ISSN 0385−0560

INSTITUTE FOR MOLECULAR SCIENCE

分子科学研究所

分子研レターズ

昭和53年12月 NO.5, '78

昭和53年３月完成した化学試料棟。屋上に太陽熱給湯設備の集熱器とその手前にドラフトの排気設備が見える。左後方は機器センター棟および実験棟。なお，化学試料棟後方では極低温センター棟の建設工事が，また，実験棟後方ではセンター施設棟（図書館を含む），電子計算機棟の建設工事，さらに実験棟自体の拡張工事が，54年４月の完成を目ざして，急ピッチで進んでいる。

目　　次

視点

化学の過去・現在・未来 …… 分子研　赤　松　秀　雄 …… 1

レターズ

分子研とのかかわりあい

分子科学研究所創設準備会議座長として …… 山　下　次　郎 …… 2

共同研究を行って …… 阪大基礎工　坪　村　　宏 …… 3

協力研究を行って …… 東邦大理　梶　原　　峻 …… 6

協力研究を行って …… 阪大基礎工　永　吉　秀　夫 …… 8

施設利用を行って …… 静岡薬大　片　山　誠　二 …… 10

施設利用を行って …… 京大工　北　川　　進 …… 12

赤松秀雄先生への手紙 …… ケンブリッジ大　浜　口　宏　夫 …… 13

大学院（教育協力）学生として …… 都立大　鈴　木　哲　雄 …… 14

外国人招へい研究者として　Four Comments …… ブラウン大　J．C．Baird …… 17

“分子”についての私の思い出 …… シカゴ大　R. S. Mulliken …… 18

訳　名大理　田　仲　二　朗

岡崎コンフェレンス

第７回岡崎コンフェレンス報告

高分解能分子分光の現状と将来 …… 分子研　広　田　栄　治 …… 22

第７回岡崎コンフェレンス　Night Session

How to Catch a Big Fish …… 相模中研　森　野　米　三 …… 28

研究会報告

光電子スペクトル強度 …… 北大応電研 木村克美 …… 32

光エネルギーによる水素の生成 …… 静岡大教育 八木達彦 …… 34

金属ポルフィリンの理論と実験 …… 東工大理 小林宏 …… 37

半導性高分子及び分子性結晶の
物性と電子過程における相関 …… 分子研 佐藤直樹 井口洋夫 …… 40

新しいπ電子系の合成とその構造特異性に関する研究 …… 九大理 吉野持 …… 43

固体界面反応の分子論的アプローチ …… 分子研 坂田忠良 塚田捷 …… 45

外国人研究員紹介

Harry F. King 教授について …… 分子研 諸熊奎治 …… 49

電子計算機センターについて …… 分子研 柏木浩 …… 50

昭和53年度共同研究（前期）一覧表 …… 53

分子研コロキウム …… 60

所内ニュース …… 62

編集後記 …… 63

視　点

化学の過去・現在・未来

分子研　赤松秀雄

近代化学は物質分離の科学として発達したといえるであろう。化学物質の認知と同定は分離と精製に基づいて行われた。純物質という概念は化学的物質観の基本である。人間が必要なものを自然に求める段階では分離科学が役立つことはいうまでもない。化学の基本的なディシプリンとして，まず分析化学の発達をみた。物質の組織を担う単位としての分子概念が普及したのもこの段階である。気体の分離に関する法則で知られたトマス・グレアムは分離科学に専念した科学者の象徴であろう。1841年に創設された英国化学会の初代会長である。そのグレアムは気体についで溶液の分離を試みたが，その過程で分離を拒むものとしてコロイド（高分子物質）を見出した。しかし高分子物質の認知と同定のためには化学の次の発展段階まで待たねばならなかった。

ディシプリンとしての合成化学の起源はどこまで遡ればよいか定めがたいが，化学が生産の科学として物質文明を担う主流となった歴史は極めて新しい。それは化学繊維やプラスチックスの如き構造材の出現に基づいている。その起源となる高分子物質の認識は化学結合の本性が解明され，分子構造に基く分子概念が確立されてはじめて可能となった。また物質の認知と同定が合成に基づいて行われるに至った。1930年代のカロザスの業績はその一つの象徴であろう。分子は単に組織を担う基本単位としてではなく機能を発現する基本単位として認識されるに至った。天然のものを人工的につくる段階から新らしい機能をもつ物質を分子設計によって創造することを目標とするに至った。分子構造の研究も，物性論も生産の科学の時代に発達したものである。現代はまさにその段階にある。

機械文明が建設的性格をもつのに反して化学文明のもたらした豊さは消費の文明でもあった。その結果，生産と消費の果てしない競合は資源の枯渇をもたらすに至った。もし人類が永く化学文明を保つことを望むならば，化学にこれを償うものを求めねばなるまい。化学の原点に帰るならば，その解答は容易に見出されるのであろう。元来化学は物質循環の原理に立つ科学である。中世の錬金術から脱脚して分子概念に到達したのは物質循環の原理に目覚めたからにほかならない。錬金術的思想が現代の核科学に変容した後では，分子概念のもつ意義はかえってますます重要となった。自然界は循環の原理に基いて運行している。人間の文明のなかにもその原理を取り入れなければならない。物質の分離科学，生産の科学として発展した化学の次の段階と期待されるのは物質循環の科学であろう。化学研究の動向にその胎動をきくことができるのは幸いである。

レターズ
分子研とのかゝわりあい

分子科学研究所創設準備会議座長として

山　下　次　郎

ある人がある事柄に関して懐く意見，下す判断はその人のもつ広い意味での経験に基づくわけである。その人が自己の経験を客観化する能力と反省とがある場合には，その経験が深くあればそれだけ，下す判断は根拠をもち，適格である可能性は高くなる。しかし一個人の経験範囲は限られているからして，人の判断は常に一方的にあるという欠陥を免れるわけにはゆかない。それ故に，例えば共同利用研究所である分子科学研究所の協議会のような集りは，いろいろな経歴をもつ学識経験者によって構成され，そこで自由な雰囲気の下において討論が行われることが最も好ましいことになる。いろいろな立場からの意見がそこに提出されて，それが個人々々の学識経験に基づいて判断されて，自ずと一つの結論に到達するというのが最も好ましいプロセスである。わたしが経験した限りにおいては，分子研の協議会はこのような形で，ほぼ理想的に運営されていたように思う。いろいろと意見の異なる方々と討論した記憶もあるが，到達した結論は常に満足すべきものであったように思うのである。

わたしは戦後直きに九州大学の大学院を出て以来，今は無い理工学研究所という東京大学の付置研究所に約10年，東京大学付置の共同利用研究所である物性研究所に20年足らず勤務した経験を持つ。その経験を通してわたしは大学における教授会の自治という制度，慣習を非常に貴重なものであると思っている。またわたしは大学の付置研究所の如き教授会の自治が確立している場所においても所長の権力というか実力というか，その力は意外に大きいものであることを知ったのである。もとより所長のリーダーシップというものは必要である。故にリーダーシップのとれる所長が必要である。しかし，制度の故に所長がリーダーシップをとるのだというのでは駄目であって，教授会の自治と所長のリーダーシップとがよく噛み合っていなくてはならないのだと思っている。この点に関して理念的には何人も反対ではないのであるが，現実はそう甘くはないという認識が一方に存在する。大学紛争とかその他の場合にも，教授会の意見が分裂し，学長，学部長，所長はなすすべもなく，その機関の活動が麻痺したという実例も少なくないのである。このような事態を反省すれば，当然のこととして，所長が決断を下せるべく，所長の権限を制度的に保証しておくことが必要となるわけである。現実問題として，いずれの考えがより正しいか。これを一義的に決定することは困難である。

大学に付置された研究所とは異なり，国立大学共同利用機関である分子科学研究所には制度上からは教授会は存在せず，所長の権限は大きい。制度はとにかく，現実問題として，所長のリーダーシップと教授集団の意志とは常によく噛み合って行かねばならない。そしてそれが自発的，相互的に調節されなければならない。それは制度の問題ではなくしてよき慣習の問題である。その基本にあるものは分子科学研究所に対する愛情であると思う。

わたしは分子科学研究所のいわゆる〝教授会〟が事実上付置研のそれの如き権限を持ち，活動できることを念じていた。しかし，制度上の制約からして，それはすべて所長の運営の妙にゆだねられることになっている。しかし，わたしはその点について危惧の念を持ってはいない。現在分子研をその内外から支えている人たちがどんなに長い間この研究所の創立を切望し，設立を喜んでおられるかを知っているからである。分子研はそれらの人々の愛情によって支えられている。その愛情の存する限り，分子研の前途は洋々たるものがあると思うのである。

共同研究を行って

阪大基礎工　坪　村　　宏

52年度からスタートした分子研共同研究に我々の出した〝固体表面における吸着物質の構造・物性および反応性〟が幸い採択され所内外で計11名でこれに参加した（構成メンバーは分子研レターズNo.3に掲載）。光エネルギー変換素子の基礎研究を念頭におきつつ固体表面の吸着物質の分光学的な研究（可視・赤外領域）を当面の課題とした。互の研究結果や計画の情報交換を行う会議を数回ひらくと共に，各グループの若手研究者を加えて，実験を分子研で行い，またグループ間で試料を交換しての測定なども行った。本53年度にも同じ課題での共同研究がみとめられ，さらにいくつかのグループを加えて共同研究が進行中である。

「分子研の共同研究は将来どのような形で進められてゆくべきか」私にはもともとこのような大きいことを考える気はなく，ただ過去一年半の共同研究が自分にとって大きいメリットがあったということをよろこび，そのような機会を与えられたことを感謝しているのみである。上記のようなささやかな研究グループではあるが，多分に境界領域的な色彩のある課題について語りあい，時には力をかしあう機会を提供してもらったのであるから私にとって工合の悪かろうはずがない。これが私の率直な感想である。

たゞ，今回，分子研レターズに何か書くよう依頼され改めて振りかえって考えているように，こ

のような共同研究は日本の将来の研究のあり方に関する大事な問題を含んでいるような気がしてきた。

自然科学を進めてゆくには Hardware 的なものと Software 的なものと二つがなければならないわけで，Hardware 的なものにはお金がいる。現在のところでは大学では研究費は限られており，分子研はこれが潤沢である。それで大変お金のかかる装置は分子研に備えてもらい，大学の研究者はこれを利用させてもらって研究をするというパターンは誰でも思いつくことであり，協力研究や施設利用ではこれが効果をあげている。共同研究においても例外ではない。しかし分子研の施設を所外の人が利用して研究を行う場合，大なり小なり分子研所内の人に手数をかけることになるのは避けられない。分子研の各部門は今のところ小人数であり，多くの所外の人にサービスすることを義務づけたのでは所内の人の研究活動にさしつかえることになってしまう。(Give and take という言葉があるが分子研の人も give ばかりではたまったものではないだろう。) 日本全体の科学ということを考えた場合，あえて分子研のような共同研究所はそのようなサービスの役割に甘んじてもらうべきであるという議論も一応成立ちうるが私はそれはとらない。そのように共同研究所を定義づけするならば，まず第一に研究所独自の仕事が生まれなくなるし，良い人が集まるために必要な魅力がなくなり，ひいてはサービス機能すらもうまく働らかなくなることは明らかであろう。理屈はともかく，そこの構成員がハピーと感じないような機関はうまく機能するはずがない。

それで，この点を解決するには二つのやり方が考えられる。一つは所外の者が分子研施設を利用して研究をやる場合，できるだけ自分で仕事して，所内の人の時間をとらぬようにすることで，もう一つは所外の人が研究をしに行ったとき，自分の経験なり，アイディアなりをもって，所内の人に何らかの give を行う，所内の人がサービスしてもひきあうと思ってもらえるだけの give をすることであろう。

次に分子研ということを離れて，もうすこし一般的なことを論じてみたい。日本の大学の研究者はこれまで研究の Hardware 面に心を奪われることが多すぎた傾向がある。すぐれた Hardware をもつことは研究室の誇りであり，そしてまたそれぞれの研究室の Hardware はほとんどその研究室のみでつかわれてきた。大学の各研究室の装置は，とくにユニークなものほど，長い厖大な労力といろいろのやりくり等とで築きあげてきたものだから，これは一面無理がない点もある。また多くの大学研究室は多数の学生をかかえており，せっかくこうしてつくりあげた機器は大ぜいの職員・学生に利用され，外部の人のわりこむ余裕がないことも多い。

もう一つ，大学研究者の特性として（必ずしも日本だけではないが）本質的に個人プレイの色彩が強い。大学研究者は自然科学の研究ということそれ自体が独立した至高な目的であり、また大学研究者はその研究テーマをえらぶ完全な自由を有すべきものという観念をもっている。そしてこの

ような自然の探求というモーティヴ以外の目的—国，企業その他の機関あるいは住民などの要請にしたがってある目的のためのプロジェクトに応じることなどはむしろ研究者として本来あるべき姿から離れたものという観念が心の底にある。これらを簡単のために研究至上主義と呼ぶことにする。

大学の研究者が自然の探求を第一に考えることは大体において正しいことであろう。問題は，上述のような「研究至上主義」が自然の探求に必らず必要なものか，他に目的をもったら自然の探求からそれてしまうかということである。私は必ずしもそう思わないが，この議論は今これ以上しないことにする。これまで大学では特殊な領域を除いて一般にプロジェクトリサーチは存在しなかった。もし今後何かのプロジェクトリサーチに大学教官をひきこもうと考えるなら，上記の大学教官の心理姿勢をかえられるかどうか，またその是非についてよく検討する必要があるだろう。

分子研の教官も大学教官から移行した人からなっており，その心理姿勢は研究に関するかぎりほぼ同じと考えてよいだろう。したがって現状では「共同研究」といえどもプロジェクトリサーチではなく，私が上に述べた give and take で各自が満足すればよいと考えるのが限度であろう。かく申す私ももちろんその例外ではない。これでよいかどうか，今後考えてみることもよいことだろう。

大学教官の個人プレイ的姿勢はこのままでよいと一応仮定してみた場合でも，今後，その研究のためのすべての Hardware を自分の研究室にとりこむことは不可能になってゆくだろう。例をあげれば，超高真空表面解析装置，200 MHz NMR，picosec. laser といった大型装置は購入費も莫大でありメンテナンスも大変で，一つの研究室でその一つをもつことすら容易でない。まして研究のために必要なそれらすべてをそなえることは明らかに学科規模でも不可能である。また Chemical Abstract，Beilstein，その他いわゆる一次情報源も，一学科はもとより一学部，一大学ですら維持は困難となりつつある。したがって今後は大型 Hardware や一次情報源は日本の研究者共通のものという観念がだんだん滲透してゆくであろう。そうなれば研究者の頭は Hardware をとりこむことよりも idea を出して仕事をする方に向いてゆくかもしれない。

このような状況となれば分子研は大型 Hardware のサービス源としての性格をもつべきであろうし，それのみでなく，研究の情報や高度の Software 的センターとしての性格も，もつようになるかもしれない。もしそうなるなら予算面のみでなく定員面での拡充も考えてゆかねばならないだろう。もしそれが不可能なら，大学研究者は分子研に時々お客さんとしてゆくだけでなく，何らかの形で寄与してゆくことが必要となろう。

協力研究を行って

東邦大理　梶　原　　峻

学生時代からの友人である坂田助教授，およびその研究室の方々と協力研究を行うことができたのは，私にとって，いくつかの点で有難い事であった。研究条件に欠ける所の多い私立大学で，多くの学生の教育に忙殺されている日常から逃れ，数日間でも，夢？のような環境で，優れた研究者と過せるのは，卒直の所ホッとする経験である。また，現実に一つの典型的な研究所が出来上っていく過程を，近くで観察できることは，研究や研究者について，自分なりに考える上で，種々の刺激を与えてくれる。もっとも，こんな心構えでいたわけだから，研究の協力にはなかなかならないで，関係者の皆さんには，ただ御迷惑だけ，おかけしたのではないかと思われる。ただし，若干，言訳を述べさせて貰えば，現在程度の旅費と研究費で，半年の間に，何か，纏まった結果を出す事を要求すれば，所外協力者に，かなりの個人的負担を強いることになり，一般には，この制度を有効に利用できる人を，大きく制限するのではないだろうか。また，所内協力者側にも，種々，効率の悪い労働を強いる事にもなると思われる。結局，ほぼ見通しのついた研究の詰めを行うとか，たまたま，所内研究者の研究設備を用いて簡単に試すことのできるアイデアが閃いたときを除いては，この制度によって，目に見える形での成果を挙げることは難しいであろう。しかしながら，これらは，むしろ本質的には，施設利用に属することであると思われる。このような形での協力は，もちろん有用であるし，必要でもあろうが，アイデアを共同で生み出すという事が，より重要な事ではないだろうか。施設利用では，必ず，研究の思想あるいは意図と，研究手段とが，異る研究者に分離されているし，共同研究に於ては，既に，研究の大きなアイデアは決っていて，研究上の役割が複数の分担者に分離される。いずれに於ても，研究者は，対等ではない，あるいは非対称な関係に置かれる。分子科学研究所が，すべての分子科学研究者の共通の拠り所であり，又，すべての分子科学研究者が，その発展に寄与すべきものであると主張するならば，このような非対称な形での協力だけではなく，共同で，あるいは渾然一体で創造するという過程が是非とも必要である。このようにして，現在の，矛盾と不均等の多い日本の研究体制の下で，多少なりとも，所内外の研究者が，平等の利益を得，一体感を得ることができるのではないかと思う。こんな訳で，私は，協力研究中の怠慢を弁解することから一歩進めて，これからも，協力研究は，ポジティブな成果だけを主目的として期待するものではなく，研究者の交流，アイデア，情報の交換，共同の試行錯誤の場を提供

するものとして，寛容な運営がなされることを要望したい。

これ迄の論点とは別に，協力ということを，生真面目に考えると，何に協力するのかという問題，更につきつめて，分子科学の意義とか，研究所の目的とか言ったものを考えざるを得ない。あるいは，そんな事を考える必要はないと主張される方も多いかと思う。しかし，既に，多くの識者が指摘しているように，どのような分野であれ，自然科学の真理というものが，即自的，かつ絶対至上の意義を持つという命題が，かなり一般に信奉されていた，自然科学者にとって気楽な時代は過ぎ去りつつあるもののようである。マクロには衆知の地球資源の限界と，環境汚染の問題があり，ミクロには，数学や素粒子理論の如き，最も抽象的思考と思われるものについてさえ，特殊の自然環境に於ける淘汰を経て進化した人間の脳の構造の特殊性と，それによる認識形態の限界といったものが，朧げながら指摘されている。少し飛躍して言えば，自然科学と言えども，生物としての人間の生存条件と生存様式により限界づけられているし，一方では，人間の諸活動の最も強い動機は，やはり人間に関することであって，自然科学的知識も，人間との関係に於てのみ真の関心を惹き起すことができるのであろう。そして，これは，自然科学者と，その研究活動についても，あてはまることではなかろうか。分子科学についても，社会的な支持を受け，若い優れた後継者を次々と得て発展していくためには，その研究主題の設定に於ても，研究組織の形態に関しても，この点を考慮する必要がある。このレターズNo.4'78 で大野公一氏が，若い分子科学研究者の相対的減少を指摘している。私は，研究の宣伝の不足等の技術的問題の他に，分子科学と人間の係わり合いについての，鮮明かつ魅力的な思想が存在しないということが大きな原因ではなかろうかと憶測している。もちろん，これ迄，自然科学の発展は，一定の思想に導かれてきたものではなく，物と現象に対する興味と，地道な実験観測と，解析接続的な，あるいは進化の分岐の如き，研究分野の拡張によってきた所が大である。現在でも，そのような意味での第一線では，魅惑的問題があまりに多く，時間があまりに少なく，人間との関係などという閑問題を持ち出すのは，有害無益と見えるかもしれない。しかし，いくたの文明が，その末期には，複雑膨大な瑣末に没し去ったのであり，しかも，それらの文明と言えども，その勃興期と最盛期には，その時代の人々にとっては，決して，現在から見るように不合理なものではなかった筈であるという事を考慮する必要がある。分子科学研究所が，当然，間接的であるにせよ，社会あるいは人間性といったものに対する貢献を常に念頭に置き，着実な活動を続け，息の長い発展をする事を期待したい。ペースは少々遅くてもかまわないし，ピークやノーベル賞は，掛声あるいは研究活動の結果としては結構なものとしても，それ自体は，研究所の指導理念ではあり得ないと言う事を忘れてはならないであろう。

協力研究を行って

阪大基礎工　永　吉　秀　夫

分子研協力研究を通じて分子研とのかかわりあいをもつようになってから，もうすぐ2年になろうとしている。昨年3月に開かれた「理論系セミナー・吸着系の理論」で初めて分子研を訪れたときは真新しい建物が一つポツンと建っているだけで，一体どこが入口なのかぐるぐる探しまわったものであったが，その後は協力研究で来所するたびに立派な建物が一つまた一つと増えているのを発見し，その発展ぶりに驚いている。

このたび上記のような題で何か書けということなので，過去2年間の研究を通して感じたことを思いつくままに書こうと思う。

「分子科学研究所」という名称は，我々物理出身の者にとって何か「本来の道」を少しはずれた異端の研究の場であるような感じをもつものだが，私も初めて分子研とかかわりをもつようになった頃は，そうしたとまどいがあったのはいなめない。実際，協力研究等を通じて分子研で行なわれた種々の研究会などに参加してみると，今までの物理屋たちとのふれあいにはない「何か」を感じずにはいられない。今だに化学屋さんの話を聞いていると，なじみのない言葉がどしどし出てきて面くらうこともあるが，この2年近くの間には私自身のそうしたふんいきに対するポテンシャルバリヤーもかなり低くなったように思う。分子研の設立目的が，物理と化学の境界にあって「物理学の原理に基いて最も基礎的な立場から化学の進歩に貢献する」ことにあるとのことで，私自身に関しても，そのような基盤が徐々にではあるが整いつつあるようである。

私の研究課題は「固体表面の電子状態の計算」ということであるが，物理屋の中では大型計算を行う部類に属するようである。コンピュータとのつきあいも，東大大学院時代のHITAC 5020に始まり，以後 HITAC 8700 / 8800，九大の FACOM 230 / 70，阪大の NEAC 2200，ACOS 800，京大の M190 と，いろいろな計算センターを利用してきた。東大時代にはグラファイトの精密なバンド計算をやっていて，HITAC 8700 / 8800で CPU 時間 1 時間のジョブを何度か入れたこともあるが，そういった大型計算は我々の場合はそう度々のことではなく，分子研の化学屋さんたちが超大型のジョブを次から次へと投入しているのを見ると圧倒される思いである。

分子研にもまもなく大型計算機が導入されるとのことで，私もそれを期待している一人であるが，この運用に関してこの機会に少し要望のようなものを記してみようと思う。まず分子研の計算センターではセルフサービスの入出力をはじめ徹底した省力化がはかられると聞いている。それは仕方のないことであろうが，それに伴い利用上でいくつかの不安がある。今までいろいろなセンターを利用してきて感じるのは「利用の手びき」が必ずしも完備していないことである。新しいセンターを利用するようになるたびにそのセンターに慣れるのは，適応能力の少ない私にとっては大変なことであった。少し複雑なこと，特にファイル関係のことをやろうとすると，「手びき」や「マニュアル」を読んでもわからないことが多く（大体これらの書物の説明文はそれ自体，わざわざわかりにくく書いてあるように思えてならない），すでにそのセンターを利用しているいろいろな人に聞きまわって，やっと何とかプログラムが動くようになる，というのが通例である。自分のやりたいことがさっとできるようになるのは，実際に自分がその種の問題でかなり苦労した後のことである。分子研の計算センターではぜひ，特にファイル関係については，数多くの実例をのせた「手びき」を充実させてほしいと思う。それとともに，特に所外にいてときどきセンターを利用する我々にとっては，何か計算機のことでわからないことがあったら気軽に相談に応じてくれるような専門の人がいてくれたら，というのがぜいたくな望みである。分子研所内の利用者ならば毎日のようにセンターを利用しているうちに自分のやっている計算に関してはそのシステム特有の事情もわかってくるであろうが，所外の利用者にとっては，そんな「練習問題」をするのに時間をつぶしていてはたまらない。肝心の計算をする時間がなくなってしまう。

分子研計算センターの運用方法については，まだ詳しい資料が手もとにないが，所外からの利用についてはできるだけ優先してほしいと思う。

分子研のセンターはそもそも「他のセンターではできないような大型計算を効率的にやる」ことを主眼にしているそうで，運用に関してもその方向で便宜がはかられると思う。それはそれでもっともなことであるが，我々の計算ということは中小のジョブがいくつかあってこれで大型計算のためのデータをつくり，その結果をみながら時に大型のジョブを入れるという性格のものである。大型計算が含まれるのでぜひ分子研の計算機でやってみたいが，それと同時にその準備のための中小ジョブも効率的にやってほしいと思うのである。

分子研センターとは別に，協力研究遂行の上で必要な中小の計算のことも忘れないでほしいと思う。何も研究上必要な計算は大型計算だけではない。我々物理屋の計算の多くは中小の計算である。現在は研究用校費を各地の大学の計算センター利用負担金にあてることができるが，分子研計算センターができても，この制度はぜひこのまま続けてほしいと願っている。たとえ分子研センターで中小ジョブ利用の便宜がはかられたとしても，我々所外の協力研究者にとっては，数多くの小さな計算は手近のセンターでやるのが当然便利である。

以上思いつくままにあれこれ書いてきたが，貴重な紙面をこれ以上浪費するには忍びないので，

この辺でペンを置くことにする。　　(1978年11月13日)

施設利用を行って

静岡薬大　片　山　誠　二

国立研究所の立札を右におれ，急坂を登っていくと，間口の広い分子研の正門に至る。あいかわらずの工事の音を聞きながら更に登りつめると，来所毎に変貌していく分子研の全容が目に入る。薄褐色の渋いレンガ風のたたずまいは，どっしりとした重量感があり，大研究所の風格をただよわせている。

私が，この分子研に施設利用として通うのも，今回で7～8回になるであろうか。想い起すに，分子研とのかかわりあいは，次のようなことからであった。

真空管式の60 MHz のNMR が我が大学に導入されたのは，十三年も前のことであったろうか。地方の薬系単科大学としては決して遅いほうではなかった。しかし，小さな大学の悲しさ，故障の多発，維持管理費等のために，四年前に遂に廃棄処分になってしまった。この期を境として，私のNMR を求めてさまよう放浪の民のような生活が始まったのである。日本のNMR の草分け，藤原鎮男教授のもとを振り出しに，阪大蛋白研，その他諸処のNMR の利用を仰ぎ，随分お世話になってきたものである。そして現在は専ら当研究所の施設を利用させていただいている。

分子研の機器センターは，行き届いた維持管理のもとに最新鋭のスペクトル機器が常備されており，自分でオペレーションに習熟してさえおれば，かなりの自由度をもって，気がねなしに潤沢な利用が可能である。地理的ハンディを除けば，私のような研究設備に恵まれない者にとっては，この上なく魅力的な研究所である。近年とみに，どの研究機関も，オープンシステムを純粋に利用することは難しくなっている現在，この分子研の存在は大変貴重である。今後も，是非，施設利用の主旨を絶やすことなく維持していただきたい。ここで，問題になることは，所内の人の手を煩わすことなく最新鋭機器の利用がどれほど可能かということである。利用者は，あらかじめオペレーションに習熟していなければならず，機器の新規購入又は更新が行われたりすると，実際問題として甚だ不利となる。要請があれば，所外者にも納入時の講習会等の門戸を開いておいていただきたい。

所内はいつも静かで，人に出合うことが少ない。恵まれたペースにしては，人の絶対数が少ないのであろうか。活力ある雰囲気を感じさせないが，優秀な〝灰色の脳細胞〟が，静かにして躍動しているのであろう。

分子研のスタッフは，その分野の選りすぐった精鋭であり，この個々の高い activity に支えられ，人手の少ないのを補なって余りあると聞いているが，それにしても，この恵まれたスペースと優秀な設備をそなえた研究所にしては，人手不足は否めないように思う。大学院生受入制度や，リサーチフェローの制度，並びに，施設利用，協力研究，共同研究等の制度は，対外交流を盛んにし，分子研の活力に一役かっているものと思われるが，大学院生や若手の研究者は，自由度のある人は少なく，従って研究母体から出にくい上に，まして経済的負担を伴うとなると二の足を踏むことにもなり，必ずしも順調とはいえないように聞き及んでいる。世界第一線の学者の招聘は，研究上のよき刺激となり，研究レベルの向上に欠くことのできないものであるが，一方，地道で派手さはないが，分子科学の次代のにない手である，底辺ともいうべき所内外の若手の研究者の育成，交流，待遇改善も又将来の分子科学，ひいては分子研の隆盛を左右する重要な要素と思われる。この意味でも，受託大学院生には，全員特奨程度の奨学金を支給するとか，施設利用，協力研究，共同研究等の旅費類は，大きな施策のしわよせとなり，とみに軽んじられる傾向にあると聞くが，そのようなことのないように，必要最小限の旅費の完全支給を図るとかの，制度的に実質を伴なった施策を行っていただきたい。

従来の多くの研究所のたどったあしどりは，オープンシステムの性格も次第に形骸化し，かつ私物化されてゆき，偏よった交流のみが残り，自由闊達な風潮は失なわれ，意気に燃える創立期の精神も，二代目，三代目となるに従って色褪せたものとなる場合が多い。分子研は，この轍を踏むことなく，長期的に分子科学を展望し，それを支える研究所のシステムはいかにあるべきかを深く洞察し，世界に冠たる大研究所になってもらいものである。

最近，アメリカでは“hungry science”なる言葉がささやかれている。hungry boxer を類推させるが，単なる経済的退潮の世相の反映だけからではないようである。長年に亘る巨大な施設，設備機器によるマスプロ science にどっぷりとつかっていた反省からであろうか。科学研究は所詮“おつむ”でするものであり，hungry な反跳力からこそ，essential な originality のある大研究が生まれるとする考えは，今日の日本の科学研究にとって一考に値する。追い着け追い越せの“imitation science”から，ようやく巨大設備機器にめぐまれ始めた日本の科学研究の流れからすると，複雑な気持ちにさせてくれる。この意味でも，今後の分子研の動向は注目に値すると思うのは著者だけであろうか。

所内には施設利用者専用の部屋もでき，山手ロッジ宿泊所も朝食が付くようになって以来，空腹をかかえて早朝をさまよう必要もなくなり，門限も以前よりは若冠あまくなった様子だし，随分便利になった。関係諸氏の御努力に敬意を表わすとともに，施設利用の申請その他利用に関して随分

御迷惑をおかけした関係諸氏に，この場をかりて謝意を表したい。

窓からもれてくる光に，かすかにとらえることのできる分子研の茫とした姿を後に，急坂を下り，夜更けの帰路の人となった。

施設利用を行って

京大工　北　川　　進

私が初めて分子研に足を運んだのは，去年の春であったと思います。建物はまだ完成しておらず，又，所内の道は雨が降ればぬかるみとなり，夜遅く帰る時には水たまりにはまり込んで，泥まみれの靴で宿舎へ戻った記憶は未だ鮮明です。その後，ここで施設利用制度を活用させて頂き，UV-PES（Perkin Elmer PS-18）並に $^{13}C-NMR$（JNM FX-100）を用いた機器測定を1年近く行いました。私の大学院生時代に，具体的に研究を進めていく上で，これらの機器利用を通じて，分子研とのかかわり合いを持ち，測定のみならず，他の分野の研究者との交流を行うという貴重な経験をしたことは幸運であったと思います。そこで，私のわずかばかりの経験と，狭い研究領域ではありますが，ここで感じたこと，得られたことを述べてみたいと思います。第1に，自分の研究テーマを追究する上で，所属する研究室の装置にこだわることなく，外へ出て追究することができたこと，そしてこの機会を与えるものが，施設利用の制度であったことです。日本で少数，又は，1台しかないような大型機器の場合に，特にこの制度は有効と考えられます。困難な研究条件の下で，熱意を持って仕事を進められている他大学，他研究所の研究者の方々にとっては，願ってもない機会を，分子研は内在させていると思います。第2に，測定を依頼するのでなく，自分で機器を操作して，生のデータ，直接見る中で，必ずしも専門領域でない分野においても，実験事実に対する鋭い目が養われたことです。これには，私に対して忙しい中，装置の使用方法を懇切丁寧に教えて下さった分子研の方々のおかげであることは，云うまでもありません。第3に，短期間の滞在であることから，非常に集中して研究を行えたことです。これは，何も分子研だけとは限らないわけですが，やはり促進するような環境・雰囲気があったように思います。以上，私との関連について述べてまいりました。最後に，施設利用制度がますます，有効に，充実したものとなることを望みます。その結果，装置のメインテナンスに常に気を配りながら独自の研究を進めておられる分子研の研究者の方々の仕事が増え，研究の支障となってはならないことは云うまでもありません。

次に施設利用を離れて，分子研への要望を述べます。分子科学研究のトップレベルの仕事をすると共に，後継者養成の観点を常に持っていただきたいと思います。その第1として，OD問題の解決に研究所あげて取り組み，近い将来の研究者養成のためのイニシァチブをとっていただきたいと思います。第2に，研究所である故，学生，院生が居ないことから，教育する，育てるという観点から遠ざかりがちになると思いますが，将来の分子科学研究者を育成するという観点を持ち続けていただきたいと思います。最近，学生の質の低下が叫ばれておりますが，批判するのみでなく，一人前の研究者として育てるために，具体的手だてを持って取組むことが重要であり，そのためにも，学問領域のトップを進む，研究者が積極的に実践的に考えることが今，必要だろうと思います。大学の教育内容，カリキュラム等にも目を向けて貢献していただきたいと思います。以上，まとまりのない文章を忍耐強く読了して下さった読者に感謝いたします。

赤松秀雄先生への手紙

ケンブリッジ大　浜　口　宏　夫

分子研で共同研究をさせて頂くにあたっては，色々と御尽力下さり，本当にありがとうございました。ケンブリッジに戻ってから，引越しその他でゴタゴタしてしまい，お礼の手紙を差し上げるのが遅れてしまいました。申し訳ありません。

さて，分子研で得たデータは，整理が終わり，これから解析に取りかかろうという段階です。当初考えていた目的2つのうち，ナトリウムのD線の成分，D_1とD_2の近傍における，偏光解消度の励起光波長依存性については，幸にして，意味のあるデータが取れました。その解析から，2光子過程（散乱）と連続した2つの1光子過程（蛍光）の2つの機構の相違点に関する情報が得られるのではないかと期待されます。もう1つのD_1とD_2の中間領域では，散乱強度が極端に弱く，理論から予測される無限大の偏光解消度は実測できませんでした。後者に関しては，セルの形状等を工夫し，再度挑戦しようと思っています。

1週間という短い期間にもかかわらず，一応の結果が得られたのも，広田先生，柿本君のお陰だと思います。又，広田研のメンバーの方々やハウゲン，クライナーの両氏と1週間をともにし，全く異った分野の人々と話す事が出来，その意味でも大変有益でした。本格的な共同研究は私にとって初めての経験でしたが，その必要性を痛感すると同時に，分子研はそのための場として理想的であると思いました。この様な機会を与えて頂いた事を深く感謝しております。

未だ具体的な見通しは立っていませんが，解析が終了した時点で，さらに詳しく結果について御

報告しようと思っております。最後に，バッキンガム教授も今回の実験結果が得られた事を喜んでおられる事を申し添えます。

これから冬に向い寒さも増す頃と思われます。くれぐれも健康に留意されて，御活躍されるよう願っております。（1978年10月17日）

大学院（教育協力）学生として

都立大理　鈴　木　哲　雄

「分子研に学生を受け入れる制度がある」という話を聞いたのが，私が分子研へ受託学生として行くきっかけであった。分子科学研究所というすごい研究所ができたという話は既に知っていたが，それまでは，自分のような学生には分子研は縁遠い存在でしかなかった。（このようなことを言うと，研究所設立に多大な尽力をされてきた方々は，不満をもたれるかもしれないが，我々のような現在大学院の学生である年代の者には，分子科学研究所に対する特別な感情はないのである。）もって生まれた好奇心の強さと，自分のいる大学の外の世界で自分の力を試してみたいという気持ちから，受託学生の募集に応募した。

私が受託学生として分子研に滞在したのは1977年度で，当時，建物は５階建の実験棟のみであり，実験室や居室は勿論，管理局，図書室，技術課，機器センター等，全ての機構がその中に入っていた時期であった。この５階建の実験棟もできたばかりであり，創設期であるということが色々な面に現われていたように思われた。したがって，最近分子研へ行かれた方や，今後分子研へ行かれる学生の方々は，私とはかなり異質の感想をもつかもしれない。

私は，分子構造の広田教授の研究室にお世話になった。私の研究テーマは「分子イオンのマイクロ波分光」で，装置，主にグロー放電型吸収セルの製作を担当した。残念ながら分子研滞在中には，初め予定していた分子イオンの検出まで至らなかった。しかしながら受託学生としての研究期間終了後も，協力研究等色々と御配慮をいただき，今年（1978年）９月に HCO^+ と CO^+ の追試に成功し，新しいイオンの観測を始められる段階に到達した。

以下，私が分子研に受託学生として滞在し，感じたことをいくつかの点について述べさせていただく。

分子研でまず最初に私がとまどったことは，物品の購入である。どんな小さい物でも，その購入に際して必ず伝票を書かなくてはならないというシステムに慣れるまでに，しばらく時間を要した。

物の名称，メーカー，型名がわかるものについては，伝票を書くのも簡単なのだが，いや，むしろ，伝票を書くだけで現物がそろうという点では便利でもあるのだが，しばしば詳しい規格や型名がわからないことがあり苦労した。ロータリーポンプの排気管に使う塩化ビニールのパイプが必要になったときには，しかたなく絵を書いて，こんな形のこんな寸法のものが欲しいと用度掛に頼みに行った。

また注文をしても現物が手に入るまでに多くの時間を要するので，しばしばイライラした日を過すことになる。特に，エレクトロニクスの部品に関しては，東京なら秋葉原に行けばすぐに手に入るような物でも，１週間位待たされるので，仕事のテンポが大幅に狂ってしまう。小型の電源トランスの入手に３週間を要したこともあり，地方都市の不便さを身にしみて感じた。

このような不便を予想してか，電気部品のストックルームがあり，色々と用意してあるのだが，やや特殊な部品になるとその都度個別に購入せざるを得なかった。とはいっても，ストックルームの存在は大変便利であり，大いに活用させていただいた。

物がいろいろとそろったところで，装置の組み立てに入ったのだが，機械工作に関しては分子研は大学と比べるならば天国のようであった。各種旋盤，フライス盤をはじめ，切断，熔接などの工作機械の完備した工作室と，適切な助言をしてくださる技術課のスタッフの方々には大変お世話になった。ただ難をいえば，人手不足のためか図面を書いて製作をお願いしてから現物ができあがるまでの時間が多少長くなったことである。また当時は，「お茶の時間」といって，ほとんど毎日午後３時半ごろに技術課の人達だけでなく所内の助手やリサーチフェローが技術課に集まる習慣があった。そこでは，製作した新しい装置の特徴，工夫した点などについての話や，誰かの書いた図面の批評といった話題から釣の話までさまざまなことが語られた。いつの日からか私も「お茶の時間」常連になり，工作技術に関する知識だけでなく，いろいろな情報を得ることができた。ときには，「お茶の時間」に顔を出すことが，「依頼した物を早く作って下さい」との催促の意志表示にもなったようであった。

短かい時間ではあったが，分子研が建設されていく過程の一部を体験したということは，私にとって様々な意味でプラスになったと思う。しかしながら，受託学生の制度をみたときに改善すべき点も少なくないのではないだろうか。最後に受託学生の立場から分子研に望むことを述べさせていただく。

まず，比較的短期間（原則として１年間）の学生の受け入れに対して，それに見合うだけの十分な制度的裏付けが不十分だということである。

例えば，宿舎の問題がある。１人で岡崎まで出て来て下宿をさがし，１年後には引き払うという情況は，経済的な負担も馬鹿にならない。特に，大学でも下宿生活をしている人にとっては，深刻

な問題であろう。（幸い，私の場合は大学へは自宅通学であったし、また岡崎市内に友人が住んでおり，色々と面倒をみてもらえたが）勿論，研究所内の人達は下宿さがしなどについても手伝って下さるが，個々の人々の善意に全面的に頼っているのが現状であろう。

この他にも，奨学金，災害保障，就職活動 etc. 学生にとって切実な問題が数多く存在している。これらの受託学生が勉学，研究を行なっていく上で基になる生活条件が改善されていくことを期待したい。

ともあれ，分子研での得難い体験は私にとって将来の力になっていくものであろう。

最後に，滞在中御指導，御助言をいただいた広田，斎藤両先生をはじめ研究室の皆様，並びに，高橋課長はじめ技術課の皆様に感謝いたします。

Four Comments

ブラウン大　J.C. Baird

Previous foreign scientists have commented on the quality of science in Japan and on the merits of Okazaki Conferences they have attended. I will simply add my agreement to their statements. It goes without saying, of cource, that Japan does not need foreign scientists to judge the quality of her science because that science has been of international stature for a very long time. The Okazaki Conference on High Resolution Spectroscopy was well carried out and quite enjoyable. I was very happy that the official language was English, and I enjoyed emmensly the debate by the spirited group at the back of the room on the meaning of a certain Zen quotation used in an after dinner talk by Professor Morino.

One piece of advise I might give the Institute for Molecular Science is that it should encourage collaboration with academic institutions in a vigorous fashion whenever the opportunity arises. In America institutions similar to I.M.S. have often had difficulties in making firm ties with universities. There is a lot to be gained by such collaboration for both types of institution. Such collaborations to exist, but it is my impression that they are rather too loose. An example of a potential collaboration between a university and IMS that I am familiar with concerns a physicist interested in the accurate determination of potential energy crossings and avoided crossings, rotational and vibrational perturbations and so on, and a chemist interested in much the same thing but in chemically reacting systems of comparative complexity. This seems to me to be just the kind of inter-

disciplinary work that should be vigorously encouraged because the complex chemical problem needs the accurate physical underpinnings to keep it honest — and less depended on subjective judgement. The Institute for Molecular Science has the opportunity, though it may be difficult, to create these collaborations because it is new. One would hope that IMS would not fall into the trap of some other research institutes by loosing its opportunity.

An observation I would like to make to Japanese scientists is that it is my impression that the interface between science and government in Japan is not tight enough. There are not enough, if any, academic scientists in policy positions in government. It is fairly obvious that during the next twenty years or so a lot of correct technological decisions must be made. The range of these decisions is quite large, from technical questions affecting local city government to profound energy policy decisions that will affect the way of life in the country for decades. As I traveled about Japan I saw great areas of industrialization and much obvious attention to business activity, but not much in land use planning, or in environmental concerns and there is probably not so much emphasis on occupational health either. The result of this lack of technological decision making is a price payed by the Japanese people in their standard of living, and it is something that does not easily appear in economic analysis, or on the account ledgers of government or corporations. Somehow Japanese scientists must become equal partners in this kind of decision making. I would think it would be an appropriate role for the elder statesmen of science, and the professional societies, to attack this difficult scientific-political problem, but an active part must be also played by younger scientists.

I would like to thank my many Japanese friends for their unparalleled hospitality. I would also like to especially thank Professor K. Hijikata, Adjunct Professor at IMS, for his kind attention, and for many animated and stimulated discussions—some of them about science. The Japanese personality is still an enigma to me in spite of all my late night study of Japanese history, Buddism, Shinto, etc. Getting information from Japanese still seems like pulling hens teeth, but not always! Finally, for me Japan has been a most interesting country, both in its very rich history and in it very many beautiful and historic places and country side. These things, and my friends, I shall greatly miss as I return to my homeland.

Okazaki
October 4, 1978

“分子”についての私の思い出

シカゴ大学　R. S. Mulliken

私が生れた頃は，自動車も，ラジオも，テレビも電気もなかった頃で，所は大西洋に面した有名な港町でした。祖父は大きな船の船長でしたから世界の各地へ航海して行ったと聞いております。日本へ行ったかどうかは知りません。父は有機化学者でした。定性有機化学という本を書きましたが，私が子供の時に，その本の校正を読んで，化合物の名前を覚えたというのは，本当の話ではありません。大学はMIT で化学と化学工学を学びました。化学工学を学んだので，毎週いろいろな化学工場を見学して，化学がどのように産業に応用されているのかを見たことは，大へんよい経験になりました。その頃は第一次世界大戦の直後で，研究室には各種の毒ガスがありました。ある時HCN をひどく吸ったことがあります。しかし何も起りませんでした。その後しばらくの間 New Jersey Zinc Company で，ゴムの中にまぜるZnO と，Carbon Black の研究をしました。それからChicago 大学へ行きました。原子核のことについて，基礎的な勉強をしてみたかったのです。その頃アメリカで原子核のことに興味を持っていた化学者は，Harkins 教授一人でした。Harkins は表面化学の先生でしたが，同時に原子構造，原子核の問題にも関心があり，表面張力の研究と共に，アイソトープの分離を研究していました。そこで私はNational Research Council のフエローシップを貰って，この問題の研究を初めました。しかし少しやっている中に，やゝ違ったことに興味を持つようになりました。それはスペクトルの研究でした。

ＢＮと考えていたもののスペクトルで，Ｂの同位体効果らしいものが見つかったのです。そこでHarvard 大学の物理教室へ行って，Saunders 教授に分光学のいろんなことを学びました。その頃は二原子分子のスペクトルはバンドスペクトルと呼ばれていた初期の頃で，まだあまり研究されていませんでしたから，私はいろんな分子のスペクトルをとりました。そうしましたら，私が最初にＢＮと思っていたものは，実はＢＯであることが分りました。同位体効果がＢＮでなくＢＯであることを示したのです。それに面白いことは，このＢＯのスペクトルが，BCl_3 の気体を活性のN_2 ガスの中へ通して出てきたことです。活性N_2 は，とても不思議なスペクトルの宝庫ともいえる気体で，その中にいろんな物を入れると，それらの美しいスペクトルが得られます。CN, NO, BO などのスペクトルを解析した楽しい一時期を過しました。

そうしていましたらSommerfeld の Atombau und Spektral Linien を読みました。その中にヘ

リウム分子のスペクトルを論じてあり，Rydberg 系列のことが書いてあります。それは分子が原子と同じような電子状態を持つことを示唆しています。この時期はまだ量子力学が出てくる前で，Bohr の古い量子論の時代でした。分子の振動や回転のことは少しは分りかけていましたが，電子構造のことは，何も分っていませんでした。しかし原子のまわりの電子の角運動量が，電子状態の指標になりそうだったので，私はこれを用いて，分子の電子スペクトルを分類することを初めました。すなわち分子のスペクトルと原子のスペクトルの類似をしらべました。例えばＣＮの励起状態はdoublet のようで，基底状態はsinglet を示し，Na 原子に似ています。それで^2P や^1Sのような記号を分子にも用いようとしました。勿論このことは後になって適切でないことが分りましたが，確かに類似はあったのです。そこで私は，電子状態をバンドスペクトルの構造，パターン，選択律を参考にして分類を行いました。1925年のことです。私はそこでドイツへ旅行しました。Hund 教授に会って議論するためです。Hund はその頃Born 教授の助手で，line spectra に関する本を書こうとしていました。ところがその頃，誰も電子のスピンのことについてよく分っていませんでした。スピン量子数は，lump quantum number でした。1925～26年になって量子力学が出きて，やっとそのことが分るようになったのです。Hund は直ちに，いろいろのカップリングの仕方によって，分子スペクトルの議論を始め，私が古い量子論によって半経験的に議論していたことを，本当の電子状態の理論のように作り初めました。

私はHarvard で research fellowship を持っていたのですが，New York 大学の助教授になりました。実験室は地下にあり，実験を初めました。そうしている内にいろいろの大学から口がかゝって，結局Chicago 大学へ行くことにしました。それから50年経った訳です。

1925年のヨーロッパ旅行の際には，Bohr や Franck や，その他にもバンドスペクトルのことを研究している人々に会って，有益な議論をいたしましたが，1927年に再び訪欧して，Hund にも再び会い，またSchrödinger にも会いました。彼は「君に面白い人達を紹介しよう」といって，Heitler と London を会わせてくれました。彼らはちょうど，有名な論文を出そうとしている時でした。

しかし我々は別のアプローチ，すなわち分子軌道の方法をHund と共に初めました。Hund は後にはすっかり私に任せることになりましたが，1928年には，二人共，小さな分子の電子配置について，同じような論文を書きました。CO^+ とBO の電子構造を理解する上での緒口は，２番目のdoublet の準位が逆転(invert) していることで，これはその shell が完全でなく，$(\Pi_u 2p)^3$ の配置になっていることを意味します。NO は，閉殻の外に１つ π電子を持っており，$^2\Pi$ 状態になり反転はしません。こうして二原子分子でよい一致が見られるようになりました。

1929年には，Heisenberg が Chicago へ来ました。私が私の妻に会ったのもその時のことです。

1930年には Guggenheim Fellowship をとって，再びヨーロッパへ行きました。Leipzig でハロゲン分子の研究をしました。1932年にも Leipzig へ行き，H_2O から初めて多原子の論文を書きました。Hitler が現われた頃で，Berlin へ行ってみると，Nazi が勢力を伸ばし始めた頃でした。

1933年には，多原子分子の論文を書き続け，Journal of Chemical Physics にのせました。その頃から学生が来るようになり，大きな回折格子を使ってスペクトルをとることになりました。SO_2，ClO_2などのスペクトルです。それから非対称回転分子のスペクトルなどです。その頃，未発表ですが，Mrs. Rieke と共に沢山の Hückel MO の計算をし，有機分子の理論について論文を書きました。

それから戦争が初まりました。戦争のためにいろんなことが阻害されました。Dr. Morozowski がきて，戦争の間，Dr. Beutler と共に CO_2^+ のスペクトルなど研究していました。
戦後しばらくして Mr. Roothaan がやってきました。彼は数学がよく出きました。その頃はまだ分子軌道理論はHückel のレベルでしたが，彼が提案した SCF MO の方法は，まだ計算機が十分に発達していなかったので積分の計算が困難でした。今ではこういうことは解決されましたが。そこでいろんな分子の計算，N_2 分子の計算を手でやりました。基底状態の計算に2年かゝりました。Prof. Shull とその学生が行ったのですが，今なら1秒もあれば出きるでしょう。電子計算機が段々と発展して，大きな分子が出来るようになり，Ohio へ行って計算をしたりしていました。学生達が二原子分子の計算を行い，実験の方では，Dr. Wilkinson と Dr. Yoshio Tanaka が N_2 やヘリウム分子のスペクトルを真空分光器を使って研究しました。

こゝで研究室の説明をしましょう。戦後それは Laboratory of Molecular Structure and Spectra とよばれ，Molecular Structure の方は理論の方面で，Spectra は実験で，赤に表紙のリポートを一年おき，あるいは数年おきに出しました。

1950年頃，私は Hildebrand 教授の論文を読みました。彼が Proc. Natl. Acad. Sci. に出そうとしていた論文で，ベンゼンとヨウ素の新しいスペクトルについてのものです。私は彼にうまく説明が出きそうだと言いましたが，初めは間違っていて，後になって正しい説明を出しました。電子移動理論の初まりです。1953年日本で初めての国際物理学会議があり，私はそれにやってきました。皆がとても楽しかった会議でした。1962年の分子分光国際会議も勿論，大へん楽しい会議で私にとって，2度目の訪日の機会でした。

ここから先のことは，もう時間もきましたので，終りにします。

（あとがき） Mulliken 教授は，日本化学会の100年記念と関連して，この4月に3度目の来日をされ，4 月11日に分子科学研究所を訪問された。分子研ではこの機会を記念して，落成したばかりの研究棟のセミナー室で，Mulliken 教授の講演を1時間余り伺った。二度と伺うことの出来ないような内容であったので，若い方々に読んでいただきたいと思って訳した。

講演の後の質問の中で，「貴方が書かれた沢山ある立派な論文の中で，御自分ではどれが一番お好きですか」という問に答えられて，「多くの人がそういう質問をする。自分はそういう質問はあまり好きでないんだが」と笑って話され，さらに「どうしても答えるのなら，若い時に書いたＢＯ分子のものだ」と言われた（Phys. Rev. 26巻，1925年)。

スペクトルの研究を初めた最初の論文をあげられたところに，Mulliken 教授が生涯変ることなく，真摯な研究生活を続けられた秘密があったような気がした。

なおこの10月末に Chicago 大学では，教授の在職50年の記念会を開いたということである。

なお本稿は紙数の都合もあり，内容はかなり省略した。

訳　名古屋大学理学部　田　仲　二　朗

岡崎コンフェレンス
第7回岡崎コンフェレンス報告
高分解能分子分光の現状と将来

分子研　広田栄治

近年レーザーや電子機器の著しい進歩により，分子分光学の分解能と感度は飛躍的に向上し，質的に新しい手法が次々と登場してきている。高分解能赤外分光を例にとれば，第2次世界大戦以前から主として米国において開発された高精密回折格子の製作技術によって1950—70年に多くの優れた研究が開花した。しかしこの段階では分解能を向上するために感度が犠牲にされ，わずかに安定な基本的分子についての分光が行われたにすぎない。現在では炭酸ガス等の気体レーザーや半導体，差周波，スピン・フリップ・ラマン等波長可変レーザーを光源とする分光により感度が著しく改善され，フリーラジカルのように試料中に 10^{-4}～10^{-7} しか存在しない不安定分子種も検出できるようになった。さらにこのような高感度を保ちながら，分解能は容易にドップラー幅の極限にまで到達でき，場合によっては飽和分光の手法によって均一幅（圧力幅）をもったスペクトルさえ観測可能となっている。第7回岡崎コンフェレンスはこのような分子分光学の現状の紹介と将来への動向を探るために企画された。会期は昭和53年9月4日－6日，参加者は51名に上った。外国人招待者はDr. J.W.C. Johns（NRC, Canada）とProf. S.G. Kukolich（Univ. of Arizona）の2名で，この他に昭和53年度分子研招へい外国人研究員 Dr. J.T. Hougen，Prof. J.C. Baird，特別協力研究員 W.A. Kreiner（Univ. Ulm）が参加した。このうちとくにDr. Hougen は二つの講演と，最初のセッションの座長をひきうける等コンフェレンスの雰囲気を盛上げるのに大きく貢献した。

以下行われた講演をトピックス毎に分けて紹介しよう。

分子分光の理論については次の二つの講演が行われた。

Level-Crossing and Level Anti-Crossing as a High Resolution Spectroscopic Tool ?

J. C. Barid（Brown Univ.）

Group-Theoretical Aspects of the Newly-Observed Torsional Splittings in the Vibration-Rotation Spectrum of Ethane.

J. T. Hougen（NBS）

Prof. Baird はレベルクロッシング，レベルアンチクロッシングを，密度行列の運動方程式から一般的に論じ，問題点を指摘するとともに高分解能分光への応用を示唆した。Dr. Hougen は内部

回転をもつ分子，とくにエタンをとりあげ，Longuet-Higgins の交換・反転群がどのように応用されるかを論じた。

可視レーザーを用いた分光としては

Rotational Energy Diffusion of BaO ($\tilde{A}^1\Sigma$) Excited by a Pulse Modulated Ar Laser

K. Sakurai（Univ. of Tokyo）

Stark Spectroscopy Using a CW Dye Laser

Kiyoji Uehara（Univ. of Tokyo）

Laser Excitation Spectroscopy of the HSO Radical

M. Kakimoto（IMS）

A High-precision Wavelength Meter

Fujio Shimizu（Univ. of Tokyo）

が報告された。桜井氏はアルゴンイオンレーザー（パルス幅700ns，くりかえし300kHz）でBaO $A'\Sigma$-$X'\Sigma$ を励起し，A状態からのケイ光の時間変化をミニコン制御によって追跡した。試料の圧力依存性から放射寿命と消光，振動および回転エネルギー移動の断面積をもとめた。上原喜代治氏は安定化したCW色素レーザーを光源としてシュタルク変調分光法を開発し，NO_2 のいくつかの吸収線が1次のシュタルク効果を示すという興味ある現象を見出した。その原因としては励起状態の状態密度が高い，$N^{16}O^{18}O$ の吸収線である，2個のN－O結合が励起状態で異なる長さをもつ等が考えられる。柿本氏は色素レーザー励起スペクトル分光の方法により，新しいフリーラジカルでHSOの検出に成功した。清水富士夫氏は可視光用波長計の製作を報告した。精度は 10^{-3} cm^{-1} で，パルス光にも使用可能である。

赤外分光の最近の大きな発展の一つは，波長固定赤外レーザーを光源とし，電場あるいは磁場を掃引する分光法，すなわちレーザー・シュタルクあるいはレーザー磁気共鳴（LMR）分光の開発である。これらの方法には光源の波長が固定である。また発振線の波長範囲が限定されているという欠点があるが，レーザー共振器内に吸収セルを挿入できるので一般に感度はきわめて高い。また用いられるレーザー光の波長あるいは周波数が精密に測られているので，高い精度が容易にえられる。

Laser Magnetic and Electric Resonance Spectroscopy at NRC

J. W. C. Johns（NRC）

Development of a Laser Stark Spectrometer of High Sensitivity

Y. Ueda（Univ. of Tokyo）and J. Iwahori（Univ. of Fukui）

LMR at Sagami Chemical Research Center

Hiromichi Uehara and K. Hakuta（Sagami Chem. Res. Center）

LMR Spectroscopy of the ν_2 Band of NH_2

K. Kawaguchi (IMS)

LMR Spectroscopy of SO in $\tilde{a}^1\Delta$ and $\tilde{X}^3\Sigma^-$

C. Yamada (IMS)

Understanding the FIR LMR Spectrum of the $^3B_1$ State of CH_2

J. T. Hougen (NBS)

Laser Stark Spectroscopy of the ν_1 Band of ClO_2

K. Tanaka and T. Tanaka (Kyushu Univ.)

先ずこの分野で中心的役割を果しているカナダ，NRC での研究の現況が Dr. Johns により紹介された。レーザー・シュタルク分光では $H_2{}^{17}O$, $H_2{}^{18}O$, HNO, $CH_2=NH$, cis－HONO が LMR では NO, HCO, HO_2, DO_2, NH_2, ND_2, PH_2 等が研究されている。上田氏は 10^{-12} cm^{-1} という驚異的に高い感度をもつレーザー・シュタルク分光器の製作とそれを用いた$^{14}NH_2D$, $^{14}NH_3$, $^{15}NH_3$, ν_2 バンドの精密な分光結果を報告した。上原博通氏は “avoidance of Zeeman level crossing” を利用して，スピン回転分裂が小さい ClO_2 のような重い分子でも LMR スペクトル が観測できることを示した。川口，山田両氏はそれぞれ CO レーザー LMR による NH_2 ラジカル ν_2 バンド，CO_2 レーザーによる $\tilde{a}^1\Delta$ および $\tilde{X}^3\Sigma$ 状態の SO の分光結果を報告した。Dr. Hougen は CH_2 ($\tilde{X}^3B_1$) ラジカルの遠赤外レーザー LMR スペクトルの解析にあたって，理論的に許されるハミルトニアンの表現を“operator equivalent” の手法を用いて論じた。田中桂一氏は ClO_2 ν_1 バンドの分光結果を紹介した。

一方マイクロ波分光では

Microwave Spectroscopy of Hydrazine

S. Tsunekawa (Toyama Univ.)

Microwave Spectroscopy of Molecular Transient Species

C. Matsumura (Natl. Chem. Lab. for Industry)

Microwave Spectroscopy of Enethiol and Enol

M. Tanimoto (Sagami Chem. Res. Center)

Microwave Spectroscopy of the FSO Radical

Y. Endo (IMS)

の講演が行われた。常川氏は反転と内部回転をもつヒドラジンおよびその重水素置換体の複雑なスペクトルを解析し，その結果を報告した。村松氏は BFHOH, $BH(OH)_2$ および ClONO というこれまでその存在の知られていなかった新分子種の検出に成功し，分子構造を決定した。谷本氏も

$CH_2=CHSH$ という新しい分子を報告し，これが二つの異性体（syn と anti）から成り，さらに anti は 2 極小ポテンシャルをもつという興味ある結果をえた。遠藤氏の検出した FSO も従来知られていなかった新しいフリーラジカルで，同程度の大きさをもつスピン回転相互作用と超微細相互作用の解析結果と分子構造を報告した。

二つ以上のコヒーレント光源を用いる多重共鳴分光は，多くの場合に他の方法ではえられない新しい情報を提供してくれる。

Infrared-Radio Frequency Double Resonance Spectroscopy of CH_3Br

J. Sakai (Univ. of Tokyo)

Infrared-Microwave Double Resonance in CH_3OH Using a Zeeman-Tuned 3.5 μm He-Xe Laser

K. Takagi (Toyama Univ.)

IR-MW Double and Triple Resonance Spectroscopy of DC≡C-CHO with a 3.51 μm He-Xe Laser

M. Takami (Inst. for Phys. Chem. Res.)

Laser Saturation Spectroscopy in Three Level System of Atomic Xenon

M. Tsukakoshi (Inst. for Phys. Chem. Res.)

Infrared Laser-Microwave Double Resonance in the Presence of Strong Stark Field

T. Tanaka (Kyushu Univ.)

Stark Effects in Some Nonpolar Molecules

W. A. Kreiner (Univ. of Ulm)

酒井氏は CO_2 レーザー・ラジオ波二重共鳴の方法により臭化メチルの超微細構造と ν_6, $kl=-2$ 準位の A_1-A_2 分裂をもとめた。高木氏はゼーマン掃引 He－Xe レーザーとマイクロ波（あるいはラジオ波）を用いメタノールの振動回転スペクトルの帰属を行うとともに二重共鳴信号の強度から分子間衝突によるエネルギー移動についても情報をえた。高見氏は同様の方法でプロピナール－d の ν_2 バンドを解析し，この状態が他の振動状態によって大きく攝動を受けていることを見出した。またアンモニア ν_4 バンドに対する赤外半導体レーザー・マイクロ波二重共鳴の実験についてもふれた。塚越氏は Xe の励起状態からなる 3 準位系に対し He－Xe レーザーを用いた光・光二重共鳴の実験を行い，信号の形状に対して詳細な検討を加えた。田中武彦氏は強電場下での CO_2 レーザ・マイクロ波二重共鳴分光法の特色を述べ，フッ化アセチレン－d に応用した結果を紹介した。Dr. Kreiner は SiH_4, GeH_4, CD_4 の CO_2 又は N_2O レーザー・ラジオ波二重共鳴信号に対するシュタルク効果を論じた。

以上は少数の例外を除いていわば静的な分光であるが，緩和過程あるいは衝突断面積に関する次の二つの講演が行われた。

Measurements of Magnetic and Electric Interactions and Relaxation Cross Sections Using Molecular Beam Maser Spectroscopy

S. G. Kukolich (Univ. of Arizona)

Infrared Transient Spectroscopy of NH_3

N. Konishi, H. Sasada, and Tadao Shimizu (Univ. of Tokyo)

Prof. Kukolich は分子線の実験の得失を論じた後，スピン回転相互作用定数の決定，NH_3，OCS，H_2CO 等の基本的な分子と他の原子分子との衝突断面積を報告した。清水忠雄氏はシュタルクスイッチングによって NH_3 の遷移状態を生成し，縦および横緩和時間を決定して，双極子ー双極子相互互作用を仮定した理論計算の結果と比較した。

高分解能の極限へ挑む重要な試みの一つとして

Optical Ramsey Resonance

K. Shimoda (Univ. of Tokyo)

において霜田教授は，マイクロ波領域で知られていた Ramsey 共鳴を光の領域で実現させる実験を提案した。また朽津氏は

Spectroscopy of Highly Excited Molecules

K. Kuchitsu (Univ. of Tokyo)

の講演で，準安定稀ガスとの衝突によって解離生成するフラグメント(CN, CH) が異常に高い 振動状態に励起されるという興味ある実験結果を紹介した。広田はコンフェレンスの冒頭で

Introduction to the Conference and Present Status of High Resolution Molecular Spectros-

Spectroscopy at IMS

E. Hirota (IMS)

分子構造学第一部門における研究の現況を報告した。コンフェレンス第２日夜のレセプションでは森野教授から

After Dinner Talk : “How to Catch a Big Fish ?”

Y. Morino (Sagami Chem. Res. Center)

と題する“教育的”なお話をいただいた。赤松所長の Opening Remarks に始まり，斎藤氏の Concluding Remarks でしめくくられた２日半のコンフェレンスは非常に面白くまた有益なものであった。ただ英語による討論には未だしの感があり，参加外国人の２人 (Drs. Hougen, Johns) からも同様の批判があった。今後の岡崎コンフェレンスの運営には何らかの工夫が必要であろう。

第７回岡崎コンフェレンス出席者

How to Catch a Big Fish

相模中研　Yonezo Morino

I was asked by Dr. E. Hirota to talk something after this dinner. I wonder if this topic is suitable for an after-dinner talk, but I would like to tell rather to younger people the experiences of an old boy who has some bitter recollections on his own younger age. So it would be my great pleasure if you allow me to tell them a couple of my experiences at this precious opportunity.

I have chosen this topic but I don't know the royal road to catch a big fish. I only know the instances that I missed to catch them. I suppose that you also would have similar experiences. In our research career, we often encounter opportunities of getting an idea which might provide us a marvellous future if it be developed, but we simply let them go, thinking that it would be trivial or less important, or more usually we put it aside, without considering it seriously, only being captured by the present interest.

In 1955, when I was in Purdue, Prof. H. S. Gutowsky came from Illinois to give us a lecture on the application of NMR to the determination of molecular structure. It was just the time when NMR was going to be used in organic chemistry. In March of the same year, Varian exhibited its first NMR apparatus in Pittsburgh Conference. After the lecture, I asked him, "How about to apply NMR to the internal rotation study?" His answer was, "No, it is too much." This may be true, because it was necessary for this application to introduce some ingeneous idea. Anyhow I remember that I was somewhat discouraged by this answer from an expert.

After coming back to Tokyo, I was still interested in NMR and even joined to the discussion meeting held by Prof. Shizuo Fujiwara who had been at Illinois in Gutowsky's laboratory. Unfortunately, however, we had no chance to catch a hint to come to this problem. As you know, it was 1959, only four years later, that Dr. M. Karplus found a relation between the coupling constant J_{HH} and the rotational angle. Lots of interesting phenomena found since then by many persons, brought up NMR to one of the most important techniques for the study of conformational analysis.

When I look back now upon that time, I feel shame why I did not think of trying to measure NMR at low temperatures. This kind of procedure is entirely the same in reasoning as that I had already taken in the study of rotational isomerism by the Raman effect. If we only measure the NMR at low temperature, we would have found a serious change in the

spectrum and come to find a breakthrough for this problem. It was stupid that I did not realize the importance of NMR in the study of the rotational isomerism, only by sticking to the microwave interest. I should not have been discouraged by a simple opinion of an expert. This is the very reason that I missed a big fish in this field.;

Another example is also related to the Raman effect. I started the Raman effect study in 1932 with Prof. S. Mizushima who came back from Germany. At the start of the study, I read a famous article written by Dr. G. Placzek in Handbuch der Radiologie. Placzek discussed the Raman effect on the base of the Kramers-Heisenberg dispersion theory and at the final part of the article he mentioned the Raman effect in absorption region. We also thought that this topic should be worthy of particular attention and I wrote it down in my note-book as a fascinating topic to be considered later. But we were awfully occupied in the study of the Raman effect in the visible region, mainly for getting a confirming evidence for the trans and gauche isomers in dichloroethan and related compounds.;

I must say, however, that we did not forget the topic. As a matter of fact, Prof. Mizushima went to Yokohama and bought back a big quartz crystal imported from Brazil. We cut it down into a prism and a lense and made a spectrograph for ultraviolet region, using a mercury line 2536 A as the exciting line.;

This line, mercury 2536 A, has a special merit as the exciting line, because the line is a resonance line, so the spectral intensity of the exciting line on the film can be reduced when we put a mercury vapour in front of the film.

We made much effort for the construction but we did not succeed to finish up the spectrograph. The reason was the twins in the quartz crystal. The Brazilian quartz was big but it had many fine stripes of d and l crystals which exerted different effects to the light beams passing through them. So the spectrum we obtained had a diffuse second spectrum overlapped on the main spectrum. The trouble was that the second spectrum changed its feature and position in each spectrum, depending on the small difference in the adjustment of the Raman source. In short, we could not fix up the spectrograph before I moved to Nagoya University in 1943.;

When I recollect now the situation at that time, I bitterly regret why I did not try to take the Raman spectra of absorbing molecules, in spite of the dirty spectrum by this spectrograph. The spectrograph was not completed but it would be sufficient enough to show us at least the change in the line intensities from those by the visible exciting line. That is evident from an example that the Raman spectrum of benzene taken by this spectrograph showed a clearly resolved isotopic effect of the 992 cm^{-1} line of the totally symmetric vibration. So, if we took the spectra of absorbing molecules, we would have been able to find the resonant Raman effect ten years of more earlier than its first experimental

demonstration by Dr. P. P. Shorygin around in 1954,[2] and many years prior to the exploitation of this phenomenon with the laser technique in the seventies. Our mistake was that we were so deeply indulged in getting beautiful spectrum that we forgot to think of the significance of the Raman effect in the absorption region. We were just at the door for finding the resonant Raman effect but we did not want to open it. It is absolutely meaningless in research to say that we were at the same place. The point is who opens it prior to others.

In this connection I want to say a few words on my start of the Raman effect study with Prof. Mizushima. He came back from Germany in 1932, as I told you before. When I saw him first on his coming back to Tokyo, he told me, "Let's study molecular structure, either by the electron diffraction or by the Raman effect." I thought that he would prefer the electron diffraction, because in Leipzig where he stayed in Germany, Dr. R. Wierl developed the electron diffraction technique and published many beautiful results on molecular structure. Against my expectation, Prof. Mizushima took the Raman effect which he had no experience at all.

I want to put stress on this point. At that time before the War, Professors who went abroad, usually learned highlights there and brought back the most up-to-date technique to Japan, and people also treated such professors as the leading authorities in that field. This may be the usual procedure in underdeveloping countries. It has a merit of bringing up science most efficiently in this kind of countries. However, Prof. Mizushima did not take that attitude. He begun a project that he had no experience at all. I guess that he did it, thinking that molecular spectroscopy is the most important for the molecular structural study and has a promising future enough to start there even without experience at all. He described in his article on the History of Physical Chemistry in Japan, published in 1972 on the Annual Review of Physical Chemistry, "Some physical chemists tend to tackle well-defined and finite problems that appear to be soluble with the methods and evidence available, probably because they consider that an accumulation of such solutions will throw light upon the large issues. In a sense they may be right, but at the same time one fears that the result may turn out to be just a linear extention of the same problem which contains nothing new. On the other hand, there is another group of physical clemists who tackle problems which appear to be chaotic, and from this chaos they try to extract a cosmos which contains something new ....."

In this talk I would like to call your attention to the fact that we always have chances around us which might be grown up to big fishes but we often miss to catch them by our ignorance. Whether one catches them or not, entirely depends on one's personal attitude. When one hits on a new idea, one should consider it thoroughly and repeatedly as possible

as one can. One should develop the idea, modify the idea, and simplify the idea. Then the idea which looked like a lisky one at a first glance, would reveal us more realistic and tangible possibilities. Here is a famous Zen tenet, "Devote yourself soly to sitting (and thinking)." It strongly urges us to think by ourselves as far as the idea becomes of our own, rather than to learn sacred books or scriptures.

Science is not a simple accumulation of routine data. Before the data there should be a physical significance of the project to be explored, and before the significance there should be an originality in the idea to be generalized for wider applications. So always compare the significance and originality of the present project with those of the new idea that you hit on, keeping in mind that we have a tendency to want to do research in an extention of the present project. Not sticking to the present temporary interest, try to exploit a new field which has a new kind of strong impact to the development of science.

References

(1) M. Karplus, J. Chem. Phys., **30**, 11(1959); H. S. Gutowsky, M. Karplus and D. M. Grant, J. Chem. Phys., **31**, 1278(1959).

(2) P. P. Shorygin, Dokl. Akad. Nauk SSSR, **87**, 201(1952): C. A., **49**, 15486f(1955); L. M. Katsyna and P. P. Shorygin, Izv. Akad. Nauk SSSR. **18**, 682(1954) : C. A., **50**, 7586c(1956).

(3) R. Wierl, "Elektronen Interferenzen", Leipziger Vortrage 1930, p.13.

(5) The original sentence is "只管打坐", which reads as "Shi kwan ta za". The first two words mean to devote oneself to, and the last word to sit. To sit means in Zen to sit and think. The third word is an auxiliary verb to put stress on the verb coming next, just like"do" in English.

本稿は第７回岡崎コンフェレンスの After dinner talk を好評に応えて森野米三教授にまとめていただいたものである。

研究会報告

光電子スペクトル強度

北大応電研　木　村　克　美

表題の研究会は，昭和54年５月26，27日の両日，約20名が参加して分子科学研究所において行われた。光電子スペクトルの強度の問題は，光イオン化断面積および光電子角度分布の情報を含んでおり，実験的にも理論的にも重要な課題である。この分野の研究者はわが国でも次第に増えており実験と理論の間の協力が得やすくなってきている。実験の立場では，光電子スペクトルによるイオン化エネルギーの決定の方法はほぼ確立しているが，タテ軸の問題，つまり分子の光イオン化断面積のデータはまだきわめて少ない。また，光電子角度分布についても，実験データはまだごく限られている。一方，理論の立場では，厳密な理論計算の例はまだきわめて少ないし，大きな分子によく当てはまる近似法を模索しているのが現状かと思われる。本研究会の目的は実験と理論との結び付きをよくすることであり，情報交換の場をもつことであった。この種の課題の研究会はわが国では最初であった。

本研究会の準備段階では，理論の人達の連絡には岩田末広氏（理研）があたり，実験の分野の連絡は私が行った。両者でプログラムの具体案をねり，さらに分子科学研究所の井口洋夫氏と小谷野猪之助氏と相談した結果，次のプログラムができた。研究会は，進行上，三つに分けられた。１は理論，２と３は実験の分野である。

５月26日（金）13：30～18：00

１）光イオン化断面積の理論

主 講 演ー市川行和（東大宇宙研）

話題提供ー岩田末広（理研）

加藤博史（名大教養）

島村　勲（東大宇宙研）

広田文彦（静岡大）

５月27日（土）９：00～12：30

２）紫外光電子スペクトル強度

主 講 演ー木村克美（北大応電研）

話題提供ー小林常利（理研）

田中健一郎（分子研）

関　一彦（分子研）

勝又春次（北大応電研）

阿知波洋次（北大応電研）

５月27日（土）13：30～16：30

３）X線光電子スペクトル強度

主 講 演ー太田俊明（東大理）

話題提供ー岸　興作（阪大理）

藤川高志（東大理）

第１日の「光イオン化断面積の理論」の主講演では，東大宇宙研の市川行和氏（現在，名大プラズマ研）は，まず，分子の光イオン化断面積（σ）および光電子角度分布の非対称パラメーター（β）の理論計算の現状について，理論計算の目的を，A）エネルギー依存性，B）微細構造，C）分子構造，に分類し，さらに計算の内訳を，１）束縛電子状態の波動関数，２）光電子の波動関数，３）公式化，に分類して解説した。具体例として，水素分子の振動構造における計算結果が紹介された。ついで，理研の岩田末広氏は，新しい方法として注目されているStieltjes-Techebycheff 法による光イオン化断面積のエネルギー依存性の理論計算を紹介し，最近 Langhoff らが発表したH_2COの計算結果は実験結果ときわめてよく一致することを指摘した。名大教養の加藤博史氏は，Ellisonの直交化平面波（OPW）近似の概略を説明し，具体例として H_2O，CO 分子等の光イオン化断面積と角度分布パラメーターのエネルギー依存性の計算結果を紹介した。東大宇宙研の島村勲氏は光イオン化断面積の計算におけるルベック積分法を紹介し，この方法の利点および欠点をいくつか指摘した。静岡大教養の広田文彦氏は，Tully らが提唱した理論計算を大きな分子に適用するための問題点や近似法を指摘し，二，三具体的な計算結果を紹介した。

２日目午前中は，紫外光電子スペクトルの強度が取りあげられた。主講演で，筆者は実験の立場から，１）σとβの歴史的背景，２）CⅠバンド，３）HeⅠ，HeⅡ スペクトルの強度変化，４）SOR光によるσとβのエネルギー依存性，５）電子衝撃によるσとβ，６）Cl，Br 原子のHeⅠスペクトルの相対強度，について紹介した。

理研の小林常利氏は有機分子の光電子バンドの帰属にβ値が役立つ例をいくつか紹介した。同等な２個のn軌道またはπ軌道から得られる$n_{\pm}$斬道または$\pi_{\pm}$軌道のβ値はほぼ等しいことが指摘された。また，β値は回転異性体の区別に役立つことが示唆された。分子研の田中健一郎氏は，“しきい”電子スペクトルと光イオン化効率曲線の両面から光イオン化過程を研究する方法を説明し，その応用としてイオン－分子反応，$H_2^+(v) + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$，の実験結果を紹介した。分子研の関一彦氏は，固体表面状態の紫外光電子角度分布の研究例として，$n\text{-}C_{36}H_{74}$ 配向蒸着膜の研究結

果を紹介し，固体表面の角度分布測定の重要性を指摘した。北大応電研の勝又春次氏は，簡単な分子のHeⅠ,HeⅡ光電子バンドのβ値の違いを指摘し，さらにベンゼンのハロゲン1置換体のβ値（HeⅠ）を紹介した。北大応電研の阿知波洋次氏は気体分子の光イオン化断面積の新しい決定法と，その若干の実験結果を紹介した。

2日目の午後はX線光電子スペクトルの強度が取りあげられた。主講演で，東大理学部の太田俊明氏は，1）Geliusの強度モデルの問題点，2）平面波近似の改良（PW→OPW→EOPW→HOPW），3）ジルコニューム（Zr），イットリゥム（Y）のM_ξX線光電子スペクトルの強度変化，4）XPSのサテライト，などについて詳しく説明し，多くの問題点を指摘した。阪大理学部の岸興作氏は，ESCAスペクトルの強度による固体の定量分析法とその応用例を紹介した。東大理学部の藤川高志氏（現在，横浜国大）は，吸着状態にある配向したエチレン分子のX線光電子角度分布をOPW近例で計算した結果を紹介した。

そのほか，上記のプログラムにないが，東大工学部の渡辺力氏と中村宏樹氏にもご出席いただき，種々ご意見をいただいた。

研究会の開催時期が諸般の事情で5月になったため，一般に広く呼びかける時間的余裕がなかったことは残念であった。

どの分野でも同じであろうが，信頼できる実験データがなくては，理論の発展は期待できないし，一方理論的な解釈が伴なわないと信頼できるデータの価値が半減してしまう。とくに光電子スペクトル強度の問題を発展させようとすれば，実験グループと理論グループの協力がぜひ必要であろう。両者の協力は必ずしも国内に限る必要はないが，もし国内でもっと協力体制があれば，それにこしたことはないし，むしろ望ましい。今回の研究会がそのため多少とも役立ったならば幸いである。

本研究会の開催にあたっては，分子科学研究所の井口教授，小谷野助教授および研究室の方々に大変お世話になったことを厚くお礼申し上げる。

光エネルギーによる水素の生成

静岡大教育　八木達彦

石油以後の新エネルギー源として，水素が脚光をあびている。もし水の分解で水素を作れれば原料は無限であり，また，燃焼しても全く無公害だからである（分子研レターズ，No 4 '78, P. 1

参照)。しかし，水を分解するための膨大なエネルギーをどのようにまかなうかという問題はまだ解決されていない。

地球上に断え間なく降りそそぐ太陽光エネルギーを利用するのが第一に考えられる。事実，緑色植物はじめ，緑藻，らん藻，光合成バクテリアは，太陽エネルギーをうまく利用して，光合成により生体成分を作っている。化学式で示せば“$6CO_2+6H_2O\rightarrow 6C_6H_{12}O_6$（炭水化物）$+6O_2$”つまり，$CO_2$を$H_2O$で還元する反応である。

緑葉の中にはクロロプラスト（葉緑体）があって，ここで光エネルギーを受けとめる。光があたると水から電子を引き抜いて，酸素を発生する。この電子を光化学系Ⅱ（PSⅡ），PSⅠの順に励起して，非常に還元力の強いZという物質を作る。電子がクロロプラストの電子伝達系を流れる間に，生物にとって最も重要なエネルギー源となるアデノシン三リン酸（ATP）の合成も行なわれる。一方，還元力の強いZはフェリドキシンを経て，生体内の電子キャリアーであるニコチンアミド・アデニン・ジヌクレオチドリン酸の酸化型（$NADP^+$）を還元型（NADPH）に還元する。炭酸同化に必要な還元力はNADPHが，エネルギーはATPが供給して，光合成という光エネルギー転換過程が進行する。

生物のもつ，この光エネルギー転換能力を水素生産に利用できないだろうかということで，5～6年前から世界各地で研究が始まった。1976年6月3日に開催された当研究所の表記研究会も，この問題に携っている研究者数名が集って，研究の現状を話しあい，発展への足がかりをつかもうということで企画されたものである。出席者と講演題目，および，内容の簡単な紹介により，当日の研究会報告としたい。なお，記載順は発表順とは必ずしも一致していない。

(1) 固定化クロロプラストによる光反応（島根大農，落合英夫），クロロプラストの光エネルギー転換能を利用するには，クロロプラストの活性を長時間にわたって維持させる必要がある。ホウレン草のクロロプラストをポリビニールアルコールとウシ血清アルブミンを使ってフィルム状に固定化すれば，数週間も活性のままに維持できる。固定化しなければ，光エネルギー転換能は不安定で，特にPSⅡは数日で全滅してしまうことを考えれば，安定化の効果は抜群である。この成果は7月12日付朝日新聞『みんなの科学』にも紹介されたから御存知の方もあるだろう。この固定化クロロプラストを電極とすれば光アノード電流を観察できるから，光エネルギーを電気エネルギーに転換する道も開けてくる。

(2) クロマトフォアの光電子伝達系について（阪大蛋白研，山下仁平），光合成バクテリアのクロマトフォアにはPSⅡに相当する系が存在しない点でクロロプラストと異なる。光励起された電子伝達系をまわってもとの物質を再還元するさいにATPを生産する。有機物の電子を引き抜き，光励起したうえでプロトンの還元による水素生産も行っている。この電子伝達系の光励起のさい

の挙動を詳細に調べるため，ポーラログラフィーを応用し，光による電子伝達系の活性化を光電流として測定した。このとき，ある種の酸化還元色素を添加すれば光電流を数倍に増幅できることを発見し，クロマトフォアが光アノードとして機能しうることを指摘した。

(3) フェレドキシン－$NADP^+$ レダクターゼの固定化と反応性（神戸大理，新勝光），クロロプラストの電子伝達系の最終メンバーは，還元型フェレドキシンより$NADP^+$ へ電子を与える反応を触媒するフェレドキシン－$NADP^+$ レダクターゼ（FND）である。FNRを精製し，その物性を調べればクロロプラストの電子伝達の理解に役立つ。今回，固定化フェレドキシンを利用してFNRを大量に精製し，次で固定化FNRを調製した。固定化FNRは，FNRが本来持っているすべての生化学活性を持ったまま，安定に固定化されていたことがわかった。

(4) ヒドロゲナーゼの物性を固定化，およびクロロプラストとのカプリング（静岡大教育，八木達彦），クロロプラストの光励起で生じた還元力を使ってH^+ を水素ガスに還元するには，還元型フェレドキシンにヒドロゲナーゼを作用させればよいことは，もう20年以上も前からわかっている。しかし，これを行うためにはヒドロゲナーゼを安定化するだけでなく，クロロプラストで発生する酸素からヒドロゲナーゼ系を保護してやらねばならない。まず，安定化については硫酸還元菌のヒドロゲナーゼをポリアクリルアミドで包括固定化することで，数ケ月にわたる反復使用に耐えるものを得た。一方，酸素から保護する手段としては，電池を利用し，クロロプラストによる光励起系から電子だけを導線でカソードに導き，ここにヒドロゲナーゼ系を働かせることで解決できる根拠を示し，落合や山下らの研究とのつながりを示した。

(5) クロロフィル増感半導体の光起電力効果（東大工，本多健一），光エネルギー転換系を組み立てるとき，生体系をそのまま使わずに，これをお手本にして人工的光励起モデルを組み立てようとするアプローチも大切である。クロロプラストで光エネルギー転換に関与する中心分子の一つ，クロロフィルを半導体SnO_2 電極上に単分子膜としてコーティングして光アノードを作り，光励起の量子収率を測定した。また，クロロフィルとステアリン酸の混合単分子膜をコーティングした場合，モル比1：1のときが量子効率が最大となった。このデータは光合成における光エネルギー転換の初期過程を理解するためのモデルとして有効である。

(6) 亜鉛テトラフェニルポルフィリンによる光エネルギー転換過程について（岡山大薬，藤田勇三郎），亜鉛テトラフェニルポルフィリン（Zn·TPP）をドデシル硫酸ナトリウムで水に可溶なミセルとして光を当てると，$Zn\cdot TPP^+$ のカチオンラジカルが生じ，光により電荷が分離されたことがわかる。この系にユビキノン－10を添加することで，カチオンラジカルの定常濃度を増大させることに成功した。さらに，Zn·TPP を白金電極に塗付して光照射すれば光カソードとして働く。この系は光エネルギー転換系の理解に有用なモデルを提供する。

(7) クロロフィル関連化合物の光化学的挙動（京大工，松浦輝男），クロロフィルは生細胞の中でも絶えず光分解で消耗し，生合成で補充される。この分解様式の理解も光エネルギー転換系の組み立てに必要である。クロロフィルのモデル化合物としてMg·TPPの光酸化過程を研究した。Mg·TPPは，光照射条件下に，一重項酸素の作用で分解し，ピロール核とメチン基の間で酸素化開裂が起る，TPP自身やヘムは光分解しないことより，Mg錯体独特の反応であることがわかった。Mg 錯体として知られるクロロフィルの光分解を考えるうえで，一つのモデルとなる。

以上の諸講演のあと，所内の川合知二氏より光アノードと光カソードを組み合わせたメチルビオロゲンの光還元装置について説明があり，諸々ディスカッションを通し，有意義な一日を過した。この機会を与えて下さった赤松所長をはじめ分子研の諸氏に感謝する。

金属ポルフィリンの理論と実験の現状と将来

東工大理　小林　宏

ヘム蛋白，クロロフィルとして生体系で重要な電子的過程をはたしている色素，金属ポルフィリンは，これまで中心金属イオンの錯体としての電子状態を反応と構造との関連で，理論的または実験的に研究されてきているし，配位子の共役二重結合系はπ電子系をもつ有機分子の一つとして，その電子状態とくに励起状態，光化学反応，分子性固体における分子間相互作用等が分光学をはじめとする物理的方法でいろいろしらべられてきている。しかしこの色素を金属錯体と考えるか有機色素と考えるかは研究者の研究上のアプローチのしかたによるが，生体系では中心金属も配位π電子系もそれぞれ重要な役割をはたしており，金属錯体とみなしたり，有機色素と考えてしまうことはできない。金属錯体の金属に比較的局在している電子系はかなり強い中心力場下にあり，しかも電子間の斥力エネルギーも大きく，分子的な環境変化によって，大きなreorientationをおこす。とくに電子的な過程にともなうreorientation は大きい。配位子のπ電子系はもちろん分子全体に非局在化しているが，この効果は中心の金属イオンの軌道にまで及んでいる。この非局在化している多電子系における電子間の相関は特徴的であり，この分子の電子的な特性の記述を複雑化している。

6月12日13日，分子研のセミナー室で「金属ポルフィリンの理論と実験の現状と将来」と題した研究会が約50名の参加のもとに行われた。わが国にはいくつかの若いすぐれた研究者のグループがあるがこの方たちに集ってもらい，理論と実験の現状とこれからの研究の問題点について討論をお

こなった。

以下講演の順を追って内容を簡単にのべる。

6月12日（月）

小谷正雄（東理大）：特別講演「ヘム蛋白の鉄の電子状態」の高スピン，低スピン状態がほんとに生理的な意味をはたしているのかどうかという問題提起をなされた。

大塚仁也（東理大）妹尾康喜（名大理）亀田陞（GAMBRO, JAPAN）：「ポルフィンFe（Ⅱ）イミダゾール系の電子構造」と題して半経験的計算を軸配位子鉄をふくめた全系に適用した結果を示した。計算結果は実験だけでなく非経験ab initio 計算との比較が重要な意味をもつという議論があった。

妹尾康喜（名大理）亀田陞（GAMBRO, JAPAN）大塚仁也（東理大）：上記の計算を拡張して電荷移動励起状態と（π, π^{*}）励起状態の配置間相互作用によってデオキシミオグロビンのＭＣＤスペクトルを巧みに解析した。

野沢庸則（東北大非水研）：ヘム蛋白質のＭＣＤスペクトルをうまく概説したが，妹尾らの解析にくらべて開殻構造の鉄とπ電子系の相互作用の機構についてあまりはっきりした結論が得られていなかった。

前田豊（京大原子炉）：種々のヘム鉄の酸化状態とメスバウワースペクトルの化学シフト，四重極分裂の関係についてのべた。とくにペルオキシダーゼ関係のデータの整理は貴重である。

柏木浩（分子研）：北大大野公男教授の下で行われたコバルトポルフィンのab initio ＭＯ計算の結果を示し，ab initio 計算の現状についてのべられた。このような大きな分子では半経験的な計算の重要性は少しも減じていないが，とくに分子研では分子の計算のための新しいコンピューターが導入されたので，柏木氏と柏木氏を助ける学生が出してくれるこの大きな分子のより徹底した計算が期待できる。とくに「理論と計算のこれからについて」の討論では分子研の新しいコンピューターによる分子計算の可能性について紹介があったが諸熊教授の「柏木さんがこれからいかに夜おそくまでがんばるかによる」といわれたのは印象的であった。

6月13日（火）

生越久靖（京大工）：生理活性を発現できる分子の合成について最近自分が合成されたものの事例が示された。

山村剛（東大理）：界面活性化したポルフィリン錯体が光照射で電子を放出する実験証拠を示された。クロロフィルの光励起の初期過程のモデルにチャレンジするための糸口となるかもしれない。

相馬光之（東大理）：相馬氏がvan der Waals 教授の下で行ったポルフィリンの三重項のＥＰＲについてのべた。

小原繁（北大理）：三重項状態についてのab initio 計算についてのべた。

谷村克己（分子研）：ポルフィリンの薄膜の光学的性質とエネルギー移動について最近分子研で行った結果について発表された。

坂田忠良（分子研）：「ポルフィリンによる光エネルギー変換」と題し，光エネルギー変換の原理についての議論がなされた。

エネルギー変換とポルフィリンを含む分子の設計に関する討論が井口教授の司会でなされた。ポルフィリンおよびポルフィリン類似のクロリン（クロロフィル）やバクテリオクロリン（バクテリオクロロフィル）の励起分子としての性質と，光励起における分子集団の挙動についてまだまだ実験的な研究が不足しており光エネルギー変換等に利用するには今後もっともっと解析的な実験をしなければならないことが明らかになった。

木村啓作（分子研）：ヘムのイオン化ポテンシヤル測定について最近のこころみが紹介された。

北川進（京大工）ポルフィリンの金属錯体の光電子スペクトルの実測が示された。イオン化ポテンシャルはとくにこの分子が関与する電子移動の機構を考察する際，最も基本的なデータであり，今後の展開が期待される。

飯塚哲太郎，島田秀夫，石村巽（慶大医）：ヘム蛋白質にＣＯを結合しておき，これに光照射をするとＣＯを解離するが，その量子収率についての軸配位の効果を明らかにしている。

工位武治（阪市大理）：コバルトポルフィンのＥＲＲのこれまでの測定結果にはいろいろ問題があった。注意深い測定によってコバルトポルフィンが擬似JAHN- TELLER 効果をおこしていることを示した。

北川禎三（阪大蛋白研）：いわゆる中間スピン状態をとっている鉄ポルフィリンについて共鳴ラマンスペクトルを測定し，高スピン，低スピンとは異った振動数をえている。

森島績（京大工）：ヘム鉄と軸配位子との結合について森島氏自身のＮＭＲの研究をまとめて話されたが，とくにCompound Ⅰ，Ⅱについての測定結果は興味あるものであったが，結論は討論に加わった人達にはうけ入れ難かった。

G. N. LaMar （カリホルニア大）：NMR Studies of the Nature of In-Plane Asymmetry in Iron Porphyrin と題してポルフィリンの４つのピロール環が外側の置換基の勅果で電子供与性電子受容性に差を生ずることを実験的に示した。

半導性高分子及び分子性結晶の物性と電子的過程における相関

分子研　佐藤直樹・井口洋夫

いわゆる機能性高分子の中にあって，電気的物性に主眼の置かれた半導性高分子についての研究は，近年著しい進歩を遂げている。それに伴って，半導性高分子の諸問題が，その励起状態をも含めて，一般の高分子における電子的過程に通じるものであり，それらの解明が高分子化合物の電気物性や光物性などの理解に不可欠である事が明らかになってきた。

他方，芳香族炭化水素に代表される（低分子の）有機分子性結晶の導電性に視点を置いた研究にも少なからぬ年月が費された今，一群の分子錯体について金属に近い導電率を示すものが発見されたり，また高純度結晶を用いての精密測定による電荷輸送過程についての情報も蓄積されて来ている。その結果，導電性の向上を図る為には有機結晶の取り扱いにも“高分子的”な配列を考慮する必要性が認められる様になって来た。

この様な状況下では，「分子科学」の手法は高分子の分野にも適用でき，また有機結晶の物性研究にも高分子の手法や概念が有用であると思われ，今回，両分野の研究者が話題を持ち寄って標記の研究会を催す事になった。

暑いさなか，7月3日および4日の両日，約30名（うち所内約10名）の参加者をもって開催されたこの研究会は，やや過密スケジュール（7月3日は夜10時過ぎに終了）ではあったが，互いに得るところ少なからぬうちに閉会となった。プログラムは凡そ，1日目は高分子，2日目は分子性結晶の，各々電気物性・光物性・構造を中心としたテーマに分割した。以下，そのプログラムに沿い，筆者の記録に基づいて具体的内容を紹介する。従って，演者の意向とは異った解釈をしている点も少なくないと思っている。なお番号の肩に※のついたものは50分，他は30分の講演であった。

第1日（7月3日）

(1)※「半導性高分子の物性――ポリーNービニルカルバゾールを中心として」（山口大工）　艸林成和

ポリビニルカルバゾールを中心とした半導性高分子に関して，intrinsic な電導性の特徴や，低分子の光学的性質との関連がつけ易いキャリヤー生成機構の問題，さらに構造との関連などについて要約された。殊に不純物の問題についての詳細な内容は応用面からも興味を引くものであった。

(2)「ポリアセチレンを中心とする化合物の電子物性」（東工大資源研）　白川英樹

最近注目を浴びているポリアセチレン化合物について，合成・構造・物性に及ぶ要約がなされた。AsF_5 を含むシス化合物の導電率が延伸度の2乗に比例して増大するとの事実が指摘された。

(3)「1,3ージフェニルー5ーpークロロフェニルー2ーピラゾリンの結晶状態とガラス状態における一重項励起エネルギーの移動」（阪大工）　城田靖彦

室温付近でガラス状態になるピラゾリンとその高分子化合物の光学的・電気的性質が紹介された。分子内電荷移動を可能にする置換基を導入した時のキャリヤー移動が分子性混晶の場合と対比しながら議論された。

(4)※「高分子の基底状態・励起状態相互作用と高分子構造の相関」（東工大資源研）　田附重夫

高分子ー高分子間の電荷移動や，分子内にドナー・アクセプターの両サイトを持つ様な高分子について，電子状態と構造の関連の要約から，分子設計の一つの指針が提示された。

(5)「nーアルカン中のキャリヤー移動機構」（阪大工）　吉野勝美

液体アルカン中の電荷易動度についての考察から発展し，固体nーアルカンにおけるキャリヤー移動機構が論じられた。

(6)「ポリエチレンテレフタレートの光伝導」（名大工）　高井吉明

ポリエチレンテレフタレートの光電導についての詳細な成果が，特長ある測定方法と共に紹介された。

(7)「高分子TCNQ塩および高分子～低分子TCNQ塩と絶縁性ポリマーとのブレンドポリマーの誘電物性」（松下電工）　池野忍

誘電物性の向上の為には，共重合体よりもブレンドポリマーの方が合目的である事が，TCNQ塩を含む不均一誘電体について指摘された。

(8)「芳香族高分子の構造と固体物性」（東大宇宙研）　古知政勝

主鎖に芳香核をもつ高分子について，X線小角散乱による構造解析の結果と，主に熱的及び力学的物性とを結びつけて論じられた。

(9)※「結晶性高分子の構造についての一般則」（阪大理）　田所宏行

分子内相互作用が凡その形を定め，分子間相互作用がそれをmodify するという高分子構造の特徴が幾つかの詳細な例に基づいて論じられた。合成による機能性高分子の開発に関する困難な点も指摘され，改めて結晶構造と高分子物性の間の密接な関連が確認された。

(10)「ポリエチレン延伸膜の光吸収と光電子放出の異方性」（日本合成ゴム）　橋本慎平

延伸方向に主鎖の配向したポリエチレン極薄膜について，真空紫外領域における光吸収と光電子放出の偏光に対する異方性が合致する事が報告された。

(11)「ヘキサトリアコンタン（$n-C_{36}H_{74}$）の凝縮状態と光物性」（分子研）　関一彦

ヘキサトリアコンタンの蒸着膜が，基板によって異なる凝縮状態をとりうる事や，光電物性が充分よくポリエチレンのモデル化合物になりうる事などが指摘された。

第２日（７月４日）

⑿※ 「分子性固体中の分子配列と物性」（京大化研）　植田夏

電子顕微鏡を主とした手段により，蒸着膜中の有機分子の配列や分子構造そのものが観測可能である事を，豊富な例を挙げて報告された。とりわけ基板との相互作用が起動力となり分子間相互作用に影響が及んで膜構造に多形が生じる過程にも論及した。

⒀ 「高分子蒸着膜の成長過程」（神戸大工）　芦田道夫

アルカリハライド上の高分子蒸着膜の成長過程を電子顕微鏡による観測結果に従って報告された。長鎖状炭化水素も含めたこれらの膜では主鎖と基板とのなす角度が種々の条件によって異なる事が指摘された。

⒁※ 「分子結晶のキャリヤー生成」（学習院大理）　小谷正博

分子性結晶のキャリヤー生成及びその移動機構について，再結合過程・易動度・有効質量などの種々の角度から検討を加え，今後取り組むべき問題（の示唆）をも含めて，それらの要約がなされた。

⒂ 「非晶性有機固体の電気的及び光学的性質」（お茶大理）　丸山有成

低温基板上に蒸着して得られる芳香族炭化水素の非晶性固体が，結晶には認められない特異な電気的及び光学的性質を持つ事が報告された。

⒃※ 「導電性有機結晶の構造と物性の相関」（東邦大理）　小林速男

数多くの導電性有機結晶を，その構造上の特徴に基づいて分類し，電子物性と特にその温度変化（低温）に対する挙動とを関連づけた。この様な研究の延長上に，より高電導性の有機結晶が存在する可能性を示唆した。

⒄ 「ＴＣＮＱ塩の励起状態」（名大理）　田仲二朗

ＴＣＮＱを含む導電性結晶の特長が整理され，光学的手法によって得られるその励起状態についての情報と併せて検討が加えられた。

⒅ 「アントラセン単分子膜の吸収スペクトル」（電総研）　伊東宇一

高真空中で５Ｋの低温基板上に蒸着したアントラセン単分子膜の吸収スペクトルの解析により，非晶体からの結晶化の問題が論じられた。

⒆ 「分子性結晶中の三重項状態」（電通大・分子研）　佐野瑞香

ゼーマン分光法により，アセナフテンキノンなどの分子性結晶中の三重項状態についての詳細な情報が与えられ，ファラデー回転の性格づけとも話題の関連をみた。

新しいπ電子系の合成とその構造特異性に関する研究

九大理　吉野　持

昭和53年７月６日，７日の２日間，上記の研究会が分子科学研究所の共同研究による研究会として開催され，北は北海道から，南は四国，九州まで全国各地から28名の参加者があった。メンバーはシクロファン研究グループと非ベンゼン系芳香族化合物の研究グループを含み，有機化学系と物理化学系の双方の研究者が集まり，それぞれの立場から新しい研究結果による知見を述べ，意見の交換を行った。

以下プログラムに従って講演題目とその内容の概略を書くこととする。

７月６日（木）13：30～17：00

１）　山本浩司（阪大基礎工）　キラールなねじれπ電子系化合物の合成：　多層架橋シクロファン類や非対称三架橋シクロファン類のほか，トランス二重結合やアレン結合を環内に含むねじれた中員環化合物を合成した。また１－ベンゾフェナントリル－２－フェニルエチレンをコレステリックな液晶中で光不斉環化させることによって光学純度1.1％の光学活性ヘキサヘリセンを得た。

２）　野崎　一（京大工）　Synthesis of Medium Rings Related to Humulene and Germacrenes：　11員環内にトランス二重結合３個を含む天然物フムレンの新しい合成法を見出した。トランス二重結合を２個含むファルネソール骨核を持つケトエステルを環化し，有機アルミニウム化合物の存在下，オキセタン－ホモアリルアルコール転位反応を用いて極めて選択的にトランス二重結合を導入できることが報告された。

３）　村田一郎（阪大理）　ベンゾ〔ａ〕ピレンの非交互異性体：　アズレノ〔1,2,3－cd〕フェナレンおよびアズレノ〔4,5,6－cd〕フェナレンを新しく合成し，既知の異性体も加えた３種について種々の物理的性質を比較した。さらに発がん性並びに突然変異性が調べられた。異性体によって作用が異るのは興味深い。なおＴＣＮＱとの電荷移動錯体の固有抵抗は 9.6×10^{6} Ω㎝で期待した電導性を示さなかった。

４）　吉田善一（京大工）　新しいフルバレン類の合成と構造：　２個のジイソプロピルアミノ基で安定化されたシクロプロペニウム環を含むフルベン，フルバレン，ペンタフルバレン，ヘプタフルバレンおよびノナフルバレンが合成され，ペンタフルバレンではCr, Mo, W, Rh, Fe およびCoの錯体が生成された。ノナフルバレンの場合はメチレン架橋によってπ電子系の安定化がはかられた。

5）　伊東　檄（東北大理）　トロポキノン類について：　p ―および o ―トロポキノン並びに1,2,5―ベンゾトロポキノンの合成，物理的性質が報告された。これら３種のトロポキノン類はいずれも種々の付加反応を行い，７員環でしかもキノン本来の化学的性質を示した。

6）　田仲二朗（名大理）　共役系の結合交替：　アヌレンやシアニン色素の共役二重結合系における結合交替の有無が物理化学の立場から論じられた。

7月7日（金）　9：00～15：00

7）　石津和彦（愛媛大理）　スピン標識芳香族クラウンエーテル類の合成及びその金属錯塩のＥＳＲ法による研究：　テトラメチルピペリジン―Ｎ―オキシルラジカルを分子内に含む芳香族クラウンエーテル類を合成し，アルカリ金属錯体のＥＳＲスペクトルを測定し，またトリフェニルメチルラジカルを含むクラウンエーテルについてもENDOR スペクトルより配座解析が行われた。

8）　森　信雄（東理大理）　〔2.2〕シクロファンの ^{13}C―NMRとCNDO/２計算：〔2.2〕シクロファンにおける ^{13}C ― 化学シフトと全電荷密度との間に直線関係の存在することが示され，ニトロシクロファン類と未置換シクロファン類との数値の比較によって基底状態の π ― π 相互作用が論じられた。

9）　田伏岩夫（京大工）　新しい水溶性ヘテロシクロファン：　４個のスルホニウム基または４個の第四アンモニウム基をもち，４個のベンゼン環を含むヘテラパラシクロファン類を合成した。これらは包接ホストとして作用し，その疎水キャビティーに疎水性の基質を選択的に強く取り込むことを明らかにした。またエステルの加水分解の加速効果も認められた。

10）　三角荘一（阪大産研）　電荷移動シクロファン：　ヒドロキノンやジメトキシベンゼンなどの電子供与体とベンゾキノンやテトラシアノキノジメタンなどの受容体の両方をシクロファンの部分に組込んだ２層および３層の多数の化合物およびトロピリウム環をもつトロピリオパラシクロファンなどの合成法および電子スペクトルが報告され，供与体と受容体との位置関係とＣＴ帯との関係が論じられた。

11）　辻　　孝（北大理）　不飽和結合を側鎖にもつパラシクロファンの環化付加反応による合成と反応：　テトラシクロプロピルエチレンまたはジシクロプロピルスチルベンとＴＣＮＱとの環化付加反応で〔10〕パラシクロファー４，６―ジエン誘導体を生成し，１―シクロプロピル―１，３―ブタジエン誘導体とＴＣＮＱの反応で〔９〕パラシクロファー３，５―ジエン誘導体を生成することが報告され，環化付加反応の機構が考察された。

12）　山川浩司（東理大薬）　多架橋フェロセノファンの合成と性質に関する研究：〔4.4〕フェロセノファンより出発して，〔4.4.3〕フェロセノファンケトンを経て，２種の４架橋体〔4.4.4.3〕フェロセノファンケトンが合成され，化学的手段により構造が確められた。

13）　稲津孝彦（九大理）　〔3.3〕シクロファン誘導体の分子内環化付加生成物：〔3.3〕パラシクロ（9,10）アントラセノファン，〔3.3〕（1,4）ナフタレノ（9,10）アントラセノファンおよび〔3.3〕（9,10）アントラセノファンの各誘導体合成の際，それらの光付加生成物や分子内Diels ― Alder 付加生成物を生ずることが報告された。

14）　又賀　昇（阪大基礎工）　物理化学者から有機化学者へ：　電子供与体と受容体を炭素鎖で結合した化合物をつかってエキサイプレックスの研究がどのように進展するかという例が述べられ，物理化学者から有機合成化学者へどのような化合物を合成すべきかという目標が示された。

以上のように２日間の研究会での発表内容は多方面にわたっているが，いずれも π 電子系の新しい知見に対して理論と実験の両面から色々と活発な意見が出された。

６日夜には所外で夕食を兼ねて懇親会が開催され盛会であった。また７日昼（12：00～13：30）には昼食後分子研の所内見学をさせて頂き有益であった。

最後に，この研究会を開くに当り，種々お世話して下さった岩村秀教授，吉原經太郎教授並びに関係研究室の方々に厚くお礼申し上げます。また，御援助をして下さった赤松秀雄所長並びに井口洋夫教授に感謝致します。

固体界面反応の分子論的アプローチ

分子研　坂田忠良・塚田　捷

昭和53年９月７，８，９日の３日間上記の題（提案代表者，田丸謙二“東大理”）のもとに，分子研の共同利用による研究会が開かれた。

最近，超高真空技術や電子分光法の発展によって，固体表面の問題（たとえば触媒作用）を分子のレベルで議論できるようになって来た。これと共に物性物理の中にも“bulk からsurface へ”の流れが生じているように見うけられる。また太陽エネルギー変換の立場から半導体界面を用いる光触媒や光電気化学の研究はこのところ急速な盛り上がりを見せている。しかし固体表面，界面の研究者はコロイド，電気化学，触媒，表面物理，理論の各分野に散らばっていて，相互の交流が少いのが現状である。

この分野の急激な進歩と変化に対応するには，これらの研究者間の学問的交流が必要であると考え，この研究会が提案された。

この会はとくに次のことに重点をおいて企画された。

(イ)新しい表面の設計。

人工的に表面を作ったり，修飾することによって，物性・触媒作用・電極作用等の制御の可能性を探る。

(ロ)光触媒や，光電極反応のような励起状態での表面・界面反応。

(ハ)表面解析の新しい技術・方法と問題点。

研究会には40数名が加わり活発な議論が行われた。いろんな分野から集ったため，お互にみしらぬ顔の人が多かったようであるが，お茶の時間，懇親会を通しても次第に親しみが増していったように見受けられた。とくにwell defined surface の問題をやっている人や理論家が，光電極反応等の複雑な現象に対しても，じっと我慢（?）して，最後まで熱心に議論に参加されていたのは印象的であった。へたをすると，雑多な人を集めてまとまりのない会になりかねなかったが，参加者全体が，このような試みを理解して協力して下さったため，最後まで盛会であった。最初の試みとしては，まずまずではなかったかと思っている。こういう会をきっかけに研究の新しい発展があるならば，分子研の共同研究の目的にかなうのではないだろうか。またこの会の参加者には，分子研訪問が初めての人が多く，分子研の内容，たとえば機器センターの利用，共同研究の実態等について多くの関心が寄せられた。

以下本研究会の内容をプログラムにそって記す。

田丸謙二（東大理）“固体界面反応の研究会開催にあたって”

固体表面の科学のはたす重要な役割と，近年における長足の進歩についてふれるとともに今までの表面研究への反省から「練習問題」にとりくむ姿勢を早く脱し，個性ある立場より独創的な研究をめざすべきことが強調された。

1．表面系のデザインと化学反応

安盛岩雄（東工大理）“表面および界面反応の特性”

表面および界面反応の特徴的問題として，表面の活性構造，分散状態および担体との相互作用，分子の吸着と分子間相互作用，表面反応の機構などを取上げ，それらの意義と解明へのアプローチを概観した。

宇佐美誠二（横浜国大工）“表面と吸着”

化学吸着のメカニズムは，現在なお実験的，理論的な中心問題で多くの基礎的研究が行われている。吸着粒子間に働く力，多原子分子の吸着と解離・非解離，吸着粒子の表面移動，吸収等の中から最近のトピックスを選び紹介した。

塚田捷，里子允敏（分子研），足立裕彦（阪大工）“表面，表面欠陥，吸着の理論”

MgO，TiO_2，$SrTiO_3$ 等の酸化物表面，特に表面欠陥や簡単な吸着系の電子状態について，DV−Xα クラスター法によって得られた結果について報告した。又，表面欠陥に伴う局在電子状態が化学活性とどう関係するかを議論した。

権田俊一（電総研）“分子線エピタキシャル法を利用した新しい表面の研究”

ＭＢＥ法の発展により，超高真空中で表面を観察しながら，分子と表面の相互作用を調べたり，へき開等で得られるのとは違う表面構造が得られる様になった。特にGaAs を例にとりＭＢＥによりどのように興味ある表面が得られるかを概観した。

藤平正道（東北大薬）“表面の化学修飾”

表面にある種の化合物を共有結合により固定し，表面の性質を著しく変化させる“表面の化学修飾”は表面設計の一つの魅力ある手法である。ここでは演者らの研究を中心に，ここ数年の電極表面の化学修飾に限って，その製造，キャラクタリゼーション，応用等について報告した。

平木昭夫（阪大工）“半導体・金属界面での低温合金化反応と電子状態”

禁制帯幅2.5eV 以下，又は誘電率８以上の半導体と金属との接触系で認められる特殊な低温固相反応について概説し，この起因を接触金属によって誘起させる半導体側の金属転移と関係して議論した。

村上雄一（名大工）“Real Surface とその問題点——実用触媒，酸化物表面はどう考えられるか”

工業的に実際用いられる触媒調製に際して，基礎研究の果す役割を述べると共に，助触媒，担体等の重要性を議論した。

津田惟雄，関田正実（無機材研）“ReO_3 の触媒作用—触媒反応に対する一つの考え方”

ReO_3 によるプロペンの触媒反応のメカニズムが，主として表面構造によって左右されるのか，或いはReO_3 の格子内にとり込まれた水素が重要であるのか，最近の実験結果に基づいて議論。

2．光誘起表面反応 — Photocatalysis and Photoelectrode Process —

坪村宏（阪大・基礎工）“光の関与する界面現象——光電極，光触媒作用について”

半導体界面に光をあてたときにおこる光→電気あるいは化学エネルギー変換の原理と問題点を総合的に平易に解説するとともに分子レベルでの現象解明の重要性が強調された。

西田昌彦（金沢工業大）“半導体表面の電子状態と吸着及び光電極反応”

半導体電極に関して，とくにn 型Ge 電極での電流増倍現象の紹介とそのメカニズムについて理論的解析が行われた。

森川陽（東工大・工）“吸着分子の光化学”

固体表面の吸着種の光化学についてとくに多孔質バイコールガラスに吸着したp —ベンゾキノンの

三重項励起状態のエネルギー緩和と化学反応について紹介された。

川合知二，谷村克己，坂田忠良（分子研）“レーザー光励起による固体界面反応のダイナミックス”

固／液界面で起る光電極過程および固／気界面で起る光誘起表面反応について nsec パルスレーザを適用した動力学的研究が紹介され光パルス法の重要性が強調された。

森崎弘，矢沢一彦（電通大）“水の光触媒的分解とTiO_2表面”

n 型半導体表面での水の分解によるO_2発生の機構が論じられた。とくにTiO_2表面準位のはたす役割がルミネッセンスや光電導の実験結果をもとに推定された。

土肥義治（東工大・工）“水と光と窒素によるアンモニア合成”

水と窒素と光触媒を使ったアンモニアの光合成について論じられた。とくに演者らの研究によるバナジウム・メタノール錯体とカテコール，NaOH の系によるメタノールと窒素からのアンモニアの光合成が紹介された。

藤嶋昭（東大・工）“光電極反応の最近のトピックス”

半導体の光電極作用にもとずく太陽エネルギー変換の問題について，とくに電解質水溶液中のレドックス剤による半導体表面の安定化について論ぜられた。

3．表面研究の手段と問題点

寺倉清之（東大・物性研）“表面および吸着系の理論的諸問題”

固体表面の理論的研究において，扱う対象とそのモデルおよび種々の近似計算の問題点と有効性が議論された。

相馬光之（東大・理）“電子分光法による触媒反応の研究”

電子分光法が触媒作用の分子論的アプローチに対し，いかに秀れた手段であるかを論じ表面構造・電子状態・吸着状態・表面での分子過程の研究への適用を概観した。

伊藤正時（東北大・工）“Modulation 法による吸着分子及び界面反応の研究”

高感度赤外反射分光法，レーザーラマン分光法，可視紫外線反射分光法等が表面・界面現象の研究にどのように用いられて来たかを種々の例を上げて紹介し，その特長と限界を論じた。

このような一般講演の外に，毎日最後の１時間を次のようなテーマでパネルディスカッションを行い，参加者の間で意見を交換した。

1）【デザインした表面上で制御した化学反応を起こさせる可能性について】(座長：恩地勝“京大・理”)

2）【光と表面との相互作用】(座長：坂田忠良“分子研”)

3）【表面・界面反応に対しどのような新しい手段を用いたらよいか】(座長：上田隆三 “早大・理工”)

外国人研究員紹介

Harry F. King 教授について

分子研 諸 熊 奎 治

年もおしつまった12月20日から，米国ニューヨーク州立大学バッファロー校（SUNY Buffalo）化学教室の Harry F. King 教授が53年度外国人研究員の掉尾をかざって来所され，54年３月31日まで滞在の予定である。

King 教授は1930年デトロイトの生まれで，マサチュセッツ工科大学でＢ．Ｓ．を終えたあと２年間兵役に服され，その後プリンストン大学でHornig 教授の下で「立体結晶場における剛体四面体の回転状態」の研究で PhD を1960年に取得された。ついでNSF Postdoctoral Fellow に選ばれ，ケンブリッジ大学理論化学教室でLonguet-Higgins 教授の指導を受け，分子軌道法の研究にたずさわるようになった。1962年よりバッファロー校で研究を続けておられる。

King 教授は，ガウス型基底関数を使ったab initio 分子軌道計算の先駆者の一人で，その応用としてのプロトン移動反応の計算，電子密度分布の実験との比較（Coppens 教授と共同）の研究のほか，電子相関のジェミナル理論などがあり，分子軌道法における広範な知識によって分子研でも討論がはずむものと期待される。

この２，３年は，ab initio 分子軌道法の重要な基礎であるガウス型基底関数の積分評価法について，今迄とちがった全く新しい方法を提唱し，注目をあびている。そして，自ら，新評価法に基づいた分子のab initio 新計算のプログラムシステム HONDO を開発し，米国カリフォルニア大学ローレンスバークレー研究所に最近設立された NRCC（National Resource for Computation in Chemistry）の最初のプロジェクトの一つとして，どんどん改良が加えられつつある。分子研でも，54年１月より稼動する大型計算機を利用してシステムの開発とその応用を続けられる予定で，計算機センターの応用プログラムの充実のためにも全く時機を得た来所といってよいであろう。

King 教授は気さくな性格で，また大のスポーツファンである。彼のプログラムシステムの名前 HONDO は，実はボストンセルティックス（プロバスケットボールチーム）の名プレーヤーJohn Havilecek（最近引退）のニックネームだと言えば，その程度もわかるというもの。分子研付近に運動設備のないのが一寸気になるところである。

ナィヤガラ滝に近いバッファロー市は，私のいたロチェスターから車で１時間ばかりのエリー湖畔にある豪雪地帯で，一昨年冬は数時間で２メートルを越える積雪があり，車ごと雪にうずもれて多数の犠牲者を出した。今冬は，雪中運転の危険を忘れて，快適に研究を進めてもらいたい。

電子計算機センターについて

分子研　柏木　浩

1．計算機システムについて

分子科学のための大型電子計算機の運転が昭和54年１月から始まる。計算機システムはHITAC M−180 ２台からなるマルチプロセッサシステムで，小数点演算のための高速演算処理装置とベクトル演算のための内蔵型アレイプロセッサを持っている。１台のＣＰＵ速度はHITAC 8800よりやや速く，FACOM M−190よりやや遅い。主記憶は８ＭＢ，ディスクは7150ＭＢである。現在の東大大型計算機センターのシステムに比べ記憶容量は主記憶，ディスクともほぼ同等，中枢部の処理能力はやや下まわる。通常の入出装置の他に磁気テープ装置，ＸＹプロッタ，グラフィックディスプレイ，各種ＴＳＳ端末が用意されている。

分子研センターの問題の一つは利用者の大多数が全国各地に散在していることである。当面の対策として，利用者が遠隔地からＴＳＳ端末を用い電話公衆回線（300BPS）を通じて計算機を利用する設備を用意した。センターの受口は５回線である。計算機運転中であればいつでも利用可能である。出力クラスの指定がMであればラインプリンタ出力のユーザ宛郵送を行なうが，職員不足のためたかだか週一回程度のサービスである。この他に自動応答電話がありセンターの運用状況，運転時間の変更などを知ることができる。

2．省力化のために

現在のセンター職員は諸熊奎治センター長（併任），西本史雄技官，牧野恵子事務補佐員と私の４名である。職員の数が極めて少ないため，原則として全ての入出力装置についてオープン利用方式を採用した。例えば，磁気テープはカードと同じような入出力用媒体と見なされ普通のジョブの実行中には使用されない。ユーザがトークンカード（磁気カード）とキャラクタディスプレイの簡単なキィボード操作により，短時間で磁気テープの内容をディスクに移し，またはディスクからテープに移す。普通のジョブの実行の際に使用される補助記憶はディスクのみである。

省力化のためのもう一つの対策は夜間の，できれば昼間も含めた完全無人運転である。少ない人員で利用時間帯の延長と大規模長時間計算をサポートするおそらく唯一の方法は自動制御に依存した一週間程度の連続運転である。昼間のある時間帯のみ有人運転を行ない，その他の時間帯は無人運転を行なう。現在の予定では無人運転のテストを54年夏頃から始める。オペレータを代行する無人化モニタは軽度の障害の場合には障害を起こした部分の切り離しを行ない，緊急事態の場合には電源の自動切断によるシステムの即時停止を行なう。中程度の障害の場合や処理中のジョブの件数

などが限度以下になるとジョブの凍結をしてからシステムを停止する。完全無人運転を徹底して行った前例はないので，不測の障害に備えて各種の警報装置やハロン自動消火装置などを準備した。

3．プログラムライブラリについて

科学研究のために研究用および応用プログラムライブラリの充実は大変に重要である。このため現在ファコムハイタックと協力してライブラリ管理システムを開発中である。このシステムの目的の一つはプログラムの登録や修正を容易にすることによりプログラム提供者とライブラリ管理者の労力を軽減することである。もう一つの目的はユーザの望むプログラムの検索を可能にすることである。このシステムはライブラリプログラムのリストと要約の他に，必要に応じてマニュアルを含むファイルを持ち，ユーザは自分の期待するようなプログラムがあるかどうか，その機能がどのようなものであるか，マニュアルをどのような手続きで参照できるかなどを順次調べることができる。

ライブラリの充実については研究者の協力が不可欠で，既製のプログラムの収集ばかりでなく，独創的研究のための新しいライブラリプログラムの開発が重要課題である。分子科学のライブラリプログラムの提供や開発は利用者の協力に期待するところが大きい。経験者にはよく知られていることであるがプログラムの製作と保守には多くの労力を必要とする。プログラムライブラリの充実は類似プログラムを重複して作ることの無駄を省き，分子科学研究者全体としてのプログラム製作の効率と研究の協力関係を飛躍的に高め，この分野の研究の発展を左右する要因になる。ライブラリ充実のために多くの利用者の積極的参加を期待したい。

4．データベースについて

分子科学の分野のデータベースの試みの一つに量子化学データベースの計画がある。これまで科研費特定研究の一つの班で準備作業が進められてきた。当センターでも実用に努めようとしている。量子化学文献検索システムは当面対象を非経験的な分子軌道法の理論と計算の文献に限った検索システムで，小規模ながらすでに管理ソフトウェアとデータを収集する組織が作られている。もう一つの試みである量子化学数値データベースは理論計算によって得られる分子の波動関数などを保存蓄積しようというものである。ヒルベルト空間の要素である波動関数は実空間の化学薬品に相当するもので，必要に応じて取り出して他種の波動関数の合成の素材として用い，あるいはヒルベルト空間での観則や分析の対象として利用する。将来，文献データと数値データおよびプログラムライブラリを統合してプログラムとデータの複合システムを形成することも検討している。このシステムは実験データの解析，理論の検証，分子設計などのために量子化学者はもちろん，一般の科学者が会話形式で容易に波動関数や物理量の期待値などを求められるようにすることをねらいにしている。

5．始まりに際して

私がここに着任してからの一年間，計算機の導入決定から搬入までの仕事のために二百人を越える方々と交渉の機会を持った。導入を準備した各種委員会の先生方，分子研管理局の事務官と技官の方々，多種類の業者，特にファコムハイタック株式会社と日立製作所の方々などである。利用者が接触することのない多数の方々のセンター建設のために払われた努力は多量なものである。これらの努力によって建物ができ，規模の大きいハードウェアとオペレーティングシステムが準備された。しかし研究のベースになるソフトウェアの充実や利用者へのサービス，コンサルタントはこれからの問題である。これらは研究面と技術面で高度の能力と意欲を持つ人間の仕事である。まずセンター定員の早急な充足が望まれる。

大型計算機の運転開始が分子科学研究のあらたな契機になることが当然期待される。コンピュータサイエンスは若い科学である。分子研の計算機から何か世界的なものが出てくるか，特に若い研究者の独創的な発想への期待が大きい。

———•———•———•———•———•———•———•———•———

計算機利用申請書，利用の手引（運用編，システム概説編）などを希望される方は分子研人事課共同研究係に申し出て下さい。

昭和53年度共同研究〈前期〉一覧表

共同研究

○分子科学における大型分子軌道計算

○北海道大理	大野公男
北海道大理	高田俊和
理化学研	岩田末廣
理化学研	野村興雄
電気通信大	松岡　修
電気通信大	神原武志
日本原子力研	佐々木貞吉
静岡大教育	広田文彦
名古屋大教育	加藤博史
名古屋大大型計算センター	秦野甯世
愛知教育大	小西英之
京都大工	中辻　博
京都大工	湊　敏
大阪大工	足立裕彦
大阪大工	田辺哲朗
大阪市立大理	長村吉祥
奈良教育大	山辺信一
大阪大基礎工	山口　兆
分子研	諸熊奎治
分子研	塚田　捷
分子研	柏木　浩
分子研〈客員〉	細矢治夫

○高電導性有機化合物〈テトラベンゾペリレン，ジフェナンスラペリレン〉の物性研究

○分子研	井口洋夫
東邦大理	青木淳治
明星大理工	岩島　聡

東邦大理　藤沢捷二
東邦大理　竹川実
学習院大理　石井菊次郎
分子研　佐藤直樹

○可変周波数コヒーレント高分解能光源を用いた新しい分子分光法の開発と応用

○分子研　広田栄治
東京大理　清水忠雄
東京大理　天埜堯義
東京工業試験所　村松知
相模中研　谷本光敏
理化学研　高見道生
富山大理　高木光司郎
九州大理　田中武彦
東京大工　清水富士夫
分子研　斎藤修二

○分子科学的に興味ある架橋芳香族化合物の分子設計と合成の研究

○分子研　岩村秀
東京大理　大木道則
大阪大産研　三角荘一
分子研　伊藤翼
分子研(客員)　坂田祥光
東京大理　木原寛
東京大理　槇野克美

○固体表面における吸着物資の構造・物性および反応性

○大阪大基礎工　坪村宏
大阪大基礎工　山本直登
大阪大基礎工　中戸義礼
大阪大基礎工　松村道雄
東北大工　末高洽
東北大工　八田有尹
関西学院大理　山田晴河

関西学院大理　佐伯雅夫
東京大理　大西孝治
岐阜大工　立木正泰
岐阜大工　箕浦秀樹
大阪大　長沢佳克
大阪大　外村正一郎
分子研　坂田忠良
分子研　川合知二
分子研　谷村克己

(○印：提案代表者)

協力研究

〔前期〕

○振動状態の励起に伴う緩和過程および化学反応の研究

大阪大学理　花崎一郎

○項間交差に対する重原子効果のピコ秒レーザーによる研究

東北大学理学研究科　三枝洋之

○Ion-molecule reactions and molecular evolution in dense interstellar clouds

京都大学理学研究科　鈴木博子

○金属あるいは半導体とその表面に吸着した有機分子との電子的相互作用

東邦大学理　梶原峻

○遷移金属錯体による二酸化炭素および分子状窒素の培触的固定

東京工業大学工　小野嘉夫

○ポルフィリン光電極過程のダイナミックス

東京大学理　相馬光之

○一級アミンの高分解能赤外スペクトル

東京大学薬　坪井正道

○分子の解離励起による高励起原子分子の生成

東京大学理　近藤保

○分子の解離励起による高励起原子分子の生成

国立公害研　福山力

○振動高励起分子のエネルギー緩和と化学反応の研究

東京大学教養　土屋荘次

○エネルギーレベルの近接した色素分子間のエネルギー移動

三重大学工　佐藤博保

○励起分子の電子状態と反応性

大阪市立大学理　西本吉助

○固体表面の電子構造の理論

大阪大学基礎工　永吉秀夫

○イオン一分子反応における振動エネルギーの果す役割

東京工業大学理学研究科　本間健二

○重水素置換炭化水素のマイクロ波分光による研究

上智大学理工　山口一郎

○架橋芳香族化合物の合成と光化学反応

東邦大学理　岩村道子

○黒鉛層間化合物の化学反応性および物性

京都薬科大学　大橋憲太郎

○星間雲分子生成過程の電算機シュミレーション

東京工業大学理　山崎秀郎

○衝突による励起分子のエネルギー移動と化学反応

神戸大学理　加藤肇

○生体高分子の電子構造の分子軌道法的研究

北里大学薬　梅山秀明

○Mo，Wの（100）表面での原子位置再配列の理論的研究

大阪大学理　寺倉清之

○高速ＧＴＯ分子積分プログラムの開発

北海道大学理　佐々木不可止

○コバルト錯体の電子相関

北海道大学理　三好永作

○遷移金属錯体の電子状態と触媒作用

熊本大学工　榊茂好

○イオン分子反応素過程の理論的検討

東北大学科学計測研　楠勲

○薬物活性の電子状態・立体構造依存性

徳島大学教養　吉川研一

○振動反応系の研究

郡上高等学校　早川俊美

○分子性結晶の光電的性質

城西大学理　日野照純

○鉄錯体のメスバウアースペクトルの解析

京都大学原子炉実験所　前田豊

○有機化合物の構造および反応性に関する理論的研究

奈良教育大学　山辺信一

○レーザーによるプラズマ化学反応の解明

豊橋技術科学大学　英貢

○分子錯体結晶の光電子分光

学習院大学理　小谷正博

招へい協力研究

〔前期〕

○Norrish Ⅱ型反応で生成する１，４－ジラジカルの化学的挙動

九州大学理　清水宣次郎

○グロー放電中の不安定分子のマイクロ波分光

東京都立大学理学研究科　鈴木哲雄

○化学反応過程の衝突論的取扱い

東京大学工　中村宏樹

○極端紫外領域における光学的技術の開発

東京大学物性研　菅滋正

○分子性固体の低速電子エネルギー損失スペクトルの測定

千葉大学工　上野信雄

○レーザー誘起化学反応

東京大学教養　片山幹郎

○大出力レーザーおよびパラメトリック発振

東京大学物性研　田中佑一

○ＹＡＧレーザーのビーム伝幡技術の研究

大阪大学レーザー核融合研究センター

加藤義章

○レーザーのミニコンピューターによる制御

東京大学教養　桜井捷海

○マイクロコンピューターを用いた自動可変波長化

北海道大学応用電気研　進藤善雄

○太陽光による窒素固定の研究

大阪大学理　中村晃

○分子線エピタキシー法による光活性表面の作製

電子技術総合研　権田俊一

○光エネルギー変換のための新しい半導体材料の開発

無機材質研　藤本良規

○光合成細菌反応中心の酸化・還元過程

東京大学理　森田茂廣

○高等植物の反応中心濃縮粒子の反応初期過程

帝京大学薬　池上勇

○固体表面光電物性解析装置の開発

東京大学物性研　村田好正

研究会

〔前期〕

○光エネルギー利用による水素の生成

静岡大学教育　八木達彦

○固体界面反応の分子論的アプローチ

東京大学理　田丸謙二

○金属ポルフィリンの理論と実験の現状と将来

東京工業大学理　小林宏

○新しいπ電子系の合成とその構造特異性に関する研究

九州大学理　吉野持

○光電子スペクトル強度

北海道大学応用電気研　木村克美

○半導性高分子及び分子性結晶の物性と電子的過程における相関

分子研　井口洋夫

他に，所長招へい協力研究（前期）（12件）及び施設利用（10件）を実施。

分子研コロキウム

所内コロキウム，第51回以降の題目演者は次の通りです。

第51回　5月17日（1978）

架橋芳香族化合物の化学（岩村　秀）

第52回　5月24日（1978）

The role of quantum theory as an adjunct to experiment in modern structural chemistry (James E. Boggs)

第53回　5月31日（1978）

高ひずみ化合物の化学（菅原　正）

第54回　6月7日（1978）

ab initio MO計算のプログラム JAMOL2 とCoポルフィンの電子状態（柏木　浩）

第55回　6月14日（1978）

Spin aligned atomic hydrogen (J. Baird)

第56回　6月21日（1978）

Interface phenomena controlling the efficiency of electrochemical $MoSe_2 : I^-/I_2$ solar cells (Helmut Tributsch)

第57回　6月29日（1978）

A stochastic theory of collision phenomena (Byung Chan Eu)

第58回　7月12日（1978）

芳香族炭化水素単結晶中のラジカル（中川　和道）

第59回　9月20日（1978）

最近の気相光化学（岡部　秀夫）

第60回　9月27日（1978）

p-キノンの三重項状態について（村尾　俊郎）

第61回　10月25日（1978）

Some aspects of theoretical work in high resolution molecular spectroscopy (Jon T. Hougen)

第62回　11月1日（1978）

赤外レーザーによるフリーラジカルの振動回転スペクトル（山田　千樫）

第63回　11月6日（1978）

Production and structure of "novel" HCSSH from experiments and theory (Børge Bak)

第64回　11月13日（1978）

"Naphthobarrelene photochemistry"(Kurt Schaffner)

第65回　11月22日（1978）

低温固相中での電子移動反応（並木　章）

第66回　11月29日（1978）

X線回析法による結晶内での電子密度分布の実測（鳥海幸四郎）

所内ニュース

受賞

○井口洋夫教授は「芳香族化合物の結晶および分子錯体の物性研究」の業績に対して本年4月日本化学会賞を受賞された。

○諸熊奎治教授は「励起状態，反応径路，分子間相互作用の分野での研究」の業績に対して本年11月国際量子分子科学アカデミー賞を受賞された。なお，International Academy of Quantum Molecular Science のPresident，B．Pullmanパリ大学教授が11月2日研究所に来所され，同アカデミー賞メダルを授与された。

○広田栄治教授は「高分解能高感度分光法によるフリーラジカルの研究」の業績に対して本年12月仁科記念賞を受賞された。

出版

○分子科学研究所全体としての学術報告書Annual Review第1号は53年12月に発行の予定である。

編　集　後　記

本研究所も創設以来早くも3年半を経過した。先発の部門や一部研究施設では活発な研究やサービス活動が行えるようになって来た。国内外の大学の研究者が色々なカテゴリーの“共同研究”や大学院教育協力等を通じて分子研と“かかわりあい”を強めて来ている。何人かの方々にそれぞれの立場から現時点での希望や問題を記述していただいた。これまでの貴重な経験を皆で今後に生かしていただきたいと思う。この他に分子研創設準備会議座長をしていただき，その後評議員をしていただいた東大名誉教授山下次郎氏より貴重な御提言を得ることができた。

前号で4月11日にマリケン教授が来所された事を記したが，当日研究棟完成のこけら落しを兼ねて先生の研究回顧を話していただいた。お話を伺っていると原子軌道の考え方から如何にスムースに分子軌道理論を生み出されたかが分って大へん興味深かった。何らかの形で本レターズに講演の様子を伝えたいと思っていた所，思いがけなく田仲教授から積極的に録音テープからの翻訳を買って出ていただいた。本号の一つの白眉ができたことを感謝したい。

吉原經太郎
斎藤　修二　記

◎交　通　機　関

東京方面より

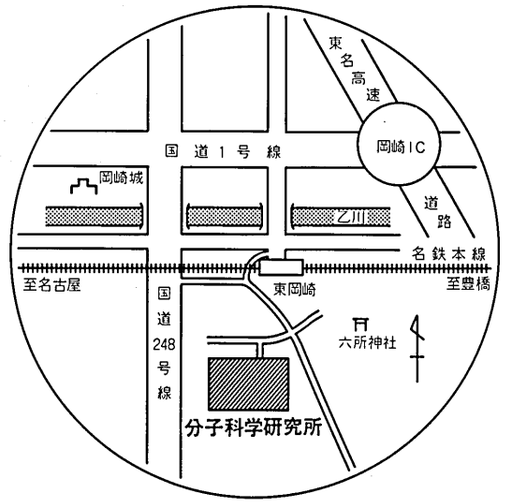
新 幹 線　豊橋駅下車

名鉄本線　豊橋 - 東岡崎 (所要時間25分)

大阪方面より

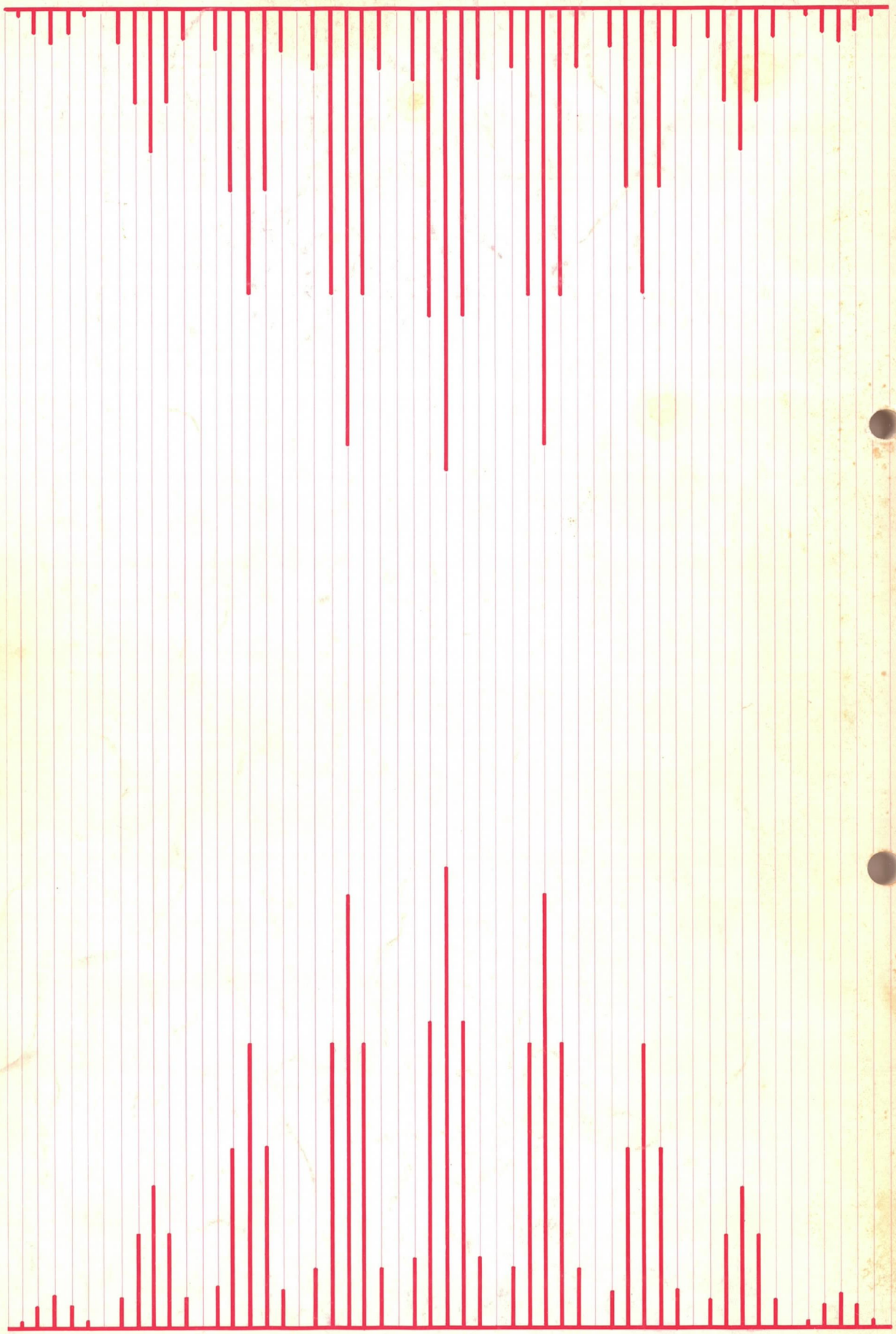
新 幹 線　名古屋駅下車

名鉄本線　名古屋 - 東岡崎 (所要時間35分)



分子科学研究所

〒444 岡崎市明大寺町西郷中38
代表電話番号〈0564〉52－９７７０

《時間外直通電話番号》

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