

ISSN 0385-0560

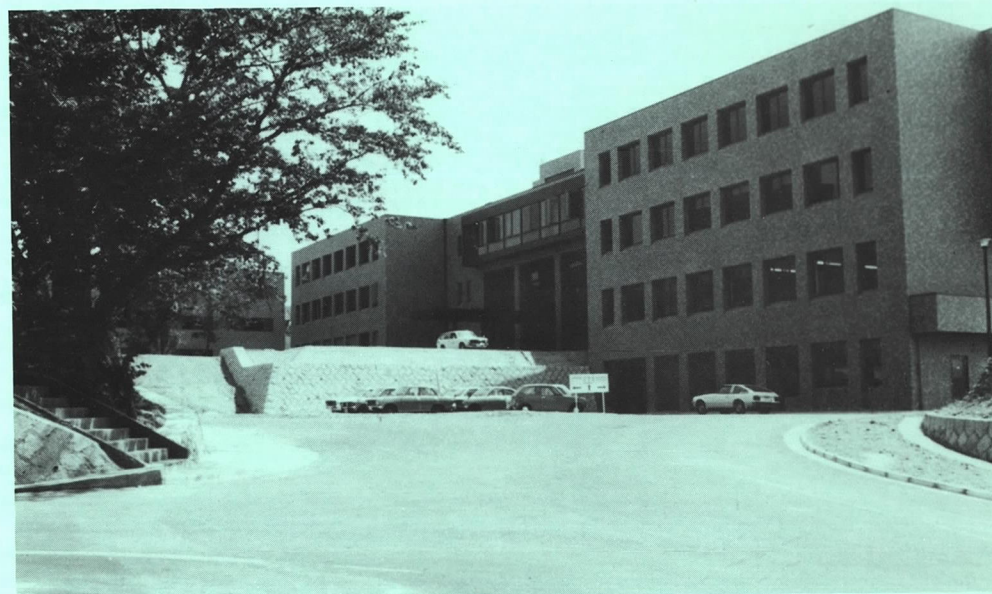
INSTITUTE FOR MOLECULAR SCIENCE

分子科学研究所

分子研レターズ

昭和54年6月

NO. 679



昭和54年3月に完成したセンター施設棟。左手前は図書館、右後方は電子計算機棟。少し後れて、極低温センター棟、実研棟拡張部分も完成した。当初予定していた主な建物の建設が終了した。

秋までにはまわりの環境整備も進み、一つのまとまった研究所の姿となるであろう。

目次

創設4年を経過して—分子研の近況— 分子研 井口 洋 夫 1

レターズ

ふるさとの町と城 東大理 朽 津 耕 三 3

分子科学の栄光のために 阪大理 千 原 秀 昭 4

分子科学研究所と分子科学研究会 東大物性研 木 下 實 7

分子研でのある一日 お茶大理 細 矢 治 夫 9

Remarks in Parting N B S Jon T. Hougen 13

One Hundred Days ニューヨーク州立大 H. F. King 15

岡崎コンフェレンス

第8回岡崎コンフェレンス報告

原子・分子・固体表面間の相互作用 分子研 諸 熊 奎 治 17

研究会報告

新しい物性測定と化学的に興味ある化合物

—多原子価化合物の構造と物性— 分子研 井 口 洋 夫 22

Molecular Processes on Solid Surfaces 分子研 塚 田 捷

坂 田 忠 良 24

気相イオン反応研究会《機器を用いた反応研究》 東大工 田 村 孝 章 26

分子イオンの生成、反応と高分解能分光	分子研 広 田 栄 治	30
溶液反応の熱力学と反応機構	名大理 田 中 元 治	33
遷移状態構造への理論と実験からのアプローチ	阪大産研 安 藤 喬 志	35
外国人研究員紹介		
C. Bradley Moore 教授について	分子研 吉 原 經太郎	39
David Fox 教授について	分子研 井 口 洋 夫	40
J. Durup 教授について	分子研 小谷野 猪之助	41
極低温センターについて	分子研 井 口 洋 夫	
	榎 敏 明	42
機器センター近況	分子研 吉 原 經太郎	44
電子計算機センター通信	分子研 柏 木 浩	46
昭和53年度共同研究（後期）及び昭和54年度共同研究（前期）一覧表		48
分子研コロキウム		61
所内ニュース		63
編集後記		64

創設4年を経過して — 分子研の近況 —

分子研 井 口 洋 夫

去る3月、足掛け3年がかりで、少しづつ組立てて来たヘリウム液化装置を、建屋の完成と同時に整備を終えました（42頁参照）。これで5研究施設の設営を完了しました。（装置開発棟、機器センター棟、化学試料棟を昭和53年3月に、電子計算機センター棟を昭和53年12月に、そしてこの極低温センター棟が昭和54年3月）。また、管理棟、図書館及び電子計算機室の3つの機能を持つ三階建の建物が、中庭をはさんで実験棟の対面に今年3月、実験棟の延長工事と共に完成しました。

かくして、当初計画の内、極端紫外連続光源（ニックネームとして分子研UVSORと呼ぼうと云って居ります）を残して、骨格が出来上りました。分子研UVSORについては、昭和55年度よりの着工を期して準備を進めて居ります。

これからは、定員の充実の時代を迎えると思います。定員充足のきびしさは、国の研究機関に属して居る者は、身を以って体験して居る所ですが、54年度を含めて、研究・技術系の現状は、研究系40名（68名の定員に対して）、技術系23名（62名）です。所長・管理局が一体となって、両三年に完成の域に持ち込むのを悲願としています。

管理局に今年度から部制が導入され（総務部と経理部）、それを構成する8課（庶務課、人事課、主計課、経理課、建築課、設備課、技術課、そして今年度から発足した国際研究協力課）で、研究所の管理関係の業務を懸命に推めています。

研究系の現状を述べます。53年度発足した2部門の教授として、木村克美教授（基礎光化学部門：北大応電研）と花崎一郎教授（電子状態動力学部門：阪大理）が就任、両部門の助教授の選考を目下慎重に進めています。

それに加えて、54年度分子動力学部門（教授1、助手1）が発足しました。さらに分子集団系につづいて理論研究系の客員部門の助手（専任）が認められ、客員部門の充足が明るい方向に進んでいます。また、待望していた研究施設系の教官（機器センター助教授並びに化学試料室助手）2名の計4名について、公募に入りました。今年度中にあと3名（電子状態動力学部門、基礎光化学部門、及び分子動力学部門）の助手について公募に入れるものと思って居ります。

人事選考については、研究所の生命線との判断のもとに、慎重を期して居ります。場合によっては、その時間の長さが応募者を不愉快にさせているのではないかと心配して居りますが、この点については是非とも理解を得たいと思って居ります。

共同研究にもふれて置きたいと思います。共同研究〔今迄に何度か報告しましたが、共同研究の中は、共同研究（狭義）、協力研究、研究会、施設利用（電子計算機を含む）より組立てられています〕の運営も、研究所の将来を左右する一つと思います。共同利用機関が抱えている共通の問題点として、研究所独自の研究推進と、共同研究機関としての機能発揮のバランスを保つ、と云うことがあります。これを解決する基本方針は、研究者が相互の立場を尊重した上で、協力並びに共同にあると思います。さらに、機器による共同研究もさることながら、頭脳による共同研究も、われわれ研究所の者として、大いに期待している所です。

いま分子科学研究所の周辺は、環境整備が急ピッチで進んで居り、その一部完成をこの秋に期待しています。

レターズ

ふるさとの町と城

東大理 朽津 耕三

1977年秋に分子科学研究会の第6期委員会がスタートし、私は委員長に選挙されてしまった。この委員会は初代の田中郁三先生に始まって井口—井早—井口—細矢と続いてきたあとなので、「これは大変なことになった」と思った。「研究会」の進み方について、色々な方の御意見を聞きながら思いまどっているうちに、もう任期2年の終わり近くなってしまった。「大過なく」といいたい所だが、会報を3回、サーキュラーを1回発行しただけなので、大過のおこしようもなかったことを恥しく思っている。昨年秋に広島大学で分子構造総合討論会が開かれたのを機会に拡大委員会を行ったところ、16名の参加者があり、極めて活発な意見の交換があった。「研究会」の存在意義（まったくないという声も少なかった）、「研究所」との関係などについて、討論の要点は千原氏、木下氏の寄稿にみごとに集約されている。そこで、私はまったく個人的な心情を書かせて頂くことにする。

私にとって、分子科学研究会は「ふるさとの町」みたいなものとつながっている。私はその学問領域に生まれ、現在会員となっておられる諸先生や諸先輩のもとで育てられた。（もっとも、当時「研究会」という組織は存在しなかった。）この町は年とともにどんどん大きくなり、住民の出入りも多くなったが、私はいまだにその町で暮らしている。この町に最近大きなお城が出来た。私たちはそれを誇りとし、それに心の支えと発展の夢を託そうとしている。・・・

私たちの集まりの特徴の一つは、学問的な絆が比較的はつきりしていることであろう。それがなぜなのかよくわからない。研究対象や方法論は様々に異なっても、問題意識やディシプリンに共通する所が多いためだろうか。

このような意味で、私は長年にわたって培われてきた「研究会」のまとまりを大切にしたいと思う。それほど大きなことは出来なくても、隔年によい名簿が作られ、役に立つ情報を盛込んだ会報が時々届くだけでもよい。（理想的な会報のイメージとしては、東大宇宙航空研の高柳和夫教授が長年続けておられる「原子衝突サーキュラー」がある。研究会・学会・国際会議などの知らせ、会員の就職・転職・移動などの動静、外国人訪問者のニュース、最近発表された論文のタイトルなども載せられていて、さっと一読するだけでも有益である。もちろん高柳先生のような編集者なしには、このような会報は長続きしないであろうが）

以前は「研究会」主催のシンポジウムが行われたことも何回かある。最近では分子研をはじめ科

研費などによる研究会や発表会、外国人訪問者を囲んだ討論会などが多いので、研究会に対する「研究会」の存在価値はほとんどなくなってしまった。しかし「研究所」の色々な活動において、「研究会」が有効に協力できる機会が将来出てくるのではないかという気がする。失礼なたとえかもしれないが、「官」と「民」の相補的な役割が想像される。「研究所」は、おそらく種々の意味で国立大学共同利用機関としての制度上の制約のもとにあるであろうし、研究会員に対する情報連絡やサービスにおいて現在以上に過重な負担を「研究所」に期待することは適当と思えない。むしろ有志の自発的な集まりである「研究会」が、進んで身軽に活動に協力することが大切であろう。

「研究会」の将来像を議論すると、老化がいつも話題となる。大学院生たちは若手の会にまともって、夏の学校を中心として活動している。今期は若手との交流をめざして、藤山常毅氏らが中心となって分子科学サーキュラーに若手夏の学校特集号を作った。この初めての試みはかなり好評だったと聞いている。編集に尽力された諸兄に感謝したい。大学院生の人たちを「研究会」に勧誘できればそれに越したことはないが、現状ではむしろ大学院を修了した若い研究者の人たちが「研究会」に入会するよう働きかけてゆきたい。また最近とくに密接な関連が出てきた隣接領域、たとえば物性物理学、分子生物学、情報科学などの連絡をどのようにつけてゆけるかが、今後「研究会」を発展させる上での鍵となることであろう。

分子科学の栄光のために

阪大理 千 原 秀 昭

分子研が活動を開始して4年目にはいった。長い間この分野の研究所の設立を待望していた多くの研究者にとって、分子研が自分たちの描いていたイメージの通りのものになったかどうかを尋ねてみたいと思うのは筆者だけではないだろう。分子研の出現は「分子科学」の分野にとってまさに画期的な突然変異であり、これによってわが国の「分子科学」研究の流れが大きなインパクトを受けることになる。既にそれを受け始めているといえよう。

研究のしかた、研究者の資質、テーマの選択、お金の使い方、そのほかいろいろの面で、従来あまり気にせずには過ぎて来た問題について、開き直って反省したり議論したりするようになった。またそうせざるを得なくしたというインパクトもある。よきにつけ悪しきにつけ、分子研が議論の対象になる。「分子研が」と書いたが、これはそこで働く研究者や運営に関与する所外の重要人物ひとりずつが実は対象になっている。常に多くの目に曝されながら仕事をする立場に置かれている

という意味ではお気の毒な気もする。しかしその多くの目が、山下次郎氏の言われる「愛情の目」である限り（本誌No.5）分子研の発展は約束されている。そのような愛情が持続するようにするためにはどうすればよいだろうか。

1. ジレンマの克服について。

共同利用機関としてある程度サービスの業務があるのは当然である。問題はそれが分子研における研究の自由をどの程度束縛するかであろう。一見相反するこの二つをどう処理するかについては創設準備の段階から議論され、いまでも論じられているが、若干の試行経験を積んだ現時点では、もう解答が出ていると考えてよいだろう。それはこの命題は二者択一を迫るからジレンマのように見えるのであって、実は融和できるものだ。所外の人との共同研究などによって、視野を広げるとは所員にとって決してマイナスではなく、むしろ積極的にしなければ、かえって閉鎖性につながり自滅してしまう。サービスの面を20%にするのがよいか30%でもよいかは個人差があるから個々に判断すべきことであるが、それを研究に対する支障と考えるのは成長を拒否する姿勢につながる。大学にいてもかなりのサービスの準研究活動をやっているのである。

2. 分子科学の定義について。

「分子科学」のスコープについて定義することは殆んど不可能である。研究者の関心は日毎に新たで、世界的な傾向も変わる。分子研は明らかに mission-oriented institute であって、大学の理学部の教室とは違う。しかし、これは分子研がどんな方向を志向してもよいということではない。漠然としたものであっても、また境界はぼやけていても、「分子科学」とはこれこれの分野であると宣言できなければならない。全国の分子科学者の支持のもとに設立され、その精神的、具体的よりどころとして分子研がある以上、支持する対象がはっきりしないのは困る。ところがここに実は未解決の大きなジレンマがあると思う。分子科学が現在の分子科学研究会の会員がカバーしている学問領域であるとする、それは非常に広大なものである。一方、分子科学を現在の分子研でカバーしている学問領域であるとする、それは驚くほど狭いものである。この小文で「」つきで分子科学という語を使ったのはこのような理由からだが、かりに前者を大分子科学、後者を小分子科学ということにしよう。大分子科学をすべて分子研でカバーするためには多分3倍以上の規模の研究所がいると思うが、それは望むべくもないし、研究所には運営上適正規模というものがある。しかしそれは設立以前からわかっていたことである。問題は小分子科学イコール分子科学という錯覚を生まないかという点である。

岡崎コンフェレンス、研究会、共同研究など、いずれも非常に好評で、そのこと自体は非常に結

構なことだが、これらは所内に世話人がいなければ実際問題として開催できず、どうしても所員の研究テーマの範囲内のものに限られる。そうすれば、ごく自然に分子研でカバーしている研究分野が活発に見え、これが分子科学だというイメージが形成され、それ以外の分野についてどうしても疎遠になり、無知になっていくおそれがある。それはさらに研究の視野を狭くすることにつながる。分子研に対応する専門家がいらない分野の研究会が原理的に開けないわけではない。しかし、そのような研究会の場所として岡崎を選ぶ積極的な理由を見出すことはむづかしい。

一つの例として筆者の専門ではないが、二成分系液体における分子間相互作用の研究という分野を考えてみる。光を研究手段の中にも含む場合はどうやら分子研での小分子科学と接点があるが、臨界点以外では光が有力な研究手段でないことが多い。また分子集団の研究者が分子研にいないこともあって（手段でなく対象で接点があればよいのだが）、この分野は明らかに「分子科学」に含まれると思うのに、分子研との相互作用を見つけることができない。

あらゆる分野を網羅したら力が分散してしまっ、ピークを作ることができないという意見もある。しかし研究活動度のピークは hardware などの札束で作るものではないし、多数決で作るものでもない。一つの優秀な頭脳と、それが活躍できる環境があればよい。広い分野を地味に育ててこそ、いろいろの可能性が生まれてくる。このことを分子研の諸氏によくお考え頂きたいと思う。

3. 分子科学研究会のことについて

分子研設立までは研究会は大きな支えとなり、設立のための原動力となった。設立された現在では、もはやその役目は終り、これからは分子研の共同研究、コンフェレンスなどを核として交流すればよいという意見もある。もし研究会を解散すれば、多分、小分子科学イコール分子科学というイメージが定着するので、この意見には賛成しかねる。むしろ分子研はこれから広い人材の支持を必要とするので、会計法の許す限り、財政的な援助をするのがよい。多くの人が、「分子研は分光学研究so所であって自分には縁がない」といって背を向けることのないよう、研究会は一層分子研をバックアップするのがよい。

この小文はやや極端な意見を代表している。しかし、こういう見方もあるということを知ってもらうことも重要であると思う。最後に一つ身勝手な希望を書かせてもらおうと、分子研の一部門として（実際は既に系の名前になっているが）、アボガドロ定数くらいの数の分子集団における分子の集団的挙動（電子でなく）を扱う部門を作って頂きたいと思う。

分子科学研究所と分子科学研究会

東大物性研 木 下 實

分子科学研究会を中心とする分子科学研究者の期待を一身に担って、分子科学研究所が元氣な産声をあげてから、早くも満4年が経過した。所長をはじめとする内部の方々の並々なぬ努力はもとより、その發育に外部から力を添える先生方の協力をもって、着々と活力を備えて来た。人員・設備等で当初の目標に達するには、なお月日を要するとのことであるが、健やかな成長を希うのは筆者ばかりではないであろう。今回は、この分子研と分子科学研究会の関係について、コメントを欲しいという編集からの依頼である。大変な難題を引受けたことになったが、あまり肩肘張らずに、日頃莫然と考えていたことの一部を整理する積りで、筆を進めていく。

分子研が誕生するにあたっての関係諸先生の長期に亘る弛まぬ努力については、今更言を俟たない。また、厚い層を成す分子科学研究者の強い支持が、大きな力となっていたことも確かである。“分子科学研究所設立の機運に伴ない”¹⁾ 分子科学研究会が改組されたのは、昭和42年であった。その時以来、研究会の最大の目標は研究所の設立に置かれた。実際には、研究集会の開催、サーキュラーの発行等研究会本来の活動も活発であったが、それも研究所設立という大きな夢の一駒であったような錯覚に陥る。従って、この大きな夢が現実となったいま、研究会がその目標を失ったかの観を呈するのにも当然と思うし、会の解散を主張する意見も心情的には理解できる。

しかし、研究会の本来の目的は、研究所の設立ではなかった筈である。研究会と名がつく以上、研究所の設立が目的である筈がない。ましてやそれで解散してしまったのでは、世の失笑を買うだけである。分子科学の發展に寄与する²⁾ という当初の目的に戻って考えるならば、分子研の設立はその一つの大きなステップであったのであり、これによってその体勢が整ったと見るべきではなかろうか。分子研も含めた新しい体勢のもとで、研究会がその真価を発揮する 때가来たと考えたい。勿論、新しい情勢を踏まえて、分子研の活動と相補的になるように、改組も含めた会の立て直しを検討することは必要と思われる。そのタイミングをはかることは難しいが、分子研設立の興奮がさめて来るに従って、会員の間にそのような声の盛り上がりが出て来るものと考えている。

確かに、この4年間は研究会の表面上の活動は低調であったと思う。この点、委員の1人として申訳ない。しかし、この間研究会の会員は、研究会を意識するしないは別として、夫々の立場から分子研の發育ぶりを見守ってこられたであろう。これも研究会の一つの活動ではないかと思う。研究会の事業を規定する研究会規定第2条の(4)に、²⁾ “…研究所の設立および運営に関して助言と勧告を行なうこと”と記されている。設立と運営が同等の重みであることに注意すべきであろう。設

立が大きな夢であったと同様に、運営も研究会としては地味ではあるが大きな責任であるといえよう。

分子科学研究所では、その“運営に関する委員会”の所外委員の約半数に相当する7名を、分子科学研究会に推薦依頼している。これは、分子研にとっても研究会にとっても、重要な接点となっている。分子研は動き出したとはいえ、多くの苦悩を抱えていると思う。人手不足という肉体的な苦しみばかりでなく、研究所の性格を決めるような研究上の苦悩は測り知れないものがあると察する。勿論、研究所は主体性をもってこの苦悩を克服して行かねばならず、それが研究所の雰囲気を決めるのであるが、その苦悩を分かち合い、温かく支援する層が厚いことが励みになると思うのである。研究会が消滅しても研究所は独りで歩いて往ける。しかし、その場合にはその行く手に暗雲が立阻めることは避けられないであろう。

分子科学研究所と分子科学研究会の関係が議論されるとき、しばしば話題にのぼるのが、物性研究所と物性小委員会（物小委）の関係である。この点に関しては、詳しいことを書ける立場にないので差控えたいが、最近の事例を記して一つの参考にする。物小委というのは、日本学術会議の物理学研究連絡委員会の小委員会であるが、同時に全国の物性研究者を代表して種々の活動をする組織でもある。物性研では、共同利用研究所として、全国の物性研究者の意見を取り入れる窓口として重要視し、研究所の重要な問題に関して物小委と連絡をとりながら施策を進めることにしている。創設以来20年を経た物性研は、種々の点で転換期を迎えたので、数年前から対策を検討して来たが、その当初から経過を物小委に逐次報告して、検討して頂いた。得られた成案の大綱は物小委、従って全国の物性研究者からの支持を得、その温かい支援のもとで関係者の努力が実り、今年度（一部は昨年）からその計画がスタートした。

分子研と研究会の関係については、まだ書き足りない面もあるが、この程度にして、研究会自身のことについて1～2付け加えさせて頂く、この紙面を借りるのは不適當かも知れないが、研究会の存続とも関係があり、また分子研レターズの記事とも関係あることなので、お許し願いたい。

昨年の分子研レターズに、研究会会員の年齢別分布が載っていた。³⁾ それによると、35才以下の会員が非常に少ない。この点が、後継者との関係で研究会の存続と関連している。実は、この若い層の激減は、10～12年前の大学紛争と深い関係を持っている。丁度研究会が改組された翌年に大学紛争が吹き荒れた。その結果、研究会の宣伝不足と学生の既成組織に対する不信が相乗的に働いたと見ることができる。昭和43年という、大学の学部が戦後生まれで占められた最初の年である。この世代は、戦後の混乱期を知らない。物心がついた時には、混乱期を脱して物質的な豊かさへ向かい、いつの間にか世はモーレツ時代に突入していた。自分達にとって科学とは何か、豊かさとは何か、人間性は一体どこへ行ったのかと疑問をもち、真理の探求を行なっている筈の科学者に

解答を迫った。一方、昭和前期の苦難の時期を体験した世代は、物質的には恵まれなかったが、それだけに人間性の大切さはよく承知していた。それを前提として物質的な豊かさを目指して進んでいたのに、いつの間にかその前提を忘れたかのようにモーレツ時代に突入した。互いに自分達の青春時代に欠けていたものを求めていた訳で、遂に噛み合うことなくどちらからともなく妥協して今日に至っている。その縮図が研究会にも影響していると思う。

研究会の目的は、研究上の情報を通しての研究の促進、発展にある。しかし、その前提として、研究者相互の親睦を通しての理解・協力・激励が必要である。戦前派にとっては、この前提は自明であり、研究会規定にうたう必要を感じていない。研究会に入るとどんなメリットがありますかと聞き直つて聞かれると、答に窮する。人間関係で得るところが大きいなどと答えるのは、戦前派にとっては面映ゆい。下手をすると、かつての日本的な甘えの構造の上に成立する派閥を意味すると誤解される可能性もある。また、もし物質的な面に毒されていると、会報やサーキュラーで得られる情報は、会費の割には少ないなどと考えてしまう。ところで、広島分子構造総合討論会の際、研究会の会費集めを行なったが、皆さん気楽に応じて下さった。大したメリットもない会の会費なら、そんなに気楽に払う筈がない。研究者は研究上の苦悩を分かち合い、理解し合える仲間を互いに求めている。

(1979年4月29日)

1) 分子科学研究会改組の通知 (1967年6月30日付)

2) 分子科学研究会規定

第1条 本会は分子科学に興味を持つ研究者相互の連絡および研究促進をはかることを目的とする。

第2条(4) 分子科学研究所に関する分子科学の研究者の総意をまとめ、分子科学研究所の設立および運営に関して助言と勧告を行なうこと。

3) 大野公一“分子科学の現状と将来について”，分子研レターズ，No.4 (1978)。

分子研でのある一日

お茶大 理 細 矢 治 夫

東京から2時間10分で豊橋に着く。ウィークデーの昼頃に着くこだまなら座れないことはまずない。会議までに少し時間の余裕があるので、駅ビルの地下の食料品売場をのぞく。さしわたし10cm

ほどの大あきりがあったり、おがくずの中でとれたてのしゃこがもそもぞ動いている。いなだの刺身だの、東京ではあまりお目にかかれない魚介類がここではあたり前のようにいろいろ店頭に並んでいるのが楽しい。今晚のおかずにできないのがうらめしい。それより昼飯をどうしよう。駅前に出れば、菜めしや味噌田楽の店が何軒もある。表向きはいかにもさえないうどん屋でも、出て来るうどんとおつゆの味はどの店も一様に旨い。そう考えている中に、東岡崎の駅前のうどん屋を思い出したので、急いで名鉄のホームへ戻ることにする。

名鉄の豊橋から東岡崎まで、鈍行に乗るとひどい目に合う。それを避ければ座席指定の特急でも、急行でも高速でも20分位で着く。真赤な流線型の名鉄御自慢の電車が、かって鉄道友の会のローレル賞に輝いたことは知る人ぞ知る。先頭と最後尾は展望車になっているので、子供連れでなくても自然に一番前の車輛の前方の席に足が向く。しかも東岡崎で降りたときに直ぐ目の前に階段があって便利だ。進行方向右側の隣りホームから国鉄飯田線が出ている。隣りの伊那駅への途中までは、名鉄・国鉄仲良く同じレールの上を走っている珍しい区間だ。飯田線で使っている電車の車輛は、東西の一流国電（四つドアのカマボコなどはお呼びでない）の姥捨て山になっていることも余り知られていない。昭和10年から20年頃まで一世を風びした横須賀線の一族や京阪神間を突っ走った流線型・半流線型の国電車輛が、ブルーとクリーム色のツートンカラーで健在である。中での圧巻は新幹線のグリーン車並みにゆったりした広窓の旧二等車サロ46がそのままの座席配置で現二等車サハ46として使われていることだ。

そんな昔の電車キチが胸をドキドキさせている中に名鉄特急は発車する。車内のデジタル速度計の数字が心地良く100を越える。電車は東名、旧東海道と平行しつつ岡崎に向かう。東岡崎に着くときには、国鉄の東海道在来線ははるかに海側の街外れに追いやられている。明治の昔、岡蒸気は家康の生誕地から門前払いを食われたのである。そういう土地柄か、改札口を出るときに駅員から「有難うございました」といわれて一瞬戸惑う。

駅前の目指すうどん屋で五右衛門釜揚げうどんを楽しむ。分子研の人達もちらほら辛棒強く遅いサービスを待っている。少しばかり幸せな気持ちになってから研究所までの坂道を登る。この10分位のだから坂は、運動不足気味の若い人達には丁度よいが、御年寄りには御同情申し上げる。道端の赤いペンキの「国立研究所」という矢印が何だか気になる。この間まで「分子科学研究所」と書いてあったのだ。

門を入った左側に守衛所があるが昼間は人影がない。ここは、一旦暗くなると帰るときにも「失礼ですが、御名前は」と聞かれるようである。ムツとしないように自分に言いきかせる。ほこり道を少し上ると赤レンガ色の一群の建物が目にとびこんで来る。相変らずの土木工事も次々と場所を変えて進んでいる。仮りの玄関口に車が何台か止まっている。「官公車専用」の字がしらじらしい。

ロンドンのヒースロー空港で見た「VIP ONLY」の字を思い出す。

定められた名前入りの鞆箱からスリッパをとり出す。研究会に来たと思われるお客さんが、スリッパがなくてうろうろしているが助けてあげられない。ちょっとしらける。でっかい運搬用と小さい人間用のエレベーターを横目に見ながらひたひたと階段を上がる。2階まで行ったら渡り廊下を通して隣りの研究棟へ行く。入ったところは実験棟だ。研究棟の2階の入り口に会議室がある。もう事務局の人が2・3名待ち構えている。少し時間があるので客員教授室へ寄る。

同じ部門の客員教授と助教授に一つの室があてがわれている。自分のいる大学ではついぞ御目にかかれないような、ふかふかの背の高い椅子にふんぞり返って一息つく。同室の教授がまだ来いていないのを幸い、そちらの椅子にも座ってみる。少し感じが違うのでよく見ると、こちらの方が僅かに大きくゆったりできている。机や戸棚、何と屑かごまで少しずつ生地や色で差がつけてあるので、苦笑を通り越して感心してしまう。同僚の客員教授にはもっと働いて貰おうかな。

机の上の郵便物や書類に一通り目を通してから会議室へ行く。途中で何人もの顔見知りに出て挨拶する。西洋人のおばさんは長期滞在の外人研究員の奥さんだ。学生とおぼしきむくつけき一族は見当らない。たまに受託で来ている大学院生は、研究所のピカピカムードにそまって心なしか何となくつつやして見える。

所長の一声で教授会議が始まる。大学の最高議決機関の教授会とは一線を画して、所長の補佐機関という存在に過ぎない。そういうわけで「議」の字が一つ余計についている。大学と大学校のようなものだ。かなり細長い長円形のテーブルの一方の隅に座った所長から丸見えなので、居眠りも内職もできない。所長と反対の側には別の席が設けてあって事務局の人が最低5人は同席しているので、あまり品のよくない冗談話や大喧嘩はでき難くなっている。それはともかく、会議の構成メンバーは他のどんな会議や委員会にも見られない位に平均年齢が低いので活発な意見の交換が期待される。

ところがどういうわけか所内の若いメンバーからの発言が聞こえて来ない。所長がたまりかねて、客員の何々さんどうですかと御指名をされる。長年のおつきあいなので遠慮のない意見をいうと、かえって有難がられてしまうので、つい勢いがそがれてしまう。客員には初耳のことでも、多くのことは各系から選ばれた主幹の会議ではかられたり、内部の種々の委員会活動で処理されることが多いので、教授会議では口角泡をとばす必要がなくなっているのかも知れない。しかし専門も年令も比較的近い人の集りであるから、もう少しぎっくばらんな意見の交換があってもよいように思える。

本来客員は最低週に一回位の割合で来所して研究所の研究活動に貢献すべきもので、そのための旅費研究費は計上されている。この制度をフルに活用している客員も数多くおり、分子研の研究活動を高めている。元来研究とは、騎馬民族にも農耕民族にも共通の普遍的非生産活動であるのだから

ら、分子研の畑を耕さざる研究は、分子研の研究にあらず、という思想（制度？）に大きな反発を覚える。あなたは分子研の一員です、だからこれだけの研究費を渡しますから、これを自由に使って分子研の名に恥じないような立派な研究をして下さい、という研究者の自尊心と競争心をくすぐるようなやり方をしたら、もっともっと成果が挙がるのではないだろうか。

そんなことを考えている中に会議が終わってしまう。夕食までまだ時間があるので所内をあちこちまわることにする。この頃は高価な実験装置も見飽きているので、分子研の中核部である新装のセンター施設棟に足を運ぶ。1階にある、無人運転が自慢の計算機室を見る。顔見知りの研究者が何人か真剣な顔をして計算機と格闘している。みんな遠い所から手弁当で泊りがけで来ているから殺気立っている。夕食をゆっくり一緒に、と誘いたいところだが我慢する。みんな夜中まで頑張りそのような顔をしている。計算機室の反対側には図書室がある。まだI D カードをもらっていないので図書室の係員に声をかけて中を案内してもらう。I D カードがあれば真夜中でも無人の図書室に出入りできるという。その代り備えつけのミニコンに入室者のすべての記録が残るという。ため息をつきながらも、これからはまだまだいろいろ世の中は変るぞ、と自分にいい聞かせる。

3階の「所長室団地」のあたりをそっとうかがってみる。分子研、基礎生物学研、生理研の3所長室と生物科学総合研究機構長室の4つが田の字型に配置されているのは何とも奇妙だ。将来の岡崎の名所の一つになるであろう。早々にここを抜け出て今晚の宿所「山手ロッジ」へ行くことにする。何年もうちすてられていた愛知教育大の女子寮跡の廃塹がこうもあざやかに変身したのは夢みたいだ。管理人のおやじさんの愛想のよさもここの自慢の一つだ。だが、夜中の御帰館が自由でも、朝食に起きて来ない低血圧症は個室のスピーカーでいやおうなくたたき起こされることになっている。そうでなくてもここの朝食を食わずに研究所までの道をとぼとぼ歩いていく手はない。一週間同じものが続けば少しはこたえるが、なかなかのおすすめ品である。明日の朝のことはこれでもうきまりだから、とりあえず今晚の食事を考えることにしよう。今日は同僚の客員教授のアジトのあの店で生きのよい魚をおかずに一杯やることにしよう。豊橋の駅ビルの地下の魚屋を思い出し、のどがごくんとなる。

注記：これは何日かの経験をダブらせて一日のできごとにまとめたものなので、部分的につじつまの合わないところや、すでにあらたまってしまったこともあるので御了解願いたい。

Remarks in Parting

NBS Jon T. Hougen

Each visiting scientist at IMS forms a large number of professional and personal impressions during his stay, and it is reasonable, while the institute is still new, to ask each of them before leaving to write down some of these impressions in the form of an IMS letter.

Professionally, I am very pleased with my eight-month visit in the molecular spectroscopy group of Professor E. Hirota. This laboratory is one of only a few in the world having excellent high-resolution equipment in the microwave, infrared, and visible regions of the spectrum. It is always exciting for a molecular spectroscopist to work in such a laboratory, since rotational, vibrational, and electronic spectra of various molecules are all simultaneously under investigation. In addition to the truly superb equipment presently available at IMS, the spectroscopic staff is both imaginative and hard-working, with a productive combination of experience (age) and energy (youth). Indeed, I found as I wrote to my colleagues in the United States every month or so, that two or three exciting new developments from IMS had to be mentioned in each letter. In short, as I expected before coming, my interactions with the group here were professionally invigorating.

During most of my stay I have felt somewhat envious of the overall scientific climate at IMS. A number of comparisons can be made between IMS and similar institutions in other countries, all of which would place IMS near the top of any list of desirable research institutes. It would perhaps be imprudent for me to pursue such comparisons in detail, but the situation is symbolized by the fact that at IMS the main laboratory building is 5 stories high, and the planned administration building is 3 stories high, while at my own institution, for example, the administration building is 11 stories high, and the laboratory buildings are 3 stories high. From this point of view, it is important to note that such seemingly harmless activities as publishing the IMS Letters and the Annual Review, as well as other essentially *internal* forms of communication, must be carefully controlled. As the internal meetings and publications, together with their associated committees, committee chairmen, etc. increase in scope, prestige, and number, they will divert an ever increasing amount of irreplaceable research time and research money from the effort necessary to produce genuine scientific contributions, carefully written up for publication in internationally read journals.

On a non-professional level, every foreigner forms some impressions of Japan, or at least of Okazaki, Japan. I came here with the firm convictions (admittedly based on limited

samples) that I would: (1) find the food delicious, (2) find the language an interesting object for study, and (3) find there was no such thing as "the inscrutable oriental personality." In my opinion, all of these prejudgements were confirmed. In addition, however, I added a few impressions I had not anticipated. (4) I take my shoes off a lot in Japan. (5) I do not fit into wearing apparel very well in this country. (6) We should import Kara Oke into the United States.

Based upon my experiences here, I will unhesitatingly advise anyone in the US with the slightest interest in visiting IMS, that he should by all means make every effort to do so, and that he should try to stay for as long a period as he can manage.

One Hundred Days

State Univ. of New York H. F. King

I flew to Narita on Christmas day 1978 and returned to the United States shortly after Okazaki Ieyasu Matsuri. Those one hundred days are unparalleled for the wealth of new sights, sounds, tastes, friendships and ideas that I encountered. It was an exhilarating time to visit the Institute. Daily progress in the construction of buildings, the enthusiasm of the young scientific staff, and the constant flow of visitors all contributed to the intensity and vitality that characterized life at IMS.

There were many components to my first visit to Japan, but I went with a central, well defined goal in mind. During the preceding few years Keiji Morokuma and co-workers had made remarkable progress in the theory of chemical reactivity using quantum chemical methods involving the gradient of the potential energy surface. Meanwhile my own small research group had developed new computational methods for integral evaluation and use of symmetry for efficient gradient computation. The main purpose of the visit was to combine our ideas and computer codes. Actually, that cooperation had been in effect for some time, but only as a weak, long-range interaction. The first order of business upon arriving was to become familiar with the new HITAC M-180. That turned out to be a pretty confusing educational endeavor for one whose previous computer experience had been mainly with CDC machines and who couldn't read the IMS computer User's Guide, available only in Japanese. All of Keiji's group showed great patience, but it was Shigeki Kato who shouldered the main burden of helping this gaijin visitor.

I set aside the computer manuals on O-shogatsu to travel to Kyoto for hatsu-mode at Yasaka. Future visitors who can take advantage of a similar opportunity are heartily advised

to do so, for I recall that it marked the beginning of a statistically unlikely streak of good luck. To those who would dismiss that as coincidence, I simply point out the additional benefit of seeing Kyoto girls in spectacular kimono.

On January 4, long tables in the Research Office Building were set with white cloth, wine, fruit, and dried fish, and several secretaries wore kimono for the occasion. After appropriate toasts and bowing many in the group went outside past busy construction crews to the partially built computer center where another brief ceremony marked formal delivery of the computer. The air of good humor that prevailed on that occasion proved to be completely justified. The center opened its doors to general users the following Monday and performed with Shinkansen-like efficiency from that day on. By January 15 the IMS version of our HONDO program using symmetry and gradients was "running production", computing structures of some aluminum-nitrogen compounds and the business of exchanging programs began.

I think there is a universal effect which applies to scientists in all countries and applicable equally to university, industrial and governmental research laboratories. When one takes an extended leave of absence from his institution he avoids, or at least postpones, committee work and countless other daily distractions. This combined with the stimulation of new people and refreshing scenery tends to create an invigorating and receptive mood. For me these were busy days and nights, yet I always felt there was time to listen to the new ideas around me, and it was a pleasure to meet in the hall those who one has previously encountered in the pages of the Journal of Chemical Physics, the famous such as Professor Fukui and young contenders such as Dr. Nakatsuji. I learned much from others in computational chemistry such as Professor Ohno and his associates from Hokkaido, but the visitor whose ideas had the greatest immediate impact was Professor Herzberg who discussed the recent observation of emission lines which he attributed to the Rydberg spectrum of triatomic hydrogen. This was interesting in being the first report of a discrete spectrum of a polyatomic molecule unstable in its ground state. As Keiji and I sat in the audience listening to Professor Herzberg enumerate the need for theoretical guidance, we immediately decided that I should work on the theory of excited H_3 . The first theoretical model that was tried, a simple frozen-core approximation, proved to be in remarkably close agreement with the known experimental facts. Obviously, we would eventually want even more reliable calculations, but the simple theory could be worked out to completion in a few weeks. That pleased me for this then constituted my Okazaki project, something that was conceived and completed entirely during my visit. Rydberg states have the property that electronic levels may be more closely spaced than vibrational or even rotational levels, so Jahn-Teller and Coriolis coupling can become important. Not having much experience with these things

it was reassuring to have Professor Hirota's group of spectroscopists only a few doors down the hall. In particular, Jon Hougen, Hirota's gaijin, was extremely helpful.

I enjoyed the association with bright, hard working young postdoctoral associates such as Iwao Ohmine and Kazuo Kitaura, and shared their pleasure as they developed even more powerful computational methods. The days passed all too quickly. I recall that I was to leave Okazaki early Monday morning, but that on the previous Saturday morning I had not yet computed some electronic Coriolis coupling constants for degenerate Rydberg states of H_3 . There was a bug in one of my subroutines. The computer would close down later that day to permit installation of a new operating system. Late in the afternoon the coding error was located and the Coriolis constants came rolling out of the high speed printer just five minutes before closing time. The "Yasaka effect" was still working!

My stay was thoroughly enjoyable and remarkably productive. Reflecting on this personal experience and on the lack of similar opportunities here at Buffalo and elsewhere leads me to urge responsible authorities to continue to vigorously support an active visitor program for both foreign and Japanese scientists at IMS. There are several advantages. With careful timing you can bring a person to the Institute at a time when he is unusually creative as in developing a new idea or in bringing together the results of past experience. For example, a lecture series by one writing a book or review can be instructive for all involved, if the subject bears on the interests of workers at the Institute. It would be only human if scientists at other Japanese laboratories were envious of the excellent facilities at IMS, but it would raise their spirits if they felt that these facilities were available to them too when a particular need arises. It is natural that the permanent staff will argue that have need of the space and other resources needed by visitors. Since the visitors do not have equal voice in pleading their case, it is all too easy to allocate these resources to other purposes. Ground once lost is never regained. The Institute of Molecular Science now has an active visitor program. I hope they exercise the constant vigilance necessary to retain it.

岡崎コンフェレンス

原子・分子・固体表面間の相互作用

分子研 諸 熊 奎 治

この数年, ab initio 分子軌道法や $X\alpha$ 分子の軌道法の発達と電子計算機による大型計算を基礎として, 原子や分子間の相互作用のみならず, 原子・分子と固体表面間の相互作用について突っ込んだ電子論的議論が行なわれるようになった。ab initio 分子軌道法では, 約10年の多原子分子の計算の経験の蓄積やプログラムの高速化という地道な努力に加え, エネルギーのみでなくエネルギーの核座標に関する勾配まで同時に計算するエネルギー勾配法や価電子のみをab initio に取扱う有効ポテンシャル法などの発達があり, その信頼性がいちじるしく増大した。また, より簡便な $X\alpha$ 分子軌道法についても, 初期のSW法に加え, 種々改良を重ねた方法が実用化して, 特に, ab initio 法の適用には大きすぎる, 原子や分子のクラスターの計算に有用性を発揮し, 結晶や結晶表面と原子・分子の計算に応用されはじめた。わが国でも, この方面の理論的研究は地道に続けられて来たが, 本年1月からの分子研電子計算機センターの大型計算機システムの運転開始に伴い, 飛躍的な発展がなされるものと期待される。第8回岡崎コンフェレンスは, このような原子・分子・固体表面間相互作用の理論的・実験的研究の現状を紹介し, 将来の研究への展望を得るために企画された。会の重点は理論的研究におかれたが, 国内の実験研究者にも積極的に参加していただいた。会期は昭和54年2月19日—21日, 参加者は54名であった。外国人招待者はDr. Richard P. Messmer (General Electric 研究所), Prof. William A. Goddard, III (California Institute of Technology) およびDr. John C. Tully (Bell 研究所) の3氏で, いずれも30—40代の, この分野の第一線で現在活躍中の精鋭である。その他, 昭和53年度分子研招へい外国人研究員のProf. Harry F. King (State Univ. of New York, Buffalo) も参加した。外国人参加者の非常にinformal な, しかし白熱した議論は, 度々会場を爆笑につつまながら, 問題の本質を明らかにした。

次に, 講演をそれぞれ簡単に紹介しよう。

○Opening Address 赤松所長 (分子研)

○Cluster Models, Molecular Orbitals and Chemisorption on Metals

R. P. Messmer (GE)

固体表面の電子状態を研究するための分子軌道理論について, 演者らが精力的に研究しているSW- $X\alpha$ クラスター法を中心として概説した。Ab initio法と比較して $X\alpha$ 法の長所・短所を議論すると共に, Al 上のO 吸着系, Cu 上のCO 吸着系について20—30個程度のクラスターで行った最近

の計算結果を報告した。

○ Theoretical Studies of Chemisorption on Metals

W. A. Goddard III (Caltech)

Ab initio分子軌道法の立場から、固体表面に対する分子の化学吸着の問題について報告を行った。特に、吸着過程を記述する上で重要な分子の解離エネルギーの再現に適したGVB（一般化Valence Bond）法の優位性を強調した。吸着過程を見る上で重要な金属の電子状態について、様々な表面状態との関連で整理した。また、有効ポテンシャルを使い、Niを価電子1個として扱う方法によりNi金属クラスターへの化学吸着を論じた。この講演の前後でMessmerとGoddardの間でX α 法とab initio法のクラスター計算においての優劣について大議論があった。計算時間ではX α 法の方が数分の一ですみ有利であるが、X α 法では一電子エネルギー（イオン化ポテンシャル）は求められても、系の全エネルギーの計算は困難で、結合エネルギーなどの議論は出来ない。

○ Self-consistent Calculations of Surface Electronic States

中村 孝（北大触研）

固体物理又は量子化学の手法を応用して固体表面の電子状態を求める様々の方法を分類し、その相互関係を議論すると共に、演者による新しい薄膜計算法の試みを紹介した。

○ Surface Electronic Structure of Metal Oxides and Chemisorption on Them

里子 允敏（分子研）

DV(discrete variation)-X α クラスター法による一連の3d-遷移金属酸化物のバルクおよび電子状態の計算結果を紹介し表面単位の形成、表面におけるイオン電荷、交換エネルギーの変化について物理的考察を加えた。

○ Study of Chemisorption by the Molecular Orbital Theory 小林 久芳（京大工）

大きい単位胞を用いることによって、PtやNiの結晶表面のステップやそでの吸着の電子状態をEHT（拡張ヒュッケル法）によって計算し、触媒活性との関係を議論した。

○ Dynamics of Gas-Surface Interactions J. C. Tully (Bell Lab)

固体表面における稀ガスイオンの中和散乱断面積が入射エネルギーに対して振動する現象の理論を紹介した。また、原子一個体クラスター間の相互作用を一般化ランジュバン方程式で記述し、それを直接数値積分して、入射粒子の固体表面上のトラジェクトリーを得る方法を報告した。このトラジェクトリーを、計算機を使ってカラーディスプレイに表わして撮影した16mm映画を示した。吸着分子がどのように振動し、また表面上を走り回るのが文字通り“目に見える”思いであった。固体表面での原子・分子の散乱の動力学の理論研究は、わが国ではまだほとんどなされていない。これを機会に、活発な研究が始められることを期待したい。

○ Theory of Surface Rumpling in Ionic Crystals 沢田 信一（京大理）

アルカリハライドの表面層のrumplingがどのように起るかについて、格子振動とイオンの長距離力の効果を含めたself-consistent理論を展開し、特にその温度依存性を議論した。

以上で結晶表面における相互作用の問題をはなれ、原子・分子間での相互作用の問題に議論を移した。先ず遷移金属と配位子の相互作用が論じられた。

○ Resonance Raman Spectra of the Intermediate-Spin Ferrous and Ferric Porphyrins and the Iron-Ligand Interactions 北川 禎三（阪大蛋白研）

共鳴ラマンスペクトルによる各種金属ポルフィリンの測定データから、金属まわりの電子構造の分類、特に配位子効果によるラマンスペクトルの変化と電子構造の関係について論じた。

○ Ab initio MO Calculations for the Metal-Ligand Interaction of Metalloporphyrins

柏木 浩（分子研）

分子軌道計算のプログラムJAMOLの新バージョンJAMOL3による分子研計算機を用いたFeポルフィンの計算結果を示し、プログラムの改良点、金属ポルフィンの電子構造について報告した。

○ Ligand-Ligand Interactions in Transition Metal Complexes

北浦 和夫（分子研）

Ab initio SCF法を用い、錯体中の配位子間相互作用を、配位子間の直接相互作用と金属を通じた間接相互作用に分け、各相互作用の特徴を比較検討した。

○ Efficient Ab Initio Calculations with Symmetry and Gradient

H. F. King（分子研）

本講と次講は主として電子状態の方法に関するものである。巨大分子の計算を行なう場合、その系の持つ対称性を有効に利用することが重要である。Dacre-ElderによるG4, P4-群の点群操作により、計算すべき二電子積分の数を最小限にする方法を示し、これをエネルギー勾配の計算にもはじめて適用した。この方法は、一般に行なわれている二電子積分の対称変換を含まないため非常に速く、たとえばベンゼン(D_{6h})では対称性を考慮しない場合の1/10の計算時間ですむことを示した。

○ Electron Charge Analysis in the Ab Initio Calculation and a Molecular Model

岩田 末広（理研）

X線等による電荷分布の実験を説明するために、従来行なわれて来たMullikenのpopulation analysisによらず、原子のまわりのある空間内での電荷分布の積分をとる計算方法を開発し、実際の系に応用した。

○ Rotationally Induced Transitions in Atomic Scattering 中村 宏樹（東大工）

○Quenching of Electronic-to-Vibrational Energy Transfer of Excited Hg Atoms

土屋 莊次 (東大教養)

Hg(³P) といくつかの分子の衝突に伴うエネルギー移動の性質を衝突分子の振動分子を測定することにより実験的検討を加えた。又、ハロゲン化オレフィンの脱離反応の主成物の振動・回転エネルギーを測定し、反応機構の解釈を試みた。土屋氏の実験の話の後、化学反応のポテンシャル面の理論的議論に話題が移された。

○Energy Partitioning and Potential Energy Characteristics in Chemical Reactions

加藤 重樹 (分子研)

反応生成物のエネルギーを説明するモデルを、IRC (intrinsic reaction coordinate) の曲率の変化を基本として提出し、それをC₂H₅F→C₂H₄+HFの反応に応用し、ab initio 計算の結果に基づいて、実測されたエネルギー分布を説明した。

○Theoretical Studies of Reaction Mechanisms W. A. Goddard III (Caltech)

オレフィンに対するO₂の反応と、Dioxetane の熱分解の機構について、彼自身の開発によるGVB法を用いたポテンシャル面のab initio 計算の結果を報告した。前者については、実験的に示唆されているいくつかの反応中間体について現時点で最も信頼しうる計算を行ない、旧来の理論的・実験的モデルの誤りを指摘し、新しい説を提出した。又、後者について一重項状態から三重項状態への遷移について6 VBの立場から説明を行なった。

○Mechanisms of Photooxygenation Reactions of Enamines 山口 兆 (阪大基工)

多原子分子のBiradical 的電子状態を記述する簡便な方法であるUHF (unrestricted Hartree-Fock) 法について説明を行なった。次で、オレフィンへのO₂付加反応における置換基効果に適用し、biradical, zwitter ion 状態の概念を用いた解釈を行ない、エナミンの反応でのzwitter ion 中間体の可能性を示唆した。

○Dynamical Aspects of Photoisomerization of Polyenes 大峰 巖 (分子研)

ポリエンの光異性化にかかわる基底状態と励起状態のポテンシャル面の構造、状態間の無輻射遷移の機構を調べ、またこの反応の動的な面を知るためにトラジェクトリ計算を行ない、動的二重回転の可能性を示唆した。

○Global Potential Surface of HCO 田中 皓 (北大理)

HCO分子の励起状態のポテンシャル面に関するab initio 計算の結果について報告を行なった。特に、いくつかのポテンシャル面の交叉について電子状態の対称性に基づく理論的解釈を行った。

会議を通じて、外国人がリードをとる場合が多かったが、討論が活発であった。この会議を一つの契機として、この分野での研究が一層発展することを願ってやまない。



第8回 岡崎コンフェレンス出席者

研究会報告

新しい物性測定と化学的に興味ある化合物 ——多原子価化合物の構造と物性——

分子研 井 口 洋 夫

物質に対する興味は、その多様性と意外性にある。新物質の発見のみならず、古くから知られている物質の中にも、今迄知られなかった特性や、或はまた純度の向上、結晶水の含有等によって、予想外の性質が具現する。われわれは、その具体例に遭遇しつつある。

これらの発掘を目的とし、“物質探索”と銘打って、今迄3つの研究所 — 東京大学物性研究所、無機材質研究所そして分子科学研究所 — がそれぞれ幹事役となり研究会を開催して来た。

第一回目： 昭和52年5月13日～14日 “物質探索” 東京大学物性研究所

第二回目： 昭和52年7月15日～16日 “物質探索研究会” 分子科学研究所

第三回目： 昭和52年10月28日～29日 “物質探索” 無機材質研究所

そして、昭和53年に入り、対象とする物質を絞って、

第四回目： 昭和53年6月16日～17日 “混合原子価をもつ物質の諸形態と新しい物性の探索” を開催した。

今回（昭和54年3月2～3日）分子研で行った研究会は：

“新しい物性測定と化学的に興味ある化合物 — 多原子価化合物の構造の物性 — ”

もその流れをくむもので、“物質探索”研究会の第五回目に対応する。

この研究会開催の趣旨は、「物性測定は、次第にその極限にむけて歩を進めている。また新しい手法も拡大しつつある。一方、物質側にたって眺めてみると、多数の化合物の中から新しい物性を持った物質がみつけれつつある。この時点に於て、マテリアルサイエンスを構成する車の両輪——測定と物質——を取って分離して：

1) 物性測定の分野からは、超強磁場、中性子線回折、SOR 物性、超高压などの手法の現状と将来。

2) 物質の分野からは、多原子価化合物などについて化学者がみて面白い物質の話題を提供する」ことにある。

その内容は次の通りである。

3月2日 午後

○三浦 登 （東大 物性研）

超強磁場と物性： 強磁場発生の手法とその限界にふれ、現在物性研で稼動しているものは2.8MGのパルス磁場、その物性測定への利用の将来に期待。

○木田茂夫 （九大、理）

Pt(II)Pt(IV) 混合原子価錯体の構造と電子状態： Pt(II)とPt(IV) が混合して表面上はPt(III)として行動する。その独自の構造と、期待される新しい物性。

○青木亮三（九大 理）

$[\text{Pt}^{\text{II}}(\text{tn})_2][\text{Pt}^{\text{IV}}\text{X}_2(\text{tn})_2](\text{ClO}_4)_4$ の電気伝導度特性：1次元配列の化合物

$[\text{Pt}^{\text{II}}(\text{tn})_2][\text{Pt}^{\text{IV}}\text{X}_2(\text{tn})_2](\text{ClO}_4)_4$ $\Delta E=0.31\text{eV}$ $\rho=1.4\times 10^5\Omega\text{cm}$

$[\text{Pt}^{\text{II}}(\text{en})_2][\text{Pt}^{\text{IV}}\text{X}_2(\text{en})_2](\text{ClO}_4)_4$ $\Delta E=0.41\text{eV}$ $\rho=7.1\times 10^7\Omega\text{cm}$

○箕村 茂 （東大 物性研）

超高压下の物性測定：いまや超高压と極低温を組合せる時期、現在装置に利用する材料面の制約から物性測定に連続的に利用出来る圧力は50万気圧

○斉藤一夫 （東北大 理）

オキソバナジウムの新しい混合原子価錯体： V^{IV} と V^{V} の錯体がつくり出す混合原子価化合物の構造と反応性、光学活性と共に。

○山寺秀雄 （名大 理）

$\text{Cs}_4(\text{Sb}^{\text{III}}\text{Cl}_6)(\text{Sb}^{\text{V}}\text{Cl}_6)$ ： Cs_2SbCl_6 は Sb はIV、しかし実は $\text{Cs}_4(\text{Sb}^{\text{III}}\text{Cl}_6)(\text{Sb}^{\text{V}}\text{Cl}_6)$

そこに新しい物性が生れる。

3月3日午前9時より

○尾中 証 （名工大）

金属—金属結合をもつ錯体：正確には金属原子—金属原子結合を持つ錯体 $\text{Fe}_2(\text{CO})_9$ (1939： $\text{Fe}-\text{Fe}:2.46\text{\AA}$) に始まる。物性研究には面白い対象。例： $\text{Cs}_2(\text{Re}_2\text{Cl}_8)\text{H}_2\text{O}$ 中で $\text{Re}\equiv\text{Re}$ は $2.237\text{\AA}$

○岩本振武・錦織伸一 （東大 教養）

双頭架橋配位子(ambient ligand) による3次元錯体：たとえばピロール包接体結晶はすきまの多い構造、例 $\text{Cd}(\text{en})\text{Cd}(\text{CN})_4\cdot 2\text{C}_6\text{H}_6$ 。

○平川金四郎 （東大 物性研）

中性子散乱で何がわかるか——古来の使用法にとらわれない話——：空間的、時間的相関同時把握、測定方法も多様化：小角散乱、背面反射、3軸法回折、TOF偏極中性子による散乱など。そして対象も生体高分子など、複雑化しつつ、発展の道を歩む。

○伊藤 翼 （分子研）

環状多座配位錯体の異性：多環の有無によって安定性に大きな違いがある。Stiff Elastic

Band (1978) の面白さ。

○富永 健 (東大 理)

混合原子価化合物のMössbauer 効果： α -Sb₂O₄ (Sb^{III};Sb^V), Fe^{II}Fe^{III}(CH₃COO)₆·0.5 H₂O など新しい発展へ。

○神前 熙 (東大 物性研)

SOR物性：より広い分野へ拡大(High resolution, Time resolved, EXAFS, Photoemission, Modulation, X-ray Scattering, X-ray Topography etc)

○山田 祥一郎 (阪大 教養)

金属錯体の「配位構造異性体」と「ひずみ異性体」：配位数，酸化状態の異常に加えて構造の異常，そこに新しい「ひずみ異性体」を考える。(1959: [NiX₄]⁻²)

○田沼 静一 (東大 物性研)

希釈冷凍機による極低温物性測定：³He→⁴He で温度降下を利用，2mK～3mKを目標。

Molecular Processes on Solid Surfaces

分子研 塚田 捷・坂田忠良

去る昭和53年11月8日・9日に，標記タイトルによる分子科学研究所研究会が開かれた。この研究会は分子研の外国人評議員であるMax Planck協会Fritz-Haber研究所長，Heinz Gerischer教授の来日を好機に行われたものである。固体表面の化学過程はきわめて広範な研究分野にわたっており，真の学際的協力が必要とされる問題が多い。ここでは表面物性の基礎と化学吸着，実用表面の構造と触媒反応，表面の化学修飾と反応性，表面による光エネルギー変換をテーマとしてとりあげ，急速に進展しつつある固体表面研究の現状を多面的にとらえ，今後の方向をさぐる事を目標とした。Gerischer教授にはFritz Haber研究所における最近の研究を紹介してもらおうと共に，固体—分子間の電子移動過程を中心として，広い視野からの概説をお願いした。普段は交流する機会の少ない違った分野の研究者間で活発な討論が行われ，それぞれが新しい問題や考え方を啓発された点がかなりあった。これはこの研究会の大きな成果であると言えるであろう。

以下，プログラムに従って内容の紹介を行う。

(1) “Theory of Surface Electronic Structure and Chemisorption on Metallic Oxides”

分子研 塚田 捷

MgO, TiO₂, SrTiO₃を例にとり，金属酸化物表面の電子構造についての，DV-X α クラスター法による最近の理論研究を報告した。特に表面酸素空格子点による局在電子状態の特徴を議論し，表面欠陥準位が吸着種との相互作用で果す役割について考察した。

(2) “The Bond-Energy Bond-Order (BEBO) Approach to the Chemisorption Mechanism”

東工大・工 宮崎 栄三

解離及び非解離吸着に対して，吸着エネルギーを決定するための経験的方法であるBEBOアプローチについて概説し，金属表面における吸着機構を議論した。

(3) “Observation of the Surface Structure by RHEED”

東北大・金研 井野 正三

表面原子構造をきわめて明瞭に観察できる事で最近注目を集めている，反射高速電子回折法(RH EED)の新技術を紹介した。Si等半導体表面第一層，或いはその上の吸着層で現れる長周期構造の種々のパターンを具体例として報告した。

(4) “Photoelectron Spectroscopy of Aromatic Solids”

分子研 佐藤 直樹

光電子の散乱距離の観点から，UPS法により検知できる有機固体表面の電子状態について考察した。また種々の基板上に成長させた同一芳香族固体の分極エネルギーに大きな差が認められる事から，有機分子の電子状態を通じて基板表面の電子構造を議論できる可能性を示唆した。

(5) “Structural Prerequisites for Catalysis” 北大・触媒研 田中 虔一

固体表面における活性点の構造が，どの様に固体触媒反応を制御するかについて，MoS₂の種々の面上のオレフィン水素化・異性化反応を例にして詳細に検討した。

(6) “Photo-Catalytic Reaction of the Chemisorbed Molecules on Semiconductor Surfaces”

分子研 坂田 忠良

n 秒パルスレーザーを使った半導体表面の吸着種の光触媒反応の動的過程に対する知見をTiO₂上での水の反応等を中心に報告した。

(7) “Formation of Surface States in GaP Electrode by Hydrogen Impregnation”

阪大・工 米山 宏

p 型GaP 表面を単分子層程度の金原子で修飾し，水素発生に対する影響を検討した。その結果，固有吸収帯よりも長波長600nm～1500nmにわたって，カソード光電流に寄与する遷移が見いだされた。この遷移に寄与する表面状態と表面に固溶した水素との関係が議論された。

(8) “Charge Injection from Excited Molecules into Solids, Mechanisms and Problems”

Fritz Haber 研 H. Gerischer

無機半導体や有機物のような絶縁体と電解質水溶液界面での光電極過程について概観すると共に、ZnO 等の半導体表面に吸着した種々の色素の励起状態からの電子移動について最近の実験結果が報告された。

(9) “ZnO Surface and Dye Sensitized Photocurrent” 阪大・基礎工 松 村 道 雄

ZnO に吸着した色素の光増感効果について、色素の吸着量と光電流や、pH との間に相関があること、吸着量の拡散反射法による決定、多孔性電極の性能が報告された。

(10) “Dynamics of Photo-Electrode Processes by the Pulsed Laser”

分子研 川 合 知 二

パルスレーザー光による過渡光電流が MoSe_2 、ポルフィリン光電極等について報告され、光電極反応とくに界面電子移動の詳細が議論された。

(11) “Electronic Interaction at Solid-Liquid Interfaces related to Photocatalytic Process

東大・工 渡 辺 正

n 型半導体の光触媒反応がとくに吸着色素を励起する場合と半導体を励起する場合について、CdS, Zn, TiO_2 表面でのローダミンBの脱エチル化を例として詳細に議論された。

(12) [パネルディスカッション]

“Present Status and Problems of Solar Energy Conversion by Means of the Solid Surfaces”

司会： 阪大・基礎工 坪 村 宏

この会の最後のしめくくりとして、出席者全員によって、最近の太陽エネルギー変換の現状と問題点が、とくに、電気化学光電池と光触媒反応による化学エネルギー蓄積の観点から議論された。電気化学太陽電池と乾式の太陽電池それぞれの特徴と比較、水の直接分解と太陽電池+電解セルの組み合わせによる水の分解の優劣が議論された。また太陽光を効率よく利用するため、ヘテロ接合電極等が将来の課題として提案され、議論された。

気相イオン反応研究会《機器を用いた反応研究》

東大・工 田 村 孝 章

イオン反応はラジカル反応と同様な物理化学の基本反応の一つであり、現在多数の分野にまたが

り興味をもたれ研究されている。今回12月8、9日の両日にわたり分子科学研究所に多くの第一線で活躍中の方々にお集まり頂き会合を開催できたことは非常に意義深く、各分野相互の刺激となって気相イオン反応研究発展に寄与するところ大と思われ、あらためてこのような機会を与えて頂いた分子研関係者の方々に感謝する次第である。

研究会のテーマは《機器を用いたイオン反応研究》であり、現在新しい装置を用いて研究されている5名の方に各2時間の発表をお願いし討論をおこなった。参加者は19名で所属内訳は東北大1、富山大1、原研4、東大3、国立公害研1、日立中研1、山梨大1、分子研2、豊田中研3、京大1、大放研1であった。以下に各発表の概要を記し研究会の紹介としたい。

1. Drift Tube を用いたイオン反応の研究 東北大・工 武 部 雅 汎

熱エネルギーから数十eVの荷電粒子の気体、液体中での挙動を群として扱う実験即ちSWARM実験の有力な方法の一つとしてDrift Tube (DT) は位置づけられて良いだろう。装置の構成はイオン源、電界を作る電極、移動速度を計るパルス系、コレクター電極である。このコレクター部を差動排気とし質量分析計をとりつけた、Drift Tube Mass Spectrometer (DTMS) といわれるものもあり、現在殆んどの測定はこの型で行われている。これはイオン種同定の問題がない反面、圧力範囲があること、差動排気部分での問題(Sampling Problem) があるが原理的には同じものである。電界中に置かれたイオンは衝突加速をくり返しなが群として、拡散しつつ一定速度で移動しコレクターに到着する。この到着時間に対するスペクトルをArrival Time Spectrum (AS) と呼び、反応がない系ではGauss 型であり、拡散方程式で記述することができる。このASから移動度、拡散定数といった輸送係数が決定できる。反応が起る系では反応生成イオンの移動速度が違うのでGauss 型からはずれこれに対しても解析解が得られている。しかし親、子それぞれの輸送係数が求められていないとComputer Curve Fitting は容易ではない。DT 法は同定の代りにAS の形、輸送係数に注意し、子イオンは“つれ子法”を用いることで反応速度が求められることを私達の研究室は $\text{K}^+ + \text{H}_2\text{O} + \text{N}_2$ の系で示した。この系の逆反応は無視し得たが、逆反応もまた“つれ子法”で直接求めることが可能である。DT法には原理的に圧力範囲はないので一歩一歩低圧から測定をすすめることで、Sampling 問題を除きながら、広い圧力範囲でイオン反応の動的な研究が可能であり、その正確な輸送係数の測定とあいまって、精密な解析に耐える実験手段となり得ると同時に、広い応用の可能性があると考えている。

2. プラズマクロマトグラフィー 京大・理 六 鹿 宗 治

プラズマクロマトグラフィーは常圧で生成したイオンに電場をかけて分離する分析法で、いわば

気相に於ける電気泳動法であって比較的 low molecular weight の有機化合物の微量分析に応用することができる。

1) 装置 現在市販されている装置は米国 PCP 社製の Phemto Chem 100 型及び M S を接続した MMS-160 型の 2 種類のみである。この装置では ^{63}Ni の β 線によって定常的に反応イオンが生成され、これによって導入された試料分子がイオン化される。イオン化の効率が高いので高い感度を得られ、またイオン化による分子の開裂も少いため簡単なスペクトルが得られる。

2) 反応イオン 正及び負の反応イオンが生成される。分析温度やキャリアガス中の水の分圧によって異なるが、正イオンは 3 つのピークを与えそれぞれ $\text{NH}_4^+(\text{H}_2\text{O})_n$, $\text{NO}^+(\text{H}_2\text{O})_n$, $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ と同定されている。負イオンはキャリアガスに N_2 を用いると e^- , 空気の場合は $\text{O}_2^-(\text{H}_2\text{O})_n$, $\text{O}_2^-(\text{H}_2\text{O})_n(\text{CO}_2)$, $\text{O}_2^-(\text{CO}_2)_n$, CO_3^- などである。

3) 分析 種々の化合物に対する応用が報告されているが、一般に生成イオンは分子イオンであるが、例えば O -フタル酸のように隣りあう二つのカルボキシル基より脱水して無水フタル酸イオンの生成や、コカインのフラグメントイオンの生成も認められている。脂肪族アミンの場合約 100°C 以下では N_2 や H_2O 分子とのクラスター生成が PC-MS によって知られている。高温側では一定範囲では Reduced Mobility K。と分子量の対数との間に直線関係が認められた。K。は分子量、サイズ、形状によって定まるので構造異性体は相互に分離される。

反応イオンを例えばアンモニアイオンのみにすることによって、プロトン親和性の高い化合物のみを特異的にイオン化する方法も開発されている。また GC や LC の検出器としての応用も試みられている。

3. 分子線サンプリング法による高温気相反応の研究

(株) 豊田中研 山崎哲, 滝 昌弘, 藤谷義保

高温気相反応過程における組成変化 (あるいは温度変化) を追跡する一方法として Kantrowitz-Grey によって提案された超音速分子線法により反応領域から Gas-Sampling を行い、質量分析計で組成分析を行うことができる。

この方法では、(1) エネルギーのそろった高密度の分子線が得られ、低濃度成分の検出が可能 (2) 不安定中間生成物の検出が可能 (3) T. O. F. 法による温度測定が可能等の利点がある。一方超音速分子線内での組成を質量分析計で定量する場合、分子線生成過程で生ずる種々の物理現象 (Mass Separation, Non Equilibrium Effect, Condensation 等) が測定値に及ぼす影響を明らかにする必要がある。

Mass Separation : 多成分混合気体を分子線化する場合重い分子が中心軸に向かって濃縮し、軽い分子が外に向かって拡散する現象を伴う。この現象は Pressure Diffusion, Mach-Number Focusing

Skimmer Interference に分離し考える事ができる。Pressure Diffusion については過去 Sherman 等により理論的には完全に解析されており、Mach-Number Focusing については並進温度分布の非平衡性により解析を行った。

非平衡現象 : 多原子分子がノズルを通して真空中に自由膨張する場合、緩和時間の遅い振動温度は高温で凍結する。この現象は、イオン化過程に大きな影響を及ぼし定量分析を行う上で大きな問題となる。凍結した振動温度を理論的に取り扱うためには、内部エネルギーの変化を考慮した Boltzman 輸送方程式を解かなければならないが十分な成果は得られていない。

超音速分子線サンプリング法には以上の様な複雑な現象を含むにも拘らず、分子線が高密度である点と応答性の良い点とから今後とも各種の高温高速反応の追跡に応用されていくであろう。

4. 大気圧イオン化質量分析法

日立中研 三井泰裕, 神原秀記, 鹿又一郎

大気圧イオン化 (API) 質量分析法は大気圧下でのイオン-分子反応を利用して、気体中の成分を効率よくイオン化して質量分析する手法であるが、キャリアガスよりイオン化ポテンシャルの低い物質や H^+ 親和力の大きな物質は非常に高感度で検出される。筆者らの API 質量分析計では針電極を用いたコロナ放電とそれに続くイオン-分子反応によりイオン化を行なっている。このイオンは径 0.1 mm の細孔を通り、約 1 torr の中間圧力部に入り、更に径 0.2 mm の細孔を通り、約 10^{-5} torr の分析部に入り四重極質量分析計で分析される。この方法により純窒素中の NO ($\sim 5\text{ppb}$), O_2 ($\sim 1\text{ppb}$), H_2O ($\sim 1\text{ppb}$), 純酸素中の H_2O ($\sim 1\text{ppb}$), CH_4 ($\sim 10\text{ppb}$), 水中の DMSO (数 10 ppb), 湿った窒素中の PH_3 ($\sim 0.1\text{ppb}$) などの分析結果が得られている。この例にみられるように API 質量分析計は極微量物質の検出が要求される公害計測、半導体プロセスガス分析、その他有機物分析に広く応用される可能性を持っている。また API 法で生成される種々のクラスターイオンに対して、本方法では中間圧力部両端にドリフト電圧を加え、1 torr 近傍での電界下で中性分子との衝突励起によりクラスターイオンを分子イオンに解離させている (ドリフト電圧の増加に伴い内部エネルギーが高められ、例えば $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_4 \rightarrow \text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_3 \rightarrow \text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_2 \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+$ のように解離する)。この解離の様子を観察することにより、生成イオン種の同定は容易となり、またクラスターイオンの構造および解離プロセスなどに関する知見を得ることができる。実際一例として従来 1 torr 近傍の窒素中では観測されていない 36 a. m. u. のイオンは $\text{H}_3\text{O}^+ \cdot \text{OH}$ であり H_3O^+ に解離することがわかり、酸素中では $\text{H}_3\text{O}^+ \cdot \text{OH}$ は $\text{O}_2^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$ を経由して O_2^+ を与えることが推定された。なお本方法ではドリフト電圧とクラスターイオンの結合エネルギーとの間に強い相関があると思われるが詳細は検討中である。

5. 時間分解型大気圧イオン化質量分析計の製作 東大・工 松岡伸吾 中村洋根 田村孝章

1 気圧下におけるイオン反応研究は気相放射線分解反応として1910年代のLind 以来の歴史をもっている。この研究は、質量分析計、ICR 等から得られる低圧での結果を参考にしつつ、放射線照射により得られる最終生成物の分析をおこなってすすめられてきた。しかしながら1 気圧下で生成したイオンが最終的に中和で消失するまでの fate については現在でも全く不明といってよい。

我々はKearle らの高圧マス装置、Biondi らのマイクロ波空洞—質量分析計、Horning らの大気圧イオン化質量分析計を参考にして、1 気圧下のイオンの fate を経時的に直接観察できるような装置を世界で初めて完成させた。イオン生成には直線加速装置より出てくる35MeV, 2 ns, 繰り返し50パルス/秒の電子線パルスを用いている。超高純度窒素ガスを試料とし、初期イオン濃度 $4 \times 10^8 / \text{cm}^3$ とした予備実験では N_3^+ , N_4^+ は100 μsec 以内に $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ に変化し、水クラスターイオンは約4 msec 以後更に $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n(\text{N}_2)_m$ に変化し、最終的にはこれらが中和反応に参加していることがわかった。水濃度が既知であれば電荷移動、クラスターリングの反応速度定数を容易に算出できる。

本装置は安定なイオンのイオン—分子反応速度、中和反応速度、クラスターリングの平衡定数及びそれらに伴う熱力学的パラメータの測定に有効である。

分子イオンの生成、反応と高分解能分光

分子研 広 田 栄 治

イオン反応はラジカル反応より一般に反応速度の速いことが知られている。このことは分子イオンの反応性の高いこと、したがって寿命の短いことを意味している。そのため分子イオンの高分解能分光は、フリーラジカル等の不安定分子に対するものに比し著しく遅れをとっており、詳細な分子分光学的研究が行われた分子イオンの数は非常に少ない。しかし分子イオンはその高い反応性のために、単に分子科学や化学反応論の分野だけでなく、プラズマ物理学、上層大気的光化学、天文物理学等広い領域において重要な役割を演じており、高分解能分光学においても分子イオンを積極的にとりあげる機運が高まってきた。幸にもこの分野の第一人者である前分子研外国人評議員 G. Herzberg 博士 (カナダNRC) が来日され、分子研に数日間滞在されたので、その間に Herzberg 博士を囲んで半日の研究会を行った。上にも述べたような広い分野における分子イオンの重要性を考慮して、分子分光学以外にイオン分子反応論、天文物理学、分子理論等の分野の方々の参加を

お願いした。日時は昭和54年1月24日13:00—17:30, 出席者は約30名であった。以下に講演の概要を示す。

○Introductory Remarks E. Hirota (IMS)

○Recent Work on Spectra of Molecular Ions G. Herzberg (NRC, Canada)

NRC における分子イオンの高分解能分光研究の最近の成果が紹介された。先ずこゝ数年にわたって行われてきた稀ガスの2原子分子イオン、とくに HeNe^+ についての結果が報告された。観測されたのは $\text{B}^2\Sigma^+-\text{X}^2\Sigma^+$, $\text{B}^2\Sigma^+-\text{A}_2'^2\Pi_{1/2}$ の二つのバンドである。B 状態は主として He^++Ne に、A と X 状態は $\text{He}+\text{Ne}^+$ にそれぞれ対応する。このことから $^4\text{HeNe}^+$ と $^3\text{HeNe}^+$ のバンドオリジンの大きな同位体シフトは、 ^4He と ^3He のイオン化ポテンシャルの差によって説明された。また $^3\text{HeNe}$ のスペクトルに見出された約 0.30cm^{-1} の分裂は He^+ の超微細構造分裂 0.2809cm^{-1} とほぼ一致することが指摘され、He は分子イオンを形成しても自由原子 (イオン) の性格をかなりの程度そのまま保持していることが示唆された。振動の帰属 (とくに B 状態) については、イオン (He^+) と原子 (Ne) の間のポテンシャルが r^{-4} に比例するという仮定を援用して行った。えられた分子定数から B, A_2 , X 状態のポテンシャル曲線がえられたが、B, A_2 の解離エネルギーは 292.8cm^{-1} , 282.4cm^{-1} と X の値 (5580cm^{-1}) に比べて著しく小さく、平衡核間距離は $2.648\text{\AA}$ (B), $2.319\text{\AA}$ (A_2) と X ($1.300\text{\AA}$) の約2倍に近いことが示された。

以上の研究よりはるかに感銘の深かったのは D₂ に関する成果である。分子イオンの中でもっとも基本的でかつ重要なものは恐らく H_3^+ であろう。その高分解能スペクトルの観測に対して多大の努力が払われてきたが、未だ充分な結果がえられていない。NRC でも低温 (液体チッ素温度) ホローカソードを用いた放電により H_3^+ を生成し、その高分解能赤外スペクトルを観測する試みが行われている。すなわち岡らは色素レーザーとアルゴンイオンレーザーの混合により差周波光として $3\mu\text{m}$ 近辺の赤外光を発生し、 H_3^+ の吸収スペクトルの観測を行っている。Herzberg, Lew, Sloane らは FT 赤外分光器を用いて $2850-2250\text{cm}^{-1}$ 領域における水素の放電からの赤外発光スペクトルを測定し、数本の線が Carney, Porter らの理論からの予測と一致するという結果をえているが、その帰属の妥当性については確認されていない。また H_3^+ のビームを作り、磁場で偏向して他の反磁性分子と分離した後そのスペクトルを観測しようという試みも行われている。

一方 Herzberg は放電中の分子の回転温度をしらべる目的で H_2 , D_2 のスペクトルを再測定したところ、 D_2 のスペクトル中に、幅は広いが明らかに P, Q, R 枝から成る構造を見出した ($5600\text{\AA}$ と $7100\text{\AA}$ の領域)。 H_2 でも対応するスペクトルは存在するが、より幅が広く、帰属は不可能である。 D_2 で見出されたこのスペクトルは D_2 のリドベルグ状態間の遷移 $n=3 \rightarrow n=2$ と考えると非常によく説明できる。 D_2 の基底状態 ($n=1$) が不安定 (Jahn-Teller 効果) であること、実測の回転定

数が $B' = 22.43\text{cm}^{-1}$, $B'' = 23.09\text{cm}^{-1}$ であること等上の解釈を支持する。 $5600\text{\AA}$ バンドは $n=3$, $^2A_2 \rightarrow n=2$, 2A_1 , $7100\text{\AA}$ は $n=3$, $^2E' \rightarrow n=2$, 2A_1 に帰属された。 $n=4 \rightarrow 2$ も測定可能と思われる。なお低温セル中の回転温度は高く、 $J \leq 4$ の赤外遷移が観測できる程度である。測定された $5600\text{\AA}$, $7100\text{\AA}$ バンドは星間スペクトルによる D_3 の検出に有用と思われる。なお D_3^+ の分子定数は D_3 の分子定数を $n \rightarrow \infty$ の極限へ外挿すればえられる筈で、今後 D_3^+ の検出に有力な手がかりを与えるであろう。

以上の報告は全くのホットニュースで、紹介された D_3 のスペクトルは、Herzberg がカナダを立つ直前にとった記録計用紙のコピーであった。

○Energy Effects in Reactions of Molecular Ions I. Koyano (IMS)

$H_2^+(v) + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$ の反応速度 (反応断面積) の振動量子数 v 依存性を同時計測法により測定した。衝突エネルギーの小さい時(0.38eV)には断面積は明らかに v とともに減少した。この結果は反応中間体として H_4^+ を仮定すれば、中間状態からの逆反応の可能性が v とともに増大するのでよく説明することができる。

○Ion-molecule Reactions and Molecular Evolution in Dense Interstellar Clouds

H. Suzuki (Kyoto Univ.)

密度の高い星間雲中の分子の生成機構を理論的に論じた。用いたモデル (反応系) は次のようなものである。5 個の元素と230個の分子種について、塵の表面での反応の他宇宙線の関与する反応10, イオン・中性分子の反応2340, He^+ の関係する反応208, イオン・電子の再結合反応395を考慮し、 50°K , 分子密度 $10^5/\text{cm}^3$ の条件下での分子生成を 10^{16}sec にわたってシミュレーションした。その結果高密度星間雲におけるいくつかの分子の相対存在比を説明することができた。

○Comment M. Morimoto (Tokyo Astronomical Observatory)

野辺山に建設が始まった45m 電波望遠鏡の概要が紹介された。周波数領域は $1 \sim 120\text{GHz}$ で、アンテナ表面精度 0.2mm(rms) , 指向性精度 2arc sec , 光学系は改良 Coudé 型である。信号検出には光音響法が用いられる。またこの望遠鏡と同時に干渉計が設置される予定で、東西および南北とも550m の基準線に直径10m の望遠鏡が5台配置される。スペクトル線としては 22GHz の水, 115GHz のCO の線が考えられている。完成は1982年3月とのことである。

○Microwave Spectroscopy of Molecular Ions at IMS S. Saito (IMS)

グロー放電型フリースペースセルを用いた分子イオン検出の試みが報告された。フリーラジカルは 10^{10} 個/ cm^3 生成できればそのマイクロ波スペクトルを観測することが可能である。しかし分子イオンは反応性が高いのでせいぜい 10^8 個/ cm^3 程度しかえることができない。したがって分光器の感度を約2桁上げることが必要である。上記セル (長さ 3.5m) を用いてかなり高い感度がえられ、

CO^+ , HCO^+ のスペクトルが文献より約1桁良いS/Nで観測された。

溶液反応の熱力学と反応機構

名大理 田 中 元 治

昨年9月ウィーンで開催された第4回IS,I (International Symposium on Solute-Solute-Solvent Interactions) において、同シンポジウムを1982年日本に招致することが決定された。同シンポジウムは溶媒溶質相互作用に関心をもつ物理化学者、無機化学者などが一堂に会して、お互に情報を交換し、討論を行うことを目的としている。第1回からの傾向を見ると、物理化学的色彩がかなり濃厚なことが感じられる。この機会にわが国各分野において別々に、この問題に取り組んでいる人達の間の討論の気運を高めることは、わが国の溶液化学の発展に有意義であると考えられる。

2月27, 28日両日表記の研究会が分子科学研究所の昭和53年度共同研究の研究会として開催された。本研究会では分析化学と錯塩化学の研究者が溶液反応を現象論的に把握するに留まらず、分子の集合体中の各種相互作用の結果としてとらえ、分子—分子および分子—イオンの相互作用が、反応の熱力学や動的挙動にどのような影響を与えるかを討論することに主眼をおいた。

溶液反応の熱力学的側面に関しては6題の講演が行われた。そのうち2題はアミノ酸錯体に関するものであった。松井春夫 (名工試) はカドミウムと α -アミノ酸との錯形成反応においてアスパラギン酸などとの錯体が難溶性であるために沈殿を生成することを述べた。山内脩, 小谷明, 高揚紀和 (阪大薬) は混合アミノ酸銅(II)およびパラジウム(II)錯体の水溶液中での挙動を論じた。混合アミノ酸錯体の生成定数は、機構論的考察(J. Inorg. Nucl. Chem., 36, 151 (1974))によって定量的に予見できることが指摘された。この機構論的考察とnmrスペクトルによれば、L-ヒスチジンの1:2銅錯体およびいくつかのパラジウム錯体においては、金属イオンに給合していない官能基間に相互作用が認められた。

金属イオンと無機陰イオンとの反応について4講演が行われた。大滝仁志, 李孝光 (東工大総合理工) は可視部吸収スペクトルとラマンスペクトルの測定から、鉄(III)イオンは硝酸水溶液中で、配位水分子が硝酸イオンによってかなり分極された形の外圏錯体を形成していることを示した。脇博彦 (九大理) はリンのオキソ酸イオンのプロトン付加は、リン四面体ごとに独立した単位として起こるとして、その付加の平衡定数を定量的にあらわす式を提出した。ナトリウムイオンはプロトンと異なり、オキソ酸陰イオン全体と静電的相互作用をもっており、その自由エネルギー変化は、オ

キノ酸陰イオンの全陰電荷と直線関係を示す。

石黒慎一、大滝仁志（東工大総合理工）は水溶液と水—ジオキサン混合溶媒におけるベリリウムの加水分解反応の研究を行った。 Be^{2+} , $\text{Be}_2\text{OH}^{3+}$ および $\text{Be}_3(\text{OH})_3^{3+}$ の水溶液から混合溶媒への移行エンタルピー（ベリリウム 1 原子当り）はこの順に小さくなることを、これらの化学種内の電荷分布から考察した。橋谷卓成（東京農工大）は希釈、イオン対生成、錯形成、中和および沈殿生成反応について ΔV (25°C) を測定した。希稀ではわずかに負の値であり、そのほかはすべて正で、硫酸バリウムの沈殿反応については $+44\text{cm}^3\text{mol}^{-1}$ におよぶ大きな値であった。

以上のほか溶液内反応の速度論的側面について11編の講演が行われた。関根達也（東京理大理）はアルコールやケトンを経媒としてクロム(Ⅲ)の β -ジケトン錯体を抽出すると、部分的に加水分解したクロムの過塩素酸イオンとのイオン対が速かに抽出され、有機相で β -ジケトンとの錯形成が起こることを示した。田中元治（名大理）は二価遷移金属イオンの溶媒交換および各種溶媒中のニッケル錯体の解離反応の活性化エンタルピーを、溶媒の溶媒和エンタルピー、蒸発エンタルピー、ドナー数、溶解パラメーターと関係づけて論じた。田端正明（佐賀大理工）は銅(Ⅱ)–PAR 錯体とCyDTA との配位子置換反応における共存単座配位子の影響を、この単座配位子とPAR とを含む混合配位子錯体の生成定数と単座配位子の退去基 PAR に対する置換活性化によって論じた。

松本伸一、川口信一（阪市大理）はビス（アセチルアセトナト）パラジウム(Ⅱ)とジエチルアミンなどとの配位子置換反応を研究した。アルコールを含む溶媒では、配位したアセチルアセトンにアルコールが水素結合して反応を促進し、そのほかベンゼン、THF などの中ではアミンがアルコールと同様に水素結合して反応を促進する機構が提案された。伊藤喜章、川口信一（阪市大理）は五配位錯体、クロロビス（ β -ジケトナト）マンガン(Ⅲ)および鉄(Ⅲ)を合成し、ジクロロメタン中で各種溶媒分子が第6の配位座に配位する平衡定数がドナー数とLFER の関係にあることを示し、これら五配位錯体のアセチルアセトンとの配位子置換反応が、第6の配位座の攻撃に始まる会合機構で進行することを明らかにした。

児玉睦夫（弘前大教養），木村栄一（広島大薬）は環状ポリアミンの錯形成反応の熱力学および反応機構を論じた。反応は配位子のプロトン付加の程度により、解離機構となったり、会合機構となったりすることを示した。

宮新也、木戸寛明、斎藤一夫（東北大理），寺井善郎（理研），柏原和夫、藤田純之介（名大理）は PtCl_2L (olefin) 錯体のオレフィンの交換反応をCD スペクトルにより解析し、速度定数の対数、 $\log k$ 、 $\log K$ (置換ピリジンおよびアニリン) の pK_a と直線関係にあること、会合活性化状態において、オレフィン間に立体選択的相互作用があることを示した。木戸寛明、渡辺愛爾、斎藤一夫（東北大理）は3価遷移金属イオンのトリスアセチルアセトナト錯体のアセチルアセトン中における配位子同位

体交換がV, Cr, Fe, Ru, Rh については会合機構で、Co については解離機構で進行することを明らかにした。

佐々木陽一、近藤進、川村玲子、西沢正人、斎藤一夫（東北大理）は複核モリブデン(V) 錯体の $[\text{IrCl}_6]^{3-}$ などによる外圏機構による酸化反応において、酸化反応に先行するイオン対生成の役割を定量的に示し、 $[\text{Mo}_2\text{O}_4(\text{l-pdta})]^{2-}$ の $\Delta\Delta-[(\text{en})_2\text{Co} \begin{smallmatrix} \text{O}_2 \\ \text{NH}_2 \end{smallmatrix} > \text{Co}(\text{en})_2]^{4+}$ による酸化において立体選択性の存在を明らかにした。また $[\text{Mo}_2\text{O}_4(\text{hedta})]^-$ や $[\text{VO}(\text{pmida})]$ は加水分解してヒドロキノ錯体になると4桁程度速く酸化されることを見出し、これはヒドロキノが H_2O よりもオキノに近く、低い活性化エネルギーで酸化されると説明した。

荻野博（東北大理）はアミノポリカルボキシラトアクアクロム(Ⅲ)錯体のアネーションはアクア錯体やペンタアンミン錯体にくらべて極めて速く、この反応で生成するアシド錯体のアクア化も対応するアシドアクア錯体やアシドペンタアンミン錯体よりもずっと速く進行することを示した。

西本テツオ、舟橋重信、田中元治（名大理）は酢酸中のテトラ- μ -アセタトニ銅（酢酸銅二量体）のアクシアル位の酢酸分子の交換反応速度を研究し、その活性化パラメーターとの比較から酢酸銅二量体とHCl およびLiCl との反応は、それぞれ会合機構および解離機構で起こることを明らかにした。

本会には約40名の出席者があり、活潑な討論が行われた。本会開催に当りお骨折を頂いた東工大大滝仁志、分子研伊藤翼両氏に厚く御礼申し上げます。

遷移状態構造への理論と実験からのアプローチ

阪大産研 安藤 喬 志

化学反応の進む方向（生成物）とその進み易さ（反応速度）を理解し予言することは、理論化学の究極の目的のひとつである。物理有機化学においては、多くの実験データの蓄積と大胆な作業仮説によって、永年の間その方向への努力が続けられてきた。一方、量子力学にその源を発する理論化学（量子化学）は、分子軌道理論の着実な進歩と大型計算機の急速な発展によってその対象を急激に増しつつある。前者はその“理論”の精緻化とともにより理論的な裏付けを必要とし、後者はその対象の複雑化とともに帰納論的常識を要求している。とくに、後者がその対象を分子の基底状態のいわば静的な性質の描写から、ポテンシャル曲面全体の把握へと進むにつれ、有機反応論との接点は明確なたちで意識されるに致った。複雑な有機化合物の反応の速度や生成物、それらに及ぼ

す電子効果や同位体効果,あるいはその立体化学などの言語も,もはや量子化学的裏付けなしには語れなくなりつつある。このような認識のもとに,有機反応論に携わる物理有機化学者と,有機反応に興味を抱く理論化学者約20名が集まり,3月5,6日の両日分子研において研究会が開かれた。テーマは,反応の進む方向と進み易さを支配する遷移状態構造とその周辺に置き,有機化学者側からはそれぞれの研究テーマにおける問題点について理論的なコメントを求める形で発表が行われ,理論化学者側からは,その研究方法と進歩の程度を認識させる形での報告が行われた。以下講演の順を追って内容の概略を述べる。

3月5日(月) 13:30-18:40

1) 安藤喬志(阪大産研) 反応速度同位体効果と有機化学反応機構 — 隣接基関与と超共役を中心に

2) 山高 博(阪大産研) 反応速度同位体効果からの遷移状態構造のモデル計算
安藤は,反応速度同位体効果の理論とその有機化学反応機構への定性的並びに定量的応用について述べ,とくに炭素-炭素単結合の隣接基関与機構を架橋と超共役の複合的寄与として解釈するに至った実験的データと,その問題点について報告した。続いて同じグループの山高が,同位体効果の実測データを使って分子振動の理論から遷移状態構造を導く手法の紹介と,それによる隣接メチル基関与の遷移状態構造の計算について報告した。これらの報告に対し,諸熊(分子研),岩田(理研)らの理論側から,問題としている $C_3H_7^+$ カチオンのポテンシャルエネルギー曲面が非常にフラットであって,計算の近似度により相対的エネルギーのみならず構造も変化し易いことの指摘があり,山口(阪大基礎工)からも,分子軌道計算側の援助はまず同位体効果で求められた幾つかの遷移状態構造の相対的エネルギーの計算であろうという示唆があった。

3) 加藤重樹(分子研) 分子軌道法を用いた遷移状態構造に関する研究

4) 山口 兆・数下 聡(阪大基礎工) 一般化HF法によるエネルギー勾配を用いた化学反応の理論的研究

ポテンシャルエネルギー面の各点で,エネルギーの絶対値を求めるのではなくエネルギー勾配を求めることにより,従来よりはずっと容易にI)幾何構造の最適化,II)エネルギーの2次微分である力定数,III)反応経路,を定めることができるという報告が,ab initio(加藤)およびMINDO(山口・数下)の両グループから行われた。更に加藤は,分子種が遷移状態からポテンシャルエネルギー面を落ちて行くときの挙動や,その際放出されるエネルギーの行方についての計算と遷移状態構造との関連について述べた。また,諸熊から ab initio 計算全般に関する紹介と,有機化学イオン反応における理論と実験との対応づけにおける最大の問題点は適当な溶媒モデルの確立であると

いうコメントがあった。更に,山口らによって,ab initio 計算と半経験的計算との比較についてのコメントがあった。

5) 秋葉欣哉(東大理) π -スルフラン上の結合交換

イオウをポテンシャルな橋頭位に有する単(双)環化合物において,アルキル化やプロトン付加に伴って起こる結合交換反応の幾つかが報告され,これらの反応の際にd軌道を考慮することの必要性がたたされた。これに対し,理論側および大野(京大化研)よりd軌道の必要性が述べられるとともに,d軌道を考慮することの計算上における意義についてコメントがあった。

3月6日(火) 9:00-16:40

6) 中井 武(東工大工) 2,3の[2,3]シグマトロピー転位の立体化学的経路

7) 岩村 秀(分子研) アルコキシカルベンおよびアルキルチオカルベンの[1,2]転位と[2,3]転位

8) 岩田末広(理研) メチレン(CH_2)とその関連化合物 — 理論計算の信頼性

中井は,ジチオカルベンやその関連化合物(N,O置換体)の[2,3]シグマトロピー転位について,新たに生成する2つの結合の立体化学に関する実験データを報告し,カルベンの電子構造や遷移状態構造モデルを使って考察を行った。岩村は,1-アリルオキシトリプチセンの光反応で得られるアリルオキシカルベンの分子内転位反応における経路と,その解釈について報告した。続いて岩田は,メチレンを例にとりあげて ab initio 計算における近似の程度と,それによって得られる計算結果の信頼性について解説的に報告を行った。計算結果の歴史的変遷や,計算の報文を読む際の心得まで話が及ぶとともに,カルベン一般の構造と反応性について討論が行われた。

9) 大峰 巖(分子研) ポリエンの光異性化について

全トランス型のポリエンが光励起によってシス体に異性化する過程について,そのポテンシャルエネルギー曲面を計算することにより,異性化の起こる位置,シス体へ落ちる割合を決める因子,励起一重項と三重項の挙動を考察するとともに,その面上のダイナミックスを計算することによって,ポテンシャル的には不利な反応(ダブルインバージョン)でも起こり得ることを示した。

10) 大野惇吉(京大化研) NAD(P)Hモデルによる還元遷移状態

NAD(P)Hモデル化合物による還元反応において,一電子移動を考えるべき根拠が溶媒効果,同位体効果,共存金属イオン効果などから考察され,金属イオンをはさんだ現状遷移状態構造が提唱された。討論は電子移動や溶媒効果一般に及んで行われた。

11) 奥山 格(阪大基礎工) シクロペンタジェン誘導体の酸解離平衡と速度

炭素酸のプロトン移動速度が,同じ酸強度の酸素酸などに比べてずっと遅いことはよく知られているが,その理由が炭素の混成変化($Sp^3 \rightarrow Sp^2$)に伴う核の再配置にあるとする実験的根拠とし

て、シクロペンタジェン誘導体の解離平衡における平衡定数と速度定数の関係が報告された。

12) 速水醇一 (京大教養) 2分子の求核置換反応における基質-試薬間相互作用

S_N2 および S_NAr 反応において、反応の前段階として会合錯体があるとする考え方が、NMR や同位体効果のデータをもとに報告された。これに対し諸熊から、C-H 結合の延長上に求核種との水素結合によるエネルギーミニマムの存在する可能性はあること、しかし逆に S_N2 の遷移状態から脱離基を落とすと直角方向へ脱けてしまうこと、が計算結果としてコメントされた。

13) 岡本邦男 (京大工) 飽和炭素原子上の立体配置保持の求核置換について

S_N2 条件下での協奏的な立体配置保持反応の可能性を、実験的に追求した結果が報告された。現在までのところかなり悲観的ではあるが、更に追求を続けるとの報告があり、その可能性について理論側からのコメントがあった。

以上2日間の研究会をとおして、理論グループと実験グループの双方が、お互いの“言葉”や“ノウハウ”を知り合い、またお互いに相手の当面している問題点を理解し合うという点で大きな成果を挙げることができた。しかしまだこれは第一歩に過ぎず、お互いの研究の上で実りを上げていくためには、今後とも不断の努力が必要であろう。最後に、本研究会開催にあたって、分子科学研究所の岩村秀教授、諸熊奎治教授、ならびに両研究室の方々に大変お世話になった。厚くお礼申し上げる次第である。

外国人研究員紹介

C. Bradley Moore 教授について

分子研 吉原 經太郎

5月14日より約3ヶ月間カリフォルニア大学(バークレー)のMoore教授を迎えることになった。同教授は1939年ボストンの生れで、1960年にハーバード大学卒業、1963年にカルフォルニア大のG. C. Pimentel 教授の下で研究の後Ph. D.を取得した。そのまゝ同校で1963年より助教授となり準教授を経て、1972年30才中ばの若さで正教授になり、現在に至っている。

筆者はMoore教授と専門と同じではないので、適切な紹介はできないが簡単に彼のこれまでの仕事を概観してみたい。最初は主としてPimentel教授と共に、比較的単純な分子の赤外線吸収スペクトルの研究を行い、振動ポテンシャルや振動-回転スペクトルの解析を行った。その後赤外線レーザー(CO_2 レーザー、HClレーザーなど)を用いて、分子間又は分子内の振動エネルギー移動(V-V energy transfer)の研究を世界に先駆けて行い、一躍世の注目を浴びるようになったということである。さらにレーザーを駆使して振動-回転、振動-並進エネルギー移動の研究を数多く行っている。又可変波長レーザーを用いたホルムアルデヒドの光化学反応の研究、レーザーを用いた同位体分離の研究とその年代測定への応用、振動励起による化学反応の促進(Vibrational Photochemistryの提唱)さらにはレーザーの生物学への研究等広い視野の研究を行っている。

同教授の招へいは昭和50年秋の創設協力者会議で一旦は決定したが、諸般の事情で実現しなかった。今回の招へいに当っては所外協力者として土屋莊次氏(東大・教養)をお願いした。その他多くの方々の御協力によって、7月2、3日の2日間分子研において研究会「レーザーの化学反応への応用」が開催され、同教授にいくつかの話題を提供していた。さらに6月20日日本化学会において、7月16日大阪科学技術センターにおいて講演会が行われた。その他全国各地で合計9回の講演会が行われた。Moore教授は“Chemical and Biochemical Applications of Lasers”(Academic Press)の編者でもあり、レーザーの化学への応用のパイオニアでもあるので、日本における活動も極めて幅広いものであった。

David Fox 教授

分子研 井口 洋夫

有機物理化学の分野での定本になっている“Physics and Chemistry of the Organic Solid State” Interscience Publishers (Vol 1 1964, Vol 2 1965, Vol 3 1967) の編者であるD. Fox 教授を今年末から来年3月末まで外国人招へい研究員として、分子科学研究所に招へいすることとなった。

1920年生れのFox教授は今年58才、カリフォルニア大学(パークレー)を1942年卒業し、1952年PhD. イスラエル工科大学講師、ロチェスター大学助教授を経て、新設のStony Brookのニューヨーク州立大学教授(物理学科)になったのは1959年:39才。「物理学科の設置運営にすっかり時間をとられたが、再び研究活動に帰れる状況になった」との本人の言葉通り、大学院科長等の仕事に忙殺された(1963~66年)のち、“分子性結晶”の研究に復帰され、日本へ来れる状態になった。

大学卒業直後、反陽子の仕事が一ツ二ツあるが、その後25年間、一貫して行っている有機分子性結晶の電子状態、特にそのExcitonの仕事は、非常に有名である。これらの研究を通じて有機固体中の電導現象の理論をいち早く提案、来年第9回を迎えるMolecular Crystal Symposiumの第1回の開催に努力し、その主催者となった一人である(第1回目は“Symposium on Electrical Conductivity in Organic Solids”と云う名称であった:1960)

1975年頃からは同じニューヨーク大学のD. M. Hansonと組んで分子性結晶中のStark効果の問題と取組み、1977年開催した第8回Molecular Crystal Symposiumでは“Vapor-Liquid Phase Transitions of Frenkel Excitons”と彼の最も得意とする問題と取組んでいる。そして、現在筆を進めている内容は、“frequency locking in coupled Josephson junctions”と“mixing of x-ray and optical phonons in molecular crystals”などでそれをexcitonの問題と平行して行っている。

秀才の誉の高いFox教授を迎えて、彼の円熟したexcitonを中心とする考え方を、われわれの分野により深く持込めればと考えている。

立派なひげ(きっと、来所の折もそのまゝであろうと期待している)は、諸熊教授に充分対抗出来るものであろう。

J. Durup 教授

分子研 小谷野 猪之助

パリ南大学のJ. Durup教授が今年度の外国人招聘研究員として、8月27日から4ヶ月間分子研に滞在されることになった。招聘研究員としては初のフランス人である。

Durup教授は1932年の生れで、1959年にパリ大学で理博の学位を取った後、2年間の軍務(ヘルスサービス)を経て1961年にフランス国立科学研究センター(C. N. R. S.)の博士研究員になり、1964年に同センターの上級研究員に就任した。1968年にパリ南大学に助教授として移り、1972年に教授になって現在に至っている。

C. N. R. S. 時代は主としてイオンと中性分子との衝突(弾性および非弾性散乱、電荷移動、化学反応)の研究にたずさわり、イオン-分子反応における安定な反応中間体の存在を実験的にはじめて示すなどの業績をあげた。電荷移動過程(多価イオンを含む)を利用した分子イオンのスペクトロスコピーもこの時代の業績として特筆されよう。パリ南大学に移ってからは、“半衝突”という観点から、分子イオンのレーザー光解離の研究に着手し多くのすぐれた業績をあげた。現在もこの“イオンホトフラグメント分光”の研究をバイオニアのひとりとして鋭意続けている。また、最近はオルセイのACOのグループと共同でSORを用いた光イオン化の研究も行っている。

同教授はこれらの実験的研究においてかずかずの新しい着想を発揮された反面、理論の仕事も残している両刀使いである。同教授のこれらのキャリアーは、われわれの研究にとっても分子研全体にとってもきわめて有益であろうと期待される。

同教授は過去に2度(1966, 1969年)短期間来日したことがあり、日本文化に強い関心をもっている。今回の日本滞在中は日本人と同じ生活をし、日本文化についても多く学んで帰りたいと云っている。

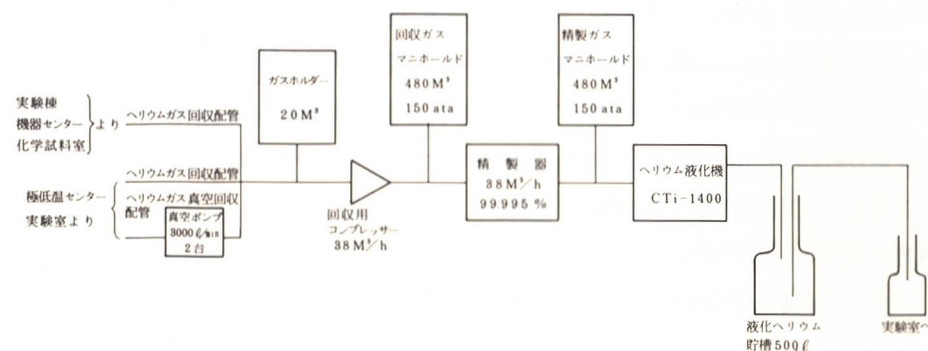
極低温センターについて

分子研 井 口 洋 夫
榎 敏 明

研究室で使用するヘリウムガスの回収を目的に設置した装置の稼動に始まる極低温センターの整備は、ヘリウム液化機の試運転によって、その第一期目標に到達した。これから暫くは、「研究者が operate するセンター」を目標に、整備に時間をかけて行う予定である。特に実験棟などに設置してある回収配管のテストを充分注意して行うことにしている。

いづれにせよ、十年の計をたてて、“使い易い極低温センター”にしたいと考えている。その一つに、将来、ヘリウムの入手についての問題が起らない保証はない。従って、そのリサイクルに力をそそぎ、その結果に期待している。

極低温センターの人員の制約を、自動化で乗り切ろうと思っている。液化もリサイクルも自動化のむつかしい分野の一つであるが、出来る限りの配慮はしたつもりである。全体のフローシート（正にその言葉通りである！）を次に掲げる。



建屋について触れる。音（主としてコンプレッサー）と振動（コンプレッサーや冷却器）は極低温センターのアキレス腱である。これを最少限度にし、且つ周辺の住宅に影響を与えないようにすることは、至上命令である。機械室を建物構造上独立させ、内張りに防音材料を充分利用して、音と振動に対応した。これによって、当初の目標をかなり実現させたのではあるまいか？

極低温センター棟の中に、いくつかの低温利用の実験室を設置してある。これも、ヘリウムを主体とする冷媒の有効利用に資するためである。またその実験室の天井の高さにはこれから急激に増加するであろう超電導マグネットへの配慮をしたつもりである。

この極低温センターの設置は、管理局の「よいものをつくろう」とする精神に支えられたもので

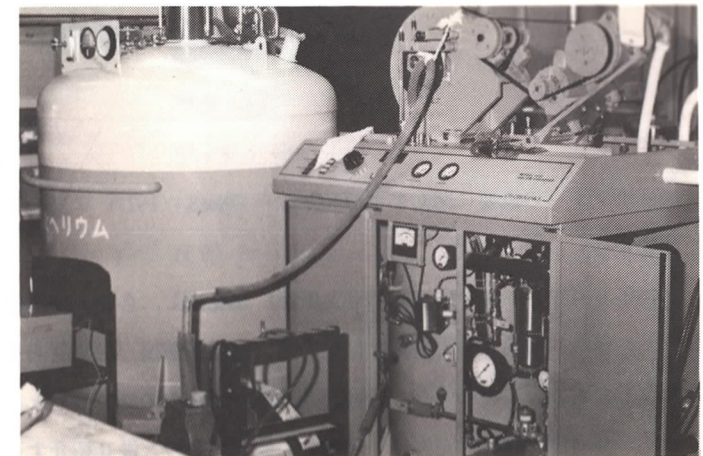
ある。

また高压を使用する極低温実験施設の建設には、種々様々の法規に対応しなくてはならなかった。これに対する管理局高安氏の努力は格別であった。

もう一人、50年の発足当初から、陰になり日向になって、この施設の建設の知恵袋になって下さった早坂

啓一氏（東大物性研）の力は大きかった。

なお液化窒素タンク（3000ℓ）はホール・ウェイ（2階）への配管も終えて、1，2階両方から有効に利用されている。



極低温センターのヘリウム液化機

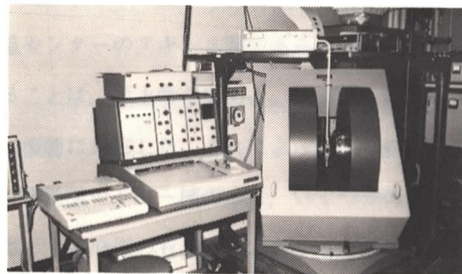
機器センター近況

分子研 吉 原 經太郎

機器センターの概要に関しては既にレターズNo.3 (1977) に紹介したので、その後の経過と現況を報告する。

1978年3月にセンター棟(1043m² 2階建)が完成し、各種測定機器の設置、調整が完了し稼動し始めた。建物の構成は分光室、物性測定室、電磁遮蔽室、磁気共鳴室、X線回折室、及び所外利用者控室等である。現在センター職員2名が所内研究者の協力のもとに、これら機器の運営にあたっている。共通測定機器も充実してきたので従来のものと併せ紹介する。又借用用小型計測器のリストも最新のものを作成中である。

可視紫外分光光度計	キャリー17
二波長分光光度計	日立 556
フーリエ変換赤外分光光度計	日本電子 JIR-10
円二色性分散計	日本分光 J-40
けいりん光計	島津 RF-502
真空紫外分光器	GCA, McPherson 225
光電子分析装置	パーキンエルマー PS-18
ラマン分光光度計	日本電子 JRS-400T
けい光寿命測定装置	Applied Photo Physics SP-3 X+Ortec
アルゴンイオンレーザー	Spectra Physics 164-05
パルス色素レーザー	Molelectron UV-24+DL14
色素レーザー	Spectra Physics 375-90



電子スピン共鳴装置



4軸型単結晶X線回折装置

粉末X線回折装置	理学電機 Geigerflex 2027
4軸型単結晶X線回折装置	理学電機 AFC-5
表面粗さ計	DEKTAK
走査型熱解折計	デュポン 990
高真空蒸着装置	日本真空 EBH-6
走査型電子顕微鏡	日立 S-450
帯磁率測定装置	Oxford
高分解能核磁気共鳴装置	日本電子 JNM-FX100
電子スピン共鳴装置	バリアン E-112/E-900

センター利用法について

所内研究者は機器が空いている限り使用できるが、利用度の高いものに関しては使用予定表に記入の上利用している。所外研究者は共同研究及び施設利用の2種の利用法がある。共同研究は所内利用に準ずるため施設利用について紹介する。「施設利用申請書」(共同利用掛に申込む)に所要事項記入の上、予めセンター長に提出し、許可の上使用する。詳細については本研究所共同利用掛に問合せられたい。なおセンター利用に関するしおりが用意してあるのでセンターまで請求していただきたい。

利用状況

上記機器の78年度の積算使用時間は4090時間、690件である。このうち所外利用は、241件にのぼった。特に高分解能核磁気共鳴装置、可視紫外分光光度計、ラマン分光光度計、光電子分析計、色素レーザー、等は利用が多い。これら機器に関しては利用前にセンター職員と十分打合せをしてほしい。新規設置の機器についてはセンターニュースで随時講習会の開催を予告している。

各機器はオープンオペレーションのため使用計画のある研究者は是非講習会への参加を要望します。

5月7日、8日に電子スピン共鳴装置、5月下旬に4軸型単結晶X線回折装置の講習会を行った。また電子スピン共鳴装置は6月中旬に2次講習会を行った。

電子計算機センター通信

分子研 柏 木 浩

1. 利用 情 況

昭和54年1月から開始されたHITAC M-180マルチプロセッサシステムの運転は順調で利用は表のように驚異的な立ち上りを示しました。

	ジョブ件数	CPU時間
1 月	9 2 5 9	2 3 4
2 月	1 3 8 7 3	4 6 4
3 月	1 6 6 9 3	6 6 9

2. 所外からのTSS利用開始

4月下旬から電話公衆回線によるTSSサービスを開始しました。300ボー3回線で代表番号は(0564) 53-6111です。利用に先立って電話回線端末設置申請書を提出してください。センターオープン時間に利用できる他、終夜運転時(4月現在火金)にも混雑がなければ利用できます。音声応答があればサービスは停止中です。

3. ライブラリプログラムの公募

今年度はプログラムライブラリの充実を一つの重点とし、分子科学・生物科学研究のために重要で汎用性の高いライブラリプログラムを公募します。センターが採択したプログラムの整備または開発をされる方に対しては、必要に応じてある程度の謝金、旅費、CPU時間を配分します。また当センターのライブラリプログラムとして適当なものがあれば整備、開発を自分で担当する意志のない場合でも、意見、希望をお知らせください。第一次公募のしめ切りは5月31日でしたが、第2次として引続き公募します。応募または情報提供の内容は次の通りとします。

- 1) 所属、身分、氏名、連絡先(電話番号を含む)。
- 2) 整備、開発、情報提供の別。
- 3) プログラム名、機能、規模、使用言語、機種など。
- 4) プログラムの作成者、管理者など。
- 5) 謝金、旅費、CPU時間についての希望。

4. 計算機利用の問合わせ先

- 1) 計算機利用申請書, 電話回線端末設置申請書, 利用の手引(運用編, システム概説編, プロジェクト管理・データセット保護編)など利用に必要な書類の請求, 手続の窓口は分子科学研究所国際研究協力課共同研究係です。

〒444 岡崎市明大寺町西郷中38 電話 (0564) 52-9770 内線232番

- 2) テレホンサービスは利用の変更, 各週の利用状況などを常時お知らせしますので出張の前などに利用してください。

電話 (0564) 52-4625

- 3) プログラム相談(平日9:30~12:00, 13:30~16:30)

電話 (0564) 52-4626

- 4) 電子計算機センター受付

あて先, 電話は1)と同じで内線462番

昭和53年度共同研究(後期)実施一覧表

協力研究

〔後 期〕

金属ポルフィリンの磁気円偏光二色性の分子軌道法による解析

東北大非水研 野 沢 庸 則

分子軌道法による金属錯体の電荷密度分布

北海道大理 三 好 栄 作

含窒素カルバニオンのNMRによる研究

名古屋工大工 吉 野 明 広

金属錯体の電子構造の計算

名古屋大理学研究科 佐 野 充

SVL蛍光による励起分子の研究

東北大理 宇田川 康 夫

SVL蛍光による励起分子の研究

東北大理 茅 幸 二

大出力、可変波長、連続発振ピコ秒レーザーの開発

京都大理 中 塚 宏 樹

重水素置換炭化水素のマイクロ波分光による研究

上智大理工 山 口 一 郎

気相イオン-分子反応の速度定数に影響を与える諸因子に関する研究

山梨大工 平 岡 賢 三

Ion-molecule reactions and molecular evolution in dense interstellar clouds

京都大理学研究科 鈴 木 博 子

LASER CHEMICAL VAPOR DEPOSITION(CVD)

豊橋技科大 英 貢

有機ランタニド化合物のルイス酸性の研究

名古屋工大 尾 中 証

気相におけるNO(a⁴Π)

東京工大理 正 田 巧

不安定分子種の制御と有機合成への利用

京都大工 檜 山 為次郎

[CO(NO₂)₆]³⁻の分子軌道計算

東京大理学研究科 大 場 茂

分子性結晶の光電的性質

城西大理 日 野 照 純

黒鉛層間化合物の化学反応性および物性

京都薬大 大 橋 憲太郎

イオン分子反応CO⁺+CO→C₂O⁺+Oにおける内部エネルギーの役割

東京工大理工学研究科 本 間 健 二

蛋白質薄膜の電気的、光学的物性の研究

都城工専 中 原 祐 典

イオン分子反応素過程の理論的検討

東北大科学計測研 楠 勲

衝突による励起分子のエネルギー移動と化学反応

神戸大理 加 藤 肇

結晶内及び表面上分子クラスターの電子構造の計算

東京大物性研 大 西 楷 平

分子軌道法計算によるアミド化合物の分子内力場の研究

東京大薬学系研究科 菅 原 洋 子

高励起リードベルグ原子・分子の生成

東京大理 近 藤 保

分子の解離励起による高励起原子の生成

国立公害研 福 山 力

励起分子の回転異性体のAbinit MO-CI 計算

大阪市大理 西 本 吉 助

1, 2-および1, 3-ジキノシクロブタンジオン類の電子スペクトルと磁気円二色性スペクトル

熊本大理 山 口 裕 之

振動高励起分子のエネルギー移動と化学反応との関連

東京大教養 土屋 莊 次

エキサイプレックス系における電子移動素過程の研究

大阪大基礎工 又 賀 昇

固体表面の電子構造の理論

大阪大基礎工 永 吉 秀 夫

ポルフィリン光電極過程のダイナミックス

東京大理 相 馬 光 之

生理活性を有する物質の物理化学的性質

徳島大教養 吉 川 研 一

環状多座配位子を含むNi 錯体のスピン平衡

北海道大理学研究科 望 月 桂

遷移金属錯体の電子状態に関する理論研究

熊本大工 榑 茂 好

分子化合物の基礎的研究

北里大薬 中 川 節 子

興味ある物性をもつ環状有機化合物の合成に関する研究

愛知教育大 小谷野 錦 子

化学反応のポテンシャル面に関する理論的研究

関西大工 酒 井 章 吾

ニッケル(0)錯体を触媒とする高ひずみ化合物と電子欠損性オレフィンの反応に関する研究

名古屋大理学研究科 山 川 仁

他核NMR によるゲル中の水の状態分析

静岡薬大 片 山 誠 二

アミンの高分解能赤外スペクトル

東京大薬 坪 井 正 道

振動励起の化学反応に及ぼす効果

大阪大理 花 崎 一 郎

バナジウム(Ⅲ) 錯体を触媒とする光誘起窒素固定

東京工大工 小 野 嘉 夫

高分解能赤外分光法による分子構造の研究

東京大理 中 川 徹

非線型振動反応系の研究

郡上高校 早 川 俊 美

in vivo におけるヒドロゲナーゼ活性の測定

東京大理学系研究科 宇都野 恵

クロロフィル累積膜の半導体性と光電性

名古屋工大 奥 山 政 高

星間雲分子生成消滅に関するイオン分子反応モデル

東京工大理 山 崎 秀 郎

分子内エキサイプレックス発光による分子鎖運動の研究

京都大工 山 本 雅 英

招へい協力研究

〔後 期〕

分子導体の設計のための基礎的研究

東京大物性研 城 谷 一 民

光化学的に生成する高エネルギー物質としてのかご型有機化合物の研究

東北大理 向 井 利 夫

有機分子固体に於けるキャリア生成

学習院大理 小 谷 正 博

光化学反応の波長効果

京都大理 志 田 忠 正

高速分子積分プログラムJAMOL3 システムへの組み込み

北海道大理 佐々木 不可止

遷移金属錯体を用いる有機合成化学

豊橋技科大 伊 藤 健 児

シンクロトロン放射利用のための実験技術の開発

東京大物性研 菅 滋 正

研究会

〔後期〕

気相イオン反応研究（機器を用いた反応研究）

東京大工原子力工学研究施設 田村孝章

分子イオンの生成、反応と高分解能分光

分子研 広田栄治

多原子価化合物の構造と物性

分子研 井口洋夫

Molecular Processes on Solid Surfaces

分子研 塚田捷

太陽エネルギーに関する基礎研究の国際交流について

分子研 井口洋夫

溶液反応の熱力学と反応機構

東京工大 大滝仁志

遷移状態構造への理論と実験からのアプローチ

分子研 岩村秀

高分解能遠赤外分光システム

分子研 広田栄治

所長招へい協力研究（後期） 13件

施設利用 件

昭和54年度共同研究〈前期〉採択一覧表

共同研究

〔前期〕

固体表面の電子状態および表面化学反応

○京都大理 恩地勝 京都大理 西嶋光昭

東京工大理 安盛岩雄 東京工大理 宮崎栄三

大阪大理 池田重良 大阪大理 岸興作

大阪大工 足立裕彦 東京大理 相馬光之

北海道大触媒研 田中一 分子研 塚田捷

分子研 坂田忠良 分子研 川合知二

分子研 里子允敏 原研 佐々木貞吉

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 京京工試 松村知

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 東京工大資源研 広瀬千秋

分子研 斉藤修二

ヒドロゲナーゼの活性 — その電子伝達体の構造と物性を中心として

分子研 井口洋夫 静岡大教育 八木達夫

国立横浜大工 仁木克己 東京大物性研 大野和郎

東京大物性研 田村正平 大阪大蛋白質研 安岡則武

分子研 木村啓作 都城高専 中原祐典

Abinitio 分子力場の設定およびその応用研究

○北海道大理 大沢映二 分子研 岩村秀

分子研 伊藤翼 分子研 諸熊奎治

分子研 加藤重樹 横浜国大工 広田攘

名城大薬 寺田幸正 東京大理 宮坂平

分子の電子密度の精密測定および測定精度向上に関する方法論的研究

○東京大物性研	齊藤喜彦	東京大物性研	佐藤昭一
東京大物性研	今野美智子	東京大物性研	大場茂
東京工大工材研	丸茂文幸	東京工大工材研	田中清明
東京工大工材研	木島直人	理化学研	伊藤徹三
大阪大蛋白研	安岡則武	大阪大蛋白研	松浦良樹
大阪大工	笠井暢民	大阪大蛋白研	田中信夫
大阪大工	三木邦夫	分子研	伊藤翼
分子研	鳥海幸四郎		

協力研究

[前期]

分子軌道法計算によるアミド化合物の分子内力場の研究

東京大薬学系研究科 菅原洋子

励起金属原子の二原子分子による消光過程に対する非経験的MCSCF計算

青山学院大理工 水谷公子

反応系における分子の構造と反応性に関する理論的研究

大阪市大理 長村吉洋

ヘテロトロボン類の光電子スペクトルの帰属

熊本大理 山口裕之

NbSe₃ のバンド構造

東京大理学系研究科 島信幸

(SN)_x のバンド構造

東京大理学系研究科 押山淳

清浄及びガス吸着した薄膜の電子構造

電気通信大 神原武志

非経験的分子軌道法による分子振動スペクトル強度の算出

富山医科薬科大薬学 篠田裕之

分子軌道法による半導体表面の電子状態の研究

金沢工大学 西田昌彦

光化学反応の反応性に関する理論的研究

奈良教育大教育 山辺信一

固体表面の電子構造の理論

大阪大基礎工 永吉秀夫

ab initio 計算によるウラシル化合物の分子内力場の研究

東京大薬学 西村善文

高分解能赤外分光法による分子構造の研究

東京大理 中川徹

不安定分子のレーザー励起スペクトル

金沢大理 大橋信喜美

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

エチレンの非調和分子内力場

京都大薬学 町田勝之輔

ラジカル種の生成と高分解能スペクトル

東京大薬学 浜田嘉昭

分子の電子衝撃による高励起原子、分子の生成

東京大理 近藤保

モノシランガスのLASER CHEMICAL VAPOR DEPOSITION

豊橋技科大 英貢

励起分子の構造とエネルギー移動及び化学反応

神戸大理 加藤肇

光合成初期反応のピコ秒レーザー photolysis

帝京大薬学 池上勇

振動高励起分子のエネルギー移動と化学反応との関連

東京大理学系研究科 渡辺肇

パルスレーザーによる光化学反応初期過程に関する研究

東京都立大工 井上晴夫

インドール環と核酸塩基あるいはアミノ酸残基との分子間相互作用の研究

金沢大薬 伊藤道也

クロロフィル累積膜の半導体性と光電性

名古屋工大 奥山政高

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

東邦大理 梶原峻

光誘起界面電子移行に基づく光エネルギー変換の研究

東京大工 藤嶋昭

固体表・界面を利用した光化学反応と光エネルギー変換の基礎研究

大阪大工 岩見基弘

固体表・界面を利用した光化学反応と光エネルギー変換の基礎研究

大阪大工 平木昭夫

モリブデン錯体の光励起による空中窒素の固定

大阪大理 中村晃

化学反応によって生成した分子の内部エネルギー分布に関する研究

大阪大理 桑田敬治

振動励起分子の反応機構の研究

三重大工 佐藤博保

SVL けい光, 多光子イオン化による励起分子の研究

東北大理 茅幸二

SVL けい光, 多光子イオン化による励起分子の研究

東北大理 宇田川康夫

SVL けい光, 多光子イオン化による励起分子の研究

東北大理 三上直彦

連続発振ピコ秒レーザーの開発とフォトンエコーの研究

京都大理 中塚宏樹

芳香族分子性結晶における光イオン化過程の研究

学習院大 小谷正博

高分子の酸化反応

名古屋工大 堀靖郎

分子性結晶における高励起状態の研究

名古屋大工学研究科 小島康一

分子性結晶における高励起状態の研究

名古屋大工学研究科 高木清

固体分子錯体の光電導性

学習院大理 石井菊次郎

非線型振動反応系の研究

郡上高校 早川俊美

アルカリ金属-TCNQ-クラウンエーテル錯体の光電子スペクトル

大阪大工 野上隆

高分子の破壊の研究

市邨学園短大 坂口真人

ジフエナントロペリレンの光電導測定

東邦大理 藤沢捷二

窒素原子を含む多環芳香族化合物の合成

明星大理工 岩島聡

黒鉛層間化合物の化学反応性および物性

京都薬大 大橋憲太郎

新しい混合原子価化合物(Pt-oxime) X_n 錯体の基礎的研究

東京大物性研 城谷一民

Ion-molecule reactions and molecular evolution in dense interstellar clouds

京都大理 鈴木博子

TEPSICO 法によるイオン-分子反応の研究

東京工大理 日輪真人

Schumann-Runge 帯領域での O_2 の光化学的挙動

東京工大理 疋田巧

イオン-分子反応による星間分子生成の電算機シミュレーション

東京工大理 山崎秀郎

浮腫の分子生理学的研究

国立予防衛生研 逢坂昭

分子レベルからみた異物に対する生体応答

徳島大教養 吉川研一

シクロブテン環の縮合したシクロオクタテトラエンの研究

愛媛大工 戸田 美三夫

生理活性アザビシクロ化合物を生成する転位反応機構の研究

帝京大薬 高山 浩明

架橋芳香族化合物の合成および光化学反応

東邦大理 岩村 道子

^{17}O NMR によるオゾンド類の構造と反応の解析

九州大理 清水 宣次郎

金属-金属結合の研究

名古屋工大 尾中 証

含窒素カルバニオンのNMRによる研究

名古屋工大 高橋 憲助

^{17}O NMR 法による0-メチルチオベンゾイルオキシラジカルの構造の研究

和歌山大教養 中西 和郎

有機過酸化物の熱分解反応機構

筑波大化学系 藤森 憲

芳香族二座配位子を含む金属錯体の発光スペクトル基礎的研究

東北大理 佐々木 陽一

RR-trans-1,2-シクロペンタンジアミン金属錯体の構造解析

名古屋市大薬 後藤 正文

環状多座配位子を含むNi 錯体のスピン平衡

北海道大理学研究科 望月 桂

$[\text{Co}(\text{hexaen})]\text{Cl}_3$ の構造

名古屋大理 吉川 雄三

不斉リン化合物の配位した新しい金属錯体の分光学的性質と構造

大阪市大理 木下 勇

金属キレート環のコンホーメーションに関する研究

名古屋大理学研究科 伊藤 晴子

Mg-ポルフィンの非経験的LCAO SCF MO 計算

北海道大理 高田 俊和

金属錯体の電子状態の計算

名古屋大理学研究科 佐野 充

新規パラジウム(O) 錯体の合成

豊橋技科大学 伊藤 健児

酸・塩基複合反応剤による新反応の開発

京都大工 大嵐 幸一郎

遷移金属錯体による触媒反応の反応機構に関する研究

名古屋大理学研究科 山川 仁

興味ある物性をもつ結合芳香環化合物に関する研究

愛知教育大 小谷野 錦子

連続発振ピコ秒レーザーの開発とパルス幅測定法の研究

京都大理 岡田 淳平

招へい協力研究

〔前期〕

CO_2 レーザー励起遠赤外レーザーの製作

大阪大工 山中 正宣

遠赤外レーザー磁気共鳴分光器の製作

理化学研 粕谷 敬宏

二分子膜におけるエネルギー移動

東京大工 鋤柄 光則

有機溶媒中における層状化合物のインターカレーションとエネルギー蓄積

山口大工 松田 好晴

分子性固体内における電子の移動過程

お茶の水大 丸山 有成

分子結晶における高励起状態の研究

名古屋大工 伊藤 憲昭

ペルオキシメチレンの化学

筑波大化学系 安藤 亘

酸素および窒素配位のMacrocyclic complex

広島大薬 木村 栄一

ヘム蛋白酵素活性中心の電子構造の分子軌道法による研究

東北大非水研

野沢庸則

極端紫外連続光源の研究

東京大原子核研

片山武司

極端紫外連続光源観測系の研究

京都大理

加藤利三

研究会

[前期]

Theoretical Aspects of Chemical Reactions and Molecular Interactions

分子研

諸熊奎治

分子衝突の動力学

東京大理

朽津耕三

レーザーの化学反応への応用

分子研

吉原経太郎

溶液内における分子間相互作用

東京工大総合理工学研究科

大滝仁志

分子科学のための大型プログラムと言語の開発

分子研

柏木浩

分子研コロキウム

第67回 12月6日(1978)

不飽和有機分子を配した dissymmetric 金属錯体のCDスペクトル (伊藤 翼)

第68回 12月15日(1978)

Dephasing of coherently excited molecular vibrations in simple liquids.

(J. D. W. van Voorst: University of Amsterdam)

第69回 12月20日(1978)

Cw色素レーザーによる可視域の高分解能分光 (柿本 政雄)

第70回 1月17日(1979)

Semiconducting CdTe made by electrodeposition (L. E. Lyons: University of Queensland)

第71回 1月18日(1979)

地震対策 1.宮城県沖地震を経験して (伊藤 光男: 東北大 理, 分子研)
2.分子研化学試料室における地震対策 (安田 新)

第72回 1月31日(1979)

カルボキシペプチターゼAのスライディングメカニズムに関する分子軌道法による研究
(中川 節子)

第73回 2月7日(1979)

SOR光源を用いた高分子延伸配向薄膜のC_{1s} 励起偏光軟X線吸収スペクトル
(関 一彦)

第74回 2月14日(1979)

芳香族カルベンとその遷移金属錯体 (川田 勇三)

第75回 2月28日(1979)

ラジカルイオンの電子スペクトルとその光励起効果 (志田 忠正: 京大 理)

第76回 2月21日(1979)

ポルフィリン薄膜の電子状態と界面光化学反応～光エネルギー変換の基礎過程との関連
(谷村 克己)

第77回 4月11日 (1979)

ポリエンの光異性化の動的機構 (大峰 巖)

第78回 4月18日 (1979)

ヘム蛋白質チトクロムC₃の電氣的性質 (木村 啓作)

第79回 5月9日 (1979)

シンクロトン放射の利用 (渡辺 誠)

第80回 5月16日 (1979)

積層化合物 (坂田祥光：阪大 産業科学研, 分子研)

所 内 ニ ュ ー ス

受 賞

○川合知二助手は「電子分光法による固体表面反応の研究と光エネルギー変換への応用」の業績に
対して本年4月日本化学会進歩賞を受賞した。

研究所創設披露式

○研究所が設置されてから5年目を迎え、また建物等もほぼ完工したので、「分子科学研究所創設
披露式」を次の予定でおこないます。

昭和54年11月8日(木) 創設披露式

◇ 11月9日(金) 一般公開

◇ 11月10日(土) 記念講演会

編集後記

「分子研近況」にもあるように、昭和53年度末をもって、研究所の建設も一段落を迎え、その建物の大部分が完成するに到った。人員的な充実は不十分であるが、創設以来5年目を迎えて、本年11月には「創設披露」を行うこととしている。

「分子研レターズ」には内外の研究者の忌憚のない御意見をいたゞいている。上記のような時期に際して、さらに一度全国の分子科学の研究者あるいは分子科学研究会と研究所の関係について考える機会を得たいと思い本号の「レターズ」を企画した。大へん書きにくい面もある主題であるが、適切な御意見を頂けたことを感謝している。

吉 原 經太郎

斎 藤 修 二

◎ 交 通 機 関

東京方面より

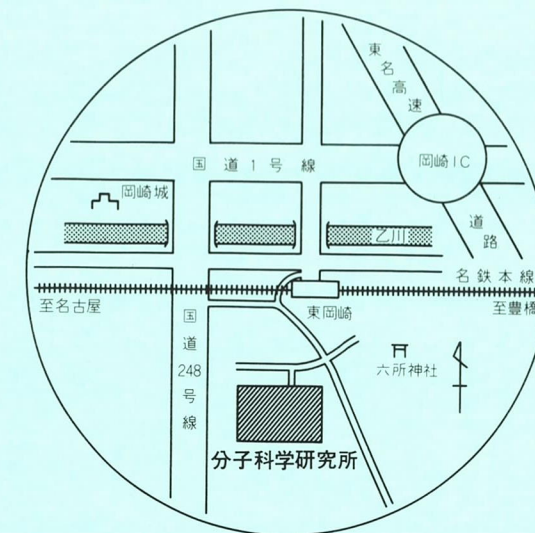
新 幹 線 豊橋駅下車

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
相關領域研究系	(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

