

ISSN 0385-0560

INSTITUTE FOR MOLECULAR SCIENCE

分子科学研究所

分子研レターズ

昭和55年11月

NO. 8, 80



主要な建物の建築が終了した昭和54年度には、ひきつづいて敷地内の環境整備が行われた。実験棟、研究棟、センター施設棟に囲まれた研究所正面は、池、芝生、植込み、樹木、赤レンガの遊歩道から成る広場になった(写真)。センター施設棟裏から研究棟裏へ続く桜並木のプロムナードも美しい。

目 次

視 点

部分と全体	分子研 赤 松 秀 雄	1
-------------	-------------------	---

レターズ

元さんのこと	分子研 藤 山 常 毅	2
分子研教授会議	東大理 伊 藤 光 男	3
共同研究雑感	東大物性研 齋 藤 喜 彦	4
客員教官の任期を終えて	理 研 高 見 道 生	6
錯体と極低温	京大理 辻 川 郁 二	7
Looking Back on a Most Remarkable Autumn	チュービンゲン大 A. Rieker	9
Lasting Impressions, Parting Shots	ウィスコンシン大 R. D. McKelvey	11

研究室紹介

基礎電子化学部門(I)	分子研 吉 原 經太郎	17
基礎電子化学部門(II)	分子研 坂 田 忠 良	20

岡崎コンフェレンス

第9回岡崎コンフェレンス報告		
反応中間体の分子設計—カルベン—の分子科学—	分子研 岩 村 秀	25
第10回岡崎コンフェレンス報告		
分子性結晶の励起子—輸送過程の見地から—	分子研 井 口 洋 夫	27

研究会報告

太陽エネルギーの貯蔵と転換	分子研 井 口 洋 夫	30
層状化合物の物理と化学	電通大 佐 野 瑞 香	31
ミセル系の構造と機能	東京理大工 北 原 文 夫	34
極端紫外連続光(UVSOR)	分子研 木 村 克 美	36

分子科学研究将来計画	分子研 広 田 栄 治	38
ベンゼンおよびアザベンゼン類の光化学初期過程	分子研 吉 原 經太郎	41
Purification and Crystal Growth for Molecular Crystals	電通大 佐 野 瑞 香	43
非ポルフィリン系マクロサイクリック錯体の構造と機能	分子研 伊 藤 翼	45
光化学への分子線の応用	分子研 木 村 克 美	46
	分子研 正 畠 宏 祐	
高性能大型レーザーの開発と応用	分子研 広 田 栄 治	49
外国人研究員紹介		
K. H. Grellmann 博士について	分子研 吉 原 經太郎	51
センターニュース		
電子計算機センター		52
極低温センター		54
機器センター		54
図書館のこれまでと今後	分子研 吉 原 經太郎	56
昭和55年度共同研究〈前期〉採択一覧		59
分子研コロキウム		65
所内ニュース		67
編 集 後 記		68

視 点

部 分 と 全 体

分子研 赤 松 秀 雄

ハイゼンベルクの『部分と全体』(山崎和夫訳)を読まれた人は多いであろう。「私の生涯の偉大な出会いと対話」という副題があるように、1919年著者19才での「原子学説との最初の出会」の章から1965年65才での「素粒子とプラトン哲学」の章に至る20章にわたって自らの思想の遍歴、開眼、成熟のあとを偉大な先達、交友との対話、あるいは回想、ときには創作かと思われるほどの情景描写を伴って語られている。この本を読む者は、おそらく彼自身が経験した科学への情熱が再び呼び起される感動をおぼえるであろう。しかし、このような意味でこの本を紹介しているのではない。ハイゼンベルクが自己の生涯を顧みて、強く読者に訴えんとする意図がみられるこの本に『部分と全体』という表題がつけられていることを謎のようにさえ思えるからである。著者はそのことに関して直接何も語っていないが、おそらくその生涯を通しての重大な関心事であったためと思われる。巻末の訳者あとがきで、山崎和夫氏により「本書を通読していただくと、はじめてこの本の表題『部分と全体』という言葉の意味が読者それぞれの解釈に従って解つていただけるものと思う」とある。

部分に関して思い出されるのは、デカルトの『方法序説』であろう。これもまた著者の思想の遍歴のあとを克明に語るものであるが序説では著者の到達した確信として、いわゆる4箇条の規則がのべられている。特にその第2箇条——“私の研究しようとする問題のおのおのを、できうるかぎり多くの、そうして、それらのものをよりよく解決するために求められるかぎり細かな、小部分に分割すること”(岩波文庫版、落合太郎訳)——はデカルトの提唱の中心であり近代科学を特徴づける方法論の基となっている。この箇条は分割の規則とも選択の規則ともよばれる如く、科学的研究の第一のアプローチであり、これなくして科学的研究は行われがたいであろう。

しかるに、今日では、細分化は限りなく進み、そのおのおのが専門化する。そのことがしばしば進歩とさえみなされる。研究者は自己の研究課題は何らかの部分であり、そのことの確信で自らをなぐさめ、またその立場を弁護する。それが基礎研究とよばれることさえある。しかるに細分化と専門化が進むに従って「全体」とは何であったかを見失う傾向さえ生じてくる。「全体」のあることさえ忘れられる傾向がみられる。全体を見失った部分は、もはや部分でさえない。全体とは何か。全体もまた拡大されいよいよ複雑となる。ハイゼンベルクの青年時代は、物理学の世界でプランク

やアインシュタイン、ボーアらによる全体の探求が行われ結実した時代であった。しかし後年のハイゼンベルクの意図した全体とは、さらに人間的なものを含んでいるかにみえる。

われわれの身近かな問題に戻ろう。化学の分野の細分化、専門化はとどまることをしらない如くである。われわれは全体に関してどれほど考えたことがあるであろうか。たとえば分子科学は化学の一部分であるのか。それとも化学に関して全体を探求する立場であるのか。私は後者であることを願望している。

(55年8月)

レターズ

元さんのこと

分子研 藤山 常毅

東京の自宅にあって岩田からの電話で起こされた時、私はまったく「意外な感じ」を持たなかった。元さんはそういう類の終り方をすると常々思っていたからだろう。彼は間違いなく上機嫌であったに違いない。何かを思いついてあのごつい身体をまつしぐらに実験室に運ぼうとしていたのだろう。実験家にとって最も精神の昂揚する瞬間に終わった彼に羨望の念すら覚えた。

元さんと私の出会いは本郷の学部学生の頃だった。彼はひとつ下のクラスで一番うるさい男であったし、私も私のクラスで一番うるさい男であったから当然普通の仲良しという訳にはいかず、何かと言えば言い争っていた。大学院時代、彼は物性研で仕事をしており、めったに会うことはなかったが、会えば必ずつき上げを喰った。大阪大学に移ってからしばらくは、友人の結婚式とかおりの学会で会う程度であったが、会えば必ず痛められた。そのやり方は豪快かつ爽快であった。

昭和46年当時、お茶大の細矢さんとある考えを持って研究グループ作りをしていた。元さんに話を持ちかけたところ、「真似目にやるなら」力を貸すとのことであった。この通称「液体グループ」は比較的元さんの気風に適ったものらしく、また仲間達も元さんを大切にした。添付した写真は、昭和50年春、川渡の東北大学研修所での研究会の際のもので、フランス留学から帰国したその足で仙台までやって来た元さんの姿が見える。この頃からの彼のテーマ展開は柔軟さと膨らみを感じさせるようになっていた。当時の私は都立大学にあって、一人で悪戦苦闘していたのだが、研究テーマのことや講義のことやいろいろと援けてくれた。特に、「分子運動と時間相関」という集中講義は学生の心に鮮烈な印象を残した。

分子科学研究所への転出に際して奇しくも機を同じくした私には、転出前後の彼の心の動きが手にとるようにわかる。稀に見る天稟と、十分に熟したアイ



ディアとが、花咲くにふさわしい舞台を与えられたのである。昭和55年1月、彼は間違いなく幸せであり上機嫌であった。最後に彼に会ったのは研究所正面の坂の途中であった。健康を害していた私は東京に帰ろうとしていた。元さんは怒った。教授がふらふらと東京にばかり戻ってはいけない。「飯ぐらい俺が作ってやる」から岡崎に居て研究に専念しろといった。「人のやり方に口出しするなよ」と返事しながら、私は嬉しかった。

元さんは坂を登り、私は坂を下った。

分子研教授会議

東北大理 伊藤光男

2年間の電子構造部門の客員教授の任を終え、もうこれで分子研から解放されたと思っていたところに花崎さんから何か書けとの命令でしぶしぶ筆を取ることにした。

分子研の客員教授、助教授の任務の1つは毎月1回開かれる教授会議に出席することである。教授会議は毎月第3週の金曜日の1:30pmから5:00pm頃まで行われるが、いまや陸の孤島と化した仙台からこの3~4時間の会議に出るのに東北本線、新幹線、名鉄と乗り継いで往復にどうしても足かけ3日かゝる。最初の1年半はほとんど毎回出席したが、最後の半年はこちらでの講義とぶつかり欠席せざるを得なかった。いつかのこのレターズで、細矢さんが教授会議の雰囲気を変えてくれた。私は教授会議の前身である創設協力者会議というのにも関係していたことがあるので、どうしてもその変り振りが目につく。第1に会議室が大変立派になり、部屋は大きく椅子の座り心地もよく、所々にスピーカーまで用意され至れり尽くせりで、大学の会議室とは大分違うようである。机は長円形に配列されていて真中かなり大きな空間があり、客員を含め総勢30名あまりの教授、助教授がぐると位置を占めている風景はかなり壮観である。所長は長円形の机の一方の隅に位置し、そこからは皆の顔がよく見えるようになっている。この机で非常に気になるのは、机の内側は板張りされており、相対する人の足は見えない仕掛けになっていることである。誤って書類や鉛筆を真中の空間に落すと、机をはいくぐって取ることはできず、まさか会議中に机を乗り越えて取りに行くぶざまなことは出来ないで、そうなったら困るだろうなとか、誰か物を落さないかなーと思っていたが、私の任期中は残念ながらそういう事態にはぶつからなかった。人間、足が見えなくて上半身だけ見るとえらく立派に見えるものである。それもかなりの距離をもって相対していると近寄り難い威厳まででてくるのは不思議である。分子

研の会議室の机の板張りが無く、皆んなの足が丸見えの状況を想像すると、格好はよくないが壮観であろうと思う。あの人はいつも貧乏ゆすりをしているとか、スリッパが大分くたびれているとか互いに観察してenjoyできるであろうし、第1に人間臭い近親感が生れるように思う。もともと、教授会議のメンバーは互いに知りつくした間柄であり、互いに遠慮のないことが言えるはずであるのに、あの会議室に入って座ると、どうもごちなくなり、皆んながえらく見えてつい発言も遠慮するといったことの原因の1つはこの机の板張りにあるように思う。

どうも教授会議であまり発言しなかった自分の責任を机におしつけた感があるが、これでも最初の内は無理な勇気を奮い立たせて発言したつもりである。最初の頃は客員は隅で小さくなっているのが分相応と考え、所長から最も離れた所に位置したのであるが、間もなくそこは最悪の場所であるのに気付いた。遠いとは言えあまりにも所長の真正面であり、絶えず所長の視線にさらされる。できるだけ視線が合わないようにならぬ方角を見るように気を付けていたつもりであるが、時々視線が合うのは避けられない。その途端に“客員の方の意見は?”とくるのである。他に客員の先生方は沢山いらっしやるのに金縛りにあった格好でついあらぬことを発言し、皆さんのひんしゅくを買ったものである。その後は所長の視線の死角になる所がよいと考え所長の近くに座るようにしたが、結局はあまり効果はなかったようである。

分子研の教授会議が終る度にかかなり空しい気持ちで帰路についた。帰りはよく朽津さんと一語で、きまって豊橋でうなぎ弁当とビール1缶を買って新幹線にのりこんだが、朽津さんは東京までだからまだいいとして、こちらはさらに上野から4時間、最近とみに揺れのひどくなった東北線で揺られることを考えるとますます空しさがつる一方であった。考えてみると大学の教授会も似通ったもので空しさを感じるが、内職ができるのがせめてもの救いである。分子研の教授会議では内職はまずできそうにない。できないとすれば、皆が思ったことをどんどん発言し会議をもっと面白いものにできないものであろうか。とくに若い方々の発言が少ないのは大いに気になることである。

どうもつまらぬ事を書いてしまったが、2年間の客員期間中、机の板張りのことばかり考えていたわけではなく、研究を含め色んな意味で私には大変有意義であった。その反面分子研に寄与する所があまりにも少なかったことを恥じている次第である。客員期間中、赤松先生、井口先生には身にあまる御好意をいただき、また吉原教授をはじめ電子構造研究系のメンバーには大変お世話になり、色々と御迷惑をおかけしました。こゝに厚くお礼申し上げます。

共同研究雑感

東大物性研 齋藤喜彦

分子研レターズに何か書くようにと御依頼を受けたので筆を執った。考えて見ると分子研と筆者とのかわり合いはずい分長く、研究所がまだ影も形もなかった頃からであった。そして昭和51年10月から2年半相關領域研究系の客員教授としてお世話になったが、最初のうちは部門が完成しておらず専任教官は居なかった。研究設備も大して整備されていなかったのもので、教授会議やその他の会議に出席することが主要な任務であった。小田急、新幹線そして名鉄を何回利用したであろうか。

とうとう読売ランド小田原間の駅名は全部暗記したし、(ただし急行停車駅のみである。)新幹線に至っては居眠りからさめて窓外の景色を見ると直ちにどこを走っているか分るようになった。この往復が筆者にとっては種々と有益であった。多くの人が同じ感想をお持ちのことと思うが、進行中の列車の中は意外に孤独なものである。これを利用して論文の校正や文献を読むのに利用させて戴き大いに能率が上がった。また分子研に居ると電話や来客にわずらわされることがないので仕事が大いにはかどったのも有難いことであった。岡崎は昔の面影をとどめており親しみやすい街である。名産大樹寺松風、きさらぎなどを買って帰るのが楽しみとなった。とくに松風の素朴な風味は忘れがたい。

こうしている中に研究所は一応完成し、研究活動が盛んになるにつれて研究上のかかわり合いができて来た。

分子を研究対象とするこの研究所に回折法で分子構造を決定する装置——X線回折計がないのはおかしいという議論は早くからあり、機器センターに四軸型X線回折計が入ったのは昭和54年のことであった。分子科学研究所が設立される以前に特定研究「分子科学」が実施され、回折X線強度の精密測定によって、分子内の結合電子を検出するという目的で、ささやかではあるがいろいろと工夫をこらした単結晶用自動X線回折計が完成していた。このためには会社から技術者が一人我々の研究室に一年間留学し、結晶構造解析とはどんなものか体験した上で試作に協力してくれた。この特定研究の成果をふまえて新しい回折計は完成した。最近この種の測定はあまりにも自動化されすぎて、試料を取付けたらあとはボタンを押すだけであとは結果が出るのを待っておればよいという形式のものが多くなって来たが、精密測定用の回折計のばあいは稍行き過ぎである。研究者が自分の目的に応じて測定の方法や条件を自由に指定できるよう入力プログラムを自分で改変できるように設計されている。この回折計は上手に使いこなせば、現在では最高の精度が得られるはずであ

る。

さて電子密度分布を精密に測定するには原子の熱振動をおさえるためどうしても低温で実験しなくてはならない。試料冷却装置を作るため、だれいうともなく共同研究を申請することになった。幸にもこれが採択され実行できたが、分子の電子密度分布を精密に測定し結合電子の分布を見出し化学結合の本質を探る分野は、最近急に研究が盛んになり初めた領域で世界全体を通じて研究者の数は決して多くはなく、我国では若い人を含めても僅かに十数名に過ぎない。この共同研究はこれらの人々を非常に元気づけることになった。

阪大蛋白研、工学部、理研、東工大そして我々の研究室で研究グループを組織し共同研究がはじまった。共通の目標をもった研究者が互に成果を語り合い、悩みを打ち明け相談することがこんなに有効とは思ってもよらなかった。第一回の研究会のあと、参加者の顔つきはひどく明るく楽しそうであった。この種の会合を重ね、また個々の研究者が分子研を訪ねることによって、低温装置の試作は進展した。我々の研究室で試作した手造りのあまりみばえのしない装置で 90 ± 2 Kに長時間保つことに成功した。これを原型として、鳥海君たちの努力によってスマートな試料冷却装置が完成し動き出したのが昭和54年暮であった。目下回折計は多くの研究者によって利用されている。

このような次第で、ささやかな低温装置を中心として多くの研究者が分子研を交流の場として利用し、お互に(所内、所外ともに)得るところが多かった。現在分子研には立派な装置がいくつも整備されている。惜しいことにはそれらを十分使いこなす研究者の数は十分多いとは言えない。所外の研究者が分子研を守り立てて共同研究を益々盛んにしなくてはならない。

客員教官の任期を終えて

理 研 高 見 道 生

早いもので、2年間の任期がたちまちのうちに過ぎてしまった。この間色々お世話になった所長はじめ所員の方々、特に研究に御協力頂いた広田、斎藤両氏をはじめとする分子構造系の方々にまず心からお礼を述べたい。また任期中に理研の様な所では得難い経験を色々させて頂き、感謝している。

客員教官の職務の果し方にも色々な形があると思うが、私はもっぱら実験をさせて頂いた。分子研の様な共同利用研究所で、限られた時間内に一人で能率よく研究をおこなうためには、研究テーマやアプローチの方法等をあらかじめよく考えておく必要がある様である。たとえば、当然のこと

であるが hard 面での開発が必要な研究を限られた時間内におこなうのはあまり能率が良くない。私の仕事もどちらかといえばこれに近いものであったが、幸にも軌道にのり、一つ仕事をまとめる事ができてぼっとしている所である。また分子研を利用された方は誰しも経験することと思うが、滞在日数が限られているためつい欲張って夜遅くまで仕事をする事になる。私は比較的自由に時間がとれたので、2年間の任期中外国出張中の3ヶ月を除くと平均して月に一週間位を分子研で過した事になるが、やはりこの習性で仕事をしたため、任期が終った時は正直にいいささかくたびれた感じであった。

日頃住みなれた自分の研究室をはなれて研究をおこなう事には色々良い点がある。私の様な物理出身者（といっても半分位はすでに chemist のつもりであるが）が化学系の研究室へ加えて頂いた結果、それぞれの分野における研究に対する評価やアプローチの仕方の相異等を多少なりとも知った点で、得る事が非常に多かったと思う。異なる分野の間の交流は科学の進歩にとって非常に大切であると思うが、この点から私は研究所を構成する研究者の専門分野はあまり homogeneous でない方がよいのではないかと考えている。

分子研について一番強く印象に残ったのは、やはり何といても豊富な予算、設備と広いスペースであった。最近日本でも基礎研究にかなりの額の予算がつく様になったが、それでも分子研の研究費はこの分野としては抜群で、高い activity と共に分子研を世界の第一級の研究所としている。満足なレーザー一つ買えない私にはまったくうらやましい限りであるが、しかし考えようによっては少ない研究費をやりくりして良い研究結果を出すのもまた研究の醍醐味の一つではないだろうかなどと、分子研の装置を横目で眺めながら自分自身を慰めている次第である。

理研の様な歴史の長い研究所にいと、終身雇用制度下の日本で、しかも昨今の様に人の流れが悪い時代における研究所経営のむずかしさ、またそれに伴って起る矛盾といったものがいやでも目につく。新らしく建設された研究所の寿命は10年であると言われるが、年老いた組織が自分自身の力で若返るのはパーキンソンの法則をまつまでもなく大変むずかしい事の様である。分子研についてはこの様な心配はまずないとは思いますが、現在の activity を長く持続させるためには、やはり何か思い切った処置をとる必要があるのではないだろうか。この意味で10年後、20年後の分子研がどのような姿になっているか注目したい。

任期終了間近になって、私の大学時代からの友人である曾田君が事故でなくなった。そのうちに酒でも飲みながらゆっくり話そうと思いつ、のびのびになっていた矢先の事で、まったく残念でない。曾田君の冥福を祈ると共に、事後処置および今後の事故の防止について万全を期されることを心から願う。分子研に限らず、first aid の用具等を見ても、安全管理に対する理解が日本ではまだ低い様に思う。

色々と勝手な事を書いてしまい、諸先生方のお叱りをうけそうであるが、内情をあまりよく知らぬ者の戯言としてお許し頂きたい。最後に感想を一言——物理と化学の壁は厚かった。

錯体と極低温

京大理 辻川 郁二

分子研に極低温センターが完成して一年半が経ち、今後極低温における研究が活発に行われることが期待される。私は錯体の極低温での諸性質の研究に携わっているが、ふりかえてみると結晶中における分子と錯体の振舞にはいろいろと共通点が多い。結晶中で分子はほとんどその独自の性質を示しながら、隣接分子間の相互作用のために分子集団としての特徴をも示すようになる。結晶中での錯イオンについても全く同様のことがいえるのであるから、結晶中での錯イオンをそれ特有の性質をもった分子とみなして差し支えなからう。ここでは、主に錯体結晶の諸性質の研究における極低温の効能についてのべてみたい。分子の極低温における研究をなさる方に少しでも参考になれば幸いである。

従来結晶における錯イオンの構造と電子状態の研究に低温ないし極低温がしばしば用いられていた。ひとくちでいうなら、より高い温度では大きな熱運動、主として格子振動のためにおおいかくされている錯体の素顔を明らかにすることが低温を用いる理由とあってよいであろう。理解をたやすくするため液化という相転移を例にとってみる。原子なり分子の集団からなる系では本来粒子間に引力的な相互作用がある。粒子の熱運動がこの相互作用にうちかつ高温では気体であり、相互作用が熱運動にうちかつ低温では液体となる。したがって、相互作用の小さい粒子の集団程低い温度で液化することになる。既存する原子、分子の中では、He の液化点が4.2K と最も低く、He 原子間の相互作用が最も小さいことを示している。これからわかることは、物質内にある相互作用が小さい程その性質を調べるのにより低い温度を必要とするのであり、そのための冷媒としても相互作用の小さい系を用いねばならぬことである。

さて鉄族錯体の d 電子の関わっている相互作用の中で、そのエネルギーが小さく、低温ないし極低温を用いて始めて適確に捉えられるものは、低対称結晶場とスピン軌道結合との二次摂動による相互作用（エネルギーのおおよそ $\leq 100\text{cm}^{-1}$ ）、ヤーンテラー相互作用（ $\leq 100\text{cm}^{-1}$ ）、隣接錯イオン間の交換相互作用（ $\leq 10\text{cm}^{-1}$ ）、磁場との相互作用（ $H=10^4\text{Oe}$ で $g\mu_B H \sim 1\text{cm}^{-1}$ ）、励起子相互作用（ $\leq 0.1\text{cm}^{-1}$ ）、隣接錯イオンのスピン双極子間相互作用（ $\leq 0.1\text{cm}^{-1}$ ）などであり、その相互作用

の大きさに相当する程度の電子準位の分裂が生じている。ところで、 kT ($T=1\text{ K}$) $= hc\bar{\nu}$ ($\bar{\nu}=0.70\text{ cm}^{-1}$) $= g\mu_B H$ ($g=2.0$, $H=7.5\times 10^3\text{ Oe}$) がなりたつので、 T , $\bar{\nu}$, H をそのままエネルギーの単位として用いることができ、ごくあらっぽく $1\text{ K}\approx 1\text{ cm}^{-1}\approx 10^4\text{ Oe}$ と覚えておくと便利である。例えば、交換相互作用とスピン双極子間相互作用を研究するには、それぞれ、 10 K 以下と 0.1 K 以下の極低温が必要となることがわかる。

まず錯体の分光学についてのべる。錯体でも分子でも同様であるが、同じ電子配置をもった状態間のスピン禁制遷移の線スペクトルでは、温度を下げると寿命幅が狭くなり、またESRではその上にボルツマン分布が効いて感度がよくなることはよく知られている。そして高温では線幅にかくれていたような小さな初期分裂、ゼーマン効果、圧力効果なども測定にかかり、 g 値、低対称結晶場、共有結合性、ヤーンテラー効果など単一錯イオンについての、また交換相互作用、励起子相互作用など錯イオン集団についての豊富で貴重な知見がえられる。励起子については分子結晶における程なじみ深いものでないが、励起子と後程のべるマグノンとの同時励起によるスペクトルが存在し、その型から励起子分散について重要な知見がえられる場合がある。

つぎに錯体の磁性についてであるが、隣接イオン間の交換相互作用がスピンの熱運動にうちかつ高温では常磁性であるが、それらの大小関係が逆になる低温では磁氣的規則状態、大抵の場合反強磁性状態となって隣接スピンの向きは逆平行になる。しかし 0 K でない限りスピンは熱的にゆらいでおり、交換相互作用がばねの役目をして、このゆらぎは格子振動や励起子同様、結晶中を伝播し、マグノンという準粒子として取り扱える。交換相互作用、マグノン、ひいては磁氣的規則状態は磁氣的測定その他、分光学的測定、熱的測定、中性子線回折などによってその様相が明らかとされる。また多核錯体の場合には、低温における磁気測定から多核錯イオン中に存在する交換相互作用の種類、数、大きさについて正確に知ることができる。分子やラジカル塩の場合にも、スピン磁性が必ずしも基底状態についてと限らないが、低温で問題となることがしばしばあろう。

つぎに電気伝導性についてふれておく。この10年間、遷移金属錯体、なかでも平面四配位Pt錯体の部分酸化塩において、Ptイオン間の $d_{x^2-y^2}$ 電子の重なりから生じる一次元的電気伝導性が脚光を浴びてきた。しかし低温にするといわゆるパイエルス転移がおきて、Pt格子が長周期的に歪み、金属的から半導体的への転移をおこす。この転移はヤーンテラー効果と類似点があって、電子系と格子系の相互作用が効いて、格子が歪むと共に電子がそのエネルギーを低くとるために局在化する転移である。同様に有機電荷移動錯体の研究も盛んで、代表的なのはTTF-TCNQである。この場合も低温でパイエルス転移をおこす。これらの研究が盛んになってきた理由の一つは、無機、有機錯体を問わず低次元系において高温超伝導体出現の可能性が秘められていることである。今年になって、 $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ という化合物が 12 kbar の圧力下、 0.9 K で超伝導体となったという報告がなされて

おり、 π 電子系での初めての超伝導体といえる。これはパイエルス的な電子格子相互作用に、超伝導的すなわち電子対を形成する電子格子相互作用がうちかつためであり、たゞこの相互作用が小さいことを示している。電子対を形成する相互作用が大きい系が見つければ、それはより高温で超伝導体となる。既に1950年にロンドンによって、生体高分子で常温で超伝導が完現しており、生体機能に重要な役割を果しているという示唆がなされており、分子集団の重要課題の一つとなる可能性がある。

今後、分子集団の極低温における研究で新しい現象が発見されたり、有意義な方法論的手段が開拓される場合にも、それらは冒頭にのべたようにある種の相互作用が熱運動にうちかつことに基づいているであろう。

Looking Back on a Most Remarkable Autumn

チュービンゲン大 A. Rieker

When in June 1979 Professor Hiizu Iwamura, IMS, Division of Applied Molecular Science, informed me that my proposed visit to Okazaki as a Visiting Professor had been approved, I already saw myself as a real professional. As far as language, culture and religion, food and eating habits were concerned, the incomparable natural beauty interspersed with imposing temples and shrines, the politeness and hospitality of the people and, of course, the chemical research, the enthusiasm for work and economic power in this land of the rising sun, all these first-time experiences, so masterfully described by my predecessors in their IMS letters, were already behind me. Had I not been in Japan before, in the autumn of 1973, for 15 weeks, also at the invitation of Professor Iwamura (then at the University of Tokyo) and Professor Teruo Matsuura (University of Kyoto)? And had we not also had the pleasure of having Professor Iwamura and Professor Nishinaga (University of Kyoto) as our guests for several months, in 1974 and 1975 respectively, at our Institute and furthermore the privilege of being able to attend lectures given by numerous other Japanese colleagues in Tübingen? And last but not least, was not my first post doctoral fellow (1969/1970) Dr. Yasuo Butsugan, now Professor at the Nagoya Institute of Technology?

Having, in 1973, primarily got to know the large towns of Tokyo, Kyoto, Nagoya, Kobe and Fukuoka (as a foreigner I managed best in Tokyo) and remained at the State Universities, this time I ventured to Okazaki, a place I, at first, couldn't even find on the map. It was for me a completely new type of Institute, one which had been described to me as being

similar to a Max Planck Institute in Germany, and so I was, of course, filled with curiosity.

I would like first to mention several things to do with non-academic life as well as with Chemistry in general which have, or have not changed in Japan since 1973. Let us begin with the language problem. I, unlike Dr. Siebrand (B.L. No.3), found that the standard of English, especially among younger colleagues, has improved on end (other languages, such as French or German are seldom to be heard). Unfortunately the same can not be said for the people in the street, restaurants or in the shops, especially in Okazaki! Here it would be bordering on a miracle if you met someone who could speak English. Just try getting a taxi from the Iga Hachiman shrine to the Yamate Lodge, or buying size 29 shoes in a shop or ordering squid in one of the little Japanese restaurants near Higashi Okazaki Station. Sometimes you may be lucky, after a lot of sign-language and gesticulation. The best thing to do would be to learn Japanese. And not just for this reason but also because it is only through the language that you can fully appreciate the literature and thus the culture. I tried it three times, the last attempt was three weeks ago—it was once again in vain!

Nowadays you can find a television set even in the smallest hotel room—at Yamate Lodge too. Advertisements form a substantial part of Japanese television, unlike, say, German television, but when you can not speak the language it isn't too bad at all. In fact, television is really your only means of communication for you have direct visual contact with the subject matter. Hence it was indispensable for the news and especially for the weather forecast (in September the symbol for typhoon is quickly learned and also what is actually meant by it). Something I will also never forget, thanks to the many live broadcasts, was the whole paraphernalia of the Japanese parliamentary elections and the obvious difficulties experienced in electing the prime minister.

Without a doubt Japan has become cleaner. You can see this in supermarkets and also in small corner shops, on public transport, on the streets, at the coast—and in toilets. And yet I am still of the opinion that the Japanese continue to commit many sins against Nature. If you look at towns like Tokyo, for instance, then you would be tempted to believe that anyone could erect any type of building anywhere (if you know the strict European building regulations, you might sometimes long to be in Tokyo). In fact, many scientists seem to have a somewhat troubled relationship to their natural surroundings and their cultural and religious past. Can this be linked to their, for us, very intensive daily penum? At any rate, there are exceptions, I climbed one of the highest mountains in Shikoku with Fumio Toda, Professor at the University of Ehime, visited many temples and shrines with Dr. Nishinaga as well as watching games of Bunraku and Noh and Dr. Kawada, IMS ("Mr. Kabuki") helped greatly to increase my understanding of Kabuki. And I would also like to mention the people from the IMS administration who sang the song of Fujiyama so movingly in the bus

on the staff outing to Shizuoka.

This atmosphere which Nature conjures up is for a foreigner most intensively experienced in a small town like Okazaki. Here almost everything is accessible on foot—sometimes it is the only possibility as there is no other means of transport. You pass by paddy fields, see the goats grazing behind IMS, and from the 5th floor of the Institute you get a fine, panoramic view of the town and the surrounding hills. On a clear day you can even see the trail of smoke from Mt. Ontake. The fresh wind of autumn carries the unending song of the chirping cicadas for miles. And when you hear the chorus in Zeami Motokiyo's drama "Toboku" sing

"... The pine trees

In the valley's depths

Soughing in the early autumn breeze

Tell us summer's ninety days are o'er

And that all-withering autumn is here,

Awakening man to the 'Way of Truth' ..."

might this not be referring to Okazaki? Okazaki, the birth place of Tokugawa Ieyasu and once the 38th stage of the famous Tokaido way from Edo to Kyoto. Who there is bothered about having to do without some of the amenities of Tokyo? He who dares to rent a car can find, North-East of Okazaki, hilly, wooded terrain with small, narrow roads, little villages and the charm of the countryside where there is little sign of hustle and bustle.

But now back to scientific matters. If a comparison is made of how well equipped the University Institutes were in 1973 and are now, then it is clear that considerable progress has been made in the meantime. The quantity and quality of apparatus used correspond to international standards and many Institutes have only recently been built. What is, however, noticeable is that the Institutes of private universities are frequently better equipped and also cleaner than those of the often better known state universities. There are members of staff in all Institutes who are recognised authorities in their fields, but still Dr. Siebrand (B.L. No.3) bemoans the fact that the high quality of research carried out in Japan "is not always reflected in publications because of the language problem". I believe that the problem lies elsewhere. Not only in Japan but especially here, it often happens that too many articles are published too quickly. There is simply no time to put the final polish on a publication and allow it to mature. Even the many congresses and conferences do not contribute to a more careful formulation of results.

If I, in closing, only dedicate a much too small amount of space to IMS, this is not because I do not consider it worthy of more. Rather it is for the simple reason that colleagues who have been there before have already written so many positive things about IMS.

from the standpoint of a foreigner that I only need to endorse their views. And the very impressive opening ceremony on 8th November 1979, which I had the honour of attending, proved to me that IMS is also held in the highest regard by my Japanese colleagues. I can only congratulate my host Hiizu on having made this choice.

I would just like to make two further comments. I found the close cooperation between the Institute members and their colleagues in universities and industry exceptionally positive. Especially laudable is, I find, the possibility of sending an assistant or employee to Okazaki for a time to learn a specific methodology or to take measurements. In passing, I might also express the hope that it will be possible for one of my assistants to work at IMS for a year within the scope of the JSPS Post-Doctoral Fellowships for Research in Japan.

Really there was only one thing about which I was sorry and that was the fact that Organic Chemistry, which has the majority of all, especially the larger—and often more interesting—molecules available, has but few representatives in the Institute. I am sure that a greater regard for the needs of the organic chemist would give the Institute further important and new stimuli.

Finally I would like to express my thanks to all those colleagues with whom I had a diversity of discussions, especially Professor Hiizu Iwamura, and who also proved a great support for me when coping with all the problems of daily life. I hope to be able to return to Okazaki soon. Just one more remark. When I look down from our Institute onto the town of Tübingen—surrounded, as Okazaki, by many green hills—I can make out a Japanese stone lantern near one of the clinics. It is a memorial to Erwin Bälz who was personal physician to the Emperor and in the years between 1896 and 1905 reformed Japanese medicine. Shuoshi Mizuhara dedicated a poem to him which is carved in the stone in Japanese and reads, in English, as follows:

“A century ago, in summer,

You, Erwin Bälz, looked up at Fuji”

I too would like to look up once more to Fuji-yama. No, more than this, I would like to climb it. (20, 4, 1980)

Lasting Impressions, Parting Shots

ウィスコンシン大 R. D. McKelvey

As I wash and put away my glassware for the last time, a bit of nostalgia creeps over me and I reflect on my experiences over the last three months. Two comments by IMS people

(to be unnamed herein) soon after my arrival come to mind: “Three months is an awkward amount of time; too long to sit on your hands, but too short to get anything done” and “Okazaki is a great place for a National Institute, because there is nothing else to do here except science.” In my own particular case, neither of these proved to be true.

In the stimulating and hard-working environment of IMS, I was able to complete a publishable piece of work of limited scope in the relatively short time available. The excellent facilities and well equipped labs helped keep the work moving along at a smooth pace. The availability of oxygen-17 NMR provided a unique opportunity for me to study my heterocyclic compounds. The helpful assistance of people such as Tadashi Sugawara, Akira Miyashita, and particularly Yuzo Kawada, helped keep my “breaking in” period to a minimum.

Considering the relatively small portion of the overall program as IMS which is Organic Chemistry, I found the Institute very well equipped to do Organic research. Whenever I had the need for even rather specialized equipment, I found it was available. Most institutions acquire such a broad range of equipment over a long period of time, but IMS is only five years old. I feel this shows a commitment to making The Institute for Molecular Science a first rate institution and I feel the effort has been a success.

From time to time, I was called upon to correct the English on a manuscript. This I did gladly, since I felt uniquely qualified and it provided an opportunity to familiarized myself with some of the most recent work being completed here. It also provided some insight into the plight of the Japanese scientist. My heart goes out to a group who are forced to publish in a foreign language (usually English) if they want the rest of the world to read of their work. As I reviewed the manuscripts, I could just barely imagine the many hours of struggling, dictionary in hand, with a language which is full of irregularities and confusing articles. I wondered how many manuscripts are rejected by referees not because of their scientific content, but because of grammar problems.

As I already mentioned, the equipment at IMS is certainly first-class. I also found the quality of the people to be very high indeed. The one thing that seemed to be out of balance was the amount of equipment, compared to the number of people. In order for even a small number of scientists to do research, a wide variety of equipment is needed and, generally speaking, IMS has met this need. However, once this equipment is in place, it can support a large number of scientists. It seemed to me that the equipment available at the institute could support a research staff perhaps twice the size of the present staff. Twice as much research could be done for perhaps 50% more money, with the additional benefits of cross-fertilization and “critical mass”.

I did find Okazaki “a great place for a National Institute” but not for the reason stated. It's true, it does not have the dazzling night life of Tokyo, but its so-called “rural” setting (to

quote another unnamed colleague) provides an opportunity to function in an environment free of the hassles of commuter trains and traffic jams. I was shown many courtesies by merchants and others in spite of my feeble and impolite attempts to communicate, mostly by pointing. Okazaki can be proud of its fireworks festival, which must rate as one of the great festivals of Japan.

I came to Japan with two rather naive notions: "Japanese people are incredibly tidy, and never litter" and "Bicycles are never stolen in Japan". My faith in the Second Law of Thermodynamics and the concept of increasing entropy was restored when I found that Japan, too, has a litter problem. A hike to the top of Mt. Fuji demonstrated that the Japanese people will even litter their sacred Fujisan. I must admit that I did manage to go two full months, almost never locking my modest bicycle (kindly loaned to me by IMS) before losing it to a nonselective bicycle thief at the Uny. I was glad to replace it with an equally modest, although shinier model, and the price of the experiment was worth the data obtained on a statistically invalid sample.

I would like to take this opportunity to thank Professor Iwamura and the Institute for inviting me to come to Okazaki. I found working in the Division of Applied Molecular Science a stimulating, and pleasant experience; one of the highlights of my professional career. I found the Institute to be the perfect host, providing not only a generous salary and research allowance, but also time and funds for limited travel within Japan. The chance to visit other institutions in Japan helped put the Institute in the proper perspective.

Several years from now, I'm sure I will find myself longing to pay the Institute a return visit. If I do, I hope that I will still find that "Okazaki is a great place ... to do science".

研究室紹介

基礎電子化学部門(I)

分子研 吉原 経太郎

分子研に至る急な坂をはじめて上って行ったのは今から丁度5年前1975年の真夏であった。分子研の最初の外国人研究員 E. C. Lim 教授 (Wayne 州立大) をお連れした。坂を上るとうっそうと夏草の繁る愛知教育大跡地には2階建の木造校舎やコンクリートの廃虚が点在するのが見えた。当時研究所に来ることが内定していたが、"これは長い^{みちのり}道程になるなあ"というのが実感だったように記憶している。とも角 Lim 教授を愛教大旧図書館の小さなゲストルームにお連れした。実験棟の地鎮祭が行われたのは翌年1月のことであった。

さて、研究を準備するに当って、できる限り基本的な有機分子の光化学過程を明らかにすることを考えた。これにはいく通りものアプローチの仕方がある。対象として気相反応、液相反応(まれには固相反応)がある。分子過程としては、振動や回転、反応のポテンシャル面等の問題にどの程度関わるかが問題である。方法としてはレーザーを用いた超高速過程やその他いく通りものものがある。種々考えた上結局、ピコ秒レーザーを用いた超高速現象の研究を行うこととした。化学反応の経路を決める各種の要因を反応機構の研究から明らかにし、反応を制御する一般的な法則に迫ることができればと考えた。しかし実際の研究に当っては余り手を広げず、目標を絞り、小さく限定することとした。

ピコ秒レーザーは取扱いが複雑であり、限られた人数でいく種類ものものを製作するわけにはゆかないと考えられた。従って用いるレーザーを選択しなければならない。これにはモード同期した Nd:YAG レーザーを採用した。このレーザーはそれまで世界でも分光用等の目的に用いられた例は聞いていなかったもので、多少冒険だった。しかしその後の Nd:YAG レーザーの隆盛を見ると、この選択は間違っていなかったように思える。さて光学測定法には過渡吸収法と蛍光法があるが、さし当り吸収法の測定に必要な OMA (オブチカルマルチチャンネルアナライザー) を購入することとした。このような準備をする内に約半年を経過し、51年3月と4月にそれぞれ、京大原子炉より並木章博士(現在豊橋技術科学大)を特定領域奨励研究員として、阪大基礎工より中島信昭博士を助手として迎えることとなった。この2人の参加で仕事のスピードは加速されたが、それでも依頼していたレーザーができて来たのはこの年の夏であったように記憶している。またこの夏はデータ処理用ミニコンピューターの選択に時間を費した。

この当時は忙しいようではあったが、設備等も不ぞろい、不整備で実際の実験を行うことはできず、全ては準備、整備に追われていた。仕事のあい間にマラソンをしたり、野いちごの採集、山いも掘り、たらの実集め等現在では考えられない“台風の日”のような時間があった。52年1月には東大物性研より住谷實君に技官として来てもらった頃より、少しずつ実験を手がけることができるようになった。これまでの研究の概要について以下に述べることにする。

1. 光化学反応初期過程の研究、シストランス光異性化反応の研究。この反応において典型的な研究対象となっているスチルベンをとり上げて反応機構の研究を行った。この反応は永い間その時期におけるそれぞれの方法論によって詳しく研究されているが、本質的に超高速反応であるために、反応を疑点なく決定するには至っていなかった。この反応は歴史的にいくつかの機構が提出された後、現在では2つの機構に集約されている。第1は1950年代に主としてTh. Försterによって提案された「三重項機構」と呼ばれるものである。これは分子が光吸収後一旦三重項状態へ緩和し、こゝで二重結合のまわりの回転をおこすというものである。第2は1960年代から1970年代にSaltielやSiebrandによって提案された「一重項機構」である。

我々は1977年以来、モード同期Nb:YAGレーザーの4倍高調波(266nm)の光を用いていくつかの研究を行って来た。i) 蛍光寿命の温度変化の実測、ii) $S_n \leftarrow S_1$ 吸収スペクトルとその動的挙動の測定、iii) 可変遅延ピコ秒ダブルパルスとレーザー誘起蛍光法を用いたシス→トランス光異性化反応の直接測定、iv) 新しい紫外光源とストリークカメラによるシス→トランス、トランス→シス光異性化反応の直接測定等を行った。その結果、これらの反応の律速段階は反応原系の励起状態の寿命に等しいと考えられること、したがって反応は「一重項機構」でおこることを直接証明できたものと考えられる。

2. 電子高励起状態の研究。ベンゼンの ${}^1E_{2g}$ 状態。ベンゼンの電子励起状態については下から3つの状態は ${}^1B_{2u}$ 、 ${}^1B_{1u}$ 、 ${}^1E_{2u}$ と古くより確定している。しかしながらもう一つの低い π 励起準位 ${}^1E_{2g}$ 状態については、極めて多くの研究(フラッシュフォトリス、2光子吸収、3光子

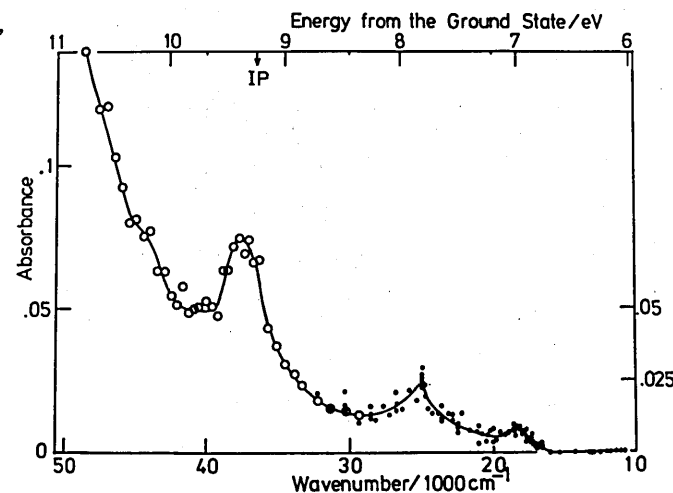


図1. 気相ベンゼンの $S_n \leftarrow S_1$ 吸収スペクトル。
3つの主な吸収ピークは低エネルギー側より ${}^1E_{2u} \leftarrow {}^1B_{2u}$ 、 ${}^1E_{2g} \leftarrow {}^1B_{2u}$ 、 ${}^2E_{2g} \leftarrow {}^1B_{2u}$ の各遷移に相当する。

イオン化、共鳴ラマン、電子エネルギー損失スペクトロスコピー、理論計算等) にもかゝらず、決定できなかった。我々は液相および気相で広範囲(観測波長、930~210nm)にレーザーフォトリシス法を適用した結果2つの ${}^1E_{2g}$ 状態(${}^1E_{2g}$ (基底状態より7.8eV, 気相), ${}^2E_{2g}$ (同じく9.4eV))を見出した(図1)。この状態は2電子の関与した遷移であり、最近ポリエンでその重要性が指摘されている 1A_g 状態と対応するものである。溶媒効果よりこの遷移は一部ab initio計算で指摘されているRydberg遷移の性質は弱いものと考えられる。なお本研究の途次、レーザー励起によってベンゼンのクラスターが生成する反応が飽和蒸気圧以下で観察された。

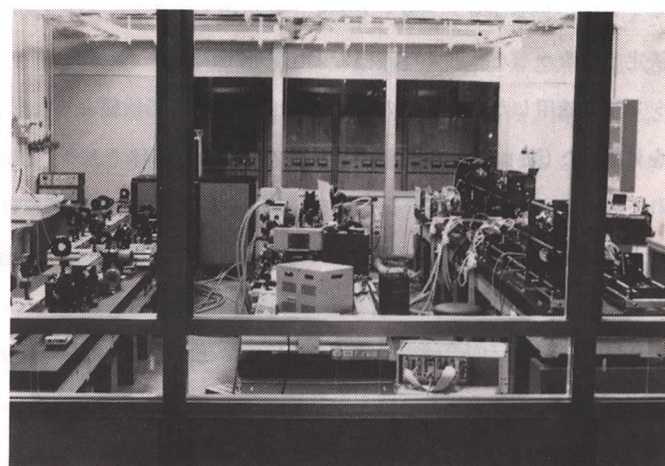
3. 電子移動反応の研究。電子移動反応は化学のあらゆる局面で重要な反応である。我々は種々の局面における電子移動反応を取り扱って来た。i) 多数の溶媒における電子移動反応とそのFranck-Condon因子の重要性を実際に即して計算した。ii) 蛍光をモニターとして電子移動の研究を行う際に、分子の拡散がある場合とない場合に分けて、蛍光の減衰の動的特性を明らかにし、電子移動平均距離等を求めた。iii) 特に分子性結晶の表面に作った単分子色素膜は、電子移動反応を行う2つの分子間の距離が固定しているので興味ある研究対象である。アントラセンとローダミンBの間の電子移動速度は約 $10^{10} s^{-1}$ であった。

4. 生物学における超高速過程。i) 高等植物(ほうれん草)葉緑体より抽出した高濃縮光合成系Iにおける反応初期過程。光合成反応は化学と生物の間に横たわる興味ある研究課題であり、超高速で高精度の測定手段を必要とする。したがって装置をたえず改良しながらこの問題に挑戦している。この研究では特にピコ秒分光に適した試料を用いることが必要で、我々はアンテナクロロフィル: 反応中心分子=5~9:1の“Ikegami particle”を用いている。これまでの所、第1に強励起と弱励起では粒子内で起る反応の様相が全く異なること、第2に弱励起で光励起してからアンテナクロロフィル間のエネルギー移動がおこり、反応中心での電荷分離に要する時間は約30psであること、第3に反応中心から最初に電子を受け取る化合物(短い時間で第2の電子受容体に電子を渡してしまう)の同定が可能になろうとしている。その他熱変性の蛍光寿命に及ぼす影響等ピコ秒分光法は光合成過程の解析にも意外と多く情報をもたらそうとしている。この問題は特定領域奨励研究員の加茂川恵司博士が精力的に解明している。ピコ秒分光は蛋白質の4次構造の推定にもよい情報を提供する。D-アミノ酸酸化酵素の蛍光寿命の測定にその好例を見出した。

5. ピコ秒分光法の技術。分子研では創設以来いくつかの大型研究設備を設置して来ているが、我々は昭和51年と53年にそれぞれ「時間分割スペクトル装置」および「ピコ秒紫外-赤外連続可変波長レーザー」を担当した。前者においてはピコ秒およびナノ秒Nd:YAGレーザーおよび一部観測システムを購入し、後者においては第1にオプティカルパラメトリック発振および増幅を中心とした固体レーザー装置およびアルゴンイオンレーザー励起ピコ秒色素レーザー装置を設置した。これら

の装置の開発を通じて高効率波長変換技術、光増幅技術を得つつある。装置開発室の協力を得てオプティカルパラメトリック発振・増幅では可視— $4\mu\text{m}$ で1 mJ以上のピコ秒パルスを得ている。これらの紫外およびさらに赤外部への変換は比較的容易であると考えられるので、所期の広範囲の可変波長レーザーが得られるであろう。

以上これまでの研究のあらすじを書いてみた。これまでは建設・研究のシュトルムウントドランクの時代であった。今後はもう少し組織的な研究となるよう期待している。



ピコ秒紫外—赤外連続可変波長レーザー

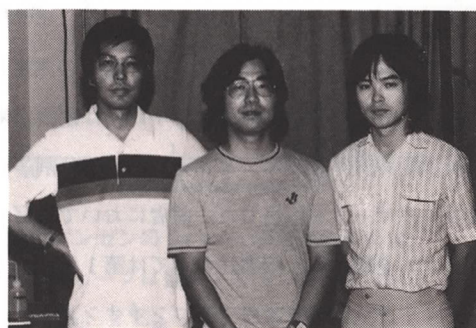
右のテーブル(長さ約6 m)はピコ秒Nd:YAGレーザーの発振および増幅器(折り返し計12 mの光路長になっている)、真中のテーブルはオプティカルパラメトリック発振および増幅による可視・紫外光発生装置、左のテーブルは近赤外・赤外光発生装置である。正面うしろには電源とコントローラーがある。

基礎電子化学部門(Ⅱ)

分子研 坂田 忠 良

1. 4 年 前

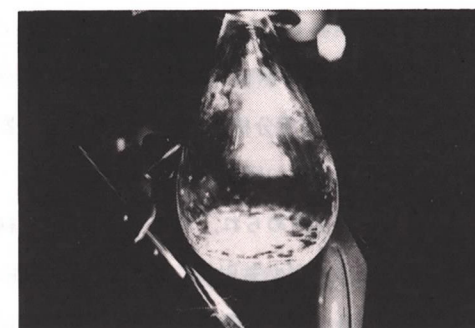
小生が分子研に赴任したのは昭和51年2月であった。分子研建設の予定地である小高い丘は、枯れ草が繁り、ガラスの破れた愛教大廃校舎が風に吹かれていた。我々が最初に住んだのは、愛教大の旧図書館。既に吉原教授が赴任されて小生を暖かく歓迎してくれた。50年度の予算で買ったのは、キセノンランプ1台。実験を始めようにも装置と



スペースがなく、殆どどの時間を読書、吉原さんと、どのような研究をするかとか他愛ないダベリング、附近の散歩、春先に萌え出るタラの芽の採取、山もも食べたりした。時間を持て余して街の喫茶店に行く余裕があった。同年7月に川合知二君が助手として赴任。彼は、触媒化学出身の峻才。オージェ電子分光、光電子スペクトルにも深い経験があり、以降研究室づくりに協力してくれた。当初小生が考えた方向は、次の2つであった。

1つは、TCNQ等の有機導体の研究。2つ目は、阪大での助手時代、坪村教授の指導のもとで、研究を始めた光化学電池を通して、太陽エネルギー変換の問題を追求すること。前者は、有機高温超電導体への夢、後者は、人工光合成という夢があることを考えたからである。

このような研究主題を選んだのは、研究歴と共に、性格的なものがあると思う。私にとって、分子科学はいくら基礎的な問題を、研究していても一種の応用科学のイメージがぬけきれない(というのは、原理的なものは、ほとんど判っているから)。そして分子科学のいいところは、諸先輩に食べられ、我々は糠を嘗めているようなところが多分にある。そしてメカニズムの研究に没頭しながら、その問題のもつ意義を考えることなく、美しく整備された学問体系に酔い、どうでもいい(?)のような問題にかかずらい過ぎていようような所がある(不遜だ?)。メカニズムはわからないところがあっても骨太い研究の中から新しい現象が見つかり、そのことによって、その分野に人が押し寄せ、メカニズムの研究は、進歩するのではないだろうか。我々理学部の出身者は、純粋な科学と応用の科学を分離して考えがちである。そして基礎科学は真理であり、応用より高級かつ優れている。しかしこのような考え方はおかしい。自然科学の真理は、宗教の真理と違って世俗的(物質的)なのだ。実際自然科学の歴史をみると、実生活における、物質的な豊かさ、快適さ、便利さを求める人間の欲望と科学の進歩は、密接に関連している。この点、精神的な真理を求める宗教の歴史と対照的だ。とくに化学の場合、石炭・石油を中心としたエネルギー産業・重化学工業の歩みと切り離せない。そして、その化石燃料の時代が、人類のエネルギー浪費のため、たかだか2~300年で終わろうとしている。そして次に築かねばならないのは、危険な原子力・核融合の時代でなく、新しい太陽エネルギー・自然エネルギー利用の世界であろう。そこで発展させられるべき科学技術のうち最も重要なものは、人工光合成を中心とした太陽エネルギー変換の科学技術である。それは、これからの光化学、いや化学のロマンである。何といって誇ろうとも現在の科学の水準では、植物や細菌のもつ光合成能力を再現できないばかりか、 N_2 固定、水の光分解もままならないのだ。ともかく、そのようなことを考えながら、川合君とともに、研究のテーマをしばり、装置を作ったり、



買ったりして実験できる環境を作っていた。その中でとくに大がかりな装置は、超高真空装置(虚空一号と命名)であった。これは、光エネルギー変換のうち半導体表面での吸着分子の光触媒反応を研究するため、質量分析器、オージェ電子分光器、分子線エビタキシャル装置をそなえた立派なもので、川合助手のもつ経験と知識が大いに役立った。大学にいた時は、いかにしてお金を使わないですますかで頭が占められ、かつそのように訓練されていた。十万円以上のお金を使うことはまれであった。ところが小生らがこの装置作りに使ったお金は千万円を超えた。これは小生にとって、衝撃的体験であった。この頃、基礎電子部門では、吉原教授以下、川合、中島、並木、住谷と、個性的な人材がそろい、にぎやかさを増して来た。しかしまだ設備が不備のため、実験に追われることもなく優雅な毎日であった。

2. 研究へ!

そうこうするうちに実験棟ができ、我々はそこで実験を始めた。我々が最初にとりくんだのは、ポルフィリン薄膜/金属を用いた光電池の研究であった。これは、アメリカのJ. H. Wangがこのような光電極で1V以上の光起電力を出し、水を分解できるといっている事の追試から、始った。そのうち、谷村克己君が、リサーチフェローとして来てくれたので、我々のグループは3人と強化された。そして我々の研究は広がりを持ちはじめ、以降三年のうちに、次のような研究を行って来た。以下列挙する。

1. 金属ポルフィリン薄膜光電池による光エネルギー変換の研究

- 開放起電力 $\sim 500\text{mV}$ 、可視部での光 $\rightarrow$ 電気変換の量子効率 約1%。
- 光電極のエネルギー構造と光電流発生メカニズム・基板金属の仕事函数とRedox系の効果
- 光電流発生ダイナミクス・パルスレーザーによる光電流の応答。これは、3の課題に発展した。
- 金属(or半導体)/有機色素界面でのエネルギー移動と電子移動の特徴が明らかになった。
- メチルビオロゲンと触媒を使った水素発生に成功した。

2. 半導体/電解質溶液界面における光起電力効果

- 光起電力の光強度依存性の定量的説明が可能になった。 $\rightarrow$ 効率のよい光エネルギー変換系の条件は何かを議論する土台を作った。

3. 半導体の光触媒(固体/気体系)過程のダイナミクス

- nsecパルスレーザーと質量分析器(超高真空装置)の結合 $\rightarrow$ 半導体(TiO_2 , ZnO)表面吸着分子の光脱離、光触媒反応による反応種の検出、その動的挙動の観測と理論的説明。この新しい方法の特徴は、不安定分子の敏感な検出と、光反応生成物の運動エネルギー分布が決定できることである。

4. 水の光分解のメカニズム

O_2 発生と H_2 発生に対する分子論的モデル $\rightarrow$ 酸化還元過程を素反応に分解し、反応種の水の中のエネルギーレベルと、反応経路の推定

5. パルスレーザーを使った半導体

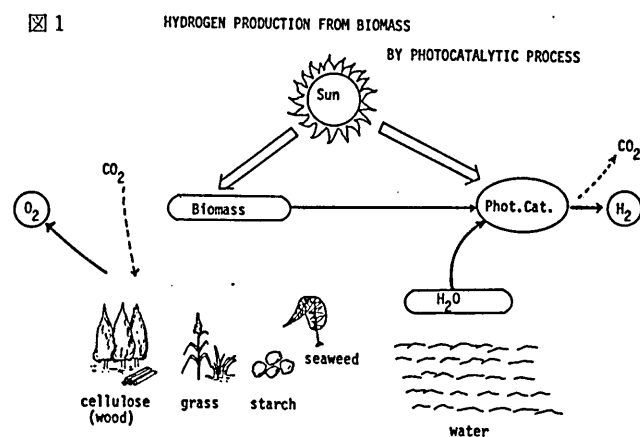
光電極反応の動的研究

半導体電極にnsec光パルスを与え、流れる光電流のpH依存性、電極電位依存性、光強度依存性、酸化還元剤の影響をみる。これらの挙動を通して、光 $\rightarrow$ 電気 $\rightarrow$ 界面反応の動的過程を直接観測することを試みた。

6. 半導体粉末、光触媒を使った水の分解と水素発生

これは、0.1ミクロンくらいの半導体微粒子の表面を、Pt, RuO_2 等の金属触媒でおおう。この処理によって活性が、数十 $\sim$ 千倍に増加(反応の種類による)。そして、おのおのの粒子が、光化学電池として働くことがわかった。 TiO_2 を使ったこの光触媒は、酸化力が強く、ほとんどの有機物(アルコール類、アミノ酸、炭水化物、脂肪、たん白質)を分解し、同時に水を還元し、水素を発生できることがわかった。

この方法は、太陽エネルギー利用の方法として興味あると共に、基礎的に新しい光化学反応であり、現在最も力を入れている課題である。図1にこの方式によるバイオマスからの水素製造システムの概念図を示す。



この他に1, 3, 5, 6のテーマと関連させる意味で、半導体表面からの発光、および表面吸着色素(とくに $\text{Ru}(\text{bpy})_3\text{Cl}_2$)からの発光を、界面電子移動と光触媒反応のメカニズムを明らかにするため研究している。

3. 人の流れ

我々の研究グループは、基本

的には、川合助手と私の二人で構成され、現在で4年になる。その間、1976 $\sim$ 1978年の2年間、谷村克己博士が、リサーチフェローとして加って、新しい刺激を与えてくれた。特に彼は、ポルフィリン薄膜/金属(or半導体)での電子移動と、エネルギー移動の問題を、深くほりきげて、解析し、我々に、新しいものの見方を示してくれた。また1978年、フリッツハーバー研から、H. Tributsch博士が、我々の研究室に滞在した。彼は、 MoSe_2 等の層状化合物半導体を持参し、その光電極とし

てのおもしろさを教えてくれた。彼と一緒に研究したのは、4ヶ月であったが、真剣な実験態度と、議論で得るものが多かった。彼は、一種の天才的資質を持ち、今後、どのように大成するのか楽しみである。人間的にも、暖かい魅力あふれる人柄であった。また、昨年1年間は、1週間に一度であったが、小磯隆氏（名工大の奥山政高先生のところから）が来た。彼は、クロロフィルや、ポルフィリンを使ったメチルビオロゲンの光還元に新しいところをつけ加えてくれた。協力研究で、微力な我々に力を借してくれた、相馬光之、近藤保、両博士、そして畏友、梶原峻博士等の、名をあげるのを忘れるわけにはいかない。このように改めて見ると、我々をとりまく人に、人物が多いのに気づく。

また、最近の最大のトピックは、橋本和仁技官が我々のグループに加わったことである。彼は、そのやさしそうな顔にも似ず、徹夜実験も辞さぬ根性がある。彼は分子研の研究者のなかでも最も若い世代であり、我々の研究に新風を吹きこんでくれるだろう。

これで我々のグループは3名に強化されたわけであるが、それぞれがかなり強い個性を持っている。共通するのは、女好き、酒好き、そして、ちょっと野心的なところであろう。現在、我々の研究室は、4才半になった。青年期にようやく達したように思える。その間、吉原教授とは、無遠慮に口論したり、無理を言って、困らせたが、大目に見て下さった。紙面でお詫びする。これからも所、内外の暖かい支援のもとに、新しい境地を切り開くべく、体をきたえ、頑張りたいと思っている。

岡崎コンフェレンス

第9回岡崎コンフェレンス報告

反応中間体の分子設計

——カルベンの分子科学——

分子研 岩 村 秀

安定分子の分子設計から興味ある物性を持つ新物質が導かれるように、反応中間体の分子設計は興味ある反応の開発と制御につながる。第9回岡崎コンフェレンスでは、カルベン： CH_2 とその誘導体の分子科学がテーマに取上げられ、この分野における第一線の研究者が一堂に会し、最新の知見と意見の交換が行なわれた。この反応中間体は、いくつもの有用な化学反応の中間体としてあるいは最近話題の C_1 化学の一つとして重要な位置を占めるばかりでなく、またあとで述べる様な理由で分子科学の興味ある研究対象となって来ている。会期は昭和55年1月7日～9日で、参加者は51名に上った。こゝでは外国からの招待者3名とその提供話題の紹介を中心に報告したい。

カルベンの化学については、これまで1964年 Academic Press と1973年 Wiley とから2大名著が出版されているが、Robert A. Moss教授 (Rutgers Univ.) は後者の編著者として知られている。小研究グループでありながら常に珠玉のような研究成果を報告して来ているが、今回は冒頭「Adventures in Carbene Chemistry」と題して、カルベン： CXY の広範な反応性を統一的に評価するパラメータ $m:\text{cxy}$ の提唱が行なわれた。そもそも： CH_2 が分子科学の研究対象として何故おもしろいかと言うと、比較的エネルギーの接近した一重項状態と三重項状態が存在し、水素原子を他の原子や基に置き替え： CXY とすると、両状態の相対安定性が微妙に変化することがあげられる。分子構造の観点からは、古くから分子が直線分子かあるいは $\angle\text{XCY}$ が何度の折れまがり分子かと言う問題があり、反応論から言うと、三重項状態はラジカルの反応性を示すのに対して、一重項状態はカルボカチオンあるいはカルバニオンに似た挙動を示すと言う反応の多様性があげられる。後者の場合、他の試薬に対する反応性は、それぞれ求電子性 (electrophilic) および求核性 (nucleophilic) となるが、Moss教授はこの両反応性を統一的に定量化するパラメータを実験的に得て、理論的な裏付けを行なったものである。反応の研究に携わる研究者からは大きな評価を受ける一方で、一連のメチル置換エチレンに対する競争反応から得られる $m:\text{cxy}$ の実験値は、これが1.48より大きい求核性カルベンに対しては実証できない難点が指摘され、これに代ってカルベン金属錯体 $(\text{OC})_n\text{W}:\text{CXY}$ の ^{17}O NMR化学シフトの値を使えばよいことが分子研グループから指摘された。

Peter P. Gaspar教授 (Washington Univ.) は先の2大著書のいずれにも一章を寄せていること

で知られる。4族元素のカルベン類似体： SiXY 、 GeXY について、新しい発生法、化学的挙動、寿命などについて総説が試みられた。 :SiH_2 の励起一重項状態 $^1\text{A}_1^*$ の寿命が比較的長く、また $\angle\text{HSiH}$ は高励起状態になるほど広がることが示された。

Maitland Jones, Jr 教授も Wiley からの本の共編著者であり、Princeton 大学で常に分かり易い講義をすることで定評がある。このコンフェレンスでは ankerman を務めていたとき、従来得られていない高エネルギー分子を得るのに高エネルギー反応中間体の分子設計が如何に利用できるかという問題提起から始めていた。標的分子として反 Bredt 則オレフィン即ち橋頭位に二重結合を持つオレフィンが取り上げられた。カルベンの環拡大反応でホモアダマンテンが作られ、低温マトリックス状態の赤外吸収 3000, 1611, 848 cm^{-1} からその生成が確認された。またカルボランにおけるカルベン-カルベン転位もその分子設計は精緻を極め、一同に大きな感銘を与えた。

この分野における日本の研究は極めて盛んで、その水準も高い。こゝではコンフェレンスにおける演題と報告者を以下にリストするに止めるが、いずれにも活発な討論が繰りひろげられた。

分子構造や反応の解析が精密さを加え、不斉合成をも含むいくつかの新しい反応が展開される一方で、カルベン反応に対して Skell の仮説に次ぐ Moss の統一見解が出て来たのは大成功であり、これを契機にカルベンの分子科学が一段と飛躍するものと考えらる。

High-Resolution Spectroscopic Studies on HCF, HCCl, and HNO

M. Kakimoto, S. Saito, and E. Hirota (IMS)

Spin States of p-Phenylene-bis (phenylmethylene)

K. Itoh and T. Takui (Osaka City Univ.)

Reactions of the First-row Monocentric Diradicals

T. Fueno and O. Kajimoto (Osaka Univ.)

Reactivity of Dihalocarbenes Generated in PTC conditions

I. Tabushi (Kyoto Univ.)

Reaction of Dimethylvinylidene with Oxygen-functionalized Substrates

T. Sasaki and S. Eguchi (Nagoya Univ.)

Some Aspects of Reactions of Silylenes

H. Sakurai (Tohoku Univ.)

The Reaction of Photochemically Generated Trimethylsilyl-phenylsilylene with Functional Substituted Olefins

M. Ishikawa (Kyoto Univ.)

Chemistry of Silyldiazo Compounds and its Related Reactions

W. Ando (Univ. of Tsukuba)

Participation of a Non-Carbenic Process in Formally Carbenic Reactions

H. Tomioka (Mie Univ.)

Formal Nitrene-Type Intramolecular 1,1-Cycloaddition of Diazomethanes to Carbon-Carbon Double Bonds

T. Mukai and T. Miyashi (Tohoku Univ.)

Arylnitrenes from Azatriptycenes

T. Sugawara (IMS)

Homoconjugated Carbocyclic Carbenes

S.-I. Murahashi (Osaka Univ.)

Radical Character of Paramagnetic Cobalt (II) Carbene Species

A. Nakamura (Osaka Univ.)

Carbene Metal Complexes as Reactive Intermediates

R. Noyori (Nagoya Univ.)

Cyclopropenylidenes and Their Metal Complexes

Z. Yoshida (Kyoto Univ.)

NMR Studies of Carbene Ligands in Metal Complexes

Y. Kawada (IMS)

Skeletal Isomerization in Metallocycles

A. Miyashita (IMS)

Behavior of Carbenes from Bridgehead Substituted Triptycenes

H. Tukada (Univ. of Tokyo)

第10回岡崎コンフェレンス報告

分子性結晶の励起子

——輸送過程の見地から——

分子研 井口 洋夫

まず本研究会の岡崎コンフェレンスへの申込みの際の要旨を掲げて、本研究会の目的に触れておこう。

「分子性結晶には、分子の集合に伴って生ずる種々の集団的性質がある。励起子の概念は、分子集合体としての分子性結晶の電子的性質を理解する上で基本的なものであり、様々な励起状態の解明、結晶内のエネルギー移動等の見地から多くの研究が行われてきた。

本会合では、この比較的成熟した分野について、秀れた業績を挙げた David Fox 教授が外国人招

へい研究員として滞在される機会に、国外から専門の研究者を招き、高い水準を持つ国内研究者との討論を通じて、現状の把握と将来への展望を行いたい。

一応、分子性結晶内のエネルギー移動や電気伝導に於けるキャリアの挙動等主眼を励起子移動におきつつ、分子性結晶に於ける励起子全般、更に半導体、イオン結晶に於ける励起子についても、各分野の研究者の参加を求め、広い視野に立った討論を行いたい。」

昭和54年度もそろそろ終りに近づいた55年2月3日～6日の間、分子科学研究所に於いて第10回岡崎コンフェレンス、Excitons in Molecular Crystals—from the viewpoint of transport processes——(分子性結晶の励起子——輸送過程の見地から——)を開催した。

提案理由にもあるように、外国人招へい研究員として滞在中のD. Fox教授(ニューヨーク州立大学(Stony Brook))に加えて、H. C. Wolf教授(シュタットガルト大学)、A. Zewail教授(カリフォルニア工科大学)及びG. J. Sloan教授(デュボン中央研究所)の参加を得、国内からは、次に掲げるプログラムに見られる研究者らと共に密な討論内容をもつ研究会をもつことができた。

分子性結晶中の励起子の研究は、長い歴史をもっている。特に最近の新しい実験手段の開発と、イオン結晶や半導体をも含めて統一的な理論展開がなされつつある現状を、緒言を含めて豊沢(東大物性研)の講演でよくまとめられていた。

これを受けて活発な討論を交えて、次のようなテーマ展開を行った。

○赤松秀雄(分子研): Introductory Talk

○豊沢豊(東大物性研): Behavior of Excitons in Deformable Lattice

○小林孝嘉, 長倉三郎(理研): Exciton Transportation in a Low Dimension Crystal: BaPt(CN)₄ · 4 H₂O

○張紀久夫(阪大基礎工): LT Mixed Modes of Exciton-Polaritons in Anisotropic Media

○D. Fox(ニューヨーク州立大学): Polarization Energies of Ions in Molecular Crystals

○小谷正博, 田中久志, 中川和道(学習院大理・分子研): Detrapping of Charge-Carriers in Singlet Excitons in Naphthalene Crystals

○住 斉(筑波大物質工学): Origin of Temperature-Independent Electron Mobilities in Anthracene and Naphthalene

○H. C. Wolf(シュタットガルト大学): Magnetic Resonance of Excitons Detected by Delayed Fluorescence

○塩谷繁雄(東大物性研): Picosecond Spectroscopy of Excitonic Polariton and Excitonic Molecule in CuCl

○権藤恭彦(九大理): Delayed Fluorescence and Energy Transfer in Mixed Crystals

○丸山有成(お茶の水大): Fluorescence Spectra and their Temperature Dependence of Amorphous Anthracene Films Doped with Naphthalene

○城田靖彦, 佐野夕美子, 横山正明, 三川礼(阪大工): Singlet Excitation Energy Migration in the Glassy and Single Crystalline States of 1,3-Diphenyl-5-(p-chlorophenyl)-2-pyrazoline

○小林浩一(東大物性研): Excitons in Magnetic Fields in Thallous Halides

○伊藤憲昭, 小島康一(名大工): Electronic Structures of Highly Excited States in Molecular Solids

○松井敦男, 西村仁(甲南大理, 大阪市大工): Resonance Luminescence due to Radiative Annihilation of Free Excitons in Pyrene

○田仲二郎(名大理): Origin of J-Band

○A. Zewail(カリフォルニア工科大学): Optical Dephasing and Laser Spectroscopy of Excitons in Molecular Crystals

○国府田隆夫(東大工): Dynamical Properties of Excitons in Isotopically Mixed Anthracene and Naphthalene

○中島信昭, F. Willig, 吉原經太郎(分子研, Fritz-Haber Inst. MPG): Electron Transfer and Energy Transfer of Monolayer Rhodamine B on Organic single Crystals

○安積徹(東北大理): Site Selective Sublevel Phosphorescence Spectra

○G. J. Sloan(デュボン中央研究所): Recent Developments in Purification and Crystal Growth of Molecular Crystals

○井口洋夫(分子研): Concluding Remarks

この研究会で、ちょっと異質に感じられるのは最後のSloan博士の講演であろう。物質(主として芳香族化合物)精製に過去30年、正に全エネルギーを投入してきた彼の一言一言には、「経験を通して初めて成し得る“Knowhow”」があった。と同時に、励起子研究の基本に“安心できる材料の入手”があり、それが如何に物質の純度と関連を持つかを充分討論してきた本コンフェレンスの最後の講演として強い印象に残った。

会が終わった後、口の悪い故曾田元さんが、「すばらしい研究会だった」と絶賛してくれたのは、2月16日の昼食の時間だった。

研究会報告

太陽エネルギーの貯蔵と転換

分子研 井 口 洋 夫

日時 1979年10月23日 9時～3時

場所 分子科学研究所 301号室

プログラム

○赤松秀雄 (分子研): 序言

○田中郁三 (東工大理): Generation of Ultraviolet Light by Conversion of Solar Energy

○田伏岩夫 (京大工): Model Systems for Charge Separation in Photosynthesis

○坪村宏 (阪大基礎工): Solar Energy Conversion into Electronic and Chemical Energy by Wet-type Semiconductor Photocell

○長倉三郎 (東大物性研): 結言

1979年度の分子研外国人評議員 M. Calvin 教授の来所の機会をとらえて、上記の研究会を開催した。国内からの参加者は上記講演者を含めて50名近く、活発な討論はちょうど来日中の M. Kasha 教授 (フロリダ大学: 東京理科大学小谷正雄学長招へいによる JSPS Fellow) によって、一層盛り上がった。

田中郁三教授は、太陽エネルギーの利用がさげばれている折から、その効率を高めるために、可視光を紫外光へ転換する方策についての研究を発表した。即ち、 I_2 , Br_2 , NO_2 を用い、波長変色色素レーザーによる多光子吸収で、紫外部の発光を観測している。例えば、 I_2 に対して490～530nm の励起光で、4つの紫外部の発光 (385, 340, 290, 270nm) が得られており、その発光能率を決める因子について言及した: 多光子吸収の寿命 (普通0.4 μ sec) をのばす工夫として、 I_2 に種々の分子を混合して、エキサイプレックスを生成する方法をとっている。

田伏岩夫教授は、光合成の人工化の夢の実現への第一歩の話題提供であった。そのモデル系として、ベンゾキノン をテトラフェニルポルフィリン・(Zn^{++}) 錯体とアミド結合でつないだものを用いた。この構造については、ベンゾキノンは内部運動の自由度を保ちながら、ポルフィリンに接近した位置をとり易いことをNMR から知り得た。これに光を照射すると、ポルフィリン蛍光が著しく消光され、これと共にキノンのアニオンラジカルが数%の量子収率で得られた。これに接続する電子伝達系としてピオロゲン膜を利用して、フラビン還元体を大量に得た系について論及したもの

である。

さらに坪村宏教授は、まず冒頭坪村氏が分子の励起状態の研究からエネルギー変換を始めた動機は1972年、ドイツでCalvin教授の講演を聴いたことによろし、謝意を表した。次いで、 TiO_2 , ZnO , CdS などの半導体電極を用い、湿式光電池の原理を説明し、太陽エネルギーを電気エネルギーに変換する問題点について要領よい説明がなされた。さらに半導体の粉末を液相乃至気相の反応物質中で光照射したときの光触媒効果と光電極効果との相関性を説明し、粉末の光触媒作用による太陽エネルギーの化学変換の可能性について、いくつかの例をあげて説明している。

これらの講演に対して、Calvin, Kasha 両教授は勿論、参加者の活発な討論は日本人にとっての言葉のバリエーションを忘れさせる程であった。

層状化合物の物理と化学

電通大 佐野瑞香

グラファイト、 TaS_2 , $NbSe_2$, $GaSe$, MoS_2 , SnS_2 , PbI_2 など層状構造をもつ物質の研究は近年ますます盛んになりつつある。これら一群の物質はそれ自身、半導体、金属、超伝導体、磁性体など固体の電子物性として興味あるのみならず、その層間はきわめて特異な場にあるので、そこにゲスト分子を入れて得られる層間化合物には新しい物性が期待される。しかし我国に於けるこの分野での研究は主として物性測定に目が向けられていて、新しい物質の開発という点からみると今一步の観がある。これは物理屋と化学屋とが別々に研究を進め、その間に密な情報交換の機会がないためと思われる。

そこで、物理屋と化学屋の両者が参加し、それぞれの分野に於ける最近の情報を提供するとともに、新しい材料、物性を見出す方法を探索するための研究会を開催した。2日間にわたり講演、討論が行われ、参加者数は物理屋が19名、化学屋が15名、物理も化学もという人が3名で、プログラムに印刷した講演はつぎの16であった。

○グラファイト層間化合物の電子物性 ($C-AsF_6$, C_6Li)

(東大物性研)・田沼静一, 家 泰弘, 小池洋二

ステージ数の異なるグラファイト- AsF_6 の de Haas-van Alphen 効果の周期は、そのステージ数で異なる。また C_6Li の電気伝導はn-型で、HOPGより三次元的であり、50mK以下まで超伝導は出現しない。

○ グラファイト層間化合物の電子物性

(東大理) 上村 洸

C₈Kのバンド構造, 移動した電荷の炭素層での分布を検討し, またステージ5で電気抵抗が最小になることを, 層面のフォノンモードによる散乱機構により説明した。

○ (CF)_n型フッ化黒鉛の各種雰囲気中における熱分解反応

(京大工)・渡辺信淳, 小山 哲, 河村俊彦

(CF)_n, (C₂F)_nとLiとの組合せで, リチウム電池 (2.8V) を作った。これはLiが中に入って層間化合物を作るからである。

○ 黒鉛繊維層間化合物を用いた濃淡電池

(豊橋技科大, 信州大工*)・稲垣道夫, 遠藤守信*

臭素との層間化合物で濃淡電池を作り, 両極間の温度差を保つと電位差が持続し, 出力密度は0.45mW/gと比較的高い。

○ 塩化鉄-グラファイト層間化合物の磁気的および電気的性質

(京都薬大) 大橋憲太郎

グラフォイルを用いてC≡FeCl₃, C-FeCl₂を作り, そのメスパワー効果, 電気伝導性を測定した。

○ C₂R (R:K, Rb, Cs) の successive phase transition について

(阪大教養) 山田安定

C₂,CsでCs層とグラファイト層との不整合による static distortion wave が報告されているが, configurational probability wave を見出す可能性を検討した。

○ グラファイト層間化合物のステイジングと格子動力学

(東北大工)・堀江忠児, 倉本義夫, 前田巳代三

格子動力学の問題は, フォノン構造だけでなく, 相転移, ステイジングなどと密接に関連していることを示した。

○ 単層および積層ステアリン酸マンガンの磁性

(阪大基礎工, 日本真空技術*)・長谷田泰一郎, 山川洋幸*

脂肪酸鎖の端にMnをつけ, これを単分子膜に並べてMnの二次元磁性体を作り, それに自発磁化のあることを認めた。

○ Mg(OH)₂型層状混合水酸化物における陰イオンの層間吸着

(阪大産研)・吉川信一, 小泉光恵

層状構造をもつ水酸化物の2価金属イオンをAl³⁺で置換して, 交換性陰イオンと水を含む新しい物質を合成した。

○ III-VI族層状化合物の格子不安定性とポリタイピズム

(東北大金研) 黒田規敬, 仁科雄一郎

ラマン散乱の測定, deformation dipole model による計算から, GaSeは β, ϵ, γ が安定, InSeは β が不安定で, (GaSe)_x(InSe)_{1-x}は0.3<x<0.6で不安定であることを明らかにした。

○ 光散乱による層状物質の格子振動の研究

(阪大工) 中島信一, 三石明善

ラマン散乱, ブリュアン散乱の測定から, 15種の層状物質で層間結合力は10³dyn/cm⁻¹台で, 最近接層間の相互作用が支配的である。

○ 2H型遷移金属カルコゲナイドの電気伝導

(東大工) 田中昭二, 内藤夫

NbS₂, NbSe₂, TaS₂, TaSe₂の順に電荷密度波の影響が強くなり, 磁気抵抗の異方性はセレン化合物より硫化物の方が大きい。Seの方がトンネル効果の確率が高いからである。

○ 遷移金属ダイカルコゲナイドの超伝導

(東北大金研)・池部 学, 片桐圭司, 小林典男, 武藤芳雄

2H-NbSe₂は異方性の強い超伝導体であるが, 面内はpureな, 垂直方向はdirtyな超伝導体であるということから, Nb_{1-x}Ta_xSe₂の超伝導性が説明できた。2H-TaS₂(ピリジン)₊では異方性が大きくなっている。

○ 沃化物層状半導体の励起子共鳴散乱

(筑波大物質工, 東北大金研)・後藤武生, 仁科雄一郎

PbI₂, HgI₂は光学フォノンエネルギーが励起子の結合エネルギーに比べて小さく, 赤外活性フォノンのエネルギー異方性効果が大きく, 反転対称性を持つため励起子の緩和過程を調べるのに好都合な材料である。

○ SnS₂の間接吸収端

(東大教養)・野崎秀俊, 今井 勇

Band gap (2.245eV) 付近の吸収は, ELCでは間接禁制遷移で, 16meV, 53meVのフォノンがそれに関与していることを明らかにした。

○ アンダーソン局在と磁気抵抗

(東大物性研)・福山秀敏, 芳田 奎

Ecを境にしてlocalizedとpropagatingが生ずるが, 磁気抵抗の符号と大きさを決めるのは, フェルミエネルギーのZeemanシフトと, さらに|Ec-E_F|が大きいときは, 軌道運動の磁場による変化があり, これらの効果の検討から層状物質のアンダーソン局在の起因が理解できる。

ミセル系の構造と機能

東京理大工 北 原文 雄

分子集合体の中で、分子が一定の配向構造をとるものとして、膜、ミセル、ベシクルなどがある。膜は単分子膜、二分子膜、多分子膜などの形態をとるが、単分子膜、二分子膜が巻いたものがそれぞれミセル、ベシクルであり、単分子膜の巻き方で正常ミセル、逆ミセルが形成される。ベシクルについても逆ベシクルが存在し得るだろうが、これはまだ全く手がつけられていない。

膜、ミセルの研究の歴史はすでに数十年になるが、その新鮮さは失なわれていない。それは、それらの機能的見地からの研究が遅れていたからだといういゝ方ができるかもしれない。ある物質系の学問の研究はある分野の人達が集中して進歩するが、それには限界がある。他分野の人達が違った見地からそれに着目して、また新しい視野が広がっていく。ミセルは1920年代から物理化学者によって開拓された分野で、有機化学者は合成界面活性剤という素材を提供するにとまっていた。1950年代の終りから、反応の場という見地から有機化学者がミセルに着目して、ミセルの新しい機能が見出され発展するに至った。それがミセル触媒である。

膜についても、生体膜のモデルとしての膜機能の研究により、膜の研究は新しい展開を見せるようになり、工業膜としての利用の発展とともに、日本では膜学会の誕生をみるに至った。

膜、ミセルなどのミセル系という分子集合体について新しい展開が行なわれつゝある現今、分子科学研究所がミセル系に着目して、その構造を見直し、その機能の展開をはかるための研究会を開催するに至ったことは正に時宜を得たものといえよう。この研究会の狙いから、話題提供、討論に参加する研究者としては、コロイド・界面化学の分野のみならず、光化学、反応機構、高分子溶液論などの分野からも参加して頂いた。それに分子研の研究者も参加し、かなり違った分野からの意見交換、討論が活発に行なわれたという点で、ふつうの学会では得られない成果があったといえよう。

研究会は11月30日、12月1日の両日にわたり、つぎのような話題提供の下に討論が進められた。

Session I ミセルの構造と機能 司会 北 原文 雄 (東理大工)

ミセルの展望 目 黒 謙次郎 (東理大理)

濃厚ミセル溶液物性 池 田 勝 一 (名大理)

ミセルの光化学 又 賀 昇 (阪大基礎工)

機能性ミセル 太 垣 和一郎 (群馬大工, 現阪市大工)

Session II 膜状ミセルの構造と機能 司会 松 浦 良 平 (九大理)

膜の展望 中 垣 正 幸 (京大薬)

ベシクルの生成 国 武 豊 喜 (九大工)

ベシクルの機能 鋤 柄 光 則 (東大生研)

単分子膜, 多分子膜 福 田 浩 成 (埼玉大理)

Session III ミセルの展開 司会 蓮 精 (筑波大)

分子物性研究における配向と会合の意義 篠 田 耕 三 (横浜国大工)

逆ミセル 妹 尾 学 (東大生研)

荷電をもつ溶質の希薄溶液構造 伊 勢 典 夫 (京大工)

討論の中に示されたいいくつかの問題点について、レポーターの感想を混えながら報告しておきたい。

ミセルの構造について、その動的挙動が問題になった。たとえば、ミセルのかたさ、やわらかさなどもそれに関する問題であり、ミセルの触媒機能と関連して今後さらに研究されるべき点であろう。また、ミセル界面は単純な球面ではないだろうし、溶媒としての水がミセル内に侵入し得る。これらについて実験的証処を含めて論議された。

また、ミセルのlocal な性質がさらに研究される必要があろう。これは逆ミセルについても行なわれるようになっている。

ベシクルという新しい“ミセル”が、ある条件を備えれば多くの両親媒性物質によって形成され得ることが示されたが、ベシクルについてはその構造、機能を含めて今後その研究の展開が期待される。ベシクル内部に局限されている水は、逆ミセルに可溶化されている水とともに、微少な相としていろいろの利用の仕方が考えられるだろう。

ベシクルの2分子層膜、また多分子層膜などは配向した分子集合体として種々の化学反応の場に利用され始めつつある。種々の化学種を用いることにより、性質の異なる場を作り得るので、生体内酸化還元反応、エネルギー変換作用のモデル反応など多方面の研究に対する場が用意されつゝあるといえよう。

極端紫外連続光(UVSOR)

分子研 木村 克美

表題の研究会は、昭和54年12月17、18日の両日、約65名が参加して分子研において行われた。シンクロトロン放射光(SOR)は分子科学にとって画期的なすぐれた極端紫外光源である。現在、分子研では0.6GeVの極端紫外光実験施設(UVSOR)計画が積極的に進められ具体化の方向に向っている。このUVSOR計画を広く所外に紹介するため最近(昭和54年4~11月)三回にわたってパンフレットを出版してきた。さらにこの計画に対する所外の方々の理解を深めていただくと同時に種々率直な意見を出していただくために本研究会が企画された。

研究会は大きく分けて、A)光源、B)観測システム、C)関連分野における利用である。以下、プログラムの順を追って研究会の様子をふり返ってみる。

A) 光源

- | | |
|--------------------------|-----------------|
| 1. UVSOR光源の概略 | (分子研) 渡 辺 誠 |
| 2. UVSORの制御系 | (分子研) 内 田 章 |
| 3. UVSORの真空系 | (分子研) 酒 井 楠 雄 |
| 4. 電子ストレージングにおけるビームの不安定性 | (東大核研) 片 山 武 司 |
| 5. ウィグラーの実用性について | (東大物性研) 北 村 英 男 |
| 6. 衝撃波遅延管の特性 | (高工研) 佐 藤 繁 |

このセッションはUVSORのマシンに関するものである。まず、UVSORの光源部分の概略について渡辺が説明し、ストレージング、シンクロトロン設計について詳しく紹介した。さらに、UVSORからの光の特性についても説明があった。ついで、内田、酒井によってそれぞれ制御系、真空系の基本方針が説明された。片山は一般論として電子ストレージングにおけるビームの不安定性に関して理論的にいくつかの要因を解説した。北村はウィグラーの実用性についてその特性を取りあげた。佐藤は気相の実験に欠かせない衝撃波遅延管(acoustic delay line)についての原理、構成、および測定結果を紹介し、今後の見通しを述べた。

B) 観測システム

- | | |
|--------------------|----------------|
| 1. UVSOR観測システムの概略 | (分子研) 木 村 克 美 |
| 2. 斜入射分光器について | (阪市大工) 石 黒 英 治 |
| 3. SOR光源の特徴と紫外用分光器 | (京大理) 加 藤 利 三 |

- | | |
|---------------------|-------------------|
| 4. 有機固体の分光と光電子分光 | (分子研) 関 一 彦 |
| 5. 固相における光化学反応 | (分子研) 中 川 和 道 |
| 6. コメント | (筑波大) 石 井 武 比 古 |
| 7. 気体の分光と光電子分光 | (分子研) 木 村 克 美 |
| 8. コメント | (京大化研) 伊 吹 紀 男 |
| 9. 気体の光化学と反応素過程 (1) | (分子研) 小 谷 野 猪 之 助 |
| 10. " (2) | (分子研) 正 畠 宏 祐 |
| 11. コメント | (東工大理) 小 尾 欣 一 |
| 12. 計測の自動化とデータ処理 | (分子研) 阿 知 波 洋 次 |
| 13. コメント | (高工研) 太 田 俊 明 |

このセッションではUVSORの観測システムの紹介と若干のコメントのほか、SOR用分光器の一般的な解説とそれに関連したSORの特性について紹介があった。石黒は斜入射分光器の原理と構造についての一般的な解説のほか、「石黒マウン」の新しい方式を紹介した。加藤はSORの光の特性とその分光について詳しく解説した。これらはいずれもUVSORの分光器の機種決定に際して重要な事柄である。UVSORの観測システムは次の四つの分野に分かれている。1) 分光、2) 光電子分光、3) 光化学、4) 反応素過程、それぞれ、気相および固相に対する測定装置の紹介が行われた。木村は気体の分光と光電子分光、関は有機固体の分光と光電子分光、中川は固相における光化学反応について、それぞれSORによる研究の方向と装置の概略の紹介を行った。石井は東大物性研SOR-RINGを使った極紫外固体分光実験の経験について述べた。伊吹はAladdin(ウイスコンシン)での気相の光吸収断面積および光イオン化収率の決定に関する演者の経験を紹介し、気相の分光実験における種々の注意事項を指摘した。

つぎに、小谷野はUVSORによる気体の光化学と反応素過程の研究の狙いと測定原理について説明した。正畠はそれと関連して光子の詳しい見積について系統的に説明し、検出の可能性について述べた。小尾はSORを用いた光解離反応の研究例を紹介し、その有用性を指摘した。

観測システムにおける計測の自動化とデータ処理の問題では、阿知波は一例として北大応電研の方式を紹介し、太田は高工研における計画を説明した。

C) 関連分野における利用

- | | |
|---------------|---------------|
| 1. SORの絶対測定 | (阪市大) 小 塩 高 文 |
| 2. X線回折用格子の製作 | (名大工) 加 藤 範 夫 |

このセッションではトピックスを取りあげた。小塩はSORの絶対測定に関して演者の研究成果を中心に解説し、加藤は主としてA-X線に対するフレネル・ゾーン・プレートの製作について紹介

した。

UVSOR 計画は分子研の創設段階から大型研究設備の一環として取り上げられてきた。世界の SOR を用いる研究のすう勢は分子研の創設当時の予想をはるかに上まわる勢いで発展しており大型から中型、小型にいたる種々の SOR 施設の建設あるいは計画が活発に進められている。わが国でも SOR-RING (東大物性研) がすでにあり、またフォトン・ファクトリ (高エ研) の建設が進められている。これらと相補的な役割を果たし、かつ地域的なバランスがとれた中、小型器の建設が切望されており、UVSOR 計画はそうした要望にそったものである。分子科学の研究は光と分子との相互作用を通して分子の性質と機能を研究する新しい段階を迎えており、UVSOR 施設の設置は分子科学およびその関連分野の研究を飛躍的に発展すると期待される。SOR の研究は理論研究グループとの連携や他の実験研究グループとの連携が今後ますます重要になってくるので、分子研の研究環境の中で UVSOR 施設が育てば、その意義は大きいであろう。

今回の研究会は分子研の UVSOR 計画をはじめて具体的にとりあげたもので、多数の所外参加者 (所外45名) からこの計画と関係して沢山の貴重なご意見や示唆を頂いた。今後の UVSOR 計画の推進に今回の研究会は大きなはげましとなった。なお、本研究会の講演要旨集は分子研 UVSOR-4 号として印刷されている。

分子科学研究将来計画

分子研 広 田 栄 治

日時 昭和54年12月22日 14:00-20:00

場所 分子科学研究所 研究棟201号室

I

分子科学研究の中心として、その役割が期待されている分子科学研究所は、昭和54年11月8日創設披露式を挙行し、ようやくその創設過程を終ろうとしている。研究所の設立は昭和30年代に発想され、40年代にかけてその構想につき研究者の間で議論が積み重ねられてきた。現在の研究系、部門等の構成はこの間行われた討議を基礎として形成されている。基礎科学研究所としてその基本方針にはいささかの变化もないが、学術発展の最近の進歩は著しく、その変遷に対応した研究および研究体制の再検討は不断に緊要である。以上の観点から分子研をふくめた分子科学研究の将来を、再び捉えなおすことを目途として本研究会を企画した。

将来計画は研究自体に関するものと研究を支える研究体制に関するものに大別できよう。今回はより重要な前者に力点を置くこととした。

II

- 先ず赤松所長司会の下に、自由な立場から意見交換を行った。以下述べられた主な意見を列挙する。
- 主題をしばった研究 (例えば、SOR を中心とした研究) を行うのが好ましい。データベース作成に対する分子研の参画を期待する。(高柳教授)
 - 研究レベルの向上は、分子研内外とも並行して行われることが必要である。(田仲教授)
 - 分子科学では重要な概念 (例えば CT complex) が既に多数提出されているが、なおその確立に向ってなすべき仕事は多い。これらの概念が確立された次の段階が問題である。(馬場教授)
 - 「分子科学」を既成の考え方にとらわれて狭く解釈すべきではない。新しい観点からこの分野を捉えなおすべきである。(大滝教授)
 - 研究所は人材、構造、機能の3点から考えるべきである。現状では構造に議論の余地が残されている。(千原教授)
 - 量子化学計算は化学への寄与が重要な課題で、今後、高励起状態、準安定状態、transient 分子等に関する研究を中心として進めて行くべきである。(福井教授)
 - 東大物性研では物性研究の将来計画として、(1)精密化、(2)材料、(3)実験技術の3本の柱を立て、これらを中心として進行させている。(菅野教授)
 - 将来計画を「戦略」と「戦術」に分けて考える。すなわち具体的な個々のテーマは専門の研究者による研究会に委ね、こゝでは広い立場から研究の将来(戦略)を考えるべきである。(長倉教授)

III

長倉教授の最後の提案を受けて、同氏を座長とし分子科学研究の将来をや、一般的な立場から整理することとした。以下は提出された項目である。

A. 極限状態

A-1 高感度化 (および高分解能化)

励起分子、反応中間体の研究等

分光法としては光からラジオ波までを包含する

A-2 特殊条件下における化学反応

a) 宇宙空間の化学

超高真空、超低温での化学反応

b) 高エネルギーの化学反応

c) 固体表面の反応

d) 低濃度での反応

e) 電磁場下での反応

f) 生体内反応

g) ビーム条件下の反応

A-3 極限条件下の構造と物性

A-4 分子系に対する擾動の極限

A-5 時間の極限下における現象と測定

B. 対象

B-1 特別な相互作用をもつ分子系

例えば van der Waals 分子, 低次元化合物, exciplex, 表面等

B-2 機能性分子系

集合の形成に伴って生ずる新しい機能をもつ系

B-3 高い分子内エネルギーをもった分子

B-4 分子情報系 (DNA など)

B-5 凝縮系

C. 新しい方法論 (理論)

C-1 電子状態の計算法

C-2 相互作用の理論

C-3 Dynamical な理論

C-4 統計的な問題

C-5 非力学的理論

例えば, トポロジー等

D. 新しい方法論 (実験)

D-1 新しい擾動方法の開発

D-2 新しい検出システムの開発

D-3 新しい分子機能および現象の観測系の設計

D-4 分子設計

なお, 現在の学問は多岐にわたり, しかもきわめて速かに変化進展している。10年はおろか5年先の予想を立てることすら困難である。1年後に再びこのような検討会をもつことが提案された。

IV

最後に再び赤松所長の司会に戻り, 分子研所員各人から研究の現状と将来への展望の紹介があり,

所外参加者から二三のコメントがよせられた。一つ話題に上ったことは所内外の交流で, 研究機器の交換を通じた交流が提案された (井早教授) が, 人的交流によって真の共同研究が行われるとの意見が大方の賛同をえた。

ベンゼンおよびアザベンゼン類の光化学初期過程

分子研 吉原 経太郎

ベンゼンやアザベンゼン類は芳香族有機化合物の基本となる化合物であるので古くから有機化学, 物理化学の中心的研究課題であった。近年光化学の分野においても無輻射遷移についての考え方の進歩, 種々の実験技術の進歩, あるいは研究のニーズというべきものの変化に伴って, さらに大きく進歩している。たゞこれまで分野別に研究が分化していて, 標記のような統一テーマにそって研究者が一堂に会することはなかったように思える。したがって今回は分野にとらわれず集ってお互いに意見を交換することとした。一つの分子についても色々な側面について学ぶことができ有意義であった。プログラムに従って, 会の概略の説明を記すこととする。

「アザベンゼンの振電準位からのエネルギー緩和」山崎 巖 (北大応電研)

各種のアザベンゼン類の無衝突気相状態での単一振動励起準位からの発光, 緩和, 光化学反応について報告があった。これらを研究するには正確な吸収スペクトル, 蛍光励起スペクトル, 量子収率スペクトルを測定することが必要である。最新のエレクトロニクスとコンピューター技術を駆使して見事なスペクトルが得られ, これに基づいて, 無輻射遷移の機構についての詳しい討論と高い振動励起準位での光化学反応性について議論を行った。

「アザベンゼンの回転振電準位からのエネルギー緩和」馬場宏明 (北大応電研)

上の実験より分解能をさらに2桁上げると分子の回転振電準位からの発光を観測できる。これは250万分の1の地図を2万5千分の1の地図に書きかえることに相当し, 分子の励起状態について極めて詳しい情報を得ることに相当する。特に注目されることは, ベンゼン, ナフタリンでは蛍光量子収率スペクトルに回転状態の影響は全くなく, これまでの一部の研究 (西独などで行われた) は間違いである事, ピラジンやピリミジンではこの影響がはっきり観測されることである。今後豊富なデータが得られ, 研究が進展するものと期待される。

「ベンゼンの多光子イオン化スペクトル」 茅 幸二, 村上純一, 伊藤光男 (東北大・理)

最近レーザー光を気相分子中に集光することにより, 容易に多光子過程によるイオン化がおこることが見出された。これを Multi Photon Resonant Ionization (MPRI) という。ベンゼンを可視部の色素レーザーで励起するとまず2光子で励起一重項状態に上り, さらに2光子を吸収してイオン化が起こる。この現象を利用して1. 分光学の分野では高分解, 高感度の多光子分光ができる。2. 反応の分野では所謂 state-to-state chemistryの研究が行えるので有望な方法である。この方法で観測したベンゼンの2光子吸収スペクトルを示し, 問題点を指摘した。

「ピラジンのSVL蛍光と2光子吸収スペクトル」 鈴鹿 敢, 宇田川康夫, 男沢 弘, 三上直彦, 伊藤光男 (東北大・理)

ピラジンの非調和バンドの解析より緩和と蛍光量子収量の関係, スペクトルの帰属, ポテンシャルの形, 共鳴ラマン吸収との関係等広い範囲にわたった詳細な議論を行った。

「ベンゼンおよびアザベンゼン類のIntersystem Crossing」 安積 徹 (東北大・理)

一般的な立場より Intersystem Crossingの成因について, いくつかの原因が示された。個々の分子についてはどの原因によって最も大きな Intersystem Crossingが誘起されるか異っており, 統一的な解釈は困難であるようである。

「デュワーベンゼンの生成, 分解反応の理論的考察」 津田 稯 (千葉大・薬)

INDO/S法による標記反応のポテンシャル面の計算結果を示し, 反応機構を論じた。

「気相および液相ベンゼンのレーザーフォトリシス」 中島信昭 (分子研)

これまで所属の不明であったベンゼンの第4番目の π 励起状態 1E_g を見出した。又気相反応において, 飽和蒸気圧以下で光誘起クラスター生成が起ることを示した。この過程は所謂第3チャンネルといわれる不明の過程である可能性があることを示唆した。

「トリプチセン類の光化学」 菅原 正 (分子研)

トリプチセンおよびアザトリプチセンの光分解によるカルベンおよびナイトレンの生成, 生成経路の有機化学的な研究法について, 実際の研究に基づいて説明した。

「ナフタリン誘導体の光原子価異性」 吉田善一, 三木定雄 (京大・工)

ナフタリン骨格の一部に tert-Butyl 基を入れる事によって, 高歪をもったデュワー型, ベンズパレン型の化合物が安定に得られる。これら歪をもった化合物の光化学について興味ある結果を示した。

「ベンゼンの第3チャンネル」 金丸信明 (名大・理)

無輻射遷移の理論に基いて, 第3チャンネルの機構が説明され, 異性化反応が Internal Conversionの中間に存在するという考え方を示した。

「クロルベンゼン, ベンジルクロライドの光分解」 市村禎二郎 (東工大・理)

標記化合物の光分解の foreign gas 効果, 波長効果, 蛍光寿命等の研究からその機構について詳しく論じた。

「ジクロルベンゼン, クロロトルエンの光分解」 森 雄次 (東工大・理)

上記と同様の方法で標記化合物の反応機構を論じた。特に o-, m-, p- 構造異性体による反応収量の違いを詳しく論じた。

「分子線によるハロゲン化芳香族の光分解」 川崎昌博 (三重大・工)

各種ハロゲン化芳香族のレーザー光分解による Fragment Translational Energyの解析を行い, 分子種によるエネルギー分割過程, 特に安定異性体のでき方等について論じた。

「2, 2-バラシクロフェンの電子状態および光化学反応性」 石川俊一 (東大・物性研)

標記化合物の結晶吸収スペクトル, T-T吸収スペクトルより電子励起状態について詳しく解析した。三重項状態を経る2段階光化学開裂反応, 反応の波長効果について説明を行った。

Purification and Crystal Growth for Molecular Crystals

電通大 佐野 瑞香

物性研究に於ては, 試料の良し悪しが結果に極めて大きな影響を与え, 良い試料を得たものが常に正しい結果を得ている。良い試料とは化学的に純粋で, 物理的に完全な試料であり, 各研究者はそのような試料を得ようと努力しているが, しかし一般に, 試料作りの詳細については論文に記さ

れていないのが常である。そこでSloan博士 (du Pont 中央研究所) およびWolf教授 (Stuttgart 大学) とともに、分子性結晶研究のための試料作りに日頃苦勞している専門家が集まり、その秘法も出し合い、討議するための研究会を開催した。

出席者数は20名で、つぎの各氏が話題を提供した。

○The identity of impurities in pyrene and stilbene and their removal

(du Pont 中央研究所) G. J. Sloan

コールタールから分離したピレンには4,5-フェナントリレン・スルフィドが多量に含まれていて、クロマトグラフィーでは除けないが、ラネーニッケルでフェナントレンに変えて、帯融解すればよい。ピレンが淡黄色に着色しているのは3種の含窒素複素環化合物のためで、活性炭を通して昇華すると除ける。一般に広く利用できる活性炭、あるいはKOHペレットのカラムを通して行なう昇華装置の説明があった。

○Purification of Violanthrene series

(分子研, 東邦大*, 明星大**)。井口洋夫, 青木淳治*, 岩島 聡**

建築染料の還元で得られるビオラントレンなどの縮合多環芳香族化合物は、その同族体を含んでいるので精製が困難である。そこで、純物質を得るためには、その同族体が形成されないような合成順序をとらなければならない。さらに、金属ナトリウム (ジエチレングリコール) 処理、無水マレイン酸処理、再結晶などにより、不純物濃度を 10^{-6} mol/mol以下まで下げることができた。

○Analysis of polycyclic aromatics by a liquid chromatography with a fluorescence detector

(分子研) 菅原 正

芳香族炭化水素を試料に用いるときは、まず高速液体クロマトグラフィーにかけてみることである。予想外に多種の不純物が含まれていることがわかる。

○Purity and emission spectra of chrysene crystals

(化学技術研) 石塚靖子

無水マレイン酸処理、アルミナによるカラムクロマトグラフィー、再結晶、帯融解をしても 6×10^{-5} mol/molのアントラセン、その他2種の不純物が残っている。この不純物は多分ベンゾカルバゾールで、加熱したKOHを通して昇華すれば除去できるであろう。

○Crystal growth of the perylene-TCNQ 3:1 complex

(学習院大) 石井菊次郎

二股に分かれたガラス容器の一方にペリレン、他方にTCNQ粉末を入れ、両分子が拡散により接するようにベンゼン溶媒を静かに注いでやると、1~2週間後に(3:1)結晶が得られた。

○Crystal growth of TCNQ salts

(電総研) 安西弘行

すべての操作をN₂で充したドライボックス中で行なわなければいけない。アニソールを溶媒にするとTMTTF-TCNQの比較的大きな結晶が得られた。赤外顕微鏡を用いて得られた結晶をチェックする必要がある。

○Crystal growth and electrical properties of (SN)_x

(阪大工) 金藤敬一

-10℃でS₈N₂を作り、5-6℃で(SN)_xに重合する。良い結晶は4.2Kと300Kでの電気伝導度の比が $\sim 10^3$ であるが、悪い結晶では30以下である。歪んだ結晶やγ線を照射した結晶は30K付近に電気抵抗の最小を示す。

このほか、Wolf教授によりStuttgart大学附置のKristall Laboratoriumの紹介があった。全学に試料を提供しているのがであるが、N. Karl博士を主任研究員として、技官4名、大学院学生1~2名がおり、炭化水素、CT錯体、ジアセチレン、亜硝酸塩などの結晶を作っている。Bridgman炉が15基もあるとは驚きであるが、化学処理、昇華、クロマトグラフィー、帯融解の装置、また試料のcharacterization用としての各種分析機器が動いている。

分子研でも化学試料室あたりにこのようなセンターが出来れば良いかと願っている。

非ポルフィリン系マクロサイクリック錯体の構造と機能

分子研 伊 藤 翼

ポルフィリン核やコリン核をもつ金属酵素のように、金属イオンが環状構造をもつ有機配位子にとり込まれた錯体——マクロサイクリック錯体——は、非環式の錯体と比べて、著しく異なった挙動を示す。1970年代に、環状配位子を含む金属錯体を化学的に合成する試みが、組織的系統的に試みられ、環状構造に由来する金属イオンの識別機能、酸素錯体の生成、安定な異常原子価錯体の生成、酸化還元電位のコントロール、スピン平衡系錯体の生成など分子科学的に興味ある実験結果が多数報告されている。この分野の化学は、比較的大きな領域にわたっているために、我国における研究者の学会発表の場がばらばらであり、比較的研究者間の交流が少ないのが現状である。研究会は、この交流を目的の1つとして企画された。また、一昨年“ポルフィリン錯体”に関する分子研研究会が開催されているので(分子研レターズ No. 5 (1978)), 今回は、非ポルフィリン系マクロサイクリ

ック錯体に焦点をしばった。

表題の研究会は、昭和55年3月14～15日、分子研で開催された。研究会開催許可が年度末にでたこともあって、参加者20名の比較的小規模な研究会となった。研究会は、木村栄一氏（広島大医）による総合的レビューに始まり、ひき続いて、各講演者がそれぞれ行っている研究の背景および最近の研究成果を紹介する型式で進められた。

講演題目、講演者は以下のとおり。

- (1) “Macrocyclic complexの化学の現状と将来” 木村栄一（広島大医）
 - (2) “環状テトラピロール類の遷移金属錯体の電気化学的挙動” 松田義尚（九大工）
 - (3) “銀(Ⅱ)マクロサイクリック錯体の電気化学的挙動” 鈴木諄亮（静岡大教育）
 - (4) “新しいCurtis型配位子” 佐分利正彦（東大工）
 - (5) “Macrocyclic Polyamine錯体” 児玉睦夫（弘前大教養）
 - (6) “環状ヘキサエチレンヘキサミンコバルト(Ⅲ)錯体” 吉川雄三（名大理）
 - (7) “クラウンコンプレクサン型キレート試薬の合成と錯形成挙動” 高木 誠（九大工）
 - (8) “トリアザシクロアルカン錯体” 野々山松雄（名大理）
 - (9) “マクロサイクルを配位子とするNi(Ⅱ)平面錯体の電子励起状態——MCDの立場から——” 小林 宏（東工大理）
 - (10) “金属錯体と有機分子とのCT錯体” 木田茂夫（九大理）
 - (11) “配位性溶媒分子、ハロゲンイオンの配位に伴うマクロサイクリックNi(Ⅱ)錯体の配位数異性とスピン平衡” 望月 桂，藤本昌利（北大理），伊藤 翼（分子研）
 - (12) “Ni(Ⅱ)-マクロサイクルの結晶構造と2，3の性質” 鳥海幸四郎，伊藤 翼（分子研）
- 参加者数が20名と比較的小規模であったこともあり、討論は極めて活発であった。表題の研究分野において、第一線で研究を続けている参加者の興味や研究上の問題点を互いに討論する機会をもてたことは、大変有意義であった。また、今後研究すべき多くの問題が提起された。

光化学への分子線的应用

分子研 木村克美，正 畠 宏 祐

最近の分子線技術及びレーザー技術の進歩はめざましいものがあり、気相光化学反応の分光学的

研究がますます進展する可能性がでてきた。我が国では比較的若手の研究者がこの分野で活躍している。従って、その人達に、主として実験または解析における苦労話，裏話，ホラを中心とした実際に発表論文に載らないことを話してもらうことによって、将来この分野で研究を進めて行こうという研究者に一助にでもなればという願いから本研究会を行なった。昭和55年3月14，15日の二日間にわたって、約45名の国内の若手研究者の参加のもとに開催され、活発な討論が行われた。所外出席者は23名であり、その点では大きな研究会であった。

プログラムを次のように5つのセッションに分けて講演及び討論が行われた。

- [A] 化学発光と消光過程
- [B] 光解離動力学
- [C] 分子会合体
- [D] 分子線技術
- [N] 自由発言

以下講演の順を追って説明しよう。

3月14日午前

- [A] 化学反応と消光過程
 - (A1) 楠 勲（東北大科学計測研）
- “10年前の分子線による化学発光の研究”
- (A2) 林 茂雄（電気通信大）
- “準安定($^3P_{0,2}$)水銀原子線の生成とその反応”
- (A3) 玉懸敬悦（岡山大薬）
- “赤外化学発光の実験と問題点”
- (A4) 秋元 肇，井上 元（国立公害研）
- “CH₃Oの発光をめぐって”
- (A5) 中川邦明（東大理）
- “I₂(B→X) けい光の消光過程”
- (A6) 梶本興亜（阪大基礎工）
- “OH($^2\Pi$, ν)の発光と消光過程”

3月14日午後

- [B] 光解離動力学
 - (B1) 川崎昌博（三重大工）
- “レーザー誘起けい光法，飛行時間法によるCS₂の193nm光分解”

(B2) 渡辺 肇 (東大教養)

“多原子分子の単分子解離反応について”

(B3) 永田 敬 (東大理)

“シアン化合物の光解離励起過程”

(B4) 加藤 肇 (神戸大理)

“光励起による直接解離と衝突により誘起された解離”

(B5) 福山 力 (国立公害研)

“ $\text{He}^* + \text{Ne}$ 系の弾性散乱とエネルギー移動”

(B6) 正嶋宏祐 (分子研)

“オゾンの266nm 光解離動力学”

[N] 自由発言

夕食後に行われた。

(N1) 手島光司 (京大工)

“衝撃波管を用いた数 eV 領域の分子線装置の開発”

(N2) 楠 勲 (東北大学科学計測研)

“TOF 法によるアンモニア・ノズル分子線の研究”

(N3) 山崎 巖 (北大応電研)

“分子内電子緩和と分子線”

(N4) 中島信昭 (分子研)

“レーザー励起によるベンゼン油滴の生成”

(N5) 田中健一郎 (分子研)

“TEPSICO 実験における問題点”

(N6) 西 信之 (分子研)

“すい星における光化学反応のロマン”

(N7) 井上 元 (国立公害研)

“ $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}$ ラジカルのLIF”

(N8) 木村克美 (分子研)

“分子研UVSOR計画”

(N9) 花崎一郎 (分子研)

“化学反応はコントロールできるか”

3月15日午前

[C] 分子会合体

(C1) 北川泰司, 森 佳洋 (富山医薬大薬)

“ノズル分子線による分子会合体の光スペクトルと質量スペクトル”

(C2) 広岡知彦 (東大理)

“水素分子クラスターの生成”

→ (C3) 野本克則 (名大理)

“ギ酸, 酢酸二量体の HeI 光電子スペクトルの測定”

(C4) 山下雅道 (東大宇宙航空研)

“超音速自由噴流法におけるダイマーの生成”

[D] 分子線技術

→ (D1) 友田真二 (京大理)

“超熱エネルギー領域のアルカリ原子の利用”

(D2) 三上直彦 (東北大理)

“Pulsed Supersonic Free Jet の試作とその応用”

(D3) 手島光司 (京大工)

“パルス作動型分子線装置”

以上の講演テーマが示すように、非常に多岐にわたって、しかも多くの講演がなされた。講演テーマは必ずしも、そのまゝ内容を示しているとは限らない。これは、実際に実験を手掛けている研究者が、研究を進めていく過程で、非常に苦勞をした点、予想よりうまく行った点、裏話などの通常論文には記述されない点をひろうする目的でこの研究会をもつことになった当然の帰結であろう。我が国には光化学研究者は多いが、分子線法を用いた研究者は比較的少ない。将来は、分子線法を応用した光化学の研究はますます盛んになるものと期待される。スケジュールが過密であったにもかゝらず、得るところが大であったという評をいただき、世話人一同大いに喜んでいる。

高性能大型レーザーの開発と応用

分子研 広 田 栄 治

比較的大きなスケールでレーザーに関するプロジェクト研究を行っている機関が全国に数ヶ所あ

り、それらの間の連絡調整を目的とした会合が過去に数回持たれた。今日もほぼ同様の趣旨の研究会である。研究機関と代表者は次のとおりであった。(以下敬称略)

東京大学物性研究所 (長倉三郎, 塩谷繁雄, 矢島達夫)

理化学研究所 (霜田光一, 中根良平)

電気通信大学 (宅間 宏)

大阪大学核融合研究センター (加藤義章)

分子科学研究所 (吉原経太郎, 広田栄治)

研究会開催日は昭和55年3月15日である。

先ず宅間から電気通信大学に昭和55年度発足が予定されている「新形レーザー研究センター」(仮称)の内容について説明があった。このセンターの目的は、実用核融合炉用ドライバーとして用いられる高出力、高効率レーザーの開発のための基礎研究と、それを通じたレーザー研究一般のレベル向上である。このセンターは学内利用機関であるが、客員部門には東京周辺の機関のスタッフを迎え、より広い範囲の共同利用に供する予定である。昭和55年度は専任教授、助教授、助手各1名(助手は振かえ)が内示の段階で認められており、将来は専任、客員各3部門に拡張する計画である。建物の見通しは未だたっていないが、特別設備費が昭和55, 56, 2年度にわたって支出される見込みである。またこの他に運営費を要求する。具体的な研究計画としては、出力1 MJのエキシマーレーザーを目指し、レート方程式を用いたレーザー挙動シミュレーション、パルス波形の整形等の問題をとりあげ、次年度以降の試作に備える。

次いで加藤から阪大レーザー核融合研究センターで行われてる金剛計画(10年計画)、その前半の大部分を占める激光12号ガラスレーザー(出力20kJ, パルス幅1 nsec, ピーク出力40TW)について説明があった。すでに予備的研究が行われ、好成績を得ているとのことであった。

塩谷は東大物性研における極限レーザー開発計画(5ケ年計画, 昭和54年度発足)の進捗状況について説明した。建物は昭和55年度着工, 同57年度完成の見込, 人員は3研究室を投入するが、この他に助教授1名が追加された。この計画に関連して物性研では部門制の再検討が行われており、5部門程度をまとめた大部門が考慮されている。

霜田は理研における研究計画が第5年目に入り、レーザー棟第2期工事の本年7~8月完工を含めて研究が順調に進んでいることを報告した。

最後に吉原と広田から、分子研におけるレーザー機器(第I~第III期大型研究設備)の使用状況、設置状況について報告があった。

以上の報告から、レーザーに関するわが国の大型プロジェクトは一通り出揃い、それぞれの計画に沿った研究の推進が開始されているという点に一致した見解が得られた。

外国人研究員紹介

K. H. Grellmann 博士について

分子研 吉原 経太郎

Karl Heinz Grellmann博士は1960年、励起状態におけるプロトン移動の研究を行いシュトゥットガルト工科大よりPhDを得ている。当時Th. FörsterとA. Wellerが同大学においてこの方面の仕事を行っていたが、その推進役となった。その後ミネソタ大でR. Livingston教授、ブランダイス大でH. Linschitz教授の下で研究を行い、西独に帰国した。エルランゲン大学を経て、現在のMax-Planck-Institut für Biophysikalische Chemie(A. Weller所長)に招かれて現在に至っている。

最近の興味の中心は一言で言うと複雑な有機化合物の光化学初期過程の研究である。特にベンゼン、ヘリセン、チオインジゴ、エナミン、ベンジリデンアニリン等々の光化学初期過程、ドナー-アクセプター系のトリプルコンプレックスの生成反応等が著名である。手法はマイクロ秒やナノ秒のフラッシュフォトリシス、蛍光寿命の測定であるが、所謂光物理的初期過程の研究にとどまらずむしろ極めて積極的に光化学の問題を扱っている。本研究所の関連分野の研究者とよい議論ができるものと考えられる。

同博士は1978年に学振の短期プログラムで東大物性研に滞在した。この際分子研を訪問し、さらに長期間、分子研に滞在して研究を行いたい旨意志表示があり、今回の招待となった。1978年以来人的交流も2回にわたって行われているので、分子研における研究もスムーズに行われることを期待している。

センターニュース

電子計算機センター

当センター利用者の方々には速報を隔月に発送してお知らせしていますが、センター利用者以外の方にも広くご理解していただくために本号より新しくダイジェストとして報告していきます。

1. センター現況

昭和54年4月から HITAC M-200H (主記憶容量12MB, ディスク容量7150MB) 1台とM-180 (主記憶容量4MB, ディスク容量3340MB) 1台の構成に替わりました。M-200HはM-180の約2.7倍のCPU処理能力があります。来年度(昭和56年度)からはさらに両システムを疎結合することにより一体化し、より使い易いシステムを実現する予定です。

当センターのプログラム・ライブラリには開発公募(4項を参照)によって開発されたプログラム数十本、QCPEの全プログラムなどが登録され、既に多数の方々に利用されています。プログラムの存在、使用方法、利用状況をTSS端末から検索できるシステムになっています。量子化学文献データベース(1977~79)も全リストを自由にとれる他、検索することもできるようになりました。

2. 昭和54年度利用状況報告

昭和54年度は53年度から引き続きM-180×2マルチプロセッサシステムによるサービスが行われ、次に示すように非常によく利用されました。

(1) 総処理件数およびCPU使用時間

計算サービス時間	処 理 件 数	CPU使用時間
12,140.8H	155,980件	6,494.3H

(2) 分野別区分別利用状況

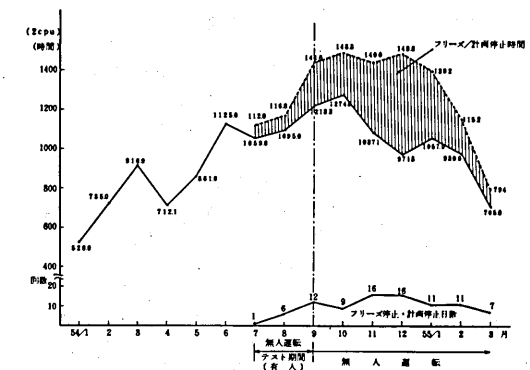
利用分野	利用区分	プロジェクト数	ユーザ数	時 間	
				許 可	実 績
分子科学	施設利用	93件	185人	3,006時間	2,279時間
	共同研究	3	14	193	178
	協力研究	51	51	1,265	426
	所 内	26	68	3,957	3,190
生 理 学	施 設	3	4	33	7
	所 内	2	9	30	1
基礎生物学	所 内	2	7	70	0
合 計		180	338	8,554	6,081

*所内はアイドル時間の利用を含む

3. 無人運転システム稼働報告

当センターでは創立以来、本格的無人運転システムの実現を目指してきましたが、昭和54年9月から定常的な運用を開始しました。無人運転は従来のオープン利用時間帯以外の夜間、日曜日、祝祭日に行います。無人運転時には計算機センター内への出入りはできませんが所外・所内のTSS端末/RJE端末からの遠隔利用およびバッチジョブの処理が行われます。これによりシステムは原則として毎週始めのセンター業務時間(午前中)を除いて、1週間単位の連続運転となります。ただし処理すべきジョブやセッション開設中のTSS端末が一定時間続けて少数になった場合には節電/省エネルギーのためシステムはジョブを凍結(フリーズ)して自動停止し、空調機も同時に自動電源切断します。図1に昭和54年度の無人運転システムの稼働実績をグラフで示します。このような完全無人運転は当センターの創意によるもので、おそらく世界ではじめてのものです。

図1 月別通電時間及びフリーズ停止・計画停止回数



4. 開発公募とプログラム情報の募集

今年度も昨年度に続き、分子科学・基礎生物学及び生理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の公募を行っています。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ある程度の謝金、旅費、CPU時間を配分します。単独では開発できないが協力者がいれば共同開発する意志のある方、ご自分で開発する意志はないが有用なプログラムについて情報もしくは希望を持っている方もご遠慮なくお知らせください。センターが適任者に依頼して開発することができます。応募または情報提供される方は、下記の事項を記入して当センター宛ご提出ください。

(1) 所属、身分、氏名、連絡先、電話番号

(2) 整備、開発、情報提供の別

(3) プログラム、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時間の希望

(6) その他ご希望

極低温センター

極低温センターが稼動を始めて、一年半が経過し、ほぼ定常的な状態に入りました。寒剤の利用は、現在、登録制を採っており、使用に先立ち、利用者としての登録をお願いしております。本年度については、液体窒素の利用登録者は74名であり、月間約2500ℓを供給しており、毎月毎月増加傾向にあります。又、液体ヘリウムについては、登録者30名であり、利用に当り全員に液体ヘリウム利用についての講習を行っております。各部門における極低温実験装置の運転開始に伴い、本年度の液体ヘリウムの供給は、急激な増加傾向にあり、年間3000ℓ～4000ℓの供給を見込んでいます。また、利用の形態については、超伝導マグネット、連続フロー型クライオスタット等の利用が多いため、30ℓ～50ℓ程度の利用が中心となっています。

機器センター

分子研の機器センターでは、センター職員独自の研究活動の他に、共同利用機関としてのサービス業務、すなわち施設利用のための中型機器および貸出し用小型機器の管理、維持を行ってきております。こゝに、当センターの近況をお知らせします。

(1) 新規購入機器について

昭和54年度中に新しく購入され、昭和55年度の所蔵機器リストに加えられた中型及び小型機器を次に示します。なお、新しい1980年度所蔵機器及びその仕様のリストは、御要望があればお送り致します。

中型機器

1. パルス色素レーザー (Chromatix社 CMX-4型)
2. フーリエ変換赤外分光光度計 (Nicolet社 7199A型)

小型機器

1. ボックスカー積分器 (NF社 BX-530A型)
2. ロックイン増幅器 (NF社 LI-574型)
3. ファンクションジェネレータ (NF社 FG-163型)
4. パルスジェネレータ (HP社 8011A型)

5. トランジェントメモリ・アベレージャシステム (川崎エレクトロニカ社 M-500T型およびTMC-400型)
6. 直流安定化電源 (高砂社 GP050-2型)
7. デジタルマルチメータ (タケダ理研 TR6856型)
8. 周波数シンセサイザー (HP社 3335A型)
9. シグナルアベレージャ (Nicolet社 1172型)

(2) 施設利用申請方法の改正について

当センターの中型機器の施設利用申し込み方法が、少し変更になりました。

1. 施設利用(I)申請書の提出

利用計画が確定しているものについては、協力研究の申込み期限に合わせ、申請書を提出して下さい。期間中(半年)の利用が可能になります。また、随時受け付け分については、各月の末日に締め切り、期間末日まで利用できます。いずれも受入れの可否はセンター長が決定し、所属長あてに御連絡します。

2. 施設利用希望日の申込み

利用希望日の3週間前までに、センター209号室へ来室されるか、又は電話(内線480)で利用日時を申込んで下さい。その際、利用当日必要となる小型・中型貸出機器があれば、御連絡下さい。可能な限り確保しておくよう努力します。四軸型単結晶X線回折装置の場合は、この他に同装置利用申込み書により、詳しい情報を提出していただき、センターより利用日時を御連絡します。

3. 利用報告書の提出

従来通り、利用後7日以内に提出して下さい。

(3) 施設利用料の徴収計画について

最近の光熱費の急激な上昇、及び約3億6千万円におよぶ当機器センターの所蔵機器の維持、修理のための出費増によって、残念ながら、センターの運営費だけではもはや運営の継続が不可能となって参りました。センターの機能を従来通り続けてゆくためには、施設利用者の皆様に、その維持費の一部を負担していただくより他はございません。装置により維持、運営費は大幅に異なりますが、運営実費のうちどの程度の部分を利用者の皆様に支払っていただくかを、早急かつ慎重に決定し、55年度後期よりこれを実施したいと存じております。その節はよろしくお願い申し上げます。

図書館のこれまでと今後

分子研 吉 原 經太郎

分子研におけるユニークな図書館整備のいきさつを書いて参考に供したいと思い筆をとった。図書館のこれまでとその近い将来は次の三つの時期に分けられる。

I 期 分子研図書室の時代（創設～昭和54年3月）

II 期 分子科学・生物科学総合図書館（昭和54年4月～昭和56年3月）

III 期 新機構の図書館（昭和56年4月より）

I 期以前には藤山常毅氏（現分子研教授）が購入予定学術雑誌のリストを作って下さった。分子科学者の多くを対象としたアンケートに基づくもので大変な作業であったものと考えられる。分子研創設後は昭和50年夏頃より木村啓作氏（現分子研機器センター助手）が図書購入整理を手がけ、秋に入って私が参加した。まだ分子研全体が旧愛教大図書館に居た頃で全くの素人が図書の発注整理に当たったわけである。管理部の対応も未だ専門的でなく庶務課人事係の方々に手伝っていただいた。その後図書委員会でもき少しづつ軌道に乗ったが、教官がほぼ全員で図書整理・カード作りなどを行ったこともあった。この時期に水島三一郎先生および日本物理学会から貴重な、あるいは多量の図書の寄贈を受けた。当時所蔵図書も少く、干天に慈雨の感があった。

さて昭和52年頃より“図書館”の将来構想が問題となって来た。元来分子研では大きな構想というよりは“図書室”という形を考えていた。ところが基礎生物学研究所、生理学研究所も発足しその全体構想も考える必要が生じた。昭和52年10月27日、関集三教授（阪大・理、元阪大図書館長）をお呼びして、「分子科学研究所図書館の将来像」について講演、懇談する機会を持った。（この要旨は「分子研レターズNo.4」参照）。この会には生物科学総合研究機構長をはじめとして三研究所の多くの研究者、管理局の職員が出席した。関教授のお話は、図書館の歴史、欧米の大学図書館、図書館の独立性、ライブラリアンの役割、近代図書館の考え方、日本の大学図書館の反省等々広範囲で格調高く、且つ実際に即したものであった。特に最近の一般図書出版点数の増加、境界領域の増加、参考図書の増加および価格の著しい上昇等に対処しなければならない。そのためには従来の大学に多く見られる“分散型”の図書室では重複購入や逆に専門化に基づく境界領域の情報の欠落を招くことになる。講演の後、三研究所共通図書館の考え方、その管理、運営その他の問題が話し合われ、中央図書館の構想は大きく前進した。将来統合が計画されているとはいえ、分子科学研究所と生物科学総合研究機構の二つの独立した機関が共通の図書館を持つという発想はユニークなものであり、各研究者も

努力を要することであった。

その後管理局の参加を得て三研究所の合同の図書館運営委員会が作られ、その下で図書館の建築の基本計画作りがはじまった。これには建築課の極めて熱心な努力があった。特に船渡英明氏が膨大な資料を収集してくれて、これを学びながら作業を進めた。先ず本図書館の基本的性格を「学術研究図書館」と規定し、共同利用研究所としての性格、三研究所の共通性等が生かされる管理ができることを考えた。その具体例の一つとして、カードによって入退館できる24時間利用システムがある。これまでのところ事故もなく極めて好評である。昭和52年10月に愛教大より図書係長小杉静夫氏を得て、全ての作業は極めて活発化した。初期には素人が図書整理を行ったので、不備が多く小杉氏に大きな苦勞をかけることとなった。

昭和53年9月には公衆電話回線を用いて、東京大学大型電子計算機センターのCASシステムを利用できるようにした。これは今後の図書館情報の全国ネットワークに参加するための第一歩であり、55年春には科学技術情報センターのJICSTシステムと結合し、今後は筑波大学のシステムとも結合する予定である。

さて昭和54年3月には約2,000㎡、3階建（一部地階を含む）の図書館が完成した。1階には新着雑誌閲覧、参考図書、ラウンジ、個室、会議室、事務室を配している。2、3階は開架式でそれぞれバックナンバーおよび単行本を収納している。建物の2、3階は中央に明かり取りのある□の字型で面積の割に大変明るい。2、3階に個室10室をもつのも一つの大きな特徴である。当時の建築課長木村伝氏を中心とするスタッフが所内はもとより図書館建築専門家とも相談して、近代図書館の要請をとり入れたもので、素晴らしい出来ばえである。

この4月より第II期、分子科学・生物科学総合図書館に生れ変わった。分子研では研究棟内に当初計画していた図書室の設置を中止して、全図書（極めて少数の実験ハンドブック等を除く）を図書館に移した。現在図書館には分子科学・生物学・生理学の図書があり、三研究所の研究者の交流の場ともなっている。昭和54年度における雑誌受入れ及び図書の総冊数は次のようになっている。

	雑 誌		図 書	
	洋書	和書	洋書	和書
分 子 研	118種	76種	6,893冊	2,330冊
基礎生物学研	104	28	2,516	1,143
生 理 研	80	25	3,116	2,108
小 計	302	129	12,525	5,581
合 計	431		18,106	

第II期において図書館運営の基本方針はかたまったと思われる。しかし昭和56年4月より三研究所が新たな機構の下に統合されると、新しい名称が付せられることになるかも知れない。これと同

時に図書館事務部が管理局と独立なものとなり、スタッフの数も増加するように現在要求中である。また本年度よりミニコンピューターを導入し、これによる図書館業務、情報収集システムの近代化を図ってゆく予定である。このようにしてライブラリアンにとっても、学術情報図書館の機能を最大限に發揮していただけるようになるのではないかと願っている。

この図書館にも大きな悩みがある。世界的にもユニークな分子科学の専門的研究所としては分子科学に関する全ての学術情報を収集、整理して、全国の大学の利用に供したいところである。しかしながら雑誌購入が教官当り積算校費に依存しなければならず、且つ教官の数が多い研究所としては予算の面から大規模な資料収集は壁につき当たらざるを得ない。第二の困難は人員の不足である。現在三つの研究所の図書を扱うのに、小杉係長を含めて職員二名、臨時職員二名のみであって多忙を極めている。以上の難点が除々にでも解決の方向に向えば、恐らく世界的にもユニークな図書館となるであろう。

昭和55年度共同研究〈前期〉採択一覧

共同研究

○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	東京大理学系研究科	久 世 宏 明
化学技術研	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	金 沢 大 理	大 橋 信喜美
理 化 学 研	粕 谷 敬 宏	理 化 学 研	柿 本 政 雄
分 子 研	斉 藤 修 二		

○双イオン性両親媒性物質の二次元および三次元分子集合状態における分子間相互作用機作

○分子研	藤 山 常 毅	京都大化学研	竹 中 亨
東京都立大理	清 宮 懋		

○アザアロマトイックス固体の合成と物性

○分子研	井 口 洋 夫	東 邦 大 理	青 木 淳 治
明星大理工	岩 島 聡	明星大理工	本 多 等
分 子 研	高 谷 秀 正	分 子 研	佐 藤 直 樹
東 邦 大 理	藤 沢 捷 治	分 子 研	鳥 海 幸四郎
分 子 研	関 一 彦	都 城 高 専	中 原 祐 典

○気相分子間化合物の分光学的研究のための温度可変分子線源の開発

○分子研	木 村 克 美	分 子 研	正 畠 宏 祐
東京大理	朽 津 耕 三	東北大科学計測研	楠 勲
東北大理	三 上 直 彦	国立公害研	福 山 力
富山医科薬科大薬	北 川 泰 司	岡 山 大 薬	玉 懸 敬 悦

三重大工 川崎昌博

分子研 小谷野 猪之助

○極端紫外光源

○分子研 木村克美
京大理 加藤利三
大阪市立大工 石黒英治
東京工大理 小尾欣一
高エネ研 木原元央
分子研 小谷野 猪之助
分子研(客員) 吉田勝英

分子研 渡辺 誠
東京大原子核研 片山武司
理化学研 小林常利
北海道大応電研 勝又春次
分子研 井口洋夫
分子研 正畠宏祐

○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 斉藤喜彦
東京大物性研 今野美智子
東京工大工業材料研 丸茂文幸
東京工大工業材料研 木島直人
名古屋大工 原田仁平
大阪大蛋白研 松浦良樹
大阪大工 田中信夫
大阪大工 甲斐泰
分子研 鳥海幸四郎

東京大物性研 佐藤昭一
東京大理学系研究科 大場 茂
東京工大工業材料研 田中清明
理化学研 伊藤徹三
大阪大蛋白研 安岡則武
大阪大工 笠井暢民
大阪大工 三木邦夫
分子研 伊藤翼

[○印：提案代表者]

協力研究

[前期]

化学反応を支配する静的及び動的因子の理論的研究
化学反応機構に関する理論的研究
化学反応のab initio MO計算
ab initio MO法によるネオペンチル型加溶媒分解反応機構の研究

横浜国立大教育 永瀬 茂
関西大工 酒井章吾
国立公害研 鷺田伸明
大阪大産業科学研 山高 博
和歌山高専 原 敏晴

金属錯体の電子状態とNMRシフト

イオン-分子反応の理論的検討

東北大科学計測研 楠 勲

陽イオン性分子のクラスター生成の機構の理論的考察

奈良教育大 山辺信一

分子軌道法計算による芳香族分子の分子内力場の研究

東京大薬 平川暁子

励起金属原子の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

光合成における水分解ならびに酸素発生反応の分子軌道法的研究

明治大工 楠正美

侵入型化学吸着についてのDV-X α 法に基づくCluster計算

東京大理学系研究科 新上和正

固体表面の電子構造の理論

大阪大基礎工 永吉秀夫

層間化合物のクラスター法による電子状態の計算

東京大物性研 大西 檜平

層状遷移金属化合物の電子状態の計算

大阪大工 足立裕彦

アセチレンの極端真空紫外スペクトルの解析

筑波大物理工学系 早石達司

分子の電子構造計算による「原子の酸化状態」概念の再検討

お茶の水女子大理 細矢治夫

分子の解離励起による高励起原子・分子の生成

東京大理学系研究科 中田宗隆

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

ダイオードレーザーおよび赤外磁気共鳴分光法による2-3の分子の振動回転状態の研究

九州大理 田中桂一

ギ酸分子等の赤外・マイクロ波分光

東京大理学系研究科 久世宏明

NH₃のV₄, 2V₂バンドの解析

東京大理学系研究科 佐々田博之

短寿命分子の高分解能分光

東京大薬 浜田嘉昭

液相中の協力現象

お茶の水女子大理 柴田文明

光散乱による高分子濃厚溶液の動的構造の研究

東京都立大理 土井正男

メソ置換ブロムアントラセンの光化学反応

京都工芸繊維大 濱之上 熊男

レーザーCVD

豊橋技術科学大 並木 章

レーザーCVD

豊橋技術科学大 英 貢

分子内エキサイプレックス系の電子移動過程に関する研究

京都大工 山本雅英

励起分子の構造とエネルギー移動と化学反応

神戸大理 加藤 肇

カルボニル分子のS₁→T₁項間交差の研究

京都大理 広田 襄

光合成初期過程のピコ秒レーザーフォトリシス	帝京大薬	池上 勇
酸化物半導体の光触媒に関する研究	東海大工	中村 賢市郎
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
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
光誘起界面電子移行に基づく光エネルギー変換の研究	東京大工学系研究科	井上 徹
層状物質を電極とする2次電池に関する研究	山口大工	松田 好晴
分子線による有機分子の解離反応の研究	富山医科薬科大薬	北川 泰司
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
光分解状態の研究	三重大工	川崎 昌博
ベンゼン, 2,4-ヘキサジイン及び1,5-ヘキサジインのそれぞれの陽イオンの光分解スペクトルの観測	北九州大	竹之下 芳也
ナトリウム分子のピコ秒フォトンエコーの研究	京都大理学研究科	藤田 稚幸
ピコ秒フォトンエコーによる分子の振動緩和の研究	京都大理学研究科	浅香 修治
芳香族化合物蒸着膜の光電導性	学習院大理	石井 菊次郎
層間化合物の光電的性質	千葉大工	日野 照純
トリフェノジチアジン類の電気的, 光学的性質	東京大物性研	城谷 一民
極低温領域における各種誘電材料の誘電損率に関する研究		
	豊橋技術科学大	小崎 正光
高純度有機結晶における励起子・電導キャリアー相互作用の研究		
	学習院大理	小谷 正博
Pt ₆ (NH ₃) ₁₀ Cl ₁₀ (HSO ₄) ₄ の構造と熱的性質	京都大理	窪田 亮三
高電導性電荷移動錯体の合成とその物性	大阪大産業科学研	坂田 祥光
黒鉛層間化合物の化学反応性および物性	京都薬科大	大橋 憲太郎
水素転換活性化化合物の探索	千葉大理	金子 克美
イオンクラスター分子反応の研究	京都大工	手島 光司
星間雲分子生成機構の電算機シミュレーション	東京工大	山崎 秀郎
Ion-Molecule Reactions and Molecular Evolution in Dense Interstellar Clouds		
	京都大理	鈴木 博子
窒素, 酸素を含む有機化合物の非経験的分子軌道計算	北海道大応用電研	勝又 春次
真空紫外光電子スペクトルの強度の精密測定に関する研究	大阪大理	渡辺 巖

He(I) 光電子分光法による分子の光イオン化断面積の決定		
	北海道大応用電研	山崎 トモ子
パルス化光電子のエネルギー分析器の試作	北海道大応用電研	進 藤 善雄
分子の光イオン化断面積の計算	静岡大教育	広田 文彦
Configuration Analysis による光電子スペクトルの解釈——ベンゼン置換体の Molecular Orbital Analysis——	信州大工	藤井 恒男
Configuration Analysis による光電子スペクトルの解釈——アントラセン置換体の Molecular Orbital Analysis——	信州大工	鈴木 哲
マイクロフォンによる吸収測定	東京工大	市村 禎二郎
C ₂ F ₄ の光分解	東工大	疋田 巧
浮腫の分子生理学的研究	国立予防衛生研	逢坂 昭
[3 ^π] シクロファン類の分子内および分子間サンドイッチ型金属-π錯体の合成		
	九州大理	稲津 孝彦
分子力場計算による有機化合物の立体配座の研究	横浜国立大工	安部 和久
太陽エネルギー有効利用に関する基礎有機化学的研究	京都大理	大槻 哲夫
¹¹⁹ Sn-NMR スペクトルによる有機スズ化合物の研究	京都大教養	児嶋 眞平
¹⁷ O NMR による分子間相互作用の研究	静岡薬科大	片山 誠二
ヘテロ芳香族化合物の光反応の CIDNP による反応機構の解明		
	上智大理工	杉森 彰
分子内積層フルオレン誘導体の合成と物性	山口大工	梶返 昭二
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
種々のホスフィン類を含むコバルト(III)錯体の研究	名古屋大理	柏原 和夫
溶存状態におけるコバルト(III)錯体の吸収および円偏光二色性スペクトルの温度変化		
	名古屋大理	黒田 彩子
Ni(II)-macrocyclic complex の ring-size effect	名古屋大理学研究科	伊藤 晴子
大型分子の Multi-configuration 計算	電気通信大	青山 智夫
フラビン酵素の構造と機能についての理論的研究	大阪市立大理学研究科	渡辺 義孝
高純度縮合芳香環化合物の合成と物性に関する研究	愛知教育大	小谷野 錦子
低原子価オレフィン錯体の触媒活性	豊橋技術科学大	伊藤 健児
高歪系を有する多環体の電子構造	京都大工	三木 定雄

招へい協力研究

〔前期〕

半導体表面の電子状態と表面構造	大阪大理	鈴木勝久
半導体素子を用いた赤外・近赤外高分解能高感度分光法の開発と応用及び化合物半導体表面の光電極反応の研究	名古屋工大	梅野正義
サブミリ波検波器の開発	名古屋大理	小川英夫
半導体電極上での光コルベ反応の機構	名古屋工大	加藤民彦
アルカン類中の電子移動度	東京大教養	中川和道
ウィスカー炭素の層間化合物	電気通信大	佐野瑞香
アルカン類の精製と電荷移動	東京大教養	西川勝
フッ化水素分子間化合物のHeI光電子分光	静岡大理	柴田周三
ヘムタンパク酵素活性中心の電子構造の分子軌道法による研究		

	東北大非水溶液研	野沢庸則
分子科学的に興味ある有機遷移金属錯体の合成研究	東京工業大資源研	山本明夫
分子運動素過程の研究	大阪大理	千原秀昭

研究会

〔前期〕

無機化学と電子状態理論との接点	分子研(客員)	米澤貞次郎
高感度マイクロ波分光器の開発とその応用	分子研	斉藤修二
液体及び溶液における動的構造	京都大理	山本常信
均一および不均一溶液系における化学的光エネルギー変換		
	分子研	吉原経太郎
生物における電子の挙動——クロロフィルを中心として		
	静岡大教育	広田文彦

分子研コロキウム

- 第100回 12月5日(1979)
エネルギー談議—選択と予測— (赤松 秀雄)
- 第101回 12月12日(1979)
Matrix Isolation Spectroscopy of High Temperature Molecules.
(M. Spoliti; University of Rome)
- 第102回 12月19日(1979)
多光子分光学 (伊藤 光男)
- 第103回 1月16日(1980)
電子スピンエコー法は化学反応や生体内電子伝達系の研究にどのような情報をもたらすか (西 信之)
- 第104回 1月23日(1980)
光電子分光法による光化学初期過程研究のアプローチ (阿知波洋次)
- 第105回 2月13日(1980)
Nd:Yag Pumped Tunable Sources. (R. L. Byer; Stanford University)
- 第106回 2月20日(1980)
高活性遷移金属錯体の合成とその特異性 (宮下 晃)
- 第107回 2月27日(1980)
ヨーロッパ, アメリカのSOR施設の現状とSORを用いた研究の動向について
(小谷野猪之助)
- 第108回 3月5日(1980)
分子におけるピコ秒フォトンエコーとFID (松岡 正浩)
- 第109回 3月12日(1980)
Polyexcitons and Exciton Condensation. (D. Fox; State University of New York & IMS)
- 第110回 3月19日(1980)
ナフタレン結晶における一重項励起子とキャリアとの相互作用 (中川 和道)
化学反応機構と速度の分子軌道計算例 (永瀬 茂)

- 第111回 3月26日(1980)
Theoretical Determination of the Role of HOCl in the Chemistry of the Stratosphere. (R. L. Jaffe; NASA & IMS)
- 第112回 4月7日(1980)
Photosensory Transduction in Stentor Coeruleus. (P-S. Song; Texas Tech. University)
- 第113回 4月16日(1980)
分子線化学 (正畠 宏祐)
- 第114回 5月7日(1980)
化学試料室の活動状況について (高谷 秀正)
- 第115回 5月15日(1980)
Photon Echoes for Everyone. (S. R. Hartmann, Columbia University)
- 第116回 5月21日(1980)
衝撃波を用いた速度過程解析の例 (田林 清彦)
- 第117回 5月28日(1980)
ポリエン類の光物理, 光化学
(K. Schulten; Institut für Biophysikalische Chemie, MPG)
- 第118回 6月4日(1980)
分光光学と溶液の構造 (藤山 常毅)
- 第119回 6月11日(1980)
高等植物の光合成(系1)反応中心濃縮粒子における光化学初期過程 (加茂川恵司)
- 第120回 6月18日(1980)
イオン-分子反応の理解 ($\text{Ar}^+ + \text{H}_2$) (加藤 立久)
- 第121回 7月2日(1980)
 $X\alpha$ ポテンシャル法による電子状態の研究 (里子 允敏)
- 第122回 7月16日(1980)
ダイオードレーザーによる高分解能分光 (永井 啓一)
- 第123回 7月23日(1980)
UVSOR計画 (渡辺 誠)
- 第124回 7月30日(1980)
Structure and Reactions of 2-alkoxytetrahydropyran-2-yl Radicals.
(R. D. McKelvey; University of Wisconsin & IMS)

所内ニュース

○死去 分子科学研究所機器センター曾田元助教授は昭和55年2月20日0時、深夜勤務中エレベーター事故により不慮の死をとげられた。まことに痛惜の念にたえない。心から御冥福を祈る次第である。なお告別式は2月25日岡崎市内専福寺において多数の参列者を得てとり行われた。

○訪問 分子科学研究所外国人評議員 G. Porter 教授が8月11~13日来所、各研究室訪問、討論の後、評議員有志による懇談会に出席された。また“Prospects for photosynthesis in vitro”と題する講演を行い、シンポジウム(“Photochemical Energy Conversion in Solutions, including Dispersed Systems”)に参加された。

○人事異動(昭和55年4月~9月)

新任	55. 4. 1	理論研究系技官	小原 繁
		分子構造研究系技官	鈴木 哲雄
		電子構造研究系技官	橋本 和仁
		電子計算機センター技官	山本 茂義
	55. 5. 1	分子集団研究系協力研究員	市村 憲司
	55. 5.16	分子集団研究系技官	佐藤 健児
		装置開発室技官	堀米 利夫(高工研より)
	55. 6. 1	電子構造研究系協力研究員	中垣 良一
	55. 8. 1	装置開発室技官(技術係長)	松戸 修(国立公害研より)
	55. 9. 1	分子動力学部門助教授	宇田川 康夫(東北大理より)
辞職	55. 4. 1	装置開発室技官(技術課長)	高橋 重敏
	55. 8.24	化学試料室技官	安田 新(旭硝子㈱へ)
転出	55. 5. 1	装置開発室技官	加藤 勝巳(生理研へ)

編集後記

○本号のレターズは今まで客員教官を経験された方に御寄稿をお願いしました。所内の者にとっては、共同利用研究所の果すべき役割についての貴重な忠言を含んでおりますが、同時に分子研を利用される方々に、我々のおかれている状況を知って頂くために役立てばと考えています。

○本号から、分子研レターズの編集は共同研究委員会のもとで行われることになりました。創刊より前号まで編集を担当された吉原経太郎、斉藤修二両氏に感謝するとともに、今後ともに皆様の御支援をお願いする次第です。

(編集担当, 花崎, 小谷野, 斉藤修)

分子研レターズNo. 8

発行年月	昭和55年11月
印刷年月	昭和55年11月
発行	分子科学研究所
編集	分子科学研究所共同研究委員会
印刷	ブラザー印刷株式会社

◎交通機関

東京方面より

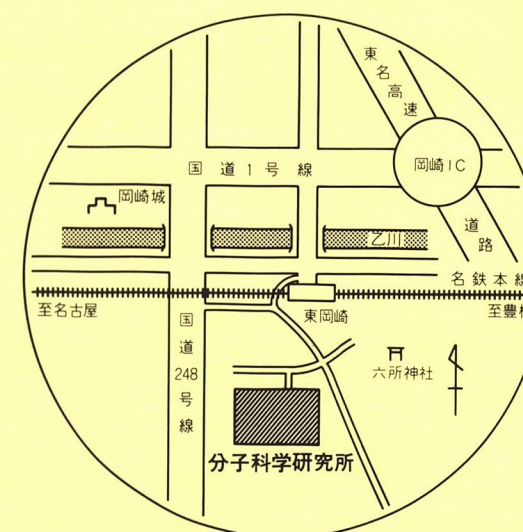
新幹線 豊橋駅下車

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	(53) 7322
電子構造研究系	(53) 7324
分子集団研究系	(53) 7326
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

