

分子研 レターズ

42
Issue of July 2000



巻頭言

実験科学の原点.....馬場宏明

研究紹介

いろいろな新しい分子性金属を作る試み
.....小林速男

レターズ

研究体制.....齋藤軍治



ISSN 0385-0560

表紙写真説明

右下；W-band（95 GHz）パルス電子スピン共鳴測定装置

（本文 54 ページからに関連記事）

左下；研究室を訪れた学生との歓談（第 10 回オープンハウス）

左上；実験棟と桜

実験科学の原点

北海道大学名誉教授・分子科学研究所研究顧問 馬場 宏 明

最近の数年間、年度末ごとに、分子研の現状を知るのに好都合な会に出席することができた。分子研の30以上もある研究グループの各代表が、次年度の研究計画を提示する会である。同時に、研究の背景や現状も紹介されるので、この会は非常に有益であった。

上の会に出ていつも感じたことは、大抵の代表者が意気軒昂としていたことである。それは、各グループがその研究の価値を認識するとともに、研究の遂行に多大の興味と自信を持っていることによる、と想像される。この想像が正しいかぎり、分子研では総じて活発な研究が行われていることになり、ご同慶の至りと言える。

今年は西暦2000年で、水島三一郎先生が分子科学研究の先駆けともいえるべき、「電波の異常分散と吸収」に関する有名な研究の論文（後述）を発表された年（1926年）からほぼ75年であり、私どもが水島先生のもとで研究を始めてから50年余り、分子研が創設されてから25年である。この75年間の分子科学の研究の発展は、想像を絶するものであった。分子研創設後の25年間を見ても、電子工学・光工学の発達による、電子計算機や光学装置の飛躍的進歩とそれに伴う分子科学研究の高度化には驚かされる。

25年前、高速分光はナノ（ 10^{-9} ）秒領域ではふつうに行われていたが、時間分解能をピコ（ 10^{-12} ）秒に高めることは容易ではなかった。しかるに今日では、フェムト（ 10^{-15} ）秒の超短レーザーパルスが安定に得られるようになり、時間分解能は著しく向上した。

これまで、たとえば、分子分光学の分野では、時間分解能や波長（エネルギー）分解能を高めることによって、つぎつぎと新知見を獲得してきたのであるが、今後も事態が同様に進行すると期待してよいであろうか。答えは恐らくノーであろう。分子科学は成熟期に入っていて、実験の精度や分解能を高めてみても新しい進展が見られない、そういう限界に近づきつつあるからである。

水島先生は、分子研創設の原動力になられた方であるが、1983年に亡くなられた。『化学と工業』の同年10月号の先輩からのおくりものという欄に掲載された、「ひと桁の実験」と題する先生の文章は、文字通りの絶筆となった。その中で先生は、前述の1926年の論文を回想されて「私の実験は一桁の数字さえ正確に出せば十分意味のあるところに特徴があるのだが、……」と書かれた。

ひとけたの実験とは、物質の示す全く新しい現象や機能を探り出すような実験である。第二次世界大戦後、今から50年ほどまえに、そのような実験が頻繁に報告されたが、その後この種の報告は次第に少なくなった。

水島先生は、亡くなられたころ、発足後8年を経た分子研が順調に発展し、そこでは優秀な装置が設備され精密な実験が行われていることに満足しておられたと思われる。それにもかかわらず先生は、実験科学においては、ひとけたの実験という原点に戻ることが最も重要であることを、後世に言い残しておきたいと考えられたのであろう。

分子研レターズ42 目次

巻頭言

実験科学の原点

馬場宏明 1



研究紹介

いろいろな新しい分子性金属を作る試み 小林速男 4

研究室紹介

分子研でやってみたいこと 佃 達哉 7

UVSORに着任して 加藤政博 9

流動研究部門紹介

常駐2年目 - 半分経過の流動紹介 - 福井一俊 12



レターズ

研究体制 齋藤軍治 15

ニュース

E-地区への道のり——井戸端会議編 渡辺芳人 19

分子研を去るにあたり

また、楽しい時を 齋藤修二 23

岡崎生活6年 岩田末廣 24

分子研を猿にあたり 浜 広幸 26

流動研究部門を去るにあたり

流動部門の2年、そしてこれから 三好永作 27

残照 田中桂一 28

流動を終えて 長門研吉 30

外国人研究員の印象記

Institute for Molecular Science and the life of a foreigner in Okazaki
Gennady V. Mil'nikov 31My expression of Institute for Molecular Science
Sergei Arzhantsev 32



受賞者紹介

岩田末廣教授に日本化学会賞	33
渡辺芳人教授に日本化学会学術賞	34
藤田誠教授に日本化学会学術賞	35
平等拓範助教授にみやぎ科学技術振興基金研究奨励賞	36
外国人研究者の自己紹介	38
新任者自己紹介	39
総合研究大学院大学	
平成11年度総合研究大学院大学修了学生及び学位論文名	52
総合研究大学院大学平成12年度(4月入学)新入生紹介	53



新装置紹介

W-band (95 GHz) パルス電子スピン共鳴測定装置	54
岡崎コンファレンス報告	
第64回岡崎コンファレンス	56
第65回岡崎コンファレンス	60
課題研究報告	
化学反応に対する溶媒効果の分子論	64
研究会報告	72
国際研究協力事業報告	
「光合成による太陽エネルギー転換」分野日米科学技術協力事業	78



分子研コロキウム・分子科学フォーラム 開催一覧	79
共同研究実施一覧	80
海外渡航一覧	86
人事異動一覧	88

いろいろな新しい分子性金属を作る試み

分子集団研究系分子集団動力学研究部門教授 小林 速 男

1. 分子集合体研究の周辺のこと

かつては、分子物質と金属などの無機化合物とは互いに対蹠的な関係にある物質群と考えられていた。それは、一言で言えば、分子は結晶内でも独立した「分子」と見なせると言う考えに起因していたものと思われる。集合体の中の分子が実は孤立した存在でなく、分子間の相互作用により集合体としての特性を発揮するということが認識されるようになったのは約半世紀以前の分子間電荷移動スペクトルの研究あたりが起点であったのではないかと想像している。同じ頃フタロシアニン分子や、縮合多環芳香族化合物の伝導性の研究がスタートしているが、伝導現象も言うまでもなく分子間の電子移動抜きにはあり得ない現象である事を考えると、分子集合体が化学の重要な研究対象として認識されるようになったのも半世紀程以前に遡ることが出来るのではないかと想像している。筆者は、大学院を出た頃、有機伝導体の分野に入り込むことになったが、当時は超伝導は勿論、未だ金属電子が分子の作る結晶中に存在し得ることさえ十分認識されていなかった時代であった。研究人口が急増し、興隆の時を迎えている今日の本分野の状況を見て、隔世の感を覚える。私事にわたり恐縮であるが、長い間私立大学に在職した後、環境も対蹠的に異なる国立研究所に勤務する機会を与えられたが、若い時代のすり込み現象のようなものは持続性が強く、4年半、経過した今でも不整合性を感じつつ過ごしている。現在のような環境を十分活用するには別のタイプのすり込みや訓練が必要であった。しかし実験に関しては、後述するように、以前と同様な主題を研究していても「装置的

環境」の改善により研究の到達度が非常に異なることを実感する事ができた。一方、分子研の「装置的环境」については全く反対方向からの見方もあるようである。最近外部の指導的な第一線の研究者から、昔の分子研の環境と比べて最近の分子研の物性機器の「装置的环境」は著しくレベルが低下しており、以前は装置的な観点からも、全国共同利用研としての意義があったが、現在ではその意義は殆どないので、今後はむしろ「テーマ発信型」の研究所として存在して欲しいとの意見を拝聴したことがある。今後分子研のこの分野は装置中心よりも物質中心に進むべきだと言われているものと思われ、個人的には共感を覚えたが、両者のバランスは勿論重要であろう。時間的制約から私自身には余り関係ないと思っているが、若い研究者が独立性を保ちながら、全体としては一つの流れを作り、新たな分子物性科学の境界領域の学問を開拓するような状況が出来れば、上述の「テーマ発信型」の研究所につながるかもしれないと感じている。

2. 最近やっていることから

さて、本題の“研究紹介”であるが、実は、締め切り間際になって、研究紹介と研究室紹介は異なるものであることが判ったが後の祭りである。しかし、個別的な研究の詳細を書いても分野外の方には興味がない場合が多いであろうから、若い共同研究者とともに今やっている「研究」の概略を「紹介」することで責をふさぐ事にさせて戴きたい。

分子研に來た時、研究室の体制を考慮し、以前からの仕事、つまり新分子性金属の開発研究を継続し

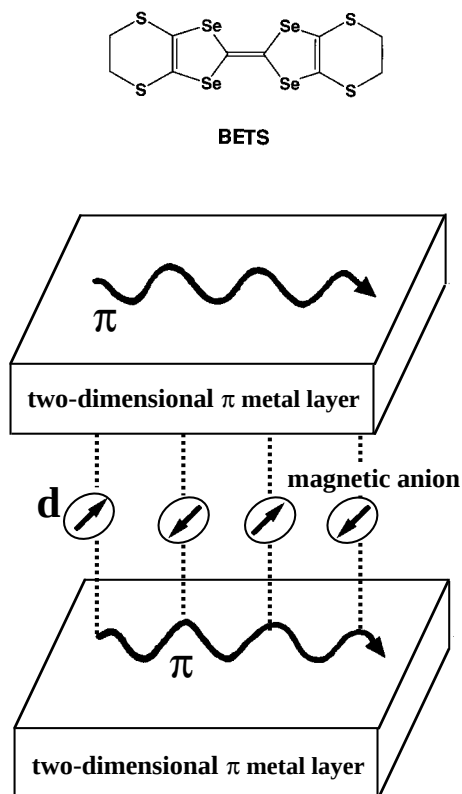


図1 BETS分子と磁性有機伝導体の概念図

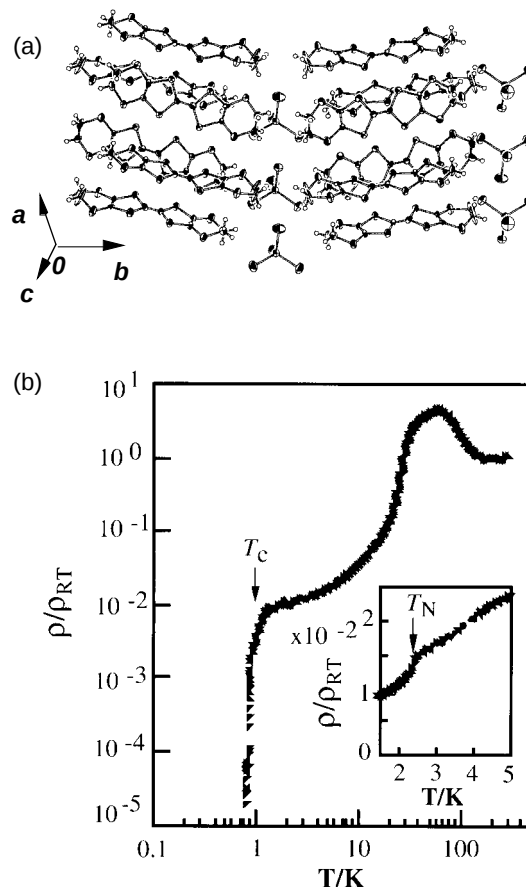


図2 初めての反強磁性有機超伝導体 κ -(BETS)₂-FeBr₄の結晶構造(a)と電気抵抗の温度変化(b)。挿入図は反強磁性転移での π -d相互作用によるスピン秩序化に伴う抵抗異常を示す。

つつ前進する以外の道は不可能と考えた。この、1、2年の間に発見した反強磁性秩序と超伝導が絡み合う新たな有機超伝導体の発見の類はそのお陰である。最近、我々の身边では磁性伝導体が広く注目されるようになったが、現実には反強磁性金属状態を示す有機伝導体すら私たちの最近の発見以前には存在していなかった状態であるから、長い間究極目標の一つと考えていた磁気秩序と超伝導が共存する有機伝導体が直ちに出現したのは上出来であったと言える。この系はBETSと略称される π ドナー分子と高スピン Fe^{3+} を含むアニオンからなる伝導体で伝導性はBETS分子の二次元金属 π バンド、磁

性は主に Fe^{3+} スピンが担っている(図1参照)。代表例は κ -(BETS)₂FeBr₄である(図2)。実は、これらの系は分子研に移る以前の1993年に*Chem. Lett.*誌に報告していたものである。以前は道具不足で放置(?)したが、その時報告した3つの Fe^{3+} イオンを含むBETS伝導体の全てで7年後に磁気転移と超伝導を見る事が出来たのは僥倖である。序でに言えば、一昨年、やはりBETS伝導体で発見した前代未聞の超伝導 - 絶縁体転移も実はヘリウム事情が良ければ数年以上前に見出していた筈のものであり、分子研の環境に感謝している。

磁性有機超伝導体の他に、実現させたいと思った

分子性金属は純有機の強磁性金属と中性単一分子で出来た金属結晶などである。十分な設計図がないこのような新たな分子物質を作ると言うことは、合成化学的な技量以上に分子物性を見通す力量を要求されるので、困難ではあるが、単に合成的に難しい化合物を作ること以上の面白さがあるのではないかと想像している。個人的には金属物質の設計の面白さは実空間と運動量空間での設計が絡み合っている处にあるのではないかと考えている。前者については助手の藤原君が中心となって研究を進めている。ここではむしろ有機半導体以来の最も基本的な課題の一つであると思っている後者について簡単に触れておこう。これまで私たちが研究してきた有機分子性金属、超伝導体の分子設計は例外なく二つのプロセスに分解できる。つまり、分子を配列させ伝導バンドを形成する事と伝導帯を形成している分子と他の化学種の間で電子の授受を行わせ伝導キャリアを生成させる事である。このために分子性金属は必ず二種以上の化学種から構成されることになる。例えば、有機結晶中の一次元金属電子の存在を初めて明確に示した(TTF)(TCNQ)、世界初の有機超伝導体(TMTSF)₂PF₆などを考えれば良い。一方これに対して、Na、Cuなどの代表的な無機金属結晶では単一構成要素(原子)が結晶を形成すると同時に金属バンドとキャリアを発生させている。これと同じ事を分子を用いて実現することが可能であろうか？この課題は半世紀前の、フタロシアニン分子や、赤松、井口による縮合多環芳香族分子と同様な単一成分の中性分子の結晶で、その伝導性を金属にまで高められるかという問題に帰着する。私自身は出来る

だけ有機分子で、と思っていたが、共同研究者(田中(現、分子研)、小林(東大))が主体となって進めて来た中性の金属錯体分子の結晶で最近大きな前進が見られ、低温まで安定な金属結晶が出来たのではないかと考えている。室温伝導度は微結晶を固めた状態で100–300 S cm⁻¹と驚異的に高い。しかし想像できるように有機溶媒に対して溶解性が低いためかこれまでのところ得られた結晶は小さく構造解析には至っていない。完全な解決にはもう少し時間がかかるであろうか。

その他、分子研で是非、試みたいと思ったことは、分子物質の高圧固体化学である。若いときから試みたいと思いつつ今日に至ったので、辞める前に少しだけ触ってみたいと考えている(定年が延びたのでそうも言っていられなくなったが、……)。しかし今回の主題から逸れるので、これまでに、精密な四端子法電気抵抗測定としては初めて15万気圧をクリヤーし(安達)、その過程で世界初の有機超伝導体の硫黄類似体(TMTTF)₂PF₆で初めて超伝導を確認出来た事だけを述べておく。



分子研でやってみたいこと

電子構造研究系基礎電子化学研究部門助教授 佃 達 哉

平成12年1月に東京大学大学院総合文化研究科から赴任して以来、あっという間に半年が過ぎようとしています。赴任第一日目(1月2日)に、官舎の近くのデパートで台車を借りて布団や掃除用具をからっぽの官舎に運びこんだことが、ついこの間のことのように思い出されます。それ以来、茅所長をはじめとする先生方や秘書、技官、管理局の皆様のご尽力で、ようやく研究環境が整ってまいりました。特に、実験室の設備と広さは、今までの経験からは想像できないほど充実しており、感動しています。この場をお借りしてお礼申し上げます。

さて、研究室紹介ということで執筆の依頼を受けたのですが、いまのところ皆様に紹介できるほど研究室が立ち上がっていません。そこで、自己紹介のつもりで、これまでどんなことをやってきたか、これから何をやっていきたいかについて率直に書かせていただきます。

私は東京大学の近藤保先生の研究室で大学院生活をスタートし、博士号取得後は理研の研究員を経て、分子研に移るまで東京大学永田研究室で助手としてお世話になっておりました。この間、主に気相に孤立した分子クラスターを対象に研究をしてきました。ひとことで言うと「分子が何個が集まると、どんな特異的な現象が現われるか? またそれは何が原因なのか?」を明らかにすることを目標にしてきました。初めて使った装置は、高励起リユードベリ状態の希ガス原子を分子クラスターに衝突させ、電子移動の結果生成した負イオンを質量分析するというものでした。当時すでにこの装置では、見附、美斎津、畠田という分子研に関係の深い先生方が「分子が何

個集まったらその系の電子親和力が負から正に変わるか?」という視点から数多くの素晴らしい仕事をされていました。違う視点で何かやろうということで、近藤先生や当時助手になったばかりの田原先生に「佃の良いところは(頭ではなく)手を動かすのが早いこと」と煽ていただきながら、試行錯誤を繰り返しました。その結果、オレフィン分子のクラスターに電子を付着するとクラスター内でアニオン重合反応が起こり、炭素6員環構造を持つイオンが選択的に得られることを見いだしました。この高い選択性はクラスターの持つユニークな幾何構造に起因するものだと考えています。博士課程の後半には、クラスターを高速で固体表面に衝突させて瞬時に圧縮し、高温高圧状態で特異な反応を誘起するというプロジェクトに携わりました。装置の立ち上げが一段落し、ようやくデータがではじめたころ、永田研究室に助手として移りました。永田研究室では、分子クラスターが余剰電子を束縛する機構やクラスター負イオンと分子との反応過程について、光電子分光法、光解離分光法、ab initio計算を使って調べました。その結果、クラスターを構成する2-3分子が電子を共有して様々なイオンコアを形成していることやクラスターサイズ(構成分子数)によってイオンコアが変化することを見い出しました。さらに、ある特殊な系では、幾何構造と同時に電子の束縛状態も変化するような異性化を繰り返していることを明らかにしました。また、永田研では研究室の立ち上げから参加できたことで、非常に得難い経験をさせていただきました。今自分の研究室の立ち上げにあたり、まさにその時の経験のありがたみを実感し

ています。

これまで対象としてきた分子クラスターは、真空中でしか存在できないほど不安定で、しかも文字どおり数えられるほど微量にしか生成できない系です。クラスターは真空中にビームとして作られ、各種の高感度実験に利用され、最終的には検出器に当たるなどして全て壊れる運命にあります。いわば測定されるためだけに作られる物質系と言えるかもしれません。これは単に個人的な趣味の問題ですが、いつからか「クラスターをものとして手にすることができる形で作る」という要素を自分の研究に取り込みたいと思うようになりました。「もの」を作ってこそ化学だ、とまでは必ずしも思いませんが、自分が思い描いた通りの「もの」を手にしたときには理屈抜きにうれしいだろうと想像します。そんなことを考えている時期に永田先生の勧めで、金属微粒子を合成し、電子顕微鏡で観察するという機会を得ました。楽な気持ちで始めたのですが、大きさの揃った無数のクラスターが綺麗にならんで全視野を覆っている様子を見て、単純にただただ興奮しました。それまでオシロスコープの画面上に現われる電気信号からクラスターの構造を推定していた人間にとっては、クラスターの形や配列のようすが直接みえるということは新鮮な感動でした。いささか幼稚ですがこれが決定的な経験となり、今では「思い通りの構造や組成の金属・半導体クラスターをモルオーダーで合成したい」という想いに取りつかれております。まず、金属クラスターイオンを溶液中に分散した形で調製するということから取り組んでみようと思っています。これまでの自分のアプローチ法は「とに

かくやってみる式」で、予想通りにことが運んだことはほとんど無く、まれに面白い現象に突き当たるということを繰り返してきました。ましてや、ものを作るということはこれまで本格的な経験の無い分野でもあり、いかに効率良く試行錯誤を繰り返すことが出来るかが今後の研究の鍵を握っているだろうと考えています。そこで、クラスターイオンの生成過程をリアルタイムに追跡できるような装置を作り、それを利用して調製の最適な条件を探して行きたいと思います。クラスターの作りわけが可能になれば、その構造や反応性がサイズや組成によってどのように振る舞うかという基本的な問題に取り組んで行く予定です。また、それらのクラスターを基本単位として複合化させたときに、どんな性質や機能が発現してくるかという問題も視野に入れて研究を進めて行きたいと考えています。

先に述べた電子顕微鏡写真を見た時に、これは見る人によって全く異なる種類の好奇心が刺激されるのではないかと感じました。面白いクラスターを調製し、いろんな分野の研究者と交流しながら、新しい発想や予想外の展開が芽生えることを期待しています。また、クラスター調製に関しても、様々な分野の情報や知識をどんどん取り入れていきたいと思っています。その点でも分子科学研究所という環境で研究が出来ることを幸せに思っています。今後も皆様のお世話になることばかりだとは思いますが、どうぞよろしくお願い致します。



UVSORに着任して

極端紫外光実験施設助教授 加藤 政博

今年の3月1日付で極端紫外光実験施設 (UVSOR) の光源加速器担当の助教授に着任いたしました。前の職場はつくばの高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所でした。高エネ研に勤める前は、学生として宇宙科学研究所にお世話になっていましたので、文部省の直轄研ばかりが3つ続いたことになります。宇宙研も高エネ研も多数の研究者が集団を構成して研究活動を行うことが多かったのですが、分子研では教授・助教授がそれぞれ独立した比較的小人数の研究グループを率いていて、何か大学のような雰囲気を感じます。ここでは研究室紹介をしないで是不なるのですが、この研究室という言葉も高エネ研ではまったく使われていませんでしたので、ずいぶん久しぶりに聞いたような気がします。

その研究室紹介ですが、私自身は着任してまだあまり間もありませんで、今のところUVSOR加速器の見習い運転手といったところです。研究室紹介というよりは、着任後1ヶ月ほどUVSORを眺めてみての感想、また、今後こういう研究活動を行っていたらという期待のようなものについて述べさせていただきます。

我々のグループの仕事を簡単にまとめると、シンクロトロン放射光発生装置であるUVSOR加速器群の運転維持、光源性能向上のためのビーム技術開発、UVSOR将来計画の検討、相対論的電子ビームを用いた新しい光発生法の研究など、ということになるかと思います。グループの構成は私以外に助手の坂さん、技官の木下さん、山崎さんの4人です。現在はこれにもう一人、助手の江田さんが加わっています。この4ないし5人という数字は相当に驚くべ

きものです。UVSORほどの規模の加速器をたったこれだけの人数で運転維持してきたこと、さらに光源開発研究においても自由電子レーザーなど立派な成果をあげてきたことは本当に驚くほかはありません。

前の職場では、放射光施設Photon Factoryの加速器の運転維持、開発研究を担当している放射光源研究系というところに所属しておりました。Photon Factoryの光源加速器はビームエネルギー2.5 GeV周長187 mの電子蓄積リングですが、これを約25名のスタッフで運転維持していました。また業務委託という形で民間企業から5名の運転要員が派遣されてきていました。ビームを供給する入射器(最高エネルギー8 GeVという巨大な線形加速器です)は別な集団が運転維持しています。UVSORはPhoton Factoryに比べると小さいとはいえ、入射器の面倒も見なくてはならないことを考えますと、スタッフ5名というのはやはり大変に少ないと思います。Photon Factoryは週末、祝祭日も休まず、24時間連続で運転されていますが、UVSORは基本的に夜は運転せず、また、週末は停止します。ずっと以前にこの話を聞いたときには、全国共同利用施設にしてはずいぶんのんびりしているなあ、と思ったのですが、実際に着任してみると現体制でこれ以上の運転は不可能であることはすぐにわかりました。

UVSOR加速器群は入射器であるエネルギー15 MeVの線形加速器、600 MeVのシンクロトロン、それに放射光源である周長53 m、750 MeVの電子蓄積リングからなります。これら加速器のひとつひとつが、電磁石群、高周波加速空洞、超高真空容器など様々

な装置の集合体です。また建物自体、あるいは電力や冷却水などの設備も加速器装置と一体のものと考えてもいいでしょう。これらは20年ちかく前に建設されたものです。そして（おそらくは？）今後さらに10年以上使われることになるでしょう。このように大きくて複雑でしかも寿命の長い装置の運転維持というのは、カタログに載っているような製品を購入して使用するのとはだいぶ趣が異なります。購入して、壊れたら修理を依頼して、性能が物足りなくなってきたら新製品に買い換える、という具合にはいきません。壊れたら修理するのはあたりまえですが、技術の進歩にあわせ装置の性能や信頼性を高めるような更新も行っていく必要があります。また10年も経てば、施設の果たすべき役割も変わり、利用者が光源に求める性能もどんどん高くなってきます。新しいビーム技術を取り入れて、光源性能を高めていかなくてはなりません。長期的な視点で着実に加速器を育てていく、というのが我々の仕事のもっとも重要な部分であろうと思います。

とはいえ我々も研究者を名乗る以上、加速器を大切に育てていればそれでいい、というわけにもいきません。開発的研究もちゃんとやっていかないと研究者としては評価してもらえません。UVSORはご老体で（？）エネルギーも低く、ビームの品質も最新の光源に比べると見劣りする面もありますが、一方で、UVSORならではの研究テーマもいろいろあるように思います。光共振器を用いた自由電子レーザー発振はその一例で、これは例えばSPring-8では不可能ですが（エネルギーが高すぎる）UVSORではすばらしい成果が上がっています。発

振に関する基礎的な研究に加え、今後は実用化という方向に発展させていけないだろうかと考えています。また、自由電子レーザーの親戚のようなものですが、外部から導入したレーザーと電子ビームの相互作用を利用した光発生基礎的な実験が始められないか。あるいはまた、UVSORには線形加速器とシンクロトロンがありますが（これらは光源リングへの入射以外には使用されていません）、こいつらを使って何かやれないか。などなど、いろいろ夢をふくらませている最中です。

UVSORを取り巻く状況について（つい最近までUVSORを外から眺めていたものとして）少し考えを述べますが、これはやはり建設当時とは大きく変わっているように思います。UVSORやPhoton Factoryは放射光利用専用の加速器として建設された最初の世代に属します。長年わが国における放射光利用研究の中心的存在として重要な役割を果たしてきました。しかし、最近では高輝度放射光の発生を狙った高性能な放射光施設が世界各地に建設され続々と稼動を開始しています。これら最新の光源は蓄積ビームのエミッタンス（ビームサイズと角度拡がりの積）が小さく、また、偏向電磁石よりもむしろアンジュレータやウィングラといった挿入光源類からの放射光の利用が中心になっているのが特徴です。わが国では西播磨の大型施設SPring-8がこの世代に属します。また、東大や東北大でも軟X線領域に重点を置いた高輝度光源の建設を計画しています。

このような新世代光源の登場に対して、旧世代（？）放射光施設の多くでは、既設の光源加速器の高性能化もしくは後継機の新規建設により競争力を



維持していこうとしています。Photon Factoryでは収束電磁石系の増強を行い放射光高輝度化に成功しました。米国Stanfordの放射光施設でも類似の手法による高輝度化を計画しています。一方、ドイツやスエーデンの施設では後継機を新規に建設し順調に稼働させています。英国やフランスでも既設光源に替わる高性能光源の新規建設を計画しています。

UVSORでは、歴代のスタッフの努力により、光源加速器としての基本的な性能の多くを着実に向上させてきています。しかしながら最新の高輝度光源に比べると、設置可能な挿入光源数も3台と少なく、放射光輝度という点で見劣りすることは否定できません。後継機UVSOR-IIの早急な実現が望まれるところで、我々のグループでも設計検討を続けていこうとしています。しかし現実問題として新規の放射光源の建設は、(東大や東北大の例に見られるように?) 予算規模が大きいこともあり、実現は容易ではないでしょう。

なんとか現UVSORの性能を飛躍的に高めることはできないのでしょうか。UVSORの電磁石配置を眺めると、比較的小規模な改造(とはいえUVSOR始まって以来の大改造にはなりますが)でリングの4箇所に挿入光源の設置可能な短直線部を創り出すことができそうです。これに加えて、収束電磁石系を増強し低エミッタンス化することができれば、新規に光源加速器を建設するのに比べはるかに小さな予算規模で、UVSORを最新の第3世代光源と競争可能な高性能光源へ転換できるかもしれません。稼働中の光源加速器の改造というのは、Photon Factoryでも経験しましたが、事前に慎重に検討し、既設の

建物や設備、放射光ビームラインなどと整合性を取ること、また、施設の運転への影響を最小限にすることが重要です。今後UVSOR関係者の助けを借りながら、現実的な改造計画を立案し、何とか実行に移せないものかと考えております。

Photon Factoryはスタッフの数も多く、光源加速器の専門家と放射光利用者が直接話をする機会というのはそれほど多くありませんでした。UVSORではスタッフが比較的少ないこともあり、こういった機会も増えるのではないかと期待しております。UVSOR利用上の不満や将来計画に関してのお考えなどありましたら、どうぞ遠慮なく言ってください。今後ともよろしくお願いいたします。

常駐 2 年目 – 半分経過の流動紹介 –

極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門助教授 福 井 一 俊

平成 11 年 4 月から平成 13 年 3 月までの流動として福井大学工学部電子工学科から来ています。初めて UVSOR Ring 室の扉を開けたときの感動が忘れられず、それ以来スタッフから外部ユーザ、そして内部ユーザとして UVSOR を使わせて頂いております（もっとも最初は某技官とキャッチボールでうれしんだほど Ring 室は空っぽでしたが……）。すでに流動として 1 年経っていますので、中間報告ということで紹介させていただきます。

ところで、放射光を使った実験といっても、実験それ自身は他の物性実験と変わらずこじんまりしたものです。ただ、装置は分析機器のように完成品ではありませんから、なにかしようとするときピームライン（分光光源）全体を作ることになったりもします。その結果、スタートから考えますと結構長い時間かかって結果を出すこととなりますし、また多くの方々と協調して行っていかなければ実現できません。ここで紹介させていただく研究もそういう多くの方々に関わりをもちながら進められています。この場をお借りしてお礼申し上げます。

さて、我々がやっていることは大雑把に別けますと、主に 半導体の伝導帯・価電子帯の電子状態や物質の光学的な性質を実験的に見ようということ、

こういう研究に必要なピームラインの光学設計・建設、ピームライン作成に必要な光学素子等周辺技術の開発・評価となります。としては主に III-V 窒化物半導体とその混晶、としては、BL7B（UVSOR：赤外 - 真空紫外ライン）、BL43IR（SPring-8：赤外ライン）組合せライン（UVSOR BL6A2 + 光電子顕微鏡 + レーザー）、

放射光用の反射ミラーの表面形状プロファイラーの開発があります。ここでは、として BL7B を紹介し、次に に関して触れたいと思います。

UVSOR にはカバーする波長領域や目的別に多くのピームラインあり、それらが所内専用の所内ラインと、全国共同利用に供されている施設ラインに別れていることはご存知だと思います。その施設ラインのなかに BL7B があります。このピームラインは、初めてユーザーグループが（施設の強力なバックアップの元で）スクラップアンドビルド（S&B）で立ち上げた 3 m 直入射分光器ピームラインです。我々は、この S&B の設計・建設・調整に直接かわって来ました。このため、研究も含めたこのピームラインの最終立ち上げは、私の流動のひとつの大きな目的（義務）と勝手に思っています。S&B の目的は、放射光の広い波長連続性に着目し、近赤外から真空紫外までの波長領域（40–1000 nm）をひとつの分光器で提供することにあります。このことにより、ほぼ同一の条件下で広い領域の反射（吸収）測定が行え、例えば物質の基礎的な光学的性質、屈折率や消光係数などの物性定数を引き出すことができます。世の中に目を向けますと、情報媒体の高密度化や半導体プロセスの細線化は、そういうことに使う光源の短波長化（可視光から紫外光、紫外光から真空紫外光へ）を要求しており、こういう波長領域を一度にカバーできる分光器の存在は光学材料物性にも貴重だと思われます。勿論、これだけでなく BL7B は発光測定の広い領域の励起光源としても考えられています。現状は施設利用にオープンしながら、調整や光子数・分解能などの諸特性を測ってい

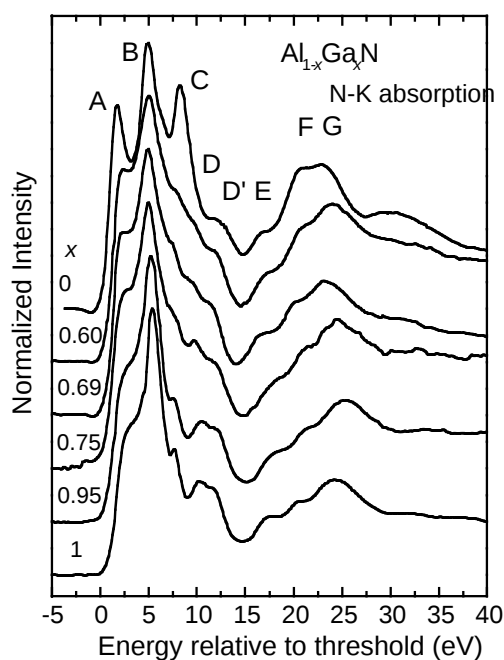


図1 AlGaIn 混晶薄膜の窒素 K 殻吸収スペクトル

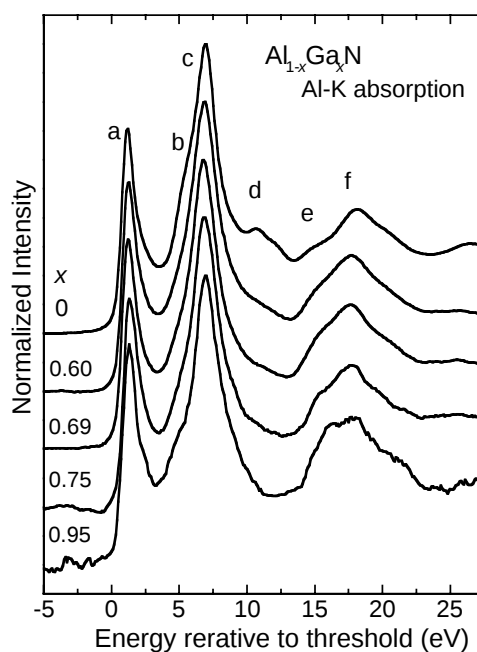


図2 AlGaIn 混晶薄膜のアルミニウム K 殻吸収スペクトル

るところです。広い波長範囲をサポートする場合に必要な高次光や迷光の除去・評価も行っています。このピームラインに関する報告は、UVSOR Activity Reportにもありますのでご興味のある方はそちらの方をお読みください。

このBL7Bの広範囲性を利用して、Ⅲ-V窒化物半導体混晶の反射測定を行っています。ここでいうⅢ-V窒化物半導体はAlN、GaIn、InNのことで、バンドギャップが大きい半導体です（各々6.2、3.4、1.9 eV）。最近よく見かけるようになった青色LEDはこのGaInから作られています。一部は信号機にも使われているとのことですので、信号待ちのときでも探してみると暇つぶしが出来るかもしれません。このⅢ-V窒化物半導体どうしから作られる混晶はその組成比によってバンドギャップが変化するため、AlGaInとInGaInで6.2 eVから1.9 eVまで変わります。

この一年、AlGaIn 混晶の反射測定をBL7Bで行い、複素誘電率を求めてきました。また、考察中ですが基礎吸収端の低温から室温までの温度依存性は半導体でよく知られるVershniの経験則に従わないことがわかってきました。それから、組成比の異なる多くの試料でスペクトルの変化を追うことで、陽イオン置換に敏感なピーク、全く変化しない構造などがわかります。このことから混晶の両端であるAlNとGaInのスペクトルピークの同定を行っています。

ところで、Ⅲ-V窒化物半導体は平均Ⅳ族の半導体ですので、4配位の結晶構造（ウルツ鉱構造）で共有結合をとりますが、窒素が強い電気陰性度を持つため、価電子が強く窒素側に引っ張られてイオン性結合の性格も相当現れてきます。そこで価電子帯や伝導帯がどのように構成されているかを調べたいです。価電子帯は光電子分光で調べられますが、

表面処理の方法がはっきりしておりませんので、まず UVSOR BL1A、BL7A、BL8B1 を用いて N や Al の K 内殻吸収測定を行ってきました。この場合、遷移の始状態が k 分散の無い 1s 内殻なので、スペクトルは基本的には終状態（伝導帯）の p 成分の状態密度を反映します。しかも、1s（K 殻）は最内殻ですから、軌道の大きさはそのイオンの近傍にしか広がりません。つまり、伝導帯の p 部分状態密度をイオンサイト近傍で見ることになります。このようなサイト選択性の手法で混晶の試料を見てみると、図 1 にありますように窒素サイトでは陽イオンの組成比で敏感に変化が見られるのに対し、Al サイトでは、図 2 に示しますように Al 組成が 100 % でも 5 % でも顕著な差が見られないことがわかりました。また、放射光の偏光性を利用して伝導帯の p 部分状態密度の各結晶軸方向成分への分解も行っており、各イオンサイト直上での伝導帯の構造を実験から明らかにしたいと思っています。

ユーザーにとって、「常駐」して使えることの有難味は大変なもので、残された任期中引き続きその有難さを充分に利用したいと思います。これからもよろしく御願い致します。



研究体制

京都大学大学院理学研究科教授 齋藤 軍治

大学における化学研究、特に物質開発研究に関する種々の悩みについて、研究体制、情報の収集と発信、教育など日ごろぼんやりと考えていたことを記述しようと思ったが、4月のすさまじい忙しさのため、研究体制に関する愚痴のみで終わることに成った。まさに、書きなぐりの結果で、文意が通じないところもあるかと思いますが、ご容赦下さい。

国内の大学や文部省関連の研究所の研究体制は、海外（欧米）の研究に肩を伍して対抗する状況になり。また、この5 - 6年（大学院重点化後）は、それにいっそう拍車をかけるような体制の劣悪化を示している。特に有機合成や有機複合材料開発を展開している研究室にとって、状況は緊迫している。大学における問題点を記述する。

1. 研究ユニットの縮小は、定削などを経て徐々に進行していたが、大学院重点化にともない急激に進んだ。教授（P）1、助教授（AP）1、助手（A）2の研究ユニットが、P:AP:Aが1:1:1、さらには、P:AまたはAP:Aが1:1と分割されたところが多い。私の属している化学専攻では、総員でP:AP:A:T = 15:14:19:3とAやTの員数が減少した。減少した分の一部はアップシフトでPやAPとして用いたことによる。他の多くの大学、学科においても類似の状況にあると聞いている。本学の物理専攻では、大学紛争前には1:1:2の体制であったのが、紛争後、1:1のユニット制となった。

研究ユニットが小さくなったものの、ユニットを多くすることは、いくつかのメリットを持つ。論

文業績の増加（学科全体として）、多くの研究領域（特に、境界、先端、学際領域）を学科・研究所としてカバーできるので、教育の面では学生の要求にこたえ、研究の面では他分野の情報を容易に得ることができる。各教官が導入する資金や設備備品など、学科として潤沢となる。高齢の教官を昇任することで、当人のアクティビティが向上する。

独立したAPにとり、自由な研究計画が可能。このような状況は、まことに結構である。このような状況で、豊富に湧き出る独創的なアイデアを持つ研究者が、博士研究員を潤沢に抱えて研究をおこなえば、充分、欧米研究者とその研究の質やスケールで競うことが可能であろう。博士研究員がいなくとも、理論分野ではPとAPが独立したユニット体制が好まれているようだ。しかし、物質開発において1:1ユニット体制はなじまない。この体制の場合、多くの博士研究員の協力を前提としなければうまく進展せず、非常に狭いテーマを深く掘り下げた研究展開で終わる。

大学は研究所に比べ、ずっと博士研究員の獲得、研究スペース、研究時間の確保が困難であり、研究ユニットの縮小にともなう多くのデメリットが顕在化した。その幾つかを列挙する。人的縮小が直接、研究テーマや規模の矮小化に連結した。競争の熾烈な短期決戦型研究に踏みとどまる体力を喪失した。

永いスパンを必要とする長期決戦型研究を維持することが、人事異動などにより、容易に破綻した。

ピラミッド型からハシゴ型体制の変化に伴い、若手教官同士の競争が低下した。教官の退官に伴う教官人事が硬直化した（外からの血の導入なしの工

レベーター人事が、最も無難となる)。ユニットの増加は、導入設備の増加を伴うことが多く、研究スペースの狭隘化、電気や水などの資源不足が発生した。これは特に問題で、事故の増加や研究効率の減少を誘引する。欧米での実験室フリースペース(7-8 m²/人)に比べ、日本では、1/3 ~ 1/4 倍の2-3 m²/人が一般的である。外国人博士研究員にとり、日本の大学研究室は、きつい、汚い、くさい、危険、窮屈と、非常に魅力に乏しい職場である。

大学院重点化により急速にユニットの矮小化を図った多くの大学では、大講座制(または大部門制)をとることにより、表面的には組織の体力維持を保っている。しかし、実質的には矮小化したユニットがゆるく結合した大講座に過ぎない。ユニットの矮小化を古くに行っていた本大学の物理学科実験系研究室では、15年ほど前から、1:1体制を実質的な1:1:1または1:1:2体制に改造を図り、上記の - を解決する努力を行っている。これは、並大抵の努力で実現するものではない。一度、分裂した物を再編成により融合することは非常に困難であり、何らかの外的圧力があって、始めて行われることが多い。近年盛んな、日本の多くの銀行や企業の再編強化は、外国からの経済圧迫に対する体力増強生き残り作戦の一環であり、実験研究においても実質的な大講座制なくしては、外国に対抗できないことは明確である。例えば、2:2:3の大講座を実質ユニットとした場合、2人のPが並列では意味がない。ボス支配などと言われる封建制や閉鎖性は厳禁であるが、全体の研究をある独創的なベクトル方向に進める能力は、個人差がある。従って、優れたリーダーに率い

られた強力な体力と頭脳を持つ組織の形成が肝要であり、せっかく得られた大きな組織体を、細切れユニットで構成するのは、物質開発の観点から、間違いである。

上記デメリットの多くを、どう改善できるのか。博士研究員の採用が最も効果的である。しかし、考えられないような高額な給料が提示されても、外国人博士研究員は望みどおりの国(化学先進国:分野により当然異なる)からなかなか来ない。そのような場所に来る研究者は、より劣悪な環境にいた者が、冒険心に溢れた者が、はたまた、非常に優れた研究をしている日本人研究者の指導を求める者のどれかであろう。多分、この順序で外国人博士研究員は集まっているのではないだろうか。本国での生活に何不自由もない外国人研究者が、手弁当で日本人研究者の扉をたたくというケースが多くなることを望む。

しかし、研究環境のみならず、生活環境や教育環境が外国人研究者の来日を抑制していることは、決定的である。敷金や謝金を伴う住居、幼稚園・小学校の入学手続き、医療・保険等々、きちんと説明する人が大学に専門職としていなければ、多くのトラブルの種となる。各大学、学振および文部省では、外国人博士研究員の受け入れに伴って生じる多くの問題を集約し、解決策を練っているところでもあるが、まだ、このような仕事は受け入れ研究室の教官にゆだねられていることが多い。

日本人博士研究員でデメリットの多くを解決することは多いに賛成であり、望むらくはA、APへの登竜門として捉えたい。私の場合、日本で助手のポストがなく、1970年代に米、カナダでポストク



を6年半続けた。当時、インド、中国、韓国、ギリシャなどから実におびたしい外国人博士研究員が米、カナダの研究を支えていた。その多くは、のちに、本国または米、カナダで就職口を見つけていたが、40歳代でポスドクをしながら家族を養っていたケースもある。

博士研究員の雇用は、学振などのフィルターなしでの雇用が可能となることが必須であろう。これは、審査を甘くするとの意味では全然なく、各教官の研究計画に即した人数を確保する、また、研究分野拡大に適した人材を確保する意味で重要である。数人の博士研究員を絶対必要とする期間に審査にはずれるほど、研究の進展を阻害することはない。米国並に科研費での雇用を可能とすべきであろうし、業績内容や研究歴に合致しないばかりばかりの高額給料を、皆一律に支払う必要は全くない。その地域において、その年代の研究者が生活できれば良いのである。博士研究員の研究の幅を拡大する点や流動性の意味から、最初のポストとして出身学科での博士研究員を許すべきではない。また、雇用は1年更新とすべきで、さらに任期途中での永久職への就職を可能とすべきである。1年以上の就業期間をうたっている種類もあるが、そのような規制を避ける自由さがほしい。ポスドク1万人計画で多くの日本人ポスドクが誕生した。アカデミックポジションも少ないうえ、民間研究所の門が狭い分野では、就職口を探すことが深刻な悩みとなっているはずである。

政府大型資金投資などにより研究設備、備品などの充実が研究所はもちろんのこと、多くの大学でも

進展している。すると、大型装置の保守点検・運転維持にマンパワーが絶対必要となる。学生、TA、ポスドク、教官のマンパワーを頼る以外に、民間機器メーカーとの保守・レンタル・リース契約を行って、何とかしのいでいるのが現状であろう。この解決策として、退官教官の雇用があり、それを斡旋する機関があっても良いであろう。このような機関として化学会や物理学会が対応してくれたら大変ありがたい。このような学会に登録すれば、学会が職種（機器保守点検運転以外に、実験指導、薬品管理、補修授業、試験問題作成などなど）に従って、適当な大学や研究所を紹介または派遣するというシステムである。今後、マンパワーの確保には退官教官に頼ることが必要である。体制とは少しずれるが、化学会には、薬品災害処理・応急処置のデータベースの整備を願いたい。各大学・研究所（民間を含め）で起きた例をまとめ、災害時にアクセスできるようにするとともに、化学災害に関する処理・処置の情報知識を的確に伝える機関となっていきたい。また、基本として大学関係の化学の建物が具備すべき施設、理想的な薬品管理の仕方、モデルハウスなどを作成し、将来の建物営繕に対するデータを整備していただきたい。

ハシゴ人事や人事の硬直化が近い将来懸念されるが、これをどのように解決したら良いのか。一つに、大学院重点化を行った研究重視の大学（および研究所）において任期制を導入することであろう。PDが1年更新（27～29歳）、AやAPが6～7年（29～35歳、36～42歳）、Pが10年（43～52歳）その上に物質開発統括リーダーのようなポストが停

年までというのでも良からう。30代など早くにPになった者で、長期間そのポストで目覚しい業績を挙げつづけることは、並大抵のことではない。途中で研究意欲の減退またはハングリー精神の衰退が起こり得る。物質開発においては、物質勘の減退が一番恐ろしい。常に緊張感を維持してもらう方法として、Pの上に、給与とは関係無くとも何らかの意欲をそそるランクを、制度として考える必要がある。このような任期制にたいしては、必ず正当な審査・評価の問題が発生する。審査・評価は、評価する側とされる側双方にとって、大変消耗のはげしいことである。現役の研究者として評価側にまわることは、なるべく避けたい思いであり、これも、退官教授の仕事として適正な仕事をしていただきたい。また、AやAPから他機関への移動を、具体的に推奨する制度が是非とも必要である。



E-地区への道のり——井戸端会議編

関連領域研究系関連分子科学第一研究部門教授 渡 辺 芳 人

本年4月から統合バイオサイエンスセンターが正式発足し、それと同時にE-地区と呼ばれる約30,000 m²におよぶ広大な土地が機構の所有地となった。なんと、二十数年にわたってあの土地は愛知教育大学の所有地であり、その管理が機構に委ねられていたに過ぎなかったのである。これまでもE-地区利用を前提にした分子研の将来計画が練られてきたが、実現できなかったのにはそれなりの理由があったと推察される。分子研に席を置いて高々5年半の私があれこれとコメントを述べる立場にはないわけだが、むしろ過去のしがらみが無い人間だからこそ、過去の経緯に囚われずに色々な提案が出来たのだと納得している。まあ、これまでのことはともかくとして、E-地区での今後の展開には、今まで以上に分子研構成員が一丸となった取り組みが必要なことは言うまでもないことである。

これまでの4年以上におよぶ活動の公式の経緯は分子研リポートなどで報告してきており、ここで同じ事を報告する必要はないであろう。むしろもっと泥臭い井戸端会議的な話を紹介したいと思っている。別に内幕の暴露話（暴露するような密約など存在しないのだけれど）ではなくて、「こんな感じで話は進んだ」というような現実的内容にしたい。

そもそもの事の始まりは、平成7年の11月頃、竹内機構長と三研究所の所長から基生研野田、生理研井本の両教授と共に管理局3階の会議室に呼び出しがかかり、既に6時を回っていたと思うのだが、とっておきのウィスキーなどが振る舞われる席上で、「三研究所でもっと交流や情報交換」が出来ないかという話が出てきた。その結果として、私が機構の

交流・情報交換のミニコミ誌を発行しようということになった。平成8年春にB4サイズ4ページ構成の「機構フォーラムNEWS」という名前でβ版と創刊号が配られたことを覚えていらっしゃる方も居るのではないだろうか？ その際、研究紹介としてあるグループを取り上げたことに、一部からクレームのようなものが聞こえてきて驚いたことがいまだに鮮明な記憶として残っている。夏には第2号を出さなくては格好が付かないと思っていた矢先に、とある筋から、「機構フォーラムNEWS」のコピーが欲しいとの要望が出てきた。三研究所が共同・協力して色々な模索を行っている活動の実績として文部省提出資料になったらしいのである。そして、間髪入れずに理論の中村、基生研の村田、生理研の森の三教授が加わる、いわゆる中村委員会が発足したのである。この時点で、昨年暮れからの動きが周到に（？）計画されたものであり、私自身は何も知らずにお釈迦さんの手の中で動き回っていたという事にやっと気が付いた次第である。やれやれ。

約一年の検討期間をかけて、「岡崎国立共同研究機構将来計画」という冊子が出来上がったのは、平成9年6月末である。当時の庶務課長の横山さんや柴崎総務部長と、夜食の丼物を食べながら、夜遅くまで将来計画の一字一句、テニオ八までも吟味したことが懐かしく思い出される。将来計画の細部を詰める段階で、「三研究所の共同で一体何が可能なのか、動植物の施設はどう扱うのか」などの難問が山積していた。全体会議だけでは小回りが利かないので、最初からのメンバーである三人がたたき台を考えるためにしばしば集まったが、何でこの三人が最

初にピックアップされたのか？という問いかけがあった。そこで出てきたのが、三人に共通する項として「それぞれが早石門下と繋がっているので、喧嘩をせずに旨くまとまるのではないか」という読みがあったのだらうと言う結論になった。そういえば、僕は慶応の医学部・医化学教室で二年間助手をしていたが、石村教授は早石門下の代表選手であった。

将来計画を立案していた当時は、分子研が既に将来計画を作成しており、基生研・生理研はそれに引っ張られる格好でそれぞれの研究所の案を取りまとめる作業を行った。生理研では、脳研究が中心課題としてクローズアップされ、機構将来計画と並行して研究所の概算要求でも脳機能計測センターの新設が掲げられた。結果として、平成10年4月から生理研に同センターの設置が認められるに至った。これは、機構の将来計画作成の作業が無ければこの時点では日の目を見なかったと個人的には感じている（もちろん、生理研の当事者の方々は違った見方をしているでしょうね）。

平成10年4月には、基生研と生理研のメンバーに大幅な入れ替えがあり、青柳助教授が新規に加わり、私のみが相変わらずこれまでの全ての経緯を知っている生き字引（？そんな年じゃないよ！）として残留の羽目になった。この時、伊藤所長（当時）から、「渡辺君の意見は、全て僕の意見として構わないから、存分にやってくれ」との励ましが無ければ、その後の修羅場をくぐり抜けることは出来なかったでしょう。何が修羅場かって？ ふーむ??

この年のワーキンググループは、形式的な機構共通組織の設置計画を作るのは時間の無駄遣いであり、

やる以上は本当にやりたい研究課題や組織を検討しようという雰囲気満ちていた。戦略的方法論やシステムシミュレーションと言った仕分けが出てきたのもこの時である。検討途中からクローズアップされた「環境ホルモン」を中心とした環境問題への取り組みが、平成11年4月に発足の生命環境科学研究センターの実現へと繋がるのである。この時に初めて、概算要求の実現に向けたダイナミックなメカニズムを体験することになった。

ご存知のように、概算要求を通すには二つのハードルを越える必要がある。最初のハードルは、文部省を納得させて、大蔵省・総務庁要求として担ってもらう必要がある。文部省としては、大蔵省・総務庁に要求する以上、その計画をなんとか実現させようと必死になっている。以下は私の私見であることをお断りした上で話なのだが、要求実現のために、文部省も夏休み返上で相当な勉強を行って、要求の位置づけなどの理論武装を行っている。大蔵省・総務庁と直接交渉するのは、最初のシナリオを作った我々ではなくて、文部省の担当者である。そのため、色々なトラブルが発生するのである。大学などで良く聞くのが、「概算要求して最終的に出来上がった内容は、我々が求めたものとは全く違う」という怒り・嘆き・不満である。こういうことが起こってしまうのは、次の二つの理由によると考えられる。その第一は、大学が文部省と交渉する段階で、色々な難問が出される。これに答えるときに、我々の場合には検討委員会のメンバーが中心になって司計と協力して必要な資料作成、理論武装を行い、要求の本筋を変更せずに文部省を説得する努力を行った。こ



れに対し、大きな大学では、現場の教官の参加が薄くなり、どうしても事務局の判断が重視されがちなのではないだろうか。「文部省はこう言っているので、このままの形ではとても通らない」「文部省はこうしろと言っている」などというやり取りは、大学人なら誰もが良く知っている文部省交渉の展開プロセスである。この時点で、最初のボタンの掛け違いが起ってしまう。本来の要求とはズレが出始める直接の原因である。

第二の理由は、文部省が大蔵省・総務庁と交渉する段階で、今度は大蔵省・総務庁から文部省に無理難題が出される。いや、無理難題という言い方は不適切かも知れない。大蔵省・総務庁にとってみれば、各省庁から出される要求を全部飲むわけには行かないわけであり、より切実で、国家予算の投入が本当に必要と思われる要求のみを拾い上げるためには、ありとあらゆる問題点の指摘は当然であろう。少なくとも政治折衝とは無縁の研究センター設置となれば、すんなりと認められる事などあるはずがない。文部省は、大学の事務担当者に資料などの作成・新たな提案などの宿題を出す、ここでも対応の中心が何処にあるかで話の進み方は大きく違ってくる。幸い、機構の場合には、所帯が比較的小さいこともあり、大蔵省・総務庁の宿題に対する答えを我々と司計が一体となって考えることが出来る。私の経験では、文部省要求を大蔵省・総務庁が取り上げる気が全くないときには、交渉は第一ラウンドで終わってしまう。具体的には、大蔵省・総務庁から何の質問・宿題も出されないのである。善戦しても第二ラウンドでアウトである。このため、統合バイオサイエン

スセンター設置の天王山である昨年9月から10月初旬までの文部省の大蔵省・総務庁交渉では、我々の側も深夜におよぶ作業を行い、文部省が必要とする資料等の作成を行った。図版もカラーで素人にも分かりやすい内容を準備した。最終資料作成までに、文部省の担当者とは何回も電話でのやり取りを行うが、カラーファックスなど完備しているはずもないので、インターネットを徹底的に活用した。こちらの資料を私のグループのホームページに載せ、直ちに文部省側ではインターネットのブラウザでチェックするのである。深夜にOKが出ると、ファイナルをプリントして、朝一番の新幹線で東京に持参することも度々であった。こうした努力の結果として、第三ラウンド（最終ラウンド）まで漕ぎ着けた次第である。

「統合バイオサイエンスセンター」の設置では、既設の組織の一部が機構共通施設に改組となるなど機構全体の構成に大きな影響を及ぼしている。こうした変革が、機構の将来にどのように関わっていくかを予測することは全く不可能なことである。それは、現在、そして将来の分子研を構成する皆さんが考え、自らが決定していくダイナミックなプロセスであり、筋書きのないドラマである。

統合バイオサイエンスセンターには、北川禎三教授と私、それに藤井浩助教授が第一期で所属する。さらに現時点で公募中の一名を加えて4つのグループが2年後にE-地区に完成するであろう約5,000 m²の新しい建物に移る予定となっている。最終的には約15,000 m²の研究施設の完成を目指して文部省との交渉を現在も行っている。分子研の将来計画では、

物質関係の研究グループが最終的には全てE-地区に研究拠点を構え、既存の研究スペースを有効に利用する計画が練られ始めている。関係の皆さんの苦勞の大きさが目に見えるようである。

すでに指定された文字数を大幅に上回ってしまっているのに、そろそろ話を終わらせる方向に行かなくてはならなかった。あしかけ5年に及ぶ作業で私自身が得た教訓は、学問のバックグラウンドの違う三研究所は、物事の考え方や結論に至る筋道も相当に違っているという事である。昨年4月から行われた最終案の詰めと分子生命体科学構想が統合バイオサイエンスセンター構想へと衣替えを行う過程では、連日の会議に管理局の部課長が全員出席し、夜遅くまでタフでホットな議論を戦わせた。考え方・背景・利害・要求の方向が違う三研究所間で一つの方向の合意の形成が如何に困難なことかをいやと言うほど味わった。それだけに、統合バイオサイエンスセンターの設置が決まり、E-地区全てが機構に管理換えされたというニュースはこれまでの疲れを吹き飛ばす物であったことは言うまでもない。

分子研の皆さんの励ましと協力に感謝すると共に、研究所の将来計画に主体的・積極的に参加していただくことを願って本文を締めくくらせていただきたい。



また、楽しい時を

福井大学遠赤外領域開発研究センター教授 齋藤修二
(前 分子構造研究系分子構造学第一研究部門教授)

2度目に岡崎に住むようになって数年たったのことであった。宿舎を出て直ぐの所の空き地に建っていた県関係の仮合同庁舎の取り壊しがはじまった。研究所へ行きがてら、毎日その取り壊し方を見ていた私は、取り壊しが進むにつれて、日本はかなり深いところで病んでいると感じるようになった。まだまだつかえる建物から窓や屋根、壁板を取り外すことなく、ブルで強引に壊し、がれきの山にし、ダンブで捨てるのである。あのガラスは、アルミの板は、鉄板はまだ使えるものを。原料とエネルギーと労働をせっかく使って生み出された物なのに。実は国民総生産のかなりの部分にこんなのが寄与しているのではないか。いわゆる産業の空洞化のごく小さな兆候を見た思いであった。

昨年3月末、無事停年になり、その後研究所の皆様のご厚意で9月末まで、それまでのように分子研で研究を続けさせてもらった。その間、幸いにも福井大学に職を得て、約束どおり研究室、住居を9月末に引越した。福井では、移管させてもらった分光器の組み立てと、それをおさめる部屋の整備に四苦八苦していたが、年末になり、分子構造系教授部門の旧実験室を完全にクリアーするようにとの所の方針の指示があった。福井、岡崎間を何度か往復して、ここ24年間に蓄積された薬品、毒物の処理、残っている備品の確認と処分、大量の消耗品の処分を行った。分子構造系の方々、北川、森田、加藤、森脇、水谷の諸氏と学生の方々にはさまざまにご協力いただいてどうにか進めることができた。特に秘書の野村さんには、備品移管、廃棄のややこしい手続きをしていただき、大変お世話になった。最終的にはこ

の1月末、尾関さん(現在宇宙開発事業団所属)に協力してもらい、まがりなりにクリアーすることができた。なお、薬品の処理や、処理しきれなかった備品、消耗品の最終的な処分は分子物質開発研究センターの加藤さんに大変お世話になった。旧研究室を完全にクリアーして、これからは福井で仕事だぞと自分に言い聞かせることができたが、同時に、ここでもあの数年前の合同庁舎取り壊しの際と似たような感慨を持った。大量の消耗品、しかも、何年使っても使い切れない細々した実験消耗品、まだまだ使える備品を引き取り手がないので捨ててしまった。実験の都度必要なものを必要なだけ注文していたらこれほどまでにはならなかったと自戒の念しきりであった。ここでも、空洞化の小さな兆候を見たと言ったら、私の思い過ごしだろうか。

さて、福井では、定常的に使える研究費は分子研での1/20から1/30である。名古屋の時がそうであったように、数百円の消耗品でもどれにするか、何個買うか、十分に迷わなければならない。少ない研究費で、新しい、レベルの高い研究をねらえるか。周囲には、分子研では当たり前であった、必要な雑誌は、新着も、バックナンバーも全くない。しかし、そんななかでも新しい実験をするのはそれなりに楽しいし、やりようがあると楽観している。またしばらくは楽しい時を持てそうである。

最後に、停年まで大変お世話になった分子構造系の方々、技術、施設の方々、管理局の方々、歴代の所長に心よりお礼を申し上げたい。

岡崎生活 6 年

広島大学大学院理学研究科教授 岩 田 末 廣
(前 理論研究系分子基礎理論第一研究部門教授)

6 年間は短いと覚悟はしていたものの、やはりあっという間に過ぎてしまいました。予想以上に早く研究室を立ち上げることができたのですが、実感としては実質 4 年半ほどぐらいしか研究グループとして機能していなかったと思います。研究テーマもやはり大きな問題に新しく挑戦できなかったと考えています。また、分子研のもう一つの重要な役割である優れた研究者の育成の面でも、確かに何人かの優れた研究者が私の研究室を通過していましたが、十分責を果たせたと、私は考えていません。その意味で、私は、私を選んだ人事委員会は誤った判断を下したと考えています。私自身は、この 6 年間の岡崎生活を結構楽しみました。人事委員会からの申し入れを受けなかった場合、あとになってひどく後悔したと思います。妻の深雪も私も東京圏から離れて生活するのは、USA での 3 年を除いては初めてでしたが、二人とも岡崎の生活を楽しみました。二人で週末に自転車を駆って近郷を遊ぶことは、後半にはできなくなりましたが、深雪は沢山の友人を作り、その友人たちはこの 3 月の三つの引っ越しを手助けして下さいました。

研究室としての活動では、外国からの長期滞在者に助けられました。特に、フェルナンド・オルネラス (ブラジル) とヤン・フルサック (チェコ) には、言葉に尽くせないほど感謝しています。日韓共同研究による 2 + 2 カ月滞在する共同研究も 3 回利用させていただきました。学術振興会の短期招聘もほとんど毎年利用できました。学振の海外博士研究員は二人でしたが、もう少し取れたらよかったと思っています。3、4 回のチャンスに二人採用していただ

いたのだから良とすべきでしょうか。分子研では、外国から人を呼ぶときに宿舎の心配がないので大変有利です。幸いこれらの共同研究者とはその後も親しい関係を保つことができています。一人の例外があります。分子研の方々にご迷惑をかけたイタリアからの研究者は EU のフェローシップを持ってきました。非常に条件のよいフェローシップなので、厳正な審査を通して採用されたと思ったのが間違いの元でした。彼だけは、既知の人からの評価を聞かずに受け入れを決めたのです。外国人に限りませんが、人を引き受けるときには、信頼できる人からコメントをもらうことが不可欠であることを厳しく体験させてもらいました。

分子研に移る前年の 4 月まで、人事部会の外部委員として 4 年間岡崎通いをさせられました。分子研に来てからも 4 年間人事委員をしていましたので、この十年のうち八年間、分子研の人事に関与してきたことになります。上に人事委員会を批判する言辭を弄しましたが、自分が関与してきた人事を振り返ると、ほんとうに人事は難しいと痛感いたします。停年が 65 歳になりますと、教授の人事はますます重要になります。高齢者が新しい活躍の場を見つけることがいかに困難かを体験している身ですが、65 歳停年はあくまでも選択肢の一つとして柔軟に運用する慣習を作っていただきたいと思います。

分子研の計算機センターには、その創設以来お世話になってきました。特に、慶應大理工学部で研究室の立ち上げ時期に当たる 80 年代には、ほとんどの研究をこの計算機センターによって遂行していました。慶應時代のグループでは 1983 年には UNIX-



workstationを導入しましたが、それでも計算のほとんどは、分子研計算機センターで実行していました。「クリスマスを岡崎で過ごした」、「油蟬の死骸を踏んで正門の坂を登った」話は学生たちに語り継がれました。計算機センター長を務めることは、私が分子研に着任する時の一つの義務であった訳ですが、特に、最後の2年間は大変でした。慶應時代の私の研究室出身者が助教授と助手で着任していましたので、弊害がでないようには気を配ったつもりですが、全くなくすことはできなかったでしょう。でも、冷静に振り返ってみて、親しい気の置けない仲間との仕事はプラスに働いたと評価できていると思います。スーパーコンピュータの契約更新は、2年以上かかってしまい、昨年の7月からの調達をめぐるいくつかの「エピソード」をとにかくも乗り切り、性能/価格比の非常に高いシステムを導入することができました。計算機センター長としては、「センター速報」に「センター長からの報告」という欄を新設して、勝手なことを書かせていただきました。だんだんとこの欄を楽しみにしてくださる方が増えたのはうれしい思い出です。分子研を去るにあたってさみしいことは、この欄に原稿が書けなくなったことです。

末筆になりましたが、3月には、盛大な「卒業」祝いをしていただき、ありがとうございました。御礼申し上げます。

分子研を猿にあたり

東北大学大学院理学研究科助教授 浜 広 幸
(前 極端紫外光実験施設助教授)

沢山のことがありましたが、一つひとつ思い出すことも結局は退屈なことで、また決して良いことばかりであったわけではなく、愉快的記憶を書き連ねても、多分に納得することは無いと思いました。そうは言うものの、多くの様々な人々に支えられてきた年月でもあります。

もうひと昔以上前のことですが、その頃現在とは異なる研究分野に身を置いており、大学院を終えたばかりの私は、まあ恐らく研究に意欲を燃やしていたと思います。ある研究施設に実験プロポーザルを提出した時の PAC のことです。その実験は重イオン核反応の閾値以下での中性 π 中間子の生成断面積と角度分布を高精度で測る、というものでした。当時、各々の核子（陽子や中性子）の運動エネルギーがある種の核反応を起こすには低すぎるにもかかわらず、どう言うわけか、それらの固まり（つまり原子核）同士をぶつけると反応が起こる、という現象が話題になっていました。この現象の一つである中性 π 中間子生成を、所属していた研究室で開発した 160 個の γ 線検出器の同時測定で捕まえてやろうというものでした。私がその実験を企てる以前の公表されていた実験データはあまり精度の良いものでありませんでした。プロポーザルの説明会には磐石を期して、同時測定のシミュレーションを何週間もかけて行い、中性 π 中間子が崩壊して放出される 2 つの γ 線の検出器でのヒットパターンまで精密に計算して、格段に良いデータを得ることができることを話しました。ところが、PAC 委員の中でも長老格の先生に、そんな実験に価値はないと、まあ言ってみれば“ぼろくそ”に評価されたわけです。

もともと鼻っ柱は強い方だったので、これまでのデータでは何も現象を理解できなかったがこれなら分かる、と反論したのですが、その先生の言わんとしたことは結局、この分野の先輩達の成果に難癖をつけるとは何事だ、というわけでした。もちろん実験は認められず、その後毎日研究室でビールを呑み続けたわけですが数週間後に施設が公表した実験リストの中に、その大先生が関与している閾値以下の“荷電” π 中間子生成のテーマを見つけました。さらにビールを呑み続けたことは言うまでもありません。

今思えばさほど重大事件では無かったかも知れませんが、所詮後追い実験のことにすぎなかったわけですが、実際のところ自然科学の研究への夢のようなものはこのとき消滅したと思います。分子研にやってきてからは、なかなかこの呪縛から解かれなかった記憶があります。一般に考えると、着任当時の UVSOR 施設長に、ここは共同利用施設なので自分の研究は 50 % 以下（それ以前は 30 % だったらしい）にせい、と言われた時のダメージの方が大きい筈ですが、共同利用施設の枠組みの中とはいえ、色々な仕事をやってこれたこともまた事実です。自分にとっては新しい土壌が提供されていたわけで、それは多分幾人もの人々に支援されたひとつの結果だろうと思います。善し悪しは常に 10 年経たなければ明瞭にならないでしょうが、ことのほか若い研究者の進化を疎外することない環境が岡崎にあることを祈り止みません。



流動部門の2年、そしてこれから

九州大学大学院総合理工学研究院教授 三 好 永 作
(前 相関領域研究系分子クラスター研究部門教授)

2年間の流動部門の任期を終えて、4月1日より九州大学に帰任いたしました。この2年間は、前所長の伊藤光男先生・現所長の茅幸二先生をはじめ多くの人々のご好意により、快適な研究活動を送ることが出来ました。また、相関領域研究系や理論研究系の方々には特にお世話になりました。こちらに来てほぼ一ヶ月になり荷物の整理もまだ終了していませんが、流動部門のこの2年間は別世界での2年間であったように思い出されます。

振り返ってみますと分子研での2年間は、あっという間に過ぎていった感じです。いろいろ刺激的で沢山のことが有りましたが、結局、何が残ったかといわれると心許ない気がします。もちろん、分子研を(準)内部から見て、人事、教授会運営、研究室体制などなど、学ぶことが多かったことも確かです。教授会でのフランクな雰囲気や人事の高い流動性は、分子研における研究面での極めて高い活性度の最大の要因であると感じました。また、研究分野間の垣根の低さは新しい優れた研究を生み出す1つの要因でしょう。これら学び取ったことをどう活かしていくかが私の今後の課題として残された思いです。

分子研は学問的に中心であるだけでなく、地理的にも日本の中心であるということに改めて実感しました。東京へ出張するにも大阪へ出張するにも飛行機を利用しないで新幹線を利用する、ある場合には、自動車を利用して出張するというのは中心に位置するから出来ることです。(ただ、九州からは遠いのでその点は困りましたが)

その地理的な利点を、余暇を楽しむためにも大いに利用させてもらいました。北アルプスや中央アル

プスの山々、富士山などにも気楽に出かけることが出来ました。何回か計画したにもかかわらず南アルプスには行けませんでした。近くの鈴鹿の山や奥三河の山にも馴染みが出来ました。冬には近くの長野や岐阜のスキー場でのスキーを、また、夏には日本海の海水浴を気楽に楽しめました。温泉も近くに沢山あり、これも十分楽しめました。

流動部門を終える場合は、普通の場合は元の研究室に戻るのが定番ですが、私の場合は事情が少し違いました。分子研の流動部門の話があった時には、私は九州大学の工学部に属していました。したがって、私は工学部から分子研の分子クラスター部門に出向という形になりました。いま、所属しているところは総合理工学研究院です。キャンパスも福岡市の南、春日市にあり、2年前とは異なります。私にとっては全く新しい研究環境になります。研究室としての蓄積は全くなく、ゼロからの出発ということになります。しかし、新しく研究室を立ち上げるといふ楽しみのある仕事があります。最終的に何年かかるか分かりませんが、これから新しく活気のあるよい研究室を作っていきたいと思っています。

最後に、分子研に在籍中にお世話になった皆様方に感謝いたしますとともに、今後の分子研の益々の発展をお祈りしています。

残 照

九州大学大学院理学研究院助教授 田 中 桂 一
(前 相関領域研究系分子クラスター研究部門助教授)

分子研の周りは思いがけず豊かな自然に恵まれています。玄関の坂を上がる桜の盛りの美しさは言うまでもなく、研究棟の裏の紅葉の小道も人知れぬ美しさを秘めています。また実験棟の上階から望む天空は、季節ごとに様相を変え、その雄大さに思わず見入ってしまうほど見事な物でした。こんな見事な自然に囲まれていると、まるで宝の山に埋もれながら気付かずに偽金作りに精を出しているかのような妙な気分になります。

二年間、流動部門と大学の職を併任し、科学の状況を異なる立場から見てきました。気のついた二三の雑感を述べたいと思います。

「こんなに恵まれた研究環境で」という形容詞で分子研が語られますが、本当にそうでしょうか。国内を見る限り確かにそうです。しかしこれはむしろ「大学が水準に達していない」と言うことを述べている様に思われます。分子研の設備運営は一流ですが、成果を上げている世界の大学や研究所と比較すると標準的なものです。水準に達しているわが国の数少ない研究機関の一つであると言う方が正確なようです。

研究所は「世界水準の優れた成果を挙げる研究機関を創設する」と言う当初の目的を見事に果たしましたが、「世界をリードする画期的な成果を挙げる」と言う次の目標に苦闘しています。しかしこれまでの努力の数倍を傾けても、なおその達成は難しいように思われます。それは予算や設備、人の問題を越えた根本的ないくつかの課題を抱えているからです。

このためには大学の充実を図り、世界水準に達した大学を整備することが、次を取るべき政策でありまた近道でもあるように思われます。大学の施設運営は貧弱たるもので、未だに十分な投資が行われていません。この落差に海外からの来訪者も驚いています。大学の環境で育った研究者が突然に良い環境を与えられても発想は元のままであり、過去の清算に終始しがちです。二歩も三歩も未来に踏み込んだ発想は現実にはなかなか可能ではありません。根となるべきものの充実なくして、研究所のみの努力では解決の容易でない重い宿題です。

「21世紀の化学を語る」という主旨の研究会がいくつか開催されましたが、拝聴して大切な点が欠けているように感じられました。それは「科学と技術」の接点です。研究に使用されている測定機器、レーザー、コンピューター、ソフトウェア、データベース等はどこの国の製品でしょうか。測定の原理、測定技術の多くは米国製であり、わが国の独自の技術、製品は希少です。先端的な技術になる程その傾向は顕著です。技術は科学の武器です。その武器を製作できない国がどうして先端の戦争に参加できるのでしょうか。よくわが国の産業は基礎科学への貢献を省略したただ乗りであると非難されますが、基礎科学自身も技術開発や基礎研究を軽視した大きな歪みを抱えています。このために新しい領域を拓くという科学の真の目的に致命的な力不足に落ち入っています。

これらの技術は研究者が重要性を認識し、十分な労力をつぎ込み技術者と共に育てて行かなければな



らないものです。その過程で新たな分野が拓れます。「最も基本的なものが最も先端である」という逆説が、科学の歴史のなかで繰り返し実証されて来ています。基本技術への貢献がないのは真に先端的な研究が行われていないからだと言っても過言ではありません。

在任中にテラヘルツ分光の最先端技術を米国、ドイツそしてロシアの研究所から提供してもらいました。科学先進国では研究機関が大学では難しい高度で時間のかかる技術開発の役割を担っています。一般的な先端科学の分野で大学と競うのではなく、研究所の役割分担を再検討する時期が来たように感じます。どなたか、こんな手のかかる王道にも踏み出して見ませんか。

「分子研は若い研究者（助教授）の天国である」とよく耳にしましたが、むしろ焦燥感の中で模索する孤独な存在に感じました。多くの優れた人材を集めていますが、潜在能力を引き出すことに十分には成功していない様に思います。成果を急がせ過ぎる事と、自身が補助的な役割に甘んじている点に原因があります。彼らの精神的な冒険を支持し、多くの試行錯誤を許し、しかも安易な成功を許さない雰囲気が必要です。これは超一流の場には自ずと備わっている特性です。成長点は柔らかく壊れ易く、自らの可能性すら自覚し得ません。しかし発想の飛躍を生むのは若い思考の柔軟さと論理の強靱さです。そして自由な環境がそれを支えます。科学の発展は一途に若い研究者の殻を破って行くような成長に懸かっています。

また科学を通して真に我々が戦っているものの正体を見据える事が肝要です。科学は長い歴史の中で一つ一つ石を削り磨き積み上げる様にして築かれて来たものです。科学には変革者としての社会との苦しい長い歴史があり、また芸術や思想とも深い関連があります。これらの遺産に十分な敬意を払う事なく飛び入りできるほど軽い遊びではありません。豊かな生活、深い精神文化と鋭い批判精神の伝統の上にゆっくりと育って行きます。満たされた時、本流となる寄与ができるのか、研究所の真価がいま問われています。

気がついてみると春の日はすでに落ち、先ほどまで木立のなかで輝いていた残照も暗闇に変わっています。少し外の空気を吸って来ましょう。研究棟の裏庭をたどる街路灯が青白く誘っています。しかし今回はちょっと道をそれて暗がりの道を取ってみましょう。おやおや、突然の進入者に驚いて草むらから何かが飛び立って行きました。雉か土鳩でしょうか。いや梟かもしれません。智の神の使いというこの鳥は、好んで混沌の中に棲み鋭い眼光で闇を見据えていると、言い伝えられていますから。

2年間の研究の機会を与えていただいた伊藤光男前所長およびの茅幸二所長に心より感謝致します。また分子研の皆様の一層のご活躍をお祈り申し上げます。

流動を終えて

高知工業高等専門学校助教授 長 門 研 吉
(前 相関領域研究系分子クラスター研究部門助教授)

相関領域研究系・分子クラスター流動部門の任期を終え高知高専に復帰して1ヶ月、次々と押し寄せてくる仕事の渦に早くも巻き込まれています。今更ながら分子研で過ごした日々の貴重さを噛み締めています。

分子研での2年間は多くのものをもたらしてくれましたが、何よりもたくさんの研究者と知り合う機会を得たのが最大の収穫でした。インターネットの爆発的な発達により地方にいても様々な情報を得る苦労が少なくなったのは事実で、世界中の研究者ともメールで気軽に連絡を取り合うことができます。しかしながら直接顔を合わせて話をする機会に勝るものではありません。分子研には日本人、外国人を問わず多くの研究者が日々出入りして、居ながらにして接触する機会に恵まれました。また自ら研究会を開くことによりたくさんの研究者と交流を深めることができました。共同利用研究機関ならではのメリットを享受できたといえます。さらに、分子研へ着任したのをきっかけに研究テーマを大気化学の分野にシフトさせようと考えていましたが、日本の大気化学研究者には分子研と接点を持っている人たちが(私にとっては思いがけず)かなりいて、そのような人たちとスムーズに知り合うことができたのも分子研にいたおかげです。こうした交流の中から共同研究がいくつか生まれ、今後しばらくの研究の柱となりそうです。

さて2年ぶりに高専に復帰してみると、以前にも増して学生の学習習慣の確立・維持のための取り組みが求められ、教官の多くのエネルギーが注がれていることに驚かされます。入学してくる学生の基礎

学力の低下は今日すべての教育機関の共通の問題ですが、高専の場合教育期間が5年と長期にわたり、また高校における大学受験のような外的なDriving Forceもありません。受験勉強の弊害がなく効率的な一貫教育ができるというメリットはありますが、学習習慣が確立できなかったり維持できない学生は卒業までたどり着けても基礎知識・専門知識とも貧弱です。こうした学生の割合が増えつつあり今日の厳しい就職状況とあいまって学校の存続を脅かす緊急課題となっています。また学生の学習習慣は生活習慣と密接な関係があり、教官のエネルギーは必然的に学生の生活指導にも注がれることになります。こうした学習指導、生活指導の取り組みが増える一方で、高等教育機関としてふさわしい(大学並の)研究活動を展開することが求められています。これらを両立させるのはなかなか容易ではなく多くの高専教官は四苦八苦しています。したがって一定期間研究に専念できる流動研究制度は高専教官にとって願ってもない制度です。関係者の方々には今後流動部門の人選を行う際に、ぜひとも高専の教官にも目を向けていただけるようお願いしたいと思います。

最後に、この2年間伊藤前所長、茅所長、西教授をはじめとする電子構造研究系のみなさん、渡辺教授をはじめとする相関領域研究系のみなさんには大変お世話になりました。また職員宿舎でも多くの分子研の方々にお世話になりました。この場をお借りして心から御礼申し上げます。

Institute for Molecular Science and the life of a foreigner in Okazaki



Gennady V. Mil'nikov

It is a real pleasure for me to share my experience about the Institute for Molecular Science where I have spent totally about 1.5 years, working in the Department of Theoretical Study in the group of Professor H. Nakamura. First of all I must say that I've never met such good conditions for carrying out scientific work as in IMS. I guess this is related with the common feature of Japanese stile of life where everything is settled as much as possible. There are many examples of this but I would mention just one. It was in September 1997 when I came here the first time with a short 3 months visit. What mostly surprised me was the plate with my name which I saw on the door when I first entered my room. This may look common for others, especially here in Japan but for me it was really impressive. No needs to say that all the other required facilities concerning lodging, computer accounts, library etc. were also settled down in advance. It is just my own point of view but for me personally such a careful attitude to a newcomer was a bit unusual and I would say stimulating. And indeed, the time spent in the group of Professor H. Nakamura was very fruitful not only in sense of interesting results but mostly due to new ideas and future plans which in some part resulted from the perfect conditions and creative atmosphere which I really enjoyed in IMS. In fact, the Institute for Molecular Science looks for me not only Japanese but also international institute where one can meet scientists from many different countries and such an international collaboration, I believe, is mutually helpful.

Of course, nobody spends all the time in the office and the life of a foreigner especially depends on circumstances outside the institute. In this sense IMS provides very convenient accommodation in Mishima Lodge while Okazaki itself is a very cosy and calm place where one can easily find a way to spend free time travelling, studying Japanese language, doing sport etc. This is also made possible because of the kindness and hospitality of many people living in Okazaki and I am thankful all of them for their voluntary and gratuitous help.

My expression of Institute for Molecular Science

Sergei Arzhantsev

I am staying in IMS more than 1 year from end of November 1998 until now. It is my first visit to Japan.

The IMS is famous and very well equipped scientific center. It also has good supporting facilities as machinery shop and Chemical Center. The library of the Institute is very convenient and well organized.

I am working on femtosecond spectroscopy with Prof. Tahara. I am investigating the excited state intramolecular proton transfer reaction in dihydroxy derivative of anthraquinone. This type of photoinduced reactions is well investigated by steady-state and picosecond spectroscopy and now femtosecond experiments can monitor such as reactions in real time scale. In addition to photochemical reaction in femtosecond time scale several intra- and intermolecular processes can be observed. Discussion with people from theoretical and experimental groups, and also with invited professors and scientists are very helpful for understanding the complicate phenomena.

Okazaki is small city and living here has many advantages. Mishima lodge is well equipped and conveniently located.

I am having very useful and enjoyable stay in Okazaki. I am deeply indebted to Prof. Tahara for my invitation and support and also to his group members for their extreme hospitality and kindness.

日本化学会賞
日本化学会学術賞
日本化学会学術賞
みやぎ科学技術振興基金研究奨励賞

岩田 末廣
渡辺 芳人
藤田 誠
平等 拓範



岩田末廣教授に 日本化学会賞

「分子軌道理論の開拓と分子科学への応用」への貢献に対し、平成 11 年度日本化学会賞が理論研究系の岩田末廣教授に授与された。岩田末廣氏は、分子軌道理論の開拓をすすめて、日本の理論化学の今日の発展に重要な役割を果たした。以下に同氏の代表的な業績を紹介する。

1. Fock 空間表示の有効ハミルトニアンへの導出

複雑な化学の研究対象を理論的に扱うための半経験理論計算は、計算機の発達した現在でもその重要性は衰えることがない。同氏は、第一原理から出発して、多参照摂動論に基づき Fock 空間表示の有効ハミルトニアンを導出することに成功し、これを用いて半経験的手法を解析し、 π 電子理論手法の意味付けを行なった。この研究成果は現在でも世界的に広く活用されている。

2. 分子の電子励起・イオン状態の研究

大規模な配置間相互作用計算が困難であった 1970 年代から、岩田教授は電子励起状態には一電子近似をこえた多電子励起配置が重要な関与を示し、励起状態を記述するのに適した「原子価型空軌道」を決定する方法論を確立した。また岩田教授は、変分空間の分割を効率的に行う機能を有し、さらに

有効ハミルトニアンをも扱うことが出来る多参照配置間相互作用計算プログラム (EFCI) を独自に開発し、光電子分光による多数の分子のスペクトルデータを系統的に解析することに成功した。この方法をさらに発展させ、分子の光解離の断面積、エキシマー型分子イオンのレーザー発振に関する理論的予測、周波数依存分極率、シンクロトロン放射光による分子の内殻電子の励起状態の記述など、一電子軌道近似の枠内では記述できない多くの分子物性の知見を得ることに成功した。

3. クラスター科学への理論的貢献

岩田教授は量子化学的手法を分子クラスターの構造・反応・分光研究に適用し、多くの興味深い新しい結果を得ている。2 族金属イオンと水クラスターの反応で発見されたサイズ依存性の特異性を解明し、クラスター内反応特有の原因を明らかにした。また、フェノール分子と水クラスターの錯体では、クラスターの構造と伸縮振動スペクトルの変化に強い相関があることを示し、そのスペクトル変化から構造の同定が可能であることを実証した。1 族金属と水のクラスターの研究では水分子が 4 以上になるとイオン対構造 $M^+(H_2O)_4^-$ が安定になり、その水の負イオン構造は、電子雲と複数の OH 基から作られる OH - 電子 - HO(OH{e}HO) 構造を持つことを明らかにした。この構造中の OH 伸縮振動の低波数シフト量と OH 結合長の伸長との相関から OH - 電子 -



今年3月に開かれた最終講義での岩田先生
(岡崎コンファレンスセンターにて)

HOは、電子-水素結合と呼べる新しい結合形式であることを示した。このようなクラスター分野への大きな貢献は、世界的にも注目されるものであり、さまざまな国際学会での招待講演の対象となっている。

以上のように、岩田末廣教授の研究は、緻密な理論を構築しつつ、従来の理論の及ばない複雑あるいは高いエネルギーの系にまで、その理論的解明を与えたという意味で、分子科学の新分野の開拓に指導的役割を果たしたものであり、日本化学会賞の受賞を心よりお祝い申し上げますと共に、今後の一層のご活躍をお祈りする次第である。

(青柳 睦 記)

渡辺芳人教授に 日本化学会学術賞

『研究者という商売は“包丁一本さらしに巻いて……”の世界である』と渡辺さんが書かれていたのを読んだことがある。その包丁の切れ味を、この度、化学者社会が高く評価したことは、誠に喜ばしい。彼は、東北大学理学部、筑波大学大学院、ミシガン州立大学とプリンストン大学のポスドク、慶応大学医学部助手、通産省化学技術研究所主任研究員、京都大学工学部助教授を経て、平成6年10月から分

子研教授に就任しておられる。その間一貫して関心をもってこられた事は、今回の受賞を生んだ「ヘム酵素における高原子価酸化活性種生成の分子機構の解明」である。異なる研究環境では、研究に対する取り組み方が違うのが当然であるが、酸化反応というものはどこにでも現れる基本問題であるが故に、その反応機構の解明という包丁は、場所を変える毎に一層研かれていったと思われる。

彼が詳しく調べてきた研究対象は鉄ポルフィリンの高酸化状態で、その典型は、 Fe^{IV} にO原子が一つ結合してポルフィリンがカチオンラジカルになった $\text{O}=\text{Fe}^{\text{IV}}\text{Por}^{+\cdot}$ である。普通の酸化反応は、反応するものから電子を奪う事を意味するが、高原子価鉄オキソポルフィリンは“酸素原子を与える”触媒機能をもっている点が特異で、その反応性こそ、“コレステロールの代謝で重要な働きをしているチトクロムP450を特色づけるもの”と考えた。高原子価鉄オキソ錯体なるものは不安定で、当時は観測されていなかったが、過酸と鉄ポルフィリンで前駆体をつくり、その分解のキネティクスを低温で調べていった。過酸のO-O結合をヘテロに開裂させないと目的の高酸化状態が得られないが、それにはポルフィリンの置換基やトランスリガンドの電子供与性(push effect)と過酸側の電子吸引性(pull effect)が効くことを明らかにした。環境が疎水的になるとホモ開裂になり、 $\text{O}=\text{Fe}^{\text{IV}}\text{Por}$ ができてしまう。こうなると酸化能はあるが、酸素原子添加能はない。ヘテロ開裂をしても $\text{O}=\text{Fe}^{\text{V}}\text{Por}$ 、 $\text{O}=\text{Fe}^{\text{IV}}\text{Por}^{+\cdot}$ 、 $\text{Fe}^{\text{III}}\text{Por}^{+\cdot}$ は同じ酸化状態にありながら反応性は違うものである。これ以外に $\text{ROO}-\text{Fe}^{\text{III}}\text{Por}$ や $\text{Fe}^{\text{III}}\text{Por}$ N-oxide など



も同じ酸化状態にある鉄ポルフィリンで、それらを別々に合成して、各々の性質を明らかにしていった。

この酸素添加反応をタンパク中で実行する酵素の場合、空間のあるべきところに H^+ 供与体或いは酸/塩基触媒部位がないといけないことを、タンパク質の部位特異的アミノ酸置換法という分子生物学的手法を用いて証明した事が、世界で誰も真似できない彼らしい点である。ミオグロビンという立体構造のよくわかったタンパク質を用い、設計した位置に酸/塩基触媒残基を導入し、更に基質導入部位をも考えて作った人工蛋白は、スルフィドやオレフィンの酸化反応に対して、手本としたペルオキシダーゼより高い活性を示し、更に酸化生成物への非常に高い不斉導入にも成功した。

この様に渡辺さんは、有機溶媒中の酸化反応機構の研究から出発して蛋白を設計し、人工酵素をつくるどころまで発展させられた。道のないところに道をつくっていったと云える高い業績である。彼は次回イタリアで開催される生物無機化学国際会議のPlenary Lecturerに予定され、国際的評価も高い。分子研一同で心から祝福したい。

(北川禎三 記)

藤田 誠教授に 日本化学会学術賞

このたび、名古屋大学大学院工学研究科の藤田

誠教授に、平成11年度日本化学会学術賞が授与されました。藤田教授は平成9年6月より平成11年3月まで、錯体化学実験施設助教授として分子研に在籍されました。今回の受賞は主にその期間に展開した「自己集合現象を活用した分子性錯体の精密構築と機能発現」に関する研究が認められたものであり、心よりお祝いを申し上げます。

藤田教授は、可逆的な配位結合が、自発的な分子集合に活用できることにいち早く着目し、この結合を駆動力とすることで、境界の定まった分子集合体がこれまでにない安定性と精密さをもって自発的かつ定量的に自己集合することを明らかにされました。このような遷移金属を活用した分子集合の研究は、近年急速に展開し、物質化学における新しい研究領域に発展しましたが、藤田教授は10年来、この領域のパイオニアとして貢献し、その業績は国際的に高く評価されております。以下に藤田教授の研究成果の概要を紹介します。

収束性金属イオン素子の開発と高次構造の定量的自己集合

遷移金属イオンの配位点を適度に保護した金属イオン素子を設計し、このような収束性金属イオンと種々の架橋配位子から、構造の発散を抑えた多彩な収束構造を定量的に自己集合させた。例えば、遷移金属の90度の結合角を四隅に配置してこれを直線的配位子で架橋した「正方形分子」は、国際的な流行を生み出した。この研究に端を発し、環が連結したインターロック構造や、球状に閉じた構造体、密閉された内部空間を持つ六面体カプセル構造等を構築した。同様に正四面体カプセル構造、チューブ構



造、ボウル型構造などを自在に自己集合させ、高次構造の構築に高い汎用性を有することを示した。

自己集合による三次元孤立空間設計と機能発現

上述の手法で得られる三次元構造体の内部に形成される孤立空間の化学を展開した。例えば金属と正三角形配位子から自己集合する三次元集合体の内部には直径1ナノメートルの空孔が存在する。この空孔内における不安定分子の安定化や、酸化反応、環状付加反応、異性化反応等の化学反応の促進などが観測され、錯体内孤立空間が人工的な特異場であることを示した。

配位結合性高分子の自己集積

遷移金属成分の選択により、上述の環状構造や内部連結構造が、さらに二次元または三次元的に繰り返した無限骨格（配位結合性高分子）が自己集積する系も見い出している。このようにして得られる高分子錯体は、既存の高分子には見られない精密分子配列を有しており、その包接、分離、触媒機能等を明らかにしている。

これらの成果からも明らかな通り、藤田教授の手法は、これまでにない物質の構築原理に基づいており、その着想ならびに成果は、物質化学分野に新しい領域を創成したものと評価されております。また、藤田教授は、分子研着任とほぼ同時期に科学技術振興事業団戦略的基礎研究推進事業の研究代表者に選出され、新技術・新産業創出への大いなる期待が寄せられています。

藤田教授の今後の益々のご活躍をお祈り申し上げます。

（田中晃二 記）

平等拓範助教授に みやぎ科学技術振興基金研究奨励賞

第1回（財）みやぎ科学技術振興基金研究奨励賞がレーザー開発研究センターの平等拓範助教授に授与されました。本賞は宮城県ゆかりの若手研究者に送られる賞であり、受賞対象となった研究業績は「半導体レーザー励起マイクロチップ固体レーザーの研究開発」です。平等助教授の先駆的な業績が多方面から評価されている証左といえます。

過去10年ほどの間に量子エレクトロニクス界で展開された半導体レーザー励起固体レーザーは、従来のレーザーを小型化、高効率化しただけでなく、レーザーとして不適切とされていた媒質や構成の優れた特性を引きだすなど質的な転換をも引き起こした。これは、真空管から半導体、集積回路と固体化により進められた電子回路分野での発展に類似しており、「固体レーザーのルネッサンス」とも称されている。一方、1970年代より提案されてきたマイクロチップ固体レーザーは、レーザー共振器の周波数特性を改善するエタロンそのものをレーザー媒質とするもので、発振周波数の単一化が容易となる特長を有するが、効率が低く、Arレーザーや色素レ



ーザーなどが励起光源として必要であったため、小さなレーザー材料の価値を殺していた。1990年頃、半導体レーザー励起に適した新材料を用いたマイクロチップ固体レーザーが提案されるに到り初めてその有用性が認識された。

マイクロチップレーザーは、低次の縦、横モード特性が得られ易く、低雑音、高安定動作が期待できる。また、エネルギー蓄積効果に優れているためQスイッチ発振やモードロックによる短パルス化も容易となるなど半導体レーザーでは、本質的に不可能な特長も備えている。また、電気光学(EO)素子による高速周波数変調や波長可変動作、さらには高輝度特性を利用した非線形光学波長変換なども可能である。

平等助教授は、半導体レーザー励起固体レーザーとして、Nd:YAGを用いた研究が主流であった1990年、新材料として開発されつつあったNd:YVO₄の有用性に着目して、マイクロチップ固体レーザーへの適用を最初に試み、半導体レーザー励起による高効率単一縦モードレーザー発振に成功した。また、新材料開発において重要な指針となるマイクロチップレーザーモデルの提案も行っている。他方、波長変換材料として注目され始めていたKTPの特徴を詳細に調べることで、EO効果を利用した多機能光素子としての可能性を見出した。実際に共振器内部SHG型Nd:YVO₄マイクロチップレーザーに適用し、単一のKTP結晶で第二高調波発生とEO-Qスイッチの両方の機能を果たす小型グリーンQスイッチレーザーを試作した。

さらに、平等助教授は、Yb:YAGレーザーの研究

にも初期の段階から積極的に取り組んでおり、次世代の高出力、高効率レーザーとして認識させるに到った。研究開始当初は、三準位レーザーの一種と見なされレーザー発振には不適切とされていたが、平等助教授は、励起光をマイクロチップ共振器に共鳴させた励起効果を利用することで効率的な発振が可能なことを実証した。一方、設計ルールの確立にも積極的であった。レーザーの横ビーム品質評価に導入されつつあるM²因子を、固体レーザー設計に適用することで簡便で有用な最適化法を提案し、Yb:YAGレーザーのような準四準位レーザーに最初に適用した。これは半導体レーザー励起Yb:YAGレーザーの高効率発振につながっている。またこの高密度励起は、Yb:YAGマイクロチップレーザーの80 nmにわたる広帯域波長可変動作をもたらした。これは515 nm領域における最初の波長可変SHGレーザーに至り、マイクロチップYb:YAGレーザーを用いた最初の波長多重記録型ホログラフィック光メモリを実現している。

近年では可塑性・生産性に優れるセラミックを用いたレーザー開発も行っており、新規材料の探索にも余念がない。世界に先駆けて新たな材料を発信していく気概にあふれ、研究領域を積極的に広げる柔軟性を持つ。共同研究者としても頼もしい限りであり、今後レーザーの歴史に足跡を刻む研究者であると感じている。氏のますますのご活躍を祈念いたします。

(栗村 直 記)



AHN Kwang-Hyun
安 光 賢

極端紫外光科学研究系極端紫外光研究部門 外国人客員助教授
(相關領域研究系相關分子科学第一研究部門 渡辺グループ)

Born in 1958 in Seoul, Korea. Received BS and MS in Chemistry at Seoul National University. Ph.D. in 1988 at the Princeton University, USA. From 1987 to 1989, post-doctoral research associate at MIT. Senior research scientist at Yukong LTD. from 1989 to 1992. In 1992, assistant professor at Kyung Hee University in Korea. Since 1996, associate professor at the same university. Currently, I am on the sabbatical leave to professor Watanabe's laboratory until July.

My research interest is in the homogeneous catalytic reaction using organometallic complex. Especially, I am interested in the synthesis of chiral intermediates using chiral catalyst. In IMS, I will study the mechanism of olefin epoxidation reaction catalyzed by manganese-salen complex.



BIAN, Wensheng

理論研究系分子基礎理論第二研究部門 学振外国人特別研究員

I got my Ph.D. (1994, Theoretical Chemistry), M.Sc. (1991, Physical Chemistry), and B.Sc. (1988, Chemistry) at Shandong University. From 1996 to 1998, I worked with Prof. Joachim Werner as a Humboldt Research Fellow at University of Stuttgart and my research work then is in the area of the ab initio potential energy surfaces and quantum dynamics of bimolecular reactions. From June 1998, I worked as Associate Professor at Shandong University. Currently I'm a JSPS fellow with Prof. Nakamura at IMS and my research project is about non-adiabatic dynamics of bimolecular reactions.



DROZDOVA, Olga O.

分子集団研究系物性化学研究部門 文部省外国人研究員

Graduated at Leningrad State Technical University (1992). Ph.D. Thesis "Optical spectroscopic studies of the conducting organic materials based on the molecule bis (ethylenedithio) tetrathiafulvalene (BEDT-TTF or ET)" at A. F. Ioffe Physical-Technical Institute, Russian Academy of Sciences (1996).

Since 1992 permanent position (Researcher) at A. F. Ioffe Physical-Technical Institute. Research Associate, Kyoto University (February, 1998–March, 2000). Visiting Researcher, Oxford University (September–October, 1999).

Research Interests: optical (infrared and Raman) properties of the low-dimensional organic conductors and superconductors; molecular complexes based on C60.

At IMS (Prof. K. Yakushi's group) since April, 2000, research concerns spectroscopic studies of organic conductors.



わたなべ たけ し
渡 邊 武 史

電子構造研究系電子状態動力学研究部門 学振特別研究員

平成 11 年東北大学大学院理学研究科博士課程修了。平成 11 年 10 月より分子研非常勤研究員として勤務。平成 12 年 4 月学振特別研究員に採用されました。水素結合クラスターの赤外分光を行い、分子間の会合状態や振動励起後のダイナミックスについて研究を行っていくつもりです。大学時代はオーケストラでクラリネットを吹きつつ、冬はスキー三昧でした。よろしくお願いします。



た むら いたる
田 村 格 良

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 非常勤研究員

平成 11 年 3 月千葉大学大学院自然科学研究科博士課程修了後、平成 11 年 10 月より現職にあります。分子集団研究系的小林先生の下で研究を行っております。今までの研究は主に水素結合型誘電体の構造相転移を X 線、中性子線を用いた研究をしてきました。分子研では高圧下における有機伝導体の構造を X 線回折を用いて調べられることを主な仕事としております。よろしくお願いいたします。



むら かみ ひで とし
村 上 英 利

分子制御レーザー開発研究センター放射光同期レーザー開発研究部 非常勤研究員

平成 11 年 3 月北海道大学大学院工学研究科博士課程修了、同大学研究生を経て 10 月 1 日より IMS フェローとして猿倉助教授のグループでお世話になっています。北海道出身です。今までは、有機材料の光物性、特に 3 次の非線形性について研究していました。分子研ではフェムト秒超短パルスレーザーを用いた、THz 電磁波の発生について研究する予定です。よろしくお願いします。



あき た (た なか) もと こ
秋 田 (田 中) 素 子

電子構造研究系基礎電子化学研究部門 リサーチ・アソシエイト
(関連領域研究系関連分子科学第一研究部門 井上グループ)

平成 11 年 3 月東京大学大学院理学系研究科博士課程修了。同年 4 月より分子研に came。現在は自己増殖反応場の構築を目指した研究を行っています。好きなこと・ものは、運動、海釣り (どちらも最近やってない)、推理小説、長風呂 (温泉ならなお良) 等々です。今後ともどうぞよろしくお願いいたします。





いし かわ え り
石 川 英 里

電子構造研究系基礎電子化学研究部門 リサーチ・アソシエイト

平成11年3月東京工業大学総合理工学研究科博士後期課程を修了後、同年10月よりリサーチ・アソシエイトとして西教授のグループに所属しています。これまで光還元反応を用いたヘテロポリ酸の合成とその構造化学を検討してきました。今後ともよろしくお願いいたします。



わ だ ひろ あき
和 田 裕 明

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 共同利用研究者

私は東北大学大学院博士課程中退後、東北大学サイクロトロン・ラジオアイソトープセンター非常勤研究員を経て、昨年10月1日付で理化学研究所協力研究員に着任し、同日付けで分子研の共同利用研究者となって現在、田中晃二教授のグループに所属しています。研究テーマは遷移金属触媒によるエネルギー変換および二酸化炭素の還元です。

休日は史跡巡りや読書（純文学、社会科学もの）をして過ごしています。



いち の さと み
市 野 里 美

技術課第四技術班分子制御レーザー開発技術係 研究支援推進員

12月より分子制御レーザー開発研究センターでお世話になってます。日常業務を通して、分子研の雰囲気にも少しずつ慣れていきたいと思いますので、宜しくお願いします。



つく だ たつ や
佃 達 哉

電子構造研究系基礎電子化学研究部門 助教授

平成12年1月に、東京大学大学院総合文化研究科から転任してまいりました。これまで分子クラスター負イオンの研究をしてまいりましたが、こちらでは面白い形や性質を持ったクラスターを作ることには挑戦してみたいと思っています。いろいろな方に無知な質問をさせていただきつつ、手探りでやっていこうと思います。好きなことは、お酒を飲むこと、野球をすることみること、子供と遊ぶこと、小説を読むこと、（家族には言えないのですが）一人旅です。よろしくお願い致します。



まき た せい じ
牧 田 誠 二

技術課第5技術班分子物質開発技術第一係 係員

平成11年北海道大学大学院理学研究科修士課程を修了し、2月より分子物質開発研究センターで質量分析、元素分析を主に行っています。

静岡、北海道と渡り歩いてここ岡崎に来たのは初めてですが、美しい桜並木など毎日が新しい発見です。スポーツと特にお酒が好きなのでお誘いいただければ嬉しいです。どうぞよろしくお願いします。



か とう まさ ひろ
加 藤 政 博

極端紫外光実験施設 助教授

3月1日付けでつくばの高エネルギー加速器研究機構より転任してきました。分子研では数少ない(?)加速器の専門家です。岡崎に来て一番変わったことは車にあまり乗らなくなったことでしょうか。つくばでは通勤は言うまでもなく研究所内を移動するにも車を使っていました。岡崎に来てからはずいぶんと歩くようになり、おなかの贅肉も少しは落ちてくれるのではとひそかに期待しています。



うえ た ただし
上 田 正

技術課第四技術班分子制御レーザー開発技術係 係員

民間企業を退職し、平成12年3月からこちらでお世話になっています。これまで半導体レーザを用いた測距技術の開発をしてきましたが、今回またレーザーの仕事につけたことをとても幸せに思っています。研究所というめぐまれた環境で幅広い知識を身につけ、一日も早く皆様のお役にたてるようがんばっていききたいと思います。どうぞ宜しくお願いします。



た だ ひろ かず
多 田 博 一

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 助教授

大阪生まれです。東大、郵政省通信総合研究所(神戸)、京大を経て4月より岡崎にお世話になっています。ようやく遠距離通勤(神戸から京都まで通っていました)から解放されたこと、そして自分の手で実験ができることを喜んでいました。しばらくは装置になれるためのリハビリが必要なようです。分子研では、分子デバイスの構築に関する研究を進めたいと思っています。よろしくお願いいたします。





かさ い とし お
笠 井 俊 夫

関連領域研究系分子クラスター研究部門 教授

大阪大学大学院理学研究科から流動で分子研にまいりました。4月から2年間お世話になります。蔡助手と分子クラスターの立体ダイナミクス研究を核に、複雑系・不均一系を含めた新しい化学反応論の実験的基礎作りを目指してがんばるつもりです。とは言うものの、家内と二人の娘には「遊びの合間に仕事をしているでしょ」と言われています。その通りと思っています。



たか す まさ こ
高 須 昌 子

関連領域研究系分子クラスター研究部門 助教授

京都出身。東京大学理学系研究科博士課程修了、金沢大学理学部物理学科助手、カリフォルニア大学バークレー校化学科ポスドク研究員、金沢大学理学部計算科学科助教授を経て、4月1日から2年間の予定で流動部門に異動しました。モンテカルロシミュレーションの手法を用いて、ポリマーやゲルの物性、ランダム媒質中のヘリウムの物性を研究してます。趣味はスキーです。よろしくお願いいたします。



ちえ どくちる
蔡 徳 七

関連領域研究系分子クラスター研究部門 助手

平成5年3月大阪大学にて博士（理学）の学位を取得。4月より米国ライス大学、翌年9月より台湾原子分子科学研究所にて博士研究員。平成7年6月より大阪大学助手。今年4月から分子研でお世話になっております。休日に景色の良い岡崎公園を家族と散策しながらのんびりと過ごすのが楽しみです。よろしくお願いいたします。



く ぼ あつし
久 保 厚

関連領域研究系分子クラスター研究部門 助手

86年名古屋大学博士課程修了後カナダBritish Columbia大博士研究員、都立大および京大理学部化学教室助手を経由して4月より分子クラスターの助手になりました。British Columbia大のボスのMcDowell先生は“Redistribute Science”とおっしゃっていました。そういう考え方もあるのだなあと感心しました。だいたい今までやってきた仕事は固体高分解能NMRの測定法の開発とそれを応用した物性研究です。また趣味はジョギングです。



の の がき よう いち
野々垣 陽 一

極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門 助手

平成8年名古屋大学大学院博士課程後期課程を中退し、平成9年に界面分子の助手となりました。その後、名古屋大学工学部助手を経て、再び、分子研に戻ってきました。名古屋大学では、主に有機金属気相法によるInP上のInAs量子ドットの作製と評価を行っていました。今後は、Si基板上に放射光を照射し、その効果をSTMで観察して行く予定です。よろしくお願い致します。



たか はし かず とし
高 橋 和 敏

極端紫外光実験施設 助手

平成12年3月に東北大学大学院理学研究科博士課程を修了し、4月より現職に着任致しました。これまでは、光電子分光法により金属ナノ薄膜・多層膜系での量子サイズ効果に対する研究を行ってきました。今後は放射光をプローブとした固体及び固体表面のダイナミクスに関する研究や新たな測定手法の開発を行う予定です。趣味は野球、スキー、そしてお酒。よろしくお願いいたします。



うお すみ やす ひろ
魚 住 泰 広

錯体化学実験施設錯体触媒研究部門 教授

北大薬、触媒化学研究センター、米国コロンビア大、京大理、名市大薬を経て2000年4月着任いたしました。7つ目の研究室、6つ目の職場です。引っ越しと研究室の立ち上げは上手になりました。声と図体が大きいです。分子研には珍しい肉体派の混ぜ物屋です。

地に足をつけて実験化学を楽しみたいです。1950年代以前のアメリカ音楽芸能のB級品を聞くのが好きです。よろしくお願いいたします。



よ た たか お
依 田 隆 夫

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 非常勤研究員

神奈川県出身。平成12年3月東京大学大学院理学系研究科博士課程修了。4月に岡本研究室に来ました。これまでは球状蛋白質の折れ畳み/変性を、ストップドフローCD法による速度過程の測定および分子動力学シミュレーションによって研究していました。これからは蛋白質の2次構造転移の研究を行う予定です。新しい環境で視野を広げ、今後の研究活動の足掛かりにしたいと考えています。よろしくお願いいたします。





はし もと まさ ひと
橋 本 昌 人

相関領域研究系分子クラスター研究部門 非常勤研究員

平成12年3月金沢大学大学院自然科学研究科博士課程修了。同年4月から分子クラスター部門の高須グループでお世話になる事になりました。金沢大学では、乱れた表面上での超流動現象、その基底状態での相図について研究をしてきました。分子研では、現在までと違った分野の研究にも挑戦していきたいと考えています。よろしくお願いいたします。



おお じ ひろし
陰 地 宏

極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門 非常勤研究員

平成11年3月名古屋大学大学院理学研究科で学位を所得、ポスドクとして一年間つとめた後こちらに来ました。母校での有機薄膜の軟X線吸収や電子分光の測定経験を生かし、分子研では放射光を用いて遷移金属錯体等の共鳴光電子分光や軟X線吸収分光を行い、分子軌道法による理論計算を行うことで、これらの分光法に関するより深い知見を得たいと考えています。趣味はバイクです。岡崎付近はワインディングの宝庫です。誰か一緒に走りに行きませんか？



し れん かず し
枝 連 一 志

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 非常勤研究員

平成12年金沢大学大学院自然科学研究科博士課程修了。4月から田中晃二先生の下で非常勤研究員としてお世話になっています。金沢大学では高原子価オキソ種の合成とその反応性について研究してきました。こちらでのまず最初の仕事は比較的安定なルテニウムのラジカル錯体を単離することです。短い期間とは思いますが、できるだけ多くのことを吸収しようと思います。宜しくお願いします。



みつ たけ あより
光 武 亜代理

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 リサーチ・アソシエイト

平成11年9月総合研究大学院大学数物科学研究科博士課程を修了し、半年間の学振特別研究員を経て、リサーチ・アソシエイトとして引き続き岡本研究室でお世話になっています。博士課程では、拡張アンサンブル法などを用いて、生体高分子の計算機実験を行っていました。今後も、これらの手法の開発等を行い、タンパク質の立体構造予測の研究を進めていきたいと思っております。趣味はスポーツ（ソフトボール、テニス、スキー等）をすることや、景色を見ることです。これからもよろしくお願いいたします。



きく ち たけ し
菊 地 武 司

理論研究系分子基礎理論第三研究部門 客員教授

1982年大阪市立大学大学院理学研究科博士課程修了後、コーネル大学、(株)日本チバガイギー国際科学研、東京理科大学計算科学フロンティア研究センターなどを経て、現在、倉敷芸術科学大学産業科学技術学部機能物質化学科に勤務しております。分子研には客員部門で一年間お世話になります。タンパクフォールディングの理論的研究や立体構造予測の研究を行っております。



きのした まさ ひろ
木 下 正 弘

理論研究系分子基礎理論第三研究部門 客員助教授

昭和54年京都大学大学院修士課程修了(その後、工学博士学位取得)。平成元年京都大学助教授。ブリティッシュコロンビア大学化学科とノースカロライナ州立大学物理学科で研究に従事した経験があります。現在は、積分方程式論と呼ばれる流体用の精密な統計力学理論を軸にして、金属-水溶液界面、液中微粒子間相互作用、水溶液中の蛋白質立体構造形成、両親媒性分子の自己組織化機構などの研究と取り組んでいます。1年間全力で頑張りますので、どうか宜しくお願い致します。



さ さ だ ひろ ゆき
佐々田 博 之

分子構造研究系分子構造学第二研究部門 客員助教授

慶應義塾大学理工学部物理学科で高分解能分子分光と中性原子のレーザー冷却の研究をしています。大学院生時代のウン十年前、まだ建物が2つしかない分子研に何度も伺い、広田グループで実験をさせていただきました。それ以来、分子研や東岡崎駅周辺の変わりようには驚いています。現在も知っている人が10人ほど在職されておりますが、分子研の研究に少しでもお役に立てれば幸いです。



やま せ とし ひろ
山 瀬 利 博

電子構造研究系電子構造研究部門 客員教授

東京工業大学理工学研究科博士課程修了(工学博士、1970年)後、同大学助手としてヘテロポリ酸の固体光化学とDiazo化合物の色素増感の研究を行う。ポスドクとしてマックスプランク、フリッツハーバー研究所で半導体表面での色素増感の研究に携わった。ヘテロポリ酸が金属酸化物の諸物性を分子論的に理解する上での格好の化合物であることに着目(1980年助教授、1989年教授)し、これを基盤とした分子素子の構築や無機医薬の実現に力を注いでいる。趣味は魚釣り(海、山、川)と水泳。





増^{ます}田^だ秀^{ひで}樹^き

関連領域研究系相関分子科学第二研究部門 客員教授

京都大学大学院薬学研究科博士課程修了。分子科学研究所錯体化学実験施設助手、名古屋大学理学部助手、名古屋工業大学工学部助教授、同教授を経て、平成12年4月より現在に至る。研究テーマは「生体系金属酵素の構造・機能モデルの構築」「外場応答機能を有する金属錯体の創成」という、一見全く異なるように見えますが、実は密接に関係した内容の2本立てで進めています。施設の共同利用等で研究所へは頻繁に出入りしていますのでよろしくお願いします。



岩^{いわ}田^た耕^{こう}一^{いち}

関連領域研究系相関分子科学第二研究部門 客員助教授

平成元年3月に大学院を修了して以来、米国オハイオ州立大学、神奈川科学技術アカデミー、早稲田大学、東京大学で研究をしてきました。現在は（共働きで子育てをする都合で）雑然とした街中で暮らしていますが、もともと屋外を歩き回るのが好きです。三島ロッジに泊まった翌朝は、よく裏手の辺りをぶらぶら歩きます。今年は岡崎に頻繁に伺えそうで、とても楽しみにしております。どうぞよろしくお願いいたします。



谷^{たに}口^{ぐち}功^{いさお}

錯体化学実験施設錯体触媒研究部門 客員教授

昭和45年東京工業大学理工学部応用化学科卒業。昭和50年同大学院博士課程修了の後、昭和52年10月から熊本大学工学部勤務。平成2年4月より教授。平成9年度、大阪大学タンパク質研究所客員教授（機能評価部門）併任。現在に至る。専門は生物電気化学、触媒電気化学など。特に、「機能修飾電極の開発と金属タンパク質の界面電子移動反応への応用」に関する研究などを行っている。



田^た中^{なか}康^{やす}隆^{たか}

錯体化学実験施設錯体触媒研究部門 客員助教授

1990年長岡技術科学大学大学院博士課程修了、(財)相模中央化学研究所客員研究員、ルイ・パスツール大学博士研究員を経て、平成3年より静岡大学工学部材料精密化学科助手、平成7年より静岡大学工学部大学物質工学科助教授、現在に至ります。専門は広い意味の生体機能関連化学、固相での分子認識、超分子化学で糖類、アミノ酸類の種類の識別、不斉識別などを行っています。趣味はラグビーで、地元（浜松）クラブチームで現役です。



なが しま たけ ひろ
長 島 剛 宏

技術課第一技術班理論研究系技術係 係員

(理論研究系分子基礎理論第一研究部門 岡本グループ)

平成11年大阪市立大学大学院博士課程修了。岡本グループで数値シミュレーションを用いたタンパク質の立体構造予測を行います。私にとってこの研究は、全く新しい領域なので、一から学ばねばならないことが多いのですが、それは同時に自分を広げるよい機会でもありますので、たくさんの方の知見を吸収し研究に励みたいと考えています。好きなこと、温泉&野宿ツーリング。



おか の よし のり
岡 野 芳 則

技術課第二技術班分子集団研究系技術係 係員

(分子集団研究系分子集団動力学研究部門 小林グループ)

平成3年筑波大学大学院・理工学研究科修士課程修了。反応有機の研究室にて硫黄、セレンを含む有機化合物を扱っていました。同年4月より東京大学物性研究所・技官。分子性伝導体の研究に携わりTTF類縁体の有機ドナー系を主に扱ってきました。平成12年4月より現職。趣味：Macintoshのアプリケーション開発。よろしくをお願いします。



かけひ み ち こ
寛 美知子

電子構造研究系基礎電子化学研究部門 技術補佐員

平成12年中部大学工学部工業化学科卒。設備・人材的にも非常にすばらしい環境を生かして新たな知識・技術を身に付けていきたいと考えております。趣味は、音楽鑑賞です。いろいろお世話になるとは思いますが、宜しくお願い致します。



かね もと かつ いち
鐘 本 勝 一

分子構造研究系分子動力学研究部門 学振特別研究員

この3月に京都大学人間・環境学研究科にて博士号(人間・環境学)を取得し、4月から学振PDとしてお世話になります。これまではESRを中心とした導電性高分子の研究を行ってきました。分子研ではいろいろな人の研究に耳を傾けつつ自らの研究を発展させていける様に頑張りたいと思います。また、きれいなコートでデニスすることも楽しみにしております(下手ですが)。よろしくお願いいたします。





の ぐち ひろ し
野 口 博 司

相関領域研究系分子クラスター研究部門 学振特別研究員

平成12年名古屋大学大学院人間情報学研究科博士課程修了。4月から高須先生のところでお世話になっています。高分子のシミュレーションをしています。これまで硬い高分子鎖の折り畳み転移やDNA電気泳動などを研究してきました。こちらで新しい知識を修得して、研究の視野を広げていきたいと考えています。よろしくお願いします。



なが その みつる
永 園 充

極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門 学振特別研究員

1988年小山高専卒、1993年横国大修士修了、1997年総研大博士(理学) 1993-1999年分子研技官、1999-2000年スウェーデン国立研究所MAX-lab博士研究員。出所後、1年でまたお世話になります。研究は、軟X線分光法の開発、およびそれを用いた分子の局所電子構造変化の解明です。趣味は、スキー、サッカー、写真、旅行、美味しい酒を探すことです。



いけ うえ たか ひさ
池 上 崇 久

分子物質開発研究センター融合物質開発研究部 学振特別研究員

平成7年東邦大学理学部生物分子科学科を卒業、平成12年千葉大学大学院理学研究科博士課程を修了し、同年4月から分子研に来ました。博士論文のテーマは、「ポルフィリン環の非平面化に伴うヘムモデル錯体の物性変化」でした。今後は、以前よりもより生体に近いヘムモデルの合成とそのモデル錯体を用いたヘム酵素の機能の解明を行いたいと思います。

こちらに来てから、既に様々な方からのご協力をいただいています。今後ともよろしくお願いします。



おか た かず とし
岡 田 一 俊

電子計算機室 受託研究員

平成12年3月、総合研究大学院大学数物科学研究科博士課程修了、4月より科学技術振興事業団の研究員として青柳研究室に所属することになりました。現在の研究は、大気環境中に存在する2原子分子や3原子分子の電子振動回転状態、およびそれらの分子の反応の理論的研究です。博士課程の時から岡崎にいましたけれど、あらためてよろしくおねがいします。



いま むら ちから
今 村 主 税

理論研究系分子基礎理論第四研究部門 公立大学研修員

平成10年3月熊本工業大学大学院工学研究科博士課程単位修得の上退学、現在、山口県立大学生生活科学部助手。これまでシクロデキストリンを用いた分子認識に関する研究を行ってきました。短い間ですが、平田グループで溶液中の化学反応の理論的研究について学びたいと考えております。趣味は、テニス、オーディオ、ドライブetc.です。今後ともよろしくお願い致します。



あき やま りょう
秋 山 良

理論研究系分子基礎理論第四研究部門 特別協力研究員

修士までは北海道大学工学部で放射線化学の実験をしていましたが、名古屋大学物理学教室博士課程に進学する時に生物物理の理論に転じ、現在は溶液化学の理論の周辺にどっぷりつかっています。3年程前からIMSフェロー、学振特別研究員として分子研でお世話になっていますが、面白い事に分子研を去る予定がたった最近になって新任者紹介の原稿依頼が来ました。9月には海外学振でコーネル大学に移る予定です。“短い”間ですがよろしくお願いします。



お しま え み こ
小 島 絵美子

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 特別協力研究員

平成12年総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程修了。この4月から、引き続き、小林先生の下でお世話になっています。これまでは新規な有機分子性伝導体の開発を目指して、有機合成を中心に行っていました。今後はもっと幅広い視野から、新規物質に携わる研究を行っていきたいと考えています。今後とも宜しくお願いいたします。



いま い ひろ ゆき
今 井 宏 之

相関領域研究系相関分子科学第一研究部門 特別協力研究員

平成12年3月に北海道大学大学院で博士(理学)学位取得後、4月から井上克也先生のもとで研究させていただくことになりました。学生時代は、分子性スピンドラに関する研究を行っていました。恵まれた環境の中で、積極的に知識と技術を身につけたいと思っています。スポーツの誘いなら大歓迎ですので、どうぞよろしくお願い致します。





すず き かず はる
鈴木 和治

関連領域研究系相関分子科学第一研究部門 特別協力研究員

2000年3月総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程を中退。4月から渡辺グループでお世話していただくことになりました。これまで、有機電気伝導体の開発として構成分子の合成や電荷移動錯体、ラジカル塩のX線結晶構造解析を行ってきました。趣味は水泳、ジョギング、自然散策といった“ゆったり系”の運動と、化学の坎を生かした料理です。今春から気持ちを新たにがんばりたいと思いますのでよろしくお願いいたします。



なか い ひで たか
中井 英隆

関連領域研究系相関分子科学第一研究部門 特別協力研究員

平成12年3月近畿大学大学院工学研究科博士後期課程を修了後、4月より特別協力研究員として渡辺芳人先生の研究室でお世話になっております。現在、環境問題という観点から非常に注目を集めつつある「水の中での有機金属化学」に関する研究を行っています。多くの方々と知り合い、様々なことを身につけたいと考えておりますので、どうぞよろしくお願いいたします。



にい くら ひろ みち
新倉 弘倫

極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門 特別協力研究員

平成12年3月総合研究大学院大学博士課程修了。同4月から、引き続いて分子研でお世話になっています。専門はUV-XUV領域における気相分子の光緩和過程の研究。特にリドベルグ電子と価電子や核との相互作用に興味があります。引き続き、気相超励起状態からのイオン化・光解離過程を明らかにする目的で、放射光(UVSOR)と紫外レーザーを併用した実験を行う予定です。



よし むら だい すけ
吉村 大介

極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門 特別協力研究員

平成11年9月名古屋大学大学院理学研究科博士後期課程修了、日本学術振興会特別研究員を経て本年4月より現職。名古屋大学在籍中よりUVSORのビームライン8B2において機能性有機薄膜の電子構造を紫外光電子分光を用いて研究してきました。昨年度よりビームライン8B2の担当として測定装置の更新作業を行っています。早く装置が立ち上がるようがんばります。よろしくお願いいたします。



さ とう かつ ひこ
佐 藤 克 彦

電子計算機室 特別協力研究員

1997年3月に東京理科大学理学研究科化学専攻博士課程を修了後、同年4月より理論第一の岩田グループへ学振の特別研究員として分子研に来て3年間が終わり、4月より電算センターの特別協力研究員となりました。分子研の優れた研究環境を生かして良い研究をしたいと思います。宜しくお願いいたします。



いま い たか し
今 井 隆 志

理論研究系分子基礎理論第二研究部門 リサーチ・アソシエイト
(理論研究系分子基礎理論第四研究部門 平田グループ)

兵庫県姫路市出身。平成12年3月総合研究大学院大学数物科学研究科博士課程修了後、同年4月16日より現職。学生のとくと同様、平田グループでお世話になっています。研究テーマは溶液中における生体分子の安定性およびその熱力学変数に対する依存性の分子論的解釈です。これからもよろしくお願いします。



うえ の たか ふみ
上 野 隆 史

相関領域研究系相関分子科学第一研究部門 助手

平成10年大阪大学大学院理学研究科博士課程修了、三菱化学を経て本年3月16日より現職。これまで、金属酵素モデルを用いてペプチドコンホメーションによる反応制御機構を研究してきました。今後はこの経験を生かし、天然にない新規金属酵素を創っていききたいと考えております。また、分子研では様々な分野の方と交流を深めていきたいと思っておりますので、よろしくお願い致します。



平成 11 年度総合研究大学院大学修了学生及び学位論文名

数物科学研究科 (構造分子科学専攻) [課程博士]

氏 名	博 士 論 文 名	付記する専攻分野	授与年月日
青 柳 将	Construction of Nanoscale Coordination Systems by Accumulating Metal-Containing Macrocycles	理 学	H12. 3.24
衣 袋 文 明	Quantitative Self-Assembly of [2]Catenanes and Cages Possessing Transition Metals in Their Backbones	理 学	H12. 3.24
岩 堀 史 靖	STUDIES ON THE REACTION BETWEEN BISNITROXIDE RADICALS AND TRANSITION METAL IONS	理 学	H12. 3.24
岡 田 一 俊	Accurate ab initio theoretical studies of rovibronic states of some simple diatomic molecules	理 学	H12. 3.24
新 倉 弘 倫	Photodissociation and Photoionization Dynamics in the Extreme Ultraviolet Region Studied by Synchrotron Radiation-Laser Combination Techniques	理 学	H12. 3.24

数物科学研究科 (機能分子科学専攻) [課程博士]

氏 名	博 士 論 文 名	付記する専攻分野	授与年月日
山 本 晃 司	Construction of a Novel Nanosecond Temperature Jump Apparatus and Its Application to Time-Resolved Raman Studies on Protein Dynamics	理 学	H12. 3.24
小 島 絵美子	Synthesis and Characterization of Novel Molecular Conductors Based on Sulfur, Selenium and Tellurium-containing Donors	理 学	H12. 3.24
今 井 隆 志	水溶液中における生体分子の安定性に対する統計熱力学的研究	理 学	H12. 3.24
茂 森 一 輝	環状メタロペプチドの新規合成法の開発	理 学	H12. 3.24

数物科学研究科 (構造分子科学専攻) [論文博士]

氏 名	博 士 論 文 名	付記する専攻分野	授与年月日
熊 倉 光 孝	準安定ヘリウム原子のレーザー冷却と冷却原子の極低温イオン化衝突	理 学	H12. 3.24
鶴 澤 武 士	Theoretical studies of water clusters containing OH{e}HO structure and electron-hydrogen bond	理 学	H12. 3.24

総合研究大学院大学平成12年度（4月入学）新入生紹介



平成12年度（4月入学）新入生

専攻	氏名	所属	研究テーマ
構造分子科学	油 努	関連領域研究系	金属錯体を利用した水中での新規な化学反応の構築
	伊藤 歌奈女	分子物質開発研究センター	新しい金属錯体の開発とその触媒機能
	大橋 雅卓	関連領域研究系	アポミオグロビンへの金属錯体の挿入と新しい反応場の構築
	加藤 恵一	関連領域研究系	有機ラジカルを用いた新しいスピン格子系の構築
	加藤 茂	関連領域研究系	ヘム酵素における構造と機能発現に関する研究
	菊澤 良弘	分子物質開発研究センター	金属錯体を用いた光励起電子移動とその合成反応への展開
	田中 仙君	極端紫外光実験施設	放射光とレーザーを組み合わせた光電子分光法による光誘起現象の研究
	AKHTARUZZAMAN, Md.	分子物質開発研究センター	超分子構造をもつ複素環化合物錯体の開発

W-band (95 GHz) パルス電子スピン共鳴測定装置 (W-band(95 GHz) Electron Spin Magnetic Resonance System)

分子構造研究系分子動力学研究部門助教授 加 藤 立 久

分子科学研究所は、材料科学分野における最先端・学術研究のセンター的役割を担っている。これまで有機超伝導体や金属クラスターなど多くの高機能分子素子を生み出してきた。最近炭素クラスター・フラーレンの出現、超伝導体の種類の多様化など、分子素子材料の新しい時代を迎えている。また、生体関連分子・金属錯体のクラスターや生体無機分子の研究などが急速に進みつつある。新物質の出現・生体関連分子への注目と時を合わせるように、電子スピン共鳴測定装置に関する方法論にも新時代が到来している。つまりパルス・フーリエ変換測定法を駆使し2次元表示する二次元パルス ESR 法と高磁場・高周波数マイクロ波 ESR 法である。方法論の革命は、新分子素子や生体関連分子の電子物性測定研究に質的变化を与えると期待される。

平成 10 年度補正予算により W-band(95 GHz) パルス電子スピン共鳴測定装置が導入され、全国大学間共同利用機器として分子物質開発センター内極低温棟 001 号室に設置された。ESR 設備全体の構成を以下に示す。

1 . X バンド CW ESR 装置一式 (Q バンド測定アタッチメント付)

1) 電磁石及び電源

電磁石直径 : 10 インチ (25 センチ)

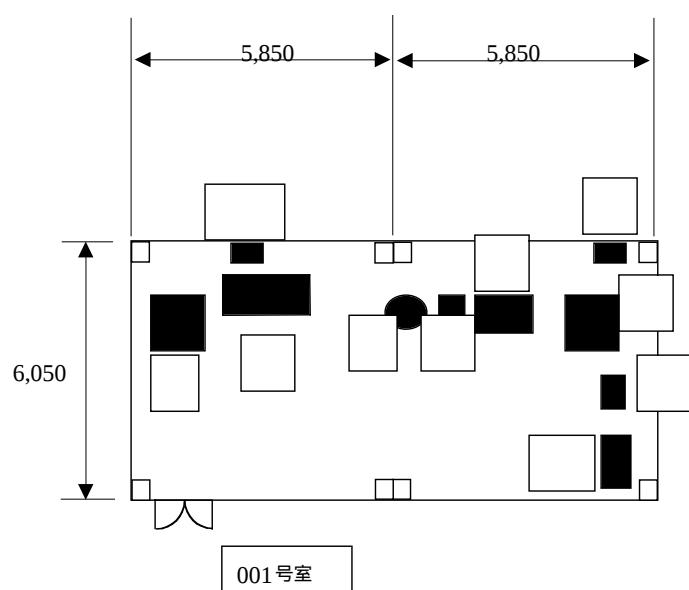
最大磁場 : 1.48 T

2) 分光計

a . X バンドマイクロ波ブリッジ

発振周波数 : 9.2 ~ 9.9 GHz

出力 : 最大 400 mW (ガン発振器)



分子物質開発センター内極低温棟 001 号室平面図

W バンド FT ESR 装置

W バンド超伝導磁石

W バンドマイクロ波ブリッジ

分光観測・制御ユニット

観測・制御用ワークステーション

パルス X バンド電磁石

電磁石電源・冷却水循環装置

液体窒素自動供給装置

X バンド CW ESR 装置

CW・X バンド電磁石

CW・X バンド分光器

電磁石電源・冷却水循環装置



b. Qバンドマイクロ波ブリッジ

発振周波数: 34 GHz

出力: 最大 80 mW (ガン発振器)

3) 共振器

a. Xバンド用矩形型標準キャビティ

共振モード: TE₁₀₂

光透過率: 50 %

最大サンプル径: 10 mm

Q値: 6000 以上 (無負荷時)

b. Qバンド用円筒型標準キャビティ

共振モード: TE₀₁₁

最大サンプル径: 2 mm 又は 3 mm

Q値: 12000 以上 (無負荷時)

4) 極低温温度可変装置

温度範囲: 1.9 K から室温

制御精度: ± 0.1 K

4) Xバンド測定部

電磁石直径: 10 インチ (25 センチ)

最大磁場: 1.48 T

5) FT 用共振器

形式: ダイエレクトリック

最大試料管径: 5 mm

6) パルス ENDOR / 三重共鳴装置

アンプ出力: 200 W 以上

周波数範囲: 0.3 ~ 150 MHz

7) 極低温温度可変装置

Xバンド FT: 4.2 K から室温 (精度 ± 0.1 K)

Wバンド FT/CW: 4.2 K から室温 (精度 ± 0.1 K)

8) 二次元測定モード

COSY、SECSY、HSCORE その他

2. Wバンド FT ESR 装置一式 (Xバンド FT ESR

装置、並びにパルス ENDOR 装置付)

1) Wバンド基本性能

測定領域: 93.6 ~ 94.4 GHz

測定感度: 2×10^7 spins/GHz

2) Wバンド共鳴器

共鳴器モード: TE₀₁₁

共鳴器チューニング幅: 10 GHz

共鳴器バンド幅: 40 MHz

共鳴器 Q 値: 2400 (室温、無負荷時)

3) Wバンド用超伝導磁石

主磁石(超伝導)範囲: 0 ~ 6 T

補助磁石(室温)範囲: 0 ~ 70 mT

第 64 回岡崎コンファレンス

次世代の分子軌道理論 Molecular Orbital Theory for the New Millennium

開催日	平成 12 年 1 月 20 日(木) - 1 月 22 日(土)		
開催場所	岡崎コンファレンスセンター		
提案代表者	名古屋大学情報文化学部	天 能 精一郎	
	東京大学大学院工学系研究科	中 野 晴 之	
	京都大学大学院工学系研究科	波 田 雅 彦	
招待外国人講演者(講演順)	LINDH, Roland	(University of Lund, Sweden)	
	HARRISON, Robert J.	(Pacific Northwest National Laboratory, USA)	
	MUKHERJEE, Debashis	(Indian Association for the Cultivation of Science, India)	
	HEAD-GORDON, Martin	(University of California, Berkeley, USA)	
	NOGA, Jozef	(Slovak Academy of Sciences, Slovakia)	
	KOCH, Henrik	(University of Southern Denmark, Odense, Denmark)	
	JENSEN, Jan H.	(University of Iowa, USA)	
	LEE, Yoon S.	(KAIST, South Korea)	
	HESS, Bernd A.	(Univrsitaet Erlangen, Germany)	

コンファレンスの概要

理論化学の大きな飛躍は常に新しい概念や方法論の発展と緊密にリンクしている。一方、これら方法論の発展が主体で最先端の理論化学者を招待した国際会議が開催されるという事は日本国内ではまだまだ一般的ではない。本岡崎コンファレンスは、新しい千年期を迎えるにあたり、分子軌道理論における新しい次元性と方向性を開拓する目的で開催された。茅幸二所長の挨拶に引き続き、会議は以下のトピックスを中心に進行した。

大規模分子を高速に計算するためのスケーラブルな分子軌道理論
密度行列を変分パラメータとする新しい分子軌道理論
励起状態や化学反応といった擬縮重条件での高精

度計算を達成する多参照多電子理論

実験誤差内の高い計算精度を可能にする完全基底関数の多電子理論

溶媒分子や不活性ペプチド鎖を精密なポテンシャルとして取り扱うための理論

相対論を取り入れた分子軌道理論

招待講演は、外国人 10 件、日本人 8 件からなり、その内 3 件の日本人講演者として 30 歳前後の国内で最も優秀な若手研究者が含まれた。又、一般参加者によるポスターセッション(37 件)が行われた。外国人講演者は、常に世界中の国際会議で招待講演が止まない分子軌道理論の最前線で活躍する研究者であるが、彼らの実に約半数は初めての来日であった。国外でしか見る事の出来ない著名な研究者を一目見ようと、他省庁や企業からの参加者も多く盛況であった。分子軌道理論という膨大な蓄積を抱える領域そのものがテーマであり、トピックスも広



範であったが、会場は勿論のこと、コーヒープレイクや懇親会でも活発な討論が繰り広げられた。閉会の挨拶としてD. Mukerjee教授が本コンファレンスの成果と次世代分子軌道理論で解決すべき課題を明確にまとめ上げ3日間の会議を終了した。この会議が21世紀を担う理論化学者に新しい発想への強い動機を与え、領域の活性化に少なからず役立つものと主催者は信じている。

最後に、本コンファレンス開催でご尽力下さった茅幸二所長、コンファレンス秘書として事務作業をして頂いた計算機センターの禿子瞳さんと理論研究系の川口律子さん、所内世話人の南部伸孝さん、また会場準備等を引き受けて下さった池上努さんを始めとする理論研究系の教官、院生の方々に厚くお礼申し上げます。

プログラム

1月20日(木)

14:00-14:10 **Opening Address**
K. Kaya (IMS)

Chairperson: **H. Nakano (Univ. Tokyo)**

14:10-14:55 Task lists in parallel implementations of direct and semi-direct SCF:load balancing of CPU and/or I/O intensive processes
R. Lindh (Univ. Lund, Sweden)

14:55-15:40 I. Algorithmic Developments Within NWChem
II. Relativistic Quantum Chemistry of Actinides: Complexes Of Uranyl
R. J. Harrison (Pacific Northwest Natl. Lab.)

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

Chairperson: **S. Yabushita (Keio Univ.)**

16:00-16:35 The configuration-interaction-singles, time-dependent Hartree-Fock, time-dependent density-functional, and many-body Green's-function approaches to the electronic excited states of extended systems
S. Hirata (Quantum Theory Project, Univ. Florida)

16:35-17:10 New electronic structure theory based on reduced density matrices
K. Yasuda (Nagoya Univ.)

17:10-17:55 Density equations in Chemical Physics
H. Nakatsuji (Kyoto Univ.)

1月22日(金)

Chairperson: **M. Hada (Kyoto Univ.)**

08:30-09:15 MRCPA as a state universal multi-reference CEPA type approach
K. Tanaka (Hokkaido Univ.)

09:15-09:50 Developments in multireference perturbation theory
J. P. Finley (Univ. Tokyo)

09:50-10:10 **Coffee Break**

Chairperson: **S. Ten-no (Nagoya Univ.)**

10:10-10:55 Some recent developments in state-specific multireference formalisms
D. Mukherjee (IACS, Calcutta, India)

10:55-11:40 Improving the Accuracy and Feasibility of the CCSD(T) Method
M. Head-Gordon (Univ. California, Berkeley, U. S. A.)

11:40-12:25 Explicitly correlated coupled cluster (CC-R12) theory: recent progress
J. Noga (Slovak Acad. Sci., Slovakia)

12:25-14:00 **Lunch**

Chairperson: **K. Tanaka (Hokkaido Univ.)**

14:00-14:45 Large scale coupled cluster calculation and aspects of reduced scaling
H. Koch (Univ. Southern Denmark, Odense, Denmark)

14:55-15:30 A few topics on one- and two-electron physical properties in the molecular orbital theories
S. Iwata (IMS)

15:30-16:15 The Effective Fragment Potential Method
J. H. Jensen (*Univ. Iowa, U. S. A.*)

16:25-18:00 **Poster Session**

1月23日 (土)

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

08:30-09:15 Recent Advances in Multireference
Moeller-Plesset Theory
K. Hirao (*Univ. Tokyo*)

09:15-10:00 Calculations of spin-orbit effects for
molecules using two-component spinors and
relativistic effective core potentials
Y. S. Lee (*KAIST, South Korea*)

10:00-10:20 **Coffee Break**

Chairperson: **K. Hirao** (*Univ. Tokyo*)

10:20-10:55 Development of Relativistic Electronic
Structure Theory
T. Nakajima (*Univ. Tokyo*)

10:55-11:40 Two-component methods for the calculation
of relativistic effects in Molecules
B. A. Hess (*Univ. Erlangen, Germany*)

11:40-12:25 Spin-orbit CI method based on the spin-
dependent GUGA and some Applications
S. Yabushita (*Keio Univ.*)

12:25-12:40 **Summary**
D. Mukherjee (*IACS, Calcutta, India*)

ポスターセッション

P1 Theoretical Studies on Electron Transfer at
Photosynthetic Reaction Centers
Kozo Aoki, Osamu Kitao, and Tetsuji Ogawa
(*Natl. Inst. Mater. Chem. Res.*)

P2 Theoretical Studies on Electron Transfer at Dye-
Sensitized Semi-conductor Solar Cells
**Tetsuji Ogawa, Osamu Kitao, and Hironori
Arakawa** (*Natl. Inst. Mater. Chem. Res.*)

P3 Theoretical Studies on the Reaction Mechanism for
the Photocatalytic Decomposition of NO on the V-
silicalite Catalyst
**Shinya Higashimoto, Masakazu Anpo, Osamu
Kitao, Kozo Aoki, and Hironori Arakawa** (*Osaka
Pref. Univ. and Natl. Inst. Mater. Chem. Res.*)

P4 Charge Equilibration Method Generalized for
Charge Separation Systems
Osamu Kitao, Kozo Aoki, and Tetsuji Ogawa
(*Natl. Inst. Mater. Chem. Res.*)

P5 The analytic gradient of the equation-of-motion
coupled-cluster energy with a reduced molecular
orbital space
Kyoung K. Baeck (*Kang-Nung Natl. Univ., Korea*)

P6 On the Performance of Diagrammatic CASPT2
Theory
**Yoong-Kee Choe, James Finley, Haruyuki
Nakano, and Kimihiko Hirao** (*Univ. Tokyo*)

P7 Experimental and ab initio studies of the vibrational
structure of the spin-orbit coupling constants in
 A^2Pu and a^4Pu of O_2^+
**Dmitri G. Fedorova, Mark S. Gordon, and
Cheuk Y. Ng** (*Univ. Tokyo and Iowa State Univ.*)

P8 Polarizabilities of dendritic molecular aggregates
**Harunori Fujita, Masahiro Takahata, Masayoshi
Nakano, Shinji Kiribayashi, and Kizashi
Yamaguchi** (*Osaka Univ.*)

P9 An ab initio MO study of hexa-aza macrocycle
containing 1,10-Phenanthrolines and its lithium
complex
**Ayako Furuhashi, Keiko Takano, Shojiro
Ogawa, and Shinji Tsuchiya** (*Ochanomizu Univ.
and Univ. Tokyo*)

P10 Some improved algorithm for the MRCISD
program
Zhengting Gan, Yubin Wang, and Zhenyi Wen
(*Inst. Modern Phys., NorthWest Univ., China*)

P11 Ab initio study of OH stretching frequency in
phenol dimer and its cation
T. K. Ghosh and E. Miyoshi (*IMS*)

P12 On the density functional calculations using scalar
relativistic effective core potentials
Young-Kyu Han and Kimihiko Hirao (*Univ.
Tokyo*)

P13 Electron Propagator Calculations by quasiparticle
equation
Osamu Hino (*Grad. Univ. Advanced Studies*)

P14 ACEb3k3 rigorous algorithm for the electron
repulsion integral over the generally contracted
solid harmonic Gaussian-type orbitals
Kazuhiro Ishida (*Sci. Univ. Tokyo*)

P15 A local interpolation scheme using no derivatives in
potential sampling
Toshimasa Ishida and George C. Schatz
(*Shizuoka Univ. and Northwestern Univ.*)



- P16** Normal Mode Analysis in Enzymatic Reaction Using ONIOM Method
Kenshu Kamiya (*Kitasato Univ.*)
- P17** Solvent effect on the electronic excitation
Yukio Kawashima, Michel Dupuis, Haruyuki Nakano, and Kimihiko Hirao (*Univ. Tokyo and Pacific Northwest Natl. Lab.*)
- P18** The steric effect for charge transfer in ion-molecule collisions at intermediate energies
Mineo Kimura, J. P. Gu, G. Hirsch, and R. J. Buenker (*Yamaguchi Univ. and Univ. Wuppertal*)
- P19** Direct MCSCF - MD simulation for ion-molecule reaction $C + H_3^+ \leftrightarrow CH^+ + H_2$
Tomoko Kinoshita, Shinkoh Nanbu, and Mutsumi Aoyagi (*Grad. Univ. Advanced Studies and IMS*)
- P20** Ab initio study of Silsesquioxanes and the Ti analogues
Takako Kudo and Mark S. Gordon (*Gunma Univ. and Iowa State Univ.*)
- P21** Quantum Chemical Calculation for Materials Design of Lithium Ion Battery
Takatoshi Matsumoto, Umpei Nagashima, and Kazutoshi Tanabe (*Natl. Inst. Mater. Chem. Res. (NIMC)*)
- P22** Quasi-Complete Active Space Self-Consistent Field Method
Haruyuki Nakano, Junji Nakatani, and Kimihiko Hirao (*Univ. Tokyo*)
- P23** Quantum-phase and information-entropy dynamics of a two-state molecular system interacting with strongly amplitude- and phase-squeezed fields
Masayoshi Nakano and Kizashi Yamaguchi (*Osaka Univ.*)
- P24** Theoretical study of the potential energy surfaces and bound states of HCP
Shinkoh Nanbu, Stephen K. Gray, Tomoko Kinoshita, and Mutsumi Aoyagi (*IMS and Argonne Natl. Lab.*)
- P25** Ab initio Study of Molecular Liquids
Hirofumi Sato and Fumio Hirata (*IMS*)
- P26** Density functional theory combined with a generalized integral equation for quantum system
Tomonari Sumi, Hirofumi Sato, Fumio Hirata, and Eisaku Miyoshi (*IMS*)
- P27** Fully variational treatment of molecular orbital method and its application to excited states
Masanori Tachikawa (*Rikkyo Univ.*)
- P28** Theoretical Study for Core-excited Reaction of Methyl Cyano Acetate
Osamu Takahashi, Masaki Mitani, Ko Saito, and Suehiro Iwata (*Hiroshima Univ. and IMS*)
- P29** On the propriety of integral equation theories for molecular liquids
Seiichiro Ten-no (*Nagoya Univ.*)
- P30** Electron correlation effect in X-Ray scattering cross section
N. Watanabe, H. Hayashi, Y. Udagawa, S. Ten-no, and S. Iwata (*Tohoku Univ., Nagoya Univ., and IMS*)
- P31** Theoretical studies on ligand transfer selectivity in conjugate addition of mixed organocuprate
Masahiro Yamanaka and Eiichi Nakamura (*Univ. Tokyo*)
- P32** NMR chemical shifts of solvated molecules: A RISM-SCF study
Takeshi Yamazaki, Hirofumi Sato, and Fumio Hirata (*Grad. Univ. Advanced Studies and IMS*)
- P33** High Performance Computation of Molecular Integrals for Generally Contracted Basis Sets
Takeshi Yanai, Haruyuki Nakano, and Kimihiko Hirao (*Univ. Tokyo*)
- P34** Accurate theoretical studies of rovibronic states of CO and CO⁺: Simulation of rovibronic spectra
Kazutoshi Okada, Tsutomu Ikegami, and Suehiro Iwata (*Grad. Univ. Advanced studies and IMS*)
- P35** Ground state structure of CuO₂: a CASPT2 study
J. Hasegawa, B. O. Roos, and K. Pierloot (*Kyoto Univ., Lund Univ., and Univ. Leuven*)
- P36** Theoretical Study of the Stannole Synthesis Catalyzed by Transition Metal Complexes
Toshiaki Matsubara, Riadh Sahnoun, and Tokio Yamabe (*Inst. Fundamental Chem. and Kyoto Univ.*)
- P37** Theoretical Study of the adsorption of N₂, CO, and NO molecules on Pd (110) surface
Toshiaki Matsubara, Tomoko Nagai, Masataka Nagaoka, and Tokio Yamabe (*Inst. Fundamental Chem., Nagoya Univ., and Kyoto Univ.*)

第 65 回岡崎コンファレンス

ナノストラクチャー創製における放射光の果たす役割 Advantages of utilization of SR in nano-structure creation

開催日	平成 12 年 1 月 27 日 - 29 日		
提案代表者	分子科学研究所 教授	宇理須 恆 雄	
	分子科学研究所 教授	黒 澤 宏	
招待外国人講演者	Prof. BACHER, Walter	(Forschungszentrum Karlsruhe, Germany)	
	Dr. BERMUDEZ, Victor M.	(Naval Research Laboratory, USA)	
	Dr. GRAY, Struan M.	(Lund University, Sweden)	
	Prof. JO, Sam K.	(Kyung Won University, Korea)	
	Prof. SCHWENTNER, Nikolaus	(Freie Universitaet, Germany)	
	Prof. URQUART, Stephen G.	(University of Saskatoon, Canada)	
	Prof. WEAVER, John H.	(University of Illinois at Urbana-Campaign, USA)	

本コンファレンスの趣旨

量子効果を利用した新機能性発現デバイスとして注目を集めているナノストラクチャーであるが、サイズ並びに配向などを精密に制御する技術の開発が遅れており、必ずしもナノストラクチャー本来の性能を発揮できるにいたっていないのが現状である。理想的なナノストラクチャー創製には表面反応の分子レベルでの観測と制御が不可欠であり、そのためには放射光科学といった従来にはない新しい科学にものとづく技術の開発が重要となる。本コンファレンスでは、分子レベルで構造および、配向を制御したナノストラクチャー創製に深い関心を持つ表面科学、固体物理、半導体材料・プロセスなどの異なる専門分野の研究者が集まり、表面における光励起反応、ナノストラクチャーの作成方法および評価方法などについて、討論を行う。特に、ナノストラクチャーの作成と評価におけるシンクロトロン放射光の果たす役割に重点を置き、今後の放射光利用の新しい視

点を模索する。

プログラム

26 (Wed)	
16:00	Registration (Conference hall)
18:00	Get-together (Conference hall)
27 (Thu)	
8:45	Koji Kaya (Director General of IMS) Opening remarks
9:00	Kou Kurosawa (IMS) Introductory talk
<u>Session A</u>	<u>SR photochemistry</u>
9:15	Nikolaus Schwentner (Freie Univ, Germany) Photochemical dry etching of metals and semiconductors in the VUV
10:00	Yuji Baba (Jpn. Atomic Energy Res. Inst.) Specific chemical-bond scission induced by inner-shell electron excitation in adsorbed silane-derivatives



10:30	Kazumichi Nakagawa (<i>Kobe Univ</i>) Elementary effect and secondary effect in surface SR chemistry	9:30	Kiyoshi Asakawa (<i>Femtosecond Tech. Res. Association</i>) Nano-probe assisted precise control of nano-photon structures; site-controlled quantum dots and 2-D photonic crystals
11:00	Taking photo (Entrance)		
11:30	Struan M. Gray (<i>Lund Univ., Sweden</i>) STM based photoemission microscopy	10:00	Toshiaki Tamamura (<i>NTT</i>) Highly ordered nano-structures formed by lithographically assisted self-organization
12:15	Masamitsu Yoshimura (<i>Toyota Tech. Inst.</i>) Scanning tunneling microscopy on Si(110) surfaces	10:30	Yoshikazu Takeda (<i>Nagoya Univ.</i>) SR-stimulated etching and OMVPE growth for semiconductor nanostructure fabrication
12:45	Lunch (Sangllia)	11:00	Coffee break
13:45	Masaharu Oshima (<i>Univ. Tokyo</i>) Synchrotron radiation analysis of low dimensional materials on semiconductors	11:15	Sukekatsu Ushioda (<i>Tohoku Univ.</i>) Optical spectroscopy with atomic spatial resolution
14:15	Masao Kamada (<i>IMS</i>) Photo-induced change in the semiconductor-vacuum interface studied by synchrotron radiation and laser	12:00	Yoshihiko Kanemitsu (<i>Nara Inst. Sci. Tech.</i>) Optical characterization of silicon quantum structures
14:45	Coffee break	12:30	Keiichi Edamatsu (<i>Osaka Univ.</i>) Exciton relaxation in wide band-gap semiconductor quantum dots
<u>Session B</u>	<u>Surface chemistry</u>	13:00	Lunch (Sangria)
15:00	Victor M. Bermudez (<i>Naval Res. Lab., U. S. A.</i>) IRRAS for in-situ studies of chemical reactions on surfaces	<u>Session E</u>	<u>Characterization by STM</u>
15:45	Sam K. Jo (<i>Kyung Won Univ., Korea</i>) Gas-phase H atom interactions with crystalline silicon: surface and bulk reactions	14:00	John H. Weaver (<i>Univ. Illinois at Urbana-Campaign, U. S. A.</i>) Semiconductor surface modification with halogens and photons: visualization with scanning tunneling microscopy
16:30	Michio Niwano (<i>Tohoku Univ.</i>) Etching of Si electrode surfaces in dilute HF solution investigated by infrared spectroscopy	14:45	Katsumi Tanimura (<i>Nagoya Univ.</i>) Laser-induced structure changes of semiconductor surfaces: Atomic scale characterization by STM
<u>Session C</u>	<u>Micromachining</u>	15:15	Fumio Komori (<i>Univ. Tokyo</i>) Magnetic properties of two-dimensionally-coupled Co dots on N-modified Cu(001) surfaces
17:00	Walter Bacher (<i>Forschungszentrum Karlsruhe, Germany</i>) Synchrotron based microfabrication at Forschungszentrum Karlsruhe	15:45	Coffee break
18:30	Reception	16:00	Masakazu Aono (<i>Oaska Univ.</i>) New methods to measure nanoscale physical properties
28 (Fri)		16:45	Tsuneo Urisu (<i>IMS</i>) Atom level observation of SR illuminated Si(111) surface by STM
<u>Session D</u>	<u>Nano process and physics</u>	17:15	Koji Nakayama (<i>Tohoku Univ.</i>) Electron- and photon-stimulated modification semiconductor surfaces
9:00	Shinji Matsui (<i>Himeji Inst. Tech.</i>) Recent progress of nano-imprint lithography		

18:30-20:30 *Poster session with drinks*

29 (Sat)

Session F Characterization by SR

- 9:00 **Stephen G. Urquhart** (*Univ. Saskatoon, Canada*)
NEXAFS spectromicroscopy of polymers
- 9:45 **Kazuhiko Seki** (*Nagoya Univ.*)
Electronic structures of systems formed by depositing organic molecules on metal surfaces
- 10:15 **Jun Yoshinobu** (*Univ. Tokyo*)
Bonding and structures of hydrocarbon molecules on Si surfaces
- 10:45 **Coffee break**
- 11:00 **Maki Kawai** (*Inst. Phys. Chem. Res.*)
Unsaturated hydrocarbons on Pd(110): Local structure and ordering
- 11:30 **Nobuo Ueno** (*Chiba Univ.*)
Synchrotron-radiation ARUPS of organic thin films: Studies of electronic structure, molecular orientation and chemical reaction
- 12:00 **T. Urisu** (*IMS*)
Concluding remarks

講演および討論要旨

第1日

午前のセッションは放射光の光プロセス応用と表面基礎過程に関するテーマである。SchwentnerによるXeF₂を用いた放射光エッチングの報告ではSiの価電子励起エッチング速度が異常に速いことが報告された。馬場等はサイレン化合物表面凝集系の内殻電子励起によるサイトスペシフィック結合切断を報

告した。中川等は、放射光励起化学反応における、励起の二次的効果の重要性を述べた。午前の後半は、電子分光とSTMの話で、Gray等はSTMのチップ下に分光放射光を照射し、STM測定と同時に電子分光を行う新しい試みを報告した。また、吉村は、Si(110)表面のSTM測定を行い各種の特異な表面再構成が観察されることを報告した。午後の前半は、尾嶋による半導体や磁性半導体の量子ドットの製作およびそれらの放射光による構造や物性の評価の話で、放射光が低次元物質の評価非常に有用であることを示した。午後の後半は表面赤外分光の講演のあと、Bacher による、ドイツのカールスルーエ研究所の放射光によるマイクロマシン応用の紹介があった。Bermudez は埋め込み金属層基板のパイオニアであるが、今回はこれを用いた半導体表面の化学反応解析への各種の応用例を紹介した。また、Jo は、赤外吸収スペクトルおよびLEEDにより、気相の水素原子とSi表面との反応を丁寧に調べ、バルク内の水素の存在を明らかにした。また、木村等はATR法を半導体表面の液相反応の解析に応用することを提案し、希フッサン液中でのSi電極のエッチングを報告した。カールスルーエ研究所の放射光装置は2.5 GeVと比較的大きなリングであるにもかかわらず、利用研究はリソグラフィや表面解析などのLIGAプロセス研究に的が絞られている点が特徴的であった。

第2日

ナノプロセスとナノ物理のセッションでは、松井がナノインプリント技術の現状と将来について報告



し、10 nm レベルのパタンの量産が可能であることを示した。浅川は、ナノプローブでアシストすることにより高精度に制御されたナノフォトニック結晶の製作に成功した。これにより位置を制御した量子ドットや二次元のフォトニック結晶の製作と特性について報告した。玉村は、リソグラフィで自己組織化をアシストすることにより高度に配列の制御されたナノ構造が形成できることを示した。また、竹田等は、放射光励起エッチングとOMVPEによる半導体ナノ構造の形成について報告した。これらの微細加工・プロセスの報告にひきつづいて、潮田はSTM誘起蛍光の測定技術を開発し、原子レベルの空間分解能で蛍光スペクトルが測定できることを示した。枝松は、ワイドギャップ半導体の量子ドットのエキシトン緩和について量子サイズ効果を報告した。午後はSTMによる評価を中心としたセッションである。Weaverはハロゲン原子による半導体表面の修飾と光励起効果をSTMより原子レベルの空間分解能で調べ、 SiCl_2 の脱離に伴いダイマーのもう一方のSi原子がテラスに移るといふ、エッチングの機構に関する新事実を報告した。谷村はレーザ照射によるSi表面の構造変化についてSTMで観察した。小森は窒素で修飾されたCu(001)表面に形成されるCo量子ドットの磁気的性質について報告した。後半のセッションでは青野による、新しいSTM技術としての二探針STM技術の開発結果と半導体、金属表面および、自己組織化膜吸着構造などのSTM測定結果が報告された。宇理須は、放射光励起によるSi表面のクリーニングと熱クリーニングをSTM像により違いを比較し、放射光照射により、熱平衡なSi

表面が得られることを報告した。中山は、Weaverとの共同研究として、半導体表面の電子ビーム及び、光による構造変化についてSTMより観測し、カスケード散乱機構を提案した。

第3日

放射光による表面評価の講演が中心である。Urquhartは各種ポリマーの顕微NEXAFS分光について報告し、この種の顕微分光における放射光の有用性を示した。関は金属表面に堆積した有機分子膜の電子構造について光電子分光によって調べた。吉信はSi表面に炭化水素分子を吸着させ、その構造をSTMおよび放射光による光電子分光などで調べた。川合はPd(110)表面に吸着した不飽和炭化水素の構造と配向についてSTM光電子分光などにより調べた結果を報告した。上野は有機薄膜について、角度分解光電子分光で調べ、電子構造、分子配向、化学反応性などについて明らかにした。加工から構造評価、物性まで、ナノ科学の幅広い領域について活発な討論がなされ有意義な会議であった。

化学反応に対する溶媒効果の分子論

提案代表者	分子科学研究所	教 授	平田 文男
提案者および共同研究者	分子科学研究所	助 手	佐藤 啓文
	京都大学	助教授	木下 正弘
	大阪大学	助 手	西山 桂
	京都大学	助 手	松林 伸幸
	九州大学	助 手	吉森 明
	学術振興会	奨励研究員	秋山 良（現分子研特別協力研究員）
	京都大学大学院	学 生	鄭 誠虎（現ミュンヘン工科大学 PD）
	京都大学大学院	学 生	石田 干城（現テキサス大学 PD）

研究計画の概要

化学反応を第一義的に支配するのは電子状態であるが、溶液内化学反応の場合は溶媒の影響が反応の方向および速度の両方を決定する重要な因子になり得ることは S_N2 反応の例を引くまでもなく明らかである。分子レベルで溶液内化学反応を解くために必要な最小限の理論的要素は電子状態理論（量子化学）と液体の統計力学である。我々は数年前にこれらの二つの要素を結合していわゆる RISM-SCF 法を考案し、主としてプロトンの親和力にかかわるいくつかの基本的溶液内化学反応の問題を解明してきた。これらの問題は溶液内の化学種の安定性の問題であり、基本的には熱力学的平衡の問題であった。

本課題研究は溶液内化学反応で残されている二つの重要な問題に挑戦しようとするものである。その一つは光化学反応に関わる問題であり、当然、励起状態の量子化学とそれに対する溶媒効果の取扱が主題となる。もう一つは化学反応の速度に関わる問題であり、特に、粘性など溶媒の動的性質と反応速度の間の関係を問題とする。この研究には溶媒のダイナミクスを記述する非平衡統計力学の要素が必要

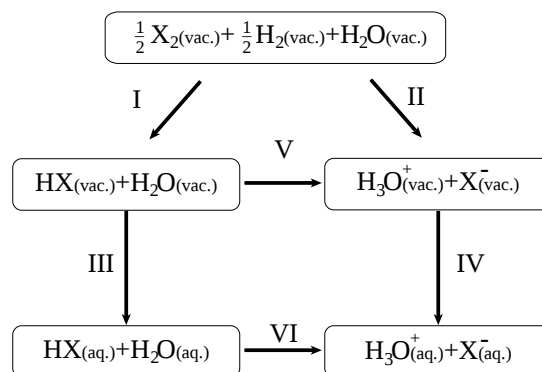
となるが、われわれはこれまでの研究で相互作用点モデルに基づく新しい理論を提案してきた。この理論によれば溶質の変化に対する溶媒の応答は溶媒の集団励起のそれとして記述することができる。

本研究では反応座標とその時間微分を変数とする一般化ランジェヴァン方程式に基づき溶液内化学反応を解析する。その中に含まれる反応の自由エネルギープロファイルや抵抗係数など溶媒効果を含む量は液体の統計力学に基づき分子論的に決定する。

研究経過と成果の概要

本課題研究では溶液内化学反応速度を決定する上で必要なふたつの理論的要素をそれぞれ独立に発展させ、最後に、それらを結合して速度論に発展させることを目指した。それらの要素のひとつは溶液内分子の安定性および反応性に関わるもので、反応系（反応資源系、反応中間体、反応生成系など）の電子状態と溶媒和の自由エネルギーの評価がその主題となる。この線に沿って過去2年間に行った研究は以下の諸課題にまとめられる。

図 1-1 ハロゲン化水素の熱力学サイクル



非プロトン性溶媒中でのフォルムアミドのケト-
エノール互変異性化反応の研究

水の自己解離定数 (pKw) の温度依存性

水溶液中の酢酸のシン / アンチ構造平衡

メンシュトキン反応の自由エネルギー曲面の決定

アセチルアセトンのケト-エノール互変異性化反
応に対する溶媒効果

水溶液中のハロゲン水素の酸-塩基平衡

超臨界状態を含む広い温度、密度範囲における水
とその自己解離

水および超臨界水中での Diels-Alder 反応

溶液内化学反応速度論を構築する上でのもうひと
つの理論的要素は、溶液内のダイナミクスに関わ
るものであり、この面の研究成果は以下の諸点にま
とめられる。

モードカップリング理論による記憶項の精密化

モードカップリング理論による時間相関関数の計
算

極性溶媒中のイオンのダイナミクス。

液体の相互作用点モデルに基づく水のダイナミッ
クス理論

水中のイオンのダイナミクス

さらに、これらの理論的要素を統合して、水、ア
ルコールおよびアセトニトリル中におけるベンゾニ
トリルの励起ダイナミクスに関する研究を行った。
これらの研究成果は本稿の最後に付した論文リスト
にまとめてある。本稿では紙面の都合上、これらの
研究の中からいくつかを抜粋して成果を述べる。

水溶液中のハロゲン水素の酸 - 塩基平衡

水溶液中のハロゲン化水素のうち HCl、HBr、HI
はいずれも強い酸性を示すのに対して、HF は弱酸
性を示す。これらのハロゲンのうちでフッ素の電気
陰性度が最大であることを考慮するとこのふるまい
は直感と非常に食い違っており、量子化学のチャレ
ンジングな問題として早くから理論家の注目を集め
た問題である。(L. Pauling もその名著“Nature of
Chemical Bond”の appendix の中で議論している。)
この問題を解くカギは「溶媒効果」を考慮すること
であり、Pauling は溶液中では HF の非解離状態が解
離状態よりも低い自由エネルギーをもつことを溶媒
和自由エネルギーの実験データを使って示した。し
かしながら、Pauling の解析は現象論であるため、
HF の非解離状態が何故解離状態より安定であるか
という問題に関する分子レベルでの解答は与えない。
われわれは RISM-SCF 理論に基づく解析により
実際に HF が弱酸性であることを定性的に示すと
ともに、HF の非解離状態が安定である理由として、
他のハロゲン化水素がひとつのタイプの水素結合
($\text{H}_2\text{O} \cdots \text{H-X}$) しか形成しないのに対して、フッ化
水素は水分子と ($\text{H}_2\text{O} \cdots \text{H-F}$) および ($\text{HF} \cdots \text{H-O-H}$)
のふたつのタイプの水素結合を形成するからである
ことを明らかにした。

図 1-1 に解析で使った反応の熱力学サイクル
を示す。図 1-1 において VI のプロセスが溶液中の
酸 - 塩基解離平衡に対応しておりこの反応に伴う自
由エネルギー変化 ($\Delta G(\text{VI})$) が解離のしやすさ

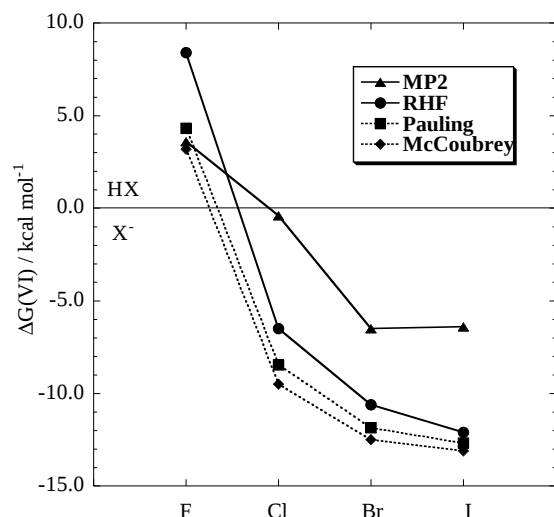
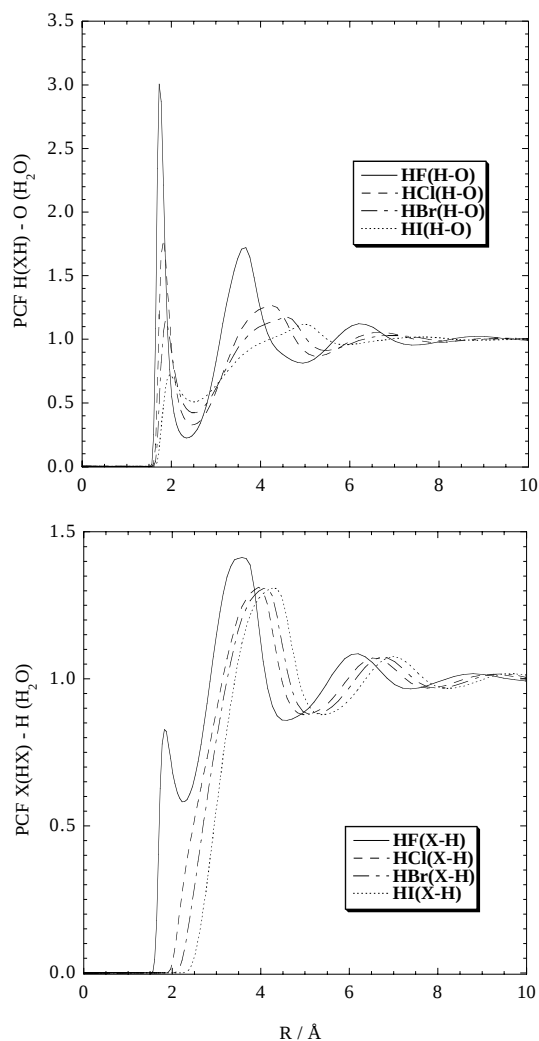


図 1-2 ハロゲン化水素のプロトン化脱離に伴う自由エネルギー変化 ($\Delta G(VI)$) [上]

図 1-3 a : 水素原子 (ハロゲン化水素) 周辺の酸素原子 (水分子) の分布 [右上]
b : ハロゲン原子周辺の水素原子 (水分子) の分布 [右下]



(酸の強さ)を規定する。I、IIおよびVのプロセスは気相中の反応であり、その自由エネルギー変化は反応に関与する個々の孤立分子の電子状態計算によって求めることができる。また、IIIおよびIVはこれらの分子の水への溶解に伴う自由エネルギー変化(溶媒和自由エネルギー)であり、RISM-SCF法に基づいて計算することができる。このようにして求めた $\Delta G(VI)$ を図1-2に実線で示す。この図において●および▲の記号は電子状態計算のレベルの違いを意味しており、それぞれ、RHFレベルおよび電子相関をMP2レベルで取り入れた結果を表わしている。また、図には比較のためにPaulingおよびMcCoubreyが溶媒和自由エネルギーの実験データを使って求めた結果を図示した。この図から明らかに、RHFおよびMP2のどちらのレベルの計算

においてもRISM-SCF理論はPaulingらの経験的結果を再現しており、先に述べた実験結果と定性的に一致している。すなわち、フッ化水素を除くハロゲン化水素の場合、非解離状態に比べて解離状態の方が安定になっているのに対し、フッ化水素の場合はその傾向が逆転している。このような安定性の逆転が起きる原因を分子レベルで調べるために、非解離状態のハロゲン化水素の周りの水分子の動径分布関数を図1-3a、図1-3bに示した。

図1-3aはハロゲン化水素のH-原子の周りの水のO-原子の分布を表わしており、どのハロゲン化水素の場合もHとOが強い水素結合を作っていることが判る。図1-3bはハロゲン化水素のハロゲン原子の周りの水のH-原子の分布を表わしているが、この場合は、フッ化水素だけが約1.7 Å附近に水素

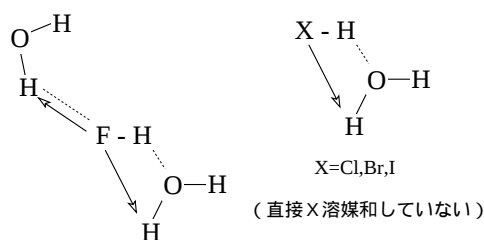


図 1-4 ハロゲン化水素の溶媒和の様子

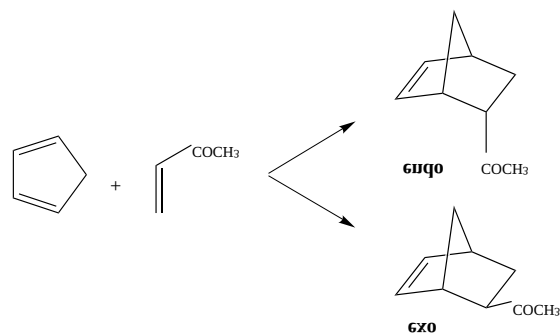


図 2-1 メチルビニルケトンとシクロペンタジエンの環化付加反応のスキーム

結合によるシャープなピークを示している。

これらの事情を図 1-4 にポンチ絵で示した。

このことからフッ化水素の場合その非解離状態において 2 個の水素結合を作ることにより、過剰な安定化エネルギーを獲得していることが強く示唆される。

ここで述べたことがらは高校の化学の教科書レベルの問題であり、いわば量子化学がその威力を試される問題として、その発展の初期において Pauling らによって取り上げられた問題であった。しかしながら、今回、RISM-SCF 法の開発によって初めてその分子レベルでの本質が解明されたのである。

水および超臨界水中の Diels-Alder 反応

超臨界水を溶媒に用いた有機反応は反応物以外の有機物質を必要としないため環境への影響も最小限に抑えられ、環境調和型の工業化学として期待されている。なかでも Diels-Alder 反応は、水溶液中で反応速度が劇的に増加することが知られている環化付加反応であるが、溶媒である水を超臨界条件にすることによって反応収率が極めて高くなり、反応速度も水中に比べてさらに増加するという実験結果が最近報告された。本研究では気相中、水中（標準状態）および超臨界水中におけるメチルビニルケトン（MVK）とシクロペンタジエン（CP）の環化付加反応を RISM-SCF/MCSCF 法を用いて調べた。

（図 2-1）ここでは以下の疑問に回答を与えることを企図した。

- (a) 水中で気相中に比べて、何故、反応速度が劇的に速くなるか？
- (b) 超臨界水における反応速度の増加は水中とどう異なるか？その物理的本質は同じか否か？
- (c) 水中に比べて超臨界水において反応収率が増加するのは何故か？
- (d) 反応の立体選択性は溶媒によってどのような影響を受けるか？

図 2-2 に RISM-SCF 法に基づいて計算した反応の自由エネルギーダイアグラムを示してある。（すべての値は反応体の自由エネルギーからの相対値である。）この結果から水中（常温、常圧）では気相中に比べて環化付加反応が優位に進行し、また、反応速度が劇的に速くなることがわかる。この溶媒効果を溶質 - 溶媒間の静電効果と疎水効果に分割したところ、静電効果の方は水素結合による安定化と電子分布の歪みによる不安定化が互いに相殺してしまい、疎水効果が反応性と反応速度を増加させる要因であることが分かった。すなわち、疎水相互作用により非極性の溶質同士が接触している確率が高くなることが反応性および反応速度を増加させるわけである。一方、超臨界水中では反応性および反応速度の両方において溶媒効果はそれほど大きくない。この場合、反応性および反応速度の増加を支配して

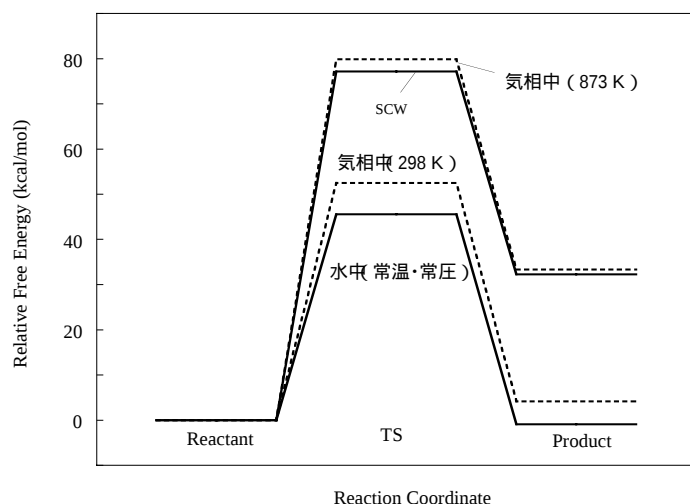


図 2-2 Diels-Alder 反応の自由エネルギーダイアグラム

いるのは溶媒効果ではなく、むしろ、温度上昇による熱運動の増加である。次ぎに反応収率の問題であるが、図 2-2 によれば超臨界水中での反応の平衡は水中に比べてむしろ反応体の方に傾いている。このことは超臨界水中では水中に比べて反応収率が大きく増加するという実験結果と一見矛盾するように見える。しかしながら、見かけの反応収率は化学平衡だけで決まるのではなく、その他の諸々の因子、とりわけ反応体の溶解度に大きく影響される。このことを考慮することによりこの問題に回答を与えることができる。見かけの反応収率を $K_{\text{eff}} = K_H \cdot K$ (K_H 、溶解度： K 、平衡定数) によって定義すると、超臨界水中における K は水中に比べて約 $1/10^7$ に過ぎないが、 K_H は約 10^{11} 倍大きくなる。したがって、その積としての見かけの反応収率は著しく増加するのである。

水、アルコールおよびアセトニトリル中におけるベンゾニトリルの励起ダイナミクス

極性溶媒中にある分子を光励起すると、その励起直後において周りの溶媒は電子状態と平衡になっていないので溶媒の緩和過程(溶媒ダイナミクス)を誘起する。一方、この溶媒ダイナミクスは励起分子に影響を及ぼし、その電子状態に時間的な変

化を引き起こす。このようなプロセスはいわゆる時間分解ストークスシフトなどの実験的方法によって測定可能であり、溶媒中の励起分子のダイナミクスと溶媒の緩和過程に関する重要な知見をもたらすことが期待される。われわれはこの問題を RISM-SCF 法と溶媒ダイナミクスの理論を組み合わせた新しい方法により解析した。この問題では溶質分子に対する溶媒からの反作用場が時間的に変化するので、溶媒 Fock 演算子中の反作用場の表現は時間に依存する形で以下のように書くことができる。

$$V_u(t) = \rho \sum_{j \in u} \int_0^\infty \frac{q_j}{r} g_{uj}(r;t) 4\pi r^2 dr$$

ここで、 $g(r;t)$ はいわゆる時空間相関関数であり溶質の周りの溶媒分子の分布と配向が時間的に変化していく様子を表わす関数である。したがって、この関数を求めることができれば、垂直励起以降の一刻一刻において Schrödinger 方程式を解くことにより電子励起状態の時間変化を求めることができる。実は、われわれはこれまでの研究において、一般化ランジェヴァン理論と RISM 理論を結合することにより $g(r;t)$ を求めるための基本的な方法論を提案しており、ここではその最もプリミティブな理論 (site-site Smolchowski-Vlasov Theory) を使用する。[F. Hirata, *J. Chem. Phys.* **96**, 4619 (1992).]

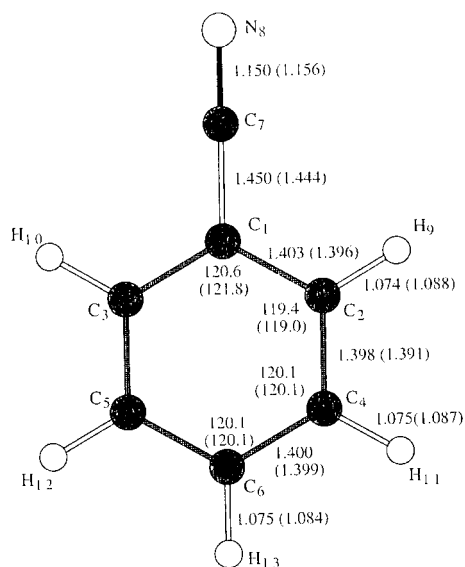


図 3-1 ベンゾニトリル（基底状態）の構造

本研究においては3つの異なる溶媒（アセトニトリル、メタノール、水）中におけるベンゾニトリルの励起状態のダイナミクスを問題とする。まず、図 3-1 に気相中において最適化されたベンゾニトリル（基底状態）の構造（結合距離、結合角、部分電荷）を実験値とともに示す。（この図は電子状態計算の精度を示すとともに、ここでの原子番号付がこの後の記述において使用される。）図 3-2 に一例として $t = 0$ および $t = \infty$ おける水中の $g(r;t)$ を示す。ベンゾニトリルの窒素原子と水の水素原子間の水素結合が時間経過とともに強くなる様子を読み取ることができる。図 3-3 には3つの溶媒中のベンゾニトリル（励起状態）の双極子能率が時間とともに変化していく様子が示されている。いずれの場合も単純な指数関数的な振るまいを示さず、2段階以上の緩和過程で記述される必要があることを示している。また、溶媒の極性の違いも緩和過程に大きく影響を与えることが読み取れる。

この研究において最も興味深い結果は以下の式によって定義される部分電荷の時間相関関数 ($C_q^u(t)$) の振るまいである。

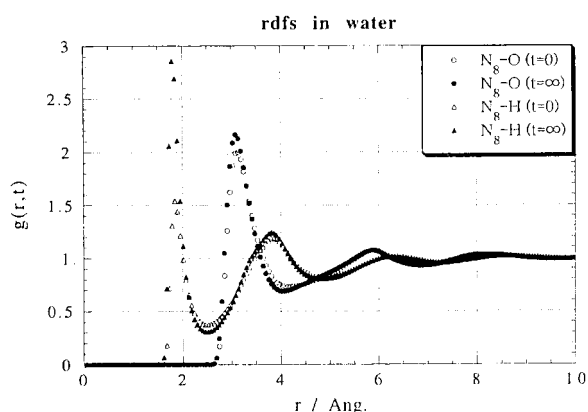


図 3-2 水中の $g(r;t)$ の変化

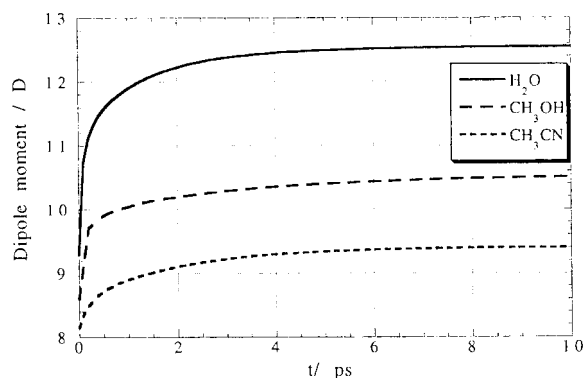


図 3-3 双極子能率の時間変化

$$C_q^u(t) = \frac{q_u(t) - q_u(\infty)}{q_u(0) - q_u(\infty)}$$

この式において $q_u(t)$ は垂直励起時刻 ($t = 0$) から t 秒後におけるベンゾニトリルの u -原子上の部分電荷を表わす。したがって、 $C_q^u(t)$ は t 秒後の部分電荷が垂直励起時直後と比較してどのように増加（または減少）したかを表わす規格化された関数である。図 3-4 に3つの溶媒中のこの関数の振るまいを示す。

これらの図を眺めてすぐ気がつくことは分子内の原子の位置によってその電荷の時間変化が定性的に異なっていることである。例えば、水中やメタノール中で C_6 （破線）や N_8 （密な点線）原子上の電荷は単純に減少しているのに対して、 C_1 （実線）や

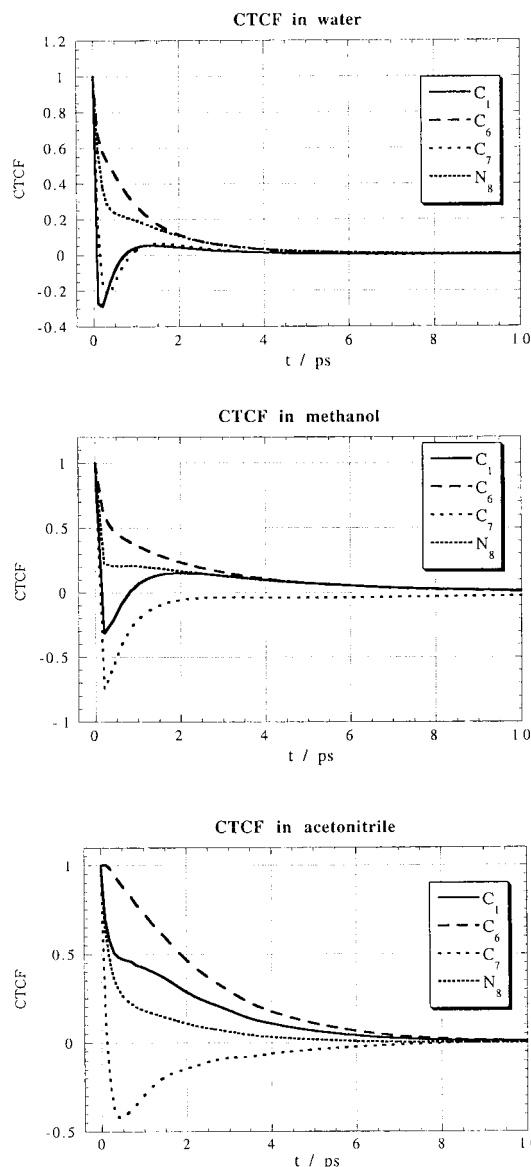


図 3-4 上から順に

- a : 時間相関関数 (水中)
- b : 同 (メタノール溶媒中)
- c : 同 (アセトニトリル溶媒中)

ある C_1 や C_7 では事情が大きく異なっている。水やメタノール中では電子が一旦 C_1 上に過剰に溜まり、一方、 C_7 上の電子は枯渇する。その後、 C_1 上の電子が C_7 上に移動して、最終値に落ち着くのである。現時点で何故このような振るまいを示すかということに関する詳細な検討は行っていないが、これらの情報はすべて計算によって得られた密度行列に中に含まれているはずであり今後の解析が期待される。

以上の取り扱いによって得られた結果に対応する実験は未だ行われておらず、この結果が正しいかどうかということに関する検証は今後の課題である。この取り扱いの本質的意義は溶液内励起分子のダイナミックスを経験的パラメタを使うことなくまさに原子レベルで記述する方法論を提案したことにある。

Reference

- 1) T. ISHIDA, F. HIRATA, and S. KATO, "Thermodynamics analysis of the solvent effect on tautomerization of acetylacetone: An ab initio approach," *J. Phys. Chem.* **110**, 3938–3945 (1999).
- 2) K. Naka, H. Sato, A. Morita, F. Hirata, and S. Kato, "RISM-SCF study for the free energy profile of Menshutkin type reaction $\text{NH}_3 + \text{CH}_3\text{Cl} \rightarrow \text{NH}_3\text{CH}_3^+ + \text{Cl}^-$ in aqueous solution," *Theor. Chem. Acc.* **102** (Fukui issue), 1–6, 165–169, (1999).
- 3) H. Sato and F. Hirata, "The syn-/anti- conformational equilibrium of acetic acid in water studied by the RISM-SCF/MCSCF method," *THEOCHEM* (Morokuma issue), **461–462**, 113–120 (1999).
- 4) H. SATO and F. HIRATA, "Revisiting the acid-base equilibrium in aqueous solutions of hydrogen halides:

C_7 (粗な点線) 原子上の電荷は一旦減少し後に増加に転じている。

さらに興味深いのは水素結合性の溶媒 (水、メタノール) 中と単純な極性溶媒 (アセトニトリル) 中とではこの関数の振るまいが定性的に異なっていることである。(この違いは C_1 上の電荷の振るまいに顕著である。) これらの原子上の電荷の符号も考慮すると電子は大局的には時間とともに C_6 から N_8 へと流れている。これらの原子上の電荷が単調に変化しているのはそのためである。しかし、その途中に



- study by the ab initio electronic structure theory combined with the statistical mechanics of molecular liquids, " *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 2460–3467 (1999).
- 5) S. Chong and F. Hirata, " Dynamics of Ions in Liquid Water: An Interaction-Site-Model Description, " *J. Chem. Phys.* **111**, 3654–3667 (1999).
- 6) S. Chong and F. Hirata, " Interaction-Site-Model Description of Collective Excitations in Liquid Water I: Theoretical Study, " *J. Chem. Phys.* **111**, 3083–3094 (1999).
- 7) S. Chong and F. Hirata, " Interaction-Site-Model Description of Collective Excitations in Liquid Water II: Comparison with Simulation Results, " *J. Chem. Phys.* **111**, 3095–3104 (1999).
- 8) H. Sato and F. Hirata, " Ab initio Study on Molecular Properties and Thermodynamics of Water: A Theoretical Prediction of pK_w over a Wide Range of Temperature and Density, " *J. Phys. Chem. B* **103**, 6596–6604 (1999).
- 9) T. Ishida, F. Hirata, and S. Kato, " Solvation dynamics of benzonitrile excited state in polar solvents: A time-dependent reference interaction site model self-consistent field approach, " *J. Chem. Phys.* **110**, 11423–11432 (1999).
- 10) H. Sato and F. Hirata, " ab initio study of water (II): liquid structure, electronic and thermodynamic properties over a wide range of temperature and density, " *J. Chem. Phys.* **111**, 8545 (1999).
- 11) Y. Harano, H. Sato, and F. Hirata, " Solvent Effects on a Diels-Alder Reaction in Supercritical Water: RISM-SCF study, " *J. Am. Chem. Soc.* **122**, 2289–2293 (2000).
- 12) K. Nishiyama, F. Hirata, and T. Okada, " Average Energy Relaxation and Rearrangement of Solute-Solvent Radial Distribution Function in Solvation Dynamics: A Connection between Spectroscopic Results and RISM Theory, " *J. Mol. Liquids* in press.
- 13) Y. Harano, H. Sato, and F. Hirata, " Theoretical Study on Diels-Alder Reaction in Ambient and Supercritical Water: Viewing Solvent Effect through the Frontier Orbitals, " *Chem. Phys.* in press.

新規 π 電子系の設計と構築

1999年10月28日(木)~10月30日(土)
岡崎コンファレンスセンター中会議室

10月28日(木)

13:00-13:10 開会

13:10-14:00 時任宣博(九大有基研)
含ケイ素芳香族化合物の化学の新展開

14:00-14:20 西長 亨(京大化研)
安定な環状 π 電子系カチオン種の合成と性質

14:20-14:40 松浦 陽(京大化研)
強固なビシクロ炭素骨格の縮環により安定化された芳香族炭化水素のラジカルカチオンの構造

14:40-15:10 川瀬 毅(阪大理)
凸凹面間相互作用による包接錯体の形成

15:10-15:30 休憩

15:30-16:00 松下未知雄(都立大工)
ピオローゲンの π 共役組織化と光電気化学的スピン制御

16:00-16:20 熊谷 等(分子研)
不斉分子磁石の構築

16:20-16:40 秋田健行(九大薬)
ジアゾ基及びニトロニルニトロキシド基をもつジフェニルアセチレン誘導体の光反応生成物の磁気的性質

16:40-17:10 瀧宮和男(広大工)
含セレン電子供与体合成の新展開

17:10-17:30 原 憲司(都立大理)
TTFオリゴマーの合成と性質

17:30-17:50 熊井玲児(JRCAT)
有機モット絶縁体の電流誘起絶縁体-金属転移とストライプパターン形成」

18:20-20:00 ポスターセッション

10月29日(金)

9:30-10:00 鈴木孝紀(北大理)
C-H...O水素結合による超分子集合化と分子認識

10:00-10:20 佐藤 潔(都立大工)
四級窒素原子を含むヘテロパイ系化合物の合成と応用

10:20-10:40 秋山 毅(九大工)
DA対単分子層修飾電極を用いた光電変換系の構築

10:40-11:00 太刀川達也(埼玉大工)
イミダゾール誘導体の蛍光特性

11:00-11:30 石黒勝也(名大工)
電子移動結合開裂による光化学ドーピング

11:30-12:00 杉浦健一(阪大産研)
ニトリル基を有するアクセプター分子を用いた分子集合体の合成とその性質

12:00-13:00 昼食

13:00-13:50 山下敬郎(分子研)
結晶構造制御を目指した π 電子系の分子設計

13:50-14:20 西川浩之(都立大理)
嵩高い置換基を有する有機伝導体 - DOET系伝導体の構造と物性 -

14:20-14:40 藤原秀紀(分子研)
ポリスルフィド環を有するTTF及び、TTFダイマーの合成、構造と物性

14:40-15:00 戸村正章(分子研)
置換アリール基を有するTTFビニローグ誘導体を用いた結晶配列制御

15:00-15:30 中村貴義(北大電研)
TTF Multiannulated Macrocycles分子集合体の構造と機能

15:30-15:50 休憩

15:50-16:20 坂本健吉(東北大理)
不飽和ケイ素を含む π 電子系の化学 - シラトリアルフルベンの化学を中心として -

16:20-16:50 箕浦真生(北里大理)
多芳香族置換典型元素化合物、Ph₆TeおよびPh₅Te⁺の合成と性質

16:50-17:10 北川敏一(京大工)
アルキルフラレンカチオンの発生と反応性



17:10-17:30 朝野芳織 (阪大産研)
6 位に π 電子系ユニットを含む両親媒性完全メチル化 γ -CD 誘導体の合成および疎水場への π 電子系封じ込めの試み
- 含 π 電子 γ -CD 系の自己集合化による大環状超分子の構築を目指して -

17:30-17:50 大谷裕之 (横国大教育)
非ベンゼン系芳香族化合物を組み込んだビフェニル型クロモフォールの合成と性質

18:10-20:30 懇親会

10月30日(土)

9:30-10:00 石田尚行 (電通大)
有機磁性体の材料としての安定ニトロキシドラジカル

10:00-10:20 植田一正 (阪府大先端研)
中性のビス(テトラチアフルバレン-ジチオラートおよび-ジセレノラート)金属錯体: 高伝導性および強磁性

10:20-10:40 持田智行 (東邦大理)
機能性 π 共役系を含む多核金属錯体の合成

10:40-11:00 松田建児 (九大工)
フォトリミックスジアリールエテンを用いたスピン状態の制御

11:00-11:50 新名主輝男 (九大有基研)
シクロファン化学の最近の進歩

11:50-13:20 昼食

13:20-13:50 真崎康博 (北里大理)
2, 3 の新規共役系分子の合成の試み

13:50-14:10 仙頭若菜 (九大有基研)
遷移・希土類金属-[3n]シクロファン錯体の合成と性質

14:10-14:30 今 徳義 (九大理)
フッ素原子を含むかご型大環状化合物: C-F...カチオン相互作用

14:30-14:50 中村洋介 (群馬大工)
シクロファンの光化学的合成と光物理的性質の制御

14:50-15:10 谷 敬太 (阪教育大)
カルバゾールエキシマーの構造

15:10-15:30 廣瀬敬治 (阪大基礎工)
アミンとの塩錯体形成に基づき鏡像体を区別する酸性色素

15:30-15:40 閉会

ポスターセッション

P1 池田 聡 (都立大理)
DOES 伝導体の構造と磁気物性

P2 伊東俊司 (東北大理)
アズレン環および関連する π 共役系を用いた新規拡張 π 共役系化合物の合成に関する研究

P3 岩堀史靖 (分子研)
Mn(II)触媒によるビスニトロキシドベンゼン誘導体の[3+3]ダイマー化反応

P4 奥島鉄雄 (東北大理)
アズレニルスルフィンおよびその関連化合物の研究

P5 小島絵美子 (分子研)
含テルルドナーが形成する分子性伝導体の構造と物性

P6 柿木昭一 (名大工)
置換ヒドロキシフェニルフェルダジルの酸化還元および酸・塩基挙動

P7 片岡義朗 (広大工)
ハロゲン置換TSFの合成と物性

P8 加藤恵一 (分子研)
分子内に強磁性的相互作用と反強磁性的相互作用をもつ新規有機トリラジカルの合成と一次元フェリ磁性

P9 金山美幸 (阪市大理)
高分子(PEG)アルカリ金属複合体を取り込んだ分子性ゼオライトの結晶構造

P10 鎌田 穰 (阪府大先端研)
トリス(テトラチアフルバレン)ジチオラート・バナジウムモノアニオン錯体の結晶構造および電気伝導・磁気的性質

P11 小谷美枝 (広大工)
セレン原子を有する新規フルバレン型ドナーの開発

P12 後藤 敬 (東大理)
配座固定された架橋カリックス[6]アレーンの合成と応用

P13 小南 剛 (阪府大先端研)
新しいタイプのドナー分子 - テトラチアフルバレン-チオキノンメチドおよび-キノンメチド誘導体

P14 迫 克也 (名工大)
金属配位型ドナー分子の合成と物性

- P15 白旗 崇 (東北大理)
BEDT-HBDST 系カチオンラジカル塩の物性
- P16 鈴木和治 (分子研)
ヘテロ原子を用いたアクセプターの開発
- P17 鈴木健太郎
ビスアミノキシルベンゼン及び、そのハロゲン
誘導体の Mn 錯体の加圧効果
- P18 鈴木里穂 (阪大理)
p-チオキノイド化合物の合成と性質
- P19 高橋一志 (京大工)
新規 TTP 系ドナーの合成と物性
- P20 田中素子 (分子研)
9-ヒドロキシフルオレン誘導体の固相加溶媒置
換反応
- P21 谷 嘉浩 (京大工)
CPTM-TS-TTP、CHTM-TS-TTP 塩の構造と物性
- P22 谷岡弘章 (京大工)
シクロヘキセン環を挿入した TTP 類縁体の合
成と性質
- P23 谷口正輝 (京大工)
TTP の結晶構造の分類
- P24 中西宣隆 (阪市大理)
酸化還元特性を有する分子性ゼオライト
($[\text{RuIII}(\text{Hbim})_3]\text{n}$)
- P25 西田純一 (北大理)
エレクトロクロミズムを示す 9 員環状過酸化物
の合成と性質
- P26 舟橋智美 (名大工)
多元電子供与・受容型分子系の光誘起電子移動
による分子内エキシプレックスの形成
- P27 森田 靖 (阪大理)
水素結合型金属錯体の構築を目指した新しいク
アテルイミダゾール配位子の合成
- P28 山本有寿 (名大工)
ジアゾ化合物のホール移動連鎖反応によるフェ
ニレン-cis-ビニレンオリゴマーの合成
- P29 横山隆二 (東北大理)
シクロヘプタトリエンおよびその鉄トリカルボ
ニル錯体と 8-オキソヘプタフルベンやハロケテ
ン類との反応
- P30 若宮淳志 (京大化研)
 σ - π 相互作用をもつ含硫黄環状 π 共役系化
合物の合成とカチオン種の性質

高機能全固体レーザーと その応用

- 非線形光学材料 / 素子の新展開 -

New aspects of nonlinear optical materials and devices

1999 年 10 月 29 日 (金)
岡崎コンファレンスセンター

Opening Remarks

Masaaki FUJII (IMS)

- 10:10-10:40 Material potential of stoichiometric LiTaO_3
and LiNbO_3 for optical applications
**Yasunori FURUKAWA, Kenji
KITAMURA, Syunji TAKEKAWA**
(NIRIM)
- 10:40-11:00 Second-order nonlinearity in stoichiometric
 LiNbO_3 and LiTaO_3
**Takumi FUJIWARA, Akira J.
IKUSHIMA (Toyota Inst. Tech.), Yasunori
FURUKAWA, Kenji KITAMURA**
(NIRIM)
- 11:00-11:20 Exact measurement of electrooptic
coefficients in LiNbO_3 crystals -
nonstoichiometric dependences and effect
of doping Ce- or Fe-ions. -
**Yukiko KONDO, Yuri YAMASHITA,
Takeshi FUKUDA (Waseda Univ.),
Yasunori FURUKAWA, Kenji
KITAMURA (NIRIM), Hirochika
NAKAJIMA (Waseda Univ.)**
- 11:20-11:40 Large second-order optical nonlinearity in
thermally poled silica glass
**Akihiro KAMEYAMA, Atsushi
YOKOTANI, Kou KUROSAWA**
(Miyazaki Univ.)
- 11:40-12:00 Sublattice-reversal epitaxy for QPM devices
**Shinji KOH, Takashi KONDO (Univ.
Tokyo)**
- Lunch
- 13:15 commemorative photo taking
- Introduction of "Institute for Molecular Science"
Koji KAYA (IMS)



- 13:30-14:00 **Special talk:**
Future prospects of fiber lasers and LD arrays
Prof. Ken-ichi Ueda (Univ. Electro-Commun.)
- 14:00-15:00 **Special talk:**
Recent developments in microstructured nonlinear materials and their applications
Prof. Martin M. Fejer (Stanford Univ.)
- Coffee Break**
- 15:20-15:40 Miniaturized SHG blue laser and application to optical disk
Kazuhisa YAMAMOTO, Kiminori MIZUUCHI, Yasuo KITAOKA (Matsushita Electric Industry)
- 15:40-16:00 QPM-SHG device using periodically poled MgO-LiNbO₃
Yasukazu NIHEI, Akinori HARADA, Shin-ichiro SONODA, Masami HATORI, Koji KAMIYAMA, Nobufumi MORI (Fuji Photo Film Co.)
- 16:00-16:20 Liquid phase epitaxial growth of LiNbO₃ thin films for QPM-SHG devices
Tatsuo KAWAGUCHI, Minoru IMAEDA (NGK Co.)
- 16:20-16:40 1.5 μ m-band quasiphase matched LiNbO₃ wavelength converters for optical communication systems
Chang-qing Xu (Oki Electric Industry Co., Ltd.)
- Closing Remarks**
Takunori TAIRA (IMS)
- 16:50-17:20 **Lab. Tour** (Microchip solid-state laser lab.)
- 17:30-19:30 **Get-together Party**

物理化学の現状と将来 II

1999年12月6日(月)13時より
岡崎コンファレンスセンター1F中会議室

13.00 開会

講演(話題提供20分、討論20分)

- 13.05-13.45 中原 勝(京大化研)
解明の期待される溶液の重要問題
- 13.45-14.25 西 信之(分子研)
水の中での分子の会合状態を探る:溶質分子クラスター相(Micro Phase)の存在
- 14.25-14:50 休憩
- 14:50-15:30 北川禎三(分子研)
タンパク質の構造化学研究の最近の動向
- 15.30-16.10 月原富武(阪大蛋白研)
チトクローム酸化酵素による酸化還元
の分子機構
- 16.10-16.50 桑島邦博(東大理)
タンパク質のフォールディング機構
- 16.10-17.30 全体討論「物理化学の将来」
化研連物理化学専門委員会委員と出席者全員

内殻電子励起状態とダイナミックス

- 現状と展望 -

2000年1月6日(木)~7日(金)
分子科学研究所研究棟301号室

1月6日

9:20 はじめに
長岡伸一(分子研)

気相の内殻励起
座長 見附孝一郎(分子研)

9:25 LUREでの電子-イオンコインシデンス
研究
繁政英治(分子研)

10:00 PF₃分子の角度分解光イオン・オージェ
電子分光
清水雄一郎(東北大科研)

10:30 フロンの内殻励起状態
齋藤則生(電総研)

気相の内殻励起の理論

座長 上田 潔 (東北大科研)

- 1 1 : 0 0 内殻励起状態の実験と理論計算
小杉信博 (分子研)
- 1 1 : 3 5 内殻励起状態における原子移動ダイナミクスと2次量子過程
田中智 (阪府大総合科学)
- 1 2 : 0 5 昼食
- 1 3 : 0 0 静的交換近似による内殻励起スペクトル解析の事例紹介
望月祐志 (原研)
- 1 3 : 3 0 2正孔状態からの水およびアセチレンのイオン性解離のダイナミクス
信定克幸 (北大院理)

気相の内殻励起に関連した話題

座長 伊吹紀男 (京教大教育)

- 1 4 : 0 0 SPring 8 と HiSOR を用いた内殻励起化学研究
平谷篤也 (広大理)
- 1 4 : 3 5 UVSOR 新斜入射分光器の現状とSR・レーザー併用実験計画
小野正樹・見附孝一郎 (分子研)
- 1 4 : 5 0 コーヒーブレーク
- 1 5 : 2 0 画像法による光電子・解離イオンのベクトル相関測定
高橋正彦 (東北大科研)
- 1 5 : 5 0 運動量画像法による強光子場中分子ダイナミクス
菱川明栄 (東大院理)

凝縮分子の内殻励起

座長 中川和道 (神戸大発達科学)

- 1 6 : 2 0 内殻電子励起に由来するイオン脱離・コインシデンス分光法によるオージェ終状態を選別した研究
間瀬一彦 (KEK PF)
- 1 6 : 5 5 高分子薄膜の内殻励起イオン脱離
関谷徹司 (広大理)
- 1 7 : 2 5 内殻励起を用いた表面脱離の研究; 分子メスへの応用を目指して
長岡伸一 (分子研)
- 1 8 : 0 0 懇親会 (職員会館2階会議室)

1月7日

固体表面の内殻励起

座長 鎌田雅夫 (分子研)

- 9 : 0 0 $\text{TiO}_2(110)$ 表面からのイオン脱離-KF機構の再検討
田中慎一郎 (名大院理)
- 9 : 3 5 内殻励起状態の緩和理論
魚住孝幸 (阪府大工)
- 1 0 : 0 5 深い内殻励起による光電子分光と表面脱離
馬場祐治 (原研)
- 1 0 : 3 5 おわりに
繁政英治 (分子研)

遷移金属元素を含む
超微粒子の化学と物理2000年3月8日(水)~9日(木)
分子科学研究所研究棟301号室

第1日(3月8日(水))

- 13:30 近藤 保 (豊田工大)
開会挨拶
- 座長: 山口 豪 (静岡大・工)
- 13:40 寺寄 亨 (豊田工大)
遷移金属クラスターの電子構造: 光吸収分光・光電子分光
- 14:20 大野かおる (東北大・金研)
遷移金属系の第一原理計算について
- 15:00 李 相茂 (筑波大・物理学系)
金属クラスターの生成と崩壊機構
- 15:40 休憩 (20分)
- 座長: 近藤 保 (豊田工大)
- 16:00 小出常晴 (高工研・物質構造)
内殻吸収磁気円二色性によるAu(111)表面上Coナノクラスターの強磁性/超常磁性相転移と界面磁気モーメントの直接決定



- 16:40 藤森 淳（東大・新領域）
光電子スペクトルと配置間相互作用ク
ラスターモデル
- 17:20 里子允敏（日大・文理）
遷移金属クラスターの電子状態と磁性
- 18:00 終了
- 懇親会
於サングリア（分子科学研究所内食堂）

第2日（3月9日(木)）

- 座長： 西 信之（分子研）
- 9:00 阿波賀邦夫（東大・院総合）
磁性クラスター錯体の物理と化学
- 9:40 山瀬利博（東工大・資源研）
層状バナジルホスフェートの構造と磁
氣的性質
- 10:20 休憩（20分）
- 座長： 寺寄 亨（豊田工大）
- 10:40 中嶋 敦（慶大・理工）
遷移金属・有機分子の低次元ハイブリ
ッドクラスターの電子物性
- 11:20 隅山兼治（東北大・金研）
遷移金属合金クラスターからの物質合
成をめざして
- 12:00 昼食
- 座長： 茅 幸二（分子研）
- 13:20 市橋正彦（豊田工大）
遷移金属クラスターのサイズ特異的反
応性
- 14:00 岩澤康裕（東大・院理）
クラスター・微粒子の挙動と触媒作用
- 14:40 休憩（20分）
- 座長： 石井 靖（中大・理工）
- 15:00 藤間信久（静岡大・工）
遷移金属クラスターの磁気 non-
collinearity
- 15:40 小田竜樹（金沢大・理）
磁性体の分子動力学と遷移金属磁性ク
ラスター
- 16:20 菅野 暁（東大名誉教授）
まとめ

「光合成による太陽エネルギー転換」分野 日米科学技術協力事業

この事業は、20年前に日米の首脳会談によって開始された科学技術協力事業の一環として今日まで継続されてきた。この間、「光転換と光合成、Photoconversion and Photosynthesis」を研究する分野は、光電気化学、光触媒から遺伝子操作による生体内光合成研究まで、幅広い分野で著しい発展を見た。また同時に、日米両国の研究体制・研究協力関係にも変化が生じてきた。このような背景のもとに、平成11年3月に開かれた日米運営委員会において、本事業を再々度延長しないことを日米間で決定した。その際、これまでの協力事業を振り返るとともに、この研究分野の現況と今後の展望を議論する「最終情報交換セミナー」を岡崎国立共同研究機構で開催することも日米間で同意した。これに基づき、11月15日から17日に“Photoconversion and Photosynthesis: Past, Present and Future Prospects”が開催された。アメリカ合衆国側は、フロリダ大学 Schanze 教授がNSFに情報交換セミナーを申請し、日本側は岩田（分子研）、井上（都立大）が世話人となってセミナーを組織・運営した。また、理化学研究所も共催に加わり、井上主任研究員が組織委員会に参加し、財政的面からもセミナーの成功を助けた。文部省・分子研と科学技術庁・理研は、本日米科学技術協力事業の日本側組織であったので、これまでも様々な形で協力しあってきたが、共催の形でセミナーを開催したのは今回が最初であった。

“Photoconversion and Photosynthesis（光エネルギー転換と光合成）”は生物科学から物質科学まで広い研究分野におよんでおり、実際、本事業は20年にわたってこの広い分野で日米科学技術協力を推進

してきた。最終セミナーでも、従って、基礎光化学からバイオテクノロジーに至る研究と展望が語られた。講演だけでは大切な関連分野を議論し尽くすことができないと判断し、本事業の情報交換セミナーとしては異例であったが、ポスターセッションを設け、広く発表を求めた。結果として94件の応募があり、2回のセッションは大盛況であった。セミナーの参加者は、登録された数だけで170名であった。まる3日間、講演・ポスター両セッションともに活発な議論が交わされ、「光エネルギー転換と光合成」研究が、現在、各分野で飛躍の時期を迎えていることが明らかになった。この最終セミナーの熱気は、この分野における国際協力事業が、いくつかのテーマで組織される必要性を強く示唆していた。

最終年度であったが、5件のグループ共同研究が引き続き実施され、日米情報交換セミナー「超分子光化学に関する研究」がニューオーリンズで開催された。研究者の派遣事業は行わなかった。

（岩田末廣 記）

平成 11 年度（後期） 分子研コロキウム・分子科学フォーラム



コロキウム	フォーラム	開催日時	講演題目	講演者
	第 20 回	1999年10月13日	計算機で化学する	岩田 末廣
第 712 回		10月29日	Luminescant Silicon Materials	John S. Tse
	第 21 回	11月10日	物質と時空	益川 敏英
	第 22 回	11月24日	科学研究は凡才にもできる - カーボンナノチューブの発見	飯島 澄男
第 713 回		12月 8日	水溶液中における溶質分子振動エネルギー緩和の計算機シミュレーション	岡崎 進
第 714 回		12月15日	電子移動化学の新展開	福住 俊一
	第 23 回	2000年 1月12日	ミクロな世界の集団心理 - 原子・分子クラスターの科学	近藤 保
第 715 回		2月16日	チオフェンを基盤とする共役オリゴマーの化学	安蘇 芳雄
第 716 回		2月23日	簡単な分子の内殻励起光解離と光イオン化のダイナミクス	繁政 英治
	第 24 回	3月 1日	超高圧下の超伝導探索	天谷 喜一

平成11年度（後期）共同研究

協力研究

溶媒和分子イオンの構造と反応ダイナミックス	神戸大学理学部	富宅喜代一 吉田 真治
大気環境分子の高精度理論計算	慶應義塾大学理工学部	薮下 聡 橋本 智裕 安池 智一
マルチカノニカル法による水・氷相転移の研究	中京大学教養部	六車 千鶴
量子化学反応動力学の理論的研究	北海道大学大学院理学研究科	信定 克幸
金属内包フラーレンの反応と構造	新潟大学大学院自然科学研究科	若原 孝次 前田 優 近藤 将弘
一酸化窒素合成酵素の紫外共鳴ラマン分光	東北大学反応化学研究所	富田 毅
紫外共鳴ラマンスペクトルによる銅蛋白質の分子構造解析	茨城大学理学部	高妻 孝光 新関 智丈
紫外共鳴ラマン分光法を用いたSH3ドメインと結合ペプチドとの相互作用による構造変化の解析	金沢大学医学部	置塩 信行
V字スイッチング性を示す液晶の偏光ラマン測定	信州大学繊維学部	福田 敦夫
C ₆₀ フラーレン多価アニオン高スピン状態の同定	大阪市立大学大学院理学研究科	工位 武治 佐藤 和信 中澤 重顕
アニリンおよびアニリン・ベンゼン混合クラスターイオンの赤外光解離分光	九州大学大学院理学研究科	大橋 和彦 井筒 弘信
アミノ酸水溶液における水和クラスター	福岡大学理学部	吉田 亨次 山口 敏男
テトラヒドロフラン・水および1,3-ジオキサン・水混合溶液のクラスター構造	佐賀大学理工学部	高椋 利幸 中溝 啓
メチル基をもつ芳香族分子のPFIZEKEスペクトルの測定	東京工業大学大学院理工学研究科	市村禎二郎 木下 真一
芳香族クラスターにおける微視的水とネットワークの形態変化	京都大学大学院理学研究科	大島 康裕 三井 正明
超高圧下におけるTTF誘導体の電子スペクトル	室蘭工業大学工学部	城谷 一民 林 純一
MPS3系層状層間化合物の電導機構	熊本大学大学院自然科学研究科	市村 憲司
ヨウ素を含む分子性伝導体の磁気的性質の研究	千葉大学大学院自然科学研究科	澤 博
金属錯体導電体の構造と物性	北海道大学大学院理学研究科	稲辺 保 松田 真生
分子性伝導体の構造と物性	東京大学大学院理学系研究科	小林 昭子
ET系有機伝導体の分子運動と電子物性に関する研究	大阪大学大学院理学研究科分子熱力学研究センター	齋藤 一弥 佐藤あかね
磁性部位を持つTTF系有機伝導体の物性	姫路工業大学理学部	坪 広樹
カテコールジオキシゲナーゼ型酸素化機能を発現する金属錯体の設計と反応機構研究	京都大学大学院工学研究科	船引 卓三 松井 元 杉生 大輔
錯体型磁性物質の磁気的局所構造と可変磁性のメカニズム	群馬大学工学部	武田 定
有機強磁性体の研究	山口東京理科大学基礎工学部	木下 實 鈴木ケイ子



新規フェルダジラジカルを用いた分子強磁性伝導体の開発	愛媛大学理学部	向井 和男 仙波 伸得
Os-W複核錯体の電子状態	北海道大学大学院理学研究科	野呂 武司
原子の電子状態の精密計算	青森大学経営学部	長内 有
サブミリ波分光法による分子クラスターの研究	茨城大学理学部	天竺 堯義 Zdenek Zelinger
超音速ジェット中に生成する不安定分子クラスターの検出	九州大学大学院理学研究科	田中 武彦 今城 尚志 石黒 正純
ドリフトチューブ内におけるイオン・分子反応の解析	東北大学大学院工学研究科	飯沼 恒一 山田 修市
SO ₂ /H ₂ O/air 混合ガスにおけるイオン誘発核生成の評価 ガス中で生成されるイオンの計測と評価	大阪府立大学先端科学研究所 広島大学工学部	足立 元明 島田 学 金 燦洙
イオン再結合による微粒子生成実験	高知工業高等専門学校	高野 弘 谷澤 俊弘
β位置換亜鉛ポルフィリン錯体の微弱S ₂ ケイ光のフェムト秒時間 分解発光検出	東京工業大学大学院理工学研究科	浅野 素子
STMによる有機機能分子の観察	豊橋技術科学大学	内田 裕久 吉田 和洋 本多 直人
放射光エッチングを利用したフォトニック結晶の製作と評価	宮崎大学工学部	横谷 篤至 中島 耕作
電子ビーム励起オージェ電子・イオン・コインシデンス装置の開発	高エネルギー加速器研究機構物質構造 科学研究所	間瀬 一彦
ベンゼンダイマーのZEKE光電子分光法	横浜市立大学理学部	三枝 洋之 古松 清人
新規ファンデルワールス錯体のZEKE光電子分光	九州大学大学院理学研究科	関谷 博 日野 和之 迫田 憲治
THz光を光源とした高圧気体の遠赤外吸収スペクトルの測定	千葉大学大学院自然科学研究科	齋藤 健一 西川 恵子
フェムト秒遠赤外光の化学反応への応用	神戸大学理学部	富永 圭介
高効率全固体紫外レーザーの開発	東北大学金属材料研究所	福田 承生 島村 清史
半導体の2次非線形光学定数の測定	東京大学大学院工学系研究科	近藤 高志 黄 晋二
定比組成LN,LTの基礎特性評価	早稲田大学理工学部	中島 啓幾 福田 武士
分子分光のための赤外域OPOの研究開発	福井大学工学部	小林 喬郎 川戸 栄 田中 大輔
立体構造変化を伴う新規酸化還元活性ホスト分子の開発	信州大学理学部	太田 哲
安定中性ラジカルを含む有機共役オリゴマーの研究	大阪市立大学理学部	小嵯 正敏
ヘム鉄のスピン状態に及ぼす非平面ポルフィリン環の効果	東邦大学医学部	中村 幹夫 大胡 恵樹 池上 栄久

oxoferryl porphyrin π cation radicals の $a1u, a2u \rightarrow d\pi(\text{iron})$ CT 遷移強度と反応性との相関	慶應義塾大学医学部	江川 毅
機能性分子の NMR 用同位体標識化合物の合成手法の開発	北海道大学大学院理学研究科	河本 充司
新物質 Ce_xC_{60} の合成と評価	法政大学工学部	丸山 有成 本橋 覚
新規アクセプターの開発研究	九州大学有機化学基礎研究センター	新名主輝男 小松 伸吾 金子 昌敏
放射光用光学素子評価装置の性能測定	東京大学物性研究所	木下 豊彦
インクジェット法による分子集積回路製作装置の開発	北陸先端科学技術大学院大学	三谷 忠興
CO_2 還元反応最終生成物に対応するルテニウム - メチル錯体の反応性	福島大学教育学部	大山 大
マルチ銅オキシダーゼによる酸素の 4 電子還元反応	金沢大学大学院自然科学研究科	櫻井 武
光学材料のレーザー損傷に関する研究	大阪工業大学工学部	吉田 國雄 越智 完好 梅林 信弘
単細胞藻の紫外線応答行動とその分子的基础の研究	基礎生物学研究所	渡辺 正勝
光 CVD 法によりシリコン上に堆積した希土類酸化物の炭素汚染に関する研究	東北大学金属材料研究所	今泉 吉明
軟 X 線ホログラフィ露光技術の研究	姫路工業大学高度産業科学技術研究所	松井 真二
放射光プロセスを用いた配列制御量子ドットの作製	名古屋大学大学院工学研究科	竹田 美和
シリコン表面上の二元金属(Pb,Sn)吸着系の電子状態	名古屋大学大学院工学研究科	柚原 淳司
ARUPS による配向性ポリイソド薄膜の表面配向	千葉大学大学院自然科学研究科	奥平 幸司
フラーレン類の光電子分光	千葉大学工学部	日野 照純
角度分解紫外光電子分光による導電性高分子低重合体エピタキシャル配向膜の電子構造の研究	名古屋大学大学院理学研究科	石井 久夫
層状複合酸化物の角度分解光電子分光	愛媛大学工学部	宮崎 隆文
研究会		
遷移金属元素を含む超微粒子の化学と物理	豊田工業大学クラスター研究室	近藤 保
物理化学の現状と将来 II	北陸先端科学技術大学院大学	吉原經太郎
新規 π 電子系の設計と構築	分子科学研究所	御崎 洋二
内殻電子励起状態とダイナミクス - 現状と展望 -	分子科学研究所	長岡 伸一
高機能全固体レーザーと新しい応用	分子科学研究所	平等 拓範
クラスター反応動力学若手ミニ研究会	分子科学研究所	鈴木 俊法
施設利用 (I) 分子制御レーザー開発研究センター		
不純物をドーブした半導体の結晶の構造相転移の研究	大阪大学大学院基礎工学研究科	半沢 弘昌
磁性半導体を用いたテラヘルツ発生とその機構の解明	東京工業大学理学部	腰原 伸也
Cu 系カルコバライト型化合物半導体薄膜を用いた太陽電池化の研究	東京理科大学大学院理学研究科	安藤 静敏



施設利用（Ⅰ） 分子物質開発研究センター

電子スピン共鳴法を用いた化合物半導体の結晶構造相転移について の研究	大阪大学大学院基礎工学研究科	半沢 弘昌
遷移金属錯体の構造変化と物性	愛知教育大学	中島 清彦
半導体薄膜の評価	豊橋技術科学大学	吉田 明
機能性膜の表面状態	豊橋技術科学大学	角田 範義
アモルファス合金の磁気特性と電子構造	名古屋工業大学	山田 正明
電導性配位高分子錯体の光電子分光	北陸先端科学技術大学院大学	北川 宏
新規分子性磁性体の構造解析	神奈川科学技術アカデミー	佐藤 治
次世代量子デバイスのための微細構造形成	名古屋大学大学院工学研究科	堀 勝
金属酵素モデルの精密設計と反応制御	名古屋工業大学	増田 秀樹
BEDT-TTF系有機伝導体の超伝導状態における磁化特性	東京大学大学院工学系研究科	谷口 弘三
Nd-Fe-β系薄膜の磁気特性	名古屋工業大学工学部	奥田 高士
鉄基ホイスラー型合金の電気的・磁気的性質	名古屋大学大学院工学研究科	加藤 雅章
コバルト超微粒子の磁性	三重大学教育学部	佐光三四郎
希土類マンガナイトの相転移とその物性の研究	豊橋技術科学大学	亀頭 直樹
準結晶の磁性	名古屋大学情報文化学部	松尾 進
遷移金属酸化物(Re _{1-x} Sr _x) ₂ NiO ₄ (Re = La, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd)の低温 における構造相転移	名古屋大学大学院工学研究科	野崎 洋
ガラクトースオキシダーゼモデルとしての金属 - フェノキシラジ カル種の構造と反応性	名古屋大学大学院理学研究科	山内 脩
ESCAを用いた窒化半導体表面層の元素分析	石川工業高等専門学校	山田 健二
強相関電子系低次元ハロゲン架橋ニッケル(III)錯体の電子状態制御	名古屋大学大学院人間情報学研究科	眞鍋 敏夫
アルカリ金属ドーブフラーレン化合物M _x C ₇₀ (M = Li, Na, K)のESR	姫路工業大学理学部	小林 本忠
PLD法により作製した磁性ガーネット薄膜の磁気特性	名古屋工業大学	安達 信泰
アルカリ金属を吸蔵したX型ゼオライトの電子物性	防衛大学校	清水文比古
ペプチドの結晶構造解析	群馬大学工学部	奥 浩之

施設利用（Ⅰ） 装置開発室

電子運動量分光のための同時計測用電子回路の開発	東北大学科学計測研究所	高橋 正彦
-------------------------	-------------	-------

UVSOR 招へい協力研究

放射光利用コインシデンス法の開発	高エネルギー加速器研究機構物質構造 科学研究所	間瀬 一彦
------------------	----------------------------	-------

UVSOR 施設利用

ワイドバンドギャップを有する無機・有機絶縁材料の吸光・発光お よび寿命特性	早稲田大学理工学部	大木 義路
タングステン酸塩における緩和励起子からの発光	信州大学工学部	伊藤 稔
アルカリ鉛ハライド結晶におけるSTE発光の内殻励起過程	福井工業高等専門学校	北浦 守

多孔質シリカ触媒の真空紫外吸収スペクトルによる欠陥構造解析	名古屋大学大学院工学研究科	服部 忠
粒子線照射を受けたシリカに生成する欠陥種に関する研究 (2)	名古屋大学理工科学総合研究センター	武藤 俊介
スピנקロスオーバー錯体の内殻反射の光照射効果	京都大学大学院理学研究科	田中耕一郎
水素結合型強誘電体のVUVスペクトル	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
放射光とレーザーによる2光子反射分光	岡山大学理学部	有本 収
ポリエステルフィルムの反射および蛍光励起スペクトル	徳島文理大学工学部	大内 伊助
水溶液表面での光イオン化	九州大学大学院総合理工学研究科	原田 明
放射光CVDによるSiO ₂ 薄膜の製作	分子科学研究所	黒澤 宏
LiCAF系結晶の真空紫外分光	分子科学研究所	猿倉 信彦
パラジウム表面上の吸着N ₂ O, O ₂ 分子のNEXAFSを用いた配向測定	北海道大学触媒化学研究センター	松島 龍夫
BL2B1ビームラインと電子・イオン・コインシデンス分光装置の整備	分子科学研究所	長岡 伸一
電子・イオン・コインシデンス分光法を用いた表面におけるサイト選択的イオン脱離の研究	分子科学研究所	長岡 伸一
TiO ₂ (110)表面に吸着した水からの内殻励起刺激脱離	分子科学研究所	田中慎一郎
真空紫外光照射による、光CVD法を用いたCu薄膜の作製、及び薄膜成長初期過程の原子レベルでの観察	豊橋技術科学大学	吉田 明
BL3A1の整備	分子科学研究所	鎌田 雅夫
1, 2価分子陽イオンの生成と解離過程	大阪市立大学工学部	増岡 俊夫
バナドセンの浅い内殻励起に起因する解離過程の研究	姫路工業大学理学部	小谷野猪之助
レーザーと放射光を組み合わせた極端紫外分子分光	分子科学研究所	見附孝一郎
有機ケイ素分子の気相におけるサイト選択的イオン解離反応の研究	分子科学研究所	長岡 伸一
二次元画像観測法による分子の光解離の研究	分子科学研究所	下條 竜夫
BL3A2の整備	分子科学研究所	下條 竜夫
Fe基DO ₃ 型規則合金の高分解真空紫外線光電子分光	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
半導体表面における光誘起現象	分子科学研究所	鎌田 雅夫
BL5Aの整備	分子科学研究所	鎌田 雅夫
Si(100)表面におけるレーザーと放射光の2光子光電子分光	分子科学研究所	田中慎一郎
軟X線磁気カー回転分光法の開発	東北大学科学計測研究所	江島 丈雄
衛星搭載用極端紫外望遠鏡の性能評価試験	東京大学大学院理学系研究科	中村 正人
SnO ₂ /SiO ₂ 多層膜の軟X線反射特性の評価と光学ユニットの調整	東京学芸大学教育学部	並河 一道
真空紫外光励起による希ガス固体からの可視発光Ⅱ	学習院大学理学部	荒川 一郎
SOLAR-B衛星搭載X線望遠鏡の開発	国立天文台	常田 佐久
アモルファス半導体の光収量に関する研究	岐阜大学工学部	林 浩司
多元混晶半導体の高エネルギーバンド構造の解析	豊橋技術科学大学	若原 昭浩
低応力軟X線多層膜の光学特性の評価Ⅱ	姫路工業大学高度産業科学技術研究所	新部 正人
レーザー照射したSi(111)7×7清浄表面に誘起されるSurface Photo-Voltageの起源の研究	姫路工業大学高度産業科学技術研究所	春山 雄一
化合物半導体混晶の顕微光電子分光	分子科学研究所	福井 一俊



TmTeの赤外・遠赤外透過スペクトル	神戸大学大学院自然科学研究科	難波 孝夫
リチウムイオン2次電池材料の特性とミリ波遠赤外反射測定	神戸大学理学部	太田 仁
希土類モノブニクタイトの磁気直線偏光二色性	神戸大学大学院自然科学研究科	木村 真一
BL6A1の整備	分子科学研究所	鎌田 雅夫
Alを含む準結晶と合金のAlのXANESによる研究	名古屋大学情報文化学部	森 昌弘
Mg K-edge XAFSによる粒子線照射マグネシア(MgO)の局所構造解析	名古屋大学理工学総合研究センター	田辺 哲朗
ゼオライト光触媒のXAFSによる構造解析	名古屋大学大学院工学研究科	薩摩 篤
マグネシア含有メソポーラスシリカのXAFSによる構造解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 寿雄
粒子線照射を受けたシリコンの局所構造と光特性に関する研究(1)	名古屋大学大学院工学部	吉田 朋子
金属置換マンガンスピネル酸化物中のドーパント金属の局所構造解析	京都大学大学院エネルギー科学研究科	八尾 健
アルコキッド法によって合成されたセラミック前駆体の結晶化と局所構造変化	京都工芸繊維大学工学部	塩野 剛司
Mo L-XANESによるメタセシス及び選択酸化触媒活性種の局所構造解析	京都工芸繊維大学工学部	有谷 博文
軟X線励起によるアルカリハライドの発光量子収量の膜厚依存性	鳴戸教育大学	松川 徳雄
二次電子収量法を用いたAl-K XAFS測定によるカルボキシアミンアルミニウム錯体の局所構造解析	福岡大学理学部	脇田 久伸
超臨界キセノン・クリプトン中のハロゲン化メタンのイオン化ポテンシャル	神戸大学発達科学部	中川 和道
アミノ酸蒸着膜の真空紫外吸収スペクトル(2)	神戸大学発達科学部	蛸名 邦禎
強相関系物質の近赤外・可視・真空紫外反射スペクトル	神戸大学理学部	岡村 英一
有機珪酸蒸気の光学特性の測定	分子科学研究所	黒澤 宏
窒化物半導体の可視・真空紫外光反射スペクトル	分子科学研究所	福井 一俊
BL7Bの整備	分子科学研究所	鎌田 雅夫
SRを用いた量子構造体形成プロセス	名古屋大学大学院工学研究科	後藤 俊夫
シンクロトロン放射光励起エピタキシーによるテルル化亜鉛への不純物ドーピング	佐賀大学理工学部	小川 博司
磁性多層膜の軟X線ファラデー回転	東北大学科学計測研究所	渡辺 誠
リチウム電池マンガ系正極活物質の電子状態	京都大学大学院エネルギー科学研究科	内本 喜晴
K殻電子励起による多原子分子の反応制御	京都教育大学	伊吹 紀男
Fe ₂ O ₃ ナノ粒子のO K-XANES	京都教育大学	村田 隆紀
Ni系及びPd系触媒表面上に析出した炭素質の構造解析	広島大学工学部	竹平 勝臣
有機酸などの内殻励起による光解離過程の研究(3)	広島大学理学部	平谷 篤也
窒化物半導体混晶の窒素K内殻吸収測定(IV)	分子科学研究所	福井 一俊
光電子エネルギーを選別したフラグメントのTOFスペクトルの測定	分子科学研究所	下條 竜夫
BL8B1の整備(M1ミラー交換)	分子科学研究所	下條 竜夫

松下道雄	分子構造研究系 分助	11.10.1 ~ 12.3.19	オランダ	単一分子分光の研究を行うため
平田文男	理論研究系 理教	11.10.17 ~ 11.10.22	アメリカ	1999年電気化学日米合同大会に出席し、研究発表を行うため
加藤立久	分子構造研究系 分助	11.10.17 ~ 11.10.22	ドイツ	金属内包フローレンのパルスESR測定のため
猿倉信彦	分子制御レーザー開発研究センター 分助	11.10.23 ~ 11.10.28	台湾	国際会議「第11回 Ultrafast Phenomena in Spectroscopy」において招待講演のため
茅幸二	分子科学研究所 所長	11.10.24 ~ 11.10.29	アメリカ	クラスターとナノ構造の接点に関する国際シンポジウムに参加、講演のため
谷村吉隆	理論研究系 分助	11.10.24 ~ 11.10.28	台湾	第11回超高速分光国際会議に参加、発表
猿倉信彦	分子制御レーザー開発研究センター 分助	11.10.28 ~ 11.11.1	アメリカ	ASSL '99に出席のため
川口博之	錯体化学実験施設 分助	11.10.30 ~ 11.11.14	イギリス	カルコゲニド錯体化学に関して共同研究の実施
猿倉信彦	分子制御レーザー開発研究センター 分助	11.11.1 ~ 11.11.5	中国	日中セミナーに参加のため
茅幸二	分子科学研究所 所長	11.11.7 ~ 11.11.12	台湾	国立成功大学にてセミナー開催及び今後の国際交流における研究打ち合わせのため
中村宏樹	理論研究系 理教	11.11.21 ~ 11.11.25	台湾	第8回アジア化学会議において講演するため
鈴木俊法	電子構造研究系 分助	11.11.22 ~ 11.11.25	台湾	第8回アジア化学会議において招待講演のため
宇理須恒雄	極端紫外光科学研究系 分助	11.11.25 ~ 11.11.27	韓国	ハードエレクトロニクス材料の開発及び耐環境デバイスへの応用に関する研究実施のため
緒方啓典	分子集団研究系 分助	11.11.27 ~ 11.12.5	アメリカ	MRS Fall Meetingに参加し、講演を行うため
中林孝和	電子構造研究系 分助	11.11.30 ~ 12.1.31	アメリカ	日米科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギー転換」分野におけるグループ研究実施のため
平等拓範	分子制御レーザー開発研究センター 分助	11.12.4 ~ 11.12.17	アメリカ	スタンフォード大学において「大出力小型固体レーザーによる広帯域赤外線発生に関する研究」を遂行する為
猿倉信彦	分子制御レーザー開発研究センター 分助	11.12.8 ~ 11.12.20	カナダ	Lasers '99に出席のため
中村宏樹	理論研究系 理教	11.12.11 ~ 11.12.17	アメリカ	日米セミナー「化学反応ダイナミクスの量子制御」で講演のため
小林速男	分子集団研究系 分助	11.12.12 ~ 11.12.19	ロシア	国際セミナー「Two-Dimensional Metal and Superconducting Systems」に出席、講演のため
薬師久弥	分子集団研究系 分助	11.12.12 ~ 11.12.19	ロシア	国際学会「Chernogolovka '99」で研究発表を行うため
平等拓範	分子制御レーザー開発研究センター 分助	11.12.20 ~ 12.1.6	アメリカ	スタンフォード大学において「大出力小型固体レーザーによる広帯域赤外線発生に関する研究」を遂行する為
長友重紀	分子構造研究系 技	12.1.19 ~ 12.1.30	アメリカ	日米科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギー転換」分野におけるグループ共同研究実施における技術支援のため
小江誠司	相関領域研究系 分助	12.1.21 ~ 12.1.27	アメリカ	日米科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギー転換」分野におけるグループ研究実施のため



野村幸代	技術課官	12. 1.28 ~ 12. 4.26	アメリカ	質量分析法を用いて生体高分子などの測定を行う質量分析装置の改良点や工夫している部分の技術習得のため
猿倉信彦	分子制御レーザー開発研究センター助教	12. 2. 8 ~ 12. 2.19	スイスドイツ	ASSL2000に座長・発表のため出席
平等拓範	分子制御レーザー開発研究センター助教	12. 2.10 ~ 12. 2.20	フランス スイス・ドイツ	ブルゴーニュ大学で発表・討論、国際会議 AdvancedSolid - StateLasers で発表、シュトゥットガルト大学で発表・討論
庄司一郎	分子制御レーザー開発研究センター非常勤研究員	12. 2.10 ~ 12. 2.20	フランス スイス・ドイツ	ブルゴーニュ大学で発表・討論、国際会議 AdvancedSolid - StateLasers で発表、シュトゥットガルト大学で発表・討論
谷村吉隆	理論研究系助教	12. 2.25 ~ 12. 3. 2	韓国	日韓超高速分光会議参加と招待講演及び高麗大学 Mr. Cho 教授との議論
水谷泰久	分子構造研究系助	12. 2.27 ~ 12. 3. 2	韓国	「1st Asian Conference on Ultrafast Phenomena」に出席し、最近の研究成果についての招待講演を行う
田中桂一	相関領域研究系助	12. 3. 5 ~ 12. 3.14	アメリカ	第18回オースチン分子構造 (18th Austin Symposium on Molecular Structure) に出席・発表及び分子分光学についての研究打合せ
谷村吉隆	理論研究系助教	12. 3.12 ~ 12. 3.24	アメリカ	アメリカ物理学会で研究成果の発表及び、イリノイ大学、ウイスコンシン大学での研究打合せのため
鈴木俊法	電子構造研究系助教	12. 3.13 ~ 12. 3.17	台湾	東アジア分子動力学ワークショップにて講演・情報収集のため
見附孝一郎	極端紫外光科学研究系助	12. 3.14 ~ 12. 3.17	台湾	東アジア化学反応ワークショップに出席して、研究発表と研究情報収集を行うため
加藤立久	分子構造研究系助	12. 3.19 ~ 12. 3.26	ドイツ	ダームシュタット工科大学 Prof.Dinse との共同研究打合せと BrankerGermany 社における EPR 装置トレーニングコース受講
酒井雅弘	技術課官	12. 3.21 ~ 12. 3.26	ドイツ	フラーレンラジカルの物性に関する研究に必要な EPR 装置に関する技術的情報の収集のため
藤井正明	電子構造研究系助教	12. 3.31 ~ 12. 4. 8	英国	二重共鳴分光法の研究に関する研究討議
猿倉信彦	分子制御レーザー開発研究センター助教	12. 4. 5 ~ 12. 4. 9	アメリカ	コミッティーミーティング出席のため
岸根順一郎	理論研究系助	12. 4. 8 ~ 13. 3.31	アメリカ	低次元強相関電子系の量子揺らぎと非摂動的課程を包含する有効場理論に関する研究に従事するため
加藤立久	分子構造研究系助	12. 4. 9 ~ 12. 4.14	ポーランド	ポリフィリン関連ラジカルに関する共同研究打合せのため
藤井正明	電子構造研究系助教	12. 4.14 ~ 12. 4.26	フランス	Molecular and Ionic Clusters (MIC2000) 出席及び研究打合せ

11.10.1	田 中 桂 一	併任更新	九州大学理学部助教授	(相関領域研究系分子クラスター研究部門助教授)	12. 3.31 まで
11.10.1	細 越 裕 子	併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科助手	(相関領域研究系相関分子科学第一研究部門助手)	
11.10.1	小 江 誠 司	併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科助手	(相関領域研究系相関分子科学第二研究部門助手)	
11.10.1	平 等 拓 範	併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科助教授	(分子制御レーザー開発研究センター特殊波長レーザー開発研究部助教授)	
11.10.1	永 田 央	併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科助教授	(分子物質開発研究センター機能探索研究部助教授)	
11.10.1	下 條 竜 夫	併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科助手	(極端紫外光実験施設助手)	
11.10.1	渡 邊 武 史	採 用	電子構造研究系基礎電子化学研究部門非常勤研究員	電子構造研究系基礎電子化学研究部門特別協力研究員	
11.10.1	田 村 格 良	採 用	分子集団研究系分子集団動力学研究部門非常勤研究員	東北大学科学計測研究所研究生	
11.10.1	銘 苅 春 隆	採 用	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門非常勤研究員	(財) 豊田理化学研究所奨励研究員	
11.10.1	村 上 英 利	採 用	分子制御レーザー開発研究センター放射光同期レーザー開発研究部非常勤研究員	北海道大学大学院工学研究科研究生	
11.10.1	田 中 素 子	採 用	電子構造研究系基礎電子化学研究部門リサーチ・アソシエイト (未来開拓)	相関領域研究系相関分子科学第一研究部門特別協力研究員	
11.10.1	石 川 英 里	採 用	電子構造研究系基礎電子化学研究部門リサーチ・アソシエイト (未来開拓)	東京工業大学資源化学研究所研究生	
11.10.1	足 立 純 一	転 出	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所物質科学第一研究系助手	技術課第二技術班極端紫外光科学研究系技術係員	
11.10.1	矢 野 隆 行	転 出	名古屋大学理学部・理学研究科・多元数理科学研究科技術官	技術課第三技術班装置開発技術係員	
11.10.1	佐 藤 敦 子	採 用	技術課事務補佐員 (広報担当)	技術課第二技術班相関領域研究系技術係研究支援推進員	
11.10.19	王 利	辞 職	中国科学院大連化学物理研究所助手	電子構造研究系電子状態動力学研究部門非常勤研究員	
11.10.31	溝 口 麻 雄	辞 職	東京工業大学大学院理工学研究科物性物理学専攻助手	相関領域研究系分子クラスター研究部門非常勤研究員	
11.10.31	林 口 僊 子	辞 職		分子制御レーザー開発研究センター事務補佐員	
11.11.1	田 中 慎一郎	転 出	名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻助教授	極端紫外光実験施設助手	
11.11.29	Kovalenko, A.	辞 職	米国 Utah 大学リサーチアソシエイト	理論研究系分子基礎理論第一研究部門リサーチ・アソシエイト (未来開拓)	
11.12.1	市 野 里 美	採 用	技術課第四技術班分子制御レーザー開発技術係研究支援推進員		
12. 1. 1	佃 達 哉	転 入	電子構造研究系基礎電子化学研究部門助教授	東京大学大学院総合文化研究科広域科学専攻助手	
12. 1. 1	田 中 彰 治	併 任	郵政省通信総合研究所関西支所ナノ機構研究室郵政技官	(分子物質開発研究センターパ イ電子開発研究部助手)	12. 3.31 まで



12. 1. 1	岩 瀬	正 探	用	分子構造研究系分子動力学研究 部門非常勤研究員	
12. 2. 1	牧 田	誠 二	探 用	技術課第五技術班分子物質開発 技術第一係員	
12. 2.20	水 谷	守 辞	職	(株)トーマーコンタクトレンズ 事業部総合開発センター研究員	分子物質開発研究センター融合 物質開発研究部非常勤研究員
12. 2.29	銘 苅	春 隆	辞 職	姫路工業大学高度産業科学研究 所助手	極端紫外光科学研究系反応動力 学研究部門非常勤研究員
12. 3. 1	加 藤	政 博	転 入	極端紫外光実験施設助教授	高エネルギー加速器研究機構物質構 造科学研究所放射光源研究系助手
12. 3. 1	上 田	正 探	用	技術課第四技術班分子制御レー ザー開発技術係員	
12. 3.16	中 澤	康 浩	転 出	大阪大学大学院理学研究科分子 熱力学研究センター助手	分子集団研究系物性化学研究部 門助手
12. 3.31	松 下	道 雄	辞 職	オランダ国ライデン大学理学部 博士(客員)研究員	分子構造研究系分子動力学研究 部門助手
12. 3.31	濱 広	幸 併任終了		(東北大学大学院理学研究科助 教授)	極端紫外光実験施設助教授
12. 3.31	宮 崎	州 正	退 職	日本学術振興会海外特別研究員 (ニュージーランド国Delft大学)	理論研究系分子基礎理論第二研 究部門非常勤研究員
12. 3.31	岩 瀬	正 退	職		分子構造研究系分子動力学研究 部門非常勤研究員
12. 3.31	渡 邊	武 史	退 職	日本学術振興会特別研究員(分 子研にて研究従事)	電子構造研究系電子状態動力学 研究部門非常勤研究員
12. 3.31	Tapas, K. G.	退 職		慶応義塾大学助手	相關領域研究系分子クラスター 研究部門非常勤研究員
12. 3.31	田 中	秀 樹	客員終了	(岡山大学理学部教授)	理論研究系分子基礎理論第三研 究部門教授
12. 3.31	橋 本	健 朗	客員終了	(東京都立大学大学院理学研究 科助教授)	理論研究系分子基礎理論第三研 究部門助教授
12. 3.31	鰐 木	基 成	客員終了	(姫路工業大学理学部助教授)	分子構造研究系分子構造学第二 研究部門助教授
12. 3.31	松 本	吉 泰	客員終了	(総合研究大学院大学先導科学 研究科教授)	電子構造研究系電子構造研究部 門教授
12. 3.31	玉 井	尚 登	客員終了	(関西学院大学理学部教授)	電子構造研究系電子構造研究部 門助教授
12. 3.31	荒 川	一 郎	客員終了	(学習院大学理学部教授)	相關領域研究系相關分子科学第 二研究部門教授
12. 3.31	御 崎	洋 二	客員終了	(京都大学大学院工学研究科助 教授)	相關領域研究系相關分子科学第 二研究部門助教授
12. 3.31	櫻 井	弘	客員終了	(京都薬科大学教授)	錯体化学実験施設錯体触媒研究 部門教授
12. 3.31	溝 部	裕 司	客員終了	(東京大学生産技術研究所助教 授)	錯体化学実験施設錯体触媒研究 部門助教授
12. 3.31	岡 田	一 俊	退 職		理論研究系リサーチ・アシスタ ント

12. 3.31	神 坂 英 幸	退 職		理論研究系リサーチ・アシスタント	
12. 3.31	長 屋 州 宣	退 職		理論研究系リサーチ・アシスタント	
12. 3.31	日 野 理	退 職		理論研究系リサーチ・アシスタント	
12. 3.31	今 井 隆 志	退 職		理論研究系リサーチ・アシスタント	
12. 3.31	木 下 朋 子	退 職		電子計算機センターリサーチ・アシスタント	
12. 3.31	齊 川 次 郎	退 職		分子構造研究系リサーチ・アシスタント	
12. 3.31	春 田 奈 美	退 職		分子構造研究系リサーチ・アシスタント	
12. 3.31	小 杉 健太郎	退 職		電子構造研究系リサーチ・アシスタント	
12. 3.31	小 島 絵美子	退 職		分子集団研究系リサーチ・アシスタント	
12. 3.31	岩 堀 史 靖	退 職		関連領域研究系リサーチ・アシスタント	
12. 3.31	原 功	退 職		関連領域研究系リサーチ・アシスタント	
12. 3.31	牧 原 伸 征	退 職		関連領域研究系リサーチ・アシスタント	
12. 3.31	鈴 木 健太郎	退 職		関連領域研究系リサーチ・アシスタント	
12. 3.31	野 田 英 之	退 職		極端紫外光科学研究系リサーチ・アシスタント	
12. 3.31	伊 藤 博 一	退 職		錯体化学実験施設リサーチ・アシスタント	
12. 3.31	梅 本 和 彦	退 職		錯体化学実験施設リサーチ・アシスタント	
12. 3.31	和 田 亨	退 職		錯体化学実験施設リサーチ・アシスタント	
12. 4. 1	高 見 利 也	配 置 換	理論研究系分子基礎理論第二研究部門助手	電子計算機センター助手	
12. 4. 1	夢 田 博 一	転 入	分子集団研究系分子集団動力学研究部門助教授	京都大学大学院工学研究科電子物性工学専攻講師	
12. 4. 1	笠 井 俊 夫	転 入	関連領域研究系分子クラスター研究部門助教授	大阪大学大学院理学研究科化学専攻教授	流動研究部門
12. 4. 1	高 須 昌 子	転 入	関連領域研究系分子クラスター研究部門助教授	金沢大学理学部計算科学科助教授	流動研究部門
12. 4. 1	蔡 德 七	転 入	関連領域研究系分子クラスター研究部門助手	大阪大学大学院理学研究科化学専攻助手	流動研究部門
12. 4. 1	久 保 厚	転 入	関連領域研究系分子クラスター研究部門助手	京都大学大学院理学研究科化学専攻助手	流動研究部門



12. 4. 1	野々垣 陽 一	転 入	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門助手	名古屋大学大学院工学研究科材料プロセス工学専攻助手	
12. 4. 1	高 橋 和 敏	採 用	極端紫外光実験施設助手	東北大学大学院理学研究科博士後期課程院生	
12. 4. 1	魚 住 泰 広	採 用	錯体化学実験施設錯体触媒研究部門教授	名古屋市立大学薬学部教授	
12. 4. 1	岩 田 末 廣	転 出	広島大学大学院理学研究科教授	理論研究系分子基礎理論第一研究部門教授	
12. 4. 1	三 好 永 作	転 出	九州大学大学院総合理工学研究科教授	相関領域研究系分子クラスター研究部門教授	流動研究部門
12. 4. 1	田 中 桂 一	転 出	九州大学大学院理学研究科助教授	相関領域研究系分子クラスター研究部門助教授	流動研究部門
12. 4. 1	長 門 研 吉	転 出	高知工業高等専門学校機械工学科助教授	相関領域研究系分子クラスター研究部門助教授	流動研究部門
12. 4. 1	原 田 賢 介	転 出	九州大学大学院理学研究科助手	相関領域研究系分子クラスター研究部門助手	流動研究部門
12. 4. 1	佐 藤 信一郎	転 出	北海道大学大学院工学研究科分子化学専攻助教授	分子制御レーザー開発研究センター分子位相制御レーザー開発研究部助教授	
12. 4. 1	山 下 敬 郎	転 出	東京工業大学大学院総合理工学研究科教授	分子物質開発研究センターパイ電子開発研究部助教授	
12. 4. 1	西 田 雄 三	転 出	山形大学理学部教授	錯体化学実験施設錯体合成研究部門教授	流動研究部門
12. 4. 1	海老原 昌 弘	転 出	岐阜大学工学部応用精密化学科助教授	錯体化学実験施設錯体合成研究部門助教授	流動研究部門
12. 4. 1	小 澤 智 宏	転 出	名古屋工業大学工学部助手	錯体化学実験施設錯体合成研究部門助手	流動研究部門
12. 4. 1	川 口 博 之	転 出	名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻助手	錯体化学実験施設錯体合成研究部門助手	流動研究部門
12. 4. 1	柘 植 清 志	転 出	北海道大学大学院理学研究科助手	錯体化学実験施設錯体物性研究部門助手	
12. 4. 1	青 柳 睦	配 置 換	岡機構計算科学研究センター助教授	電子計算機センター助教授	
12. 4. 1	南 部 伸 孝	配 置 換	岡機構計算科学研究センター助手	電子計算機センター助手	
12. 4. 1	大 野 人 侍	配 置 換	岡機構計算科学研究センター助手	電子計算機センター助手	
12. 4. 1	北 川 禎 三	併任更新	分子構造研究系分子動力学研究部門教授	(岡機構統合バイオサイエンスセンター教授)	13. 3.31 まで
12. 4. 1	谷 村 吉 隆	併任更新	京都大学大学院理学研究科助教授 (大学院教育連携協力)	(理論研究系分子基礎理論第二研究部門助教授)	13. 3.31 まで
12. 4. 1	笠 井 俊 夫	併 任	大阪大学大学院理学研究科化学専攻教授	(相関領域研究系分子クラスター研究部門教授)	13. 3.31 まで
12. 4. 1	猿 倉 信 彦	併 任	東京大学物性研究所極限環境物性研究部門客員助教授	(分子制御レーザー開発研究センター放射光同期レーザー開発研究部助教授)	13. 3.31 まで
12. 4. 1	田 中 彰 治	併任更新	郵政省通信総合研究所関西支所郵政技官	(分子物質開発研究センターパイ電子開発研究部助手)	13. 3.31 まで

12. 4. 1	鎌 田 雅 夫	併任更新	京都大学大学院理学研究科助教授（大学院教育連携協力）	（極端紫外光実験施設助教授）	13. 3.31まで
12. 4. 1	加 藤 政 博	併 任	高エネルギー加速器研究機構物質科学研究所放射光源研究系極短波光発生研究部門客員助教授	（極端紫外光実験施設助教授）	13. 3.31まで
12. 4. 1	田 中 晃 二	併任更新	京都大学大学院理学研究科教授（大学院教育連携協力）	（錯体化学実験施設錯体物性研究部門教授）	13. 3.31まで
12. 4. 1	依 田 隆 夫	採 用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門非常勤研究員	東京大学大学院理学系研究科博士後期課程院生	
12. 4. 1	橋 本 昌 人	採 用	相關領域研究系分子クラスター研究部門非常勤研究員	金沢大学大学院自然科学研究科博士後期課程院生	
12. 4. 1	陰 地 宏	採 用	極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門非常勤研究員	名古屋大学物質科学国際研究センター非常勤講師	
12. 4. 1	枝 連 一 志	採 用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門非常勤研究員	金沢大学大学院自然科学研究科博士後期課程院生	
12. 4. 1	光 武 亜代理	採 用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門リサーチ・アソシエイト（未来開拓）	日本学術振興会特別研究員（分子研理論研究系にて従事）	
12. 4. 1	菊 地 武 司	客 員	理論研究系分子基礎理論第三研究部門教授	（倉敷芸術科学大学産業科学技術学部教授）	
12. 4. 1	木 下 正 弘	客 員	理論研究系分子基礎理論第三研究部門助教授	（京都大学エネルギー理工学研究所助教授）	
12. 4. 1	佐々田 博 之	客 員	分子構造研究系分子構造学第二研究部門助教授	（慶應義塾大学理工学部助教授）	
12. 4. 1	山 瀬 利 博	客 員	電子構造研究系電子構造研究部門教授	（東京工業大学資源化学研究所教授）	
12. 4. 1	増 田 秀 樹	客 員	相關領域研究系相關分子科学第二研究部門教授	（名古屋工業大学工学部教授）	
12. 4. 1	岩 田 耕 一	客 員	相關領域研究系相關分子科学第二研究部門助教授	（東京大学大学院理学系研究科助教授）	
12. 4. 1	谷 口 功	客 員	錯体化学実験施設錯体触媒研究部門教授	（熊本大学工学部教授）	
12. 4. 1	田 中 康 隆	客 員	錯体化学実験施設錯体触媒研究部門助教授	（静岡大学工学部助教授）	
12. 4. 1	長 島 剛 宏	採 用	技術課第一技術班理論研究系技術係員	大阪市立大学大学院理学研究科研究生	
12. 4. 1	岡 野 芳 則	転 入	技術課第二技術班分子集団研究系技術係員	東京大学物性研究所新物質科学研究部門技術官	
12. 4. 1	熊 倉 光 孝	転 出	京都大学大学院理学研究科助手	技術課第一技術班分子構造研究系技術係員	
12. 4. 1	寛 美知子	採 用	電子構造研究系基礎電子化学研究部門技術補佐員（未来開拓）		
12. 4. 1	鶴 田 由美子	採 用	技術課事務補佐員（受付）		
12. 4. 1	北 川 禎 三	併 任	分子構造研究系研究主幹	（岡機構統合バイオサイエンスセンター教授）	14. 3.31まで
12. 4. 1	小 杉 信 博	併任更新	極端紫外光実験施設長	（極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門教授）	14. 3.31まで



12. 4. 1	平 田 文 男	併 任	岡機構計算科学研究センター長	(理論研究系分子基礎理論第四研究部門教授)	13. 3.31 まで
12. 4. 1	魚 住 泰 広	併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科機能分子科学専攻教授	(錯体化学実験施設錯体触媒研究部門教授)	
12. 4. 1	藤 井 浩	併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科構造分子科学専攻助教授	(分子物質開発研究センター融合物質開発研究部助教授)	
12. 4. 1	佐 藤 啓 文	併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科構造分子科学専攻助手	(理論研究系分子基礎理論第四研究部門助手)	
12. 4. 1	中 林 孝 和	併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科構造分子科学専攻助手	(電子構造研究系基礎電子化学研究部門助手)	
12. 4. 1	高 口 博 志	併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科機能分子科学専攻助手	(電子構造研究系電子状態動力学研究部門助手)	
12. 4. 1	藤 原 秀 紀	併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科構造分子科学専攻助手	(分子集団研究系分子集団動力学研究部門助手)	
12. 4. 1	水 谷 泰 久	併 任	総合研究大学院大学先導科学研究科助手	(分子構造研究系分子動力学研究部門助手)	
12. 4. 1	岩 田 末 廣	称号授与	分子科学研究所名誉教授	(理論研究系分子基礎理論第一研究部門教授)	
12. 4.16	今 井 隆 志	採 用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門 リサーチ・アソシエイト(未来開拓)	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)	
12. 4.30	高 田 恭 孝	辞 職	理化学研究所播磨研究所放射光物性研究室研究員	極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門助手	

文章をどう書くかは、人それぞれであろう。即興的に一気に書く人、鉛筆を舐めなめ原稿用紙を埋めていく人、終わりから書く人等々。文章の書き方というのは、多分にその人の脳のニューラルネットワークの張り方に依存している気がする。私はといえば、大まかに全体を書いて、言葉や文の位置を並べ替えたり、シェーブアップしたりと、変分法的に文章を書く。この書き方は、詳細は犠牲にしても全体をつかむ事を優先するという、大雑把な私の性格によく合っている。有名な作家が、どのように小説を書いていったかを調べるのは興味深いが、これで科研費はもらえないであろう。

（谷村吉隆 記）

分子研レターズ編集委員

藤 井 正 明（委員長）

谷 村 吉 隆（本号編集担当）

加 藤 立 久

中 村 敏 和

水 川 哲 徳

見 附 孝一郎

分子研レターズ No. 42

発行年月	平成12年7月
印刷年月	平成12年7月
発行	岡崎国立共同研究機構 分子科学研究所
編集	分子研レターズ編集委員会
印刷	大日印刷株式会社

岡崎国立共同研究機構
分子科学研究所

444-8585 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地

<http://www.ims.ac.jp/>