

分子研 レターズ

43

Issue of February 2001



巻頭言

山の向うの化合物.....中村 晃

研究紹介

水中の集団励起とイオンの

ダイナミクス.....平田文男

時間分解分光による凝縮相分子

ダイナミクスの研究.....田原太平

レターズ

分子構造総合討論会運営委員会の

発足の経緯について.....濱口宏夫

分子クラスター、遷移状態の構造選別と立体反応ダイナミクスの解明： 新しい化学反応論の構築をめざして

関連領域研究系分子クラスター研究部門 笠井俊夫

分子配向は化学反応において制御すべき、最後に残された重要なパラメータです。このパラメータは、反応速度や分岐をゼロにも百パーセントにもする大きな反応制御の潜在力を持っています。また別の課題としてクラスターの構造と、クラスター化による化学反応性に及ぼす影響の系統的解明が必要となってきました。とりわけクラスター反応を分子レベルで詳細に理解するにはクラスターのサイズと構造異性体を何らかの方法で選別して反応を観察しなければなりません。

流動期間で予定している研究計画は次のような内容です。

分子線を用いたレーザー蒸発法により有機分子と金属原子とを人工的に組み合わせる有機金属錯体など新規な中性クラスターを合成し、六極電場法を用いてそのサイズと構造を非破壊的に選別し、引き続きクラスターの配向制御を行います。一方、直線偏光レーザー励起法によりラジカル・分子のアライメントを行い完全配向状態で反応を実現します。さらにAB+CD二分子反応の遷移状態化学種[AB...CD]は広い意味での分子クラスターとみなせますので、その幾何構造は反応分岐を決定する要因です。従って、その構造選別を行い反応のActive Controlを試みます。これらの研究から新しい化学反応論の展開と近い将来の反応制御の新しい方法論の確立を目指します。

以上のようなレーザー蒸発法で合成した新規な分子クラスターの構造選別と立体反応ダイナミクスの解明に加えて、水素結合型のハロゲン化水素クラスターに関しても同様の構造と反応性の解明を行いま

す。例えばHClなどのハロゲン化水素二量体クラスターはトンネル反転運動を伴うL型分子構造を持っていますがホモとヘテロダイマーではトンネル運動速度は極端に異なることを私たちは明らかにしました。このトンネル反転運動速度の違いが化学反応にどのような影響するのかについて調べることで、クラスター化における量子効果を解読できます。

このように、分子配向をコントロールして原子・分子レベルの基礎解明の研究過程において見出された法則に基づいて近い将来、反応を制御する新しい方法論を確立することができるのではないかと期待されます。このような一見遠回りに思える基礎研究が、将来の新しい生産と技術の発展を促すことができ、これがいわゆる自然現象を「理解 (post-dict)」し次にそれを「予測 (pre-dict)」するサイエンスの不可欠な両輪で、両者がそろって初めてサイエンスとして成り立つのではないかと考えています。

これらの研究成果に基づいて、従来のエネルギーを主とする反応論から、分子構造と結合状態の変化のありさまを時間・空間的にトータルに解読するベクトル的な「立体反応ダイナミクス」の新しい反応論へと進化することができます。大気反応や燃焼反応、そして物質を合成する多くの表面反応が原子・分子レベルで議論されようとしている今日、立体反応ダイナミクスあらゆる分野では益々その重要性が認識されるでしょう。

平成12年4月、蔡徳七助手と修士2年生の橋之口道宏君と共に「夢とロマン」を求めて岡崎に寄せていただいてからすでに半年以上過ぎ去り、歳月の



矢のような速さを改めて実感する次第です。幸いその間、新しい配向分子ビーム反応装置の立ち上げも順調に進み、また10月からは分子研フェローの清水雄一郎さんも私たちのグループに加わっていただきお陰様で順風の船出と言えます。分子研の研究環境と研究サポート体制のすばらしさは、確かにその恩恵を受けてみないとわからないもので、このようなよき伝統はこれからも未永く続けていただければと願っています。

現在、全国の大学・研究所等に独立法人化の嵐が吹き荒れています。そんな時期に私たちは、たまたま流動で大学の理学部から分子研に転任したものですから、否応なしに「研究所における研究とはなにか?」とか「分子科学とは何か?」という基本的な問題についても考えざるを得ない状況となっています。私たちの研究分野は物理化学ですので、分子科学が現在、節目であるならば即ち物理化学も節目であると同義です。分子研が日本の分子科学の象徴的存在であるだけに、ひとたび分子研が分子科学の将来方向に関して判断を間違うと、大学の理学的な分子科学の研究も風前の灯火となるのは予測できます。「研究の評価」という名において、研究の収支決算をするのは結構ですが、問題は研究が基礎的で、応用的なものでなければいほど「貨幣の交換率」が誰にもわからないところでしょう。言い換えれば今日の問題は、ギリシャ神話にあるプルートーンや冥界の諸神たと自認する人達が余りにも世間に多くおり、我こそは「研究の評価」ができると信じていることでしょう。歴史を振り返れば、偉大な発見や発明は、多くの場合地道で絶え間ない好奇心の追求

の途上に来る偶然の産物であり、またそれらの真の評価は時として百年のオーダーを必要とするという、この簡単な事実を認める謙虚さの欠落かも知れません。

また別の話になりますが、研究の進め方には「探偵型」と「アマゾン型」の二つの方法があると言った人がいます。「探偵型」研究は論理と推理を駆使して犯人を見つけ出すタイプの研究です。「アマゾン型」研究は理論を必要としますがどちらかといえば直観と信念をたよりに、未踏のジャングルをさまよう探検的なものです。この夢とロマンの探検こそが「分子科学の理想」であり、かつてはそれが実行されていたと思うのですが、この意味において現在の分子科学が一体どれだけそうであるのかわかりません。いずれにしても「分子科学の理想」は理想で終わらせてはならない理想であると思います。

分子研に赴任して

関連領域研究系分子クラスター研究部門 高 須 昌 子

平成12年4月に、金沢大学理学部計算科学科より、
関連領域研究系分子クラスター部門の赴任しました。

研究グループの現在の構成員は、高須昌子（助教
授）橋本昌人（IMS Fellow）野口博司（学振PD）、
野坂誠（D2）の4名です。

流動部門に赴任するに当たっては、伊藤機構長、
茅所長、平田教授、西教授を始め、皆様に大変お世
話になりました。

また、快く送り出して下さった、金沢大学理学部
の樋渡学部長を始め、計算科学科の皆様に感謝いた
します。

分子研には、数年前から、いろいろな研究会に来る
機会があり、なじみのある場所です。平田先生から、
分子研の流動のお話をいただいた時も、即座に行く
気になりました。2000年3月まで流動で来られてい
た三好先生（九大）から、宿舎内部の家具を譲って
いただき、おかげさまで、スムーズな移動となりました。

私は、高校までは京都で育ち、大学以降は、東京、
金沢、カルフォルニアのバークレーなどにありまし
た。友達には、「全国観光地周り」などと言われて
います。今回の岡崎は、今までいた場所とは、また
違ったよさがあり、楽しんでおります。

大学から研究所に移って、まず嬉しかったことは、
時間がたっぷりあることです。大学にいた時は、入
試問題の作成や会議、授業の準備や試験の採点、大
勢のマスターの院生や4年生の指導など、とても忙
しかったです。分子研に来ると、朝から研究ができ
て、嬉しいです。

また、研究費の点でも、恵まれているようです。
おかげさまで、コンピュータを購入して、さっそく
計算をしています。

図書館に夜でも電気がついていて、コピーできる
所は、バークレーに似てます。1990年から1992
年まで、バークレーの化学科でポスドクをやってお
りました。当時の生活に戻ったようです。

毎週水曜夜のジョギングにも参加させていただい
てます。この2年間で、体力もつけよう、と思っ
てます。

研究室では、ほぼ週1度セミナーをしております。
愛知工業大の村中氏も常連メンバーです。グループ
のメンバーの他、理論のポスドクの方々や外部の方
にセミナーをお願いしています。

他には、月1度、分子クラスターでゼミをやってい
ます。分子クラスターは、流動講座で、実験と理論の
混成です。いいチャンスと思って、実験の話も聞かせ
ていただいています。12名の小人数なので、厳しい質
問も出ます。院生やポスドクの若い人にとって、違う
分野の人の前で話をするのは、就職の面接にも役立
つと考えてます。午前中にゼミをやって、皆で焼肉ラ
ンチを食べに行くのも楽しみです。笠井先生が阪大、
久保先生が京大、私が金沢大からの流動なため、関西
系の人が多く、ランチでは関西弁が飛び交ってます。

また、関連の渡辺先生やグループの皆さん、太田
さん、谷澤さんにも、大変お世話になってます。

私の研究室では、物性のシミュレーションをやっ
ています。私がシミュレーションを初めて知ったの



は、大学院生の頃です。統計力学の研究室にいました。東大理学部物理学科で鈴木増雄先生にご指導いただきました。その頃助手をされていた宮下精二先生にも、大変お世話になりました。当時は、2次元量子スピン系のモンテカルロシミュレーションをやっていました。

その頃、研究発表をすると、必ず聞かれたことは、「そういう量子スピン系は現実にあるのですか？」でした。「ある場合もあるが、大部分は今後の実験で出てくるだろう」などと、苦しい答をしていました。

最近、分子研のコロキウムなどを聞いていると、10年前になかった物質も、化学の方々の努力により合成されているようで、嬉しいです。

さて、ドクター修了後、私は金沢に移り、樋渡先生の影響もあり、ポリマーなどのソフトマターにも興味が出てきました。1990年から1992年にパークレーに行った時は、チャンドラー教授の研究室で、電子移動のモデル計算をしました。少しは化学の世界を知ることができました。1994年に金沢大学の物理学科の助教授になり、研究室を持つようになっては、他のテーマにも広がってきました。その後、1996年に計算科学科が新設され、講座ごと、新学科に移動しました。

最近の主要なターゲットは、ポリマーやゲルなどの高分子系と、ヘリウムなどの量子系の2つです。

ゲルに関しては、大学院生の野坂君が精力的に計算しています。化学ゲルのモデルを作成し、リンカー数などのパラメータを変えた時の、パーコレーシ

ョンの有無を判定します。実験の研究者の方々とともに議論して、研究を進行中です。

量子系については、大学院生の時に、いわゆる符号問題で、さんざん苦労しました。符号問題というのは、量子系を次元が1つ上がった古典系に変換してから、コンピュータで計算すると、位相のせいで、計算の精度が悪くなる問題です。量子平衡系では、三角格子上の反強磁性ハイゼンベルグモデルなど、フラストレーション系で符号問題が発生します。フェルミオン系でも発生します。量子非平衡系では、時間発展が複素数になるので、たいてい発生します。多くの方が、近似や改良を試みてますが、完全解決はまだなされてません。

その後、「符号問題がなくて、おもしろい系」を探して、エアロゲルなど、ランダム媒質中のヘリウム4の系に取り組むことになりました。この系のシミュレーションを、ポスドクの橋本君がやっています。最近、クラスターアルゴリズムをこの系に適用しています。

また、DNAの電気泳動のモデル計算をポスドクの野口君がやっております。実験と定性的によく合う、いい結果を得ています。

個人的な興味としては、雪崩や経済現象のシミュレーションもやりたいと思っています。現在は分子研所属なので、大学の計算科学科に戻って、学生が大勢来た時のテーマとして、考えている所です。

以上、簡単ですが、現在の研究の様子などを紹介させていただきました。

今後もよろしくお願いいいたします。