

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

中日文化賞	中村宏樹
森野基金	田原太平
森野基金	岩田耕一
名古屋メダル	相田卓三
新潟日報文化賞	赤阪 健

中村宏樹教授に 中日文化賞

理論研究系第二部門中村宏樹教授が「化学反応における非断熱遷移現象の研究」により第53回の中日文化賞を受賞されました。非断熱遷移とは、分子等の運動やエネルギー状態が異なる状態に“一線を越えて”移る現象です。非断熱遷移は物理、化学、生物等の様々な分野における状態や相変化の機構として、重要な働きをしています。例えば化学においては化学反応の進行を、生物においては生体分子中の電子移動等を支配する基本的なメカニズムです。最近、素粒子物理で質量の有無が話題になっているニュートリノの変換も非断熱遷移です。

1932年、Landau、Zener、Stueckelbergにより先駆的な仕事がなされましたが、この理論は遷移が起こる確率を近似的にしか求められず、しかもエネルギーが相対的に高いという、限られた領域でしか適用出来ないため、例えば量子トンネル効果を伴う現象などを調べる事が出来ない等の限界がありました。この理論が登場以来、多くの研究者が完全な理論を作る試みをしてきましたが、多くの未解決問題が残されたままでした。

中村教授はこの問題を20年以上研究され、近年中村教授の学生であった朱超原氏とともに、この問題の基本方程式を解き直し、量子力学的に正しくしかも応用上も便利な完全解析解を導く事に成功しました。

この理論は非断熱遷移の遷移確率と位相を全エネルギー領域で正確に計算する事を可能とし、有名なLandau-Zener公式を完全に置き換えるものです。また、Landau-Zenerタイプの遷移確率だけでなく、トンネルタイプの非断熱遷移の取り扱いも可能にしています。この研究は92年に発表され、「60年ぶりの完全解」として世界的な注目をあびました。

中村教授は、基礎理論を構築するのみならず、その応用についても精力的な研究を行ってきました。最近では、レーザーを用いて非断熱遷移を人工的に作り、化学反応を制御する研究も行っています。非断熱遷移の概念は狭い意味での化学に限定されません。中村教授は、非断熱理論を経済学に応用し、経済学者とともに「資金供給と金融市場の相互作用」というタイトルの共同論文を書いています。

以上のように、中村教授の研究は、非断熱遷移の厳密な理論を構築したのみならず、従来の理論の及ばない複雑あるいは広いエネルギー領域の問題を解明し、また物理や化学等の多くの有用な問題に応用



する道を開いたものであります。中日文化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申し上げます次第です。

(谷村吉隆 記)

田原太平助教授に 森野基金

このたび、極端紫外光科学研究系の田原太平助教授が第16回分子科学研究奨励森野基金を受賞されました。本賞は森野米三先生の抛出により創設されたもので、分子科学の分野で活躍する前途有望な研究者に送られる賞です。受賞された田原助教授は東京大学理学系研究科博士課程を修了後、同助手、神奈川科学技術アカデミーでの研究員を経て、1995年1月より分子研に新たな研究の場をもうけ、主として凝縮相分子のダイナミクスの研究に邁進されてきました。今回の受賞は、学生時代から現在にいた

るまで一貫して精力的におこなってこられた「超高速時間分解分光法による凝縮相分子ダイナミクスの研究」に関する業績が高く認められたものであり、このことは共同研究者にとってもこの上なく大きな喜びです。心よりお祝い申し上げます。

田原助教授はご自身の研究における興味の源が、学部時代フラスコの中で起こる化学反応をみて抱いた素朴な好奇心にあるということを経験あるごとに口にされています。溶液中の分子がどのような変化を繰り返しながら反応が進むのかを、まるで8ミリフィルムを手回しするがごとく直感的にもわかる形で理解したいという一心でひたむきに研究に取り組んでこられました。このことは、系の時間変化を時間の流れに沿って記録してゆく時間分解分光の手法を一貫してもちい凝縮相光化学の分光学的研究を行ってこられたことにもよく反映されています。研究対象とした時間領域という観点で振り返っても、ナノ秒領域の研究から出発し、ピコ秒、さらに高速なフェムト秒領域へと飽くなき好奇心を前面に押しだして勇猛果敢に攻めの研究を繰り返してこられました。この内なる好奇心にしっかりと裏打ちされた溢れ出さんばかりの熱意と常に前向きな姿勢が研究を推し進めてゆく上で実は一番大切なのだということ、自ら実証されてきたようなご経歴だと思えます。

こうした充実した研究経歴の間に達成された業績のすべてをここで網羅することはとてもできませんが、その中でも今回の受賞と直接関係する代表的なものを紹介させていただきます。田原助教授はまず励起状態分子の構造変化に敏感で豊富な情報を得ることができる過渡共鳴ラマン分光をもちいて、ナノ



秒の時間分解能で芳香族カルボニルおよび電荷移動錯体の励起三重項状態について研究されております。数多くの同位体置換体の合成およびそれらをもちいた参照実験の結果から過渡ラマンバンドを同定し、励起状態での分子構造についての詳細を明らかにされました。また高圧ガスラマンシフトを早い段階から導入し、ラマン測定条件の最適化に成功されたとも聞いております。その後、自発ラマン散乱測定にとって最大の障壁となる蛍光バックグラウンドの影響が少ない非線型ラマン分光をもちいた実験にも積極的に取り組まれました。特にこの研究は、ピコ秒レーザー、広帯域ナノ秒レーザーおよびストリークカメラを組み合わせることにより、広い波数領域にわたるラマンスペクトルの形状とその時間挙動の様子を一度に二次元イメージとして得ることができる画期的な二次元時間分解CARS (2D-CARS) 分光法の開発へと発展しました。この斬新で独創的な分光装置をもちいて全トランス型および9シス型レチナールの光異性化ダイナミクスを解明されました。これら二つの異性体の2D-CARSイメージを見較べたとき両者の異性化ダイナミクスの違いは歴然にして一目瞭然であり、分子構造変化を文字通り手に取るように把握することができます。この実験の武勇伝を語られるときの表情は抱きつづけた《8ミリフィルムの夢》を一つ形にできた満足で満ちあふれていたということを印象的に覚えています。

分子研に異動されてからはフェムト秒領域での研究を新たに展開されました。これ以降の研究業績については本誌研究紹介にご自身が寄せた解説と重複しますので詳述を控えますが、これらの研究におい

てもフェムト秒光パルスの特徴を最大限活かした分光手法の開発に前向きに取り組み続けてこられました。特にフェムト秒パルスの瞬撃性、コヒーレント広帯域性を利用した時間領域振動分光に挑戦し、分子の基底状態、次いで励起状態での振動(核)波束運動の観測に成功されています。またフェムト秒蛍光・吸収分光をもちいた高電子励起状態の緩和および光プロトン移動反応の研究、ピコ秒自発ラマン散乱分光をもちいた高速光異性化反応の研究も行い、実験データにもとづいた定量的な議論を通してこれら光化学過程のダイナミクスとメカニズムの詳細を解明されています。

これらの業績からわかるように、田原助教授はサイエンスに対するひたむきな情熱を原動力にして常に新しい研究領域に挑戦し続けてこられました。本質を見抜き問題を一刀両断する鮮やかな研究ぶりは分子研七年目を迎えてますます冴えをみせています。分子研の廊下に『よっしゃ!』という歓声が響きわたり夢がまた一つ現実のものになることを、共同研究者として心から願っております。

(竹内佐年 記)

岩田耕一助教授に 森野基金

このたび、関連領域研究系の岩田耕一客員助教授に第16回分子科学研究奨励森野基金が授与されました。本賞は分子科学の分野で活躍する前途有為な



研究者に送られるものです。岩田助教授は東京大学理学系研究科博士課程を修了後、米国オハイオ州立大学、神奈川科学技術アカデミー、早稲田大学を経て、現在、東京大学理学系研究科に在籍しておりますが、今年度から客員助教授として分子研においても新たな研究を展開されております。今回の受賞はこの期間全体にわたって精力的に研究されてきた「時間分解赤外・ラマン分光法の開発と高速溶液反応動力学のモデル化」に関する業績が高く評価されたものであり、心よりお祝い申し上げます。

岩田助教授は、凝縮相での過渡分子種の構造および動的挙動の解明のために極めて有効な時間分解赤外分光法の確立に向けた計画に早くから参画し、分散型赤外分光器を用いたマイクロ秒時間分解赤外分光計を開発されました。開発当時においても、この分光装置によりいわゆる指紋領域を含む4000から800 cm^{-1} の広い波数領域にわたって吸光度変化 10^{-4} という高い検出感度を達成されたと聞いております。この独自の分光システムを用いてポリアセチレンフィルム中の荷電ソリトンの生成・消滅過程を観測し、その機構の詳細を明らかにされました。このような分散型分光器をもちいた時間分解赤外分光装置は現在光化学や物性物理化学の広い分野で標準的測定手法の一つとして利用されていますが、この手法の発展は岩田助教授の先駆的な研究に負うところが大きいといえます。

その後、博士研究員としてオハイオ州立大学に赴く機会に恵まれ、そこで高繰り返し(MHz)ピコ秒時間分解ラマン分光システムの製作、性能評価およびその応用に取り組みされました。帰国後もその経

験を生かしてピコ秒時間分解ラマン分光システムを立ち上げ、それをもちいて主として溶液中の分子の超高速諸過程についての研究を開始されました。こうした高繰り返しのシステムの開発は過渡ラマンバンド形状の信頼できる測定を可能にしたという意味で、過渡ラマンスペクトルの質的な向上をもたらしました。現在のピコ秒時間分解ラマン分光計は、世界的に高繰り返しのシステムが主流となっていますが、この手法の確立に岩田助教授がパイオニアとして果たした役割は極めて大きいといえます。

岩田助教授は自ら開発した上記ピコ秒時間分解ラマン分光計を駆使して、溶液中での溶質・溶媒エネルギー散逸過程と溶媒和構造の解明に積極的に取り組まれました。中でも、溶液中での最低励起一重項(S_1)状態にあるトランススチルベンのラマンバンドの位置および形状が光励起からの時間に依存して変化することを見出し、これが高温の S_1 トランススチルベンが冷却する過程に対応することを実験的に示すことに成功されました。この「ピコ秒ラマン温度計」を用いて溶質の冷却速度と溶媒の温度拡散率の間に強い相関があることを明らかにし、溶質から最近接溶媒へのエネルギー移動が2-3ピコ秒以内に起こるという結論を得られています。さらに拡散方程式を基にした定量的モデルを考案することにより観測した冷却曲線を再現し、最近接溶媒分子の数を5-12個と見積もることに成功されました。

このように溶液中での光化学過程における溶媒の役割およびその微視的描像に注目したユニークな研究が続けられる中で、さらに光励起されたトランススチルベンやピフェニルが四塩化炭素溶媒分子と超

高速（数ピコ秒）な二分子反応をおこなうことも新たに発見され、赤外および可視吸収スペクトルの時間分解測定結果から Cl 付加物と CCl_3 ラジカルが生成していることをつきとめられました。この反応ダイナミクスが拡散律速反応の Smoluchowski および Collins-Kimball モデルで定量的に記述できることから、数ピコ秒の時間領域でも溶液中の分子の並進運動を統計的な拡散運動と考えると良いことを実証されました。

これらの研究業績が示すように、岩田助教授は新たな分光測定装置を開発するとともに、その装置性能を最大限生かした常に挑戦的な実験により、凝縮相光化学過程の機構およびダイナミクスを振動分光学の鋭い切り口で次々と明らかにされてきました。ここに書ききれなかった研究業績も含めて振り返るとき、岩田助教授の先見の明と考察の緻密さに改めて感心せずにはおられません。分子研という新たな活躍の場を広げて、今後ますます一層のご活躍をお祈りする次第です。

（竹内佐年 記）

相田卓三教授に 名古屋メダル銀メダル

本研究所錯体化学実験施設・配位結合研究部門（客員研究部門）を平成 11 年度より担当されている相田卓三教授（東京大学大学院工学研究科教授）が 2000 年度名古屋メダル銀メダルを受賞されま

した。心よりお祝いを申し上げます。

名古屋メダルは国際的に見て現在の有機化学研究の中心地の一つである名古屋の名を冠した国際賞であり決して地域に限定された賞ではありません。金メダルは国際的に偉大な業績をあげられた研究者に対し、銀メダルは優れた研究業績をあげ今後の発展が期待される Rising Star に対し、それぞれ授賞されます。1956 年生まれの相田卓三氏はまさに本賞にふさわしい卓越した若手研究者です。相田氏は既に日本化学会進歩賞、高分子学会賞、Wiley 高分子科学賞、IBM 科学賞を受賞され、また更に 1996 年からは PRESTO プロジェクトの推進を担い、2000 年からは ERATO プロジェクトの研究リーダーとして活躍されています。その研究者としての歩みの全ての世代においてトップランナーとして走り続け、現在では疑いなくわが国の科学研究の牽引者の一人といえます。

メソポーラス無機材料の特性を巧みに利用した高分子合成、有機 dendrimer 化学の独自の展開、生体関連の分子認識や触媒作用、などその業績は多岐に渡り、膨大且つ高水準です。本稿では今回の受賞講演において同氏が紹介された「Novel Nanostructured Polymeric Materials」について簡単に紹介します。

近年ミセルを鋳型とすることで高度に制御された微細な細孔径をもつハニカム構造シリカが容易に調製できるようになり、メソポーラスシリカと呼ばれます。相田氏は独自に調製したメソポーラスシリカの細孔内をチタノセン型の前周期遷移金属錯体によって修飾しました。この修飾メソポーラスシリカを鍵触媒としたエチレンの重合反応では、エチレンの



重合・成長は細孔径により制御され、30–50 nmの径をもつポリエチレン繊維が生成します。従来のポリエチレンよりも2桁～3桁も微細なこの繊維はシリカ細孔からまるで「トコロテン」のように押し出されながら成長してきます。先端的無機材料の特性を巧みに利用することで、古典的な高分子合成反応に新たな地平を拓いた革新的研究です。

既に相田氏は天頂高く輝く1等星です。しかし今回の受賞は「Rising Star」に対するものですから、同氏はまださらに上に昇っていくことを意味しています。手が届かないほど高く昇っても、その分だけ輝きも増すでしょうから見失う心配はなさそうです。

(魚住泰広 記)

の付加を行ないました。また、ストラティファイド素材として注目されるフラ-レン球面の内側に金属原子を取り込んだ金属内包フラ-レンの新たな構造特性を明らかにしました。さらに化学変換に世界に先駆けて成功し、この分野に画期的な新展開をもたらしました。

以上の功績に対して、新潟日報社から新潟日報文化賞が送られました。分子構造第二部門客員教授として、分子研におかれても研究をされておられ、分子研として今回の受賞をお祝いしたいと思います。

(加藤立久 記)

赤阪健教授に 新潟日報文化賞

フラ-レンは空洞閉殻構造を持つ炭素多面体分子です。これらフラ-レンは、その特殊かつ新規な分子構造に由来する種々の物理的、化学的特性を示す新かご状炭素素材として非常に魅力ある物質群であり、近年多彩な研究が展開されています。赤阪 健教授は、“フラ-レン球面の外側および内側の化学”の基礎研究として、フラ-レンおよび金属内包フラ-レンの分子構造と物性の解明を行い、この分野に画期的な新展開をもたらしました。フラ-レン球面の外側へのケイ素基の導入法を初めて確立し、種々の誘導体の興味ある構造の解明、新しい電子的特性

分子動力学研究部門 (分子エネルギー変換研究部門)

莫 育俊 教授

分子集団動力学研究部門 (分子エネルギー変換研究部門)

Prof. GRITSENKO, Victor V.

相関分子科学研究部門

金 哲 教授

分子制御レーザー開発研究センター (極端紫外光研究部門)

Prof. LUPEI, Voicu

莫 育俊 教授

Mo Yu-Jun(莫育俊)教授は1939年中国河南省に生まれた。1962年北京物理学学科を卒業し、すぐに北京のAcademy of Science物理学研究所のスタッフとなった。そこでは強磁性の研究をした。1975年までの13年間YIG(Yttrium Iron Garnet)のマイクロ波装置を用いてマイクロ波磁性の研究をした。その後4年間強磁性の緩和の研究をし、Garnetの結晶成長の研究に着手した。1979年から82年にかけて、できた結晶の磁性の異方性を調べるところから光散乱との関わり合いが始まった。

1982年頃に、Surface Enhanced Raman Scattering (SERS)というテクニックが銀電極に吸着した分子の研究で注目されるようになっていた。1982 - 1984、1986 - 1988、1992 - 1993年と3回にわたりスイス、チューリッヒにあるETHの固体物理学学科のP. Wachter教授の研究室に出かけSERSのメカニズムを明らかにすると共に超薄膜をSERS

で調べる研究をした。その間北京の物理学研究所でもSERS観測装置を組立て、界面活性剤、DNA、高温超伝導体、フラーレンの測定をした。今日でも中国でラマン分光というとSERSを意味するぐらいSERSは中国でさかんに用いられている。1993 - 1995年と1995 - 1996年の2回、イタリアのローマにあるCNR Istituto di Metodologie Avanzate InorganicheのG. Mattei博士の研究室を訪れ、フラーレンのSERSやSurface Enhanced Infrared Spectroscopyの研究をした。その途中1995年に6ヶ月韓国TaejonのKorean Advance Institute of Science and TechnologyのJ.-J. Kim教授の研究室でイオン埋込シリコンのラマン分光の研究に携わった。そして1996年から河南大学物理学学科の教授となり現在に到っている。そして1997年にはスイスETHから自然科学のPh. D.を取得した。日本の文学博士並みの高年令学位で、この事からもわかるようにMo教授は大変な努力家であり、日曜も働き続けるがんばり屋である。河南大学に教授として移ってからは充電可能なLi電池、ナノ粒子、フラーレン等のラマン分光の研究



を手がけている。

これらの研究活動を通して、1979年12月に“ In-Substituted BiCaVIG Single Crystal ”の研究に対し National Scientific and Technological Inventive Awardを受賞、また1990年には“ The Studies of Mechanism and Applications of Surface Enhanced Raman Scattering ”に対し、Award of Natural Sciences in Chinese Academy of Sciencesを受賞している。現在河南大学の学術委員会委員として大学の運営にも関与し、また中国物理学会光散乱専門委員会委員として学会の役員もしておられる。分子研ではデンドリマー鉄ポルフィリンに赤外光を照射したときにポルフィリンのどの部分の温度がどの程度上昇するかをアンチストークスラマン分光で調べる実験に奮闘中である。

(北川禎三 記)

Prof. GRITSENKO, Victor V.

Gritsenkoさんとは昨年の12月に私がロシアのChernogolovkaで行われた研究会に出席したときに初めて会いました。それ以前より、研究上では他の共同研究者を経由して共同研究者の関係にあり、共著の論文も幾つかあったのですが、会うまでそのことも余り認識しておりませんでした。私にとって初めてのロシアの訪問でありましたし、ロシアは結晶学が盛んで、多くの同業者にもお会いしましたので、Gritsenkoさん個人よりも周囲の研究者の特徴ある

雰囲気強い印象を受け、1年間の滞在が順調に行くことを祈りながら帰って来ました。しかし、Gritsenkoさんが実際5月の中旬に書類に書いた日を律儀に守り、1日も遅えずに分子研にやって来て、その直後からはじめた熱心な研究ぶりをみて、何よりも仕事を第一に考える、積極的な研究者に会えた事に気づき、非常に嬉しく思いました。これまで、X線結晶構造解析は堪能でも、ご本人が扱っているごく一部の物質にしか興味を示さないX線結晶学の専門家をよく見かけましたし、一方、極く通常の構造解析は誰もが自分でする時代になりましたので、伝統あるロシアのX線結晶学の専門家であるGritsenkoさんが分子研でどのように研究を始めるのか、半分心配しておりました。しかし予想に反し、岡崎に来られて2日目に若い人に手伝って貰いながらロシアから持参した結晶でこれまで全く自分では経験がなかった筈の端子付けを器用にやり、電気伝導度測定を始めたのには驚きました。また、物質作成もロシアでは殆どやったことが無かったとのことですが、若い人に手伝ってもらいながらせっせと試みています。奥様のOlgaさんも同じロシアの科学アカデミ - の研究所の研究者で、私たちの研究室で若い人に手伝って貰いながら合成実験を試みています。

ご家族で三島ロッジに滞在しておられますが、二人のお嬢さんの内、8歳のお嬢さんは夏休み後の9月より近くの小学校に通っております。英語も話しますが、それに加えてまだ、2ヶ月も経っていないのに、日本語をかなり話すのには驚きましたし、何より小学校の宿題を日本語で書いて提出し、満点を

貰っているのには感心しました。下の3歳のお嬢さんも保育園が非常に楽しいようで、会話の中に日本語が自然に飛び出して来るようです。2001年の5月までの滞在ですが、Gritsenkoさんの研究が順調に進んで行く事を望んでいます。

(小林速男 記)

金 哲 教授

金哲先生は、韓国のSeoul National University of Technologyの助教授です。韓国のソウル大学とトップを競う延世大学卒業後、米国のUC San Diegoに移られ、ポルフィリン化学で有名なT. G. Traylor教授の下で学位を取得しています。その後、Minnesota大学で生物無機化学のビッグネームであるLawrence Que教授の下で3年間ポスドクを経験されました。研究は、メタンモノオキシゲナーゼによる酸素の活性化と不安定中間体のキャラクタリゼーションで、現在でも我々の分野で激しい競争になっているテーマです。最終的に1996年に帰国され、現在のポジションに就いているというのが大まかな研究経歴です。

私が初めて金先生にお会いしたのは、UC San Diegoでセミナーをした時で、Traylor先生とのディスカッションの時に彼を紹介され、学位論文の中で私の研究とオーバーラップする部分について意見交換したことを覚えています。その後、ミネソタ大学に行ったときにQue先生の所で久しぶりに再開し、

3年ほど前に韓国の化学会の年會に呼ばれたときに、また逢うという具合で、彼の行き先々で必ず再開するという奇妙な縁が出来てしまいました。さらに、韓国の梨花女子大の先生と共同研究をしていたら、金先生が向こうのメンバーにいつのまにか入っているという腐れ縁(?)もあって、今回、客員としてお出で頂いているという次第です。

金先生は、酸化反応に関与する金属酵素のモデル系による研究を行っていますので、今回の共同研究では、金属蛋白質自身を用いた研究に参加していただいています。彼によりますと、

"Before I came over here, I was very curious of research utilities, living style, research systems, and etc of IMS. While I stayed in IMS, I was very impressive to the research capability of IMS. Research environment and utilities were excellent for doing experiments, and not worse than those of UCSD and University of Minnesota in USA and even better in some cases."

と言うことで、研究と生活を楽しんでいらっしゃいます。

(渡辺芳人 記)

Prof. LUPEI, Voicu

レーザープラズマ及び輻射物理国立研究所(ルーマニア)から、2000年10月より2001年4月まで分子研に滞在予定のProf. Lupei, Voicuは、1968年にCluj大学より固体物理に関する研究でPh.Dを



取得後、原子物理研究所にて主任研究員、固体量子エレクトロニクス研究室室長、さらには1998年3月から2000年9月までは原子物理研究所所長 (General Director) などの重要な地位を歴任されてきました。彼はこれまでも米国カルフォルニア大学 (Argonne National Laboratory)、仏国リヨン大学、独国ハンブルグ大学での長期客員研究員(半年以上)、その他にもスイス、仏国、英国、独国、米国、露国、中国、伊国などで短期客員研究員として各国に滞在し多くの友人を得ています。現在でもリヨン大学やパリ大学 (the University of Paris VI) での客員教授、ブカレスト大学での準教授などを兼任されています。また Academy of Sciences of the USA, European Community, DAAD Germany, TEMPRA France. Member of SPIE, IEEE and ERES.のメンバーでもあり、今日でも幅広い分野でアクティブに活動されています。

彼の興味は原子や固体物理、不純物添加結晶、固体レーザー材料物理、量子エレクトロニクス (レーザー発光、スイッチング、非線形プロセス) (レーザー) 高分解分光、磁気共鳴、物質との輻射相互作用などであり、これらの分野で500以上の学術論文を報告されています。また、技術的分野にも造詣が深く、結晶成長、固体レーザー構成や装置、レーザー応用 (金属加工、医療、レーザー誘起蛍光など) で10以上の特許も所有しているなど多方面での活躍が伺い知れます。彼の分子研における滞在期間は半年と短く、すでに残すところ4ヶ月となりましたが、できれば1人でも多くの皆さんとの親睦を深めることを期待しています。短い期間ですが宜しく御

願いたします。

(平等拓範 記)



MO Yu Jun
莫 育 俊

電子構造研究系分子エネルギー変換研究部門 客員教授
(分子構造研究系分子動力学研究部門 北川グループ)

I graduated from Physics Department of Peking University (1962) and then became a staff member at Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences (Beijing). Since 1985, worked as associate professor at that Institute. Obtained Ph.D. in Nature Science from ETH-Zurich, Switzerland (1997). 1996-present time, professor at Physics Department of Henan University. I worked with Prof. Peter Wachter at Lab. of Solid State Physics, ETH-Zurich for 4 years in the period of 1982-1993 as a visiting scientist, as a visiting professor for 2 years at Instituto di Metodologie Avanzate Inorganiche, CNR, Roma, as well as in KAIST (Korea 1995 Jan.-July).

Research interests: Raman spectroscopy, surface enhanced Raman scattering and magnetism of condensed matter; study of magnetic crystal and microwave device. At IMS (Prof. T. Kitagawa group science May 2000), research concerns resonance Raman study of dendrimer metalloporphyrines.



LI, Zheng-Qiang

分子構造研究系分子動力学研究部門 文部省外国人研究員

I graduated from Biochemistry Department of Jilin University in China (1984, BS) and received MS (1990) and Ph.D. (1994) of Biophysical Chemistry in the same University. From 1995 to 1996, I worked as a post-doctoral fellow at the Chemistry Department of Hong Kong University of Science & Technology under supervise of Prof. YU Nai-Teng. Since 1997, I worked as an associate professor in the Key Laboratory for Molecular Enzymology and Engineering of Education Ministry of China, in Jilin University.

My research interest is vibrational spectroscopy of protein and enzyme. Since May of 2000, I have been a visiting scientist of Mobusho at Prof. T. Kitagawa group and the project is about the study of soluble guanylyl cyclase.



GRITSENKO, Victor V.

電子構造研究系分子エネルギー変換研究部門 客員助教授
(分子集団研究系分子集団動力学研究部門 小林グループ)

Academic Record:

1989: Graduated from the Physical Department at the Rostov-on-Don State University, Russia.

1989-1994: Studied at the Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences (IPCP RAS) for Ph.D on “X-ray structural investigation of the organic conductors based on bis(ethylenedithio)tetrathiafulvalene with metal halogenides” under Prof. O. A. Dyachenko.

1994-2000: Scientific researcher, Lab. of Crystal Chemistry at IPCP RAS. I have been published 35 science articles and 15 poster communications from 1991 to 2000.

2000-present: Associated Professor at the MAD Department at the Institute for Molecular Science in Prof. H. Kobayashi group.

Interests: X-ray analysis, crystallography, molecular conductors and superconductors based on the different donor molecules, fullerenes; search of structural laws for an explanation of mechanism of the electrical conductivity in molecular conductors and superconductors. Now I am engaged in synthesis, X-ray analysis and conductivity measurement of new molecular conductors with magnetic anions and hope to find a new correlation of “structure-properties” in these type of compounds.



GRITSENKO, Olga

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 外国人特別協力研究員

Academic Record:

1985: Graduated from the Chemical Department at the Saratov State University, Russia.

1989-1993: Studied at the Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences (IPCP RAS) for Ph. D on “The study of interaction of polyaniline and polypyrrole conducting polymers composites with gaseous substances.” under Prof. M. L. Chidekel’.

1994-2000: Scientific researcher, Lab. of Metallo-Complex Catalizator at IPCP RAS.

2000-present: Visiting Scientist at the MAD Department at the Institute for Molecular Science in Prof. H. Kobayashi group.

Interests: Synthesis and study of catalitical activity of metallocomplexes mimicking monooxygenase-ferments. Now I am engaged in the synthesis of new molecular conductors with new anions.





CHOE, Jong-In

電子計算機室 文部省外国人研究員

Jong-In Choe was born in Seoul, Korea in 1953. He took his B. S. from Seoul National University in 1975, and received Ph. D. in physical chemistry in 1981 from University of Kansas, U.S.A. with Professor Marlin, D. Harmony. He did postdoctoral work in the field of physical organic chemistry with Professor R. L. Kuczkowski at University of Michigan, U.S.A. (1981-1983). He had visited the University of Arizona studying Fourier Transform Spectroscopy in the Professor S. G. Kukolich laboratory from 1984 to 1987 (summers and winters). His research interests are in computational chemistry, quantum chemistry and molecular spectroscopy. He has been as a professor at the department of chemistry in Chung-Ang University at Seoul, Korea since 1983.

Research activities at IMS in Prof. Aoyagi's group is in the studies of designing new host systems which can selectively interact the target guest and perform intriguing molecular recognition processes. Calixarene is one of the attractive host systems, and using ab initio calculation method we evaluate the property of this molecule.



HOCKE, Heiko

錯体化学実験施設錯体触媒研究部門 学振外国人特別研究員

Graduated at the Martin-Luther-University (1995). Ph.D. Thesis "Generation of areneimidosulfonic peracids – a new class of chiral oxidants for diastereo- and enantioselective epoxidation reactions" (1998). Then I worked in the group of Prof. R. Csuk/Halle on the total synthesis of UCK14.

From May 1999 to August 2000, I joined as a postdoctoral fellow the research group of Prof. B. Giese at the University Basel/ Switzerland. During this time, I worked on photoinduced radical ring closing reactions of small peptide units.

Since September 2000, I'm a JSPS fellow at the IMS (Prof. Y. Uozumi's group). My research interests are focused on syntheses of solid supported catalysts and their use in asymmetric oxidation reactions.



かわ ぐち ひろ ゆき
川 口 博 之

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 助教授

平成12年5月に名古屋大学大学院理学研究科より転任しました。生まれは大阪です。6年程名古屋で勤めて、今回こちら岡崎にきて名古屋と三河の違いが少し解った様な気がします。専門は錯体化学ですが、分子研で研究できる機会を活かし新しい事に挑戦したいと思っています。今後の自分の核となる研究が行える様に努力していくつもりですので、よろしくお願いします。



か とう つよし
加 藤 毅

理論研究系分子基礎理論第二研究部門 非常勤研究員

千葉県出身。平成8年3月、東北大学大学院理学研究科博士課程後期修了。5月より台湾原子與分子科学研究所にて博士後研究員、同年10月より平成11年9月まで電子技術総合研究所特別研究員、10月より東北大学反応化学研究所助手。今年5月から分子研谷村研究室でお世話になっています。凝縮相中分子の量子ダイナミックスに関する研究を行っていく予定です。新しい環境で視野を広げていと考えております。よろしくお願いいたします。



なか お りゅう
中 尾 竜

錯体化学実験施設錯体触媒研究部門 受託研究員

平成7年3月名古屋市立大学大学院薬学研究科博士前期課程修了。同年4月ゼリア新薬工業(株)に入社。平成12年5月より魚住泰広教授の下で受託研究員としてお世話になっています。新規両親媒性固相担持遷移金属錯体の開発と主に水中での反応について研究しています。短い期間ですが、優れた環境の中、幅広い知識を身に付けたいと考えています。よろしくお願いします。





KOVALENKO, Andriy F.

理論研究系分子基礎理論第三研究部門 助手

Graduated from Lviv State University, Ukraine (1985). Fellow, Postgraduate student at Bogoliubov's Institute for Theoretical Physics, Kiev, Ukraine (1985-1992). Ph. D. in Theoretical and Mathematical Physics from Lviv State University (1993); advisor Dr. Sci., Prof. Myroslav Holovko. Fellowships of the International Scientific Foundation (1993, 1994). Postdoctoral position at the National Autonomous University of Mexico (1995-1996); working with Prof. Douglas Henderson. Scientific Researcher, Senior Scientific Researcher at the Institute for Condensed Matter Physics, Lviv, Ukraine (since 1993). Visiting Professor at the IMS in the group of Prof. Fumio Hirata (1997-1998). Fellowship of the Japanese Governmental Program "Research for the Future," IMS (1998-1999). Research Associate at the Chemistry Department of the University of Utah, USA (1999-2000). Joshu position in the group of Prof. Fumio Hirata, IMS (since 2000).

Scientific Interests:

Ion-molecular liquids and solutions. Chemically active liquids, polymers, colloids, and biomolecules in solutions. Liquid crystals. Adsorption of molecular liquids on crystalline surfaces and in porous media. Electronic and classical properties of electrode-molecular liquid interfaces. Charge transfer reactions in solutions. Chemical reactions in solutions under ambient and supercritical conditions.

Shallow impurities, Wannier excitons, and exciton-impurity complexes near semiconductor-insulator and semiconductor-electrolyte interfaces. Localized and extended states.



池 滝 慶 記

電子構造研究系電子状態動力学研究部門 民間共同研究員

(派遣元所属：オリンパス光学工業株式会社基礎技術研究所 主任研究員)

上智大学大学院理工学研究科修士課程修了。本来は電子衝突法の研究に従事していました。入社後は、カラープリンターの色再現法の研究や軟X線領域の光源・光学素子に関する研究開発などを行ってきました。現在、分子科学研究所では、2色レーザー光を用いた顕微鏡法の研究開発を行っております。皆様の多岐にわたるお知恵を拝借して、特色ある研究テーマに発展させたいと思いますので宜しくご指導をお願いいたします。



ね ぎし ゆう いち
根 岸 雄 一

電子構造研究系基礎電子化学研究部門 助手

慶応義塾大学理工学研究科博士課程中退、慶応大学工学部化学科助手を経て、平成12年7月より現職。これまでは主に気相中半導体クラスターの電子状態に関する研究に従事してきました。現在はサイズ選択された金属超微粒子の合成及びその物性に関する研究を行っています。趣味はスポーツ観戦と海外旅行。スポーツの中でも陸上競技はかなりのマニアです（月刊陸上競技マガジンは15年前のものから全て揃えてもっています）。



おお しま やす ひろ
大 島 康 裕

電子構造研究系電子構造研究部門 客員助教授

現首都（圏）から前首都に移り住んではや5年、現在は周波数領域と実時間領域の各種レーザー分光法を併用して、気相クラスター（主に芳香族化合物を含むもの）の構造と反応性を研究しています。あまりの運動不足の解消を目指し、ごく時たま、思い出したように寺院巡りをかねて近場を散策したりしています。分子研の方々と協力して、1 + 1が2以上となるような研究を目指したいと思っています。



はつ い たか ぎ
初 井 宇 記

極端紫外光研究系基礎光化学研究部門 助手

平成11年3月総合研究大学院大学博士課程修了、東京大学理学部、ウブサラ大学物理学科を経て8月より分子研にお世話になっています。これまでは金属錯体・有機伝導体の軟X線を使った分光法で研究してまいりました。これからは視野を広げて、分子の軟X線の吸収・脱励起過程の研究に携わっていきたいと考えています。どうぞよろしくお願いします。



なか い ひで たか
中 井 英 隆

関連領域研究系関連分子科学第一研究部門 非常勤研究員

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、10月からは非常勤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、「水の中での有機金属化学」という非常にクリーンな研究に携わっております。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致します。





しみず ゆういちろう
清水 雄一郎

関連領域研究系分子クラスター研究部門 非常勤研究員

平成11年3月に東北大学大学院理学研究科を修了し、学振特別研究員を経て、10月から笠井先生のもとで研究させていただくことになりました。分子研では特殊六極電場法による高密度の配向分子ビームや高密度配向クラスタービームを発生するビームラインを新たに試作し、空間的に配向した分子及びクラスターを用いて内殻励起分子の立体ダイナミクス研究を行う予定です。今後ともよろしくお願いします。



GRAAF, Harald

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 非常勤研究員

I received my Diplom (Master) in 1997 and my Doctor degree (Ph.D.) in Physical Chemistry in 2000 at the Institute of Applied and Physical Chemistry, University of Bremen, Germany.

My research interests are the electrical and optical properties of organic molecules with semiconductor behavior and their technical applications.

At the IMS (Prof. Tada's group) I want to investigate the electrical properties of small areas of molecules as well as single molecules covalently bound on doped silicon.



MORÉ, Sam Dylan

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

My name is Sam Dylan Moré and I have been actually already 2 years at the IMS, as a JSPS fellow in the group of Prof. M. Kamada. Since October 2000 I belong even directly to the IMS as a IMS fellow in the group of Prof. T. Urisu.

In this new group I will continue to work with semiconductors, and so remain in the field of surface science and connected to the UVSOR facility. On the other hand side, we are embarking on a new project and plan to build self-assembled layers (SAM) and superstructures of those with bio-molecules. I am looking forward to new exiting fields.

Apart from that I am living in Okazaki with my daughter, and learn both Shogi and Judo. As I have been here for a while already I hope I can be of some help to new visiting foreign colleagues, who do not know Okazaki yet.

平成12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
鈴木和治	ヘテロ原子を含む有機アクセプター分子の合成	理学	H12. 9.29

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
安藝理彦	Resonance Raman Studies of Cytochrome <i>c</i> Oxidase and Heme-Binding Protein ²³	理学	H12. 9.29
幡野明彦	金属イオンにより誘起される人工DNAの自発的集合化	理学	H12. 9.29
森下泰全	Bisbidentate型架橋配位子を用いた集積型金属錯体の合成と構造 - 自然分晶する不斉環状亜鉛四核錯体	理学	H12. 9.29
曹紅花	配位結合により塩基対を形成する人工カテコール型ヌクレオシドの合成と機能化	理学	H12. 9.29
PICHL, Lukas	Analytical Treatment of Some Quantum Transitions in Molecular Dynamic Processes	理学	H12. 9.29

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
売市幹大	非平面有機ドナーの伝導性電荷移動塩の構造と物性に関する研究	理学	H12. 9.29