

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

表紙写真説明

左上；第9回分子科学研究所一般公開
(本文36ページからに関連記事)

左下；実験室点描

右上；分子研に降る雪

山の向うの化合物

見かけは簡単そうで出来てしまえば電子的に安定であるのに合成がやたらと手間がかかり収率の極端に悪いものを私はこう呼んでいる。昨今の化学合成の進歩にも拘わらずこの種のものは特に重遷移金属に多いようである。

一例をあげよう。タングステンのビス・ベンゼン錯体、 $W(C_6H_6)_2$ はサンドイッチ型有機金属化合物として極めて基本的なものであるが実際に化学合成は1960年に行われたものの、3ページにわたるドイツ語の実験の部を読むと非常に困難であり収率はわずか1.8%である。しかし、1gの化合物を得ているのは素晴らしい努力の結果といえる。この初めての合成より14年後のタングステン蒸気を利用する“物理合成”によって収率は約30%に上がったがタングステン金属の著しい不揮発性の為にこの方法も微量の合成にしか用いられていない。

一方、フラーレン合成については原理的に類似の装置を用いて現在かなりの量が炭素から物理合成されている。Kroto-Smalleyの初めての合成では、ごく微量しか得られなかったので『山の向う』と私は思っていたが、その後の合成面での著しい発展によって容易に行き来できる大きな分野へと成長したのである。

こう書いてくると物理合成の方がはるかに有利であると思われるかも知れないが、実際には金属蒸気法によって作られた化合物の多くが後に化学合成されている。実例としては、モリブデンのブタジエン錯体 $Mo(C_4H_6)_3$ がはじめは金属蒸気法で合成されブタジエン配位子の導入に必須の方法と思われたが、ブタジエン・マグネシウムを用いる新しい方法によってモリブデンのほか類似のニオブ、タンタルについても各種の1,3-diene錯体、例えばカチオン性の $[CpMo(butadiene)_2]^+$ や中性の $CpTa(butadiene)_2$ などが合成されるようになっている。

新しい物質の合成は化学の基本である。しかし、コンピュータの恩恵を殆ど受けない分野なので地道な努力の積み重ねによって「山の向う」までようやく道が開ける。錯体研究の中心でもある分子研にさらなる進歩をこの領域に期待している。

大阪大学名誉教授

中村

晃

分子研レターズ43 目次

巻頭言

山の向こうの化合物 中村 晃 1



研究紹介

水中の集団励起と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研究 平田文男 4

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 16

研究室紹介

有機薄膜デバイスと単一分子デバイス 畠田博一 23

分子研に着任して 川口博之 26

流動研究部門紹介

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 笠井俊夫 28

分子研に赴任して 高須昌子 30



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 32

ニュース

分子科学研究所一般公開 中村宏樹 36

第10回分子科学研究所オープンハウス 永田 央 38

分子研を去るにあたり

北の国から 佐藤信一郎 40

通勤電車の中で考えること 山下敬郎 41

流動研究部門を去るにあたり


分子科学研究所の流動教授を終えて 西田雄三 42


外国人研究員の印象記


My stay at the Institute for Molecular Science Olga Drozdova 43

My impressions of the IMS Sam D. Moré 44



	受賞者紹介	
	中村宏樹教授に中日文化賞	46
	田原太平助教授に森野基金	47
	岩田耕一助教授に森野基金	48
	相田卓三教授に名古屋メダル銀メダル	50
	赤阪健教授に新潟日報文化賞	51
	客員外国人研究員の紹介	
	莫 育俊 教授	52
	Prof. GRITSENKO, Victor V.	53
	金 哲 教授	54
	Prof. LUPEI, Voicu	54
	外国人研究者の自己紹介	56
	新任者自己紹介	59
	総合研究大学院大学	
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	63	

	I M S マシン報告	
	高分解能分光器用光学素子表面形状測定装置	64
	遠赤外光用軸外し放物面鏡	65
	研究会報告	67

	分子研コロキウム・分子科学フォーラム 開催一覧	77
	共同研究実施一覧	78
	海外渡航一覧	84
	人事異動一覧	88

水中の集団励起と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研究

理論研究系分子基礎理論第四研究部門 平 田 文 男

1. はじめに

「化学反応」は分子科学の中心的な命題であるが、中でも溶液中におけるそれは大部分の有機化学反応や生体内反応がそれに該当するように、最も身近な化学反応である。また、例えば、蛋白質のフォールディングも広義の異性化反応であり、この場合も溶媒環境が本質的役割を演じている。一方、その重要性に比べて、溶液内化学反応の理論的記述は極めて遅れた段階にある。化学反応の理論的記述にはふたつの側面がある。ひとつは化学平衡であり、溶液内においては反応始原系と反応生成物の自由エネルギーの差で決まるプロセスである。われわれのグループではこの問題に関して、分子性液体の統計力学と非経験的分子軌道法を組み合わせた新しい方法 (RISM-SCF 法) を提案し、有機化学反応を含む様々な化学反応の理論的な解析を行ってきた。化学反応のもうひとつの側面は反応速度あるいはダイナミクスであり、これは反応経路全体が関わる極めて複雑な問題である。とりわけ溶液内では反応に関与する分子種 (反応始原系、遷移状態、生成系) の変化だけでなく、それに対する溶媒の動的な応答を含む極めて複雑なプロセスであり、当グループはこの問題の解明を究極の目標に掲げて研究を続けている。本稿ではこのような方向への第一歩として、最も典型的な溶媒である水そのものと水中のイオンのダイナミクスについて行った最近の研究について概説する。

本節では当グループの研究を紹介する前に、水のダイナミクスに関わる最近の興味深い実験状況について簡単にレヴュ - しておこう。水の集団励起に

関して比較的最近二つの興味深い報告がなされた。^{1,2)}

一般に、液体中の密度揺らぎの周波数 (ω) を波数ベクトル (k) に対してプロット (分散関係) すると、小さな k の極限で直線関係が得られ、その傾きが音速に対応する。すなわち $\lim_{k \rightarrow 0} \omega = ck$ (c は音速) である。水の場合、良く知られているように音速は約 1500 m/sec である。ところが、最近、中性子非弾性散乱実験に基づいて、少し大きな波数ベクトルの領域に通常の音速の約 2 倍の速度をもつ “新しい音響モード” が存在がすることがフランスのグループによって報告された。¹⁾ この音速は通常の氷の音速と非常に近い値をもっている。実は、以前に Stillinger らが分子動力学の方法を使って同様なモードを水中に見出ししており、その研究との関係からその “新しいモード” が水のネットワークの氷様構造のダイナミクスに関係したものであると考えられた。^{1,3,4)} 一方、波数ベクトルの増大に伴うこのような音速の増加は通常の液体 (アルゴンや窒素など) でもいわゆる “正の粘弾性効果” として普通に見られる現象であり、別にことさら水だけに特徴的な新しい音響モードと呼ぶ必要はないという反論も出されている。⁵⁾ 問題はそのような二つのモードがどのようにクロスオーバーするかにあり、最近、イタリアのグループが X 線散乱実験によりこのクロスオーバーが連続的に起きるといった報告を行った。⁶⁾ これは “正の粘弾性効果” という描像に近いように思える。この問題の分子動力学による研究はそれほど容易ではない。何故なら、計算時間上、分子動力学はシミュレートする分子数に制約があり、波数ベクトルをあまり小さくすることはできないからで



ある。この問題に最終的な理論的解決を与えるためには非平衡統計力学に基づく解析的な定式化が必要となる。

水のダイナミクスに関するもうひとつの話題はいわゆる「光学モード」に対応する集団励起である。上に述べた音響モード以外の諸々の集団励起の分散関係は $k = 0$ の極限で ω は有限の値をもち、「光学モード」と呼ばれている。イタリアのValauriらは水の分子動力学シミュレーションから得られる動的構造因子 $S(k, \omega)$ の解析通じて分散関係を求めることに成功し、ひとつの光学モードを取り出した。この集団励起は使用された水分子モデルが剛体モデルであることからして水の回転運動に関わるモードであることは明らかである。²⁾

2. 分子性液体のダイナミクス理論と水中の集団励起^{7,8)}

ここで使う理論的な方法は非平衡統計力学の中で重要な位置を占める一般化ランジェヴァン方程式にその基礎をおいている。一般化ランジェヴァン方程式としてよく使われているのはその遅延摩擦項や揺動力項を現象論的な形式で置き換えたものであるが、そのような理論は少なくとも分子レベルでの化学現象の記述には適さない。液体の統計力学の分野では古くから射影演算子の方法によってこの摩擦項や揺動力項を液体の構造（密度相関関数）と関連づける理論が発展しており、いわゆる単純液体（球形の分子からなる液体）に対しては少なくとも定性的には液体のダイナミクスを分子レベルで記述することが可能となっていた。⁹⁾ しかしながら、分子が形をもっている場合、すなわち分子性液体の場合、問題

はそう単純ではない。分子の並進運動だけではなく分子の回転運動が問題になるからである。このような問題に対する直接的な解決は分子座標を位置と配向を含む6次元の座標系で表わすことであり、実際、そのような記述が最も伝統的な方法として発達してきた。^{10,11)} その最も単純な例が位置と配向のそれぞれをFick型の拡散方程式で表現する方法であり、例えば、NMR緩和理論では現在でもそのような記述が使われている。¹²⁾ このような方法は二つの点で化学現象の記述には適さない。ひとつは重心廻りの回転を3つの角度座標で表わすことはその関数形を極めて複雑なものにするため多原子分子ではすぐに破綻してしまうからである。（多重極展開を考えると一目瞭然）第2の問題はこのように並進と回転を分割するとどうしてもその間のカップリングを陽に記述する必要が出てくることである。これはもちろんnon trivialな問題である。さらに、化学反応のように分子がその形すらも変えてしまうようなダイナミクスに至っては記述がほとんど不可能になってしまう。筆者は液体ダイナミクス理論のこのような状況を分析するうちに、分子座標を「位置」と「配向」で表現するという発想そのものを転換する必要があると考えようになった。すなわち、分子のダイナミクスを互いに相関をもって移動する「原子」の「並進運動」と看做してはどうか考えたのである。このような発想から生まれた理論が1992年に*J. Chem. Phys.*に発表した“Site-Site Smolchowski-Vlasov (SSSV)”理論であった。¹³⁾ 実はこの理論の背景には筆者らがこれまで発展させてきた相互作用点モデルに基づく分子性液体の統計力学（RISM理論）

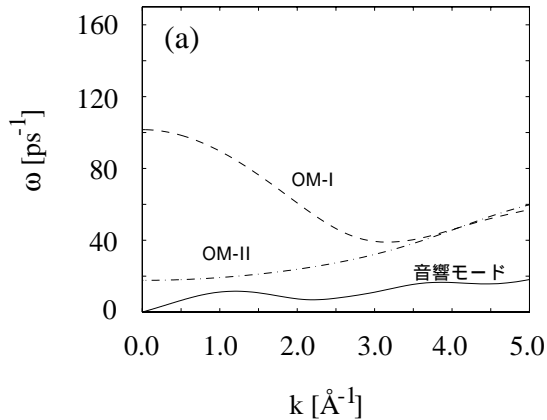
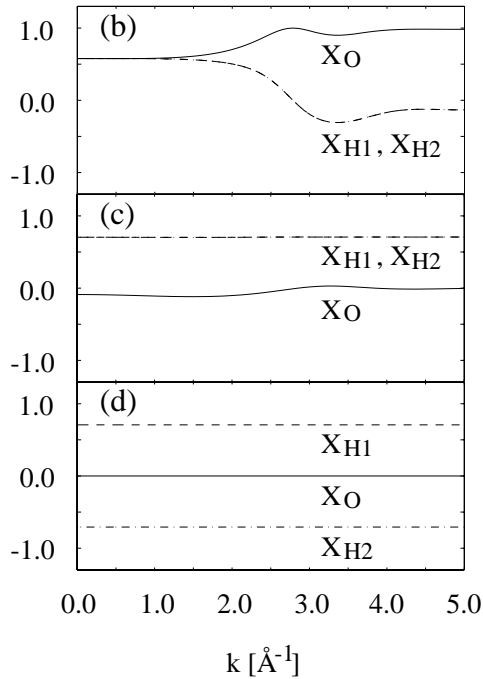


図1 (a) $\langle \omega_k^2 \rangle$ の対角化による基準振動モード。
 (b) 音響モードと(c) OM-Iモードへの寄与は、
 いずれも全 k 領域について $x_{H1} = x_{H2}$ である。
 (d) OM-IIモードへの寄与は、全 k 領域につ
 いて $x_{H1} = -x_{H2}$ である。(b) ~ (d)では、 x_O 、
 x_{H1} 、
 x_{H2} は $x_O^2 + x_{H1}^2 + x_{H2}^2 = 1$ で規格化してあ
 る。



があり、この理論を一般化ランジェヴァン方程式と結合することにより実現したのである。¹⁴⁻¹⁶⁾

上に述べた液体のダイナミクスに関するモデルと理論を定式化する上で位相空間における運動変数 (Dynamic variables) をどのように選ぶかが本質的な問題になる。この点で特に留意すべきことは、液体の構造理論をどのようにダイナミクスに取り込むかであるが、分子性液体の統計力学において最も定式化が進んでいるのは原子間の密度相関関数に基づく理論 (RISM理論) であり、したがって、運動変数のひとつとして原子密度場を採用するのが最も合理的な選択である。すなわち、

$$\rho_\alpha(\mathbf{k}, t) = \sum_{i=1}^N \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i^\alpha(t)] \quad (2.1)$$

原子密度相関関数は以下の式によって定義される。

$$F_{\alpha\beta}(k, t) \equiv \frac{1}{N} \langle \rho_\alpha(\mathbf{k}, 0) * \rho_\beta(\mathbf{k}, t) \rangle \quad (2.2)$$

$$F_{\alpha\beta}(k, 0) \equiv \chi_{\alpha\beta}(k) = \omega_{\alpha\beta}(k) + \rho h_{\alpha\beta}(k) \quad (2.3)$$

このように運動変数を選び、これらの変数に他の自

由度を射影する演算子を P を $PX = C \langle C^* C \rangle^{-1} \langle C^* X \rangle$ のように定義すると、スタンダードな射影演算子のレシピに従って、密度相関関数に対する以下のような一般化ランジェヴァン方程式が得られる。

$$\ddot{\mathbf{F}}(k, t) + \langle \omega_k^2 \rangle \mathbf{F}(k, t) + \int_0^t d\tau \mathbf{K}(k, t - \tau) \dot{\mathbf{F}}(k, \tau) = 0 \quad (2.4)$$

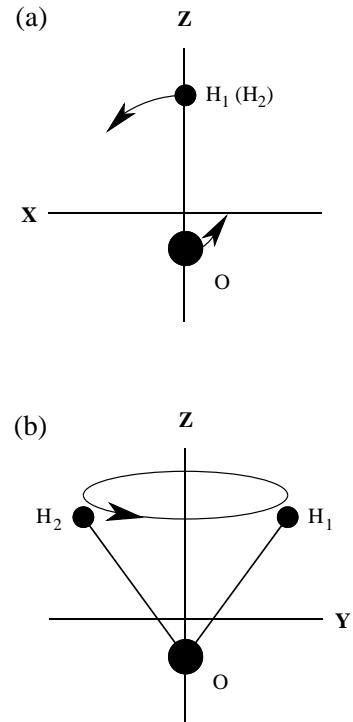
ここで、 $\mathbf{K}(k, t)$ は記憶項であり、太字で記した記号は行列を表わし、その要素は例えば $F_{\alpha\beta}(k, t)$ のような原子を添字にもつ関数である。 $\langle \omega_k^n \rangle$ は $\mathbf{S}(k, \omega)$ の規格化された n 次の振動数モーメント行列であり、以下の式で定義される。

$$\mathbf{S}(k, \omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \mathbf{F}(k, t) \quad (2.5)$$

$$\langle \omega_k^n \rangle \equiv \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega^n \mathbf{S}(k, \omega) \right] \chi^{-1}(k) \quad (2.6)$$

もし、減衰項がなければ(2.4)式は形式的に調和振動の式 ($d^2q/dt^2 + \omega^2q = 0$) と同じである。集団密度揺らぎの“基準振動モード”は、したがって、行列 $\langle \omega^2 \rangle$ (“Hessian”) を対角化することによって得られる。図1(a)にこの固有振動数を波数 k に対してプロットしてある。得られた三つの固有振動数のう

図2 OM-Iモード(a)とOM-IIモード(b)についての、分子運動の模式図。
それぞれ“pitch”“roll”の回転運動に対応している。



ち、ひとつは $k = 0$ の極限でゼロとなり、定義により音響モードに帰属される。非減衰運動の場合この固有振動数の $k \rightarrow 0$ の極限における漸近形は、

$$\omega_{\text{acu}}^2(k \rightarrow 0) = \frac{k_B T}{M \chi(k=0)} k^2 \quad (2.7)$$

となる。ここで、 M は 1 分子当たりの質量である。この $\omega_{\text{acu}}^2(k \rightarrow 0)$ に対する表式は通常の音波のそれ ($\omega = vk$) に一致していることがわかる。つまり、 $\chi(k=0)$ は等温圧縮率に比例しており、したがって、音速の自乗に逆比例している。また、この式の名分に分子の質量が含まれていることから、このモードは分子全体の並進運動に関係していることがわかる。

他のふたつの固有振動数は $k \rightarrow 0$ の極限で消えない。このことから、これらのモードは「光学モード」に帰属される。これらふたつのモードの $k \rightarrow 0$ の極限におけるふるまいは以下の式によって示される。

$$\omega_{\text{OM-I}}^2(k \rightarrow 0) = \frac{2k_B T}{3\chi''(k=0)} (z_H - z_O)^2 \left(\frac{1}{I_x} + \frac{1}{I_y} \right) \quad (2.8)$$

$$\omega_{\text{OM-II}}^2(k \rightarrow 0) = k_B T \left(\frac{1}{I_x} + \frac{1}{I_y} \right) \quad (2.9)$$

ここで I_x 、 I_y および I_z はそれぞれ x 、 y 、 z 軸まわりの慣性能率、 z_O および z_H は分子に固定した座標系における酸素原子および水素原子の z -座標である。(図2) これらの光学モードは上の表現中に慣性能率を含んでいることから分子の回転運動に関係していることがわかる。OM-Iはその表現の中に密度相関関数の二次モーメント、 $\chi''(k=0)$ 、を含んでいる。よく知られているように $\chi''(k=0)$ は系の誘電率に密接に関係している量であるが、集団的な性格をもっている。一方、OM-IIはそのような集団モードを特

徴づける量を含んでいないので、単一分子運動であると考えられる。

各原子からそれらのモードへの寄与は次のようにして評価することができる。行列 $\langle \omega^2 \rangle$ の対角化は系を記述する基底(運動変数)を各原子の密度場 ($\rho_\alpha(k)$) からその線形結合 ($x_O(k)\rho_O(k) + x_{H1}(k)\rho_{H1}(k) + x_{H2}(k)\rho_{H2}(k)$) へ変換することに対応している。ここで、 $x_O(k)$ 、 $x_{H1}(k)$ 、 $x_{H2}(k)$ はそれぞれそのモードに対応する固有ベクトルの要素である。したがって、 $x_\alpha(k)$ ($\alpha = O, H1, H2$) の符号と大きさを解析することによって問題のモードにどの原子がどの程度寄与しているかを調べることができる。

音響モードと光学モードへの各原子からの寄与を図1(b) (c) (d) に示してある。音響モードに関する寄与を見ると小さい k の領域では $x_O(k) \sim x_{H1}(k) = x_{H2}(k)$ であり、このことは音響モードが分子重心の並進運動に関わりをもっていることと符合している。つまり、各原子は同じ重みでこのモードに寄与しているのである。一方、図1(c) から明らかなよ

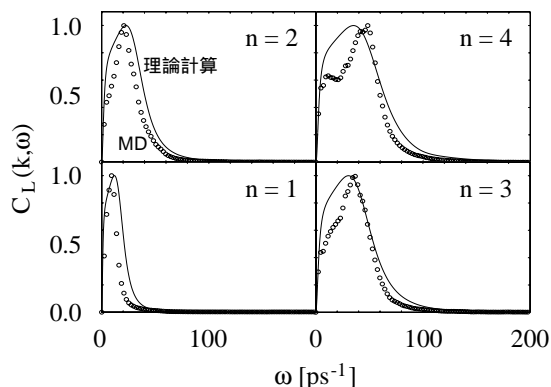


図3 音響モード $C_{L,MM}(k, \omega)$ の流速密度スペクトルの計算結果。 $k_{\min} = 0.3185 \text{ \AA}^{-1}$ および $n = 1 \sim 4$ について、周波数を $k = nk_{\min}$ の関数としてプロットした。 k_{\min} refers to the minimum accessible wave vector from MD simulation.

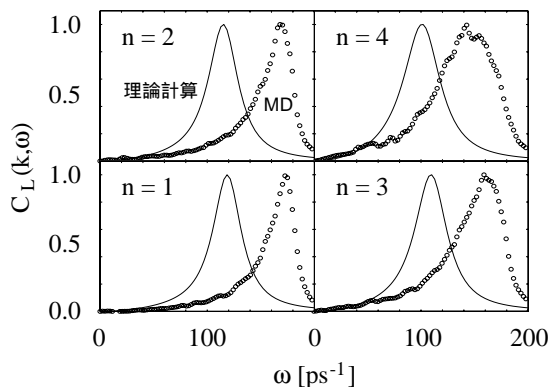


図4 光学モード $C_{L,ZZ}(k, \omega)$ の流速密度スペクトルの計算結果。

うに、OM-Iモードに関しては全波数ベクトルの領域で重心から遠いところにある水素原子からの寄与が支配的である。また、OM-IIに関する図1(d)を見るとこのモードは酸素原子を固定して二つの水素原子が逆位相で動く回転運動に関係していることが分る。さらに詳細な解析を行った結果、OM-IとOM-IIはそれぞれ“pitch”と“rolling”の回転運動に対応していることが明らかになった。(図2)

これまでは減衰項を無視してダイナミクスの基本的な性格に関して議論をしてきたが、ここで減衰項も含む実際のダイナミクスに話題を転じよう。 $\langle \omega^2 \rangle$ によって規定されるこれらのモードは記憶項 $\mathbf{K}_{\alpha\beta}(k, t)$ によってその共鳴の位置がシフトし、また、減衰する。本研究では $\mathbf{K}_{\alpha\beta}(k, t)$ に関して次のような近似を用いることにより $\mathbf{F}_{\alpha\beta}(k, t)$ およびそのスペクトル関数を計算する。この近似は記憶項を指数関数で表現し、その関数に含まれる緩和時間を Lovesey らが原子性液体で行ったやり方を拡張した方法で求めるもので、一切のパラメタは実験結果を使わず密度相関関数の微分量のみから決定される。¹⁷⁾ このよ

うにして得られた結果を計算機実験 (MD) との比較において図3および図4に示す。この図に示したのは以下の式で定義する量で、集団励起のスペクトルを与える。

$$C_{L,XX}(k, \omega) = \sum_{\alpha, \beta} c_{\alpha} c_{\beta} C_{L,\alpha\beta}(k, \omega) \quad (2.10)$$

ここで $C_{L,MM}(k, \omega)$ および $C_{L,ZZ}(k, \omega)$ はそれぞれ質量および電荷に関する縦方向の流速密度のスペクトル (longitudinal-current spectra) であり、 $c_{\alpha} = m_{\alpha}$ (α 原子の質量) および $c_{\alpha} = q_{\alpha}$ (α 原子の電荷) として得られる。 $C_{L,\alpha\beta}(k, \omega)$ は原子に関する対応するスペクトルであり、以下の式で定義される。

$$C_{L,\alpha\beta}(k, \omega) = \frac{\omega^2}{k^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} F_{\alpha\beta}(k, t) \quad (2.11)$$

図3に示されているように、音響モード ($C_{L,MM}(k, \omega)$) に関して上記の理論から得られた結果 (実線) は“実験結果” (○) の特徴を定性的によく再現している。特に、 $n = 4$ の実験結果に観測される低周波数領域のピークは理論ではショルダーとして再現されている。このピークは集団モードではなく、Miura によって指摘されたように、単一分子のダイナミッ



クスに帰せられる。⁵⁾ 図4には光学モードのスペクトル関数 ($C_{L,ZZ}(k, \omega)$) に関する結果を“実験結果”と比較してある。図から明らかのように、理論から得られたスペクトルのピーク周波数は約 50 ps^{-1} ほど低周波数側にシフトしている。しかしながら、全体的なスペクトルの形状は理論によってよく再現されており、ピーク位置をシフトさせることによって、理論と実験はほぼ完全に一致する。これまでの考察からピーク位置に関する理論と実験の不一致は主に4次モーメント、 $\langle \omega^4 \rangle$ 、に起因することが明らかになっている。

3. 水中の溶媒和イオンのダイナミクス^{18,19)}

極性溶媒中のイオンのダイナミクスは長年に亘って物理、化学の分野の基本的な問題として研究者の注目を集めてきた問題であるが、最近、生物(生理)の分野でもその重要性が認識されつつある。例えば、生体系中のイオン伝導は神経伝達において重要な役割を演じているが、その伝達経路にはイオンが溶液相からチャンネルに移行する過程(あるいはその逆)が必ず含まれており、その全過程を解明するためにはチャンネル内だけのイオンのダイナミクスをシミュレートするだけでは不十分で、溶液相におけるイオンの静的、動的溶媒和構造を分子レベルで知る必要があるからである。

極性溶媒中のイオン伝導における主な興味の内容はイオンが移動する際に溶媒から受ける摩擦抵抗(その逆数はイオンの移動度)のイオンサイズ依存性における奇妙な振るまいにある。もし、イオンの運動が流体力学的なストークス-アインシュタイン

則に従うとすると、その摩擦抵抗(ζ)はイオン半径に比例して増加しなければならない。 $(\zeta \sim \eta R$; η 、粘性係数; R 、イオン半径)しかしながら、アルカリ金属イオンおよびハロゲン化物イオンの場合、摩擦抵抗は逆にイオン半径とともに減少するのである。^{19,20)} イオンダイナミクスのこのような振るまいを説明するために、これまで二つの代表的なモデルが提案されている。そのひとつは歴史的に実験化学者が発展させてきた直感的なモデルで、いわゆる「溶媒和イオン」(solventberg)モデルである。^{20,21)} このモデルはイオンが溶媒を結合して一種のクラスターを形成して、この溶媒和クラスターが溶液中を移動していると考えられる。そして、溶媒和クラスターに働くストークス抵抗はそのクラスターの半径(「実効的」イオン半径)によって決定されるとする。このクラスターの半径はイオンがどのくらい強く溶媒分子を結合しているかによって決まり、さらに、それはイオンと溶媒との間の静電相互作用の強さで決まる。このイオン-溶媒間の相互作用の強さはイオン半径が小さいほど大きいので、イオンの実効半径(したがって、摩擦抵抗)はアルカリ金属イオンの場合 $\text{Li}^+ > \text{Na}^+ > \text{K}^+ > \text{Rb}^+ > \text{Cs}^+$ のようにイオン半径の増加とともに減少するのである。イオンに働く摩擦抵抗のふるまいを説明するもうひとつのモデルは、最初、ノーベル物理学者のM. Bornによって提案され、その後、Boid, Zwanzichらの改良を経て、最終的にはやはりノーベル物理学者であるL. Onsagerとその弟子のJ. Hubbardが電磁流体力学によって定式化したモデルで誘電摩擦理論に基づいている。²²⁻²⁶⁾ 今、1個のイオンが極性溶媒中で平衡状

態にあるとしよう。このイオンは周囲の溶媒を分極して安定となっている。このイオンが瞬間的に少し位置を変えたと想像しよう。周りの溶媒の分極はこの新しいイオンの位置に対して平衡になっていないため、溶媒の位置と配向の緩和過程が誘起される。この溶媒の緩和過程は運動量とエネルギーの散逸過程を伴い、それが摩擦抵抗の原因になるのである。この摩擦に主な寄与をするのは溶媒の電気分極の緩和であるからこの摩擦抵抗を「誘電摩擦」と呼んでいる。イオンによる溶媒の分極はイオンの電場が大きくなる程、したがって、イオンサイズが小さくなるほど強くなる。このため、誘電摩擦はイオン半径が小さくなる程大きくなり、アルカリ金属イオンでは $\text{Li}^+ > \text{Na}^+ > \text{K}^+ > \text{Rb}^+ > \text{Cs}^+$ の順序となる。イオン半径がさらに大きくなるとイオンの電場の寄与は無視できるほど小さくなり、ストークス-アインシュタイン則に従って、摩擦抵抗はイオン半径に比例して増加する。したがって、摩擦抵抗のイオン半径依存性は下に凸の曲線に載ることが予想され、事実、定性的には実験値はそのような振る舞いをする。

さて、以上のようにイオンに働く摩擦の問題は流体力学あるいは電磁流体力学の範囲で一応の定性的な定式化が行われている。しかし、分子レベルでは多くの問題が残されている。まず、第一に、上に述べた二つのモデルのどちらが実際の物理過程に近いのか、明らかではない。第二に、もし、どちらのプロセスも同時に起きているとすれば、それらの間の関係は一体どうなっているのか？ 実は、この二つのモデルはイオン半径の増加に関して矛盾する関係にある。例えば、(裸の)イオン半径を大きくした

場合、誘電摩擦の考えに従えば摩擦抵抗は減少しなければならないが、一方、ストークス抵抗は増加するはずである。また、逆に、「溶媒和イオン」モデルに従って実効イオン半径を大きくすれば、ストークス抵抗は大きくなるが、誘電摩擦は減少する。

以上の疑問はイオンのダイナミクスに関する分子論を構築することによってのみ解決することができる。本研究では一般化ランジェヴァン方程式、モードカップリング理論、およびRISM理論に基づき、イオンに働く摩擦抵抗をイオンの変位(摂動)に対する水の集団励起(第1節)の応答として捉える視点から問題を定式化する。

3.1 イオンダイナミクスの「記憶関数理論」による定式化

摩擦係数 ζ はアインシュタインの揺動散逸定理によって拡散係数 D と以下の関係によって結ばれている。

$$\zeta = k_B T / D \quad (3.1)$$

拡散係数はさらにグリーン-久保式によって速度自己相関関数 $Z(t)$ と次の式によって関係づけられる。

$$D = \int_0^\infty dt Z(t) \quad (3.2)$$

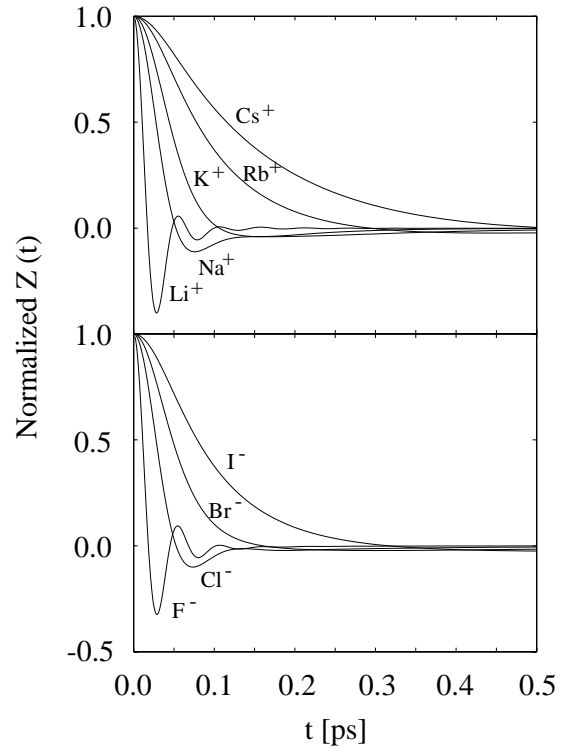
$$Z(t) = \langle v_{u,z}(0) v_{u,z}(t) \rangle \quad (3.3)$$

ここで、 $v_{u,z}(t)$ は時刻 t におけるイオンの速度の z -成分を表わす。(下付き添字 u は溶質のイオンを意味する。) 教科書的な射影演算子法に基づけば、 $Z(t)$ に関する以下のような式が得られる。

$$\dot{Z}(t) = - \int_0^t d\tau K(t-\tau) Z(t-\tau) \quad (3.4)$$

上式において、 $K(t)$ は記憶関数であり、この関数に

図5 水中のカチオンとアニオンの速度相関関数。



様々な現象論的仮定を行うやりかたが通常よくなされているが、その分子論的表現を求めることは理論物理学における重要問題である。特に、分子性液体中のそれを求めた報告はこれまでにない。我々はSjogrenによる原子性液体に関するモードカップリング理論の定式化を下敷きにしてこの問題にアプローチした。まず、Sjogrenに従って、記憶関数を二つの寄与の和で表現する。^{27,28)}

$$K(t) \approx K_{\text{fast}} + K_{\text{slow}} \quad (3.5)$$

ここで、 K_{fast} は2体衝突に起因する記憶の速い減衰を記述し、一方、 K_{slow} は相関をもった衝突から生じる記憶項を代表しており、ゆっくりと減衰する。

速く減衰する記憶は第1節で述べたのと同様の指数関数近似 (Gaussian ansatz) でよく表わすことができる。

$$K_{\text{fast}} \approx K(0) \exp(-t^2/r^2) \quad (3.6)$$

$$1/\tau^2 = -\frac{1}{2} \frac{\ddot{K}(0)}{K(0)} \quad (3.7)$$

上式において $K(0)$ はアインシュタイン周波数と呼ばれる量であり、溶媒とクラスターの中でのイオンの振動の平均周波数のようなものである。重要なことはこの関数が原子間相互作用ポテンシャルと2体密度相関関数の情報だけを含んでおり、したがって、RISM理論から完全に計算できることである。 $\ddot{K}(0)$ も平衡量であるが、3体の密度相関関数を含むため評価が難しい。しかし、近似的にはあるがやはりRISM理論から求めることができる。遅い記憶項 K_{slow} をはモードカップリングの方法に基づいて以下の式により評価する。^{9,29)}

$$K_{\text{slow}} = \frac{\rho k_B T}{6\pi^2 m} \int_0^\infty dk \sum_{\lambda, \mu} c_{u\lambda}(k) (1 - f_u(k, t)) F_u(k, t) F_{\lambda, \mu}(k, t) \quad (3.8)$$

ここで、 m はイオンの質量、 $c_{u\lambda}(k)$ はイオンと溶媒原子間の直接相関関数、また、 $F_u(k, t)$ はイオンの自己中間散乱因子 (動的構造因子) を表わす。 $F_u(k, t)$ に対しては以下のガウス近似を採用する。

$$F_u(k, t) = \exp\left[-k^2 \int_0^t d\tau (t - \tau) Z(\tau)\right] \quad (3.9)$$

上の表現は短時間と長時間の両極限において正確である。 $F_{\lambda, \mu}(k, t)$ は前節で定義された溶媒の原子-原子中間散乱因子である。 $f_u(k, t)$ は $F_u^{id}(k, t)/F_u(k, t)$ で定義される補助関数であり、また、 $F_u^{id}(k, t) = \exp[-(k_B T/m)k^2 t^2]$ は理想気体の中間散乱因子を表わす。速度相関関数 $Z(t)$ および記憶関数 $K(t)$ は以上の方程式を自己無撞着的に解くことにより求めることができる。

3.2 速度自己相関関数

上で述べた理論に基づいて計算した水中のアルカリ金属イオンおよびハロゲン化物イオンの速度相関関数 (VACF) を図5に示してある。この結果の際

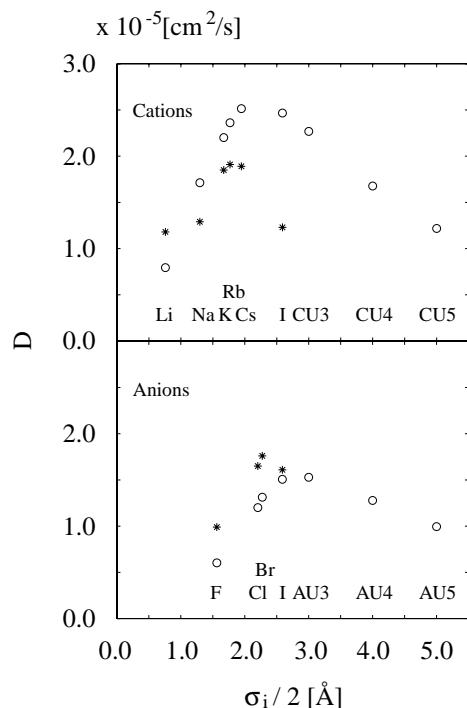


図6 水中のカチオンとアニオンの拡散係数とイオンサイズの関係。CU*i*とAU*i*は $\sigma_i/2 = i$ オングストロームとした仮想イオンを示す。が本稿の理論計算、*がRasaiahらによるMDシミュレーション。

がしだいに長くなる。図5に示されたイオンのVACFの振るまいは計算機実験に得られた結果と定性的によく一致している。³⁰⁾

3.3 自己拡散係数

上に述べたVACFと式(3.2)から求めたイオンの拡散係数をイオンサイズに対してプロットしたものを図6に示す。(イオン半径としてLennard-Jonesの σ パラメタの半分をとってある。)通常のStokes-Einstein則に基づく拡散係数の予測はイオンサイズとともに単調に減少することを考えると、ここで得られた結果がいかに奇妙なものであるかは明らかである。(実はここには示していないが、イオンの電荷を取り除いた中性の分子に関する結果はまさにStokes-Einstein則が予測するものに一致している。)イオンサイズが小さい時の拡散係数の振るまいはStokes-Einstein則が予言するところと全く逆のイオンサイズ依存性を示し、サイズがさらに増加するとStokes-Einstein則と同様の依存性に転じる。このような振るまいの物理的起源に関しては、後程、摩擦抵抗係数を論ずる際に述べることにして、ここでは次ぎの2点についてコメントをしておこう。まず、カチオンに関するプロット(上のパネル)とアニオンに関するそれ(下のパネル)を比較していただきたい。その比較から明らかなようにこれらの曲線は一致しない。これはイオンの電荷の符号に関して拡散係数が非対称であることを意味しているが、何故、そのような非対称性がうまれるのか? 実は、この非対称性は水分子内の電荷分布の非対称性から来ていることを以前にわれわれはイオンの水和自由エネ

立った特徴は小さいイオン(Li⁺, F⁻)の速度相関関数に見られる強い振動である。イオンサイズの増加に伴ってこの振動は消滅し、しだいに長い時定数によって特徴付けられる単調な減衰に変わっていく。小さいイオンの場合の強い振動は明らかにイオンの振動運動を反映しており、この振動を維持する何らかの「構造」の存在を強く示唆している。実はこのようなイオンは主として静電相互作用に起因する強い力によって周囲の水分子を引き付け、比較的寿命の長い「水和イオン」を形成していることが知られている。VACFに見られる振動構造はいわばこの水和イオン内でのイオンの振動を表しており、この振動の持続時間が水和イオンの寿命を表していると考えることができる。このVACFの振動はイオンサイズの増加に伴い消滅する。その理由はイオン-溶媒間静電相互作用が弱くなることによって水和イオンが形成されなくなるためである。また、イオン質量の増加とともにいわゆる並進的な慣性運動が支配的となることによって、VACFの減衰に関する時定数

図7 水中でのイオンの摩擦係数 ζ 。

、全摩擦 ζ ； \square 、ストークス抵抗 ζ_{NN} ； \triangle 、誘電摩擦 ζ_{ZZ} ； \diamond 、交叉項 ζ_{NZ} の2倍

ルギーに関する研究の中で明らかにしている。すなわち、水分子の電荷分布はいわゆるSPC（あるいはSPCE）モデルでよく表すことができるが、この種のモデルは球形の中心から約1オングストローム離れた位置に水素原子を模した二つの正の部分電荷を置き、中心に1個の負電荷を配置する。水分子に関する他の古典的モデルもほぼ同様の電荷分布を持っており、それらに特徴的なことは電荷分布が反転対称性を持っていないことである。この水分子内の電荷分布の非対称性によって、正イオンおよび負イオンと水分子との相互作用に違いが生じ、イオンの場に対する溶媒の静的、動的応答に非対称性が生まれたのである。このような非対称性は連続誘電体モデルでは絶対に説明できないことであり、統計力学的取り扱いの重要な帰結である。

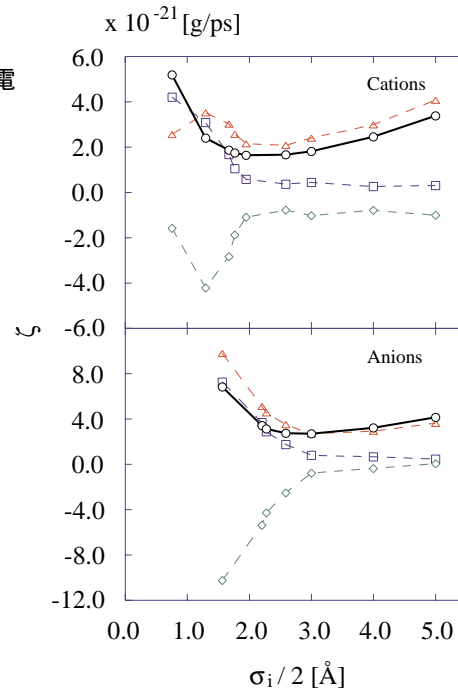
ここで強調しておきたいもうひとつのことは「実験」との一致についてである。図中、*印で示したのはRasiahらが計算機実験が得た結果であるが、少なくとも定性的には「実験」結果を良く再現しているといえよう。³⁰⁾

3.4 摩擦係数

摩擦係数に関する表現は式(3.1)、(3.2)および(3.3)より得ることができる。

$$\zeta = m \int_0^{\infty} dt K(t) \quad (3.10)$$

この摩擦をイオンの摂動に対する溶媒の集団励起の応答とみなし、イオンの摂動を静電相互作用（ $\sim 1/r$ ）に起因するものとそれ以外（短距離力）に分け、溶媒の音響モードと光学モードとの間の結合を



考えると、摩擦係数は以下の三つの項の和で表すことができる。すなわち、

$$\zeta = \zeta_{NN} + 2\zeta_{NZ} + \zeta_{ZZ} \quad (3.11)$$

上式において ζ_{NN} は短距離力に対する溶媒の音響モードの応答であり、その物理的意味において現象論的流体力学モデルのストークス抵抗に対応している。 ζ_{ZZ} は静電相互作用に対する光学モードの応答であり、いわゆる誘電摩擦に対応する物理的意味をもっている。また、 ζ_{NZ} はそれらの交叉項であるが、分子レベルの理論でこの項をあらわに評価した例はこれまでにほとんどない。

図7にカチオンとアニオンの摩擦係数 ζ を式(3.11)で定義したその成分 ζ_{NN} 、 ζ_{ZZ} 、 ζ_{NZ} とともにイオンサイズに対してプロットしてある。イオンサイズが大きくなるとともに全摩擦係 ζ は最初まず減少し極小を通過して増加に転じる。イオンサイズが小さいところでの ζ の振るまいは流体力学モデル（ストークス則）が予言するところと全く逆になっている。アルカリ金属イオンやハロゲン化物イオンのサイズは ζ が減少するイオン半径の領域内に含まれて

おり、このためこれらのイオンの摩擦係数の実験値はイオンサイズとともに減少するのである。

上に述べた ζ の三つの成分に話しを転じよう。 ζ_{ZZ} は比較的単純な振るまいを示す。すなわち、イオン半径の増加とともに単調に減少している。この項はイオンの変位に対する溶媒の誘電的応答に関係しており、イオンサイズの増加にともなってイオン-溶媒間静電相互作用が単調に減少するためにこのような振るまいをするのである。一方、 ζ_{NN} はかなり複雑な振るまいを示している。イオン半径が大きい領域では Li^+ を除いてイオンサイズとともに増加しており、ストークス則が予言するところと一致している。しかしながらイオン半径が小さい領域では ζ_{NN} はイオンサイズの増加とともに減少している。先に速度相関関数を議論した際に、このような小さなイオンが比較的寿命の長い「水和イオン」を形成する可能性についてふれたが、 ζ_{NN} のふるまいはこの「水和イオン」の形成に起因していると考えられる。 ζ の分割に際して直接のクーロン相互作用($\sim 1/r$)からの寄与は ζ_{NN} から除かれているが、再規格化されたイオン-水間の短距離相互作用には静電的キャラクターを帯びた強い相互作用が含まれており、この相互作用によってイオンは水との間でクラスターを形成しているのである。水和イオンのサイズは、(裸の)イオン半径が小さくなりイオン-水間の短距離相互作用が大きくなるにしたがって増大する。このようにして小さなイオンに関する ζ_{NN} の一般的振るまいを説明することができる。ここで、一つの例外は Li^+ の場合であるが、Rasaiahらの分子動力学の結果も同様の振るまいを示していることから、

我々の計算のアーティファクトとは考えにくい。³⁰⁾現時点でのわれわれの解釈は、水との大きなクラスターを安定化するには Li^+ イオンが小さすぎるのではないかということである。

図7における最も興味深い結果は ζ_{NZ} からの寄与である。この寄与は多くの理論研究において無視されている項であるが、われわれの研究結果はこの項が単に無視できないばかりか他の二つの項と同程度の寄与をすることを示している。もうひとつ指摘すべき重要なポイントはこの項が負の寄与をしていることである。この節の始めに述べたが、水和イオン形成に伴う有効イオン半径の増加が摩擦係数に及ぼす影響は誘電摩擦からの寄与と逆方向に作用するはずであり、従って、その交叉項の符号は負となると考えられる。

文献

- 1) J. Teixeira, M. C. Bellissent-Funel, S. H. Chen and B. Dorner, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2681 (1985).
- 2) M. A. Ricci, D. Rocca, G. Ruocco and R. Vallauri, *Phys. Rev. A* **40**, 7226 (1989).
- 3) A. Rahman and F. Stillinger, *Phys. Rev. A* **10**, 368 (1974).
- 4) S. Saito and I. Omine, *J. Chem. Phys.* **102**, 3566 (1995).
- 5) S. Miura, *Mol. Phys.* **87**, 1405 (1996).
- 6) F. Sette, G. Ruocco, M. Krisch, C. Masciovecchio, V. Mazzacurati, R. Verbeni and U. Bergman, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 83 (1996).



- 7) S-H Chong and F. Hirata, *J. Chem. Phys.* **111**, 3083 (1999).
- 8) S-H Chong and F. Hirata, *J. Chem. Phys.* **111**, 3095 (1999).
- 9) Balcani and M. Zoppi, *Dynamics of the Liquid State*, Oxford University Press; New York (1994).
- 10) D. F. Calef and P. G. Wolynes, *J. Chem. Phys.* **78**, 4145 (1983).
- 11) Bagchi, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **40**, 115 (1989).
- 12) A. Abragam, *The principle of Nuclear Magnetism*, Oxford (1961).
- 13) F. Hirata, *J. Chem. Phys.* **96**, 4619 (1992).
- 14) F. Hirata and P. J. Rossky, *Chem. Phys. Lett.* **83**, 329 (1981).
- 15) F. Hirata, B. M. Pettitt and P. J. Rossky, *J. Chem. Phys.* **77**, 509 (1982).
- 16) F. Hirata, P. J. Rossky and B. M. Pettitt, *J. Chem. Phys.* **78**, 4133 (1983).
- 17) S. W. Lavesey, *J. Phys. C* **4**, 3057 (1971).
- 18) S-H. Chong and F. Hirata, *J. Chem. Phys.* **108**, 7339 (1998).
- 19) S-H. Chong and F. Hirata, *J. Chem. Phys.* **111**, 3654 (1999).
- 20) R. A. Robinson and R. H. Stokes, *Electrolyte Solutions*, Butterworth; London, (1965).
- 21) H. S. Harned and B. B. Owen, *The Physical Chemistry of Electrolyte Solutions*, Reinhold; New York, (1958).
- 22) M. Born, *Z. Phys.* **1**, 221 (1920).
- 23) R. H. Boyd, *J. Chem. Phys.* **35**, 1281 (1961).
- 24) R. Zwanzig, *J. Chem. Phys.* **38**, 1603 (1963); **52**, 3625 (1970).
- 25) J. B. Hubbard and L. Onsager, *J. Chem. Phys.* **67**, 4850 (1977).
- 26) J. B. Hubbard, *J. Chem. Phys.* **68**, 1649 (1978).
- 27) L. Sjogren and A. Sjolander, *J. Phys. C* **12**, 4369 (1979).
- 28) L. Sjogren, *Phys. C* **13**, 705 (1980).
- 29) R. Biswas, S. Roy and B. Bagchi, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1098 (1995).
- 30) S. Koneshan, J. C. Rasaiah, R. M. Lynden-Bell and S. H. Lee, *J. Phys. Chem. B* **102**, 4193 (1998).

時間分解分光による凝縮相分子ダイナミクスの研究

極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門 田原 太平

つらつら思うに私自身の原初的な興味は大学学部時代に有機化学と量子化学の講義を聴講した時に抱いた問題意識にその源があると思う。それは、「(有機化学でいうところの)反応は(量子化学で言う見方において)どの様に進んでいるのか理解したい」という言葉で端的に言い表すことができる。この問いはきわめて簡単に聞こえるが実は奥が深く、自分の理解のレベルの深化に応じて異なるレベルの答えを要求してくるように思える。このような「根っこ」を持つ自分にとって、系の変化を実時間で分光学的に追跡する時間分解分光法は(少なくとも今までは)性に合った方法論で、これまでそれを使って凝縮相の研究をしてきた。分子研では、特にフェムト秒からピコ秒の時間領域に注目して研究を行っている。この時間領域は凝縮相において、いわゆる“高速な”反応だけでなく、エネルギーの散逸や揺動、電子緩和、振動緩和、核波束運動などの諸問題を直接的に実時間で調べられる時間領域である。このダイナミックな時間領域において典型的な問題をとりあげて研究を行い、それを通して背景にある一般的な問題を理解し、できるだけ凝縮相ダイナミクスの全体像を把握しようと心がけて研究を進めている。その意味で、同じ時間領域でも分光手段を変えると分子の異なる側面が見えてくるので、電子状態に対する分光、振動状態に対する分光、核波束運動(振動コヒーレンス)を時間領域で観測する分光、などを多角的に用いて研究を進めている。今回、分子研レターズに研究紹介を書く機会を与えていただいたので、これまでに分子研で行った研究をその経緯とともに紹介したいと思う。

1. フェムト秒蛍光分光による光化学ダイナミクスの研究

分子研で研究を始める際に、とにかくこれまでの単なる継続ではない研究をやろう、と思った。それまでラマン分光を用いた研究をよくしていたが、ラマン散乱測定では蛍光が大変大きな障害となる。蛍光にはいつも嫌な思いをさせられていたので、逆にこの機会にこれをとりあげてやることにした。そこで助手として赴任してきた竹内君と蛍光アップコンバージョン装置(時間分解能 ~ 200 fs)を製作してフェムト秒時間分解蛍光分光による研究を始めた。以前コヒーレントラマン分光を用いてレチナル(後でもでてくる)を研究した際、その蛍光の時間挙動がなにやら奇妙であることに気がついていた。そこで、まずこの問題をとりあげ、レチナルからの蛍光を高い分解能で時間分解測定してみたところ、その蛍光が実は3成分からなっていることがわかった。それぞれの寿命、スペクトル、振動子強度の見積もりから、この分子では最初に光励起で作られるのは S_3 状態(寿命 ~ 30 fs)で、それが S_2 (370 fs)、 S_1 (33 ps)状態へと順々に電子緩和しつつそれぞれの状態から蛍光が発していることが判明した。これには最初驚いた。なぜなら通常蛍光測定では、高い電子励起(S_n)状態に光励起しても、最低励起(S_1)状態からの蛍光しか観測されないのが常識だからである(Kasha則)。そのことからするとこのレチナルの蛍光挙動はきわめて特殊な例であると最初思えたが、その後、7-アザインドール二量体のプロトン移動を研究した際にも高い励起状態からの蛍光がフェムト秒領域で観測されたため(後述)、しだいに S_n 蛍光の検出はフェムト秒領域においては実は

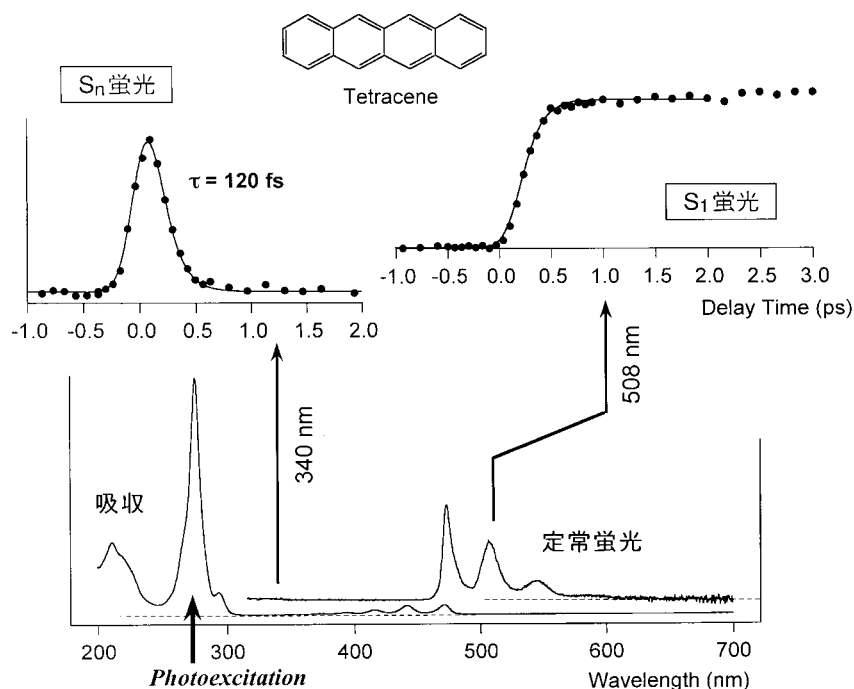


図1. テトラセンの吸収スペクトル・定常蛍光スペクトル（下段）と時間分解蛍光信号。定常蛍光では一見にもないような紫外領域（340 nm）に寿命の短いS_n蛍光が観測されている。

普通のことなのだ、と考えるようになった。すなわち、S_n状態は寿命がきわめて短いためにS_n蛍光は「観測しにくい」のだが、その寿命より高い時間分解能で測定すれば失活前のS_n状態からの蛍光は一般的に観測されるのだと思うようになった。S_n状態の寿命は大体数10 fsから数100 fsであると見積もられるから、これは蛍光分光がフェムト秒領域ではS_n状態やその緩和ダイナミクスを研究する重要な手段になりうることを意味している。この理解を確かめるための実験を、学振の博士研究員としてインドから来たSarkar君がテトラセンに対して行った。テトラセンは図1に示すように紫外部にS_n吸収、可視部にS₁吸収を示すが、紫外光でS_n状態に分子を光励起しても通常の定常蛍光測定ではS_n蛍光は“見えず”、S₁蛍光のみが観測される。しかしフェムト秒時間分解測定すると、ちゃんと紫外部に寿命

約120 fsのS_n状態からの蛍光が観測され、上に述べた理解が正しいことが検証された。このテトラセンの研究ではさらに偏光測定と組み合わせることで約120 fsでおこるS_n → S₁電子緩和、に加えて、それに続く電子緩和直後の分子内振動再分配（IVR）過程、振動冷却、回転緩和など、溶液中で多原子分子をS_n状態に励起したあとに一般的に起こると考えられる一連の緩和過程に対応する蛍光ダイナミクスを観測し、それぞれの過程の時間スケールを明らかにすることができた。

電子緩和ダイナミクスの研究と並行して、時間分解蛍光分光では光プロトン移動反応の研究を行っている。光プロトン移動は最も基本的な反応でありながら、きわめて高速（フェムト～ピコ秒）で進むためにそのダイナミクスは未だ明らかでない。そこでまず、分子間光プロトン移動反応の代表的な系であ

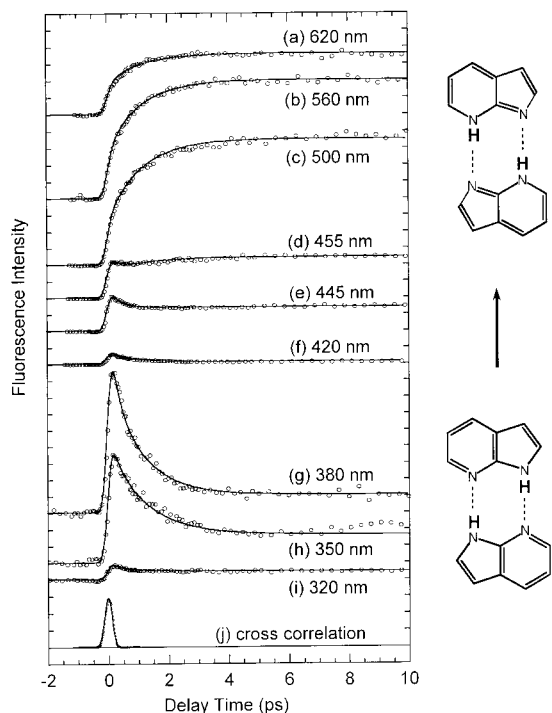


図2. 7-アザインドール2量体からのフェムト秒時間分解蛍光信号。短波長側の減衰する蛍光は前駆体励起状態のもの、長波長側の立ちあがる蛍光は生成物の互変異性体励起状態のもの。

り、塩基対のモデルとしても重要な7-アザインドール二量体の研究を竹内君が行った。図2に測定された時間分解蛍光信号を示す。ここに見られるように、プロトン移動の前駆体である二量体励起状態からの減衰する蛍光が短波長側に、また生成物である立ちあがってくる互変異性体からの蛍光が長波長側に観測され、その時間挙動からプロトン移動が約1ピコ秒で進行することが明らかになった。さらにこの蛍光の時間挙動の定量的な解析から、前駆体の二量体励起状態からの蛍光は実は2成分からなることを初めて見出した。遷移エネルギーの評価・振動子強度の見積り・蛍光偏光異方性の測定をもとにこの2成分を S_2 蛍光と S_1 蛍光であると帰属した。すなわち、この光プロトン移動反応では、光励起後まず2量体の $S_2(L_b)$ 状態から $S_1(L_a)$ 状態への電子緩和が約200 fsで起こり、その後 S_1 状態において(少なくとも実験的に見る限りは)協奏的にプロトン移動が進むのが見えてると結論した。奇しくもこの研究は米国のZewail教授のグループに追われる形になり、

現在、反応が協奏的(2つのプロトンが同時に移動する)か、段階的(2つのプロトンが一つずつに移動する)か、という問題に関して論争がおきている。(これに関してはきわめて最近自分たちの結論をサポートする新しいデータがでて喜んでいる。)7-アザインドールに関する分子間プロトン移動反応の研究の後、さらに速い分子内のプロトン移動反応の研究へ進み、学振の博士研究員としてロシアから来たArzhantsev君がアントラキノンのジヒドロ誘導体に対する系統的な研究を行った。彼の研究ではいくつかの分子(例えば1,8-ジヒドロアントラキノン)ではプロトン移動が光励起後なんと50 fs以下で起こることが見出されている。この異常なほどの速さは、この種の分子内プロトン移動が通常の意味でのA-Bという反応というよりは、励起状態での波動関数の非局在化を反映した変化だとして理解する方が適当であることを意味していると考えている。

2. ピコ秒時間分解自発ラマン分光による光化学反応の研究

分子研で研究を始めてしばらくして、凝縮相の研究には分子構造に対する情報が得られる分光法がやはり必要であるということ強く感じるようになった。そこで、IMSフェローの下島君とピコ秒時間分解自発ラマン分光システム(時間分解能2~3ピコ秒)を製作した。これには新しいレーザーであるチタンサファイアレーザーをベースにして時間分解ラマン分光の装置を作りたいと強く思ったことも動機となった。下島君は製作した装置を用いてレチナールの光異性化反応の研究をした。レチナール

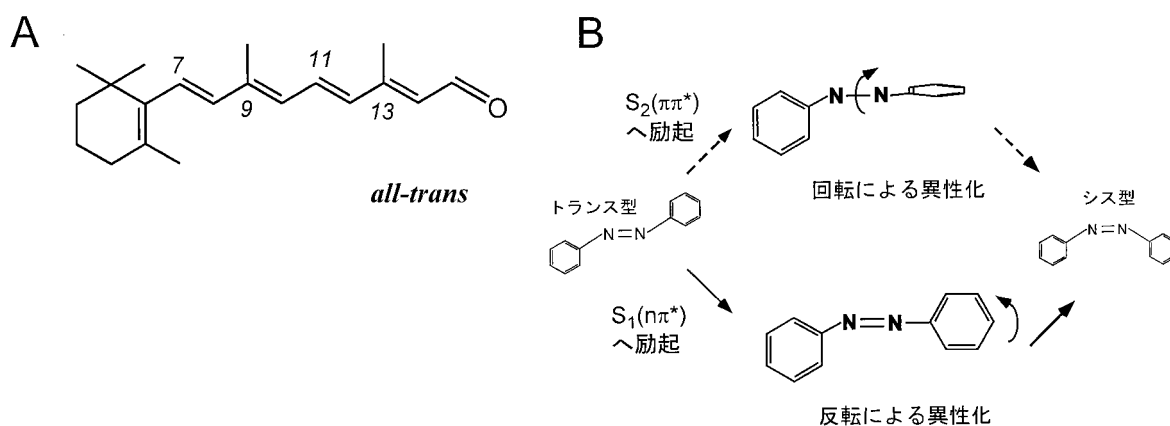


図3 . (A)レチナル。7-8、9-10、11-12、13-14位の4つの二重結合に関するシストランス異性がある。
(B)アゾベンゼンのこれまでいわれてきた二種類の異性化機構。

は、視覚の初期過程に關するタンパクであるロドプシン、および高度好塩菌に含まれ光駆動プロトンポンプとして働くバクテリオロドプシンにおける発色団で、そのシストランス異性は生化学的にも重要である。この分子には図3 Aに示すように4ヶ所シス-トランス異性を起こしうる二重結合があり、この位置の違いで反応機構が違ふのか否かという点に光化学的観点から興味を持たれていた。これを調べるには異性体の違いに敏感な分光手法を用いる必要があるが、吸収分光や蛍光分光では異性体の区別が付きにくく、振動分光で研究する必要がある。効率良く異性化する9-シス体、13-シス体についてピコ秒領域でラマン測定を行ったところ、9-シス体全トランス体の構造変化は最低三重項 (T_1) 状態でおこるのに対し、13-シス体全トランス体の異性化は系間交差の前に一重項状態でおこっていることがわかった。これにより、確かに二重結合の位置で異性化機構が違ふことが初めて明らかになった。

時間分解ラマン分光は特定の問題に關しては、時間分解吸収分光や時間分解蛍光分光ではわからないことを極めて明確にすることができる。学振博士研究員の藤野君は、アゾベンゼンの異性化に關してラ

マン分光法の長所を最大限に生かした研究をした。アゾベンゼンの異性化反応は基本反応として重要であるだけでなく応用の観点からも注目されている。これまで、この異性化反応の機構は励起エネルギーで大きく異なり、エネルギーの高い $\pi\pi^*$ 型の S_2 状態ではN=N二重結合の周りの回転(回転機構)によって、またエネルギーの低い $n\pi^*$ 型の S_1 状態ではN原子に關する反転(反転機構)で異性化が起るとされていた(図3 B)。この反応の研究は、この反応がきわめて高速(数ピコ秒内)に進行してしまうため遅れていたが、ようやく数年前にフェムト秒吸収分光による研究が初めて報告された。その研究で、 S_2 励起後、寿命約1ピコ秒と16ピコ秒の2成分の吸光度変化が400 nm付近に観測され、これまで言われている反応機構にしたがって、これらの寿命成分は回転異性化の途中に現れる「ねじれた励起状態」に対応するものである、という解釈がされた。ところが、われわれがこの400 nmの過渡吸収に共鳴させてラマンスペクトルを測定し、この過渡種のNN伸縮振動数を ^{15}N 同位体シフトを使って決定してみると、その振動数は S_0 状態と過渡種でほとんど変わっていなかった(図4)。つまりNN結合は二重

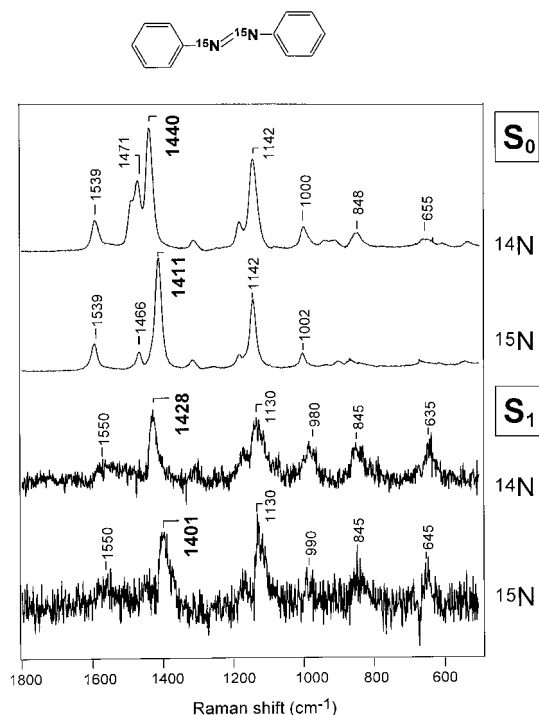


図4. アゾベンゼンの電子基底 (S_0) 状態と電子励起 (S_1) 状態のラマンスペクトル。 ^{15}N 置換で振動数が変化するラマンバンド (1440 cm^{-1} 1411 cm^{-1} in S_0 ; 1428 cm^{-1} 1401 cm^{-1} in S_1) が $\text{N}=\text{N}$ 伸縮振動に帰属できる。この二つの状態で振動数はあまり変わっていない。

3. フェムト秒時間領域分光による振動コヒーレンスの研究

数 10 フェムト秒級の極短パルスを用いて分子を光励起すると、そのエネルギー不確定性幅内で多数の振動準位をコヒーレントに励起することができる。このコヒーレントな状態は固有状態でないので時間発展をするが、これがいわゆる核波束運動と呼ばれるもので、この観測は分子の核の運動を実時間で観測することに対応している (時間領域分光)。この振動コヒーレンスが観測されることはフェムト秒領域の分光実験の重要な特徴の一つである。分子研で研究をスタートする際に、フェムト秒蛍光分光とともにこの時間領域分光の研究を始めた。まず、電子基底状態の振動コヒーレンス (核波束運動) を観測するための何か手法的に新しいことをやろう、ということで、IMS フェローの松尾君と話してインパルス誘導ラマン散乱測定へのヘテロダイン検出にトライすることにした。基底状態にある分子の振動コヒーレンスを観測する方法はいくつかあるが、そのうち最も自由度が高いのがインパルス誘導ラマン散乱測定である。この方法では交差する 2 つのレーザー光を試料に照射してカー効果によって屈折率のグレーティングを作り、それが振動コヒーレンスを反映して時間変化するのをプローブ光の回折光強度変化として検出する。この方法は偏光条件を自由に変えて測定ができ強力であるが、その反面、新たな方向に発する信号の光強度 (電場の自乗) を検出するので、系の応答 (これは電場に比例する) の位相 (符号) 情報が失われてしまう。この問題を解決するた

結合性を保っていて分子は全然ねじれてなどいない。さらに、振動励起状態からのラマン散乱が現れるアンチストークス側の測定を行ってみると、この平面型の過渡種 (最終的に S_1 状態に帰属された) が約 1 ps で消失するとともに、 S_0 状態の振動励起状態が現れ、それが 16 ps で消失していくことがわかった。すなわち、分光学的に見ているのは、分子が平面を保ったままの電子緩和と振動緩和であることがわかった。 S_2 励起後に平面型の $n\pi^*$ 型 S_1 状態が生成しているということは、 $\pi\pi^*$ 励起の場合も異性化は一度 S_1 状態に緩和してから反転機構で起きていることを強く示唆していて、これまで信じられていた S_2 から直接おこる回転機構による異性化経路は重要でないことを意味している。(これはその後の研究によりさらに裏付けつつある。) 分光はときにその最も得意とする問題に適用すると、議論を必要としない明確なデータを与えることがあるが、これはその一つの例になっているのではないかと思う。

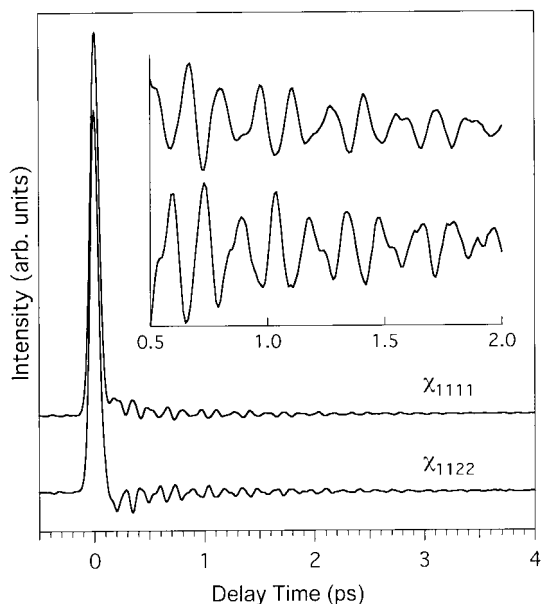


図5．四塩化炭素からの光ヘテロダイン検出インパルス誘導ラマン散乱。基底状態のラマン活性な振動コヒーレンスが観測されている。偏光条件の違い (χ_{1111} 、 χ_{1122}) で振動ビートの位相が逆転して見えていることに注意されたい。

めには、別なところからもう一つフェムト秒光をもってきて、光の位相を制御しながら信号光と重ね合わせ、その干渉成分を検出すれば良い(これを光ヘテロダイン検出という)。この実験では光の位相を制御する必要があるため、きわめて高い精度で光学系の光路長を制御しなければならない。そこで、これをアクティブに安定化させるトリックを考えて、図5に示すような液体試料の振動コヒーレンスによるビート信号を観測することができた。最近、世界的にフェムト秒分光のヘテロダイン化が多くされるようになったが、われわれの研究はその引きがねの一つになったと思う。

インパルスラマンの研究は自分にとって振動コヒーレンスの研究の初めてのものであって思い入れもあったが、落ち着いて考えてみるとこれで観測できるのはあくまで基底状態の振動コヒーレンスであって、(光) 化学反応とコヒーレンスの関係を論じ

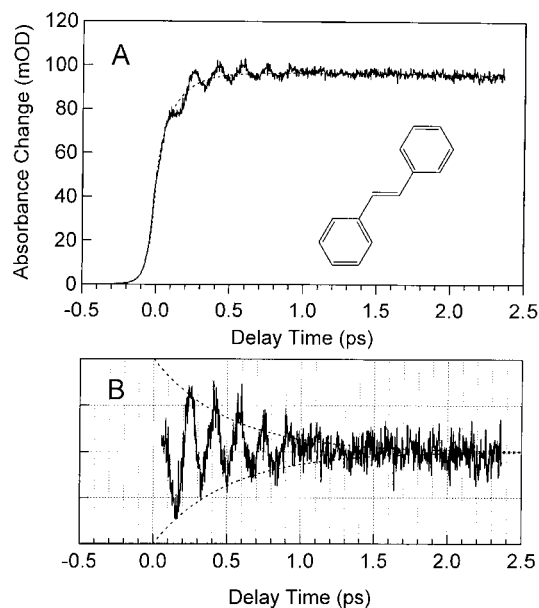


図6．トランススチルベンの過渡吸収に現れる S_1 状態の振動コヒーレンスに由来するビート信号(A)。ビート成分だけを取り出したもの(B)。

るといふ観点ではそこにとどまらず電子励起状態の振動コヒーレンスの研究へむかわなければならない。そこで、ちょうど時間分解蛍光の研究を一段落させて次を模索していた竹内君と相談し、励起状態の振動コヒーレンスに向けて研究を進めた。凝縮相で励起状態の振動コヒーレンスを観測するためには測定の時間分解能を極限的に上げる必要がある。いろいろ試した結果、光パラメトリック増幅(OPA)を用いて500 nm - 750 nmの範囲で波長可変なサブ10 fsの光パルスを発生させることができ、それをベースとして2波長ポンプ-プローブ時間分解吸収測定システム(時間分解能数10 fs)を製作できた。これを用いて図6に示すようなスチルベン分子の光励起直後の電子励起状態の振動コヒーレンスの観測をした。多原子分子の場合には、振動モードは多数あるので、このような実験でどのような核運動が見えるのか(そもそも本当に重要な振動モードのコヒーレ

ンスが見えるのか!?) という点が問題になる。このスチルベンの研究を通して、 S_0 、 S_1 、 S_n 状態のポテンシャルがある特定の振動座標に関してずれているときに対応する振動モードのコヒーレンスが強く現れるのだ、ということを実験的に明らかにすることができた。

4. 現在行いつつある研究

以上述べた研究はある意味すでに終了した研究であるので、現在進行しつつある研究についても 2 ~ 3 簡単に述べる。まず、竹内君は電子励起状態の振動コヒーレンスの研究をすすめて、超高速光解離反応をおこす分子の核波束運動の観測を行っている。反応における核運動の効果を議論したり、さらに成形した光パルス(列)を用いて反応を制御する試みへとつなげたいと考えている。また、技官の水野さんは最近、溶媒和電子の電子吸収に共鳴させてピコ秒時間分解ラマン測定をして、電子に溶媒和した局所的な水分子のラマン強度が選択的に著しく増大することを見いだした。これはある意味で新しい現象とも言えると思う。この効果をうまく利用すれば、これまで全くわかっていないバルクの中での溶媒和電子周りの溶媒局所構造の知見が得られる可能性がある。さらに、電子励起状態分子のテラヘルツ領域のスペクトルを得るために時間領域分光とポンププローブ法を組み合わせた「時間分解時間領域分光」の開発を総研大生の藤芳君が行っている。これは新しいコンセプトに基づく分光手法の開発でずいぶん試行錯誤したが、1年以上の模索ののち先日意味のあるデータが初めてとれた。励起状態分子の大振幅

運動を研究する分光手法に発展させられるかもしれない。

本稿でこれまでわれわれが行った研究を説明してきたが、時間分解能とエネルギー分解能を選んで実験を行うことで、反応はもちろん、エネルギーの散逸、電子緩和、振動緩和、振動コヒーレンス(核波束運動)など、いろいろな分子のダイナミクスが観えるようになってきたことがわかっていただけたかと思う。私自身はこれまでの研究で凝縮相の分子を総合的に研究する準備がようやく整ったと想着いて、(いつもそうだけれど)これからが問題だと思っている。新しい方法論を考え、新しい問題を模索し、できるならばそれらによって新しい現象を観てみたいと思っている。

分子研に来る前までは助手時代の1年間をのぞいて実験等をずっと基本的に一人でやっていたので、少なくともある時期、傲慢にも「研究は一人でやる方が速いし、クオリティも高くなる」と半ば本気で思っていた。分子研で研究をしてきて、それはたぶん間違いである、と思うようになった。ここに書いたように分子研での研究は仲間との合作であって、明らかに自分一人ではできなかった。皆と「お!? これはいけるんじゃないの?」と思いつきで言い合って始めた事の方がむしろ後から考えて本質的であったりしている。この気持ちの変化を研究者の成長とみるべきか、あるいは老化とみるべきかは自分ではよくわからないのだけれど(おそらくその両方なのだと思う) 少なくとも共同研究者への感謝の意をこめてここに明記しておきたいと思う。



有機薄膜デバイスと単一分子デバイス

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 尋 田 博 一

2000年4月に分子集団動力学研究部門に着任いたしました。紙面をお借りしまして、研究室（および研究テーマ）の紹介をさせていただきます。とはいいいましても、まだ「室」を構成するに至っておりません。10月にブレーメン大学よりHarald GraafがIMS Fellowとして着任し、ようやく研究の方向を議論できるようになりました。来年4月からは総研大を受験予定の学生さんが2名居りますので、今よりは賑やかになるのではと期待しています。

研究テーマを「有機分子を用いたナノデバイスと単一分子デバイスの構築に関する基礎研究」に据えたいと思っています。ここではこの分野の現状と将来性について紹介したいと思います。

【1】有機薄膜デバイスの歴史と現状

1950年の有機半導体の発見¹⁾、1954年の有機伝導体の発見²⁾および1977年の導電性ポリマーの発見³⁾以降、有機材料を電子デバイスの能動素子として利用する気運が高まり、1980年代に入って有機電界発光ダイオード(OLED)^{4,5)}や有機電界効果トランジスター(OFET)⁶⁻⁸⁾に関する研究が盛んとなりました。OLEDは、1987年のTangらによる正孔輸送層/電子輸送層の積層型OLEDの開発が大きなブレイクスルーをもたらされました。⁴⁾ それでも、この時点では、実用化は難しいであろうとの予測が大半を占めていました。しかし、1999年パイオニアがカーステレオにOLEDを実装し、⁹⁾一旦は開発から撤退していたいくつかのメーカーも巨額の設備投資を開始しています。現在は高輝度化・フルカラー化・フレキシブル化に関する開発競

争が行われており、¹⁰⁾ 欧米では、このOLEDを用いた新しい技術や商品に関する情報がベンチャー会社のホームページを華やかに彩っています。

一方、OFETに関しては、チオフェンオリゴマーが大きなキャリア移動度(10^{-2} cm²/Vs)を持つことで期待が寄せられましたが、アモルファスシリコンの持つ移動度(1~10 cm²/Vs)にはおよぶ物質が得られなかったことから、多くの企業がその開発から離れていきました。しかしながら、ここ2~3年の間に大きなブレイクスルーがいくつかもたらされ、アメリカやドイツで実用化に向けた研究が再燃しています。ひとつは、ペンタセンが蒸着膜の形で1 cm²/Vs程度の正孔移動度を示したことと、¹¹⁾ もうひとつは、大気中でも安定なn型半導体特性を示す有機材料が発見されたことです。¹²⁾ これにより、OFETを組み合わせた論理回路や有機材料の特性を活かしたフレキシブルトランジスターが発表されています。¹³⁾

【2】OFETのしくみ

図1にOFETの概略図を示します。基本的には絶縁膜の片側にゲート電極、反対側にソースおよびドレインの電極を持ち、有機半導体をその上にコートした構造となっています。通常はゲート電極として高濃度にドーブされたシリコンを用い、その上に均一な熱酸化膜を作製し絶縁層として利用します。ゲート電極に正(または負)のバイアスを加えることにより、有機薄膜と絶縁層界面に電子(または正孔)キャリアが蓄積され、ソース・ドレイン間の電流が制御されます。例として、フタロシアニン蒸着膜を用いて作製したOFETの特性を図2に示しま

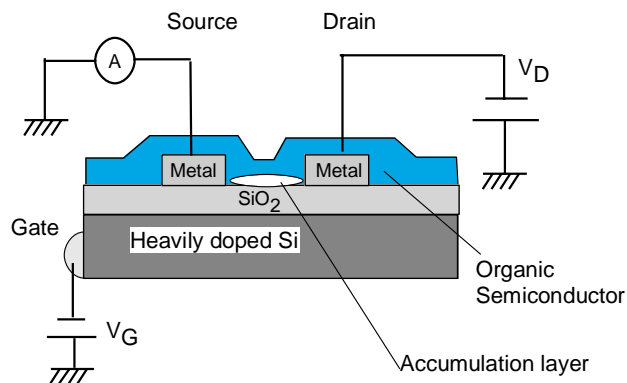


図1 . OFET の概略図。

す。¹⁴⁾ 大気中では正孔が多数キャリアとなっており、ゲート電極に負バイアスを印加するにつれ、ソース - ドレイン電流が増加しているのがわかります。

P型半導体のキャリアの起源は、酸素の吸着の影響と考えられていますが、N型半導体における不純物の起源はよくわかっていません。FETとしての素子特性は、有機薄膜の構造によるキャリア移動度の大きさだけでなく、電極材料や有機薄膜との界面電子状態が影響を与えることがわかっており、技術的工夫による特性改善の余地が残されています。¹³⁾

【3】単結晶FET

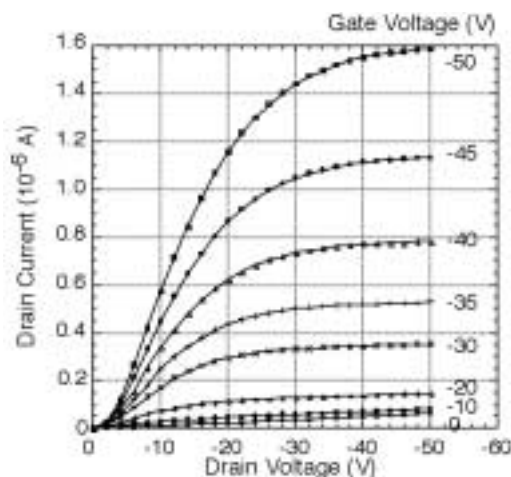
ごく最近、Bell Labから有機単結晶を用いたFETに関し、注目すべき論文がたてつづけに発表されました。¹⁵⁻¹⁸⁾ ひとつはC₆₀やペンタセンの単結晶が、電界によるキャリア集積により極低温で超伝導状態になるという報告です。^{15,16)} 単結晶に間隔25 μmの電極を取り付けその上に絶縁層としてアルミナを蒸着しています。100 V以上の電圧の印加が必要ですが、1 cm²あたり10¹⁴個のキャリアが集積され、超伝導が観測されています。もうひとつはテトラセン単結晶FETを用いて数Vの電圧印加でレーザー発振を実現したことです。¹⁸⁾ 単結晶の電界発光は通常数百Vの電圧印加が必要ですが、FETによるキャリア注入により低電圧での駆動を実現しています。

これらの研究成果は、今後のFET研究において下記のような展開を期待させます。まず、基板材料や有機材料に大きな広がりをもたらされます。これまで、有機材料の上にアルミナを蒸着することは有機物を分解・昇華させるおそれがあるため試みられた例はありませんでした。今回のようにゲート絶縁膜を後から作製することが可能であれば、薄膜を支持する基板材料はシリコン酸化膜である必要はなくなり、さまざまな単結晶基板を用いることが可能となります。次に、ナノメートルサイズの有機グレインの電気特性に興味を持たれます。報告によると超伝導のコヒーレント長は数nmであり、このサイズの有機グレインは比較的容易に作製でき、そのFET特性の測定は興味深いと思われる。

【4】分子を用いたFETの作製と今後の展望

図1の構造において、ドレイン - ソース電極の間隔を分子スケールにまで小さくすることにより、分子のFET特性を測定することが可能となります。すでに1本のカーボンナノチューブ¹⁹⁾や1個のC₆₀²⁰⁾を用いたFETが製作されその動作について議論されています。電極間隔は前者が200 nm、後者が1 nmです。すでに我々は分子1個のスイッチング特性を調べることができるようになりつつあります。

図2 . チタニルフトロシアニン薄膜のFET特性。



純粋な有機分子は本来「真性」状態となるべきですが、ほとんどの有機物は合成時の不純物または雰囲気ガスの影響を受けてp型、n型のどちらかを示す外因性半導体となります。カーボンナノチューブでさえ電気伝導度はガスの影響を強く受けます。すなわち雰囲気によりフェルミ準位が移動してしまいます。不純物を制御しない限り、薄膜デバイス、単一分子デバイスの開発と動作原理の解明は難しいと思っています。また不純物制御により、有機材料では両極性 (ambipolar) トランジスタの実現が可能です。有機材料のキャリア移動度は正孔・電子ともほぼ同じ値を示すものが多く、ambipolar 状態の利用は無機半導体では真似のできない素子を実現させると期待されます。

分子研では薄膜および単一分子系において、ambipolar なトランジスタ動作の実現を試みます。さらにシリコン - 炭素結合を起点とする分子組織体を構築し、局所的な電子状態を調べ、分子スケール電子デバイスの設計指針を与えたいと考えています。次回 投稿の機会が与えられた時には、新しい成果を紹介できるようにがんばりたいと思います。

【文献】

- 1) H. Akamatu and H. Inokuchi, *J. Chem. Phys.* **18**, 810 (1950).
- 2) H. Akamatu, H. Inokuchi and Y. Matsunaga, *Nature* **173**, 168 (1954).
- 3) C. K. Chiang, C. R. Fincher Jr., Y. W. Park, A. J. Heeger, H. Shirakawa, E. J. Lowis, S. C. Gau and A. G. MecDiarmid, *Phys. Rev. Lett.* **9**, 1098 (1977).
- 4) C. W. Tang and S. A. VanSlyke, *Appl. Phys. Lett.* **51**, 913 (1987).
- 5) 総説として、筒井哲夫, *光学* **29**, 225 (2000).
- 6) A. Tsumura *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **49**, 1210 (1986).
- 7) A. Assadi *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **53**, 195 (1988).
- 8) M. Madru *et al.*, *Chem. Phys. Lett.* **142**, 103 (1987).
- 9) <http://www.pioneerelectronics.com/features/9904-OELPreview1.asp>
- 10) <http://www.ee.princeton.edu/~ocmweb/>
- 11) S. F. Nelson *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 1854 (1998).
- 12) Z. Bao *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **120**, 207 (1998).
- 13) <http://jerg.ee.psu.edu/>
- 14) H. Tada *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 873 (2000).
- 15) J. H. Schön *et al.*, *Science* **288**, 656 (2000).
- 16) J. H. Schön *et al.*, *Nature* **406**, 702 (2000).
- 17) J. H. Schön *et al.*, *Science* **288**, 2338 (2000).
- 18) J. H. Schön *et al.*, *Science* **289**, 599 (2000).
- 19) S. J. Tans *et al.*, *Nature* **197**, 49 (1998).
- 20) H. Park *et al.*, *Nature* **407**, 57 (2000).

分子研に着任して

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 川口博之

平成12年5月に名古屋大学大学院理学研究科から分子科学研究所・錯体化学実験施設・錯体物性研究部門の助教授として着任しました。赴任にあたり、分子科学研究所ならびに名古屋大学の諸先生方、事務の皆様大変お世話になりました。この場をお借りしてお礼申し上げます。

赴任した当初は、学生が20名以上いる研究室から分子研に来ましたので、かなり寂しい気がしました。今ではこの研究所の雰囲気にもなれ、たまに大学の研究室を訪ねるとその人の多さに、逆に疲れる様になりました。私をはじめ分子研を訪れたのは、助手として名古屋大学理学部の巽和行教授の研究室に赴任した時です（今から6年程前）。当初、研究室には単結晶X線回折装置がなく、分子研の施設利用で構造解析を行い月に1回程度、お世話になっていました。1週間の使用期間内にできるだけ多くの構造を決定するために、南実験棟の地下室にあった測定室で夜を明かしたことを良く覚えています。それからは、岡崎コンファレンスや研究会などで分子研を訪ねる機会が多くなりましたし、平成10年から錯体実験施設の流動部門の助手として1年半お世話になりました。そして今回、この分子研で独立して研究する機会を与えられました。赴任が決定した当初は、正直なところ喜びよりも、自分の研究能力や研究室の運営に対しての不安が大きかったのですが、この岡崎から新しい錯体化学を発信できるよう努力していきます。

我々のグループでは合成実験を中心に研究を進めていきますが、南実験棟の合成実験用に整備された部屋を研究室として使用できましたので、ガラス器

具をセットするだけで実験をスタートすることが出来ました。しかし、我々が合成する化合物の構造決定にはNMRなどは補足的なデータを得るのに使えるだけで、最終的にはX線構造解析を行う必要があります。茅所長と錯体化学実験施設の先生方の尽力により、施設のX線回折装置をCCD検出器を搭載した装置に更新することができました。従来の測定装置だと数日（1週間以上の時もあります）かかる測定が、新しい装置だと1日で終了します。この装置の導入で研究のスピードアップが期待できますし、従来では反射の測定ができなかった微量結晶の構造決定も可能になります。

研究内容についてですが、我々のグループでは、新しい有機金属化合物や配位化合物の合成、構造、反応性、および結合や電子状態に興味をもち、研究を行っています。これまで金属錯体および有機金属化合物の合成に関する研究、特に硫黄やセレンを配位子とするカルコゲニド化合物の研究を中心に行ってきました。現在、これまで行ってきた研究を踏まえて、カルコゲンを配位子にもつ錯体化学を中心に以下の研究を進めています。

金属硫化物は水添反応や脱硫反応等の触媒としてはたらくが、これに第二の金属を添加すると触媒活性が向上することが知られています。一方、金属酵素の活性中心には様々な異核金属クラスター（ニトロゲナーゼ、ヒドロゲナーゼ等）が存在することが知られています。我々は、興味深い反応性を示すこれら異核金属硫黄化合物を手本として、



異核金属カルコゲニドクラスターを設計・構築し、工業触媒や金属酵素よりも優れた機能をもつ異核金属カルコゲニドクラスターの創製を行っています。

生体内では金属硫黄クラスターが多く存在し、これらが高度に集積化することにより電子伝達反応や触媒反応を円滑に行っています。そこで、金属硫黄クラスターを段階的に連結することにより、各段階において新しく発現する物性や反応性と構造の関係を明らかにし、金属硫黄クラスターの潜在的な機能の開拓を目指します。

金属酵素の活性中心に存在する金属-硫黄化合物や脱硫触媒のモデル化合物として、錯体化学者により様々な金属-硫黄クラスターが合成されています。しかし、金属-硫黄クラスターの合成で反応式から生成物を予測することは難しく、目的とした構造をもつ化合物を構築する有用な合成法はありません。このことが金属-硫黄クラスターの研究において大きな問題点のひとつになっています。そこで金属-硫黄クラスターの合理的な合成法の開発を行っていきたくと考えています。

窒素分子は不活性な分子ですが、様々な金属錯体に結合できることが現在、知られています。しかし、硫黄配位子をもつ窒素錯体の例は非常に限られています。これは生体内で活性中心に金属硫黄クラスターをもつ窒素固定化酵素が窒素分子のアンモニアへの変換反応を温和な条件で行っていることと対照的です。我々はチオラートやスルフィド配位子をもつ金属錯体上での窒素分子の活性化を目指し研究を行っています。

以上の研究を通してこれまでにない結合様式、構造および反応性をもつ化合物を合成していきたいと考えています。現在、研究室の立ち上げの最中であり、先に述べた課題以外に何かオリジナルなテーマを見つけようと奮闘中です。

現在、研究室のメンバーは私と名古屋大学大学院からの受託院生の2人の合計3人です。この研究室紹介が掲載されるころには新しく助手がグループに参加している予定です。まだ小さなグループですが、広い視野に立って、楽しみながら研究を進め、化合物を見ただけで我々が行った研究であることが皆さんに理解していただけるような独自の錯体化学・無機化学を展開していきたいと考えています。

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のと同義です。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ならないほど「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
 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。

分子構造総合討論会運営委員会の発足の経緯について

東京大学大学院理学系研究科 濱口宏夫

昨年9月に東京大学駒場キャンパスで行われた第33回分子構造総合討論会において、標記運営委員会の発足の可否と、第一期の委員候補者の信任を問う投票が、討論会登録者全員を有権者として実施されました。その結果、運営委員会の発足が承認され、39名の委員が信任されました。またその後の委員による互選で、代表幹事として関一彦教授（名大物質国際研）、幹事として平尾公彦教授（東大院工）、大野公一教授（東北大院理）および筆者が選出されました。今後、分子構造総合討論会は、この運営委員会と、その下部に年度毎に設置される実行委員会によって運営されてゆくこととなります。運営委員の名簿および運営委員会規約については添付の資料をご覧ください。

ここでは、本レターズ編集委員長藤井正明教授の要請に従い、この運営委員会の発足のための準備に携わった者の一人として、その経緯を記録にとどめておくことにします。より多くの分子科学研究者の皆様、分子構造総合討論会の運営に対するご理解とご支援を賜るための一助となれば幸いです。

分子構造総合討論会は、分子科学分野で最大規模の国内討論会であり、日本の分子科学の発展に大きな役割を果たしてきました。この討論会は従来、年度毎に選出される「世話人」が全責任を持ってその年度の討論会を実行するという方式で運営されてきました。「世話人」を選出する母体として「世話人連絡会」があり、そこで次年度、次々年度の世話人を、主として持ち回りの原則で決めていました。し

かし、「世話人連絡会」は、委員の選出法や任期などが明確に定まっていなかったため、その位置づけが曖昧であり、討論会の長期的課題を討議・決定する機関としての機能を十分に果たすことができませんでした。一例として、討論会の名称変更の問題があります。この問題は十数年前に故森野米三教授が討論会の懇親会の席で提案されて依頼、永年の懸案となっていますが、未だに決着がついておりません。また、近年の参加者の急増に対応して、討論会の発表形式を再検討する必要が繰り返し議論されていたものの、具体策を実行するに至っていませんでした。

このような状況のもとで、1997年の名古屋での討論会期間中に行われた「世話人連絡会」で、分子構造総合討論会のありかたを抜本的に見直すべきであるという機運が高まり、2000年度での実行を期して改革に取り組むことが決まりました。2000年度に討論会を担当することがほぼ決まっていた東京大学の委員を中心として、東京地区の「世話人連絡会」委員に改革案のたたき台作りを委嘱し、次年度の松山での会議に答申を求めるという手順も合意されました。筆者はその際、「世話人連絡会」をもっとオープンなものに改組すべきであるという発言をしていた関係で、答申案をつくる作業の世話役をする羽目に陥りました。もっと正確に言うと「言いだしっぺの自分がやらなければ、またもとのもくあみになる」という義務感と使命感の入り交じった複雑な心境で、この問題に関わることとなりました。ただし、多くの研究者を巻き込む大変重要な問題であるので、お世話するからには万全を期して遂行しよ



うと決心しました。

まず1997年11月に、東京地区の「世話人連絡会」委員17名の合意を得て、全国の委員を対象とした5項目のアンケート調査を実施しました。沢山の意見が寄せられ、整理に多大な時間を要しました。1998年4月24日に東京大学の委員4人が渋谷で会合し、アンケート結果を分析したうえで、東大委員としての答申原案を作成しました。7月15日に、御茶ノ水の化学会館で東京地区の「世話人連絡会」委員会(17名中11名出席)を開催し、東大原案を討議して、それに基づいて5項目からなる東京地区からの答申を決定しました。これを9月18日に松山で開かれた「世話人連絡会」に提出したところ、まさに議論百出し、明確な結論を得るに至りませんでした。結局、5項目の答申のうち「世話人連絡会」の改組に関する事項については、筆者が翌年までに具体案を作成して成案とすることを目指す、それ以外の改革は各年の当番校の責任において実施することになりました。筆者は、筆者が指名する数人のご協力が得られることを条件に、「世話人連絡会」改組の具体案の作成と、規約の起草作業を引き受けました。ご協力をお願いしたのは、西信之教授(分子研)、関一彦教授(名大院理、現在物質国際研)、向井和男教授(愛媛大理)、松尾隆祐教授(阪大院理)の4人の方々と、筆者を含む5人で規約の起草委員会を構成することになりました。

1999年の2月に入ってから、上記起草委員会、規約案作成のためのアンケートを準備し、3月

16日に全国の委員宛送付しました。5月の末にこのアンケート結果を集計し、それをもとに5人で検討を重ねた結果、8月の末によろやく分子構造総合討論会運営委員会規約(案)、運営委員会委員選挙細則(案)、運営委員会幹事選挙細則(案)、実施細則(案)からなる最終案の策定にこぎ着けました。この最終案を9月29日の大阪での「世話人連絡会」に提出しました。いくつかの微小修正を求める意見が出されましたが、起草委員会の責任で指摘された修正を行うことを条件にこの原案が承認されました。その結果、翌年(2000年)の討論会において、運営委員会の発足の可否と、委員候補者の信任を問う選挙を行うことが確定しました。

2000年5月23日に、起草委員会から提出する規約および細則の最終案の策定に着手し、7月末にこれを決定しました。また、決定した規約(案)に基づき、運営委員会委員の候補者の確定作業に入り、討論会直前の9月19日に候補者名簿を確定しました。これでよろやく投票の準備が整いました。「世話人連絡会」の承認を得て、選挙管理を永田敬教授(東大院総合)にお願いし、投票用紙や投票箱の準備をして頂きました。そして、9月27日から3日間にわたって投票を実施し、これを無事終了することができました。

以上が、1997年から足掛け4年にわたった作業の概要です。この作業に携わった者としては、運営委員会が無事発足して「一件落着」の感がありますが、一方、多くの討論会参加者にとって、この改

革が唐突であったことも事実であり、忸怩たる思いもあります。まさにこのような「大多数の参加者が知らないところで、いつの間にか方針が決まってしまう」ことを避けるために、今回の運営委員会が発足した訳ですが、しかしその発足のための準備は、既存の「世話人連絡会」の枠組みの中で行わざるを得なかったことをご了解頂きたいと思います。今後、ホームページ活用などにより、討論会参加者と運営委員会・実行委員会との意志の疎通が大幅に改善されることを願ってやみません。

現在、分子構造総合討論会はいくつかの大きな問題を抱えています。前出の名称変更の問題がその一つです。また、日本化学会の秋期年会との同期開催の可否、分子科学研究会との提携の問題、あるいは日本化学会の部会との関係なども旧「世話人連絡会」で議論されています。さらに、参加者の急増に伴う

発表方式の見直しも重要な検討課題となっています。このような問題を解決するには、明確な手続きで選ばれた参加者の代表が、参加者全員に見える形で問題を十分に討議し、その上で意見を集約して方針を決定する、というプロセスが不可欠です。このプロセスを担う機関として、運営委員会がその機能を遺憾なく発揮することを期待します。

最後に、アンケート調査等でご協力頂いた旧「世話人連絡会」委員の方々、最終案のとりまとめにご尽力頂いた起草委員の方々、とくに終始ご助言を賜った関一彦教授、また選挙管理をお願いした永田敬教授に感謝致します。これらの方々をはじめ、多くの討論会関係者のベクトルの方向が一致したことが、今回の運営委員会発足という目標を、まがりなりにも達成できた原動力であったと強く感じています。

分子構造総合討論会運営委員会委員

(2年任期委員：2002年討論会で改選)

大橋 修、廣瀬千秋、西 信之、松浦博厚、旗野嘉彦、小谷正博、加藤 肇、岡田 正、八木幹雄、三上直彦、関 一彦、大橋裕二、田中武彦、山口 兆、平尾公彦、小中重弘、茅 幸二、山崎 巖、岩田末廣、林 久治、藤本 博、松尾隆祐、池本 勲

(4年任期委員：2004年討論会で改選)

中辻 博、梶本興亜、伊藤紘一、大橋信喜美、菅原 正、濱口宏夫、山内 薫、正島宏祐、薬師久弥、榎 敏明、北川禎三、増原 宏、工位武治、大野公一、奥田 勉、向井和男



分子構造総合討論会運営委員会規約

1) 名称および機能

委員会の名称を、分子構造総合討論会運営委員会（以下運営委員会と略す）とする。運営委員会は、分子構造総合討論会の開催地、運営の基本方針などを討議、決定する。運営委員会は、各年度ごとに分子構造総合討論会実行委員会（以下実行委員会と略す）を設置し、実行委員長を指名する。実行委員会は、運営委員会で定まった基本方針の範囲内で、特色ある討論会を企画・実行する自由度を持つ。

2) 委員の定数

定数を30名とする。運営委員会が必要と認めた場合は、最大5名まで追加することができる。

3) 委員の選出

新委員は、運営委員会委員による選挙により選出する。ただし、ここに言う運営委員会委員は、退任予定の委員を含む。候補者は、自薦および他薦により決定する。前年度の参加登録者は推薦人となることができる。選出に際しては、研究者分布を考慮した形で、各地域、各分野からの代表者が委員として選ばれるよう留意する。委員選挙についての細則は別に定める。

4) 委員の任期および年齢制限

委員の任期は4年とし、2年ごとに半数を改選する。2期連続の重任は不可とする。任期終了予定年の8月31日現在で65才を超える者は、被選挙権を持たない。

5) 幹事および代表幹事

運営委員会に幹事4名をおく。幹事は委員の互選により選出する。幹事の任期は2年とし、2名を継続委員から、2名を新任委員から選出する。継続委員から選出された幹事2名のうち、得票数の多い者を代表幹事とする。幹事選挙についての細則は別に定める。代表幹事は運営委員会の議長をつとめる。代表幹事は必要に応じて電子メール等により、運営委員会委員全員の意見を聴取・調整し、運営委員会の意思形成の過程に資する。幹事は、委員としての任期が終了後も、次期幹事が選出されるまで、その任にあたる。幹事は代表幹事を補佐する。

6) 委員会の開催

定期の運営委員会は年1回、討論会の会期中に開催する。幹事が提起し、過半数の委員が必要と認めた場合には、臨時的委員会を開催することができる。運営委員会は、委員の2/3以上の出席（委任状を含む）によって成立する。

7) 運営委員会規約の改訂

運営委員会における過半数の賛成により、この規約および付随する細則を改訂することができる。

分子科学研究所一般公開

3年に一度行っている分子科学研究所の一般公開「分子科学への招待」を10月21日(土)に実施しました。不思議なことに前回同様前日は大雨でしたが、当日は爽やかな天気恵まれ、午前9時半の所長の開会宣言とともに順調に開始されました。小、中、高、大学生、家族連れ、年輩の方々も多くの方が見学して下さいました。今回は、各研究グループや施設が用意した展示が29件あり、講演は今迄通り3件でした。受付では、見学者の皆さんに、機構の冊子、機構の宣伝パンフレット「OKAZAKI」、分子研の宣伝パンフレット、アンケート用紙、分子研の文字入りボールペンとプラスチック製ファイルの一式を展示及び講演の題目と地図を印刷したファイルに入れて配りました。これは中々好評だったようです。講演は魚住教授、岡本助教授、平等助教授による、「見えないけれど身近な分子」、「ポストゲノム時代の分子生命体科学」、「高性能マイクロチップレーザーの展望」の題目で午前1件午後2件、それぞれ1時間に亘って熱心に行われました。展示、講演ともにテレビ取材もあり緊張の中で良い公開が出来たのではないのでしょうか。

展示会場が色々な建物にかなり広く点在している事を考え今回は少し工夫をこらしました。その第一は、展示をAからEまでのグループに分け、見学者の好みに応じて好きな所からスタート出来る様にしました。今迄は、回るコースを決めていたので、混雑が時間とともに移動するという状況になっていたのですがこれをある程度解消することが出来ました。ただ、アンケートの記入と回収の場所は一ヶ所にしましたので、そこに戻ってもらえる様に工夫する必

要は生じました。それから、あちこちに出来るだけ多くの椅子を置き休憩を取れる様に工夫もしました。

分子研の一般公開も今回で9回目となりますが、若い研究者が自分達の平素の研究内容を一般の方々に理解してもらえる様に一所懸命に説明すると言うノウハウもちゃんと引き継がれていて大変良かったのではないかと思います。本物の科学に触れ、説明を聞いて聞いている姿を見ると、説明している人もやりがいを感じたろうと思います。アンケートでも一所懸命の説明に感謝する内容が相当ありました。これからは、基礎学術研究においても「説明責任」が一層問われる様になりますから、一般公開の定着とともに、平素研究者仲間では考えもしない様な質問にも答えらるよう訓練・努力を心掛けていく必要もあるでしょう。

最近の地震や色々な事件の多さを考え、細かい所にも気を配って準備をして頂いたお陰で事故もなく無事に終えることが出来たのは何よりであったと思います。管理局の方々、分子研の職員の方々の努力に改めてお礼を申し上げます。ただ一つ残念だったのは、見学者の数が1500名弱と例年より少し少なかったことです。これは、小中学校の登校日および高等学校の試験日に重なったこと等が響いたようです。次回からは、この点にも気を付けて開催日を決める必要があるでしょう。以下に展示項目と講演題目の一覧を掲げておきます。

一般公開実行委員長
中村宏樹



展示内容

- A01: スーパーコンピューターで探る分子の世界
- B01: 液体のミクロな構造と動きを探る
- B02: ナノメートルの世界を創る・視る
- B03: ドラムにきざまれた化学反応の歴史
- ドラムレコード型質量分析装置の開発
- B04: イオンで計る分子の指紋
- B05: 化学結合という「ばね」
- B06: 金属酵素の働き
- B07: 分子と磁石
- B08: 電波で調べる分子集合体の不思議な世界
- B09: 分子科学研究をささえるガラス工作
- B10: 真空中で方向の揃った分子クラスターの発生
その構造と反応性の解明
- B11: 原子を集めてミクロの「だんご」をつくる
- B12: ゼロから始める光合成
- B13: ミクロの時間の化学

- C01: 物性のコンピュータ・シミュレーション
- C02: 光でみる有機伝導体の性質
- C03: 金属蛋白質の科学
- C04: 多核金属錯体の集積化
- C05: 化学物質のエネルギー変換
- C06: 水中での化学反応
- D01: 実験装置のいろいろ
- D02: 電磁誘導でさぐる物質の磁性
- D03: He 液化機のしくみ
- E01: 世の中のために役に立つレーザー
- E02: 宇宙の光を地上で使う - 放射光による分子科学 -
- E03: 加速器からの光で見る物質内部の電子
- E04: 放射光で拓くナノ科学の世界
- E05: 金属に強く束縛された電子を光で取り出す装置
- E06: 極端紫外光で外殻電子を見る



講演会

見えないけれど身近な「分子」

- 光学活性有機分子の開発を中心に -

魚住 泰広

ポストゲノム時代の分子生命体科学

- 計算機シミュレーションによる蛋白質分子の立体構造予測

岡本 祐幸

高性能マイクロチップレーザーの展望

平等 拓範

第 10 回分子科学研究所オープンハウス

2000年5月13日(土)に第10回分子科学研究所オープンハウスが開催されました。この行事は、全国の大学院生・学部学生および社会人を対象とする見学会です。この見学会は毎年一度春に開催されており、分子研の研究内容を主に学生向けにわかりやすく解説すると同時に、総合研究大学院大学の基盤機関としての分子研の教育活動について外部の人々に知っていただくことをも重要な目的としています。

3月頃から学会誌(日本化学会、日本物理学会、および日本生物物理学会)に広告を掲載し、分子科学関連分野の研究室に電子メールなどで案内を送り、またポスター・チラシを印刷して学会会場や全国の大学で掲示をお願いして参加者を募集しました。参加者は合計53名で、内訳は次の通りです。中部地

区からの参加が多かったのですが、中には鹿児島大学・新潟大学・東北大学など遠方からの参加者もあり、熱意が感じられました。

学部4年生	15
修士1年生	19
修士2年生	13
博士課程学生	5
社会人	1

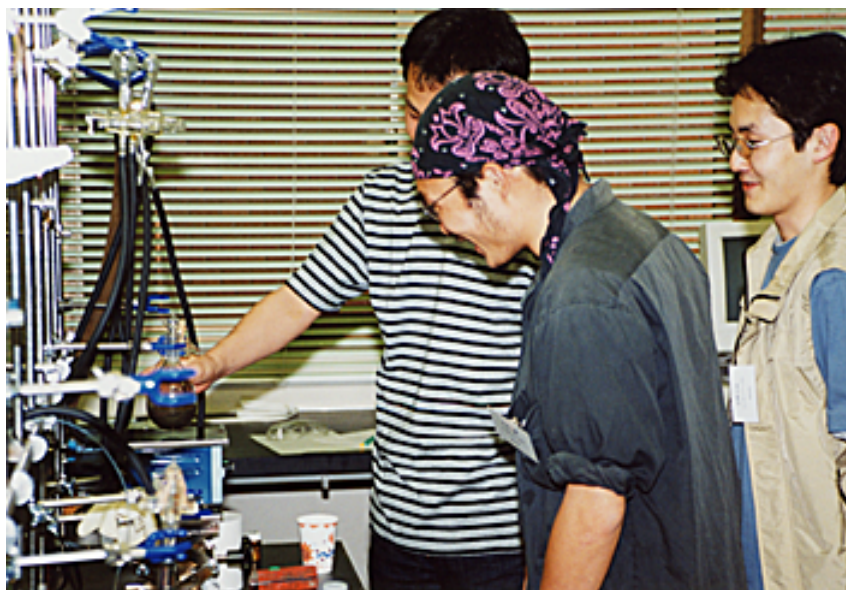


分子研の概要を説明する茅所長



説明に熱心に聞き入る

実験の実演も
あったりして・・・



当日は、参加者に午後
1時にコンファレンスセ
ンターに集まっていただ
き、映画「分子科学」を
(待ち時間に)上映した
あと、茅所長が分子科学

研究所の概要を説明し、続いて田中晃二教授が総合
研究大学院大学の概要を説明しました。次に総研大
生(構造分子科学専攻3年)の和田亨君に「学生の
目から見た総研大」について話してもらいました。



次はどこに行こうかな

このあと約3時間半にわたって、参加者は研究所
内を自由に見学しました。各研究グループが工夫を
こらして研究内容を説明し、特に学部学生の人など
は見たこともないような装置を目の前にして感激し
ていました。ただ、アンケートを回収してみたところ、
広すぎて大変・展示場所がわかりにくい、など
の意見もあり、案内の掲示にもう少し力を入れる必
要があったようです。

夕方には、参加者と研究所のメンバーが集まって
職員会館にて懇親会を行ない、和やかな雰囲気の中
で終了しました。

本年も実り多いオープンハウスを無事終了するこ
とができました。所内のみなさん、および各大学の
の方々のご協力・ご理解に感謝いたします。

(永田 央 記)

にぎやかな懇親会



北の国から

北海道大学大学院工学研究科助教授 佐藤 信一郎
(前 分子制御レーザー開発研究センター助教授)

実質二年間という短い間でしたが、前所長の伊藤光男先生、現所長の茅幸二先生をはじめとして分子研の皆様には大変お世話になりました。これまで研究場所を移る度に研究テーマを変えてきましたが、北陸先端大から分子研への異動では、ゼロからの研究室創りを進めながら十分な研究成果を残すということが出来ませんでした。関係者の方々に御迷惑をお掛けしてしまったことが心残りです。ここで紙面ながらお詫びを申し上げます。

北大に移りましてからは、はじめて研究場所が変わってもテーマを変えることなく、分子研で始めたレーザー波形制御を基とする分子の量子状態制御の研究を続けております。幸いなことに、最もベーシックな制御法ともいえる「位相ロックパルス対レーザーによる電子励起状態の波束干渉」に目途が立ち多少安心しているところです。現在、順調に研究が進行しているのは、分子研での蓄積が基礎にあるものと思っております。改めて分子研での研究の機会に恵まれたことに感謝いたします。

岡崎を去って北海道という北の地に住み初めて、はや半年以上過ぎてしまいました。今、厳しい北海道の冬を経験しております。岡崎は本当に住みやすい土地だったなあと感じながらも、新しい土地での新しい生活を楽しんでおります。初めて本格的に講義を受け持つことになりましたが、幸い二年生の量子化学を担当することになりました。自分が学生の頃を思い出しながら、毎週講義内容を考えるのが楽しみになっています。

岡崎でのちょっとした不満は「上手いうどん屋はあるのに、上手いラーメン屋が無い」ということで

したが、札幌に移って上手いうどん屋が無い代わりに上手いラーメン屋が沢山ある環境になりました。寒い冬に啜る熱い味噌ラーメンは格別です。しかし、札幌には上手い鰻屋がないのが残念です。岡崎の鰻屋は本当に美味かった。自然も生活習慣も岡崎とは大分と違う北の地に移りましたが、研究活動においては分子研の雰囲気から得た「常に新しい研究を創っていく姿勢」を保って志の高い研究を続けていこうとおもっております。

最後になりましたが、斎藤修二前センター長、藤井正明現センター長、そして分子制御レーザーセンターの皆様、特に山中さん、林口さん、寺田さんには本当にお世話になりました。厚くお礼申し上げます。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。



通勤電車の中で考えること

東京工業大学大学院総合理工学研究科 山下 敬郎
(前 分子物質開発研究センター助教授)

分子研には約11年間お世話になりました。所長をはじめ分子研の皆様および管理局の皆様にはあらためて感謝を申し上げます。この間に私が居りました化学試料室が現在の分子物質開発研究センターに改組されるという大変革も経験致しました。化学試料室は助教授1グループだけの小さな組織で化学物質の合成、分析や廃棄物の管理などと業務も限られたものでしたので比較的のんびりとたいしたプレッシャーもなく仕事をさせてもらい、いつのまにか10年近くを経過していました。極低温センター、機器センターの物性部門と一緒にあって現在のセンターがスタートしたのは平成9年4月です。従来の施設としての役割に物質開発研究を行う研究センターとしての活動が加わったわけです。新規物質が物質科学の進展に果たす役割は大ですので、このセンターから研究のブレークスルーにつながる分子が誕生しますことを願っております。

さて、私は4月から東工大に移りましたが所沢市に住んでおり、長津田キャンパスまで片道1時間半かけて通勤しております。JR武蔵野線、JR南武線、東急田園都市線にそれぞれ20分ぐらい乗っております。山手線のずっと外側の環状線を利用していることとなります。今までの勤務先は地方都市でしたので、分子研のように住居が近いところは歩いて通ったり、遠い場合でも車で通勤しておりました。電車を使った通勤は初めてのこととなります。電車の中の1時間は最初の頃は特に新鮮で、乗客達の様子をながめたり、耳にはいつてくる会話を聞くとも無しに聞いているうちに目的駅に着いていました。日本の社会の様子も通勤電車に反映しているよ

うで、今の流行も分かるようになりますし、研究者の世界とはまるで違う雰囲気も味わえます。宣伝の雑誌の見出しを眺めていると芸能関係のニュースに詳しくもなります。帰宅する時に夜の9時より10時の電車の方が混むのに気づいて、夜型の社会になっているのだなとあらためて感じました。また、人身事故で電車がストップしたのに3度も遭遇し、社会の暗い面を強く感じさせられたりします。半年以上電車通勤したこの頃はだんだんと読書の時間が増えてきました。しかし、往復の通勤時間の3時間は貴重な時間ですので、もう少し有効に使いたいと考えております。この文章の内容も電車の中で考えましたのでタイトルに使いました。研究の面では電車の中では研究室とまた違った発想がでてきますので、新しいアイデアが生まれるかも知れません。

私の所属しております総合理工学研究科は学部を持たない大学院で、外部から研究室志望の学生を集めてこなければなりません。この点では総研大と似た面がありますが、修士からという点と学生数がずっとこちらの方が多いという点が大きな違いです。自分の研究室には今年度は学生がおりませんが、隣の研究室のにぎやかな学生達を見ていると大学にすることが実感してきます。私の専門の合成化学ではマンパワーがかなり重要ですので、分子研でマンパワー不足で出来なかった化合物の合成を是非実現したいと考えております。

分子科学研究所の流動教授を終えて

山形大学理学部 西 田 雄 三

(前 錯体化学実験施設錯体合成研究部門教授)

分子科学研究所錯体化学実験施設の流動部門教授として赴任してから、はやいものでもう2年以上が経ちました。山形大学勤務中は、従来の金属錯体触媒による酸素酸素化反応機構にどうしても納得がいかず、自分なりの、従来の酸素化反応機構とは全く違った、より合理的な機構を提案したつもりですが、分子科学研究所では、その機構の実験的な証明を得ることと、これからの新しいテーマに向けて新しい分野を開拓する、の2点に絞って過ごしてきました。

酸化反応は、有機化学では還元反応と並んで二大反応で、それと関係する発表された論文は膨大なものですが、これまで提案されている機構が正しいかと言えば、少なくとも酸素添加反応について言えば、間違っていると思います。私の機構では、これまでのような、反応を点で考えるのではなく、線で考える方式で統一しました。また、実験とは別に、従来からDFT計算をやってみたいとは思っていたのですが、地方大学では、経済的な理由でできませんでしたが、分子科学研究所でそれも開始できました。結果の一部はすでに報告していますが、現在までの時点では理論的な計算結果は私の機構とは矛盾していないようです。

すでにInformation Bulletin No. 34, 1999で御承知とは思いますが、今年からこの流動部門が廃止されることとなります。これは錯体化学から言えば発展的な解消であるときいておりますので、今後の好展開に期待したいと思います。流動期間中、伊藤、茅両所長、田中先生をはじめ分子科学研究所のかたがたにいろいろとお世話になりました。この場を借りて厚く御礼申し上げます。

My stay at the Institute for Molecular Science



Olga Drozdova

It is time to summarize my yearlong stay in the Institute for Molecular Science, which has been both pleasant and fruitful. I am deeply indebted to Prof. K. Yakushi for inviting me to join his laboratory and also to his group members for their warm hospitality and kindness. This visit was a natural extension of my work in Kyoto University in the laboratory of Prof. G. Saito (1998–2000), during which I visited Prof. Yakushi's group a number of times for experiments.

The first project was comparative study of the infrared and Raman properties of κ - and κ' -(ET)₂Cu₂(CN)₃. We discovered an oriented homogeneous mixture of two kinds of ligands in the superconducting (κ' -) compound, estimated the mixing ratio, and examined the correlation between the properties of superconducting state and composition. Second project was motivated by the absence of a reliable tool for estimating the charge transfer degree of BEDO-TTF complexes. We employed Raman spectroscopy and found a linear correlation between two C=C stretching modes and charge on BEDO-TTF in the region between 0 and +2. It was applied to dozens of complexes where other methods were not applicable or not reliable, and allowed us to estimate the critical charge value $\rho = +0.3$, above which BEDO-TTF tends to self-assemble into a two-dimensional layer with extremely small anisotropy, and to provide metallic and highly conducting complexes. The main interest of the passing year was spectroscopic study of organic metals, for example, calculation of the electronic band structure and Fermi surface of (EO-

TTP)₂AsF₆ from the infrared spectra, and understanding optical properties of a strongly correlated organic metal κ -(ET)₂Cu(CN)[N(CN)₂] in the far-infrared region where the intraband transition of the free charge carriers appears.

In summary, the high level of fundamental scientific research, excellent facilities, close scientific interaction and international atmosphere of IMS benefit both the Institute and foreign visitors and allow to obtain exciting results and generate new ideas for future development.

My impressions of the IMS

Sam D. Moré

Two years ago I arrived in Okazaki to study NEA formation on GaAs, to learn a new technique (photoemission spectroscopy) and last not least to experience life and work in Japan. Previously I had been for short scientific stays in both Huntsville/Al and Bercely. Studying first in Hamburg and later in Berlin both at the Free University and the Fritz-Haber Institute, which might be comparable in equipment and funding with the IMS, I had therefore spent most of my scientific life in large cities. Now I was exchanging Berlin with a place that had less than 1/10 of inhabitants. I was curious how this would shape my stay and how this would characterize the IMS and distinguish it from other institutes I have worked before.

At least for me as a foreigner the most important feature was the international campus-like community I found around the IMS and the neighboring institutes—the unique mix of long-time scientists, who stay typically for more than one year, the visiting scientists who will be here only for a few weeks or months and finally the ones who only come for a few days to give a lecture. Also Japanese scientists tend to stay for long hours at the institute. In a sum this creates a thriving interdisciplinary scientific community which I experienced as an especially stimulating atmosphere.

Additionally to both formal and informal meetings or conferences, I enjoyed many evenings with neighbors from all over the world, be they from Sweden, the US, Korea, Vietnam or China, to name just a few.

In my experience information is freely shared between research groups. Something special in that context was also the former interdisciplinary “Beer seminar with pizza and sushi” that used to take place in the rooms above the cafeteria until the organizing scientist left for a position in the US.

The number of people on a particular group defines both social climate and group hierarchies more than other any other factor.

As Okazaki is a small town, ethnic communities do not form that exclusively—creating a unique community of foreigners which is—when I compare it to the ones I heard about Tokyo, Nagoya or Osaka and experienced in San Francisco or Berlin—more open and which truly enabled me to get more than a glimpse from other cultures.

I have also found the Japanese population of Okazaki very friendly and helpful, and this includes both the IMS administration and the one from city hall. I have rarely encountered a more efficiently organized bureaucracy as well. Therefore one of my first impressions was the astonishment that on the day I arrived in Japan everything from housing to my JSPS settling in allowance to the kindergarten place for my daughter was ready and waiting for me.

In fact the family friendly attitude I found in Japan and at the IMS, has definitely contributed to the success of my research at the IMS.

Here I have in particular also to thank my host, Prof.



M. Kamada, and the other members of both his group and the UVSOR department with which I have worked for the past two years.

What I found important as long-time foreign scientist and what might be also a good idea for other visitors was to learn some Japanese. I found that knowing some Japanese also facilitated communication in English: hearing my mistakes in Japanese probably made people feel less selfconscious about foreign languages. A good option might actually be to learn Japanese in advance or exclusively during the first months. In spite of the language barriers, connecting with people outside the institute is fairly easy as Okazaki offers the various activities of the OIA, a choir, and a large variety of sports-clubs.

Situated between the sand beaches of the warm pacific ocean and the mountains of central Japan, and with an almost subtropical climate the founders of the IMS therefore definitely picked a good site to build.

All this has made me feel so much at home that I decided to continue my stay as an IMS fellow in the group of Prof. T. Urisu, now starting a new exciting project, whose aim is to combine biological material with nanostructures.

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取り組みられました。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

高分解能分光器用光学素子表面形状測定装置 遠赤外光用軸外し放物面鏡

IMSマシンは、先端的研究装置の提案を、毎年所内から募り、その設計・製作を行っている。今回はその内、以下の2件（「高分解能分光器用光学素子表面形状計測装置」と「遠赤外光用軸外し放物面偏光鏡」）について報告する。報文は各課題の担当技官による。

高分解能分光器用 光学素子表面形状測定装置

提案者： 木下豊彦（現東京大学物性研究所）
開発担当者： 吉田久史、堀米利夫（現北陸先端科学技術大学院大学）、浅香修治（現文部省初等中等教育局）

我々は、放射光実験施設において高分解能分光器を建設する際に必要な光学素子の形状を精度良く測定するための装置を製作した。本装置の構成を図1に示す。形状測定の方法は、被測定物にレーザ光を入射し、その反射光の位置と方向を測定するものである。入射光には半導体レーザ（L）を反射光の検出には4分割フォトダイオード（D1、D2）を使用し、それらを個別にリニアスケール付きのY-Zステージにマウントした。フォトダイオードは、常に反射光の重心位置を追いかけるように、ハードウェア上でフィードバック制御をかけることができる。レーザ光の走査と反射光の位置の測定は、パソコンにより自動的に実行され、得られた位置データを使って被測定物の形状が計算される。製作した表面形状測定装置を写真1に示す。現在、キャノテック株式会社との技術提携により、装置の測定精度等の評価を行っている。

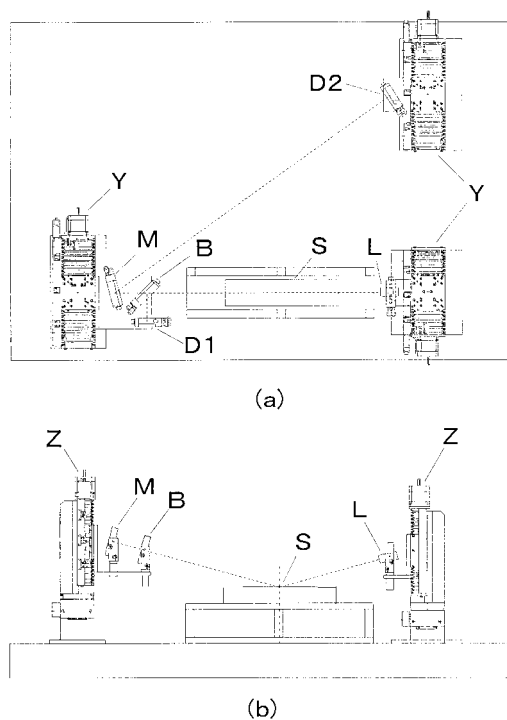


図1 光学素子表面形状測定装置
(a) 上面図、(b) 側面図
L；半導体ダイオードモジュール
S；非測定物
B；ビームスプリッタ
M；全反射ミラー
D1、D2；4分割フォトダイオード
Y、Z；リニアステージ



写真1 表面形状測定装置
(a) 光学測定部 (左上)
(b) 計測制御部 (左下)



遠赤外光用軸外し放物面鏡

提案者： 大竹秀幸（分子制御レーザー開発研究センター）、矢野隆行（現名古屋大学）

開発担当者： 矢野隆行（現名古屋大学）、鈴井光一

遠赤外光用軸外し放物面鏡の製作過程に於いて以下に示すような成果を得たので報告する。

本課題は、従来行われていた軸外し放物面鏡とワイヤグリッドを組み合わせた遠赤外領域用の実験装置を、軸外し放物面鏡の表面に一様なけがき線を入れた光学素子で代用することを目的としている。しかしながら製作の段階で、表面粗さ $0.5\ \mu\text{m}$ の表面上に $0.3\ \text{mm}$ 間隔、深さ $0.2\ \text{mm}$ 弱の円弧状格子までしか現状の方法では製作する事が出来なかった。また、放物面上に切削方式で溝を施す場

合、放物面形状によって切削工具の一部が干渉してしまい、切削工具や設置方法を工夫しても製作出来ないものが現れる事も分かった。

この結果から、製作方法について再検討した。具体的には、「切削」という方法から精度良く仕上げられたアルミ製板を「重ね合わせる」方法を採用した。まず最初の段階として、平面型の回折格子を「重ね合わせ」法により製作した。概要を図2に示す。素材にはアルミ材（A1015： $t = 0.3, 0.5\ [\text{mm}]$ ）を使用し、図中A部を切削、研磨加工を施した。また、部品としては、高さの違う2種類を用意し、互い違いに並べ重ね、専用のボックスに収納することで実験に使用する。次に、回折効率を上げるため、図2中のA部に角度を持たせたものを製作した（図3）。この素子に遠赤外光を用い照射角度を変化させつつ

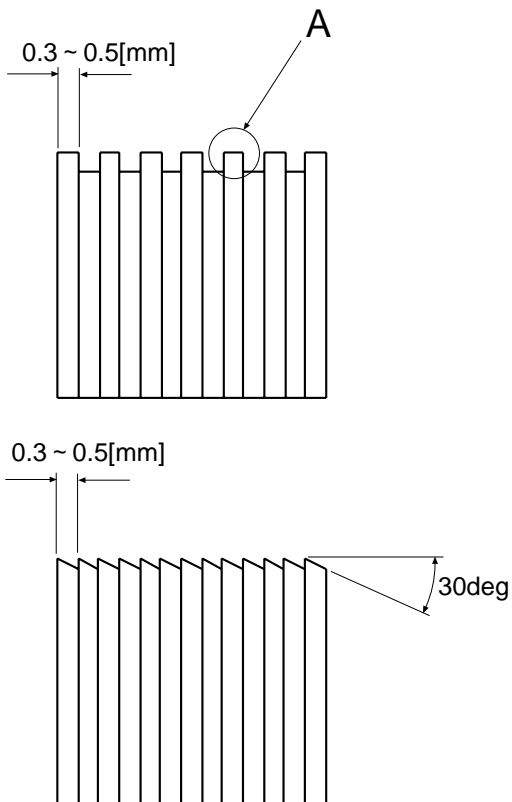
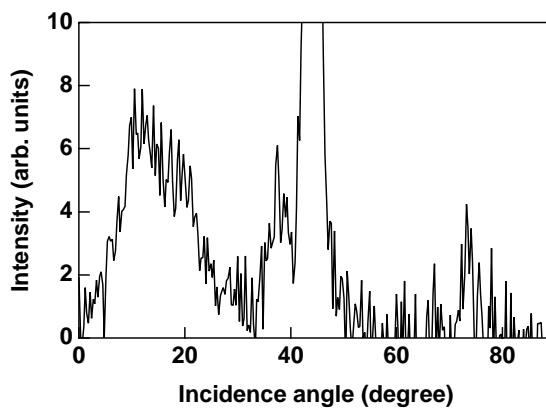


図2 平面型の回折格子（左上）
 図3 角度を持たせた回折格子（左下）
 図4 反射光強度（下）



反射光強度を測定した結果を図4に示す。45度付近の反射光の他に10度付近に回折光が現れていることから遠赤外光分光素子として機能したことが判明した。今後の展開として、この「重ね合わせ」法を用いた軸外し放物面鏡を開発する予定である。

なお、今回「重ね合わせ」法によって製作した回折格子は、科学技術振興事業団の特許化支援事業を利用して申請を行い、出願番号：特願2000-109977として特許願が受理された。

分子研研究会「凝縮相ダイナミクス研究の現状と将来」

2000年5月25日(木)~27日(土)

分子研研究会「若手分子科学研究会のための物理化学研究会」

2000年6月9日(金)

分子研研究会「タンパク質の振動分光」

2000年6月22日(火)~24日(土)

分子研研究会「立体反応ダイナミクスの新展開」

2000年7月18日(火)~19日(水)

分子研研究会「スピン化学の現状と展望(高磁場ESRの可能性)」

2000年8月8日(火)~10日(木)

分子研研究会「強光子場の化学」

2000年9月4日(月)~5日(火)

分子研研究会「真空紫外光とその応用」

2000年9月18日(月)~19日(火)



凝縮相ダイナミクス研究の 現状と将来

2000年5月25日(木)~27日(土)
岡崎コンファレンスセンター小会議室

5/25(木)

12:45-13:15 受付

13:20-13:30 Opening Remarks
岡本裕巳(東大)

Session I 座長 田原太平

13:30-14:05 岩田耕一(東大)
溶液中の動的過程と拡散モデル

14:05-14:40 江幡孝之(東北大)
分子クラスターの振動緩和・クラスタ
ー構造と振動モード依存性-

break 20 min

Session II 座長 木村佳文

15:00-15:35 水谷泰久(分子研)
共鳴ラマン分光・振動緩和・ヘムタン
パク質

15:35-16:10 岡崎進(東工大)
溶液中における分子振動量子力学の
計算機シミュレーション

break 20 min

Lecture I 座長 岡崎進

16:30-17:30 平田文男(分子研)
溶液内非平衡過程の統計力学的研究

- 18:00-19:30 Poster Session
with beer & snacks
- 5/26 (金)
- Session III 座長 平田文男
- 9:25-10:00 谷村吉隆 (分子研)
凝縮系中分子の2次元分光
- 10:00-10:35 長岡正隆 (名大)
凝縮系分子の理論的取り扱い - KFP方程式とMD計算 -
- break 15 min
- Session IV 座長 中島聡
- 10:50-11:25 石内俊一 (総研大・分子研)
光励起したフェノールノアンモニアクラスターの赤外分光 - プロトン移動 vs 水素原子移動
- 11:25-12:00 平田善則 (神奈川大)
アミノフェニルチルラジカル対の再結合 ジェミネートダイナミクスとラジカル間相互作用
- 12:00-13:30 Lunch Time
- Session V 座長 坂本章
- 13:30-14:05 宮坂博 (京都工繊大)
多光子吸収過程を利用したホトクロミックジアリルエテンの反応制御
- 14:05-14:40 朝日剛 (阪大)
有機結晶のフェムト秒レーザー誘起光化学現象
- 15 min break
- Session VI 座長 宮坂博
- 14:55-15:30 中村一隆 (東工大)
ピコ秒時間分割X線回折でみる結晶格子ダイナミクス
- 15:30-16:05 和田昭英 (東工大)
遺伝的アルゴリズムを用いたフェムト秒パルスの波形成形とその応用
- 16:05-16:40 玉井尚登 (関学大)
ポルフィリン会合体のフェムト秒ダイナミクスとメゾスコピック構造
- 20 min break
- Lecture II 座長 岡本裕巳
- 17:00-18:00 中村收 (阪大)
超解像の光学：近接場顕微鏡と多光子顕微鏡を中心として
- 19:00-22:00 懇親会
- 5/27 (土)
- Lecture III 座長 寺嶋正秀
- 9:30-10:30 小倉尚志 (東大)
呼吸酵素のミリ秒ダイナミクス
- 20 min break
- Session VII 座長 小倉尚志
- 10:50-11:25 神取秀樹 (京大)
極低温で起こる異性化
- 11:25-12:00 熊崎茂一 (北陸先端大)
光合成光化学系1反応中心の超高速電荷分離
- 12:00-12:10 Closing Remarks
寺嶋正秀 (京大)
- Poster Presentation (5月25日(木) 18:00-19:30)
- P-1 木村佳文 (京大)
超臨界流体中での光熱変換過程
- P-2 岡本裕巳 (東大)
液相構造・ダイナミクス研究におけるピコ秒赤外分光法の利用
- P-3 竹内佐年 (分子研)
液相分子の励起状態振動コヒーレンスの観測とその機構：10fsパルスを用いたトランススチルベンの時間分解吸収分光
- P-4 中島聡 (阪大)
銅蛋白質の超高速電子移動反応におけるコヒーレントダイナミクス
- P-5 春田奈美 (総研大・分子研)
紫外共鳴ラマン分光法を用いたアポミオグロビンのリフォルディン反応の追跡
- P-6 寺嶋正秀 (京大)
蛋白質構造変化の時間分解検出
- P-7 山本亮介 (東北大)
誘導ラマン・紫外二重共鳴分光法によるベンゾニトリルクラスターの構造と振動緩和の研究



- P-8 石内俊一(総研大・分子研)
フェノール・アンモニアクラスターの振動及び
電子スペクトル クラスター内水素移動反応
の検証
- P-9 中林孝和(分子研)
溶液中における酢酸分子のミクロな会合体構
造-ラマン分光法による研究
- P-10 鈴木俊法(分子研)
時間分解光電子画像分光で見る分子内位相緩和
- P-11 加藤 毅(分子研)
PICJ会合体における二励起子ポーラロン構造
と二光子吸収
- P-12 坂本章(埼玉大)
ピコ秒時間分解赤外分光法による共役 電子系
高分子ポリ(P-フェニレンビニレン)の光励起
ダイナミクス
- P-13 藤野竜也(分子研)
ピコ秒時間分解ラマン分光法を用いたアゾベン
ゼンの光異性化反応に関する研究
- P-14 平松弘嗣(東大)
赤外分光法による液体分子の外部電場応答の観
測
- P-15 奥村剛(分子研)
2次元分光法による構造解析とフォトンエコー
による2次元ラインシェイプ
- P-16 酒井誠(分子研)
カルバゾールの凝縮相光化学反応:紫外・赤外
二重共鳴分光によるアプローチ
- P-17 田原太平(分子研)
最近みたこと・そうではないかと思っているこ
と-クリサジンのフェムト秒分子内プロトン移
動に関して
- P-18 鈴木陽子(分子研)
溶液中回転運動と光学応答
- P-19 林 友将(東大)
溶媒誘起動的分極、振動位相緩和、赤外吸収バ
ンド形にたいする新しい理論的アプローチ
- P-20 熊崎茂一(北陸先端大)
COを検出して遺伝子転写制御を行うヘムタン
パクにおける配位COの光解離と再結合

- 13:30-13:35 開会の辞
米満 賢治(分子研)
- 13:35-14:05 クラスターの構造とダイナミクス
大島 康裕(京大院理)
- 14:05-14:35 超臨界流体を通してみた溶媒効果
木村 佳文(京大院理)
- 14:35-15:05 相対論的電子状態理論の開発とその応
用
中嶋 隆人(東大院工)
- 15:05-15:30 休憩
- 15:30-16:00 レーザー場と、その分子との相互作用
の理論
河野 裕彦(東北大院理)
- 16:00-16:30 クラスター研究のための実験法:その原
理と装置の設計
寺崎 亨(豊田工大)

タンパク質の振動分光

2000年6月22日(火)~24日(土)
岡崎コンファレンスセンター小会議室

6月22日(木)

- 12:30-13:00 事務手続き
- 13:00-13:10 高妻孝光(茨城大)
はじめに
- 第一部 座長 神取秀樹(京大)
- 13:10-13:40 藤井 浩(分子研)
63Cu-NMRによる非ヘム銅酵素の反応
場と反応性の研究
- 13:40-14:00 岩瀬 正(分子研)
タンパク構造変化・カルボン酸・生体
NOを赤外吸収で測るための草の根の技
術
- 14:00-14:20 長友重紀(分子研)
紫外共鳴ラマン分光からみたCO、NO
配位に伴うヒトヘモグロビンの四次構
造変化での -ヘム、⁺ヘムの役割の違
い。四次構造変化において -ヘムのFe-
近位 His結合はどの程度重要か。

若手分子科学研究会のための 物理化学研究会

2000年6月9日(金)

- 14:20-14:40 尾高雅文(理研)
ニトリルヒドラーゼの反応機構 - 最近の話題 -
- 14:40-15:00 休憩
- 第二部 座長 紙中庄司(慶大)
- 15:00-15:20 樋口恒彦(東大)
特徴的P450モデル錯体によるヘム-チオレート構造の特性探求
- 15:20-15:40 尾林栄治(理研)
一酸化窒素還元酵素の触媒反応の分子機構:立体構造と分光法から
- 15:40-16:00 安藝理彦(総研大)
チトクロム酸化酵素の紫外共鳴ラマンスペクトル:Tyr-244の振動スペクトルとその機能
- 16:00-16:20 休憩
- 第三部 座長 樋口恒彦(東大)
- 16:20-16:50 青野重利(北陸先端大)
COセンサー機能を有する転写調節因子CooAの構造と機能
- 16:50-17:10 水谷泰久(分子研)
媒質としてのタンパク質の動き - ミオグロビンを例にあげて -
- 17:10-17:30 置塩信行(金沢大)
円二色性、紫外共鳴ラマン分光法によるPI3-kinaseのSH3ドメインと結合ペプチドとの相互作用の解析
- 18:00-19:30 ポスター討論会
- 6月23日(金)
- 第四部 座長 小倉尚志(東大)
- 9:30-9:50 紙中庄司(慶大)
バクテリオロドプシン光反応サイクル中の動的蛋白構造変化の追跡:突然変異体とナノ秒時間分解法を使った紫外共鳴ラマンによる研究
- 9:50-10:10 山口宏(関学大)
銅アミン酸化酵素の自己触媒活性化反応の解析
- 10:10-10:30 森田勇人(愛媛大)
多次元NMR分光法によるラン藻の重金属耐性機構の構造化学的解析
- 10:30-11:00 休憩
- 11:00-11:20 谷文都(九大)
チトクロムP450モデル錯体の酸素、一酸化炭素付加体のラマンスペクトル
- 11:20-11:50 長井雅子(金沢大)
ヘモグロビンの協同性:紫外共鳴ラマン分光による研究
- 11:50-12:10 堀洋(阪大)
EPRでみる金属タンパク質の構造変化
- 12:10-13:30 昼食
- 第五部 座長 北川禎三(分子研)
- 13:30-14:00 竹内英夫(東北大)
ラマン分光で見るアミノ酸側鎖の構造
- 14:00-14:20 富田毅(東北大)
グアニル酸シクラーゼを精製して
- 14:20-14:40 山崎洋一(京大)
システインをプローブとしたロドプシンの構造変化の解析
- 14:40-15:10 休憩
- 第六部 座長 林秀則(愛媛大)
- 15:10-15:30 藤沢清史(筑波大)
金属含有タンパク質の低分子量モデル - 構造と詳細な性質 -
- 15:30-16:00 伊東忍(阪市大)
ノンヘム遷移金属錯体による分子状酸素の活性化機構
- 16:00-16:20 千田俊哉(長岡技科大)
2原子酸素添加酵素の立体構造解析と反応機構解析、現状と問題点
- 16:20-16:50 休憩
- 16:50-17:10 橋本慎二(山口東理大)
タンパク質の紫外共鳴ラマンスペクトル
- 17:10-17:30 福井孝一(山形県地域結集)
Electron spin echo envelope modulation法を用いたタンパク質活性中心の構造の解明と将来への展望
- 18:00-20:00 懇親会(サンタリア)
- 6月24日(土)
- 第七部 座長 池田斎藤正男(東北大)



- 9:30-10:00 樋口芳樹 (京大)
ヒドロゲナーゼの水素活性化機構のX線構造化学
- 10:00-10:20 廣田 俊 (名大)
振動分光法による金属タンパク質の一酸化炭素付加体の研究
- 10:20-10:40 高妻孝光 (茨城大)
紫外共鳴ラマン分光法からみたブルー銅蛋白質の構造
- 10:40-11:10 休憩
- 11:10-11:30 島田秀夫 (慶大)
チトクロム P450 による酸素活性化機構: 非天然アミノ酸の部位特異的導入を利用した解析
- 11:30-11:50 高橋 聡 (京大・科技団)
蛋白質の動的構造変化を追跡するための高速溶液混合装置の開発
- 11:50-12:00 小倉尚志 (東大)
おわりに

ポスター討論会発表題目
(6月22日(木)18:00-19:30)

1. 菊池まき子 (茨城大)
共鳴ラマン分光法による銅型亜硝酸還元酵素の構造
2. 織田賢二 (茨城大)
ブルー銅蛋白質アズリンの紫外共鳴ラマンスペクトル
3. 佐藤勝子 (茨城大)
ブルー銅蛋白質シュウドアズリンの金属イオン認識
4. 柳澤幸子 (茨城大)
ブルー銅蛋白質シュウドアズリンの紫外共鳴ラマンスペクトル
5. 大黒真巳郎 (茨城大)
重金属代謝に関わる転写活性因子 Smtb の紫外共鳴ラマンスペクトル
6. 新関智丈 (茨城大)
ブルー銅蛋白質シュウドアズリンの時間分解紫外共鳴ラマンスペクトル
7. 向井政博 (理研)
リガンド結合時におけるミオグロビンタンパク質の動的構造変化

8. 春田奈美 (総研大)
紫外共鳴ラマン分光法を用いたアポミオグロビンのフォールディング及びアンフォールディング反応の追跡
9. 奥野大地 (総研大)
タンパク構造変化・カルボン酸・生体NOの赤外吸収測定
10. Im Sang-Choul (東大)
Resonance Raman Spectra of Cytochrome c Oxidase Reconstituted into Phospholipid Vesicles
11. 溝尾昌也 (愛媛大)
点変異の導入に伴うラン藻 *Synechococcus* sp. PCC 7942 のメタロチオネイン様タンパク質 SmtA の重金属結合能と溶液構造変化の相関
12. 小倉尚志 (東大)
結晶酵素タンパク質の反応中間体捕捉のための顕微吸収分光光度計の試作
13. 池上崇久、藤井 浩 (分子研)
チトクロムc酸化酵素の反応中間体モデル錯体の合成と同定
14. 神取秀樹 (京大) PYP の赤外分光から、時間分解 X 線結晶構造解析の光と陰を考える

立体反応ダイナミクスの新展開

2000年7月18日(火)~19日(水)
岡崎コンファレンスセンター小会議室

7月18日(火)

9:00 Opening Remarks
大野公一

座長:小杉信博(分子研)

9:10 旗野嘉彦(九大)
分子超励起状態の生成とその解離ダイナミクス

9:40 見附孝一郎(分子研)
アセチレンの超励起状態と価電子イオン化

10:10 藪下聡(慶応大学)
単純な分子の複雑な光解離過程 塩素分子

10:40 休憩

座長:繁政英治 (分子研)

- 11:00 柳下明 (物構研)
配向分子からの内殻光電子の角度分布
- 11:30 高橋正彦 (東北大)
多次元光イオン化電子・解離イオンコ
インシデンス画像分光実験

12:00-13:30 昼食

座長:青柳睦 (分子研)

- 13:30 川崎昌博 (京大)
分子配向、振動励起、入射光位相によ
る光分解過程制御
- 14:00 石川春樹 (東北大)
HCP分子の前期解離ダイナミクス:親分
子の回転と解離生成物の回転の相関
- 14:30 蔡徳七 (阪大、分子研)
HClクラスターの光解離ダイナミク
ス:[ClHCl]の内部状態分布の測定

15:00-15:30 休憩

座長:西信之 (分子研)

- 15:30 佃達哉 (分子研)
クラスター負イオンの化学反応と異性
化過程
- 16:00 大下慶次郎 (東北大)
金属原子からの電子移動で開始される
ビニル化合物のクラスター内重合反応
- 16:30 富宅喜代一 (神戸大)
金属・溶媒分子間相互作用; 分子配向
と電子移動
- 17:00 佐藤博保 (三重大)
かさ高いラジカルの再結合反応におけ
る立体効果

18:00-20:00 懇親会 (葵丘会館)

7月19日 (水)

座長:佃達哉 (分子研)

- 9:30 高塚和夫 (東大)
クラスター構造転移の立体ダイナミク
ス
- 10:00 本間健二 (姫路工大)
タンパク質のコンフォメーション変化
- 10:30-11:00 休憩

72 分子研レターズ 43

座長:藤村陽 (京大)

- 11:00 高口博志 (分子研)
交差分子線法によるNO+Ar非弾性散乱
衝突観測
- 11:30 奥西みさき (東北大)
交差分子線を用いた水銀光増感反応の
研究

12:00-13:30 昼食

座長:川崎昌博 (京大)

- 13:30 梅本宏信 (北陸先端大)
準安定窒素原子と水素分子の反応ダイ
ナミクス挿入機構の検証
- 14:00 高柳敏幸 (原研)
O(¹D)+N₂O → NO+NO反応のダイナミ
クス:理論的研究
- 14:30 藤村陽 (京大)
偏光ドップラー分光法を用いた二分子
反応の立体ダイナミクスの研究
- 15:00 松見豊 (名大)
塩素原子のスピン軌道成分(²P_{1/2})の反応
性

15:30-16:00 休憩

座長:辻正治 (九大)

- 16:00 徳江郁雄 (新潟大)
塩化水素、臭化水素のHe*(²S)ペニン
グイオン化におけるA²Σ状態の振動回
転励起
- 16:30 大山浩 (阪大)
配向分子線を用いた立体ダイナミクス
の研究
- 17:00 岸本直樹 (東北大)
原子分子衝突イオン化反応の2次元ス
ベクトルの理論合成と立体反応解析
- 17:30 Concluding Remarks
笠井俊夫

スピン化学の現状と展望 (高磁場ESRの可能性)

2000年8月8日(火)~10日(木)
岡崎コンファレンスセンター小会議室



8月8日(火)

13:30-14:00 事務手続き

14:00-14:05 加藤立久(分子研)
はじめに

14:05-14:45 加藤立久(分子研)
新共同利用機器 ESR・BrukerE680

14:45-15:00 休憩

座長 小堀康博(東北大反応研)

15:00-15:45 生駒忠昭(東北大反応研)
共役ラダ 高分子中のスピンソリト
ンのパルスおよび高周波 ESR

15:45-16:30 下位幸弘(電子技術総合研究所)
導電性共役高分子の非線形励起とドー
プ状態

16:30-17:15 鐘本勝一(分子研)
導電性ポリマーの ESR 測定

17:30-19:00 ポスターセッション&オープニングパ
ーティー
(スナックと飲み物)

8月9日(水)

座長 加藤立久(分子研)

9:00-9:45 中村敏和(分子研)
分子性電気伝導体の ESR

9:45-10:30 塩見大輔(大阪市大)
純正有機フェリ磁性体モデル系分子性
スピンの異常挙動

10:30-10:45 休憩

10:45-11:30 横山利彦(東大理)
磁性薄膜と分子の吸着

11:30-12:15 白井正伸(京大院理)
ESRによる光誘起相転移の研究

12:15-13:30 昼食

座長 藤井浩(分子研)

13:30-14:15 福井孝一(山形地域結集プロジェクト)
Wバンド ESR を用いた微生物体試料測
定

14:15-15:00 堀洋(大阪大学大学院基礎工学研究
科)
金属タンパク質の EPR で何をみるか?

15:00-15:15 休憩

座長 福井孝一(山形地域結集プロジェクト)

15:15-16:00 藤井浩(分子研)
EPRによる金属ポルフィリンラジカル
の磁氣的相互作用の研究

16:00-16:45 秋山公男(東北大学反応研)
エンジン関連化合物の ESR

16:45-17:00 休憩

座長 生駒忠昭(東北大反応研)

17:00-17:45 佐藤和信(大阪市大)
新しい遷移モーメント分光学としての
Pulsed ESR - Based 2D Electron Spin
Transient Nutation Spectroscopy:高スピ
ン - 高核スピン系への応用

17:45-18:30 山内清語(東北大反応研)
励起多重項の高磁場 ESR

18:30-20:30 懇親会(サンテリア)

8月10日(木)

座長 山内清語(東北大反応研)

9:00-9:45 福井晃三(大阪市大)
NH₃ガスをドープしたガンマ - シクロ
デキストリン包接 C₆₀ フラーレンの X
バンドおよび Wバンド ESR による研究

9:45-10:30 小堀康博(東北大反応研)
フルーレン - ジポルフィリン連結分子
のシーケンシャル電子移動

10:30-10:45 休憩

座長 工位武治(大阪市大)

10:45-11:30 兒玉健(都立大)
ESRによるフルーレンラジカルの研究

11:30-12:15 大庭裕範(東北大反応研)
ラジカルが2個付加したフルーレンの
ESR

12:15-13:00 中澤重顕(大阪市大)
C₆₀フルーレンおよび分子性クラスター
の多価アニオン高スピン状態の Xバン
ドおよび Wバンド ESR による研究

13:00-13:05 工位武治(大阪市大)
おわりに

ポスター討論会発表題目
(8月8日(火) 17:30-19:00)

- p1. 岩崎洋平(東北大反応研)
溶液中の励起三重項におけるスピン緩和の磁場依存性
- p2. 直原一徳(東北大反応研)
フェロセンを電子供与体を用いた光誘起電子移動反応のCIDEP
- p3. 矢後友暁(東北大反応研)
電子受容体-供与体系の再配向エネルギー測定
- p4. 大窪清吾(総研大)
ランタニウム金属内包フラレン異性体のESR測定
- p5. 加藤立久(分子研)
13C-La@C82フラレンのHYSCORE測定
- p6. 藤井浩(分子研)
EPRによるオキソクロム(V)ポルフィリン錯体の反応性の研究
- p7. 福井晃三(大阪市大)
新規ジアザフェナレニルラジカル結晶の磁性と電子スピン構造
- p8. 西尾 尊久(大阪市大)
単結晶N-ENDORによる基底6重項Fe(III)オクタエチルポルフィリンのヤーン・テラー歪みを受けた分子構造の決定
- p9. 松岡 秀人(大阪市大)
Eu系高スピン種の高磁場/高周波CW-ESRおよびPulsed ESR - Based 2次元電子スピンニューテーション分光法による研究
- p10. 古川 貢(大阪市大)
ネットワーク水素結合系Cu(II)錯体の磁性と構造
- p11. 長谷 修一郎(大阪市大)
負電荷を付与したニトロニルニトロキシドピラジカル分子の磁気的性質 - 有機塩フェリ磁性体の構築 -
- p12. 金谷 貴保(大阪市大)
単成分有機フェリ磁性モデル分子の構造と磁気的性質
- p13. 尾田 伸之(大阪市大)
群論的な対称性を考慮した高スピン有機分子の設計と無秩序配向ESRスペクトルのシミュレーション
- p14. 田中 航也(大阪市大)
1,3ペンタンジイル(S=1)をスピンユニットとする新奇な 共役系高スピン分子のESRによる研究

- p15. 古川 貢(大阪市大)
セミマクロスコピック強磁性人工格子薄膜のスピン波共鳴による研究

強光子場の化学

2000年9月4日(月)~5日(火)
岡崎コンファレンスセンター小会議室

9月4日(月)

10:30-10:40 はじめに
中村宏樹(分子研)
山内薫(東大院理)

10:40-12:30 セッションI
「フロケ描像と分子過程制御」
ディスカッションリーダー: 染田清彦
(東大院総合)

[話題提供] 染田清彦(東大院総合)
強光子場中の分子のイオン化ダイナミクス

寺西慶哲(理研)
Floquet描像と非断熱遷移

菱川明栄(東大院理)
強光子場におけるO₂⁺の光解離過程

昼休み

13:30-15:30 セッションII
「分子内電子移動と分子構造変化」
ディスカッションリーダー: 河野裕彦
(東北大院理)

[話題提供] 河野裕彦(東北大院理)
電子の動力学から電子対の動力学へ

小関史朗(三重大工)
レーザー電場による二酸化炭素およびその多価カチオンの構造変化

山内薫(東大院理)
強光子場中の分子構造制御

恩田健(東工大資源研)
ピコ秒赤外パルスによる固体表面上の短寿命種の観測

休憩



15:50-18:20 セッション III
「非線形動力学としての光・分子相互作用系」
ディスカッションリーダー:池田研介
(立命館大理)

[話題提供] 高橋公也 (九州工大)
S行列に現れるカオスのトンネル効果

田崎秀一 (早大理工)
少数系における不可逆性

戸田幹人 (京大院理)
レーザー場中における I V R (振動エネルギー再分配) と非線形共鳴のネットワーク

首藤啓 (都立大理)
周期摂動と複素力学系

18:30-20:30 懇親会

9月5日(火)

9:00-12:00 セッション IV
「分子配向と反応制御」
ディスカッションリーダー:酒井広文
(東大院理)

[話題提供] 酒井広文 (東大院理)
非共鳴レーザー電場による気相分子の配向制御と今後の展望

藤村勇一 (東北大院理)
化学反応の量子制御における課題

笠井俊夫 (分子研)
分子配向の制御によりはじめて観測できる反応分岐の機構

川崎昌博 (京大院工)
分子配向と光反応制御

昼休み

13:00-15:00 セッション V
「超強光子場と分子応答」
ディスカッションリーダー:中島信昭
(大阪市大院理)

[話題提供] 中島信昭 (大阪市大院理)
超高強度レーザーによる C60 のクーロン爆発、ペンタクロロベンゼンのイオン化

江潤卿 (原研光量子)
クラスターの強光子場中でのふるまい

清水政二 (大阪市大院理)
強光子場におけるベンゼンのクーロン爆発

中村一隆 (東工大応セラ研)
超短パルス硬 X 線発生とピコ秒時間分解 X 線回折

真空紫外光とその応用

2000年9月18日(月)~19日(火)
研究棟201セミナー室

9月18日(月)

1:00-1:30 エキシマランプによる透明 SiO₂ 膜の積層堆積
東海大 村原正隆

1:30-2:00 真空紫外光 CVD による薄膜作成
宮崎大 本山理一

2:00-3:00 MOCVD of High Dielectric Constant Materials (特別講演)
Silicon Valley Group Yoshi Senzaki

3:30-4:00 大面積 Xe₂ エキシマ光照射装置の開発
ウシオ電機 菱沼是宣

4:00-4:30 レーザー生成プラズマを光源に用いた真空紫外分光システム
宮崎大 加来昌典

4:30-5:30 Photo-induced Large Area Growth of Dielectrics with Excimer Lamps (特別講演)
University College London Ian Boyd

5:30-8:00 Banquet

9月19日(火)

9:00-9:30 放射光励起エッチングと有機金属気相エピタキシー法による半導体微細構造の作成
分子研 野々垣陽一

- 9:30-10:00 放射光とレーザーの組み合わせによる
GaAs表面の研究
分子研 田中仙君
- 10:00-10:30 真空紫外光CVD法によって堆積した
シリコン酸化膜の物性評価
福井高専 堀井直宏
- 11:00-11:30 アンジュレータ放射光誘起による非晶
質シリカの構造変化
電総研 粟津浩一
- 11:30-12:00 ピコ秒パルスX線励起による固体アン
トラセンの発光ダイナミクス
東北大 畑中耕治
- 12:00-12:30 内殻共鳴励起における表面反応
原研東海 馬場祐治
- 1:30-2:00 真空紫外-紫外多重波長励起プロセッシ
ング
理研 杉岡幸次
- 2:00-2:30 真空紫外F2レーザーによる石英のア
ブレーション機構
大阪大レーザー研 実野孝久
- 2:30-3:00 リソグラフィ用F2レーザーの開発動
向
ギガフォトン 永井伸治
- 3:30-4:00 高出力レーザー励起X線レーザーの高
度化
原研関西研 永島圭介
- 4:00-4:30 レーザープラズマ軟X線光源の狭帯域
化に関する研究
トヨタマックス 西村靖彦
- 4:30-5:00 長尺アンジュレータ光源を用いた軟X
線干渉波面計測
姫路工大 新部正人

平成12年度（前期） 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717回		2000年4月 5日	単一分子分光	松下 道雄
第718回		4月26日	交替スピン鎖に見る融合磁性	山本 昌司
第719回		5月10日	金属酸化物表面の吸着分子 - 走査プローブ顕微鏡と時間分解赤外分光法による研究 -	大西 洋
第720回		5月24日	ヘテロスピン系による光応答型強磁性体の構築	古賀 登
	第25回	6月 7日	すばる望遠鏡でみる宇宙	家 正則
第721回		6月21日	新機能パラジウム錯体触媒の開発	魚住 泰広
	第26回	6月28日	質量ゼロの素粒子の話	西島 和彦
第722回		7月 5日	磁性薄膜と分子の吸着	横山 利彦
	第27回	9月 6日	数学で化学する 次世紀の日本のために哲学性を取り戻そう	中村 宏樹
	第28回	9月20日	科学と技術	井口 洋夫 豊田章一郎

平成12年度(前期)共同研究

課題研究		
化学反応に対する溶媒効果の分子論	分子科学研究所	平田 文男
協力研究		
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
エネルギー最小化に基づくタンパク質立体構造予測法の実験的精度評価	奈良女子大学理学部	中沢 隆 奥田 有香
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
RISM理論によるエタノール - 水およびトリフルオロエタノール - 水二成分混合溶液の液体構造解析	福岡大学理学部	山口 敏男 吉田 亨次
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
高周波ESRによる基底および励起多重項状態の研究	東北大学反応化学研究所	山内 清語 大庭 裕範
紫外共鳴ラマンスペクトルによる銅蛋白質の金属イオン認識機構に関する研究	茨城大学理学部	高妻 孝光
紫外共鳴ラマン分光法を用いたSH3ドメインのリガンド認識メカニズムの解明	金沢大学医学部	置塩 信行
液晶における競合誘電性の発現機構	信州大学繊維学部	福田 敦夫 朝 克 安藤 智宏
C ₆₀ フラーレン多価アニオン及び分子性クラスターの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
回転コヒーレンス分光によるイオンクラスターの構造決定	京都大学大学院理学研究科	大島 康裕 江頭 和宏
ベンゼン - ベンジルアルコール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
ナフタレン誘導体のPFI ZEKESペクトルの研究	東京工業大学理学部	市村 禎二郎 松本 龍 吉川 和男
弱い水素結合を有する分子錯体のPFI - ZEKES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
フラーレン錯体の電子物性の研究	豊橋技術科学大学	今枝 健一
C ₆₀ 誘導体を用いた電荷移動錯体の作製	京都大学大学院理学研究科	吉田 幸大 青木 敬 鄭 鎮洪
分子性伝導体 型BETS塩の光学的研究	山口東京理科大学基礎工学部	井口 眞 藤井 陽平
TTP系導電体の磁気物性に関する研究	京都大学大学院工学研究科	御崎 洋二 谷口 正輝 高橋 一志
極低温バルク量子ホール効果の研究	岡山大学理学部	大嶋 孝吉
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 柳本 真伸



B E D T - H B D S T 塩の超伝導相及び反強磁性相の探索	東北大学学際科学研究センター	高橋かず子 白旗 崇
構造選別によるクラスター内光誘起反応における第三体効果と立体選択性の検証	大阪大学大学院理学研究科	大山 浩
ポリマーのモンテカルロ・シミュレーション	金沢大学理学部	樋渡 保秋 野坂 誠 河村 竜弥 森 由季子
りん、いおうなどを含む分子の内殻励起計算	静岡大学工学部	石田 俊正
内殻励起の大規模 S C F 計算コードの開発	九州女子大学	八尋 秀一
クラシドモナスの走光性応答の紫外外部作用スペクトル	北陸先端科学技術大学院大学	高橋 哲郎
単細胞鞭毛藻ミドリムシの紫外線センシングの作用スペクトル	基礎生物学研究所	渡辺 正勝 伊関 峰生 東 正一 伊藤 慎治
超臨界二酸化炭素中における負イオンクラスター構造の時間分解分光	東京大学大学院総合文化研究科	永田 敬 横山 大輔
赤外反射分光法を用いた Si(100) 上の酸素吸着構造の研究	日本原子力研究所	吉越 章隆
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 亀山 晃弘 亀田 芳人 柏田 大輔
分子クラスターのポテンシャルエネルギー曲面の理論的・実験的研究	九州大学理学部	田中 桂一 原田 賢介
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
L N、L T の分極反転特性評価	早稲田大学理工学部	上江洲由晃 加藤 徳剛 石川 啓
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
分子分光のための赤外域 O P O の研究開発	福井大学工学部	小林 喬郎 川戸 栄 田中 大輔
ゲスト認識部位の構造変化を伴う新規酸化環元活性ホストの研究	信州大学理学部	太田 哲 沼江 妙子
含硫 ヘテロ環を含む電子供与体の新規開発	名古屋工業大学	斉藤 勝裕
oxoferryl porphyrin π cation radicals の cation radical が FeO 酸素原子の反応性に及ぼす効果	慶應義塾大学医学部	江川 毅
機能性分子固体の物性解明のための物質創成	北海道大学大学院理学研究科	河本 充司
新規シアノ系アクセプターの開発	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
放射光用光学素子評価装置の性能評価	東京大学物性研究所	木下 豊彦
自由電子レーザーの利用研究に向けて (1)	東北大学大学院理学研究科原子核理学研究施設	浜 広幸 神藤 勝啓
カルボニルルテニウム錯体の酸塩基反応における生成物の特定、および錯体の電子状態と反応性との相関性	福島大学教育学部	大山 大

遷移金属錯体を利用した酸化窒素変換過程の研究	上智大学工学部	長尾 宏隆
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 松岡 毅至
光機能性有機薄膜の分子配向制御に関する研究	京都大学大学院工学研究科	石田 謙司 松重 和美 高田 正基
有機/無機ヘテロ超構造の構築に関する研究	神戸大学工学部	柳 久雄
走査プローブ顕微鏡を用いた蛋白分解酵素の構造変化の解明	神戸大学医学部	奥宮 明子 白川 卓
アフィニティー樹脂；PKSI-Toyopearlにおける阻害剤の結合状態の解明	神戸学院大学薬学部	岡田 芳男 多田まや子
UVSORにおける電子ビーム位置変動の観測	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	本田 融
多核希土類元素錯体の合成	静岡大学大学院理工学研究科	鈴木 浩司 松枝 悟司 渡辺 真志 村上 芳伸
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
レーザー照射したSi表面に誘起されるSurface Photo-Voltageの研究	姫路工業大学高度産業科学技術研究所	春山 雄一
光電子分光法によるSi上のフタロシアニンの吸着状態の研究	筑波大学物理学系	秋本 克洋
ARUPSを用いた配向性ポリイミド/金属界面の研究	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
分子間水素結合を導入した有機エピタキシャル膜の角度分解光電子分光による研究	名古屋大学大学院理学研究科	石井 久夫
LiNiO ₂ の紫外光電子分光と光電子放出の角度依存性	愛媛大学工学部	宮崎 隆文
研究会		
若手分子科学研究者のための物理化学研究会	東北大学大学院理学研究科	三上 直彦
立体ダイナミクス研究の新展開	東北大学大学院理学研究科	大野 公一
強光子場の化学	東京大学大学院理学系研究科	山内 薫
タンパク質の振動分光	東京大学大学院理学系研究科	小倉 尚志
真空紫外光源の開発とその応用	分子科学研究所	黒澤 宏
スピン化学の現状と展望（高磁場・高周波数電子スピン共鳴法の可能性）	分子科学研究所	加藤 立久
凝縮相分子ダイナミクス研究の現状と将来	分子科学研究所	田原 太平
施設利用（Ⅰ） 分子制御レーザー開発研究センター		
溶液中における分子集合体の電子スペクトル	神戸大学理学部	富永 圭介
カルシウム依存的な蛋白質構造変化の解析	生理学研究所	井本 敬二
波長可変レーザー蒸発法による巨大サイズクラスター生成の研究	東北大学大学院理学研究科	美津津文典
定比組成LiNbO ₃ 単結晶の非線形光学定数評価	無機材質研究所	寺部 一弥
高出力0.193 μm光の発生	千歳科学技術大学	加藤 洸



高出力0.193 μm 光の発生	千歳科学技術大学	高岡 詠子
Q-Band ESR を用いた C ₆₀ の低温電子状態の研究	東京工業大学大学院理工学研究科	B. L. V. Prasad
太陽乾電池としてのカルコパーライト型化合物半導体薄膜の評価	東京理科大学	樋口 透
窒化インジウムガリウムの光学特性	弘前大学理工学部	小豆畑 敬
施設利用 (I) 分子物質開発研究センター		
高分子常磁性中心の電子スピン共鳴	東北大学反応化学研究所	生駒 忠昭
ポルフィリン環の非平面化に伴うヘムの物性変化	東邦大学医学部	中村 幹夫
金属吸蔵ゼオライトの物質探索	防衛大学校	清水文比古
準結晶の磁性	名古屋大学情報文化学部	松尾 進
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
アモルファス磁性合金の特性と電子構造	名古屋工業大学	山田 正明
金属錯体の構造と反応性	愛知教育大学	中島 清彦
機能性膜の表面状態	豊橋技術科学大学	角田 範義
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
半導体薄膜の評価	豊橋技術科学大学	吉田 明
2次元面内に分散した C ₆₀ 超微粒子の磁性	三重大学教育学部	佐光三四郎
新規な有機伝導体や有機磁性体の構造決定	姫路工業大学理学部	坪 広樹
フラーレン、ナノチューブ - 希ガス二元系の XPS 測定 (I)	熊本大学大学院自然科学研究科	市村 憲司
フラーレン化合物の磁化率と ESR	姫路工業大学理学部	小林 本忠
ナノチューブ状物質の構造・磁性	科学技術振興事業団	坂東 俊治
半導体表面層の ESCA 分析	石川工業高等専門学校	山田 健二
ペプチド化合物の結晶構造解析	群馬大学工学部	奥 浩之
PLD 法および RIBS 法により作製した磁性ガーネット薄膜の磁気特性評価	名古屋工業大学	安達 信泰
60 電子系を保った新しいフラーレン誘導体の合成	名古屋大学大学院人間情報学研究科	村田 静昭
リチウムイオン 2 次電池におけるカーボン負極への Mn 付着の影響について	名古屋大学情報文化学部	佐野 充
UVSOR 招へい協力研究		
高分解能斜入射分光器の高性能化	広島大学理学部	吉田 啓晃
UVSOR 施設利用		
エチルアンモニウムカドミウムハライドの励起子発光	山形大学理学部	大西 彰正
遷移金属酸化物の真空紫外反射分光	東京大学大学院工学系研究科	十倉 好紀
ワイドバンドギャップを有する無機・有機絶縁材料の吸収・発光および寿命特性	早稲田大学理工学部	大木 義路
PbWO ₄ 結晶の反射スペクトルに及ぼす各種の不純物イオンドーピングの影響に関する系統的研究	信州大学工学部	伊藤 稔
CsPbX ₃ (X = Cl, Br, I) の二次励起子形成過程	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・発光スペクトル	名古屋大学大学院工学研究科	服部 忠

粒子線及び放射線照射を受けたシリカに生成する欠陥種	名古屋大学理工科学総合研究センター	武藤 俊介
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
放射光とレーザー光の同時入射によるオージェ・フリー発光強度の増大	大阪歯科大学歯学部	辻林 徹
真空紫外励起蛍光体のPL励起スペクトル測定	鳥取大学工学部	田中 省作
放射光とレーザーによる半導体の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極端紫外励起蛍光スペクトル	徳島文理大学工学部	大内 伊助
真空紫外CVDで作成した酸化物薄膜の光学特性の測定	分子科学研究所	黒澤 宏
電子・イオンコインシデンス法を用いたZnO表面からのイオン脱離の研究	名古屋大学大学院理学研究科	田中慎一郎
自己組織化単分子膜の内殻励起による光分解反応の研究	広島大学理学部	関谷 徹司
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
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監察(II)	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
紫外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
BL3A2の整備	分子科学研究所	下條 竜夫
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
(Pb,Sn)/Si(111)系の高分解角度分解光電子分光	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
光電子分光法による光誘起相転移現象の研究	京都大学大学院理学研究科	田中耕一郎
BL5Aの整備	分子科学研究所	鎌田 雅夫
非平衡半導体表面のダイナミクス	分子科学研究所	鎌田 雅夫
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 文雄
He-I, II共鳴線用多層膜偏光子の評価	東北大学科学計測研究所	羽多野 忠
衛星搭載用多層膜反射鏡の性能評価	東京大学大学院理学系研究科	中村 正人
真空紫外光励起による希ガス固体からの全脱離絶対収率の測定	学習院大学理学部	荒川 一郎
高空間分解能X線CCDカメラの開発	国立天文台	常田 佐久
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
アモルファス半導体光誘起現象の可逆性に関する評価	岐阜大学工学部	林 浩司
エッチングした軟X線多層膜の表面粗さと反射率の評価	姫路工業大学高度産業科学技術研究所	新部 正人
希土類ブニクタイトの価電子帯の光学スペクトル	分子科学研究所	木村 真一
狭小内径ライトパイプ形式を利用した2K遠赤外反射測定装置の開発	神戸大学理学部	難波 孝夫
LiNiO ₂ の充放電特性とミリ波反射測定	神戸大学理学部	太田 仁
Tl ₂ Mn ₂ O ₇ の赤外磁気光学スペクトル	分子科学研究所	木村 真一
希土類ブニクタイトの磁気直線・円偏光二色性	分子科学研究所	木村 真一
BL6A1の整備	分子科学研究所	鎌田 雅夫



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 (2)	名古屋大学理工科学総合研究センター	田辺 哲朗
超イオン伝導物質のXAFS	名古屋大学情報文化学部	森 昌弘
金属含有アパタイト触媒の局所構造解析	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 (2)	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
金属置換マンガンスピネル系酸化物中の金属の配位状態の解析	京都大学大学院エネルギー科学研究科	八尾 健
MgO-ZnO固溶体の局所構造のMg-K端XANESによる評価	京都大学大学院エネルギー科学研究科	田中 功
液相法より合成されたスピネル前駆体の結晶化と局所構造変化	京都工芸繊維大学工学学部	塩野 剛司
構造制御した担持MO ₃ のL殻XANESによる構造解析	京都工芸繊維大学工学学部	有谷 博文
軟X線励起による発光量子効率の膜厚依存性	鳴門教育大学	松川 徳雄
二次電子収量法を用いたAl-KXANES測定によるアルミニウム化合物の局所構造解析: 27AlNMRケミカルシフトとXANESスペクトル変化の相関について	福岡大学理学部	脇田 久伸
BL7AにおけるKTP分光結晶のテスト及びビームラインの整備	分子科学研究所	繁政 英治
GaN系化合物半導体の光物性研究	三重大学工学部	平松 和政
超臨界流体中の分子のイオン化ポテンシャルと溶解構造	神戸大学発達科学部	中川 和道
希土類強相関電子系の真空紫外反射スペクトル	神戸大学理学部	桜井 誠
強相関電子系物質の近赤外・可視・真空紫外反射スペクトル	神戸大学理学部	岡村 英一
有機珪酸の真空紫外光分解過程の測定	分子科学研究所	黒澤 宏
BL7Bの整備	分子科学研究所	福井 一俊
窒化物半導体の可視・真空紫外光反射スペクトル (II)	分子科学研究所	福井 一俊
極端紫外領域でのオゾンの高分解能スペクトルの測定	分子科学研究所	下條 竜夫
SRを用いた微細構造体形成プロセス	名古屋大学大学院工学研究科	堀 勝
シンクロトロン放射光を用いたテルル化亜鉛の低温エピタキシャル成長とn型ドーピング	佐賀大学理工学部	西尾 光弘
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
マンガンスピネル酸化物リチウム電池正極活物質の電子構造の解析	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位置選択的化学反应	京都教育大学	伊吹 紀男
有機酸などの内殻励起による光解離過程の研究 (4)	広島大学理学部	平谷 篤也
AlInN半導体混晶の窒素K内殻吸収測定	分子科学研究所	福井 一俊
BL8B1の整備 - M1ミラー交換後の調整	分子科学研究所	下條 竜夫
真空紫外光によるポリマーの加工及びコーティング技術の開発	豊橋技術科学大学	吉田 明
拡散接合化合物半導体の界面制御	分子科学研究所	庄司 一郎
MgO欠陥構造のMgK殻XAFSによる局所構造解析	京都工芸繊維大学工学学部	有谷 博文
ハイドロゲネットから合成した新規カルシウム含有化合物の局所構造解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 寿雄
MgO-ZnO固溶体の局所構造のZn-L端XANESによる評価	京都大学エネルギー科学研究科	田中 功
軟X線励起に伴う発光量子効率の膜厚依存の点検	名古屋大学情報文化学部	森 昌弘
光電子分光法による光誘起相転移現象の研究	京都大学大学院理学研究科	田中耕一郎
K殻電子励起による多原子分子の位置選択的化学反应	京都教育大学	伊吹 紀男

猿 倉 信 彦	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	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
加 藤 立 久	分 子 構 造 研 究 系 助 教 授	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 部 門 教 授	12. 4. 14 ~ 12. 4. 26	フランス	Molecular and Ionic Clusters (MIC2000)出席及び研究打合せ
酒 井 誠	電 子 構 造 研 究 部 門 助 手	12. 4. 14 ~ 12. 4. 26	フランス	2 波長レーザー振動分光法と量子化学計算による反応活性クラスターの研究についての研究打合せ
佐 伯 盛 久	電 子 構 造 研 究 部 門 非 常 勤 研 究 員	12. 4. 14 ~ 12. 4. 26	フランス	2 波長レーザー振動分光法と量子化学計算による反応活性クラスターの研究についての資料収集
猿 倉 信 彦	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	12. 5. 6 ~ 12. 5. 14	アメリカ	CLEO 2000 で発表
黒 澤 宏	極端紫外光科学研究系 教 授	12. 5. 7 ~ 12. 5. 22	アメリカ カナダ	「Conference on Lasers and Electro optics」及び「Electron Chemical Society-197th Meeting」参加、講演
平 等 拓 範	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	12. 5. 7 ~ 12. 5. 18	アメリカ	CLEO 2000 で発表及び共同研究実施
栗 村 直	分子制御レーザー開発研究センター 助 手	12. 5. 7 ~ 12. 5. 18	アメリカ	CLEO 2000 で発表及び共同研究実施
加 藤 立 久	分 子 構 造 研 究 系 助 教 授	12. 5. 16 ~ 12. 5. 20	カナダ	米国電気化学会フラーレンシンポジウム招待講演発表
渡 辺 芳 人	相 関 領 域 研 究 系 教 授	12. 5. 18 ~ 12. 5. 28	ハンガリー	日本学術振興会 日欧科学協力事業により、ハンガリー科学アカデミーのProf.L.I.Simandi教授との共同研究実施のため
茅 幸 二	分 子 科 学 研 究 所 所 長	12. 5. 25 ~ 12. 5. 28	韓 国	韓国分子反応動力学ワークショップ出席及び研究打合せ
黒 澤 宏	極端紫外光科学研究系 教 授	12. 5. 26 ~ 12. 6. 5	フランス	E-MRS Spring Meeting(ヨーロッパ材料学会春季講演会)に参加、講演
猿 倉 信 彦	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	12. 5. 27 ~ 12. 6. 6	フランス	レーザー非線形光学結晶国際シンポジウムに招待講演、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 授	12. 5. 28 ~ 12. 6. 4	フランス イタリア	「レーザー・非線形光学結晶国際シンポジウム-20世紀のフォトニクス材料」講演、「次世代・紫外レーザー光源」に関する研究打合せ
北 川 禎 三	分 子 構 造 研 究 系 教 授	12. 5. 29 ~ 12. 6. 12	スウェーデン, フィンランド	日本チェコ共同研究の推進及び国際学会に出席のため
井 上 克 也	相 関 領 域 研 究 系 助 教 授	12. 6. 4 ~ 12. 6. 19	ロ シ ア	ヨーロッパ磁性国際会議 (EMMA) 他に出席及び発表のため
夢 田 博 一	分 子 集 団 研 究 系 助 教 授	12. 6. 20 ~ 12. 7. 2	ド イ ツ フランス	国際会議における招待講演
渡 辺 芳 人	相 関 領 域 研 究 系 教 授	12. 6. 21 ~ 12. 7. 2	フランス	金属蛋白質分子設計に関する最新の研究動向の調査及び第1回ボルフィリン及びフタロシアニン国際会議にて招待講演をするため
茅 幸 二	分 子 科 学 研 究 所 所 長	12. 6. 26 ~ 12. 7. 3	スウェーデン	第117回ノーベルシンポジウムに参加、講演のため
鈴 木 俊 法	電 子 構 造 研 究 部 門 助 教 授	12. 7. 1 ~ 12. 7. 9	アメリカ	Gordon Research conference にChirmanとして出席のため
鈴 木 俊 法	電 子 構 造 研 究 部 門 助 教 授	12. 7. 1 ~ 12. 7. 9	アメリカ	ゴードンコンファレンスに出席し、研究成果の発表、研究情報の収集をするため
猿 倉 信 彦	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	12. 7. 8 ~ 12. 7. 15	アメリカ	超高速光現象国際会議にて発表のため出席



田中晃二	錯体化学実験施設教授	12.7.9 ~ 12.7.17	イギリス	第34回錯体化学国際会議で論文発表のため
中村宏樹	理論研究系教授	12.7.9 ~ 12.7.16	チェコ	日・チェコ共同研究実施のため
今井宏之	相関領域研究系リサーチアソシエイト	12.7.12 ~ 12.7.27	オーストリア	合成金属の科学と技術に関する国際会議(ICSM2000)出席及び研究打合せ
薬師久彌	分子集団研究系教授	12.7.13 ~ 12.7.23	チェコ	日本・チェコ共同研究実施のため
井上克也	相関領域研究系教授	12.7.13 ~ 12.7.27	オーストリア フランス	合成金属国際会議(ICSM)にて成果発表及び研究打合せ
藤原秀紀	分子集団研究系助手	12.7.13 ~ 12.7.25	オーストリア チェコ	合成金属に関する国際会議(ICSM'2000)に出席し、研究発表及び資料収集を行うため
山本薫	分子集団研究系助手	12.7.13 ~ 12.7.25	オーストリア チェコ	合成金属に関する国際会議(ICSM2000)に出席し、研究成果発表および資料収集のため
DROZDOVA, O.O.	分子集団研究系文部省外国人研究員	12.7.13 ~ 12.7.23	オーストリア	ICSM2000(合成金属に関する国際会議)に出席し、現在実施している研究に関する調査を行うため
小林速男	分子集団研究系教授	12.7.14 ~ 12.7.24	オーストリア	合成金属に関する国際会議(ICSM2000)において招待講演を行うため
中村敏和	分子集団研究系教授	12.7.14 ~ 12.7.23	オーストリア	合成金属の科学と技術に関する国際会議2000に出席・発表し討論するため
米満賢治	理論研究系教授	12.7.14 ~ 12.7.23	オーストリア	ICSM2000(合成金属の科学と技術に関する国際会議)に参加し、研究成果発表及び討論を行うため
田中彰治	分子物質開発研究センター助手	12.7.14 ~ 12.7.24	オーストリア	国際会議(IMSM2000)に出席、発表を行うため
細越裕子	相関領域研究系助手	12.7.14 ~ 12.7.29	オーストリア フランス	合成金属の科学と技術に関する国際会議(ICSM2000)出席・研究成果発表およびLCC-CNRSでの研究打合せのため
陰地宏	極端紫外光科学研究系非常勤研究員	12.7.14 ~ 12.7.25	オーストリア	国際学会(ICSM2000)にて発表及び研究打合せ
竹内佐年	極端紫外光科学研究系助手	12.7.21 ~ 12.8.3	ドイツ	第18回IUPAC光化学シンポジウムへ出席のため
中村宏樹	理論研究系教授	12.7.29 ~ 12.8.8	アメリカ	国際ワークショップ「非断熱動力学の理論」で研究成果発表をするため
水谷泰久	分子構造研究系助手	12.8.3 ~ 12.8.16	アメリカ	Gordon Research Conference on Vibrational Spectroscopy and Molecular Dynamicsにて研究成果を発表する。関連分野の研究室を訪問しセミナー発表を行うため
杉田有治	理論研究系助手	12.8.4 ~ 12.8.11	アメリカ	第14回蛋白質学会会議に参加し、研究発表及び討論を行うため
田原太平	極端紫外光科学研究系教授	12.8.5 ~ 12.8.13	アメリカ	「振動分光と分子ダイナミクスに関するゴードン研究会議」に出席のため
平田文男	理論研究系教授	12.8.6 ~ 12.8.13	アメリカ	ゴードン会議における招待講演のため
猿倉信彦	分子制御レーザー開発研究センター教授	12.8.6 ~ 12.8.13	アメリカ	「2000年度非線光学会」に出席のため
小杉信博	極端紫外光科学研究系教授	12.8.7 ~ 12.8.14	アメリカ	第8回電子分光・電子構造国際会議に出席、研究成果発表のため
江田茂	極端紫外光実験施設助手	12.8.13 ~ 12.8.20	アメリカ	第22回国際自由電子レーザー会議において研究発表のため

保坂将人	極端紫外光実験施設 助 手	12. 8.13 ~ 12. 8.20	アメリカ	第22回国際自由電子レーザー会議において研究発表のため
福井一俊	極端紫外光科学研究系 助 教 授	12. 8.15 ~ 12. 8.30	ドイツ	「高輝度光源利用に関する調査研究」(平成12年度創造開発研究海外調査)のため
加藤政博	極端紫外光実験施設 助 教 授	12. 8.18 ~ 12. 8.27	ドイツ	国際会議出席(7th International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation)
鎌田雅夫	極端紫外光実験施設 助 教 授	12. 8.18 ~ 12. 9.0.1	ドイツ	Synchrotron Radiation Instrumentation 国際会議ならびにサテライトミーティング、セミナーに出席、講演のため
北川禎三	統合バイオサイエンスセンター 教 授	12. 8.19 ~ 12. 8.29	中国	ラマン分光国際会議で研究成果の報告のため
黒澤宏	極端紫外光科学研究系 教 授	12. 8.20 ~ 12. 8.28	イギリス	第19回熱電材料国際会議に参加し講演及び研究打合せのため
平田文男	理論研究系 教 授	12. 8.20 ~ 12. 9.15	アメリカ ワシントン州 ベルモント	米国化学会年会にて研究発表を行い、国立標準技術研究所(NIST)にて統計力学に基づく化学反応に関する討論を行うため
見附孝一郎	極端紫外光科学研究系 助 教 授	12. 8.20 ~ 12. 8.27	ドイツ	第7回放射光装置国際会議に出席し講演発表と討論を行うため
岡本祐幸	理論研究系 助 教 授	12. 9. 3 ~ 12. 9. 8	ドイツ	巨大分子系の多スケールモデリング研究会にて講演をするため(講演題名: 拡張アンサンブル法によるタンパク質折り畳み機構の研究)
平等拓範	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	12. 9. 8 ~ 12. 9.18	スウェーデン ストックホルム	ストックホルム国際会議発表国際会議(CLEO/Europe-IQEC2000)発表、レーザーとプラズマ物理の国立研究所にて研究、討論のため
大竹秀幸	分子制御レーザー開発研究センター 助 手	12. 9.10 ~ 12. 9.21	フランス デンマーク	CLEO/Europe 2000に参加し高強度テラヘルツ電磁波発生に関する情報収集及びInternational Terahertz workshop 2000会議出席のため
酒井雅弘	技術 課 官	12. 9.10 ~ 12. 9.17	フランス	CLEO/Europe-IQEC2000に参加し、真空紫外光学素子に関する技術的情報収集のため
井上克也	相 関 領 域 研 究 系 助 教 授	12. 9.13 ~ 12. 9.19	アメリカ	有機フュルカルと遷移金属イオンの自己集合組織化による複合機能を持つ分子磁性体の構築に関する情報収集及び意見交換を行うため及び分子磁性国際会議(ICMM)に出席、発表のため
小林速男	分子集団研究系 教 授	12. 9.14 ~ 12. 9.20	アメリカ	ICMM2000に出席、講演するため
中村宏樹	理論研究系 教 授	12. 9.14 ~ 12. 9.21	イスラエル	分子衝突動力学ヨーロッパ会議にて招待講演及び討論のため
細越裕子	相 関 領 域 研 究 系 助 手	12. 9.15 ~ 12. 9.23	アメリカ	分子磁性の国際会議(ICMM2000)出席・研究成果発表のため
加藤立久	分子構造研究系 助 教 授	12. 9.21 ~ 12. 9.26	アメリカ	Third Annual Japanese American Frontiers of Science Symposium 招待参加のため
猿倉信彦	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	12. 9.23 ~ 12.10. 3	ドイツ	第8回テラヘルツ電子工学国際会議出席及び研究情報の収集のため
平等拓範	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	12. 9.26 ~ 12.10. 2	アメリカ	スタンフォード大学において「界面制御による高機能光測定用光帯域波長可変クロマチックレーザーの開発研究」を遂行するため
加藤立久	分子構造研究系 助 教 授	12.10. 4 ~ 12.10. 8	ドイツ	金属内包フラーレンの分子物性の分光学的研究のためのドイツとの共同研究のため
小杉信博	極端紫外光科学研究系 教 授	12.10. 6 ~ 12.10.22	フランス ドイツ	光イオン化国際会議に出席・研究成果発表、ポッフム大学・オスナブルック大学訪問、研究資料収集のため
杉田有治	理論研究系 助 手	12.10. 8 ~ 12.10.16	アメリカ	フェルトリコ大学にて蛋白質の立体構造予測法に関する討論を行い、ニューヨークにて生体高分子のモデリング法に関する国際ワークショップに参加し、研究発表を行うため
茅幸二	分子科学研究所 所 長	12.10.13 ~ 12.10.19	台湾	平成13年度学術会議会新プログラム・COE特別委員会出席、国際シンポジウム出席及び文部省所轄並びに国立大学附置研究所所長会議大一部会出席のため

中村宏樹	理論研究系 教 授	12.10.13 ~ 12.10.19	台 湾	第4回原子分子物理学アジアセミナーにおいて研究成果の発表をするため
猿倉信彦	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	12.10.14 ~ 12.10.18	アメリカ	高強度テラヘルツ電磁波による画像新知覚化システムの構築に関する情報収集のため
鈴木敏泰	分子物質開発研究センター 助 教 授	12.10.14 ~ 12.10.20	アメリカ	ACS Polymer Division主催のFluoropolymer2000において講演を行うため
宇理須 恆 雄	極端紫外光科学研究系 教 授	12.10.15 ~ 12.10.23	アメリカ	Molecular Bio Science&Hybrid Electronic Systems に出席し、米国におけるナノ反応場の研究の現状を調査するため
鈴木俊法	電子構造研究系 助 教 授	12.10.19 ~ 12.10.29	ギリシャ オランダ	IMAGINE Network meeting にて招待講演を行い、研究成果の発表、研究情報の収集をするため
谷村吉隆	理論研究系 助 教 授	12.10.22 ~ 12.10.30	韓 国	課題研究に関してEok Lee教授と討論し、情報を収集するため
鈴木俊法	電子構造研究系 助 教 授	12.10.31 ~ 12.11.4	韓 国	ソウル大学を訪問し、セミナーを行い、研究成果の発表、研究情報の収集をするため。



異動年月日	氏名	区分	異動後の所属・職名	現(旧)の所属・職名	備考
12.5.1	川口博之	転入	錯体化学実験施設錯体物性研究部門助教授	名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻助手	
12.5.1	浅香修治	転出	文部省初等中等教育局教科書課教科書調査官	装置開発室助手	
12.5.7	竹添法隆	辞職	ウシオ電機(株)播磨事業所研究員	極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門非常勤研究員	
12.5.15	加藤毅	採用	理論研究系分子基礎理論第二研究部門非常勤研究員	東北大学反応化学研究所附属有機資源・材料化学研究センター助手	
12.5.15	宮下治美	採用	技術課第三技術班装置開発技術係研究支援推進員		
12.5.22	KOVALENKO, A. F.	採用	理論研究系分子基礎理論第三研究部門助手	ウクライナ科学アカデミー凝縮系物理学研究所主任研究員	
12.5.31	石川英里	辞職	東京工業大学資源化学研究所化工設計部門助手	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)	
12.5.31	野村幸代	辞職	米国コロンビア大学留学(博士研究員)	技術課第五技術班分子物質開発技術第一係員	
12.6.1	神坂英幸	採用	理論研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)	
12.6.1	長屋州宣	採用	理論研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)	
12.6.1	日野理	採用	理論研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)	
12.6.1	山崎健	採用	理論研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)	
12.6.1	宮下尚之	採用	理論研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)	
12.6.1	春田奈美	採用	分子構造研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)	
12.6.1	大窪清吾	採用	分子構造研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)	
12.6.1	小杉健太郎	採用	電子構造研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)	
12.6.1	坪内雅明	採用	電子構造研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)	
12.6.1	原功	採用	関連領域研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)	
12.6.1	牧原伸征	採用	関連領域研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)	
12.6.1	鈴木健太郎	採用	関連領域研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)	
12.6.1	野田英之	採用	極端紫外光科学研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)	
12.6.1	王志宏	採用	極端紫外光科学研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)	



12.6.1	藤 芳 暁 採 用	極端紫外光科学研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)
12.6.1	齊 川 次 郎 採 用	分子制御レーザー開発研究センターリサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)
12.6.1	佐 藤 庸 一 採 用	分子制御レーザー開発研究センターリサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)
12.6.1	和 田 亨 採 用	錯体化学実験施設リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)
12.6.1	小 林 克 彰 採 用	錯体化学実験施設リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)
12.6.1	東 門 孝 志 採 用	錯体化学実験施設リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生)
12.6.1	吉 田 久 史 配 置 換	技術課第二技術班分子集団研究系技術係長	技術課第五技術班分子物質開発技術第二係長
12.6.1	山 崎 潤一郎 昇 任	技術課第四技術班分子制御レーザー開発技術係長	技術課第四技術班極端紫外光実験技術係技術主任
12.6.1	高 山 敬 史 昇 任	技術課第五技術班分子物質開発技術第二係長	技術課第五技術班分子物質開発技術第二係技術主任
12.6.1	酒 井 雅 弘 命 ず る	技術課第五技術班分子物質開発技術第二係技術主任	技術課第五技術班分子物質開発技術第二係員
12.6.1	杉 田 有 治 併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科助手	(理論研究系分子基礎理論第一研究部門助手)
12.6.1	井 口 佳 哉 併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科助手	(電子構造研究系電子構造研究部門助手)
12.6.1	水 谷 雅 一 併 任	総合研究大学院大学数物科学研究科助手	(極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門助手)
12.6.16	渡 邊 一 雄 転 出	東京大学大学院総合文化研究科広域科学専攻助手	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手
12.7.1	今 井 宏 之 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)	相關領域研究系相關分子科学第一研究部門特別協力研究員
12.7.7	新 美 さとみ 改 姓	旧姓；糟谷	(分子物質開発研究センター事務補佐員)
12.7.16	根 岸 雄 一 採 用	電子構造研究系基礎電子化学研究部門助手	慶應義塾大学理工学部助手
12.7.16	大 島 康 裕 客 員	電子構造研究系電子構造研究部門助教授	(京都大学大学院理学研究科化学専攻助教授)
12.8.1	初 井 宇 記 採 用	極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門助手	日本学術振興会特別研究員(スウェーデン国Uppsala大学にて研究従事)
12.10.1	奥 村 剛 転 出	お茶の水女子大学理学部物理学科助教授	理論研究系分子基礎理論第二研究部門助手
12.10.1	佃 達 哉 併 任	総合研究大学院大学先導科学研究科助教授	(電子構造研究系基礎電子化学研究部門助教授)
12.10.1	猿 倉 信 彦 併 任	東北大学金属材料研究所附属新素材設計開発施設助教授(客員)	(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
12.10.1	中 井 英 隆 採 用	相關領域研究系相關分子科学第一研究部門非常勤研究員	相關領域研究系特別協力研究員

12.10.1	清水雄一郎	採用	<p>関連領域研究系分子クラスター研究部門非常勤研究員</p>	<p>(財)高輝度光科学研究センター放射光研究所利用促進部外来研究員</p>
12.10.6	朱超原	帰化	<p>旧氏名；朱超原（漢字表記変更なし）</p>	<p>（理論研究系分子基礎理論第二研究部門助手）</p>
12.10.10	GRAAF, Harald	採用	<p>分子集団研究系分子集団動力学研究部門非常勤研究員</p>	<p>独国ブレーメン大学化学科博士課程院生</p>
12.10.16	MORÉ, Sam Dylan	採用	<p>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</p>	<p>日本学術振興会外国人特別研究員(分子研にて研究従事)</p>
12.10.21	PROKOP, Petra V.	採用	<p>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)</p>	<p>独国ライプチヒ大学ティーチング・アシスタント</p>
		勤務命令	<p>東京工業大学資源化学研究所山瀬教授研究室配置</p>	
12.10.27	MOHAMMED, B. Z.	辞職	<p>米国南カリフォルニア大学客員研究員</p>	<p>分子物質開発研究センターバイ電子開発研究部非常勤研究員</p>
12.10.31	MAKSIMUK, M. Y.	辞職	<p>ロシア科学アカデミー Solid State Physics 研究所リサーチワーカー</p>	<p>分子集団研究系物性化学研究部門非常勤研究員</p>
12.10.31	塚田浩	辞職		<p>分子集団研究系物性化学研究部門非常勤研究員</p>
12.10.31	鶴澤武士	辞職	<p>(株)日立製作所公共システムグループ公共システム事業部技師</p>	<p>技術課第一技術班理論研究系技術係員</p>

21世紀最初の分子研レターズである第43号も無事発刊の運びとなりました。ご多忙中にもかかわらずご執筆をお引き受けいただいた皆様には、編集委員一同より厚く御礼申し上げます。長らく岡崎国立共同研究機の発展にご尽力くださった伊藤光男機構長も平成13年3月をもって任期を終えられることとなり、機構ならびに分子研も新たな節目を迎えます。省庁統合を皮切りに激動の時期に突入致しますが、今後とも本誌が所内外の研究者間の交流の場としてお役に立つことを切に願っております。

最後に、企画調査係の神谷良志夫さん、杉江左知江さんと分子研広報担当の佐藤敦子さんには実務面で多大なるご尽力を頂いたことをお伝え申し上げます。

(中村敏和 記)

分子研レターズ編集委員

藤井正明(委員長)

中村敏和(本号編集担当)

加藤立久

川口博之

谷村吉隆

長岡伸一

分子研レターズ No. 43

発行年月	平成13年2月
印刷年月	平成13年2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	西濃印刷株式会社

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/>