

日本化学会賞

日本化学会学術賞

日本化学会学術賞

金属組織写真奨励賞

分子シミュレーション研究会学術賞

分子科学研究奨励森野基金

茅 幸二

平田文男

赤阪 健

平等拓範

高須昌子

水谷泰久



茅幸二所長に日本化学会賞

このたび、茅分子科学研究所所長に平成12年度日本化学会賞が授与されました。これは、慶応義塾大学在任中に精力的に取り組んでこられた「クラスター化学の創成—二成分複合効果の解明」に関する業績が高く評価された結果です。分子研の一員として、またクラスター研究に関わっている研究者のひとりとして、心よりお祝申し上げます。

茅所長が慶応義塾大学に着任した1981年当時、クラスターはほとんどの化学者にとって馴染みのない物質であり、その重要性も認知されていませんでした。このような状況の中で、茅所長は化学者の視点でクラスターに着目し、「クラスター化学」という新しい研究領域を切り開くことに成功しました。主に、2成分からなる金属・半導体クラスターや有機金属クラスターを取りあげ、多様かつ顕著な複合効果が発現することを示しました。例えば、コバルト・バナジウム合金クラスターでは、吸着反応性がその組成比・幾何構造に応じて特異的な振る舞いをするのを見い出しました。また、ベンゼン・バナジウムからなる有機金属クラスターは、多層サンド

イッチ構造を持ち、その結果として金属のd電子がベンゼンを介して1次元的に非局在化することを明らかにしました。これら一連の現象の発見は、国内外の理論家・実験家を大いに刺激し、その後のクラスター化学の発展の礎となりました。

茅所長の研究の進め方を拝見すると、独自の研究・実験技術を開発することが如何に大切かを痛切に感じさせられます。実際にこれまで、レーザー蒸発法による合金クラスター・有機金属クラスターの生成法、異原子ドーブによる電子構造解析法、超高度磁気ボトル型光電子分光器、クラスターを基板上に軟着陸させるソフトランディング法、など高度な実験手法を次々と開発しました。特にソフトランディング法は、気相で合成したクラスターを基板上に集積化するための最先端の方法であり、クラスターの実用化への端緒を開く技術として大きな注目を集めています。これらの技術を駆使しながら、様々なひらめきを具現化した結果が、「クラスター化学」という分野の開拓に繋がっているように思います。新しい発想と武器を持って新しい分野を切り開く、という研究スタイルは、「光音響分光法」を（趣味と実益を兼ねて？）開発したベル研在籍時代から今回の受賞に至るまで貫かれています。茅所長の挑戦



的な研究姿勢は、多くの若手研究者にとっても大きな励みになっているものと思います。

今後は、クラスターサイエンスにとどまらず、広く分子科学全般にわたって指導的な役割を果たされることを信じてやみません。

(佃達哉 記)

平田文男教授に 日本化学会学術賞

「分子溶液の化学」の基礎理論体系の確立とその応用 拡張RISM理論の新展開 という業績に対し、分子科学研究所理論研究系教授の平田文男氏に平成12年度日本化学会学術賞〔物理化学部門(基礎及び応用)〕が授与された。心から祝意を表したい。

平田氏は福岡県のご出身で、北海道大学大学院理

学研究科博士課程に在学後、日本学術振興会奨励研究員、ニューヨーク州立大学ストーニーブルック校博士研究員、テキサス大学オースティン校博士研究員、ラトガーズ大学ニューブランズウィック校助教授、京都大学理学部化学科助教授などを経て、平成7年から現職に就かれている。今回受賞の対象となった拡張RISM理論は、テキサス大学のP. Rossky教授のところで博士研究員をされていた時に平田氏が開発したものである(F. Hirata and P. Rossky, *Chem. Phys. Lett.* 83, 329 (1981))。よって、拡張RISM理論は、本年記念すべき「生誕20周年」を迎えたことになる。RISM理論自体は1972年のChandler-Andersenの論文で提唱されたが、静電相互作用が扱えず、大変制限の大きいものであった。水を含めてほとんどの分子では静電相互作用が重要な役割を果たすわけであり、平田氏の拡張RISM理論はこの困難を克服するものであった。これによって、初めて様々な分子科学の研究に適用が可能になったと言える。

しかし、平田氏の研究生活は常に順風満帆という訳ではなかった。テキサス大学で拡張RISM理論を発表後、平田氏は帰国を決意したが、当時日本の大学に理論化学の職は極めて少なく、ましてや電子状態理論以外の理論の職は皆無に等しい状態であったのである。それで、平田氏は約4年間学問から離れ、コンピュータプログラム開発を請け負う、あるベンチャービジネスの会社に勤めた。そして、筑波科学博覧会で富士通の目玉出展となった「ザ・ユニバース」という映画製作を担当して、水や生体分子の分子動力学シミュレーションを行ったのが契機となり、



赤阪健教授に 日本化学会学術賞

平田氏の学問への情熱が呼び覚められた。その頃には拡張RISM理論は十分な知名度を上げていたので、ラトガーズ大学への転職は難しくなかったと聞く。その後の平田氏の研究活動は、今年の「化学と工業」の3月号の表彰の欄に詳しく書かれているように、まことに多岐にわたり、実に華々しいものである。特に、RISMの元祖のChandlerを初めとするアメリカの研究者がRISM理論に興味を失った後、10年以上にわたって平田氏が拡張RISM理論を守り、そして大樹に育てた感がある。歴史に「もしも」は禁句であるが、平田氏があの時、筑波博で映画製作の依頼をされなかったならば、現在の拡張RISM理論の隆盛はなかったかも知れず、分子溶液の化学の歴史は現在とは大分違ったものになっていたであろう。このような平田氏の困難をものともしない「不屈で首尾一貫した研究活動」(ご本人は「三つ子の魂百までも」と表現された)を顧みると、今回のご受賞は研究者を志す若い人達に大いなる希望と勇気を与えることになったと思う。

平田氏はテニスやスキーなどをこよなく愛するスポーツマンであると共に、読書家でもある。これらが良い気分転換となり、氏の創造性あふれる研究活動に貢献しているものと思われる。平田氏の今後の益々のご活躍をお祈りする。(岡本祐幸 記)

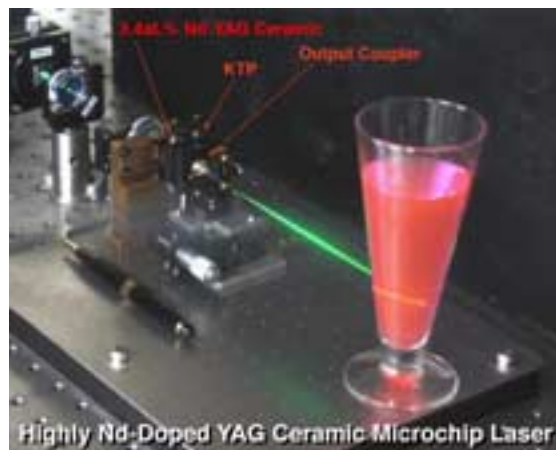
赤阪健教授は、“フラーレン球面の外側および内側の化学”の基礎研究として、フラーレンおよび金属内包フラーレンの分子構造と物性の解明を行い、この分野に画期的な新展開をもたらしました。フラーレンは空洞閉殻構造を持つ炭素多面体分子です。フラーレンは、その特殊かつ新規な分子構造に由来する種々の物理的、化学的特性を示す新かご状炭素素材として非常に魅力ある物質であり、多彩な研究が展開されています。その中において、赤阪教授はフラーレン球面の外側へのケイ素基の導入法を初めて確立し、種々の誘導体の興味ある構造の解明、新しい電子的特性の付加を行いました。また、ストラティファイド素材として注目されるフラーレン球面の内側に金属原子を取り込んだ金属内包フラーレンの新規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。その学問的波及効果は極めて大きく、国内外で高い評価を得ておられます。以上の功績に対して、日本化学会学術賞が贈られました。昨年度まで分子構造学第二研究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)

平等拓範助教授に 金属組織写真奨励賞

2001年度「金属組織写真奨励賞」がレーザー開発研究センターの平等拓範助教授に授与されました。本賞は「学術上技術上優秀な写真に贈呈する賞」であり、金属組織分野における新規な業績が対象となっています。受賞写真のタイトルは「高出力レーザー発振を可能とするYAG焼結体」であり、この数年平等助教授が精力的に行ってきたセラミックレーザーの業績が評価されたものです。なお「セラミックレーザー」は平等助教授と、共同受賞者日本ファインセラミックスセンター池末明生グループとの共同研究になっています。

安価で成型性に優れたセラミックレーザーは従来単結晶Nd:YAGが用いられてきた波長1 μm の固体レーザーに新風を吹き込んでいる。YAG単結晶は通常Cz法と呼ばれる液相からの引き上げ法で育成され、結晶品質を保つために数 mm/h程度の成長速度に制限される。このことがYAG結晶のコスト低下の妨げとなっており、特に長尺化への大きな障害となっていた。またCz法では、一度液相を介するためにレーザーの活性イオンであるNd濃度を上げることが困難で、1.4 at%が限界とされていた。これはマイクロチップレーザーのような小型レーザーを指向する際にはポンプ光の吸収が不十分になるため不利である。このため従来は吸収係数の高いNd:YVO₄が熱伝導率が低いにもかかわらず利用されていた。すなわちNd:YAG結晶自身は高い熱伝導



率、長い上順位寿命など有利な特性を有するにもかかわらず、長尺化においてもマイクロチップ化においても問題点を有していた。平等助教授らはマイクロチップレーザーへの適用をめざして新たなNd:YAGの製法を模索し、焼結法がNdイオンの高濃度添加に適していることを見いだした。また池末らと共にグレイン境界の散乱を抑制する新たな製法を開発し透光性セラミックを実現した。これは世界で初めてのセラミックマイクロチップレーザーとして成就した。セラミック製法では活性イオンの選択添加、過飽和吸収イオンの選択添加などの高機能化、複合化が可能であるため、レーザー材料に新たな自由度が加わったと同等の評価がなされている。また愛知県地方の地場産業である窯業技術のハイテク展開であるため、地元産業上のインパクトも大きく、一般紙も含めて新聞各紙に取り上げられる成果になった。国内外を問わず注目されており、材料分野への貢献も大きい。

なお本原稿は平等先生と共に出張した Conference on Lasers and Electro-Optics (Baltimore, USA) からの帰国便で記述していますが、本会議での発表数7件と世界の研究者たちからも一目をおかれる存在になってきています。氏の今後ますますの活躍をお祈り申し上げます。

(栗村 直 記)



高須昌子助教授に 分子シミュレーション研究会学術賞

この度、相関領域研究系（流動部門）の高須昌子氏に平成12年度「分子シミュレーション研究会学術賞」に授与された。この賞は高須氏がこれまで行ってきた「ランダム媒質中の量子系のシミュレーション」における業績が高く評価されて贈られたものである。高須氏はランダム媒質中の量子系に関して、以下の2つの分野において顕著な業績を挙げた。

媒質中の電子移動の量子モデル計算。

ランダム媒質中のヘリウムの超流動転移のシミュレーション。

また、表題に関連して

ポリマーのマルチカノニカル・シミュレーション
タバコモザイクウイルスの多糖類の存在化でのシミュレーションの先駆的なシミュレーション研究を行った。

以下に、これらの業績を簡単に紹介する。

1. 媒質中の電子移動の量子モデル計算

溶液中で、電子が1つの原子から他の原子へ移動する現象を、3準位モデルと2準位モデルによって表した。溶媒分子のランダムな動きの影響を、振動子で表し、3準位系に結合させて、量子力学的計算を行なった。特に、非対称的な2準位モデルの場合、反応の速さを、エネルギー・ギャップの関数として表して、古典的なMarcusの議論と比較した。その結果、今考えている系では、量子性のために、上記

の関数は非対称となり、また、normal regionとincoherent regionの相図を求め、対称的な2準位モデルと比較した。

この研究は、鈴木・トロッタ公式を用いた量子モンテカルロ計算および数値計算を行っている。速い計算をするためのアルゴリズムの改良も行われている。電子移動という重要な分野において、数値計算の手法を提示し、シンプルなモデルによる結果を出したという点で、画期的な意義を有する。なお、この研究の一部は、カルフォルニア大のチャンドラー教授との共同研究である。

2. ランダム媒質中のヘリウムの超流動転移のシミュレーション

この研究ではヘリウムの超流動転移のシミュレーションを行い、ランダムな媒質中のヘリウムの相図を得た。格子上的ボゾン系のグランドカノニカル・シミュレーションは、世界で数グループのみで行われており、先駆的な研究である。計算の面からは、ボゾンの量子計算での、特殊なフリップに工夫がある。また、クラスターモンテカルロ法のボゾン系への応用が、現在進行中であり、将来の応用が大いに期待できる。

3. ポリマーのマルチカノニカル・シミュレーション

この研究はマルチカノニカル法を用いたポリマーのシミュレーションである。マルチカノニカル法はそれまでスピン系で使われていたが、ポリマーに応用した点が新しい。この方法は他の研究者によりタンパク質にも使われている。

4. タバコモザイクウイルスの多糖類の存在化でのシミュレーション

タバコモザイクウイルスが多糖類の存在下でネマ

ティック転移を起こす実験結果を、シミュレーションにより、定性的に再現した。本研究は、ウイルスの働きという重要な現象をシンプルなモデルで表現し、実験家からも関心を持たれている、重要な研究である。

(平田文男 記)

水谷泰久助手に森野基金

分子構造研究系の水谷泰久助手が『ピコ秒時間分解共鳴ラマン分光法を用いた溶液中の光化学反応および振動エネルギー緩和に関する研究』で第17回分子科学研究奨励森野基金を受賞された。この基金は森野米三先生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の若手研究者に与えられる賞と聞いている。大変嬉しい話で、研究所の諸氏と共に心よりお祝いしたい。

水谷博士は京都大学工学部時代から一貫して溶液論に興味をもち、修士課程では中西浩一郎教授の指導のもとに、核磁気共鳴やラマン分光を用いて溶液構造を調べることを中心に研究を進めた。総合研究大学院大学が創設された時にその第一期生として入学し、タンパク質の共鳴ラマン分光の研究で理学博士号を取得するに到った。毎年自然科学の分野で優れた学位論文を書いた人50人に与えられる井上研究奨励賞を総研大生として初めて受賞された事からも明らかのように、この頃から氏の研究者としての芽は出ていた。学位取得後は、学術振興会特別研究

員となってペンシルバニア大学のRobin Hochstrasser教授のもとで超高速現象の分光学の研鑽を積んだが、この時代に学んだ技術と物の見方がその後の氏の研究を強く支配し、溶液化学の関心事とそれとが結びついて今回の受賞につながったと私は思っている。

水谷氏は、溶液中の溶質にデルタ関数的な揺動を与えたとき、まわりの溶媒分子がそれにどう対応するかといった、エネルギー緩和と構造緩和を実験的に調べる研究に興味をもち、ピコ秒刻みで分子の振動をラマン分光で測定する計画を実践に移された。『望みの波長のピコ秒パルスをキロヘルツ繰り返し得られる光源』をつくる事からのスタートであった。これは外国の色々な所から問い合わせが来たほど画期的なもので、その後多くの人とそのシステムを使うきっかけとなった。この光源から2色のピコ秒パルスをつくり、その2つのパルスの時間をずらせながらラマンスペクトルを観測するシステムを製作するに到り、それを用いてアンチストークスラマン線の強度の時間変化を精度高く観測する事に成功したわけである。そしてミオグロビンという蛋白(筋肉の赤色を与える蛋白)から一酸化炭素を光解離させると、一瞬ヘムが高温になり、それが時定数1.9 psで冷えていく事を観測して*Science*誌に掲載され、光解離による鉄ポルフィリンの構造変化は非常に速いが、それに伴う蛋白の構造変化が少し遅れて~100 psで起る事も指摘された。これはCO-ヘムという溶質が蛋白マトリックスという溶媒中で、COの光解離という瞬時の揺動を受けたとき、まわりがどのように対応するかという溶液化学の設問に対する解答であった。



これとは別の研究として、金属ポルフィリンを有機溶媒に溶解させておき、環の振動励起をサブピコ秒で行なったときのアンチストークスラマン線強度の時間変化を観測して分子内振動エネルギー分布の変化や分子冷却過程を論じる展開も注目を集めた。特に立上り時間が振動モードにより異なる事を初めて見つけ、『ポルフィリンのような大きな分子が溶液状態にある場合でも、振動エネルギーの再分布がピコ秒オーダーで起こる』ということを実証した事は非常に重要なことであった。尚、水谷氏は6月1日付で、新設の神戸大学分子フォトサイエンス研究センター極短パルス光科学研究部門助教授へ栄転された。

(北川禎三 記)