

# 新しいスーパーコンピュータシステム

電子計算機室



平成 11 年度末に稼動を開始し、実質的に昨年度当初から公開された計算科学研究センターのスーパーコンピュータシステム（以下、本システム）について、その性能、機能などの概要を解説し、この一年の利用状況を報告する。

## 1. 構成、スペックと実効性能

本システムは、富士通製 VPP5000（以下 VPP）と SGI 社製 SGI2800 / Origin3800（以下 SGI）から構成されている。<sup>1)</sup> VPP はベクトル演算器を持つ分散メモリー型計算機、SGI は cc-NUMA（cache-coherent Nonuniform Memory Access）方式による論理共有メモリーの超並列計算機である。それぞれの構成とカタログ性能は次のとおりである。

### 1.1 Fujitsu 製 VPP5000

#### (1) 演算処理装置 (30PE)

主記憶容量 256 GB  
総理論演算性能 288GFLOPS (9.6GFLOPS / PE)

#### (2) 磁気ディスク装置 (アレイディスク)

総容量 3.5TB (18GB\_9ドライブ / RAID、24RAID)

### 1.2 SGI 製 SGI2800 / Origin3800

#### (1-1) 演算処理装置 (SGI2800 / 192CPU)

プロセッサ MIPS RISC R12000 300MHz  
主記憶容量 192 GB  
総理論演算性能 115 GFLOPS (0.6GFLOPS / CPU)

#### (1-2) 演算処理装置 (Origin3800 / 128CPU)

プロセッサ MIPS RISC R12000 400 MHz  
主記憶容量 128 GB  
総理論演算性能 102 GFLOPS (0.8GFLOPS / CPU)

#### (2) 磁気ディスク装置 (アレイディスク)

総容量 4.6 TB (36GB\_8ドライブ / RAID、16 RAID)

それでは、実際にどのくらいの性能が出ているのだろうか。当センターでは、単体 CPU の浮動小数点演算性能を測るために、linpack<sup>2)</sup> という密行列のガウス消去法で性能を測るプログラムを使っている。<sup>3)</sup>

さまざまな問題サイズに対して VPP と SGI の性能を比較すると、問題サイズが小さくキャッシュに乗る範囲では SGI が速いが、問題サイズが大きくなるにつれてベクトル性能が伸びてくるために VPP の性能が上回るという結果が得られる。問題によって細かいところは異なるが、1000 × 1000 程度までの行列を扱うような比較的問題サイズの小さい計算は SGI が、ベクトル化が効くような大きな問題に対しては VPP が適しているようだ。

## 2. バッチキューの構成と利用形態

本システムでは、利用者が公平に各マシンを利用することができるように次ページの表のようにキューを設定し、主にバッチジョブ形式での利用を推奨している。

並列計算は、VPP においては全体の 3 分の 1 程度までの演算装置を利用した並列計算が可能である



写真1 主機室に配置されたVPP5000（左）とSGI2800（右）

が、単体演算装置での高度にベクトル化された計算に対する需要が多いために、これ以上のリソースを並列計算に割り当てることは難しい。一方、SGIにおいては、8並列、16並列、32並列、64並列で利用できる各キューが用意されており、それぞれ

のプログラムに適した並列度合いを選択して実行できるようにになっている。並列化の方法に関しては、VPPではMPI等のメッセージパッシングライブラリを利用しなければならないが、SGIではこのような明示的な並列化以外に、自動並列化コンパイラーを

表1 VPP5000のバッチキューの構成

キュー名	CPU時間	主記憶(標準値)	多重度	ノード数	1ユーザ制限	1グループ制限	備 考
V1	6時間	512MB	3	3	1	2	V2,jobexecとノード共用
V2	12時間	12GB(1.5GB)	12	3	1	1	
V3	24時間	15GB(7GB)	4	2	1	1	
V4	24時間	7GB(3GB)	15	14(24)	1	2	VP6が空の時24利用可
V5	48時間	7GB(3GB)	15	14(24)	1	2	VP6が空の時24利用可
VP6	12時間	7GB × 10	1	10	1	1	ベクトル並列ジョブキュー
jobexec	1時間	7GB × 2		2	1	1	会話処理で並列計算
会話処理	30分	256MB		1	-	-	コンパイル・リンク他

表2 SGI2800のバッチキューの構成

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	CPU数	1ユーザ制限	1グループ制限	備 考
G1	12時間	8GB	4	4-8	2	2	並列ジョブ(SGI2800)
G2	24時間	16GB	2	9-16	2	2	並列ジョブ(SGI2800)
G3	48時間	32GB	3	32	1	1	並列ジョブ(SGI2800)
G4	24時間	64GB	1	64	1	1	並列ジョブ(SGI2800)
G2S	24時間	16GB	8	9-16	2	4	並列ジョブ(Origin3800)
G5S	24時間	128GB	無制限	128	-	-	特別申請(Origin3800)
会話処理	2時間	1GB	4	1-4	-	-	8CPU(Origin2000)



利用することによって、比較的簡単に並列計算を行うことができる。並列化による性能の向上は、プログラムの内容に大きく依存するため一般的にその効率を見積もることは難しいが、分子動力学計算など通信の比率の少ない計算においては、100%に近い効率を達成しているプログラムもあるようである。

### 3. パッケージプログラムの利用状況

本センターでは、Gaussian、GAMESS、Molproといった、いわゆる量子化学計算のための汎用パッケ

ージプログラムの利用が多く、本システム上でもそれぞれの計算に適したキューを選択して実行されている。VPPでは、大規模な行列の対角化が含まれる計算など、比較的ベクトル化率の高い計算が効率よく実行できる。SGI上では、これらのパッケージプログラムを利用しても16並列程度まで効率よく実行できる計算もあるようで、例えばGaussianでのベンチマークによると、DFT計算は比較的効率よく並列化ができていようである。下のグラフは並列化によって計算速度がどの程度上がるかを示した一例

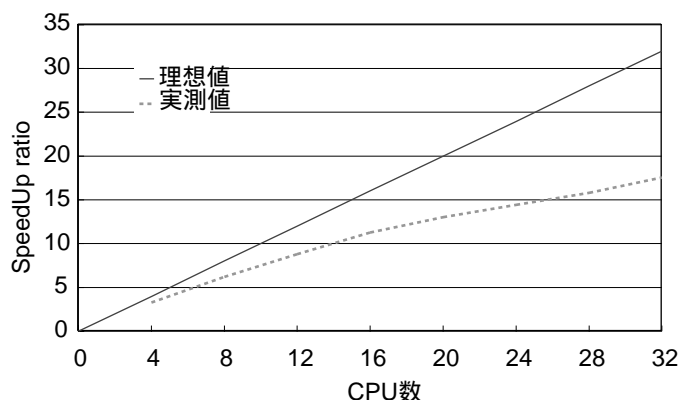


図1 SGI2800での並列計算の速度向上比

表3 昨年度のCPU利用状況

年月 マシン名	CPU使用時間				VPU時間	
	VPP5000	利用率 (%)	SGI2800	利用率 (%)	VPP5000	利用率 (%)
平成12年4月	8,963	47	60,558	39	6,248	33
5月	8,846	43	88,362	49	6,044	29
6月	8,544	40	52,923	29	6,202	29
7月	9,709	45	51,228	28	7,437	35
8月	11,172	51	53,594	28	8,825	40
9月	9,505	47	50,572	29	7,383	36
10月	12,010	63	25,385	14	9,473	50
11月	13,460	70	43,283	26	10,468	54
12月	16,236	74	48,706	26	12,151	55
平成13年1月	15,905	78	34,793	20	11,730	58
合計	114,350	56	509,404	29	85,961	42

〔注〕VPP5000のCPU、VPU時間は30PEの合計。SGI2800のCPU時間は192CPUの合計である。

であるが、利用CPU数が少ない間は効率よく並列化されていることがわかる。並列化効率がどこで頭打ちになるかは問題によって大きく異なるので、詳細はセンターのWEBページ等の情報を参考にしてほしい。<sup>4)</sup>

#### 4．平成12年度の利用状況

今年1月までのCPU利用状況を表3に示す。並列キューの構成などを効率がよくなるように修正をしてきた結果、特にVPPではCPU利用率も徐々に上昇して70%前後と、かなり高い状況が続くようになってきた。VPU時間とはベクトルプロセッサの動作時間をあらわし、ベクトル化率の高い計算が実行されるほど利用率が上がることになる。

#### 5．今後の運用方針

この10年程度の間に各研究室に高性能ワークステーションが普及し、また現在、急速にパーソナル

コンピュータの性能が向上しており、問題によっては、これらのマシンの性能が本システムの単体CPU性能を上回る場合もあるようになってきた。小規模の数値計算に関しては、より安価に、手軽に実行できる環境が整いつつあるということで歓迎すべきことであるが、これは逆に、本システムのような高性能スーパーコンピュータに対しては、よりいっそう大規模計算の需要が高まるということを意味している。

この一年間は、主に新しいマシンに慣れるために幅広い計算を受け入れるようにキューを構成し運用してきた。今年度は、これに加えて特別申請という利用形態が始まっている。これは、一定期間、特定のグループに本システムの一部を貸し出す形で利用してもらう方式で、大規模計算を実行しやすくするためのものである。特別申請での利用は、平成13年度前期はSGIシステムのうちOrigin3800(128CPU)部分のみ、後期からはVPPの一部も使うこ



とができるようになるが、通常のバッチキューの運用とのバランスを考えて調整していくことが必要であると考えている。

#### 参考サイト

- 1) さらに詳しい情報は、計算科学研究センターの Web Page ( <http://www.rccs.orion.ac.jp/> ) を参照。
- 2) linpackc も含めて各種のベンチマークプログラムは、Netlib ( <http://www.netlib.org/> ) より入手可能。
- 3) さまざまな CPU に対して、linpackc の実効性能をセンターで測定した結果は、計算機室便利帳 ( <http://ccinfo.ims.ac.jp/network/> ) 以下の該当ページを参照。
- 4) センターで運用している各種パッケージプログラムのベクトル化、並列化に関する情報は、<http://ccinfo.ims.ac.jp/bench/> を参照。

## 不等刻線間隔平面回折格子分光器 BL4B

極端紫外光実験施設 繁 政 英 治

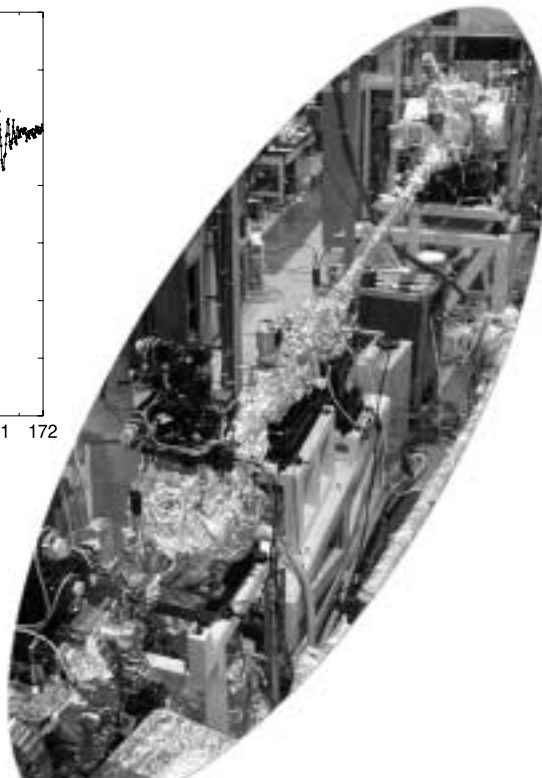
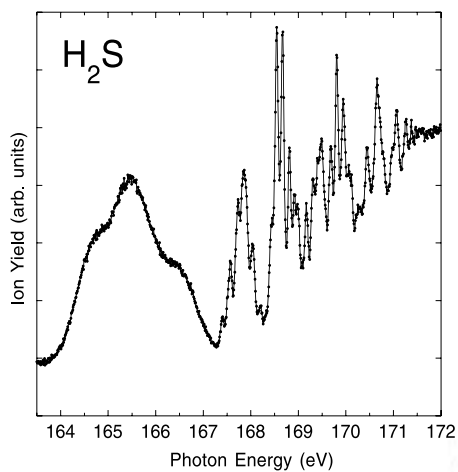
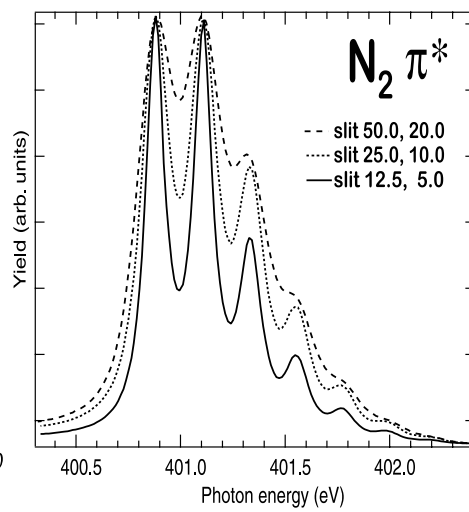
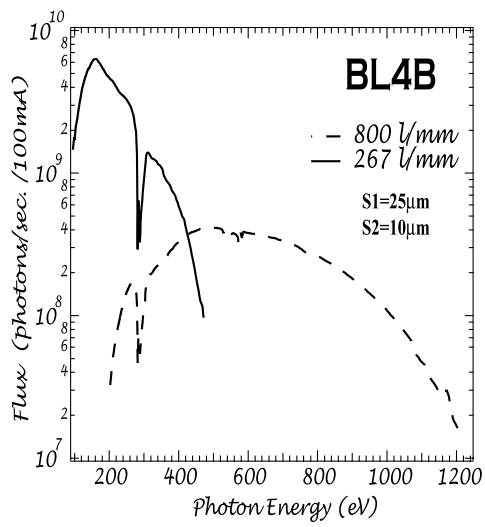
極端紫外光実験施設 (UVSOR) では創設期からいろいろなエネルギー領域で分光器や測定装置を整備してきた。しかし、放射光分光技術に格段の進歩を遂げている他の新しい施設と比較すると創設来 17 年以上も経た UVSOR の分光性能に劣るものが数カ所見られるようになった。そこで特に遅れをきたしていると思われた 100 eV から 800 eV 付近までのエネルギー領域 (イオウやリンの 2p 内殻や炭素、窒素、酸素の 1s 内殻を励起) をカバーする高性能な分光器の開発を目指して、繁政が着任した平成 11 年前期に研究系 (小杉、高田) と施設 (繁政、下條) の連携チームを編成し直ちに設計を開始した。初期のレイトレースによる設計作業は、高エネルギー加速器研究機構や東京大学理学部の研究者とも意見交換しながら主に高田 (現理研) が担当し、最終的に不等刻線間隔平面回折格子分光器を採用するに至った。その後、平成 12 年後期より小杉グループの新メンバー (初井、陰地、永園) を加え、BL4B への設置作業を開始し、同 12 月より放射光を導入して調整と性能チェックを行った。なお、立ち上げの際、出射部との繋ぎ込みでは UVSOR の中村技官、分光器の制御では UVSOR の近藤技官、ビームラインインターロックでは装置開発室の豊田技官の協力が不可欠であった。また、建設計画の遂行にあたっては、かなり無理な予算申請をしたにも関わらず、茅所長にはいろいろとご配慮頂いた。この場を借りて感謝したい。この分光器の特長は、1) 回折格子の偏角 (入射角 + 回折角) が一定な定偏角型の分光器であり、出射光の方向や集光位置が一定である、2) 集光素子と分散素子が分離しており、調整が容易であ

る、3) 回折格子の回転のみで波長操作が可能であり、波長再現性などの信頼性が高い、4) 回折格子の刻線密度をパラメータとして収差補正を行っており、高分解能が達成できる、等があげられる。2 種類 (800 l/mm 及び 267 l/mm) の回折格子を真空中で切り替えることによって、目的のエネルギー範囲全域で高分解能の光が得られる仕組みとなっている。

テストの結果、入射スリット幅を 25  $\mu\text{m}$ –10  $\mu\text{m}$  に設定した時 (800 l/mm の回折格子の場合、400 eV において分解能 5000 程度に相当) 90~1000 eV の光エネルギー領域において、 $10^8$ – $10^{10}$  photons/sec の光強度である事が確認された。分解能に関しても、綿密に光学素子の調整を行った結果、スリット開度に依存して望みの高分解能が得られることが確認された。図示したように振動構造が明瞭に分離された窒素分子の K 殻吸収スペクトルが観測され、文献等との比較から、400 eV 付近での最高到達分解能 ( $E/\Delta E$ ) は設計段階での目安の 5000 (余裕を見て見積もった値) を遙かに上回ることが判明した。更に、現在計画中の UVSOR 電子蓄積リングの高度化が実現すれば、同じ分解能の時の光強度が数倍になることが予想され、世界的な競争力も増すと思われる。高度化計画が、近い将来に実現することを切に希望する。内殻励起領域で振動構造を分離できる高性能分光器が完成したことにより、内殻励起分子の構造、電子構造、光化学反応などの詳細を解明する研究が展開することが期待される。平成 13 年度前期は、高分解能を活かした対称性分離イオン分光法や光電子分光法による性能評価を兼ねた実験を分光器建設グループが中心になって行う。特に大きな問題がなけれ



ば、後期から協力研究ビームラインとして一般に公開する。



## 特殊六極電場を用いた超高密度配向分子ビーム発生装置 広帯域波長変換素子作製のための高電圧印加真空装置

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（「特殊六極電場を用いた超高密度配向分子ビーム発生装置」と「広帯域波長変換素子作製のための高電圧印加真空装置」）について報告する。報文は各課題の担当技官による。

### 特殊六極電場を用いた 超高密度配向分子ビーム 発生装置

提案者： 笠井俊夫、蔡徳七、橋之口道宏  
(分子クラスター研究部門)

開発担当者： 鈴井光一、渡辺三千雄

配向分子ビーム発生のための特殊六極電場電極を製作したので報告する。

従来は六本の電極を平行に設置し六極電場を形成していたが、ここではそれぞれの電極の電位を共有する様に周囲に18本の電極を八ニカム状に追加配列し、全部で24本の電極から構成されている。こ

れにより七カ所の六極電場が形成され、各電場に分子ビームを導き高密度の配向分子ビームを発生させる装置である。

この装置に使用する電極は収束点から放射状に八ニカム配列するために、その形状はテーパ状でかつ配向の状態選別の機能上ある程度の長さが必要である。このような電極を実現させるため幾つかの方法が考えられた。電極製作法としてNC旋盤によるテーパ加工などがあるが、ここでは金属加工の概念から離れ、釣竿などに使用されている導電性のCFRP（炭素繊維強化樹脂）に注目した。長さ1000mm、直径15mmから7.5mmのテーパCFRPパイプ（ゴルフクラブ用シャフト）を入手しこれを電極に用いた。



図1





写真 1 装置全体

電極支持部品は電極に正負の電位差が20~30 kVを想定している事から高絶縁材料を用いる必要がある。絶縁性の高いマシナブルセラミックを想定したが、加工が困難で材料コストが高価であり、さらにテーパ電極の小径側では隣り合う電極間の距離を大きくすることが不可能であった。従って、支持部品のデザインを新規に行い、本装置ではポリアセタール樹脂を使用し、材料コストの低減と加工が容易に出来るようにした。

平成12年度末までに完成した電極を図1に示す。この装置はパルスノズル、スキマー及び差動排気隔壁を4本の支持ロッド上にすべて配置し配向分子線源として一つのユニットとする計画である。また本装置用の真空チャンバを含め引き続き装置開発室で製作を進めている。

## 広帯域波長変換素子作製のための高電圧印加真空装置

提案者： 栗村直、平等拓範  
(分子制御レーザー開発研究センター)  
開発担当者： 小林和宏、鈴木光一

本装置は広帯域赤外光発生用波長変換素子作製のため、微細な電極パターンを用いた分極反転構造の作製を目的とする装置である。高真空中( $1 \times 10^{-7}$  Torr)での広い温度範囲(-180 ~ 150 )における高電圧印加(最大20 kV)が可能となっている。従来の方式では絶縁オイルを用いることで絶縁性を確保してきたが、微細な周期では忠実なパターン転写が不可能であり、本装置を製作するに至った。写真1に装置全体を示す。

現在当初の目標であったチャンバーの到達真空度 $1 \times 10^{-7}$  Torrを達成している。また、温度範囲



写真2 ロウ接前の温調プレート

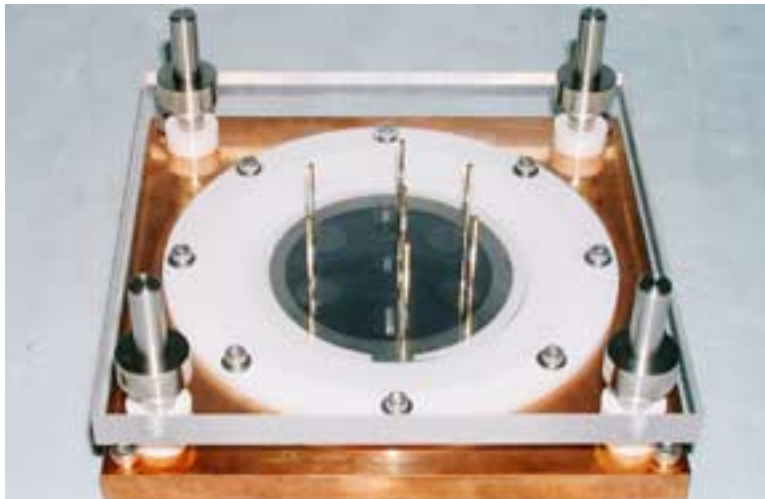


写真3 高電圧印加装置  
(配線無し)

-180 ~ 150 で温度可変可能な温調プレートの動作確認も終了している。

真空雰囲気中で温度が可変出来る温調プレート(写真2)は液体窒素の流路とマイクロシースヒーターを納める溝を別々の部品で構成し、これらの部品を銀ロウで接合している。さらに、液体窒素を供給するための導入口にVCRを使用しこれも銀ロウにより接合している。この設計により均一な熱拡散と安定した定温特性を得ることが出来た。

写真3は温調プレート上にウェハを固定し電極パターンに高電圧を印加する銅プレート部分である。電極部分には半導体検査用のコンタクトプローブを使用し、電気伝導に必要な接触圧を得ている。又、銅プレートは熱容量を稼いで温度リップルを取り除く

為に10 mmの厚みを有している。

現在、最終的な実験準備をしている段階である。

## 平成 12 年度分子科学研究所 COE 国際シンポジウム

## 分子集合体の電子物性 分子固体から単一分子まで



開催日	2001年3月15日(木) - 17日(土)	
開催場所	岡崎コンファレンスセンター	
提案代表者	分子科学研究所	小林速男
提案者	薬師久彌 畠田博一 中村敏和 井上克也 米満賢治 鈴木敏泰	
招待外国人研究者	David L. Allara Patrick Cassoux E. Coronado Peter Day Dante Gatteschi Howard E. Katz R. M. Metzger R. Superfine Fred. Wudl	(Pennsylvania State Univ., USA) (LCC/CNRS, France) (Univ. de Valencia, Spain) (The Royal Institution, UK) (Univ. of Florence, Italy) (Bell laboratories-Lucent Technologies, USA) (Univ. of Alabama, USA) (Univ. of North Carolina, USA) (Univ. of California, USA)

## シンポジウムの概要

有機超伝導が初めて報告されてから20余年が経過し、有機超伝導研究も成人の歳を迎えた。最近の分子物性化学分野の進展は著しく、超伝導や強磁性のような無機固体の殆どの「典型物性」は分子物質でも既に実現し、「今後は、分子物質でも出来た...」という時代は終了し、分子物質であるからこそ出来た...という特徴ある物性を開発することが重要である」と言われるようになった。本シンポジウムは、このような状況を受けて、物性分子科学の将来への新たな展望を開くことを目指して企画された。即ち、有機伝導体、分子磁性体研究の最前線を把握し将来への展望を探ること、および、今後の分子科学の重

要課題である、小さな分子集合体の電子機能や単一分子の電子機能開発を目指した基礎研究について世界の最新の動向を知る事が目標であった。具体的には新規有機超伝導体、磁性有機超伝導体、単一分子金属、分子磁性体、光複合物性、有機薄膜、分子デバイス、単一分子デバイスへの基礎研究などが話題となった。本シンポジウム提案後、電界効果トランジスター(FET)を用いた有機分子結晶および高分子の超伝導やレーザー発振、中性単一分子金属、強磁性分子性金属、磁場誘起超伝導などの発見がなされ、ナノサイエンスやナノテクノロジーへの関心が急速に高まり、更には昨年10月の白川英樹先生の伝導性ポリアセチレンの発見に対するノーベル賞の報道がなされた事を振り返れば、本シンポジウム提案は非常に時宜を得たものであったとすることがで

きょう。講演は全て招待講演で、白川英樹先生の伝導性ポリアセチレンの発見前夜の研究についての講演、京都大学の石黒武彦先生のポリアセチレンの電氣的性質の講演を初めとして、各分野で活発な研究を展開している約30名の代表的な内外の研究者が講演を行った。会場は岡崎コンファレンスセンターの大会議室を使用し、参加者は約150名であった。また、ポスター発表は中会議室を使用して行われたが、申込期間が非常に限られていたにも関わらず、約70のポスター発表の希望があり、本シンポジウムへの高い関心を感じることが出来た。発表者は各々非常に熱のこもった高いレベルの発表をされ、全体として3日間の会議は非常に好評であった。また、海外の殆どの招待者からも我が国の分子科学研究の高い水準について、好意ある感想を聞くことが出来た。本シンポジウムの特徴は、これまでは共通の場所で発表される事の無かった「異分野」の講演、例えば「分子性固体の電子物性」の研究と「単一分子操作」の基礎的研究の講演が共存したことであるが、分子研に比較的なじみの少ない分野についても、我国の指導的研究者の積極的な協力によって活発な討論がなされたことに対して深く感謝申し上げたい。活性化しつつあるナノサイエンスと物性分子科学の間に橋を掛ける可能性を念頭に企画した研究会であったが、参加者がこの研究会からこれまでの研究会では得られなかった物性分子科学の広い展望や新たな印象を多少とも感ぜられたとすれば幸いである。

## 講演プログラム

March 15 (Thursday)

- |               |  |
|---------------|--|
| 9:05 - 9:15   | Opening Address<br>H. Kobayashi (IMS)  |
| 9:15 - 10:00  | T. Ishiguro (Kyoto Univ.)<br>Conduction Mechanism in Doped Polyacetylene   |
| 10:00 - 10:45 | P. Day (Davy Faraday Research Lab.)<br>Supramolecular Chemistry of Molecular-Based Magnets and Superconductors                     |
| 11:00 - 11:45 | D. Gatteschi (Univ. of Florence)<br>Dynamic Phenomena in One-dimensional Magnets   |
| 1:10 - 1:40   | K. Hashimoto (RCAST, Univ. of Tokyo)<br>Spin Transition Induced by Light at Room Temperature on Metal Polycyanides                 |
| 1:40 - 2:10   | T. Nogami (Univ. of Electro-Communication)<br>Magnetic Properties of Some Transition-metal Complexes                               |
| 2:10 - 2:40   | K. Awaga (Univ. of Tokyo)<br>Magnetic Bistability in Organic Radical Crystals  |
| 2:40 - 3:10   | K. Inoue (IMS)<br>Construction of High- $T_c$ Molecule-based Magnets with Asymmetric Structure                                     |
| 3:30 - 4:15   | H. Shirakawa (Cabinet Office)<br>The Discovery of Polyacetylene Film — The Dawning of an Era of Conducting Polymers —              |
| 4:15 - 5:00   | P. Cassoux (LCC/CNRS)<br>M(dmit) <sub>2</sub> - and BETS-based (Super) Conducting Salts with Magnetic and Photochromic Ions        |
| 5:00 - 5:30   | A. Kobayashi (Univ. of Tokyo)<br>Metallic Crystal Composed of Single Component Molecules — Design, Synthesis and Structure —       |
| 5:30 - 6:00   | T. Nakamura (Hokkaido Univ.)<br>Integrated Molecular Systems Based on Molecular Conductors and Magnets: Channels, Rotors and Wires |



6:00 - 6:20 R. Kondo (Univ. of Tokyo)  
Superconductivity vs. Spin Density Waves  
in Twin-Columnar Conductor,  
(BETS)<sub>2</sub>(X<sub>2</sub>TCNQ) [X = Cl, Br]

March 16 (Friday)

9:00 - 9:45 R. M. Metzger (Univ. of Alabama)  
Unimolecular Rectifiers and Metal  
Nanowires

9:45 - 10:30 D. L. Allara (Pennsylvania State Univ.)  
Chemical Aspects of Self-assembled  
Molecular Electronic Devices

10:45 - 11:25 M. Fujihira (Tokyo Institute of Technology)  
Study of Self-assembled Monolayers by  
Scanning Tunneling Microscopy

11:25 - 12:05 Y. Wada (Hitachi, Ltd. and CREST, JST)  
Prospects for Single Molecule Information  
Devices for the Next Paradigm

1:30 - 2:10 K. Seki (RCMS, Nagoya Univ.)  
Organic / Metal Interfaces: Structure,  
Electronic Structure, and Other Aspects

2:10 - 2:50 S. Koshihara (Tokyo Institute of  
Technology)  
Photo-control of Cooperative Phenomena in  
Organic and Inorganic Semiconductors

2:50 - 3:20 T. Suzuki (IMS)  
Perfluorinated Oligo(*p*-Phenylene)s:  
Efficient n-Type Semiconductors for  
Organic Light-Emitting Diodes

3:40 - 4:25 E. Coronado (Instituto de Ciencia  
Molecular. Univ. de Valencia.)  
Multifunctional Molecular Hybrids with  
Coexistence of Magnetic and Conducting  
Properties

4:25 - 4:55 H. Seo (Univ. of Tokyo)  
Charge Ordering in Organic Conductors

4:55 - 5:25 R. Kato (RIKEN)  
From Molecule to Molecular Ensemble

5:25 - 5:45 H. Fujiwara (IMS)  
Structures and Physical Properties of an  
Antiferromagnetic Superconductor, -  
(BETS)<sub>2</sub>FeBr<sub>4</sub>

7:30 - 9:00 — Poster Session —

March 17 (Saturday)

9:00 - 9:45 F. Wudl (Univ. of California)  
Design and Synthesis of Materials for Thin-  
film Organic Devices: Making an  
Anthracene Behave Like Pentacene

9:45 - 10:30 H. E. Katz (Bell laboratories-Lucent  
Technologies)  
Design and Synthesis of Organic Transistor  
Semiconductors for Logic Elements,  
Displays, and Sensors

10:45 - 11:30 R. Superfine (Univ. of North Carolina)  
The Atoms Matter: Lattice Registry Effects  
in NEMS Devices

11:30 - 12:10 Y. Nakayama (Osaka Prefecture Univ.)  
Molecular Devices Using Carbon  
Nanotubes

12:10 - 12:30 A. Hassanien (Electrotechnical Laboratory)  
Fermi electron wavepacket interference  
images on carbon nanotubes at room  
temperature

2:00 - 2:40 K. Matsushige (Kyoto Univ.)  
High Density Ferroelectric Molecular  
Memory

2:40 - 3:10 T. Ogawa (PRESTO, JST)  
Molecular Electronics Devices Using  
Functional Organic Molecules and Nano-  
gap Electrodes

3:10 - 3:40 Hirokazu Tada (IMS)  
Nano-scale Electrical Properties of  
Molecular films on Silicon Bound through  
Si-C Bonds

3:40 - 3:50 Closing Address  
K. Yakushi (IMS)

「分子、クラスター、ナノ結晶の原子構造と電子物性の研究会」

2000年11月21日(火)~22日(水)

「フラーレン科学における新機能探索の現状と展望」

2000年11月23日(木)~25日(土)

「紫外・真空紫外光領域の新しいニーズと放射光利用」

2000年12月11日(月)~12日(火)

「動的側面からみたタンパク質の分子科学：揺らぎの理解に向けて」

2000年12月25日(月)~27日(水)

「有機分子機能体の設計・合成・物性」

2001年1月18日(木)~20日(土)

「真空紫外線・軟X線パルスの利用と将来展望」

2001年1月26日(金)~27日(土)

分子、クラスター、ナノ結晶の原子構造と電子物性の研究会

2000年11月21日(火)~22日(水)

岡崎コンファレンスセンター

11月21日(火)第1日目

13:00-14:20 共通セッションI

座長 田中信夫

1. シリコン表面7×7構造：原子を見る  
高柳邦夫(東京工大総理工)40分

2. 近接場光学：計測から加工へ  
大津元一(東京工大総理工)40分

14:20-14:30 休憩(10分)

14:30-17:35 セッションIIA

座長 竹田精治

1. ナノチューブ研究の展開  
飯島澄男(名城大理工)35分
2. 量子渦糸をみる  
外村彰(日立製作所基礎研究所)35分

15:40-15:50 休憩(10分)

3. 電気伝導を観る  
長谷川修司(東京大理)35分
4. STMによる固液界面反応の解明  
板谷謹悟(東北大工)35分
5. 非接触AFMによる分子種の認識  
菅原康弘(大阪大工)35分



17:35-17:45 休憩 (10分)

特別講演 Structural Biologyと顕微鏡の解像力  
濱 清 (生理研)

18:00-18:10 全体総括  
田中信夫、藤吉好則

11月22日(水)第2日目

9:00-11:25 セッションIII A

座長 平山司

1. サブオングストローム分解能電子顕微鏡のためのモノクロメータと収差補正  
津野勝重 (日本電子)
2. 実時間焦点位置変調電子顕微鏡の開発と応用  
高井義造 (大阪大工)

10:10-10:15 休憩 (5分)

3. ナノ領域の元素分布をみる STEM-EELS法  
倉田博基 (日本原子力研究所)
4. 電子と電子は干渉するか? 電子カウンティングの拓く世界  
長我部信行 (日立製作所基礎研究所)

13:25-15:50 セッションIV A

座長 高柳邦夫

1. 水素終端シリコン表面での原子の観察と操作  
橋詰富博 (日立製作所基礎研究所) 35分
2. 表面をみる  
八木克道 (東京工大名誉教授) 35分
3. 欠陥や界面を第一原理計算で探る 計算科学と電子顕微鏡との共同  
香山正憲 (大阪工業技術研究所) 35分
4. 金属内包フラーレンの構造  
篠原久典 (名古屋大理) 35分

15:50-16:00 休憩 (10分)

16:00-18:00 共通セッションV

座長 高井義造

1. 電子線とX線による超分子の構造解析 細菌べん毛らせんのスイッチ機構  
難波啓一 (ERATO, JST&松下電器先端技研) 40分
2. 位相差電子顕微鏡と複素観測  
永山国昭 (生理研超微小形態生理) 40分

## フラーレン科学における 新機能探索の現状と展望

2000年11月23日(木)~25日(土)

岡崎コンファレンスセンター

1日目(11月23日(木))

セッション1:「フラーレン分子の化学修飾を用いた物性開発」

(座長:都立大院理・兒玉健)

13:30-15:00 東北大反応研・伊藤攻  
フラーレン類の新しい光物性と光反応の開発

休憩

(座長:新潟大院自然・若原孝次)

15:30-16:30 新潟大院自然・前田優  
フラーレン触媒としての新展開

16:30-17:30 九大院工・池田篤志  
カプセル型分子によるC<sub>60</sub>の包接とその応用研究

終了

18:00- 幹事会

2日目(11月24日(金))

(座長:京大化研・村田靖次郎)

9:00-10:30 東大院工・田代健太郎  
フラーレン・ポルフィリン超分子錯体の構築と機能

休憩

セッション2:「フラーレン、ナノチューブ固体相の物質設計」

(座長:都立大院理・三宅洋子)

11:00-12:00 都立大院理・石井知彦  
磁性金属錯体-C<sub>60</sub>-電荷移動錯体の合成・磁気物性および電子状態

昼食

(座長：東大工・河野正道)

13:30-15:00 筑波大物質・岡田晋  
フラーレン・ナノチューブポリマー相の構造と電子状態

15:00-16:00 東大院理・田村了  
ナノチューブにおける電子輸送

休憩

(座長：青学大理・中田恭子)

16:30-18:00 無機材研・坂東義雄  
B-C-N系の多元素ナノチューブ・フラーレンの合成と構造解析

終了

18:00- 懇親会

3日目(11月25日(土))

セッション3：「スーパーアトム の物性解明」

(座長：名大院理・稲熊正康)

9:00-10:30 岡山大院自然・久保園芳博  
金属内包C<sub>60</sub>の構造と物性研究の現状

10:30-11:30 都立大院理・秋山和彦  
放射能をプローブとした金属フラーレン研究

休憩

(座長：都立大院理・小林郁)

11:50-12:50 総合討論

終了

12/11

座長 伊藤稔(信州大工)

13:20 - 13:30 始めに  
福井一俊(分子研界面)

13:30 - 14:10 真空紫外励起用蛍光体～酸化物蛍光体の課題と量子カッティングを用いたフッ化物蛍光体の探索～  
田中省作(鳥取大工)

14:10 - 14:40 分子軌道計算の光機能材料開発への応用～手法と実際～  
里園浩(浜松ホトニクス中研)

14:40 - 15:00 休憩

座長 難波孝夫(神戸大理)

15:00 - 15:20 水素結合型強誘電体の構造相転移と光学応答  
大野宣人(大阪電通大工)

15:20 - 15:40 電子励起が誘起する order-disorder 相転移  
萱沼洋輔・野場賢一(大阪府立大工)

15:40 - 16:00 休憩

座長 黒澤宏(分子研界面)

16:00 - 16:40 次世代半導体リソグラフィ技術の展望  
笹子勝(技術研究組合超先端電子技術開発機構(ASET))

16:40 - 17:10 高解像光リソグラフィ技術  
寺澤恒男(日立中研ULSI)

17:10 - 17:40 真空紫外光用透過材料としてのSiO<sub>2</sub>  
粟津浩一(電総研量子放射部)

17:40 - 18:00 紫外・真空紫外光分光によるシリカ系ワイドバンドギャップ物質の研究  
西川宏之・大木義路(芝浦工大工・早大理工)

18:00 - 18:30 UVSOR見学ツアー

18:30 - 20:30 懇親会

12/12

座長 福井一俊(分子研界面)

09:00 - 09:40 新しい高輝度真空紫外光源  
黒澤宏(分子研界面)

## 紫外・真空紫外光領域の新しいニーズと放射光利用

2000年12月11日(月)～12日(火)  
岡崎コンファレンスセンター中会議室





- 09:40 - 10:00 極紫外広帯域 (200 nm - 30 nm) 多層膜の開発  
江島丈雄 (東北大科研)
- 10:00 - 10:20 休憩
- 座長 平松和政 (三重大工)
- 10:20 - 10:50 III 族窒化物半導体のエピタキシー  
~量子ドット・低転位~  
田中悟 (北大電子科学研)
- 10:50 - 11:10 窒化物半導体からの紫外高輝度発光  
~200-300 nm 帯発光デバイス実現の可能性~  
平山秀樹 (理研半導体)
- 11:10 - 11:50 窒化物半導体受光素子による火災検知センサ  
平野光 (大阪ガス)
- 11:50 - 12:10 放射光を用いた窒化物半導体の研究  
福井一俊 (分子研界面)
- 12:10 - 13:10 昼食
- 座長 鎌田雅夫 (分子研 UVSOR)
- 13:10 - 13:30 VUV 光を用いたアミノ酸薄膜の光物性と化学進化の研究  
田中真人 (神戸大自然)
- 13:30 - 14:00 イオン性半導体における励起子吸収の圧力効果  
難波孝夫 (神戸大理)
- 14:00 - 14:20 BaFBr:Eu<sup>2+</sup> の輝尽発光中心  
大西彰正 (山形大理)
- 14:20 - 14:40 休憩
- 座長 中川英之 (福井大工)
- 14:40 - 15:00 ハロゲン化鉛、タンゲステン酸鉛等の紫外・真空紫外光領域における光学スペクトル  
藤田正実 (海上保安大自然)
- 15:00 - 15:30 真空紫外光を用いた固体におけるエネルギー緩和過程の研究  
北浦守 (福井高専応物)
- 15:30 - 16:10 21 世紀の VUV 光物性研究への一考察  
鎌田雅夫 (分子研 UVSOR)

## 動的側面からみたタンパク質の分子科学： 揺らぎの理解に向けて

2000年12月25日(月)午後~27日(水)午前  
岡崎コンファレンスセンター小会議室

12月25日(月)

12:45-1:20 受付

1:20-1:30 はじめのことば  
北尾彰朗 (京大院・理)

座長 水谷泰久 (分子研)

1:30-2:10 柴田稯 (レーザー総研)  
サイト選択分光法で見る蛋白質構造揺らぎの調和性、非調和性

2:10-2:50 寺嶋正秀 (京大院・理)  
光トリガーによる蛋白質のダイナミクス

2:50-3:15 休憩

座長 寺嶋正秀 (京大院・理)

3:15-3:55 北尾彰朗 (京大院・理)  
理論と実験データの解釈から得られた蛋白質ダイナミクスの描像

3:55-4:35 桑田一夫 (岐阜大・医)  
蛋白質の励起構造と機能・病原性

4:35-5:00 休憩

座長 北尾彰朗 (京大院・理)

5:00-5:40 杉田有治 (分子研)  
拡張アンサンブル法による蛋白質構造揺らぎの解析

5:50-7:20 ポスターセッション

12月26日(火)

座長 赤坂一之 (神戸大院・自然科学)

9:00-9:40 石井由曠 科技団・一分子プロジェクト)  
1分子計測で見たタンパク質構造のダイナミクス

9:40-10:20 高野光則(東大院・総合文化)  
1分子計算機実験再考

10:20-10:40 休憩

座長 奥村剛(お茶水大・理)

10:40-11:20 齋藤真司(名大院・理)  
液体の揺らぎと非線形分光

11:20-12:00 長澤裕(阪大院・基礎工)  
液体、ガラス、蛋白質中の超高速緩和過程

座長 小松崎民樹(神戸大・理)

1:20-2:00 奥村剛(お茶水大・理)  
2次元レーザー分光法による生体分子の構造解析の可能性と2次元フォトンエコーによる2次元ラインシェイプ解析

2:00-2:40 富永圭介(神戸大・理)  
超高速分光の実験家から見た凝縮相における揺らぎと緩和

2:40-3:05 休憩

座長 富永圭介(神戸大・理)

3:05-3:45 肥後順一(生物分子工学研究所)  
Fluctuations of solvent dipole field and pinning around biomolecules

3:45-4:25 八木原晋(東海大・理)  
マイクロ波誘電分光によるタンパク質の動的構造の研究

4:25-4:50 休憩

座長 木寺詔紀(京大院・理)

4:50-5:30 山本晃司(神戸大・理)  
実験的アプローチによるタンパク質低振動領域の考察

5:30-6:10 赤坂一之(神戸大院・自然科学)  
高圧NMRによる蛋白質構造の遅い揺らぎ 蛋白質ダイナミックスの新しい描像

6:30- 懇親会

12月27日(水)

座長 齋藤真司(名大院・理)

9:00-9:40 木寺詔紀(京大院・理)  
モードカップリング・振動エネルギー移動から見た蛋白質のダイナミクス

9:40-10:20 平田文男(分子研)  
蛋白質の部分モル容積と構造揺らぎ

10:20-10:40 休憩

座長 高橋聡(京大院・工)

10:40-11:20 中迫雅由(東大・分子細胞生物学研)  
極低温蛋白質X線結晶構造解析で得られた蛋白質 水系動的構造研究の手がかり

11:20-12:00 片岡幹雄(奈良先端大・物質創成科学)  
中性子非弾性散乱による蛋白質ダイナミックスの研究

12:00-12:10 おわりのことば  
水谷泰久(分子研)

ポスターセッション (12月25日(月), 5:50-7:20)

P-01 高橋聡(京大・院・工)  
「HRPのCompound0中間体の寿命は10マイクロ秒以内である」

P-02 秋山修志(京大・院・工)  
「高速混合・X線小角散乱技術を利用したシトクロムc折れ畳み初期過程の観察」

P-03 古川良明(京大・院・工)  
「蛋白質間電子移動に対する水和水の効果」

P-04 木村哲就(京大・院・工)  
「ペプチドのヘリックス コイル転移過程の時間分割IR測定」

P-05 林義人(東海大・理)  
「誘電緩和測定によるタンパク質ドメインの揺らぎの観測」

P-06 横田浩章(科技団・一分子プロジェクト)  
「1分子蛍光エネルギー移動法によるタンパク質構造のゆらぎの検出」

P-07 佐々木裕次(科技団・素過程と連携)  
「X線1分子計測法でタンパク質分子の揺らぎを見る」

P-08 永原哲彦(阪大・院・基礎工)  
「光カーゲート法を用いた溶媒とダイナミックスの研究」

P-09 前川宏明(神戸大・院・自然科学)  
「2次元振動分光の実験的・理論的開発」

P-10 奥野浩明(神戸大・院・自然科学)  
「制限された空間内における液体分子の振る舞い」



- P-11 鳥居肇 (東大・院・理) (於大会議室)  
「液体中の非局在振動励起に関わる非線形光学過程の解析と、タンパク質の構造・ダイナミクス解析への展望」  
1/18 (木)  
13:00- はじめに
- P-12 林友将 (東大・院・理)  
「振動位相緩和、赤外吸収バンド形にたいする理論的アプローチ」  
[座長: 坏広樹 (姫路工大)]
- P-13 森次圭 (京大・院・理)  
「タンパク質分子内の振動エネルギー移動」  
13:15- 13:40 田中寿 (分子研)  
単一分子から成る分子性金属結晶の合成と物性
- P-14 坂倉政明 (京大・院・理)  
「光解離によるカルボキシミオグロビンの構造ダイナミクス: 遠位ヒスチジンの変異の影響」  
13:40- 14:05 唐澤悟 (九大院薬)  
マトリックス中での光応答型磁性体の構築
- P-15 水谷泰久 (分子研)  
「ミオグロビンの機能に関係した揺らぎをとらえる試み」  
[座長: 中山敦子 (物質研)]
- P-16 中島聡 (阪大・院・基礎工)  
「超高速分光法によるブルー銅蛋白質の電子移動反応と蛋白質の動的挙動の研究」  
14:05- 14:30 中澤康浩 (阪大院理 分子熱セ)  
有機微小単結晶での熱容量測定 低温熱測定でみた電子物性
- P-17 Ying Hu (分子研)  
「Investigation of cytochrome c unfolding using ns T-jump time-resolved Raman spectroscopy」  
14:30- 14:55 井上克也 (分子研)  
不斉構造を有する分子磁性体の構築
- P-18 神山匡 (広島大学・VBL)  
「蛋白質の構造・圧縮率・機能相関」  
14:55- 15:25 < coffee break >
- P-19 川上勝 (神戸大・院・自然科学)  
「温度ジャンプNMRで見たラクトアルブミンのアンフォールディング」  
[座長: 米満賢治 (分子研)]
- P-20 北原亮 (神戸大・院・自然科学)  
「高圧NMRによるユービキチンの構造探索: 機能的構造と変性中間体構造の発見」  
15:25- 15:50 瀧宮和男 (広島大工)  
セレン原子を含む分子性導体の最近の展開 新規合成法と新物質
- P-21 米原久美子 (神戸大・院・自然科学)  
「タンパク質SNaseのfolding初期過程における疎水核形成」  
15:50- 16:50 腰原伸也 (東工大・物質科学, KAST)  
[招待講演]  
金属錯体における協力現象の光制御 相転移ダイナミクスの光・磁場制御
- P-22 武田佳奈 (神戸大・院・自然科学)  
「タンパク質POIA1の圧力変性過程」  
17:00- 18:10 ポスター発表 (I) (中会議室)
- P-23 光武亜代理 (分子研)  
「拡張アンサンブル法による小ペプチド系のシミュレーション」  
18:40- < 懇親会 >  
(於分子研構内サングリア食堂)

1/19 (金)

[座長: 齊藤一弥 (阪大理)]

9:00- 9:25 内藤俊雄 (北大院理)  
ET/MnCl<sub>4</sub>/TCE系の磁性と伝導性

9:25- 9:50 塩見大輔 (阪市大院理)  
有機フェリ磁性のスピン化学

9:50- 10:15 太田仁 (神戸大理)  
有機分子性物質の磁性とESR

10:20- 11:30 ポスター発表 (II) (中会議室)

11:30- 13:30 < 昼食 >

## 有機分子機能体の設計・合成・物性

2001年1月18日(木) ~ 20日(土)  
岡崎コンファレンスセンター

[ 座長：矢持秀起（京大理）]

13:30- 13:55 近藤隆祐（東大院総合）  
ドナー・アクセプター型有機超伝導体  
(BETS)<sub>2</sub>(X<sub>2</sub>TCNQ)(X=Cl, Br)の構造と物  
性

13:55- 14:20 武田定（北大院理）  
固体高分解能 NMR でみる磁氣的局所構  
造と磁氣的相互作用

14:20- 14:45 芥川智行（北大電子研）  
有機伝導体中のプロトン・イオン運動  
と電子伝導

[ 座長：伊東裕（名大理）]

14:45- 15:10 石田尚行（電通大）  
ピリミジンを利用した分子性磁性体

15:10- 15:35 野上由夫（岡山大院自然）  
有機分子機能体の低温構造と物性

15:35- 16:00 < coffee break >

16:00- 16:25 森田靖（阪大院理）  
奇交互炭化水素フェナレニルを基盤と  
した新しい共役 電子系物質の開発

[ 座長：西川浩之（都立大理）]

16:25- 16:50 森初果（超工研）  
有機電導体におけるバンド幅およびバ  
ンドファイリングコントロールによる電  
子状態制御

16:50- 17:15 金道浩一（阪大極限セ）  
極低温及び高圧下の強磁場磁化測定

17:15- 17:40 高橋一志（京大院工）  
新規 TTP 系分子集合体構築へのアプ  
ローチ

1/20（土）

[ 座長：藤原秀紀（分子研）]

9:00- 9:25 山本浩史（理研）  
超分子を用いた分子性導体の開発

9:25- 9:50 長尾修身（阪市大理）  
ニトロキシド導入型含窒素二座型配位  
子 磁性金属錯体の合成と物性

9:50- 10:15 宇治進也（金材研）  
 $\lambda$ -(BETS)<sub>2</sub>FeCl<sub>4</sub>の強磁場電子状態

10:15- 10:40 < coffee break >

[ 座長：手木芳男（阪市大院理）]

10:40- 11:05 戸村正章（分子研）  
弱い分子間相互作用を利用した分子集  
合体設計

11:05- 11:30 大平聖子（理研）  
ミュオンをプローブとして用いた有機  
磁性体の研究

[ 座長：坂井徹（姫工大理）]

11:30- 11:55 榎本健悟（東工大院理工）  
有機ラジカルイオン塩(DMET)<sub>2</sub>FeBr<sub>4</sub>の  
構造と物性

11:55- 12:20 細越裕子（分子研）  
分子性化合物による新しい磁性体

12:20- 終わりに

ポスター発表（於中会議室）

偶数講演番号：ポスター（I）18日（木）17:00- 18:10

奇数講演番号：ポスター（II）19日（金）10:20- 11:30

P1 坏広樹（姫工大理）  
有機ラジカル部位を持つアニオン、TEMPO-  
NHSO<sub>3</sub><sup>-</sup>およびTEMPO-OSO<sub>3</sub><sup>-</sup>を用いた有機電  
荷移動錯体の合成、構造と物性

P2 伊藤彰浩（京大院工）  
パラフェニレンジアミン部位をスピン源とする  
高スピンカチオンラジカルの合成

P3 伊東裕（名大工）  
ハロゲン架橋金属錯体 Ni<sub>1-x</sub>Pd<sub>x</sub>(chxn)<sub>2</sub>Br<sub>3</sub>の電  
気伝導

P4 伊藤哲明（東大工）  
Cu ドーピングと圧力印加による(DI-DCNQI)<sub>2</sub>  
Ag における電荷秩序の融解

P5 井野晴洋（京大院工）  
ピンドシエドラーズ・グリーンをスピン源とす  
る高スピンカチオンラジカルの合成

P6 キャンセル

P7 上田未紀（京大院人環）  
メソスコピック分子磁性体 Fe<sub>8</sub>の磁性と NMR

P8 上野晋平（広島大工）  
固体状態におけるオリゴチオフェンの酸化還元  
挙動

P9 売市幹大（分子研）  
一次元電子系 BDTFP 塩の反射スペクトルおよ  
び結晶構造



- P10 大久保晋 (神戸大理)  
Pd(dmit)<sub>2</sub> 塩の ESR 測定
- P11 大島勇吾 (神戸大理)  
単純なフェルミ面を持った BEDT-TTF 系のサイクロトロン共鳴
- P12 岡崎暢寿 (姫工大理)  
フラストレートしたスピンラダ - の磁化過程
- P13 岡本清美 (東工大院理工)  
BIP-TENO の非自明磁化プラト - の機構の理論
- P14 Olga Drozdova (分子研)  
Far-infrared properties of  $\kappa$ -(ET)<sub>2</sub>Cu(CN)[N(CN)<sub>2</sub>]
- P15 加藤恵一 (総研大・分子研)  
分子内に S = 1 ユニットを含むニトロキシド系ポリラジカルの合成と磁性
- P16 川上貴資 (阪大院理)  
有機結晶中での強磁性相互作用の解析・設計に関する hybrid-DFT 法の適用
- P17 岸木敬太 (電総研)  
二次元系の dHvA 振動の多重バンド効果
- P18 木村尚次郎 (阪大極限セ)  
スピギャップ系の高周波強磁場 ESR
- P19 小柴健 (京大院人環)  
ナノスケール分子磁性体 Mn<sub>12</sub>-acetate の <sup>55</sup>Mn NMR
- P20 桐田敬三 (神戸大理)  
スピンラダー系 BIP-TENO の ESR からみた低次元性
- P21 坂井徹 (姫工大理)  
フェリ磁性鎖の量子磁化プラト -
- P22 迫克也 (名工大)  
ジアセチレンユニットを有する TTF 誘導体の合成と性質
- P23 佐竹由里恵 (京大工)  
ジ(2-ピリジル)メタン部位を有する TTF 系ドナーの合成と性質
- P24 佐藤あかね (阪大院理分子熱セ)  
有機伝導体に関する ac カロリメトリー
- P25 陣野俊介 (愛媛大理)  
純有機伝導性磁性体の合成と性質 アルキルピリジニウム置換フェルダジラジカルと TCNQ の(1:1)および(1:2)塩
- P26 武内修 (筑波大物工,JST)  
フェムト秒ポンププローブ測定による一次元有機伝導体  $\beta$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>PF<sub>6</sub> の CDW 相転移の解析
- P27 武田圭生 (阪大院基礎工)  
高圧下における一次元白金錯体 [Pt(bqd)<sub>2</sub>]<sub>n</sub> の電気伝導と X 線回折
- P28 田中久暁 (名大工)  
擬一次元ハロゲン架橋金属錯体 Ni<sub>1-x</sub>Pd<sub>x</sub>(chxn)<sub>2</sub>Br<sub>3</sub> の ESR
- P29 谷嘉浩 (京大院工)  
電子供与体を配位子とする金属錯体の合成と物性
- P30 谷岡弘章 (京大院工)  
シクロヘキセンを挿入した TTP 誘導体の合成と性質
- P31 田村格良 (分子研)  
 $\alpha$ -ET<sub>2</sub>I<sub>3</sub> の高圧単結晶構造解析
- P32 丁玉琴 (総研大・分子研)  
Polarized Raman and reflection spectra of phthalocyanine conductors Co<sub>x</sub>Ni<sub>1-x</sub>Pc(AsF<sub>6</sub>)<sub>0.5</sub>
- P33 手木芳男 (阪市大院理)  
光励起状態を介した 共役スピン系のスピン整列
- P34 中西高士 (岡山大理)  
低次元分子磁石への誘い
- P35 中野元裕 (阪大院工)  
単一分子磁石の分子設計 - 磁気異方性 D の符号転換
- P36 中屋敷崇 (京大院工)  
セレン原子を導入した含カルコゲノピラン TTP 系伝導体の構造と物性
- P37 中山敦子 (物質研)  
超高圧下における単一有機分子結晶の金属化
- P38 鳴海康雄 (CREST, 阪大極限セ)  
強磁場磁化測定を用いた量子スピン系の研究
- P39 西川浩之 (都立大院理)  
MeDH-TTP 塩の合成と物性
- P40 西田辰介 (阪大院理)  
6-オキソフェナレノキシル類の CV 法による酸化還元挙動の考察
- P41 畑中貴志 (愛媛大理)  
分子内に正電荷を有する 6-オキソフェルダジラジカルの [M(dmit)<sub>2</sub>](M=Ni, Zn, Pd, Pt) 塩の磁性と伝導性
- P42 原憲司 (都立大院理)  
TTF オリゴマーならびに 拡張型 TTF オリゴマーの合成、構造と物性
- P43 平井克幸 (三重大分析セ)  
安定な高スピンポリカルベンの発生と特性化

- P44 藤井裕 (福井大工)  
かごめ格子および歪んだかごめ格子をもつ有機ラジカル反強磁性体の核磁気緩和
- P45 藤田敏之 (東北大金研)  
 $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>KHg(SCN)<sub>4</sub>の強磁場中における電流 - 電圧特性
- P46 前里光彦 (京大院理)  
一軸性ひずみによる有機導体の物性制御
- P47 槇優 (阪大院理)  
水酸基を二つ有するフェナレノン誘導体から発生させた安定ラジカルの合成と性質
- P48 松浦広明 (京大院人環)  
イミダゾール環の4位を置換したニトロニロニトロキシドの合成と磁気物性
- P49 松本充功 (東大工)  
 $\kappa$ -(d[2,2]-ET)<sub>2</sub>Cu[N(CN)<sub>2</sub>]Brのモット転移近傍における超伝導 - 絶縁体転移の<sup>1</sup>H-NMR
- P50 御崎洋二 (京大院工)  
(CHTM-TTP)<sub>2</sub>TCNQの構造と物性
- P51 水谷敏幸 (電総研/東理大理工)  
有機超伝導体の一軸性圧力効果
- P52 宮坂誠 (早大理工)  
頭-尾規制ポリ(3-ラジカル置換チオフェン)の合成とスピン整列
- P53 森本貴信 (都立大理)  
DODHT塩の合成と物性
- P54 山本薫 (分子研)  
振動スペクトルによる $\theta$ および $\alpha$ 型BEDT-TTF塩の電荷整列の観測
- P55 山本晃士 (東大工)  
MMX錯体のNMR
- P56 矢持秀起 (京大院理)  
(EDO-TTF)<sub>2</sub>PF<sub>6</sub>に見られた大きな分子変形を伴う金属 - 絶縁体転移について
- P57 吉野優子 (都立大院理)  
シアノ鉄一次元鎖とBEDT-TTFカラムとが直交構造を有した電荷移動錯体の構造と磁性及び伝導物性
- P58 吉岡英生 (奈良女子大理)  
Effects of Next-Nearest-Neighbor Repulsion on One-Dimensional Quarter-Filled Electron Systems
- P59 キャンセル
- P60 米山直樹 (東北大金研)  
有機超伝導体 $\kappa$ -ET<sub>2</sub>Cu[N(CN)<sub>2</sub>]Brにおける磁化の冷却速度依存性

- P61 渡辺俊介 (京大工)  
TTPダイマーの合成と物性

## 真空紫外線・軟X線パルスの利用と将来展望

2001年1月26日(金)~27日(土)

岡崎コンファレンスセンター中会議室

1/26

座長: 伊藤稔 (信州大工)

13:20-13:30 はじめに  
鎌田雅夫 (分子研 UVSOR)

13:30-14:00 SPring-8における放射光パルス性の性能と運転状況  
大熊春夫 (JASRI)

14:00-14:30 X線レーザーのパルス性  
河内哲哉 (原研関西)

14:30-15:00 EUVリソグラフィ用プラズマ光源の研究  
青田達也 (電総研)

15:00-15:30 レーザー高調波の発生と利用  
関川太郎 (東大物性研)

15:30-16:00 休憩

座長: 富江敏尚 (電総研)

16:00-16:30 電子線とレーザーによる極短ビーム発生  
上坂充 (東大原研)

16:30-16:50 蓄積リングにおけるパルス光発生  
加藤政博 (分子研 UVSOR)

16:50-17:10 高調波真空紫外線を利用した超高分解能光電子分光とその物性研究への応用  
幸埴 (東大物性研)



- 17:10-17:40 Diffuse scattering and ultra-fast time-resolved crystallography studies at thermo- and photo-induced neutral-ionic transition  
Dr. Eric Collet ( LABORATOIRE LEON BRILLOUIN:CEA/Saclay )
- 18:00-20:00 懇親会
- 15:30-15:50 超高速時間分解分光  
末元徹 ( 東大物性研 )
- 15:50-16:00 まとめ  
鎌田雅夫 ( 分子研 UVSOR )

1/27

座長：伊藤寛 ( 香川大工 )

09:00-09:30 レーザープラズマ光電子分光  
錦織健太郎 ( 電総研 )

09:30-10:00 レーザー高調波による時間分解顕微光  
電子分光  
宗像利明 ( 理研 )

10:00-10:20 レーザーと放射光を用いた光電子分光  
田中仙君 ( 分子研 UVSOR )

10:20-10:50 休憩

座長：河内哲哉 ( 原研関西 )

10:50-11:10 放射光パルスを用いた 2 光子蛍光  
辻林徹 ( 大阪歯科大 )

11:10-11:30 SPring-8 における短パルスレーザー利用  
実験  
田中義人 ( 理研 )

11:30-12:00 フェムト秒レーザー生成プラズマ X 線に  
よる時間分解分光  
中野秀俊 ( NTT 物性基礎研 )

12:00-13:10 昼食

座長：渡辺雅之 ( 京大人間 )

13:10-13:40 レーザープラズマ光電子顕微鏡  
富江敏尚 ( 電総研 )

13:40-14:10 放射光によるポンププローブ X 線実験  
大柳宏之 ( 電総研 )

14:10-14:30 放射光による高速分光への期待  
中西俊介 ( 香川大工 )

14:30-15:00 休憩

座長：有本収 ( 岡山大理 )

15:00-15:30 固体と分子における内殻励起状態での  
原子緩和  
萱沼洋輔 ( 阪府大工 )

## 日韓合同セミナー「気相、凝縮相および生体系中の光化学過程：実験と理論の協力的展開」

上記の日韓合同セミナーを2001年1月10日より3日間、岡崎コンファレンスセンターにおいて開催した。本セミナーにおいては、気相、凝縮相および生体系中で起きる光化学過程を光によって誘起される分子内・分子間の電子移動（酸化・還元）およびエネルギー移動反応の観点からとらえ、この問題に関して日韓両国で実験・理論両面において展開しつつある研究を報告、討論した。この会議における討論を通じて、日韓両国におけるこの分野の実験および理論の協力的展開の契機とすることを目的とした。

我が国と韓国の分子科学者は1984年以来、隔年、日韓合同シンポジウムを開催し、その中で分子科学に関する情報を交換し、また、両国の研究者間の共同研究を促進してきた。この試みは両国研究者間の共同に多くの成果を生み出してきた。実際、合同シンポジウムを契機として日本の分子科学研究所が韓国各地の研究機関から毎年3人の客員研究者を受け入れる制度が定着し、両国間の共同研究が着実に拡大しつつある。第8回目の日韓合同シンポジウムは「分子スペクトルと理論化学」と題して1999

年1月韓国テジョン市で開催されている。本セミナーはこれらの日韓研究交流の一環として行ったものである。今回の会議は学術振興会「日韓科学協力事業」より財政的援助を受け、韓国側から Mu-Shik Jhon教授を始めとする研究者13名、日本側からは茅分子研所長を始めとして全国の大学・研究機関から20名の研究者の参加のもとに行われた。

本セミナーでは以下の諸点について理論、実験両面から集中的な議論を行い、日韓両国における今後の研究に示唆を与える多くの成果が得られた。

- (1) クラスタを含む気相中での光解離など化学反応素過程における電子状態変化および各種非断熱遷移を含む諸問題。
- (2) ナノスケールのポリボルフィリン中の電子移動過程、液体中の溶媒和ダイナミクス、水-電極界面での光-エネルギー変換過程。
- (3) 光合成活性中心の電子移動および光感知に關与する蛋白質内のプロトン移動反応。ラマン、赤外分光法に基づく蛋白質のエネルギー移動、構造揺らぎおよび部分モル容積の検出。人工酵素の合成と化学反応。

(平田文男 記)

