

# 分子研 レターズ

44  
Issue of July 2001

## 巻頭言

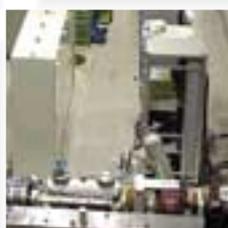
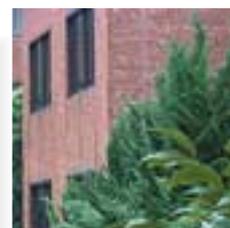
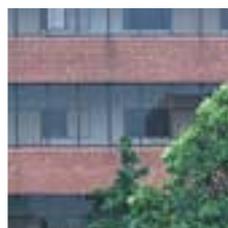
変わるってドキドキ.....岩田末廣

## 研究紹介

競合する相互作用を持つ低次元電子系としての分子性物質.....米満賢治  
猿倉研究室 研究紹介.....猿倉信彦

## レターズ

日本の大学の研究活動のランキングと独立行政法人化.....岡本祐幸



## 表紙写真説明

右下；UVSORリング室を見下ろす（本文68ページからに関連記事）

左下；岡崎コンファレンスセンター大会議室（第32回分子科学フォーラム）

右上；雨の分子研

昨年の初秋、新しい仕事が決まりかけていた頃、テレビやその他の宣伝媒体で、北野武演ずる男がこの言葉をキャッチフレーズに新車の宣伝をしていた。「変わる」のではなく「変わる」といっているのが、当時の自分の気分に適していた。基礎科学の研究と教育を中心とした30年以上の生活から「変わらされる」というのが実状に近いのだが、ともかくも今までと違う仕事をするのだという意気込みとは言えないまでも、「まだ」変わるという気持ちを鼓舞させる言葉として、この言葉をつぶやいてきた。この4月に就任した新しい仕事は、大学評価事業に伴う各種の委員会の調整役に加えて、「個々の分野に即した評価システムのあり方について調査研究」を行い、「分野別の教育・研究評価システムを研究・企画する」と公募文では記されている。研究や大学教育の評価を研究することになるのである。正直言って、実際に採用されるまで、教育評価はともかくも、研究評価が研究対象になっているとは知らなかった。これまでの研究生活の中で、研究を評価するという作業は多くの場面でやってきた。分子研の人事委員は、延べ8年間も務めさせられたが、分子研のような研究機関では、人事選考が研究（能力）評価作業と言ってよいだろう。学術雑誌の論文審査や科学研究費の審査も研究評価の一つであろう。しかし、今問題になっているのは、大学や学部・研究科、学科・専攻という組織の評価である。個々の研究の善し悪しは私たちが日頃いろいろ形で判断しているが、組織の評価となると機会も少ない。研究評価という場合、あくまでも一つ一つの研究評価の積み重ねがなければならないが、組織の研究評価になると観点を増やさなければならないであろう。この組織の研究評価をこの十数年間徹底して実施しているのがイギリスである。研究評価作業（Research Assessment Exercise, RAE）は研究分野（Unit of Assessment, UoA）を69設定して、すべての高等教育機関を対象にして一斉に実施している。前回は1996年に実施された。RAE2001が今進行中で、各機関の書類提出が終わり、69個のパネルが評価作業を開始したところである。<sup>\*</sup> 私が所属しはじめた大学評価・学位授与機構が文部科学省の要請で試行を開始した大学評価事業の中の「分野別研究評価」<sup>\*\*\*</sup>がRAEに対応しているが、根本のところは異なっている。RAEでは、各パネルが各機関を7段階に等級付けし、その結果が次の何年間の研究費算定に用いられる。そもそもが、高等教育資金会議（Higher Education Funding Council for England, HEFCE）がRAEを実施している。昨年度から開始された日本の事業は、直接的には財政と結びつかず、「競争的環境の中で個性が輝く大学」、「各大学等の教育研究活動等の改善」が第1に掲げられている。他にも多くの相違点があるが、もう一つあげると、RAEの評価の基準が、徹底して研究の質（quality of research）が問われているのに対して、「分野別研究評価」では、個々の研究の評価に際して「社会的貢献」という項目が付け加わっている。大学評価事業は、「開放的に進化するシステム」を唱っている。厳しい批判の目が今後とも必要であろう。

研究評価が特に話題になってきたのは、いわゆる「競争的基金」に大学等の個人あるいはグループが応募し獲得するようになったこととも関係していよう。これらの研究費の執行に際して、中間評価や事後評価が行われるのが普通になってきてまだ十数年もたっていない。この時の「評価」の判断はどのように行われているのか、あるいは行うのが適切なのか？ 私自身の例でも、科学技術振興事業団の資金による研究では、担当事務官から盛んに「特許」の取得を促された経験を持っている。研究をまだしているつもりが「評価の研究」を勉強する価値があるのだと思いきもしている今日この頃である。

研究資金を得るための申請書を書き上げるには、かなり明確な研究成果を心に描かなければならない。研究報告でも筋書きがあったかのような「お話」をすることになる。ところが、多くの新しい独創的な研究は予定外のところから出発するし、実際の研究の進行は、後付のお話とはかけ離れたジグザグな紆余曲折を経ている。Serendipityと言う言葉が、白川先生のノーベル賞受賞を契機に思い出されているが、研究が一段落したときに書いたり話したりする総合報告は、研究の位置づけには有効であろうが、その美辞麗句では、次の飛躍には結びつかない。一つの研究プロジェクトの評価を近視眼的に下すことは避けなければならないだろう。

\* 平成13年4月から大学評価・学位授与機構 評価研究部 教育・研究評価開発部門に就任

\*\* RAEやHEFCEについては、もっと「調査研究」して、別の機会に昔の研究者仲間に報告しましょう。

\*\*\* 「全学テーマ別」、「分野別教育」、「分野別研究」に分かれて評価事業が進められている。

## 分子研レターズ44 目次

## 巻頭言

変わるってドキドキ 岩田末廣 1



## 研究紹介

競合する相互作用を持つ低次元電子系としての分子性物質  
米満賢治 4

猿倉研究室 研究紹介 猿倉信彦 14

## 研究室紹介

「錯体触媒」はどこへ向かうのか 魚住泰広 16

[(限界)×(超限界)の光]と分子 岡本裕巳 18

## 流動研究部門紹介

分子研に赴任して 久保 厚 21

「目で見る」原子と分子 小宮山政晴 24



## レターズ

日本の大学の研究活動のランキングと独立行政法人化  
岡本祐幸 27

## ニュース

物理と化学の5研究所を跨ぐ「旧・新プログラム：科学研究費補助金(学術創成研究費)」  
「新しい研究ネットワークによる電子相関係の研究  
物理と化学の真の融合を目指して」がスタート!  
西 信之 30

## 分子研を去るにあたり

大豆生田君のこと 池上 努 32

## 流動研究部門を去るにあたり

流動研究部門を去るにあたり 黒澤 宏 33

毎週帰ることじゃ! 福井一俊 35

感謝の2年間 長岡伸一 36

## 外国人研究員の印象記

Getting Acquainted With IMS Heiko Hocke 37



	<b>受賞者紹介</b>	
	茅幸二所長に日本化学会賞	39
	平田文男教授に日本化学会学術賞	40
	赤阪健教授に日本化学会学術賞	41
	平等拓範助教授に金属組織写真奨励賞	42
	高須昌子助教授に分子シミュレーション研究会学術賞	43
	水谷泰久助手に森野基金	44
	<b>客員外国人研究員の紹介</b>	
	Prof. SKODJE, Rex T.	46
	Prof. DE LANGE, Cornelis A.	47
	Prof. SWIETLIK, Roman	47
	外国人研究者の自己紹介	49
	新任者自己紹介	51
	<b>総合研究大学院大学</b>	
	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	61
総合研究大学院大学平成13年度(4月入学)新入生紹介	62	

	<b>新装置紹介</b>	
	新しいスーパーコンピュータシステム	63
	不等刻線間隔平面回折格子分光器BL4B	68
	<b>I M S マシン報告</b>	
	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	70
	広帯域波長変換素子作製のための高電圧印加真空装置	71
	<b>C O E コンファレンス報告</b>	
	研究会報告	76
	国際研究協力事業報告	86
	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」	

	分子研コロキウム・分子科学フォーラム 開催一覧	87
	共同研究実施一覧	88
	海外渡航一覧	95
	人事異動一覧	98

# 競合する相互作用を持つ低次元電子系としての分子性物質

理論研究系分子基礎理論第四研究部門 米 満 賢 治

## 1. はじめに

物質がもつ性質（どれだけ電気を流すか、磁石にくっつくか、どんな色をしているかなど）とそれを構成している分子の性質には大きな関係があります。その関係は一筋縄に説明できるしるものではありませんが、これを私たちは追求しようとしています。分子研にはいろんな視点から研究している人たちがいて、分子のもつミクロな性質を分光などの手段を使って精密にステップバイステップ理解しながら、より大きな分子集団へ進んで凝縮系の物質の理解を試みようとする研究者と、それとは全く逆の方向になります。分子軌道の多数重なり合ったマクロな電子状態を最初に意識しながら、その物性を論ずる上でよりミクロな性質（どうしてその分子でなくてはいけないのか、分子をどう入れ替えるとどんな性質が期待できるかなど）に向かっていく研究者がいます。我々のグループは後者です。例えば前者のアプローチであれば、基本は1個の分子ですから分子軌道はまず孤立しているところを思い描き、いかにそれらを重ねあわせればうまく電子が動き回って電気を流してくれたり、スピンの向きがそろって磁石になってくれるかということに、工夫がされます。そういう発想により多くの興味深い物質が作られています。しかしながら、我々のグループは通常全く逆の発想をしていて、電子は既に分子軌道の重なりによって電気が流れようとしているのに、なぜ電気が流れにくくなったり逆に電気抵抗が完全になくなって“超”ながれやすくなってしまおうかを、議論しています。

物質はいろんな性質を持ちますが、これらの主役

はたいていの場合、電子です。電子は量子力学的な運動法則によって動き回ったり、あるいはその場にながらスピンの向きを上を向いたり下を向いたりしてふらついていたりします。すべての電子と原子核を念頭に置きながら、近似などあいまいなことをなるべくせず、最初からすべての性質を説明しようとするのを第一原理の方法と言って、分子構造の情報さえあれば量子力学だけを使った計算で分子集団のある程度の性質を予測できます。分子内の多数の電子が関与しているのが大事なことはありませんが、重要な役者はたいてい分子の最高占有分子軌道か最低非占有分子軌道にいる電子と、そのまわりに遷移金属がいる場合はそのd軌道にいる電子たちです。たとえばこれらの電子たちに限っても、それらの示す性質は多様であり、ちょっと近似を落とすと本質的な過ちを起こす例を多数、我々は知っています。そこで、これらの分子軌道やd軌道にいる電子だけを記述するモデルをたて、ほかの脇役電子は主役電子がどれくらい動き回れるか、あるいはどれくらい強くお互いに反発しあっているか、そのエネルギーレベルがその周辺にある原子核の位置にどれくらい敏感かなどを記述するパラメタに含まれていると考えます。このパラメタはすでに多くの電子と原子核の相互作用によって決まるものなので、たとえば単純にクーロンの法則を使って求まるものよりも、大きさが一桁くらい違うことがざらにあります。パラメタは、むしろいろんな実験結果と矛盾のないように与えて、最終的には第一原理からの計算で求められることを期待しています。



## 2. 分子性物質の特徴

では分子が配列することによってできている物質（分子性物質）に特徴的なことは何でしょうか。原子が“まると”こととは対照的に、分子はそれぞれ“かたち”を持っています。従って、分子性物質には割れやすい方向、電気が流れやすい方向、磁石になったときの向きなどがあります。電気の流れやすさを決めているのは分子軌道の重なり具合ですが、それが方向によって十倍あるいは百倍くらい違っていることがあります。電気がある方向にだけ流れやすいときに、電子的な意味でこの物質は1次元であるといい、ある面内で流れやすければ2次元であるといえます。この電子的な意味での次元性は重要な意味を持っています。特に低次元で金属状態が不安定になりやすく、結晶構造が歪んだり（パイエルス絶縁体）、電荷が規則的に並んだり（電荷整列絶縁体）、あるいはそれらの変形がなくても電子数が特殊な場合に（モット絶縁体）、電気が流れにくくなります。たとえ金属のまま残っても、1次元金属はほかの次元の金属と全く異なる性質をもつことが知られています。次元性は分子軌道の重なりだけでなく、相互作用によっても変わります。分子軌道が少しだけ重なっている方向に電子が移動しようとしても、既に満員電車のなかのように電子がぎちぎちに埋まっていて移動できないことがあるからです。ですから、みている温度やエネルギースケールによっても次元性が変化することがあります。

もうひとつ分子性物質に特徴的なことは柔らかいことです。外からの力に対して、分子自体は変形し

にくいのですが、分子間の結合が分子内の結合に比べて弱いので、熱膨張率は高いです。さらに分子変形や（より一般に）結晶格子の変形によって軌道のエネルギーや軌道の重なり具合が変わり易い性質をもっています。これを電子格子相互作用が強いといい、これ自体は金属状態を容易に不安定にして絶縁化する性質を持ちます。格子変形によって電子が周期的に散乱され、電子がとりうるエネルギーに“ギャップ”が生じて、系全体が安定化するからです。分子はいろんなモードで振動していますが、電子格子相互作用があるので、電子はこれらの振動も感じながら動き回っていることになります。そのために電子間には実効的に引力が働き、もともとクーロン反発しあっているのを弱める傾向があります。これは負の電荷をもつ電子のいるところに正の電荷をもつイオンが偏ってきて、電子がよそに動き回ったあとも重い質量をもつイオンの偏りが残って、次の電子が来やすくなるからです。ここまでを整理すると、多くの分子性物質は電子的に低次元であり、さらに電子間の斥力相互作用と電子格子間の相互作用が競合している性質を持っていることになり、これが分子性物質の示す多様な電子相の起源になっているのです。これを以下、IMSフェローの桑原真人さんが主体となって研究した物質群に即した例を通してより具体的に説明します。

## 3. ハロゲン架橋複核金属錯体

ハロゲン架橋金属錯体は特に単核錯体が古くから知られており、電子間相互作用と電子格子相互作用が競合する1次元電子系として研究されてきました。

Halogen-bridged binuclear metal complexes (MMX chain compounds)

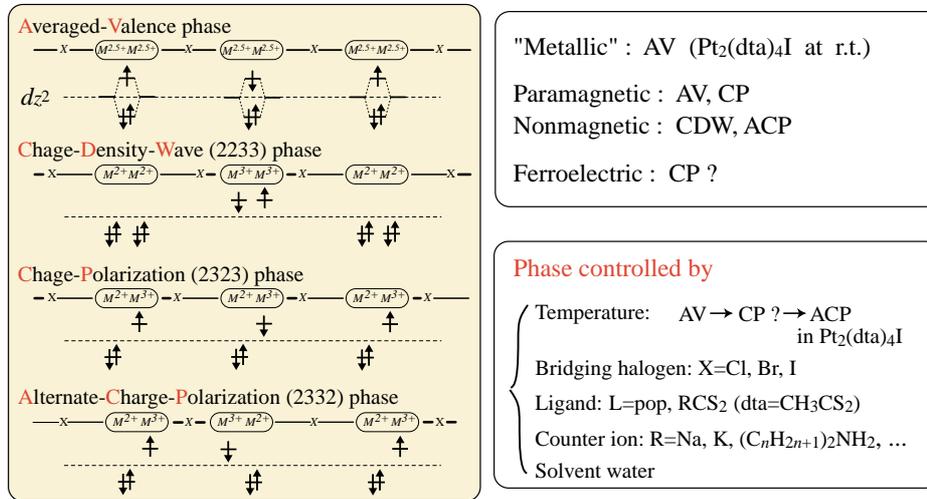
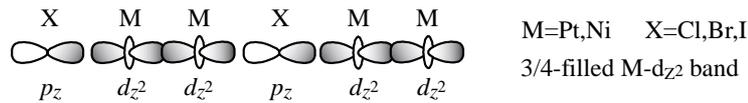


図 1 . MMX 錯体の d 軌道と p 軌道だけを取り出した模式図および実験で観測されている電子状態。  
 AV = 平均原子価相、CDW = 電荷密度波相、CP = 電荷分極相、ACP = 交互電荷分極相。

ここでは複核化されたために自由度が増えて、より多様な電子相が現れ、その中には常磁性で強誘電性をもつ可能性をもつものがある、複核錯体 (MMX 錯体) について述べます。ここでの主役電子は金属 d 軌道の電子と、場合によってはハロゲン p 軌道の電子です。複核化により (電子の抜け殻である) 正孔ひとつあたりがしめる空間が広がったので、単核錯体に比べればクーロン反発の効果が弱まっていることもあり、電子が動き回ろうとするエネルギースケールと、クーロン反発するエネルギースケールと、ハロゲンと金属原子との距離が変化することにより d 軌道のレベルが変更を受けるエネルギースケールがすべて拮抗し合う状況が生まれています。MMX 錯体でこれまでに観測されている電子状態を図 1 に示します。

価数はあくまでも形式的なもので 2 価と 3 価はそれぞれ  $2.5 - \delta$  価と  $2.5 + \delta$  価と解釈すべきものです。

3 価の金属イオンのほうに -1 価のハロゲンイオンが近づいています。複核ユニットの間の距離が変更を受けるのは、交互電荷分極相だけです。すべて絶縁体ですが、その中でも平均原子価相で電気抵抗が最も小さくなります。磁場をかけたときそれに比例して磁化が生じる常磁性を示すのは、この中で平均原子価相と電荷分極相で、残りは弱い磁場をかけても磁化が生じない非磁性を示します。電荷分極相では分極がそろっているので、これが 3 次元的にそろえば強誘電性をもつはずですが、いまのところ 3 次元的な秩序は観測されていません。電子相はものによって異なりますが、架橋ハロゲン、配位子、対イオン、結晶水などの構成要素、温度、圧力、光照射によって制御することができます。

これらの電子相がどのように制御されるかを図 2 に示すモデルを使って調べました。電子状態を求め

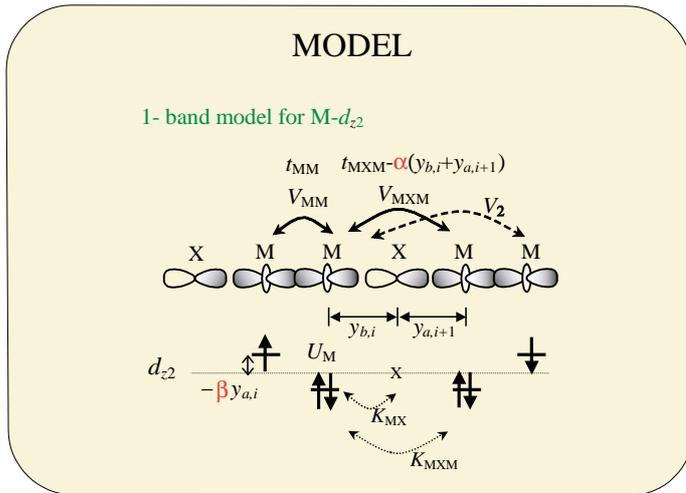


図2 . MMX 錯体の d 軌道にいる電子だけに注目したモデル。軌道の重なりは  $t$  で、電子格子相互作用は  $\alpha$  (サイト非対角型) と  $\beta$  (サイト対角型) で、電子間斥力相互作用は  $U$  (オンサイト) と  $V$  で、格子変位  $y$  に対する弾性定数を  $K$  で表す。

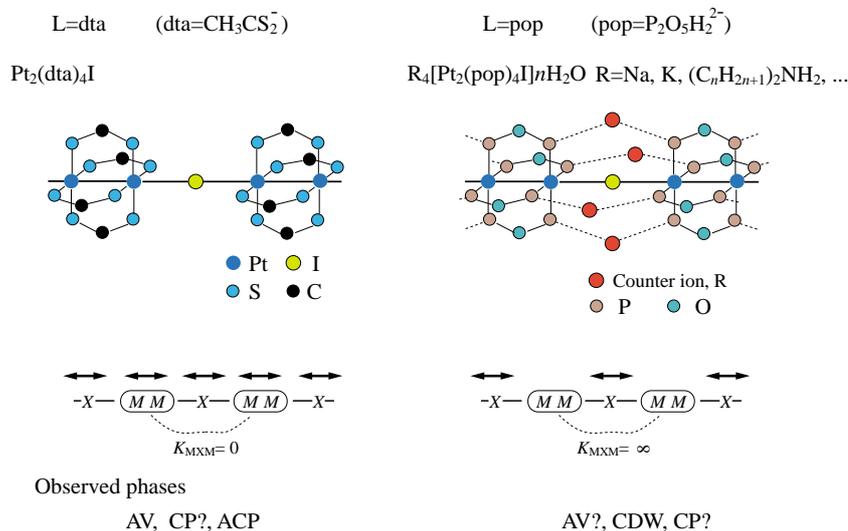


図3 . dta系錯体とpop系錯体の模式図。

るために使ったのは、有限サイズのクラスターを数値的に厳密対角化する方法、有限サイズの効果を見るため、かなり長いサイズまで正確に電子相関を計算できる密度行列繰り込み群などです。計算結果は強結合極限から4次までの摂動計算により解析しました。

MMX 錯体には配位子が RCS<sub>2</sub><sup>-</sup> で表される系列 (R = CH<sub>3</sub>の場合は dta と略されるので dta 系錯体と呼ぶことにする) と配位子が P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>H<sub>2</sub><sup>2-</sup> で表される

系列 (pop と略されるので pop 系錯体と呼ぶことにする) があり、その模式図を図3に示します。すべての原子を書いているわけではありませんが、dta系ではMMX鎖が中性なため対イオンが存在しないのに対し、pop系ではMMX鎖が荷電しているため対イオンが存在することが大きな違いです。前者では複核ユニット間の距離が変更を受けやすく、実際に交互電荷分極相が観測されているのに対し、後者ではそれが観測されていません。

Short-range vs. long-range electron-electron interactions

Strong-coupling limit ( $t_{MM} = t_{MXM} = \alpha = 0$ )

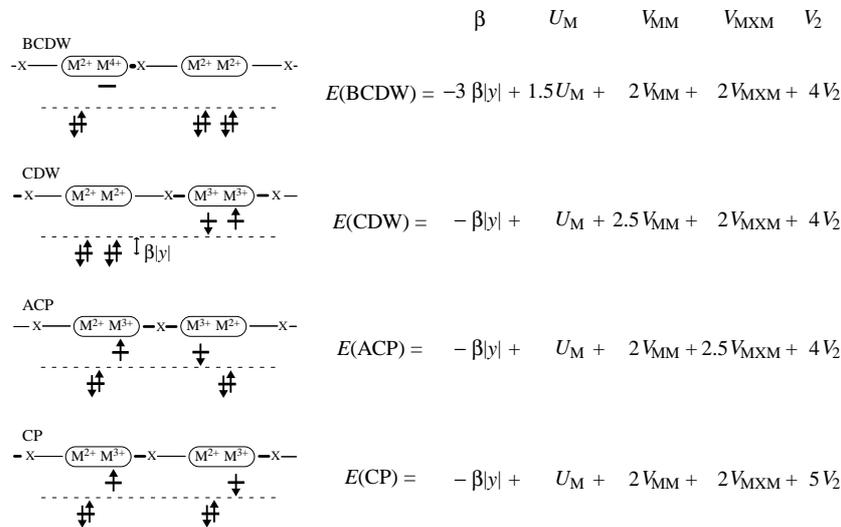


図4．強結合極限における各電子相の複核ユニットあたりの全エネルギー。

4．いろいろな相互作用の競合

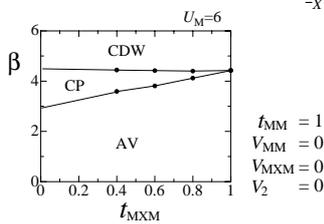
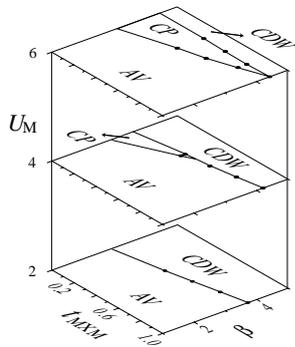
図2に示したモデルはパラメタが多く、それらのパラメタ空間で電子相図を描くと複雑なものになります。しかし、相互作用のそれぞれが競合する様子は比較的容易に理解することができます。電子の遍歴性を取りあえず無視して、軌道の重なりをゼロとおくと、電子相それぞれの全エネルギーを計算できますが、それを図4に示しました。一番上には、実験では観測されていないBCDW = ボンド電荷密度波相を比較のためにいれてあります。ここでは電子の抜け殻である正孔を使って説明すると、2価のサイトに正孔はいなくて、3価のサイトに正孔が1個、4価のサイトにスピンの異なる正孔が2個あることになります。

上からいくとボンド電荷密度波相は電子格子相互作用( )からのエネルギー利得が最大になる反面、あるサイトに正孔が二重占有しているためにオンサイト斥力( $U_M$ )からのエネルギー損失も最大にな

り、実現していないので実験でも観測されていないと考えられます。電荷密度波相はひとつおきの複核ユニットに正孔が隣り合っているので、ユニット内最近接斥力( $V_{MM}$ )からのエネルギー損失が他より大きくなります。同様に、交互電荷分極相はハロゲンを介した最近接斥力( $V_{MXM}$ )、電荷分極相は次近接斥力( $V_2$ )からの損失が大きくなります。pop系錯体ではハロゲンがヨウ素のとき、対イオンや結晶水を置換して複核ユニット間を広げるほど、平均原子価相から電荷密度波相そして電荷分極相へ転移していることが観測されています。複核ユニット間が狭いときは軌道の重なりが効いて電子の遍歴性が高まっているので平均原子価相になります。複核ユニット間の距離が長くなったときになぜ電荷密度波相から電荷分極相に転移するかの一部は強結合極限でのエネルギー解析でも予想がつきます。即ち、電荷密度波相のエネルギーを高める $V_{MM}$ は影響を受け難いのにに対し、電荷分極相のエネルギーを高め

Electron-lattice vs. electron-electron interactions

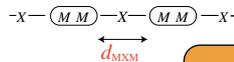
$K_{MXM} = \infty$  for L=pop



Strong-coupling limit ( $t_{MM}=t_{MXM}=\alpha=0$ )

2nd-order PT	intra-unit process	inter-unit process
CDW	$\delta E_{MM} = \frac{-2t_{MM}^2}{U_M - V_{MM}}$	$\delta E_{MXM} = \frac{-t_{MXM}^2}{2\beta y  - V_{MM} + 2V_2}$
CP	$\delta E_{MM} = \frac{-t_{MM}^2}{2\beta y  + V_{MXM} - 2V_2}$	$\delta E_{MXM} = \frac{-t_{MXM}^2}{2\beta y  + V_{MM} - 2V_2}$

CDW } is stabilized by {  $\beta$ .  
 CP } {  $U_M$ .



**$R_4[Pt_2(pop)_4]nH_2O$**

$d_{MXM}$	small	large
	AV	CDW CP
$t_{MXM}$	large	small
$\beta$	large	small
$V_2$	large	small

図5 . 複核ユニット間距離を固定したときの電子相図。

る  $V_2$ が弱められるので、これらの電子相が拮抗している場合は前者から後者へ転移するわけです。勿論、相対的な安定性を決めるのはこれだけではありません。

はじめに述べたように、一般に電子間の斥力相互作用と電子格子相互作用は競合することが多いです。(いつもそうとは限らないので、次の章ではこれらが協力する例を述べます。) その競合の様子を図5に示しました。

複核ユニットをまたぐトランスファー積分 ( $t_{MXM}$ ) が平均原子価相を安定化し、サイト対角型電子格子相互作用 ( ) が電荷密度波相を安定化し、オンサイト斥力 ( $U_M$ ) が電荷分極相を安定化していることがわかります。電子間の長距離相互作用を簡単のため無視すると、電荷密度波相と電荷分極相

のエネルギーが強結合極限で縮退しているので、トランスファー積分に関する2次摂動論により相図を理解することができます。複核ユニット内のトランスファー積分 ( $t_{MM}$ ) の2次過程で得するエネルギーの式に、電荷密度波相の場合は  $U_M$  が、電荷分極相の場合は  $\beta$  が入っています。ですから、 $\beta$  が大きくなると電荷分極相が損になり、 $U_M$  が大きくなると電荷密度波相が損になるので、このような相図が書けるわけです。pop系錯体のハロゲンがヨウ素のときの变化について再考すると、複核ユニット間の距離が長くなったときに影響が大きいのは  $U_M$  ではなくて  $\beta$  のほうです。複核ユニット間が広がって  $d_{MXM}$  が小さくなるにつれ、相対的に電荷分極相が安定になり、これも実験結果を説明する理由のひとつになっています。

Optical conductivity of MMX chains

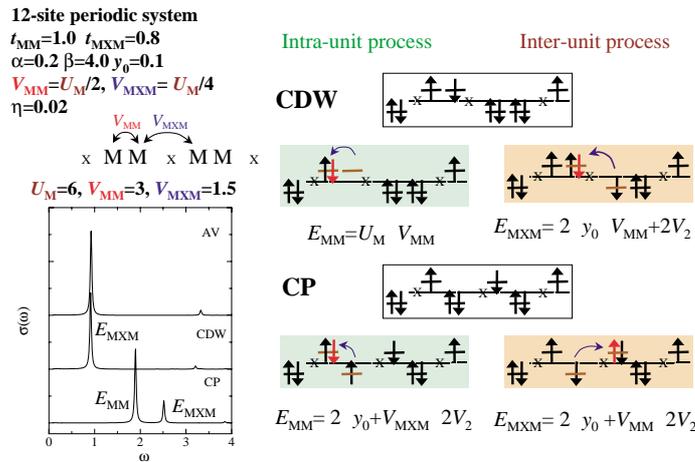


図 6 . 光学伝導度の電子相依存性。

それではどの影響がどれくらい効いているのでしょうか。それに答えるためにはモデルパラメタを実験結果から求める必要があります。そのためには光学伝導度の実験が有用なことがわかりました。金属原子 2 個あたりハロゲン原子が 2 個はといった XMMX 錯体があり、そこでは XMMX ユニットがほぼ孤立していると考えてよいので、モデルを決めれば近似なしに光学伝導度を計算することができます。XMMX 錯体は金属が 3 価でハロゲンが金属原子に近寄っている MMX 錯体の一部とみなすことができます。詳細は省略しますが、XMMX 錯体のスペクトルのハロゲン依存性などから 3 つのピークの同定をすることができ、励起エネルギーと励起強度から独立な 6 つのパラメタをそれぞれのハロゲンについて求めることができます。その結果、隣り合わない(少し離れた)MX間のトランスファー積分が無視できないことや、隣り合うMX間の斥力がかなり大きいことがわかりました。

さらに光学伝導度のスペクトルは前述のような電子相の起源の解釈が正しいかどうかについても指針

を与えてくれます。格子変位があるときはその大きさを一定にしておいたときの平均原子価相、電荷密度波相、電荷分極相のスペクトルの違いを図 6 に示します。

電荷密度波相と電荷分極相のスペクトルの違いも基本的に強結合極限から理解することができます。電荷密度波相で見えているスペクトルは強いオンサイト斥力がかかわらない複核間電荷移動過程です。正孔がひとつおきの複核ユニットに隣り合って並んでいたのが、光があたったことにより、ひとつがそれまで正孔のいなかった複核ユニットに移動します。そのために電子と正孔のペアができ引きつけあうので、電子間相互作用のぶんだけ低エネルギー側に吸収が起こります。一方電荷分極相では、正孔が最大の距離を保ちながら等間隔に離れあっていたので、光があたることにより、どれかの正孔が必ず近づいてしまいます。そのために、電子間相互作用のぶんだけ高エネルギー側に吸収が起こります。ここまでの話は軌道の重なりを無視したときの話ですが、重なりを摂動的に取り入れても状況は変わりませんし、実際に厳密対角化の結果は図に示した通りです。こ

Electron-lattice vs. electron-electron interactions

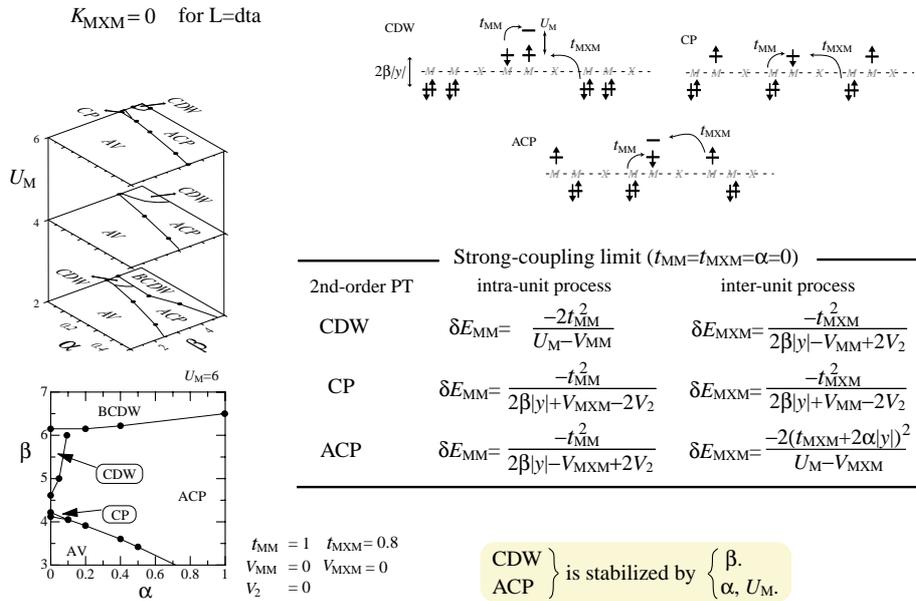


図7. 複核ユニット間距離を自由に変えられるときの電子相図。

これは実験結果と矛盾しません。複核ユニット間の距離を長くするにつれて、光学伝導度のスペクトルに見えるピークエネルギーは高くなっていきますが、電荷密度波相から電荷分極相へ移るときに不連続に高くなっています。さらに昨年、東大新領域の岡本グループにより、圧力をかけることによって電荷分極相から電荷密度波相への不連続転移が観測されましたが、このときの色の変化も目ではっきりみえるもので、吸収エネルギーは不連続に低くなっています。つまり対イオン、結晶水を変えながら化学圧を変える場合と物理圧を変える場合を、同じ過程とみなすことができそうなことがわかりました。

ここまでは pop 系錯体の実験結果を参照しながら述べましたが、dta 系錯体との違いをもう一度認識していただくために、複核ユニット間の距離が自由にえられる場合の相図を、以前の  $t_{MXM}$  をサイト非対角型電子格子相互作用 ( ) に変えて図7に示

します。

今度は  $U_M$  が交互電荷分極相を安定化するように働きますが、これも摂動論から理解できます。電子間の長距離相互作用を簡単のため無視すると、今度は電荷密度波相と電荷分極相と交互電荷分極相のエネルギーが強結合極限ですべて縮退しているので、トランスファー積分に関する2次摂動論を使います。複核ユニット内のトランスファー積分 ( $t_{MM}$ ) の2次過程で以前と同様に電荷分極相とそれ以外の縮退が解け、 $U_M$  の競合する様子が以前と同様に導けます。今度は複核ユニットをまたぐトランスファー積分 ( $t_{MXM}$ ) の2次過程で  $\beta$  が大きいときは交互電荷分極相が安定化することがわかります。つまり電子格子相互作用のサイト対角型 ( ) とサイト非対角型 ( ) が競合していて、オンサイト斥力 ( $U_M$ ) は  $\beta$  と競合しています。これは  $\beta$  がバンド上の電荷を、 $U_M$  がサイト上の電荷を粗密にする傾向があるのに対し、 $U_M$  がサイト上の電荷集中をな

くそうとする傾向が強いからです。dta系錯体では対イオンがないので複核ユニット間の距離が変わり易く、結果的に  $\sigma$  の影響が強くなりやすくなって交互電荷分極相が現れるのに対し、pop系錯体では対イオンが邪魔をして複核ユニット間の距離が一定に保たれ交互電荷分極相が現れないのだと考えられます。

#### 5. d 複合電子系、 $(\text{DCNQI})_2\text{Cu}$

ここでは電子格子相互作用が電子間相互作用と協力する例を述べます。擬 1 次元電子系である  $(\text{DCNQI})_2\text{Cu}$  では、リエントラントな転移を含め、不連続な金属絶縁体転移がよく知られています。Cu の周りに DCNQI 分子が 4 方向から配位し、DCNQI 分子は両側から Cu 原子に挟まれていて、ある方向に DCNQI 分子だけあるいは Cu 原子だけが積層している構造をもっています。DCNQI 分子の軌道は重なり合って非結合電子帯と結合電子帯を構成しており、後者が Cu 原子の d 軌道と混成して 3 次元的な電子帯を形成しています。一般に電子は遍歴性が高く、電子格子相互作用により絶縁化しやすい傾向をもっているのに対し、一般に d 電子は局在性が高く、磁氣的に秩序化しやすいので、両者がうまく複合した d 電子系には複合物性が期待されます。例えば圧力下で生じる絶縁相には、3 倍周期の格子変形を持ち、非結合電子帯のちょうどフェルミ面のところでギャップが開くのでパイエルス絶縁体のように見えます。そうであれば非磁性のはずですが、実際には常磁性です。これは結合軌道と d 軌道が混成してできる電子帯がほぼ 1/6 フィリングであり、3 倍周期の格子変形により実質

的に 1/2 フィリングとなって、あたかもモット絶縁体のようになっているからです。つまり電子格子相互作用によるパイエルスの機構と、電子帯のフィリング（電子の密度）が特殊なときに働き電子相関に由来するモットの機構が協力的に働いたのだと解釈することができます。単純に上の電子帯描像が成り立つのなら、 $\sigma$  軌道と d 軌道のレベルが特別なときにだけ起こるはずですが、実際にはそうなっていません。

圧力をかけていくと Cu 原子の周りにある DCNQI 分子の配置が正四面体の頂点の位置からどんどんずれてひしゃげていくので、d 軌道のうち完全に占有されていない軌道が上にシフトしていきます。つまり圧力とともに電子が Cu 原子の d 軌道から DCNQI 分子の  $\sigma$  軌道にどんどん抜けていくはずなので、非結合電子帯がちょうど 1/3 フィリング、d 混成電子帯がちょうど 1/6 フィリングにはならない筈なのです。しかし実際には、かなり広い圧力領域で 3 倍周期の格子変形がみられることから、そのような d 間の電子移動が抑制されていることが期待されます。実際、電子相関を正しく取り入れた計算を行うと、 $\sigma$  軌道と d 軌道のレベル差がちょうどよい値をとらなくても、自動的に格子がひずんで電子の数と d 電子の数がちょうど 3 倍周期の格子変形を安定にするような配置になります。自己ドーピングが起きているとみなしてもよいでしょう。あるいは本来は  $\sigma$  軌道と d 軌道の間にかかるべき電子移動が抑制されているので、d 電子移動ブロックが起きていると言ったほうがより正確かもしれませ



ん。これはd軌道にいるべき電子の数がある特定の数でないと安定にはならないという、格子との整合性による電子数のピン止めが起こるからです。つまり強い電子相関により安定化するために、電子間相互作用に比べて弱い電子格子相互作用が犠牲になって、全体として安定な構造をとるわけです。

#### 6. 今後の展望

ここでは多様な電子相を発現している機構として、電子間と電子格子間の相互作用が競合あるいは協力して初めて生じる電子状態に焦点をあてて、電子的に低次元な分子性物質を紹介しました。通常は、これらの相互作用が競合していても、どれかひとつの効果が他を圧倒していることが多いので、優勢でない相互作用は隠れています。電子状態に“欠陥”がある場合はその隠れた相互作用が見えることがあります。例えばノーベル化学賞の対象になったトランスポリアセチレンにおけるソリトンという状態は一重結合と二重結合の順序が逆になる“欠陥”として現れますが、中性ソリトンの周りには電子間相互作用によるスピン密度交替が局所的に現れていることが、核磁気二重共鳴などによって知られています。電子相関の強いことで知られている銅酸化物の反強磁性相中にドーピングされてはいた正孔の周りには、電子格子相互作用により振動数が変わった赤外活性モードがあることが知られています。

このように一様で平衡な状態にある攪乱を与える、通常は隠れている比較的弱い相互作用が顔を出して、電子物性に影響を及ぼすことがあります。い

ま光をあてて多電子の協力効果により磁性、光物性、誘電性などがドラスティックに変わる現象が注目を集めています。光励起の閾値特性や相転移を始める前の孵化時間などの一般的な特性が論じられることが多いのですが、電子相の発現機構や制御機構をより詳しく理解する上でも重要だと考えています。そういった多重安定な電子状態をもつ物質の電子相関を正しく考慮して、熱力学的転移と光誘起相転移を矛盾なく記述することも今後目指していく方向のひとつです。

## 猿倉研究室 研究紹介

分子制御レーザー開発研究センター 猿 倉 信 彦

軌道放射光とレーザーは、分子科学研究に用いる代表的な光源の中でも最も重要なものである。これらの光はそれぞれ長所・短所をもち、互いに相補的である。その意味で、2つの光の併用実験は多くの研究者に興味を持たれているが、それにもかかわらず、まだ世界的に見てもほとんど未開拓の領域である。具体的には、輝度や分解能における放射光の弱点を、高強度で高分解能なレーザーを利用することによって補ってやることで、広い波長範囲で光励起ダイナミクスの詳細な研究が可能となり、まだ知識が不足している励起分子の動的過程（イオン化、解離、脱離、振動緩和など）について精密な情報が得られると期待される。とくに、放射光に含まれる極端紫外光（VUV）は、分子を構成する個々の原子、または特定の化学結合に局在化した深いエネルギー準位にある電子を励起することができる。従って、放射光で分子中のある結合を選択的に切断して特異的な光反応を起こし、生成した励起分子の時間変化を、時間同期がとれたレーザーでリアルタイムに追跡するといった実験手法が、実現可能となる。

しかしながら、このような実験を行うに際し、最も問題となるのはVUV領域における光学素子である。VUV領域では可視域で使用可能でレンズや波長板などがその吸収特性のため役に立たない。そこで、我々のグループは極端紫外分光の基礎であるVUV光学素子の作成を行った。VUVを透過する物質はLiFが有名であるが、潮解性があり扱いが非常に難しいという欠点をもっていた。また、MgF<sub>2</sub>は潮解性こそ少ないが、複屈折性があり、光学材料としては適していない。そこで、我々はUVレーザー結晶

の母体として使用されているLiCAF（LiCaAlF<sub>6</sub>）とLiSAF（LiSrAlF<sub>6</sub>）を用いて吸収の実験を行った。図1にその結果を示す。比較として用いたLiFは結晶の品質が良くなかったため、138 nm付近に吸収端をもっているが、LiCAFは112 nmという極端紫外領域に及ぶ透過領域を有している。125 nm付近に存在する吸収は不純物によるものと考えられる。

図2にLiCAFの吸収スペクトルと反射スペクトルの比較を示す。実線は吸収スペクトルを、波線は反射を示す。この吸収測定でも125 nm付近にプラトーが存在しているため、やはり何らかの不純物に

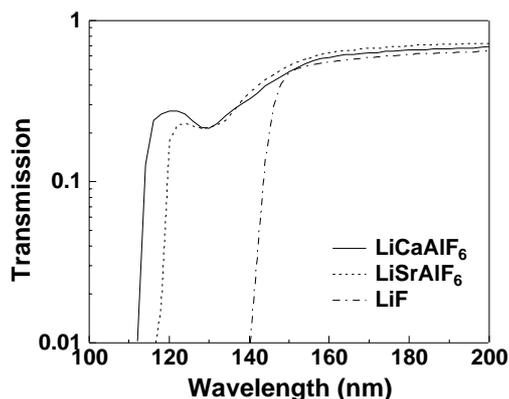


図1 吸収の測定実験  
LiCAF（LiCaAlF<sub>6</sub>）とLiSAF（LiSrAlF<sub>6</sub>）及びLiF吸収スペクトル。125 nm付近の吸収は不純物によるものと考えられる。

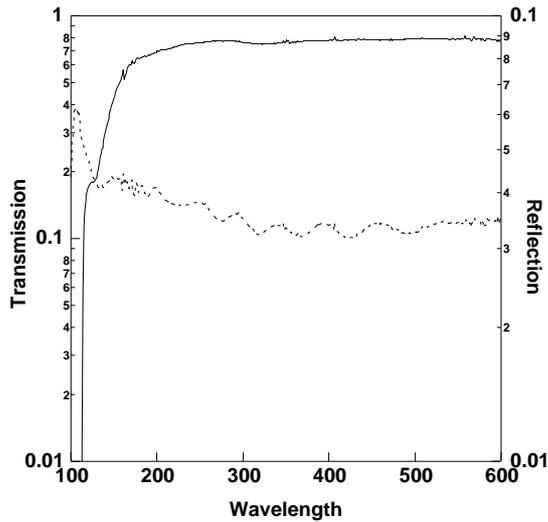


図2 LiCAFの吸収と反射スペクトル  
LiCAF (LiCaAlF<sub>6</sub>)の吸収、反射スペクトル。反射スペクトルに見られる振動構造は試料の表面と裏面での干渉である。

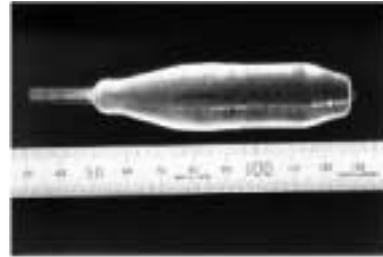


図3 LiCAF結晶の引き上げ後の写真  
現在、比較的大きな結晶が容易に得られているため、VUV領域の光学材料として非常に有望である。

よるものだと考えられる。一方、反射スペクトルも吸収スペクトルに合致した形状を示しており、極端紫外領域における光学素子としてのLiCAF結晶の優位性を示している。従って、LiCAF結晶は、他の結晶に見られるような複屈折性や潮解性もないため、波長板やレンズなどの光学素子、大気中にさらされる窓材としても利用できるため、非常に有望であると考えられている。

光学材料としての将来性として、図3にLiCAF結晶の引き上げ直後の写真を示す。およそ2センチ径の結晶であるが、現在は大きさ、品質共に向上しており、新たな分子科学を開拓する新素材として期待されている。

また、猿倉研究グループでは、主に科研費特定領域研究B、NEDOの中小企業創造基盤技術研究の支援を受けて、遠赤外領域のテラヘルツ電磁波発生の研究も行っており、数々の成果をあげている。

## 「錯体触媒」はどこへ向かうのか

錯体化学実験施設錯体触媒研究部門 魚住 泰 広

皆さんこんにちは。錯体化学実験施設・錯体触媒研究部門を担当する魚住泰広です。2000年4月に着任して以来、約1年が過ぎました。それまでは北海道大学、米国コロンビア大学、京都大学、名古屋市立大学で一貫して新しい後周期遷移金属錯体触媒の開発とそれらを利用した有機変換工程の開発研究に取り組み、特に新規かつ高立体選択的触媒機能を実現する配位子の開発を主たる課題としてきました。

最近の数年は完全水系メディア中で機能する触媒的有機変換に焦点を当てつつあります。これは水中でこそ有機物が示すであろう疎水性相互作用を反応の駆動力や制御因子として利用する試みです。様々な機能を有する分子の特徴を、一つの錯体触媒に組み込む機能集積型触媒の創製により、従来の触媒システムより高い活性、高い選択性、構造的柔軟性と一般性をあわせ持ち、また回収再利用も簡単にできて、無毒で安全な水の中で働き、しかもできれば従来型の錯体触媒では原理的に不可能な有機変換を司る、そんな触媒が夢？ 理想？ 目標？ もうすぐできる？……そんな課題に取り組んでいます。

今回は私達の研究室紹介（「研究紹介」ではない）をする機会をいただきましたので、アカデミックな話は端に追いやり、読んでも得にならない話を書きます。

まずは基本スペック：構成は魚住泰広（教授）、山野井慶徳（助手、2001年4月に着任したて）、Heiko Hocke（JSPS 博士研究員）、柴富一孝（博士研究員）、中尾竜（特別協力研究員）、中井康司（博士課程1年）、田中博隆（特別共同研究員、修士課

程2年）、中園真紀（特別共同研究員、修士課程2年）、西村愛美（秘書）の9名で、分子研としてはまあまあ大所帯の方です。居場所は南実験棟の1階の東端に実験室、3階西端に教授室と居室があります。夜間にも必ず守衛さんが施錠チェックのために部屋の中まで入るので（各階端の室内に機械錠点検盤のような物体があるため）倒れていても早期発見が可能などとも良い保安状況にあります。つい先月にもある院生がコンピューターからプリント命令を出し、プリンターのところに歩み寄る5メートルほどの険しい道のり（途中に机、椅子などの障害物多数）で力尽き、翌朝寢息を立てる「物体」と化して床の上で発見されるという事件がありましたが幸いにも単なる睡眠不足だったようで大事には至りませんでした。

また現在、体育会系バドミントン部出身者が3名も在籍しており、化学系研究室対抗バドミントン大会があれば全国でもかなり有力であると自負しています。せっかくなので紙面を借りてお伝えしよう「我々は誰の挑戦でも受ける!!（ただし今年度限定）」

他に特筆すべき研究室の特徴としては、コンパで出てくる日本酒は宮城の地酒のみである。研究室で使うボールペンはビジネスホテルか学会の展示会場で入手するので決して購入してはいけぬ。研究室で飲むコーヒーは教授のおごりなので全員無料である。論文が学術誌に受理されたら著者持ちで研究室全員に奢る。プロッコリーは人間の食べる物ではない。パイナップルこそが果物の王様である。などなど研究室には多くの鉄の掟が存在しています。もち



ろん鉄は錆びます。

一方、本分たる研究の方はどうなっているのかというと、こっちも結構頑張っています。もちろん「頑張る」というのは過程に関する表現ですから、結果が伴うかどうかは今後のことです。この1年間で研究所からの多大な支援などにより大型機器としてはゲル相核磁気共鳴分光装置を導入、立ち上げし、また実験設備の改修や種々の機器、器具の充実などもほぼ終了することができました。ハード面のみならずソフト面での研究環境という点でも分子研はとても良いです。化学を考える時間が以前の倍にはなっています。以前なら自動的に頭の中で「待った」をかけてしまったかも知れない思い付き的な発想もゆっくり反芻しブラッシュアップできる余裕があり、また議論できる相手も豊富にして多様。研究グループ間の敷居が低いのも化学、科学を楽しめる研究環境の大切な部分ですね。

分子研は私にとっては6つめの研究場所です。これまでの5つの研究環境においても常に骨を埋めるつもりで自分なりに全力投球してまいりました。分子研の研究環境は本当に素晴らしいので、もちろん骨を埋めるつもりです。

## [(限界)×(超限界)の光]と分子

分子構造研究系分子構造学第一研究部門 岡 本 裕 巳

結局また来てしまいました。2000年11月から分子構造第一研究部門に着任いたしました。まずは初対面の方も多数おられますので自己紹介から。私は15年半ほど前(1985年)に、当時東京大学理学系研究科(田隅研究室)の博士課程の学生でしたが、どういうわけか分子研の電子構造研究部門の助手として拾っていただくこととなりました。当時の吉原グループのメンバーとしてフェムト秒レーザー分光装置の開発を行いました。なかなかうまく行かずにもがいていましたが、開き直って続けたところ、なんとか形だけは整えることができるようになり、6年の任期を1年残して1990年に東京大学理学部に戻りました。学位も3年遅れましたが分子研での仕事で取らせてもらえました。東大では振動分光の特徴をなるべく活かして、ピコ秒でよいから超高速現象のまだ見ぬ世界を調べたい、という立場でやってきました。アンチストークスラマン散乱を用いて振動緩和現象のこれまで明らかとなっていなかった側面を見るということと、まだ測定例のなかったピコ秒オーダーでの指紋領域赤外(有機分子の構造に敏感な波長領域)分光法を開発して励起分子の構造情報を引き出す、ということをして2本の主要な課題として行いました。東大にはちょうど10年ほど在籍し、この度岡崎に帰って来てしまったというわけであります。10年ぶりに岡崎に住むことになってまずショッキングだったのは、某エスプレッソ系コーヒー専門店や、100種類前後も茶葉を揃えた某紅茶専門店なんか、軒を連ねているショッピングセンターの存在でした。私の15年前~10年前からの外挿予想値には、このようなものは岡崎

には存在していませんでした(2.5 くらいには入っていたかも知れない)。

それはともかく。そもそも私は、大昔からなにかと工作することが好きでしたが、この私の特性は研究上にも陽陰の影響を与えていて、「実験の職人気質」を自認しています。いわば、ある意味で「装置屋」です。この方向性は、思えば以前の分子研助手時代に(図らずも)出来上がってしまったような気がします。恐らく私は当時、装置開発室のフライス盤の最もヘヴィーなユーザーの一人であったと思います。レーザーなどの実験装置を壊す(破壊することではない、念のため)ことも、平気になってしまいました。東大時代に研究上不便を感じたことの一つは、分子研の装置開発室に相当するようなものがなかった、ということがあります。分子研は、分子科学の基礎研究を行っていく上で必要になる新しい装置を作って実験するという環境において、やはり非常によい環境にあって、私は以前に分子研にいた時に、その恩恵にずいぶん浴することができたと思います。

さて今度は分子研で何をやるか。実のところ、私は将来の抱負を述べるのは苦手なのです。特に基礎研究では、今から何が起こるかわからないところに、ある意味で面白さがある、それについて具体的なことをあれこれ話せるわけがない、と思ったりします。(本当のところは、自分の企画力と表現力の問題なのかもしれませんが。)しかし今の時代、そうも言ってもらえないところもあるようで、今現在申し上げられる範囲のことを書かせていただくことにします。他の場所から移って来た時に、いままで自



分自身に蓄積があって、よそよりも進んだところをもっと極めていく、という方向性も考えられるのですが、今これはちょっと飽きました。一方で、私の特性である「実験の職人気質」の立場は今後もできるだけ崩さずに保っていききたい(分子研はそれに適した環境があると思います)、その上で何か新しい領域を開いていくことができれば、と思います。自分の得意なところを活かしつつ、若干方向転換したいと思っています。それで、私が7~8年前からやってみようと思いつきながら、時間と¥などの都合でできなかったことを、この際いい機会なので始めさせていただきたい、と考えています。

その以前からやりたかったことというのは、私に蓄積のある高速分光の研究(特に凝縮相)に、高い空間分解能を持つ顕微光学的な手法を持ち込んで、分子のダイナミクスの研究に新たな展開がはかれないうか、ということです。超短パルスレーザーの分野では、今では振動数の幅と時間の幅の積がほぼ限界に近い小さい値となった、いわゆるトランスフォームリミットな光は当たり前になっており、光の単色性を適切に保った条件下で時間分解能を限界まで押し進めることが普通にできるようになりました。一方空間分解能のほうは従来、光を用いるかぎり回折限界の壁があって、これを越えた空間分解能は得られないというのが普通の常識でした。しかし最近、この限界を超えた超解像の手法が、いくつか実用的に用いられるようになって来ました。特に最近急速に発展して来た近接場光学の方法は、ナノメートルのオーダーの空間分解能で物質の光学的・分光学的性質を知ることができる手法として注目されます。

このように、限界まで時間分解能を確保した光を用いた超高速分光実験を、通常の光の限界を超える空間分解能で行うことが、原理的には可能となってきている状況にあります。

実はこのような方向での試みは、既に内外のいくつかのグループで始まりつつあります。時間も空間も同時に高い分解能で測定したい、というのは当然出てくる発想といえます。しかしまた、この手の実験は測定法として完成したとは言えない状況で、現在のターゲットは測定が容易なテストサンプルに留まっているようです。私も最初は超短パルスレーザーとファイバプローブ近接場分光システムの組み合わせによって、テストサンプルの位置特異的な蛍光ダイナミクスの観測などから始めたいと思っていますが、基本的な技術を習得できれば、新たな発想で測定法に奥行を持たせること、分子ダイナミクスの研究に活用していくことを行っていきたいと考えています。測定法の奥行を拓けるという面では、従来の超高速分光法に用いられて来たさまざまな測定手法を近接場分光測定のさまざまな測定モードと合わせていき、広い測定対象に適用可能な方法を作っていくことも当然行っていきたいと思いますが、その他に、ポンプの過程とプローブの過程を空間的に分離する可能性や、分子の動きを直接検出する方法の開発(必ずしも走査光学系を用いない)など、恐らくまだ試みられていないことも含めてアイデアを温めているところです。

測定手法とノウハウを蓄積していくと同時に分子ダイナミクスの研究に適用していきたいと考えています。物質化学、生命科学の広い領域を含めて現在

「ナノメートル」が注目を集めていることもあり、このような測定手法の対象は、ある意味でいくらかでもあるといえますし、私も測定法が完成すればそのような立場からの共同研究は積極的に行っていきたいと思います。しかしそればかりではなく、私のこれまでの超高速分子ダイナミクスの興味とも関連した分子科学の基礎的な研究として、次のようなことを少し長いスパンで考えてみたいと思っています。一つは、最近合成の方々が精力的に行っておられるような、構造と大きさの制御された自己集積型超分子は、これまでの分子・分子集合体にはない性質や機能が期待され、超高速ダイナミクスの観点からも興味深い対象です。そのような分野の方たちと協力して時間空間分解の特徴を活かした研究が展開できれば良いなあ、と思っています。今一つは、液相の分子ダイナミクスの問題です。液体のような系は一見、空間分解した分光法の対象とはならないようにも思えますが、ここに時間分解やダイナミクスの考え方を持ち込むと、必ずしもそうではなくなると思うのです。私は東大にいた頃に、液体中の分子の光励起に伴う余剰エネルギーの流れに関する研究を振動分光法の立場から行って来ましたが、その関連においても、空間を分解したダイナミクスの研究は意味が出て来そうです。液相中の分子の動的なプロセスは、分子科学の基礎としての興味だけでなく、固体や気体と違ってその中を大量の大きな分子が移動でき、それを通じた情報・エネルギー等の伝達が可能であるという面でも、重要性を持っていると思います。

つかみ所のない漠然としたことばかり書いて来て

しまいましたが、まだ実験装置が整備された状況ではなく、私自身の中でアイデアを出しては消している段階なので、この程度でお茶を濁させていただきます。雑用もじわりじわりと来はじめましたが、時々楽器をやったりして右脳を活性化させながら、大学とは異なる環境を活かしつつ研究をしていきたいと思っています。研究がうまくいった時には、とっておきのB級イタリアワインをあける積もりで、それに向けて頑張ります！



## 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 久保 厚

平成12年4月に京都大学理学部化学教室より分子研の流動部門に赴任しました。京都大学からは博士課程の西山君と市川君がいっしょに来ました。市川君は今年4月から富山市の博物館に就職しました。非常に緻密な実験データを出す人でいつも感心するのですが、貴重なデータをまとめて近く世に出してもらえもの信じています。西山君も現在、京都大学の寺尾教授の御指導で論文の仕上げに取り組んでいるところです。市川君は分子性結晶のdisorderを重水素NMRスピン拡散の実験で調べました。また西山君はコレステリック液晶やネマティック液晶の高分解能<sup>13</sup>C NMR法の開発を行っています。

私自身の紹介をさせていただきます。博士課程修了まで名古屋大学理学部化学教室の中村研究室にいました。卒業後、カナダのプリティッシュ・コロンビア大学にポスドクとして約2年、留学したことが大きな経験であった様に思います。西洋社会では若者が権力におべっかを使ったり擦り寄ったりすることは必要とされないとは聞いていたのですがまさにそのとおりであった様に思います。私のボスはすでに引退して名誉教授だったのですが、彼が金曜の夕方時々皆にビールや中華料理をおごってくれたりしました。日本人のポスドクはたいがい喜んで付いて行くのですが、イギリス人のポスドクの1人はあいつの話を聞かされるのは御免だという感じでいっしょに食事をするのを拒否していました。前提としてそのような行動をとっても不利益を受けないということが保障されているようです。また日本から来た先生が講演された時、話がわかりにくかった所為か学生が話

の途中でどンドン席を離れていきました。カナダの学生は講義で寝る必要はないようです。

ボスがまた親切な人でよその研究室のポスドクにおまえのところの先生は学生のデータをとり上げて自分でさっさと論文にしてしまう癖があるとアドバイスしていました。アメリカ人の友人が人間よりも犬の方がよっぽど誠実だと言っていたことも思い出します。ボスがよく言っていたのは大学は原則を教える場所だということでした。かつてその大学で学生をしていたという教授らしき人は、自分も学生のころは彼とよく衝突したが今になってみると彼のやりかたはほぼ正しかったというようなことを言っていました。さてその原則として彼や私の友人達は何を言っていたかと断片的に思い出すと、「才能は伸ばすためではなく皆で使うためにある。」日本に帰って文庫本を読んでいると似たような考えに出会いました。「道具は作った人のためにあるのか？使う人のためにあるのか？」「医術は、医術の利益になることを考察するものでなく、身体利益になることを考察するものなのだ。」（プラトン、国家。）「西洋の学者は、東洋の学者のように知識を集めて悟りを開くことが目的ではなく、ただ皆の使えるように知識を図書館にでも整理しておくのが役目。」（おそらくパール・バック、大地）同様にして「論文はpublishした時点で学会発表し、使ってくれそうな人に配る。」「終わったら、さっさと他のテーマに移る。」「博士論文は使うためにある。」

「若い時は人格など問うても仕方ない。だが年をとれば誰でも理解するようになる。」「何が悪いことが皆が判るように、悪の標本のような人も時には必

要。」ポスドク時代、廊下で他の研究室の先生とすれ違うと嫌な顔をしていたのを覚えています。同僚のポスドクもそのように言っていました。装置の修理や工作等は年配の優秀な技官の人が素早く対応してくれました。俺達が働かないことには大学が成り立っていかないから、というような自覚と自信を技官の人達が持っていたのが印象的でした。同僚にインド人のポスドクがいて、仕事は速くないが非常に親切な人でした。彼は、「キリスト教ではどんな悪いことをやっても心から謝罪すれば許される。」と言っていました。ポスがNMRの本を書いた著者の名を挙げて「こいつは自分の本には一個所も誤りがないと主張している。」と非難していました。「良い人はどこにもいない。」

また留学中に広島かどこかの大学の助手が教授を殺害したという記事が物理教室の掲示板に張っており、ポスがそれを見て、大学院生に殺されない様という戒めだといっていました。「ここではfacultyになったらほぼ自動的にprofessorになる。」とも言っていました。「私におとなしく付いて来れば教授にしてやる。」とか言う人がいたとすれば目標の設定が根本から間違っているのではないのでしょうか？原則を理解させ、社会において自分の持ち場で可能な限り原則に従って行動する人を育てるとというのが、カナダの大学での教育方針でした。

留学して半年あまり、論文を読んだり、自分の提案したテーマで結晶作りを試みたり、ことごとく失敗しました。その頃、研究室は気の優しいインド人と私の2人だけでしたので日に日にポスの表情が硬くなっていったような気がしました。その時もらっ

たのがスピン拡散のテーマでした。2つの論文があり、一方はノーベル賞学者の、もう一方はアメリカの企業研究者の論文でした。ノーベル賞学者の方は非常にきれいに書かれていて、もうこの実験を繰り返しても結論は全く同じになってしまうような気がしました。もう一方の企業研究者の論文は読みづらいものでした。けれど良く読んでみると企業研究者の論文も異なる近似方法を取っていて無視するのは公正でない気がしました。またポスが「ノーベル賞学者は優秀な学生を集めて使っているだけ。」「自分の論文以外は引用せず小さなグループの論文を無視する傾向がある。」と非難していました。実験結果を良く眺めてみると自分の系においてはノーベル賞学者の近似は適用できないことがわかりました。またバス停でバスを待っている時、児童を数人連れた先生が「私達は多人数だから先に乗って欲しい。」と譲ってくれることがありました。「人は地位や家柄ではなく行為によって評価されるべき。」論文でなされた行為を考えると、きれいにまとまっていれば確かに後で読み易いが、自分の限界ぎりぎりのところでもがきながら新しいことを見つけようという仕事も大切に思います。編集のプロがいて体裁良く論文を仕上げるということは読者にとっては結構なことですが、逆に論文を読むプロがいて、体裁の悪い論文から真にその論文でなされた行為を抽出し公正な評価を下すということの方が必要な気がします。そんな調子でずいぶん年配の先生方に反感を持たれるような論文を書いてしまいました。ただ比較的若い人には今でもその頃の論文を引用してくれたりするようです。



友人の一人にそんなに働いてもどうせ professor の仕事となるだけだ、と忠告してくれる人がいました。自分でも自分のしたことただ与えられた問題を解いただけということはよく自覚していました。しかしながら何人かの人（論文の読者や友人）と共感することができたことが大きな経験として残りました。ボスは、「模倣はやはりオリジナルにはかなわない。それは読めばわかる。」また新たに教授として赴任する人について、「彼も他大学へ移ってから（自分のやっていた）緩和時間測定で有名になったからなあ。」とっていました。私もこの時の仕事の残像が長い間、頭の中に残り、かなり彼のテリトリーを侵害したに違いありません。ただ孤島で外界との接触なしで自分独自のオリジナルな研究をする人はおそらくいないだろうし、いてもいないに等しい。もらった物の一部でも返すように自分でも色々調べ、思い浮かんだアイデアもしゃべるにはしました。（Mulliken の population analysis と同じでどこに境界線を引くかは厳密には決まらない。）他人のやった仕事はちゃんと引用し、自分が少しでも付け加えることを見つけ正直に書くように心がけるしかないと思いました。

ボスは第2次大戦中のドイツの軍人を評して「彼らはワッペンを集めるのが好きだった。兵士をこき使った。」とっていました。戦争というのは国内問題でもあります。財産や能力を多く持った人が「やはり持っている人は捨てるのが嫌なのだ。」といわれないうち頃から責任を果たすことも必要でしょう。カナダのボスも私が去った後、皆が予想もしないようなテーマを見つけ学会発表していました。

学生時代から同じテーマを一貫して続けてこられたことを自慢する方も見受けられますがどうでしょうか？ すでにあるテリトリーを維持することではなく新たなフロンティアを見出すことが本当は重要ではないでしょうか？ 戦争中飢餓状態に陥った人間の悲惨さは大岡の「野火」や山崎豊子の「大地の子」にもよく描かれています。学問の飢餓状態というのは別に人が死ぬわけでもなくたいしたことはないのですが、「ピラトの罪」という原則も友人から教わりました。ハンナ・アーレント「イェルサレムのアイヒマン」。私には何も責任はないとは同時代の人には言えない様です。学問の目的がギリシャ時代のように何が正しくて何が誤っているのか判断する能力を養うことであるとすれば、どんなことが必要でしょうか？ もちろん知識の図書館として応用に奉仕するという今日的意義もあるでしょうが、ブリティッシュ・コロンビア大の化学教室のヘッドになった人が「私もこの年になってやっと、アフリカ人や東洋人の学生の面倒を見る気になりました。」といていたのがとても印象的でした。学術研究は後世の人すべての利益のためでもあり、先進国のお坊ちゃま、お嬢ちゃまの名誉欲を満足させるためにあるのではないと思います。

まとまりのない話を長々と書いてしまいました。流動の助手に呼んでいただき独立に研究費をいただき大変感謝しています。研究費を無駄にしないよう新しいNMRのプロープの作成に取り組んでいます。

## 「目で見る」原子と分子

極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門 小宮山 政 晴

### 1. STMのこと

走査型トンネル顕微鏡 (STM) を初めて見たのは、かれこれ15年ほど前のことになります。「STMというものを作ったのですが、一緒に応用をやりませんか?」という、当時東北大通研の助手をしていた現阪大教授の森田さんのお話しがきっかけでした。もちろん当時は市販の装置はなく、手探り、試行錯誤で装置づくりを重ねては、今日はナノメートルまでいった、もう一桁上げるにはどうしたらよいらうと、いくつかのグループが通研の一室で頭を寄せ集めては情報交換をしながら仕事を進めるというような様子でした。

STMというのは、原理的にとくに新しいことはなく、ただただノウハウのかたまりとってよいような装置です。STM (そしてこれから派生した、原子間力顕微鏡 (AFM) などのいわゆる走査プローブ顕微鏡 (SPM)) は、基本的には鋭い針 (探針) で試料表面をなぞって、表面の原子や分子の像を見るという顕微鏡です。探針先端の原子と試料表面原子との間に働く何らかの物理量を検出して両者間の距離を数オングストローム以内に保ち、一方探針を試料の面内方向にオングストローム以下の精度で移動させて試料表面の原子像を得るのです。

探針をオングストローム以下の精度で制御することは、そんなに難しいことはありません。この目的には piezo素子を使うのですが、変位量が10 nm/V 程度の piezo素子は一般に市販されています。これを10 mV 程度の精度で制御すればよいわけですから、ノイズ対策さえ十分にやれば、制御回路の作成はそんなにたいへんなことではありませんでした。

一番大きな問題は、外界からの振動をどう遮断するか、ということでした。オングストロームのオーダーで探針の位置を制御しているわけですから、外界から侵入するほんのわずかの振動 (音波その他) でも命取りになります。いろいろな方法で除振対策を施した結果、最後まで取りきれなかったのは建物が有する固有振動でした。1982年にSTMの開発を発表したIBMのグループは、超伝導磁石をつかってSTMを実験台から浮かせるという方法まで試みています。私たちが実験を始めた当時は、良いデータがとれるのは建物内で人が動いていることの少ない深夜から早朝の時間帯でした。ことに休み明け (月曜日など) の早朝 (2~3時ころ) がベストです。このようなわけで、STMの原理を利用した建物の振動検出器を特許申請したこともありますが、いまだに買い手は現れません。今はもちろんそんな時間に実験をする必要はなく、通常二重ばねつり型の除振台と渦電流ダンパの組み合わせを用いることにより、この問題を解決しています。

原子レベルの分解能をもつ装置は、STMの出現以前にもいくつかありました。たとえば透過型の電子顕微鏡は、原子一個一個を見ることはできませんが、同じ原子が10個くらい縦方向に並んでいると (たとえば結晶など) 試料面内でその原子列を一つの原子として分解することができます。またX線回折や電子線回折、EXAFSなどでは、逆格子空間ではありますが、結晶の原子配列を決定することができます。さらに電界放射顕微鏡 (FIM) も、試料系は極端に限られますが、原子分解能を有しています。ちなみにSTMの研究者にFIMの研究から転進した



人が多いということも、興味深い事実です。

これらの装置に比較して、STMやAFMがこれだけの普及を果たしたのは、いろいろな理由があると思います。たとえば、装置や制御回路が比較的簡単であること、試料系に制限が少ないこと、原子像を見るのに真空は必ずしも必要でなく大気中・水中でも動作すること、実空間で「通常目で見えるような」原子像を得ることができること、などを挙げることができます。なかでも最後の項目は重要で、STM以前の原子分解能を有する装置の多くが試料中の原子配列に長周期性を必要としていたのに比べ、原理的にはSTMでは無秩序な試料でも孤立した吸着分子でも観察することが可能なのです（ただし実際にはとてもたいへんです）。STMの認知が非常に早かったのも（1986年ノーベル物理学賞）、開発者であるBinnigらがSTM開発の早い時期にSi(111) 7×7構造の原子分解像を得たからだ、といわれています。

このようにSTMでは、他の手法では観察できない条件下、他の手法では観察できない構造を見ることができたために、表面科学や電気化学、その他の分野に長足の進歩をもたらしたことはよく知られているとおりです。その一方で、「見た者勝ち」という状況もしばらくの間続きました。たとえばある著名雑誌の表紙もかざった「グラファイト表面に吸着したDNA分子の像」は、実はグラファイト表面のアーティファクトであったことが、今では一般に受け入れられています。私たちもAFMを用いて、水溶液中でゼオライト表面の原子像やそこに吸着したピリジン塩基分子などの分子像を観察し（アーティ

ファクトではないと信じています）その配列・配向構造を決定していますが、「ゼオライト（非導電性試料）表面」に水相で吸着させた分子像の「その場」観察などは、これまでの他の手法ではまったく不可能であったことです。

## 2. 空間分解分光法

最近私たちは、SPMを使った分光法、すなわちSPMの高い空間分解能を利用した「空間分解分光法」とでも呼ぶべきものに興味をもっています。

一般に分子の形状や性質を知ろうと思うと、三つの分解能が必要だといわれます。すなわち、エネルギー分解能、時間分解能、空間分解能です。エネルギー分解能は種々の分光法として、時間分解能は非常に速いレーザーを用いて、また空間分解能はSPMにより、それぞれ単独ではほぼ極限に近づいていると見てよいでしょう。そしてしばらく前から、複数の分解能を組み合わせることで分子の姿に迫ることが行われています。なかでも進んでいるのは時間とエネルギーの組み合わせによる時間分解分光法で、これによる研究がZewailに1999年のノーベル化学賞をもたらしたことは記憶に新しいところです。

STMにより空間分解分光が可能であろうということは、STM出現後かなり早い時期から指摘されていました。一つは走査トンネル分光法STSと呼ばれるもので、これは試料表面のフェルミエネルギー近辺の電子状態密度を空間分解して見るのに有効です（フェルミ端近傍での光電子分光、逆光電子分光の空間分解に相当）。一方以前から行われている非

弾性電子トンネル分光法との類推から、1分子の振動分光ができるはずだという指摘もあり、実際グラフィットに吸着したソルビン酸1分子の振動分光を行ったという報告が出たこともあります。長い間その追試に成功するグループはありませんでしたが、最近になって、銅表面に吸着したアセチレン1分子の振動スペクトルが報告されています。これも追試は難しそうですが、データの信頼性は高そうです。

このようにSTM装置そのものを用いた空間分解分光法に対して、光を使った分光法を利用しようという考え方もあります。この場合には光の回折限界が空間分解能を左右しますが、それを近接場により回避しようというのが現在主流の考え方で、このような考え方による装置を走査型近接場光学顕微鏡(SNOM)と呼びます。

最近のSNOMの発展も著しく、すでに何機種か市販品もでていますが、現在のところ空間分解能はよくて数十nmで、原子・分子を見るには今ひとつのたりません。SNOMタイプの顕微鏡で原子レベルの空間分解分光を行うには、もう一つか二つ(またはそれ以上?)のブレークスルーが必要なのではないかと推測されます。そのなかには、現在のSNOMオプティクスとはまったく異なるオプティクス開発も含まれるかも知れません。

私共のグループの分子研での2年間は、これまでのSTM装置のみを用いたいわゆる走査トンネル分光法STSによる空間分解分光法の研究を続けながら、一方で光とSPMを組み合わせた空間分解分光法の装置開発もしてみたいと考えています。このような装置(SNOMに限らないかもしれませんが)の分解能

を、現在の数十nmから原子・分子のレベルまであげるためのブレークスルーのきっかけを、この2年間でつかめればと願っています。皆様方のご支援、ご鞭撻を願い上げる次第です。



# 日本の大学の研究活動のランキングと独立行政法人化

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 岡本 祐幸

我が国の国立大学の独立行政法人化が目前に迫っているが、それに伴って、大学及び大学共同利用機関の研究活動の順位付けがいろいろな形で行われていくことは必至であろう。これに関して、我が国の大学等の研究活動をランク付けする報告が学術月報の2000年3月号に発表された。<sup>1)</sup> 本小文では、この文献の内容について考察したい。

文献1では、米国ISI社(The Institute for Scientific Information<sup>2)</sup>)の引用統計データベースの中のNational Citation Report (for Japan) (NCR) という、所謂「日本の論文」(著者の少なくとも1人が日本の研究機関に所属するもの)のデータベースを調査対象としている。詳しく言えば、1981年1月から1997年6月までの16年半の間に、ISI社が厳選した「国際的に有力な雑誌」(数は数千に上り、原則的に英文誌)に発表された、853,323件の「日本の論文」のうち、文献種別がarticle、note、proceedingsである、737,039件の論文を調査対象としている(筆者は1995年4月に分子研に着任したので、このデータベースにはあまり関係なく、気楽にコメントできる立場にある)。実は、1992年に米国の有力雑誌*Science*が「日本の科学」と称する特別企画を設けて、<sup>3)</sup> 同じISI社の1981年から1991年間のデータベースに基づいた、日本の研究機関のランキングを既に行っており、今回の調査<sup>1)</sup>は、その延長上にあると言えるであろう(文献3を教えて下さった伊藤光男前所長に、この場を借りて感謝したい)。文献1では、これらの論文の所属機関を大学・企業・その他の3つのセクターに分類した。ここで、「大学セクター」は4年制大学、大学院大学、大学

共同利用機関、短期大学、高等専門学校、高等学校などの教育機関を含む(特に、532大学と17の大学共同利用機関が含まれている)。また、「その他セクター」は、基本的に文部省以外の官公セクターであり、国公立試験研究機関、特殊法人・財団法人の研究所や大学付属病院以外の病院、その他の公的団体等が含まれる。文献1では、特に大学セクターの論文589,472件の調査結果を中心に紹介している。

研究活動の順位付けは何を元にするかは、議論の余地があるが、上のデータベースに基づけば、研究機関毎の「論文数」と「引用度」(論文1報当たりの平均被引用回数)が考えられる。しかし、論文数は研究者の数が多ければ多くなるのは当然であり、また、意味のない論文を数多く書いても評価されないことを考えるとあまり良い指標とは言えない。一方、後者の引用度は、論文が他の研究者にどれくらい影響を与えたかを示すものであり、論文の質を示す(完璧とは言えないまでも、現在考えられる)最も客観的で厳密な指標と言うことができるであろう(完璧とは言えないというのは、例えばこの数字には同業者の数が考慮に入られていないという問題がある。同業者が多ければ引用度が高くなるのは当然である)。勿論、論文数が多いということも研究が活発に行われていることの一つの指標にはなり得る。すなわち、全論文数はその研究機関の研究者の数に依存するので、あまり意味がないが、研究者1人当たりの平均論文数(全論文数をその機関の(例えば、助手以上の)研究者の数で割ったもの)は重要な指標になる。しかし、文献1では全論文数と引用度だけが扱われていて、この量は考慮されてい

い。よって、ここでは、論文の引用度に基づいた、大学等の研究活動のランク付けに話を絞る。

文献1では理工系、生物・医学系、人文・社会系の3系26分野について、引用度の詳しい解析を行っているが、分子研に關係する化学と物理学の分野における結果を表1と表2にまとめた。ここでは、それぞれの分野において、論文数上位30機関の論文引用度をランク付けした(文献1の表4参照)。化学では分子研が圧倒的に全国第1位、物理学でも僅差で第1位であることが判明した。

なお、岡崎国立共同研究機構には分子科学研究所

の他に、基礎生物学研究所と生理学研究所という2つの研究所が存在するが、これらの2研究所が關係する生物学・生化学、神経科学、植物学・動物学の3分野においても、岡崎国立共同研究機構が、全国第1位にランクされている(文献1の表4参照)ことを付言したい。

それでは、なぜ、分子研がこれ程までに研究活動が活発なのかという問いに答えなければならない。これについては、前分子科学研究所長・前岡崎国立共同研究機構長の伊藤光男先生のご意見<sup>4)</sup>が大変参考になるので、それをここで引用させて頂く。「全

表1 日本の大学等の分野別論文引用度  
分野：化学(1981-1997)

順位	大学等	論文引用度
1	岡崎国立共同研究機構	15.1
2	京都大学	10.6
3	東京大学	10.2
4	名古屋大学	10.0
5	大阪大学	9.4
6	東京工業大学	9.3
7	大阪市立大学	9.2
8	九州大学	8.6
8	東京薬科大学	8.6
10	東北大学	8.4
10	北海道大学	8.4
12	東京都立大学	8.2
13	広島大学	8.1
14	早稲田大学	7.7
15	慶応義塾大学	7.6
15	金沢大学	7.6

表2 日本の大学等の分野別論文引用度  
分野：物理学(1981-1997)

順位	大学等	論文引用度
1	岡崎国立共同研究機構	11.1
2	東京大学	10.5
3	高エネルギー物理学研究所	9.8
4	京都大学	8.7
4	筑波大学	8.7
6	東北大学	8.0
7	東京工業大学	7.7
7	新潟大学	7.7
9	大阪大学	7.6
9	広島大学	7.6
9	神戸大学	7.6
12	名古屋大学	7.2
13	東京農工大学	6.9
14	九州大学	6.8
15	東京都立大学	6.7



ての教官、教授・助教授・助手の採用は公募で行っています。また助手から助教授、助教授から教授への内部昇進は実質的に禁止されています。(中略)おそらくここほど人事の流動性の高いところはないでしょう。日本一だと思います。これは、ここの研究環境が良い、また、大学と違って学生の教育に多くの時間をとられることなく、研究に没頭できるところにあると思います。ここのスタッフはプロモーションのためには外に出なくてはならない。外へ出るのは、日本の場合どうしても閉鎖的ですから、なかなかそう簡単ではありません。その競争に打ち勝って出ていかななくてはなりません。(中略)このような実績がよく知られているので、また全国から優秀な人が多数応募してくる。その中から一番よい者を選ぶということで循環がとてうまくいっているのです。」<sup>4)</sup>

大学の独立行政法人化に伴って、多くの大学が生き残りをかけて切磋琢磨する時代に突入しようとしているが、安易な任期制を導入して研究者の地位を不安定にするよりも(分子研では、助手には任期制も課しているのは確かだが)、むしろ、完全公募・内部昇進禁止という分子研の人事政策を採用することの方が研究活動を活発化するのに、効果が大きいと筆者は考えている。

ここまでは、分子研を宣伝する立場で書いてきた。しかし、一研究者の立場としては、私は引用度などに気を取られているようではスケールの大きな研究はできないと思っている。たまたま自分の書いた論文の引用度が高いのは名誉なことではあるが、引用度を上げようと思って研究の方向付けをし出したら

おしまいである。創造性の高い研究は、しばしば最初は人に無視されたりするものであるからである。引用度のように数値化されたものだけで研究者を評価することには大きな危険性も存在する。例えば、次のような有名な「伝説」がある。コーネル大学の物理学科に助教授として就職したK. Wilsonは終身雇用(tenure)の審査を受けるまでの数年間ほとんど論文を書けなかった。よって、数値化された評価は大変低いものであった。審査はもめにもめたが、最後にH. Betheが次のように言った(伝説であるので、実際の英語がどうであったかは定かでない)「But this man is DEEP」(深遠とでも訳すのであろうか)。この一言でWilsonにtenureが認められ、その数年後にノーベル賞につながる、繰り込み群の研究など、多くの創造性豊かな研究成果が生み出されたのであった。独立行政法人化により、評価評価と言い出したとき、評価する側がBetheのような眼力を持ち合わせない限り、Wilsonタイプの研究者が生き残る道が閉ざされて行くのを危惧する次第である。

#### 参考文献

- 1) 根岸正光、孫媛、山下泰弘、西澤正巳、柿沼澄男、「我が国の大学の論文数と引用数　ISI引用統計データベースによる統計調査」、*学術月報* Vol. 53, No. 3, 258 (2000).
- 2) <http://www.isinet.com/>
- 3) A. Anderson *et al.*, in "Science in Japan," *Science* 258 (1992) p. 561.
- 4) 伊藤光男、「世界の歴史に無い研究機構に発展」、*文部科学教育通信* Vol. 1, No. 3, 20 (2000).

## 物理と化学の5研究所を跨ぐ “旧・新プログラム：科学研究費補助金（学術創成研究費）” 「新しい研究ネットワークによる電子相関係の研究 物理と化学の真の融合を目指して」がスタート！

電子構造研究系基礎電子化学研究部門 西 信之

茅所長のリーダーシップによって、高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所、東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所、京都大学化学研究所、そして分子科学研究所という物理と化学の5研究所が一体となって、研究ネットワークを構築し、物性物理学と物性化学の境界領域としての「多様な電子相関係物質科学研究」をスタートさせることとなった。5年間に10億円のプロジェクトであるが、その予算の主要部分は、物質構造科学研究所（物構研）を中心とする、コラボラトリーの構築に充てられる。これは、中性子やX線を用いた高精度の構造解析を各研究所からのリモートコントロールで行えないかという発想から始まった。また、ヒューマンインターフェースとして、5研究所にいるメンバー間で多対多間のリアルタイムの研究討論を行うためのネットワークの構築も目玉の一つである。このような新しい設備を中核として、我が国の物質科学の研究所が一体となってこのようなプロジェクトを遂行する意義は極めて大きい。

分子科学研究所では、点検評価を踏まえて将来構想委員会を中心として議論がなされ、物質関連の研究施設や研究部門の強化を図るためにE地区にその拠点を構築するという構想を持っている。これは、従来の物性化学の枠を越え、物質科学がこれから迎えるであろう新しい発展に対応したものでなくてはならない。錯体化学実験施設や関連領域研究系を包含した広い視野に立った物質科学の拠点形成と目指した展開は、研究所の主要な課題の一つである。物質

科学の発展は社会的にも大きな期待を寄せられており、分子科学研究所が様々な方策によって積極的に取り組む必要がある。このような時の中にあって、5研究所の研究プロジェクトがスタートできたのは、この流れを加速する大きな力となるであろう。リーダー構想案に記されたその内容を以下に紹介する。

物性物理学と物性化学が「実空間であれ運動量空間であれ、各々の旧来のやり方では表現できない電子系」を未開拓領域としてっており、精密化と専門化が進んだ2つの物性科学が、各々の個性を尊重しつつ、共通のターゲット持って協力・融合して、次世代の物質科学の基礎を支える新概念を構築することは緊急かつ極めて重要である。この目的を遂行するために物質科学研究に携わる研究・教育機関が緊密な連携関係を構築することが望まれる。将来的には、仮称「物質科学研究機構」のような大学・研究所をつなぐ組織の構築が適切と考えられるが、その大きな目標に向かっての第一歩としてわが国の物性科学に関連する五つの研究所（東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所、高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所、岡崎国立共同研究機構分子科学研究所、京都大学化学研究所）の分野を超えた協同体制を築く。この共同体制を真に実現するためには、現代IT技術の革命的発展に基づいた研究室間ネットワーク“コラボラトリー”の構築が不可欠である。新しい研究協力システムである“コラボラトリー”とは、各研究室の持つ資源（ブレイ



ン、ハードウェア、ソフトウェア)を研究ネットワーク上の研究室の間で共有化することにより、各研究室があたかも隣にあるかのような研究環境を提供するものである。その内容は、A：特殊大型装置の遠隔操作による共有化、B：高速ネットワークによる分散並列計算機システムの構築、C：多対多のヒューマンインターフェースシステムの構築、の3つからなる。

本研究では、以下のような役割をもつ五つの研究班を構成する。(1班)強相関物質班：新奇な物性を持つ多機能強相関電子系の創製を行う。(2班)複合ナノ構造物質班：ナノサイズ分子系および界面ナノ構造物質の創製、構造解析および機能制御を行う。(3班)構造・物性解析ネットワーク班：特殊大型実験装置の遠隔操作による研究室の枠を超えた物性評価システムを構築する。(4班)計算機ネットワーク構築班：各研究所のスーパーコンピュータの並列使用による巨大分散並列計算機の構築とそれによる強電子相関物質の機能設計を行う。(5班)ヒューマンインターフェース(HI)構築班：多対多の研究者間のネットワークによる緊密な協力体制を構築する。これら5班の班内、班間における物理と化学の融合、そしてコンピューターネットワークによる研究所の枠を超えた柔軟な新研究協力システム“コラボラトリー”の構築により、物性科学の新しい潮流を構築することが本研究の最大の目的である。

分子科学研究所からは、第1班に小林速男教授、田中晃二教授、筆者、井上克也助教授が、第2班に、

畠田博一助教授、佃達哉助教授が、第3班に、小林速男教授が兼務で、また、第4班と第5班に青柳睦助教授がメンバーとして参加している。また、分子研が事務を全面的に引き受けており、事務局秘書として鈴木優子さんが専念される。

## 大豆生田君のこと

米国自治領プエルトリコ大学博士研究員 池 上 努  
(前 理論研究系分子基礎理論第一研究部門助手)

はじめて分子研を訪れたのは、修士二年目の夏のことだから、もう十年近く前になる。琵琶湖での分子科学夏の学校に参加した後、美斎津さんに無理を言って、分子研を見学(見物か?)させてもらった。実験棟をひと渡り案内していただいたあと、西先生のお部屋にお邪魔してお話を伺った。強い感銘を受けたことを憶えている。その日は美斎津さんのアパートに泊めてもらった。結婚される直前のことだったと思う。今、思うに、ずうずうしい奴である。博士課程を分子研でとるシタゴコロもあったのだが、結局、エレベータ式に進学してしまった。ところがその三年後、分子研の、今度は理論系にやってくるのだからアラ不思議。そのまま六年、居座ることになるのだから世の中わからない。

ひと所に六年も暮していると、およそいろんなことが起きる。その中でも特に後味の悪かった思い出を書いておこう。主人公は大豆生田君という。大豆生田君は鳩である。名前はついさっき付けたところだ。彼にはじめて会ったのは、三年前の冬である。その前にも会っているかしのれないが、憶えちゃいない。当時、借りていた下宿は、建物に入っすぐの所が吹き抜けになっていて、高い所に明り取りの窓があった。大豆生田君はその窓の縁に越してきた。越しては来たものの、どうもそこが気に入らぬ様子である。しきりに窓に向かって体当たりしている。「すぐ下に出口がありますよん。」出掛け際にひと声かけてみた。

翌日。部屋を出ると、ばさばさ音が聞こえる。大

豆生田君である。二百三高地もかくやの突撃を繰り返している。不屈の闘魂である。がんばれ、大豆生田君。負けるな、大豆生田君。しかし所詮、鳩はハト。ガラスには傷ひとつ、付いていない。「こけてよるけて落ちてくるかも。」とりあえず放っというて、出掛けてしまう。冷たい奴だ。

鳥は弱ると膨らむというのは本当である。そのまた翌日、大豆生田君は前日比、約 1.2 倍に肥大している。こちらを向いたその姿は、まるでふくらまずめだ。思い出したように繰り返す体当たりにも力がない。二、三本、飛び出した羽も、憔悴感に彩りを沿えている。ことここに至ってようやく対策を考えた。しかし、いい考えが浮かばない。棒の先に籠をくくり付けて突き出してみたけれど、大豆生田君、おたおたと逃げ惑うばかりで、降りてこない。小一時間も振り回したら、目が回ってしまった。放り出して出掛けることにする。飽きっぽい奴だ。

その夜、帰ってきたら、もう動かなくなっていた。冗談の好きな大豆生田君のことである。死んだ振りをしているのかもしれない。だがもう二度と、体当たりをすることはなかった。

今、住んでいる所は鳩が多い。道に伸されて平べったくなっている奴もいる。そんな鳩を見ると、大豆生田君のことを思い出す。思えば間抜けな死に様である。けれども、そんな彼を嗤えない自分がそこにいる。



## 流動研究部門を去るにあたり

宮崎大学工学部教授 黒澤 宏  
(前 極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門教授)

今、考えても不思議な出会いから始まった。東岡崎駅前のレストランで夕食を取っているところに、主幹の宇理須教授が突然現れた。流動部門の教授を探しているが、引き受けてくれる人がいない。「黒澤さん、どう?」と言われても、「えッー?? 流動って、なに??」。それ以来、大学内での合意を取るのに、小規模な地方大学ならではの問題にぶつかりながら、伊藤前所長が学部長へ直接お話くださり、なんとか予定通りに事が運んだことは、今考えれば薄氷を踏む思いの1年間であったかもしれない。お陰で平成11年4月には、分子研での新しい研究生生活をスタートさせることができた。

分子研とのお付き合いは、機器分析センター、極端紫外光実験施設の利用を通じて歴史は古く、いろいろな方々との交友もあったので、見も知らぬ世界に飛び込む気はしなかった。また、施設の方々の暖かい励ましもあり、研究生生活も順調にすべりだし、大学における各種委員会や講義の責務から逃れ、研究三昧の生活は無事にスタートを切った。当人にとっては、突然舞い込んだサバティカルである。で、何をしよう? 折角、神が与えたもうた貴重な時間であるので、無為にすごしたくない。かといって、今までの研究を継続するのも能がない。2年後に戻る大学で、残る10年間に花開かせられるような新しいテーマの足がかりをつかむことをもくろんだ。幸いなことに、NEDOの助成事業による資金もあり、分子研での特別研究費をあわせて、ナノサイズの光物性に焦点を当てた研究に取り組むことにした。とは言っても、すぐに測定に取りかかることは出来ず、装置の設計から製作を始めたに過ぎなかった。

柳田君が、修士課程から博士課程に進学したこともあり、2年間の間に、ほぼ全容の装置が立ち上がり、当初の目標に向かってのスタートが切れたことは、幸いだった。また、この研究テーマとは別に、私が分子研に移る直前に竹添君が学位を取ったので、分子研のポストクに採用していただき、宇理須教授との共同研究として、放射光励起の表面反応装置と観測装置の立ち上げに参加させていただいた。細かい問題が山積みされた研究であり、思うように進まなかったことは、返すがえすも残念であったが、それなりに新しい経験を積むことが出来たことは、竹添君にとっても良かったのではないだろうか。

研究とは別のところで、忘れられないくらい楽しい出来事もあった。それは放射光学会の開催である。若い人たちと、わいわい言いながらの準備作業をおして、親しくなれたことは何事にも代え難い。加えて、放射光関係の研究者の方々ともお近づきになれたことも。講演会が無事にスタートしたことを見届けるやいなや、受付での佐々木泰三先生たちとのワインパーティーも忘れることは出来ないできごとである。遅ればせながら、所内でお手伝いいただいた方々に、この場をかりて感謝したい。

ところで、分子研に来て最高に良かったことは、今までに出会ったことのないような種類の研究者と親しくなれたことであろう。それは茅所長とUVSORの繁政助教授である。茅所長は雲の上のような方であると想像していたのだが、たまたま同じ日に赴任したことからか、当方から見れば、「何で?」と言いたくなるほど、親しくしていただいた。また、繁政助教授には、「研究は楽しまなくっちゃー!」の

言葉を身をもって教えてもらった気がする。常日頃、「研究は趣味」と思って生活してきたのであるが、その通りの人がいたっ！て、感じである。これからもこの言葉通りの生活が出来ればと思っている。最後に、研究所のみなさんの迷惑を顧みず、当方が勝手に親しくしていただいたと思っているのかもしれないが、これからもその思いこみのママに接させてください。どうかよろしく申し上げます。



## 毎週帰ることじゃ！

福井大学遠赤外領域開発研究センター助教授 福井 一 俊  
(前 極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門助教授)

大学の教官室で、まだ開けていないダンボールの山に囲まれながらこの原稿を書き始めました。たかが2年分の簡単な引越したと思っていましたが、いざ収納しようと思うと意外に量が多く、改めてこの2年の重さを感じさせてくれています。

さて、この2年間はUVSORを中心に活動させていただきました。施設ビームラインのBL7Bを担当させていただき、このビームラインの立ち上げの最終部分と整備及びユーザー対応を行いながら、他のビームラインも使わせていただくという放射光三昧の生活でした。

ところで、岡崎には単身赴任致しましたが、単身赴任歴連続20数年という大学のツワモノ教授から、“要は毎週帰ることじゃ”と言われ、まじめにもほぼ実行しました。おかげで、高速バスの常連となり（JRは高い！）他の常連を識別できるようになりました。しかし、彼らの年季を感じさせる乗りこなしは結局マスターできずじまいでしたが（ツワモノの中には、乗車中ずっと何かの資格試験の勉強をされている方がいて感心しました）、腰痛を避けたい私はひたすら寝ることにしました。乗ったらすぐ寝て、トイレ休憩もむやみに起きず、終点まで寝つづけるのが私の極意です。いかなる状況下でも（たとえシートが体に合わなくても）寝つづけることがマイスターへの道なのです。

最後にご負担を承知で流動に送り出してくださった大学関係者の方々、受け入れてくださった分子研の皆様方、そして単身赴任を可能にしてくれた愛する家族に心より感謝いたします。

## 感謝の2年間

愛媛大学理学部助教授 長岡伸一  
(前 極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門助教授)

このたび、3月31日をもちまして大過なく流動期間を終え、4月1日付で前任地の愛媛大学理学部に帰任いたしました。昭和60年から平成元年にかけての4年間に続き、2度目の2年間の在任中は大変お世話になり、誠に有難うございました。お蔭様にて研究においても日常においても充実した日々を送ることができました。

研究面においては、間瀬一彦さん(現在、Photon Factory)や田中慎一郎さん(現在、名古屋大学大学院理学研究科)に教えていただきながら、主としてUVSORのBL2B1ビームラインで電子・イオン同時計数装置を用いて表面上での内殻電子励起によって引き起こされるサイト選択的な解離の研究を行いました。サンプルはSi(100)表面上に吸着したCF<sub>3</sub>CD(OH)CH<sub>3</sub>で、単層吸着と多層吸着の相違、温度変化などからサイト選択性に付いて興味深い結果を得ることができました。流動期間中に行った東京大学物性研究所の吉信淳先生のグループとの共同研究であるHREELSの結果とまとめて論文にする予定です。また、気相における電子線励起による新しいタイプの電子・イオン同時計数装置を開発中でして、愛媛大学で研究を継続いたしますので、今後ともご指導くださいますよう、どうかよろしくお願いたします。間瀬さんが栄転した後の同時計数装置担当、田中さんが栄転した後のBL2B1のビームライン担当、UVSOR安全委員、分子科学研究所研究会世話人の経験は、大変勉強になり、今後に大いに役に立つと思います。

在任中、技官や事務の皆様のしっかりした研究サポート体制には大いに助けられました。特に、UV

SORの中村永研さんにはビームラインの整備や保守で大変お世話になりました。研究所でのルームメイトである佐々木時代さんをはじめ秘書の方々のサポートで事務処理を円滑に進めることができました。

帰任いたしました愛媛大学は医学部、工学部などの「実学」が主体であり、理学部でさえ学生は純粋に学問的な面白さよりも「研究が何の役に立つか」を大いに気にしていますし、教員免許が取れることが入学の大きな動機の一つになっています。そこから分子科学研究所のような「高等学術研究機関」に来るとまったく異なった雰囲気(真理の探求へのひたむきさ)を感じました。今後、このような雰囲気をそのまま継続すべきなのか、それとも時代とともに変質していくべきなのか、現在問われていると思います。個人的には、年齢的なものから、そうした研究所の雰囲気に郷愁を覚えますが、今後の皆様の判断が益々重要な意味を持ってきていると思います。

最後になりましたが、2年間大変お世話になった伊藤光男前機構長をはじめ岡崎国立共同研究機構の皆様、茅幸二所長をはじめ分子科学研究所の皆様、特に宇理須恆雄主幹をはじめ極端紫外光科学研究系の皆様と小杉信博施設長をはじめUVSORの皆様、留守中お世話になった愛媛大学理学部物質理学科化学系の皆様に心から感謝いたしますとともに、皆様のご健康と分子科学研究所の益々のご発展をお祈りいたしまして、お別れの言葉に代えさせていただきます。有難うございました。



## Getting Acquainted With IMS

Heiko Hocke

My name is Heiko Hocke. I am a JSPS postdoctoral fellow and currently a member in the group of Professor Yasuhiro Uozumi/ Coordination Chemistry. I arrived in Japan nine months ago. Herein I want to tell about my experience with the Institute for Molecular Science. But in order to tell properly I should start with the very beginning that means before my arrival in Japan.

Previously I had joint as a postdoctoral fellow the group of Prof. B. Giese in Basel/ Switzerland. At this time my work was connected with radicals and peptides. But my research interests moved on to asymmetric catalysis, especially solid supported catalysts. From a labor mate in Basel I heard about the work of Prof. Uozumi — and shortly after that a contact was established. He invited me to join his group as a postdoc giving me the opportunity to gain experience in this field of — after all — black box chemistry.

After approval of my fellowship by JSPS I learned that I need a visa for my period of stay in Japan. This is normally a very time consuming process (about 3 months) unless someone has a so called ‘Certificate of Eligibility.’ I wrote my ‘problem’ to Mrs. Aimi Nishimura (secretary of the group) and got promptly not only the certificate, but also a lot of written confirmations for every thinkable reason and question. The Japanese Embassy in Switzerland issued the visa then in two days.

Mrs. Nishimura also informed me by e-mail that the IMS is able to provide accommodation for foreign

visitors. She was so kind to arrange everything. In fact, when I arrived in Japan, all necessary things had been settled already and I had not to look after anything at all. In the first week Mrs. Hisayo Nagasono (secretary for foreign affairs) took me to all the government offices doing the unavoidable bureaucracy. Maybe this is Japanese style but I was really surprised about the good organization and unconventional handling. I am very thankful to both Mrs. A. Nishimura and Mrs. H. Nagasono for making my start in Japan so easy and I want to use the chance to say thank you to both of them.

I think this example from my starting time at the institute shows not only how well experienced the IMS administration and staff are with the needs and problems of a new arrived ‘gai koku jin’ but also how efficiently things are handled.

Since my beginning I found the atmosphere at the IMS is both stimulating and encouraging. One reason is surely the state of the art equipment available, which makes research very enjoyable, but more important are the people working here. I experience much support, which I need the most in subjects related to information of any kind, since I am not able to understand or read Japanese, from my coworkers. Particularly, I have to thank my host, Prof. Y. Uozumi, and all the members of his group for the hearty and warmly welcome as well as for their constant voluntary and gratuitous help.

A complete different aspect of the IMS is its

multicultural environment. People from many different nations (U.S., China, S-Korea, Hungaria, Russia ...) and cultural background are living on the campus-like area in Mishima Lodge or Yamate Lodge creating a unique pot-pourri. It allows a deep and fast inside to strange custom (at least strange to me), religions and world view not as a tourist, but as a neighbor and friend. Especially at the beginning it did profit me in another area of living too, because it was the fastest way to learn about good shopping centers, historical sites for viewing, sport activities, upcoming events in Okazaki and all the small things that make daily live easier and which helped me to integrate in social live.

Besides all this, the kindness and hospitality of many people living in Okazaki, for instance people from the OIA and from the Rotary Club, are a huge help to get adjusted and make me feel almost at home.

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、異原子ドーピング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)

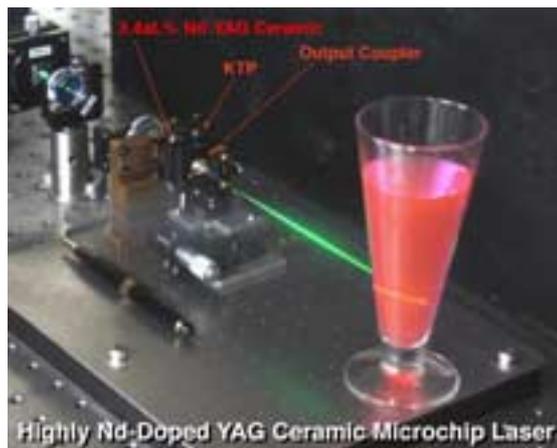
赤阪健教授は、“フラーレン球面の外側および内側の化学”の基礎研究として、フラーレンおよび金属内包フラーレンの分子構造と物性の解明を行い、この分野に画期的な新展開をもたらしました。フラーレンは空洞閉殻構造を持つ炭素多面体分子です。フラーレンは、その特殊かつ新規な分子構造に由来する種々の物理的、化学的特性を示す新かご状炭素素材として非常に魅力ある物質であり、多彩な研究が展開されています。その中において、赤阪教授はフラーレン球面の外側へのケイ素基の導入法を初めて確立し、種々の誘導体の興味ある構造の解明、新しい電子的特性の付加を行いました。また、ストラティファイド素材として注目されるフラーレン球面の内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  $\mu\text{m}$ 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:YVO<sub>4</sub>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。格子上の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、その後多くの人がこ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)

分子基礎理論第一研究部門（極端紫外光研究部門）

Prof. SKODJE, Rex T.

電子状態動力学研究部門（分子エネルギー変換研究部門）

Prof. DE LANGE, Cornelis A.

物性化学研究部門（分子エネルギー変換研究部門）

Prof. SWIETLIK, Roman

## Prof. SKODJE, Rex T.

Skodjeさんは現在 Boulder, Colorado のコロラド大学化学及び生物化学科の教授です。1955年 North Dakota 州の生まれ、ハーバード大学物理学科の卒業ですが、学位はミネソタの Truhlar 教授の下で化学物理で取得されています。学位取得後は Boulder で Reinhardt 教授の下で PostDoc をやられ、1984年コロラド大学の Assistant Professor になられ、1998年から教授と言う訳です。色々な awards と fellowship を受けておられますし、今迄にアメリカ国内のいろいろな場所、スペイン、台湾などに客員として滞在された経験をも有しておられます。ご先祖はノルウェーの出身だそうです。そう言えば、面影にそんなところが伺えます。この度は、大学のサバティカルを利用して分子研客員教授として平成13年4月から12月末まで滞在されます。研究分野は、ご存じの方も多いと思いますが、気相化学反応の理論、量子カオス、単分子動力学、分子内及び分子間振動エネルギー移動、半古典動力学、非線形動力学、表面過程のキネティックス、及び気相キネティックスと広い分野に亘っています。クラスター等のナノ構造

のキネティックスにも興味を持っておられます。反応動力学では、最近、共鳴現象の役割についての興味ある研究を活発に展開されています。例えば、 $F + HD$ 系の低エネルギーの反応断面積に共鳴のピークが生きている事を理論的に確認され、実験とも符合する結果を得ておられます。分子研滞在中には主にこのような化学反応動力学の分野で我々との間で良い協力研究が出来ればと思っています。我々の非断熱遷移の理論にも大変興味を持っていただき、その反応動力学等への応用も視野に入れて現在議論を進めています。実験の方やいろいろな分野の方との討論・協力にも興味があります。また、最近の応用重視の風潮には批判的で基礎学術の重要性を説いておられます。

この紹介記事を書くに当たって趣味は何ですかと伺ったところ、今は趣味に使える自由な時間が殆どないとのことでした。研究が忙しいのと、新しい奥様が時間を取ってしまわれるとか！ 御馳走さまです！ 因に、新しい奥様とは、若い綺麗な大阪出身の日本人の方です。今年の11月には日本で二世誕生の予定とか。大変おめでたいことです。所で、趣味ですが、ゴルフをすることおよび国際的な映画を鑑賞することだそうです。日本滞在中には、日本



語を少しはマスターしたいとおっしゃっています。

Good luck!!

(中村宏樹 記)

## Prof. DE LANGE, Cornelis A.

de Lange教授はチューリップと風車の美しい国、オランダはアムステルダム大学から来られた大変穏和な紳士です。御専門は光電子分光実験で、特にPFI-ZEKE(パルス電場イオン化しきい光電子分光)と磁気ボトル(オランダ原子分子研究所で開発された、高性能飛行時間光電子分光装置)を用いた詳細な分光研究で世界的に著名な研究者です。分子研ではナノ秒レーザーを用いたZEKEの研究者として木村克美名誉教授や藤井正明教授がおられ、日本人研究者にも友人の多い方ですが、今回は私達の研究課題である、フェムト秒時間分解光電子画像観測法に御興味をもたれ来日されました。de Lange教授御自身もピコ秒レーザーを用いた時間分解光電子分光の開拓的な研究を行った御経験があり、私達の研究の良き理解者の一人です。

de Lange教授はアムステルダム大学で実験物理と数学を修めた後、英国Bristol大学でBuckingham教授の指導の下で、“Nuclear Magnetic Resonance in Oriented Molecules”の研究によって学位を得られました。その後、Shellの研究所での気相における遊離基のEPRの研究を経て、アムステルダム自由大学に移り、溶媒のNMRと遊離基の光電子分光の研

究を進められました。1988年からアムステルダム大学で物理化学を教えておられ、レーザー分光特に小さな遊離基の光電子分光を研究しておられます。理論、実験、磁気共鳴、レーザー分光と幅広い活躍をしておられますが、分子科学の基礎をしっかりと追求する研究姿勢が印象的な研究者です。現在、ヨーロッパ連合の研究プログラム、「燃焼と大気化学に重要な反応中間体に関する実験研究」を指揮し、マネジメントの面でも活躍しておられます。

今回、岡崎には外国人客員教授として5-7月の3ヶ月滞在します。昨年から新しく始まった、分子研課題研究のプログラムで比較的短期の滞在ですが、私達二人とカリフォルニア工科大学のVince McKoy教授、東大の高塚和夫教授が協力して、理論実験両面から時間分解光電子分光の開拓的研究を行う計画です。ご家族は奥様と二人のお嬢様がおられ、奥様(Annetteさん)は5月上旬来日され2週間ほど日本の生活を楽しまれました。学問を愛する優しい方ですので、気軽に声をかけてみてください。

(鈴木俊法 記)

## Prof. SWIETLIK, Roman

スヴェトリク教授は平成13年8月から6ヶ月間分子研外国人客員教授として滞在予定です。所属はポーランド科学アカデミー分子物理学研究所です。この研究所は科学アカデミーがポズナム市郊外に建設した分子性固体の研究を行う研究所で、森に囲ま

れた閑静な場所にあります。因みにポズナムはワルシャワとベルリンの間にある人口約60万人の都市です。スヴェトリク教授は1970年代後半より分子性導体の分光研究を開始し、TCNQ塩、TMTSF塩、BEDT-TTF塩と一貫して分光学を用いた分子性導体の物性研究に携わっています。最近では共鳴ラマン散乱を用いたBEDT-TTF塩の先駆的な研究を行っています。この間プタペスト物理学中央研究所、マックスプランク研究所、チェコ物理学研究所、ポール・パスカル研究所、北京化学研究所に客員研究員として勤めています。また1998年からは分子物理学研究所の副所長として多忙な研究生生活をおられます。

スヴェトリク教授とは別刷りの交換などを以前から行っていましたが、最初にお会いしたのは1997年夏ポズナムの近くの保養地プスチコボで行われた国際会議の時です。その後、1998年モンペリエで開かれたICSM98、1999年ポーランドとチェコの国境にあるスクラルスカ・ポレバで開かれたERPSO-8、1999年オックスフォードでのISCOM99と毎年会っています。中でもICSM98が一番印象に残っています。モンペリエで開かれたこの会議では広大な牧場でバンケットが催されましたが、そこでフランス式闘牛を見物する機会がありました。円形の闘牛場に牛を放つのはスペインと同じですが、人間が闘牛場を走り回って牛を挑発しては塀に攀じ登って逃げるのです。最初は牧場の人々が挑発役をやっていたのですが、一般の人も飛び入りで中へ入る事を許されました。何人かの会議参加者が中に飛び込みましたが、その中の一人にスヴェトリク教授がい

ました。余談ですが、このとき闘牛場に飛び込んだ幾人かのうち3人が分子研に来たことのある人でした。

まだ赴任前ですが、こちらでの研究計画についてメールの交換を行っています。東工大の森研究室との共同研究で、 $(\text{TMM-TTP})_3$ という物質の金属・絶縁体相転移に伴う電子状態の変化を赤外分光法とラマン分光法を用いて解明する事を計画しています。6ヶ月という短い期間ですので、上記物質と関連物質を森研より提供していただき、この問題を解決するための実験を迅速に行いたいと話合っています。また来日時期が8月ですので、夏休みを利用して奥方とお嬢さんが短期間岡崎に滞在する予定になっています。

(薬師久彌 記)



## MANDAL, Debabrata

極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門 学振外国人特別研究員

Graduated from the Indian Association for the Cultivation of Science (2000). Ph.D. thesis: "Solvation dynamics and other ultrafast processes in organized media." Since November 2000, I have been a JSPS post-doctoral fellow in the group of Prof. T. Tahara at IMS.

My research interests are focussed mainly on the laser spectroscopic study of a variety of ultrafast photophysical processes (in the pico- and femtosecond time scales) in homogeneous solutions as well as in restricted environments like biomolecules, macromolecules, supramolecular assemblies and nanocages.



## SKODJE, Rex T.

極端紫外光科学研究系極端紫外光研究部門 客員教授  
(理論研究系分子基礎理論第二研究部門 中村グループ)

I graduated from Harvard University with a BS in physics in 1978. After a brief stay at the University of Texas where I studied high-energy physics, I moved to the University of Minnesota and received a Ph.D. in chemical physics in 1983. My graduate studies, supervised by Professor Donald Truhlar, focused on tunneling in chemical reactions. In 1983, I accepted a postdoctoral position with Professor William Reinhardt at JILA, and we worked on development of the adiabatic switching method for semiclassical quantization. In 1984, I assumed a position as Assistant Professor in the Chemistry Department at the University of Colorado in Boulder, which has been my permanent home institution ever since. In 1998, I became a Full Professor in the Chemistry Department. I also have affiliations with the Department of Applied Mathematics and the Center for Complexity at the University. I have held visiting positions at Argonne National Laboratory, Los Alamos National Laboratory, Autonoma University (Madrid), Academia Sinica (Taipei), Institute for Theoretical Physics (Santa Barbara), Institute for Theoretical Atomic and Molecular Physics (Harvard), and the Cornell Center for Applied Mathematics.

My research interests cover a range of topics in the area of molecular dynamics and chemical kinetics. I am interested in problems arising in chemical reaction dynamics, molecular spectroscopy, surface kinetics, thin films, and gas phase reaction kinetics. My group employs theoretical techniques including quantum scattering theory, wave packet dynamics, semiclassical theory, nonlinear dynamics, Monte Carlo simulations, and classical trajectory simulation. I am especially eager to interact with experimental groups to produce physical understanding of laboratory results.





### HUDECEK, Jiri

分子構造研究系分子動力学研究部門 文部科学省招聘外国人研究員

プラハのカレル大学化学科で物理化学を専攻。卒業後、兵役、スロバキアの放射線及び応用原子力研究所の研究員を経てカレル大学の物理化学の助手となった。1年間務めた後、同大学の生化学科の助手に移った。そこで助教授になり現在に到る。これまでチトクロムP450というヘム酵素の構造と機能を分光学的に調べてきた。本研究所では、ヘム部分はP450と似ているが機能の異なる、NO合成酵素の共鳴ラマン分光の研究をする。



おか もと ひろ み  
岡 本 裕 巳

分子構造研究系分子構造学第一研究部門 教授

東大の博士課程を中退し1985年から分子科学研究所助手を5年務めた後、東大助手、助教授を経て、2000年11月より分子研に舞い戻ってきてしまいました。10年前とは分子研も岡崎もだいぶ変わりましたが、以前お世話になった数名の教官・技官・事務官の方々と再会できたことを、大変嬉しく思っています。ときどき楽器がうるさいかもしれませんが、大目に見てやってください。出張演奏承ります(!?)。



おか もと きちこ  
岡 本 佐知子

分子制御レーザー開発研究センター 事務補佐員

平成12年12月よりレーザーセンターでお世話になっております。科学とは無縁の私ですが、分子研という環境のもと多くのことを学んでいけたらと思っております。まだまだ分からないことばかりで、皆さまにはいろいろとご迷惑をおかけしますが、どうぞよろしくお願いたします。



みなみほうじょう はる な  
南坊城 春 奈

分子集団研究系物性化学研究部門 事務補佐員

大阪府立大阪女子大学卒業。学生時代は金属薄膜の物性研究をかじりました。分子研で物性化学部門の事務補佐員の仕事をさせていただく中で、みなさんのお話を聞きながら物性研究の多様性と深遠さに多少なりとも触れることができ、日々楽しく生活しております。今後ともご指導並びにご鞭撻のほど、よろしくお願致します。



なが せ しげる  
永 瀬 茂

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 教授

大阪大学大学院博士課程修了後、ロチェスター大学博士研究員、オハイオ州立大学博士研究員、分子研技官、横浜国大助教授、同教授、都立大教授、同大学院教授を経て、平成13年4月に着任しました。幾つかの異なる場所で研究や教育を経験してきましたが、分子理論と分子計算に興味をもっています。現在新しい環境に慣れるのに奮闘しています。よろしくお願いたします。





ふるかわ こうじ  
古川 貢

分子構造研究系分子動力学研究部門 助手

平成13年3月大阪市立大学大学院理学研究科で学位を取得。同年4月より助手として加藤立久助教授のグループでお世話になります。これまでは、磁性集合体（強磁性薄膜，分子性磁性体）の共同的磁気特性をESRをもちいて研究してきました。こちらではW-band ESRのメリットを最大限に生かした研究をしたいと思っています。よろしくお願ひします。



ふじやま しげき  
藤山 茂樹

分子集団研究系物性化学研究部門 助手

2001年3月東京大学大学院理学系研究科修了後、4月より現職。学生時代は核磁気共鳴法をもちいて銅酸化物伝導体の電子物性の研究を行ないました。現在は中村敏和先生のもとで、磁気共鳴法を用いた有機導体の電子物性の研究に取り組んでいます。無機物と有機物では電子相関を決定づけるパラメーターの大きさの違いから物性が大きく異なり、同じ磁気共鳴法でも見え方が全く異なってきたりして、僕にとっての新奇な現象を楽しんでいます。



やまのい よし のり  
山野井 慶徳

錯体化学実験施設錯体触媒研究部門 助手

平成13年4月より錯体化学実験施設・錯体触媒研究部門に助手として着任をいたしました山野井慶徳でございます。私はこれまでに4つの研究室にて研鑽を積んで参りました。この度、分子科学研究所に着任して5つ目の研究室となりました。現在は、効率良く分子変換を行うことができる新規な化学種の開発などに興味を持っており、任期修了までには何とか一つの新分野を築いていきたいと思っております。



わだ たかひろ  
和田 亨

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 助手

平成13年3月総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程修了。4月より錯体化学実験施設錯体物性部門田中晃二教授グループの助手に着任いたしました。助手としては新参者ですが、分子研での研究生生活は4年目となります。現在は錯体化学の分野を中心に研究を行っていますが、分野にとらわれない自由な発想を身につけ、自分ならではの科学を見つけ出したいと思ひます。よろしくお願ひします。



まつ お つかさ  
松 尾 司

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 助手

この4月から川口博之先生のグループで研究しています。よろしくお願ひします。平成11年3月筑波大学博士課程化学研究科修了。学振特別研究員を経て同年6月より筑波大学化学系（先端学際領域研究センター）助手。これまでは有機ケイ素化合物のアルカリ金属錯体の研究をしていました。今後は周期表を広く見据えた錯体化学を展開したいと考えています。趣味は音楽です。出身は北海道です。



こみやま まさ はる  
小宮山 政 晴

極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門 教授

1972年に沼津高専を卒業して以来、静岡大学工学部、東北大学大学院、カリフォルニア大学バークレー校大学院、コーネル大学大学院と、学位をとるまで4つの大学をわたりあるきました。1980年に東北大学工学部に就職し、山梨大学教育学部、工学部を経て、今年度より2年間分子研にお世話になることになりました。工学系の出身で、理系分野との近接遭遇はバークレーのCollege of Chemistry以来ですが、このような異分野遭遇のなかから新しいものが生まれることを願っています。



おく たいら こう し  
奥 平 幸 司

極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門 助教授

1988年3月名古屋大学博士課程修了後、日本学術振興会特別研究員、IMSフェローを経て1991年名古屋大学理学部助手、1993年千葉大学工学部へ転任、1998年同大学自然科学研究科助教授。4月に流動部門に着任しました。有機薄膜の表面および界面の物性に関する研究を行ってきました。分子研はIMSフェロー時にいろいろお世話になったところであり、とても懐かしいです。多くの研究者からいろいろな刺激を受けることができる環境を十分に生かして研究を行っていきたく、考えています。分子研ではUVSOR-BL8B2で主に実験をおこないますのでよろしくお願ひします。



くほその よし ひろ  
久保園 芳 博

極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門 助手

九州大学大学院理学研究科博士課程（化学専攻）修了。学振の特別研究員を経て、岡山大理学部で助手をやっていました。本年4月に界面分子科学（流動）研究部門の助手として赴任して参りました。これまで、フラーレン系物質の構造・物性を放射光を用いたX線吸収およびX線回折と、他の分光学的手段や輸送測定により研究してきました。本部門では、フラーレン・ナノチューブ系をベースにしたナノメータサイズの科学を展開する予定です。よろしくお願ひいたします。





ちえー 崔 隆 基

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 非常勤研究員

平成13年3月に東京大学工学部の博士課程を修了し4月からIMS Fellowとして働かせてもらうことになりました崔と申します。出身は韓国で来日して今年で4年目です。今までは理論の開発及びポルフィリン系化合物の研究をしてきました。化学の興味深い問題を理論及び実験とのインタープレイによって解いていきたいと思えます。よろしくお願ひします。



ふじ さき ひろ し

理論研究系分子基礎理論第二研究部門 非常勤研究員

平成13年3月東京大学大学院理学系研究科博士課程を修了し、現在、中村研究室にお世話になっている者です。博士課程では「非断熱遷移における多次元効果」という問題を研究していました。中村研でも引き続き、非断熱遷移の研究や、それを生かした多次元多電子状態系のコントロールの問題に取り組みたいと思っています。趣味はジャズ、ボサノバ、売れ線狙いでないポップスなどを聞くことです。よろしくお願ひいたします。



と やま なみ き

分子構造研究系分子動力学研究部門 非常勤研究員

平成13年3月に東京工業大学理工学研究科博士課程を修了し、4月から現職。これまでは常磁性金属を含む超分子系の光励起緩和過程の研究を行ってきました。分子研では加藤先生のもとで磁気共鳴による金属フラレン包摂錯体の磁氣的性質の解明を中心に研究を行っています。休日には大学時代に始めたアルトサックスの練習場所を探索中です。どうぞよろしくお願ひします。



まつもと た き

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

平成11年3月に信州大学大学院工学系研究科博士後期課程を修了後、横浜の旭硝子株式会社に2年間勤務し、11年ぶりにこのような形で実家のある岡崎に戻ってくる事となりました。分子研では、新たな光触媒系の構築を目標とした研究を行います。毎朝、母校岡崎高校の制服を懐かしく眺めつつ、当時のような新鮮な気持ちで仕事に臨んでゆければと思っております。宜しくお願ひいたします。



しら さわ のぶ ひこ  
白 沢 信 彦

分子物質開発研究センター分子配列制御研究部 非常勤研究員

昨年12月に東京工業大学総合理工学研究科で学位を取得し、3月まで東工大・資源化学研究所で学振の博士研究員として勤務した後、4月より鈴木敏泰先生のグループでお世話になっています。鈴木グループでは有機EL素子や、トランジスタに用いる有機半導体の合成研究を行っています。自他共に認めるサッカージャンキー。トトの当り、お教えします。皆様、どうぞよろしくお願ひ致します。



しば とみ かず たか  
柴 富 一 孝

錯体化学実験施設錯体触媒研究部門 非常勤研究員

平成13年3月名古屋市立大学大学院薬学研究科博士後期課程修了。同4月より魚住研究室でお世話になっております。水中不斉有機合成の開発研究を行っております。どうぞ宜しくお願ひします。



やま ぐち つよし  
山 口 毅

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 リサーチ・アソシエイト  
(理論研究系分子基礎理論第四研究部門 平田グループ)

私は平成12年7月に京都大学大学院理学研究科化学専攻(廣田研)で博士号を取得し、平成13年まで京都大学化学研究所(中原研)で日本学術振興会特別研究員として研究を行ってまいりました。今年4月から、分子研平田グループで、分子性液体の輸送現象に関する理論的研究を行う予定です。よろしくお願ひします。



こ すぎ けんたろう  
小 杉 健太郎

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

平成9年九州大学理学研究科修士課程修了。平成13年総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程修了。4月から、引き続き、西先生の下で研究を行うことになりました。これまでは、芳香族分子やカルボン酸のクラスターについて研究してきましたが、今年度以降は、遷移金属を含んだクラスターについて、研究を行います。より幅広い知識を習得し、新しい世界を切り開けるよう努力したいと思います。今後も、よろしくお願ひします。





さい とう すすむ  
斎 藤 晋

理論研究系分子基礎理論第三研究部門 客員教授

専門は物性理論です。密度汎関数法を中心に、研究対象と目的に合わせた種々の研究手法を用いています。研究対象は、主にクラスター・フラーレン・ナノチューブとそれらの固体相です。物性解明のみならず、新物質設計を視野に入れた研究を進めています。励起状態を記述する手法も研究中です。分子研では、普段の東工大キャンパスから離れる機会に、新たな研究展開を目指します。



しも い ゆき ひろ  
下 位 幸 弘

理論研究系分子基礎理論第三研究部門 客員助教授

本務先は産業技術総合研究所というこの4月にできた研究所で、つくばに勤務しています。私は、京都大学理学研究科を修了の後、科学技術特別研究員を経て、電子技術総合研究所に入所しました。電総研を含む工業技術院の研究所が統合、独立行政法人化してできたのが産総研です。これまで、主に導電性共役高分子などの低次元電子系の電子、光物性に関して理論的に取り組んできました。この機会に、いろいろな方とdiscussionやcollaborationができればと思っております。よろしくお願いいたします。



あ く つ ひで お  
阿久津 秀 雄

分子構造研究系分子構造学第二研究部門 客員教授

昭和47年東京大学大学院理学系研究科生物化学専攻博士課程単位取得退学、同年大阪大学蛋白質研究所助手、昭和60年横浜国立大学工学部助教授、平成3年より教授、平成12年大阪大学蛋白質研究所教授。溶液および固体NMRを用いて、生体エネルギー変換系、情報変換系タンパク質の構造と機能の関連について研究している。



か とう れい ぞう  
加 藤 礼 三

分子集団研究系分子集団研究部門 客員教授

1984年に東京大学大学院理学系研究科博士課程を修了。その後、東邦大学理学部化学科（小林速男先生の研究室）の助手・講師、東京大学物性研究所の助教授を経て、1999年より現職（理化学研究所分子物性化学研究室主任研究員）。大学院の修士課程まではヘテロポリ酸のNMRや結晶構造解析を行っていましたが、博士課程から分子性電気伝導体の開発研究を始め、現在に至っています。



## 小川 琢 治

分子集団研究系分子集団研究部門 客員助教授

大阪府生まれ。京都大学博士課程を修了後、愛媛大学理学部、九州大学有機化学基礎研究センターを経て再び愛媛大学理学部に戻り、現在に至っています。1999年から科技団さきがけ研究者を兼任、2000年から郵政省通信総合研究所職員を併任しています。バルクで見える有機物の物性が、単分子ではどのようなものだろうと言う点に興味があり、有機合成、ナノリソグラフィー、SPMで対象に迫りたいと思います。



## 堀 洋一郎

極端紫外光実験施設 客員助教授

名古屋大学工学研究科博士課程を修了、1987年より高エネルギー加速器研究機構放射光原研究系で光源リング(PF)の真空を担当しています。放射光施設にとっては最先端の実験研究に直結する性能向上が急務の趨勢にあり、スタッフの方々と協力してUVSOR高度化のための改造、開発研究に取り組む所存です。PFの高輝度化以来またまた加藤政博先生に扱き使われることになりましたが、目標は勿論PF以上(ちと小さいか?)です。



## 時 任 宣 博

錯体化学実験施設配位結合研究部門 客員教授

宮崎県出身。大学は博士課程修了まで東大。その後、筑波大、東大、九大を経て、平成12年4月より京大化研勤務。高周期元素を含む新規な結合様式の化学(平たく言えば重い元素の化学)を研究しています。決して全国を網羅する気はないのですが、この度縁あって今までに経験のない中京地区の分子研にお世話になることになりました。これまでの勤務先同様、人との出会いを大切に、研究交流の中から新しい研究分野の開拓ができればと期待しております。



## 鬼塚 清 孝

錯体化学実験施設配位結合研究部門 客員助教授

平成4年大阪大学大学院理学研究科博士後期課程修了。大阪市立大学工学部助手、同講師、大阪大学産業科学研究所助手を経て、平成10年より同助教授、現在に至ります。専門は有機金属化学で、特に有機金属錯体を利用した高分子合成に関する研究を中心に行っています。趣味は山歩きですが、最近はおっぱら家族と麓でのキャンプを楽しんでいます。よろしくお願ひします。





きのした かず ひこ  
木 下 一 彦

統合バイオサイエンスセンター 教授

生まれは豊川市ですがすぐ引っ越しました。1974年東京大学理学系大学院単位取得退学。学振奨励研究員、東大研究生、米国ジョンスホプキンス大学医学部ポスドク、理化学研究所研究員、慶應義塾大学理工学部教授を経て今年4月から三河人になりました。といっても建物ができるまで川崎で研究を続けます。一分子生理学（光学顕微鏡下でたんぱく質分子機械の働く仕掛けを探る）を目指しています。趣味は皮肉・嫌みと読漫画、スキー。横浜に妻1人男子3人。よろしく願いいたします。



よし おか し ろう  
吉 岡 資 郎

統合バイオサイエンスセンター 非常勤研究員

（関連領域研究系関連分子科学第一研究部門 渡辺グループ）

平成13年3月に京都大学大学院工学研究科博士課程を修了し、この4月より渡辺芳人教授のもとで研究を行っております。学生時代から分子研で実験をさせていただいたことがあり、静かな雰囲気の中で研究に没頭することに慣れていました。現在はその思いが果たせて大変満足ですが、逆に働きすぎて自分を見失わないよう、マイペースで努力していこうと考えております。

ちなみに、欧州の機械類（カメラ、バイクなど）が好きです。



おお た たけ ひろ  
太 田 雄 大

統合バイオサイエンスセンター 非常勤研究員

（分子構造研究系分子動力学研究部門 北川グループ）

平成12年3月、京都大学大学院工学研究科分子工学専攻博士後期課程修了。平成13年3月まで、日本学術振興会特別研究員（PD）。2月から統合バイオサイエンスセンター、北川研究室にてお世話になっております。これまでは、金属酵素の触媒反応機構について、量子化学的および錯体化学的に研究してきました。これからは、タンパク質高次構造変化によるアロステリック効果の発現や情報伝達機構について、時間分解共鳴ラマン散乱により研究してゆく予定です。自分の生涯の研究目標を定められるように努力したいと思います。よろしく願い申し上げます。



ま き じゅん  
真 木 淳

計算科学研究センター 非常勤研究員

平成11年3月、北海道大学大学院理学研究科博士課程修了後、金沢大学の博士研究員を経て、4月1日から電子計算機室の青柳先生のグループでお世話になっております。密度汎関数法を用いて反応のダイナミクスや励起状態の研究を行っていきつもりです。音楽を聞くのが好きで特にチャイコフスキーや70年代のものをよく聞きます。どうぞよろしくお願い致します。



り 李 すよん 秀 栄

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 学振特別研究員

平成13年3月に立教大学大学院理学研究科を修了し、4月から学術振興会特別研究員として永瀬茂先生のもとで研究をさせていただいています。主に、水和クラスタの構造や反応性に関する研究を量子化学的手法を用いて行っています。分子研に来て以来、毎日とても貴重な時間を重ねています。素晴らしい環境を生かし、楽しく良い研究をしていければと思います。今後ともよろしくお願い致します。



おおつか わだ あきら 大塚 (和田) 章

統合バイオサイエンスセンター 学振特別研究員

( 相関領域研究系相関分子科学第一研究部門 渡辺グループ )

平成13年3月に名古屋工業大学大学院博士後期課程修了。同年4月より渡辺芳人教授のもと、学振特別研究員として研究に励むこととなりました。これまでは金属酵素モデル研究における遷移金属 - 活性酸素錯体の構築と機能発現について研究を行ってまいりました。分子研では、より広い視野と深い専門的知識や技術を身に付けられるよう精進したいと考えております。どうぞ宜しくお願い致します。



こ いずみ たけ あき 小 泉 武 昭

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 科学技術振興事業団派遣職員

平成10年3月東京工業大学大学院総合理工学研究科博士課程修了、理化学研究所・基礎科学特別研究員を経て4月1日よりCREST研究員として田中晃二教授のグループでお世話になっています。これまでは触媒反応に関連したd - ブロック、f - ブロック遷移金属錯体の構造および反応性に関する研究を行ってきました。分子研では金属錯体による二酸化炭素の還元的活性化に関する研究を行う予定です。今後ともよろしく申し上げます。



おお つ ひで き 大 津 英 揮

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 科学技術振興事業団派遣職員

平成13年3月に大阪大学大学院工学研究科博士課程を修了し、この4月から科学技術振興事業団の研究員として田中晃二先生の所でお世話になることになりました。恵まれた環境の中で様々な研究に耳を傾け、多くの方々と交流し、自らの研究の幅を拡げてゆきたいと思っております。皆さんにいろいろとお世話になるかと思いますが、その際にはどうぞ宜しくお願い致します。





ふじ はら てつ あき  
藤原 哲 晶

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 科学技術振興事業団派遣職員

滋賀県出身。平成13年北海道大学大学院理学研究科博士課程修了。4月から田中晃二先生の研究室でお世話になっています。これまではモリブデンポルフィリン錯体の研究を行ってきました。分子研では“役に立つ金属錯体”の合成を目指した研究を始めています。設備の充実した環境で、多くのことを吸収したいと考えています。機構のサッカー部“ラジカルズ”に入部しました。よろしくお願いいたします。



つづ い かな こ  
筒井 香奈子

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 科学技術振興事業団派遣職員

平成13年3月日本大学大学院総合基礎科学研究科博士前期課程を修了し、同年4月より田中晃二教授のグループでお世話になっています。これまでは触媒の反応特性について研究を行ってきました。

設備や人材等、めぐまれた環境の中で様々な技術や知識を身につけていきたいと思っています。よろしくお願いいたします。



まつ もと よし てる  
松本 剛 昭

電子構造研究系電子状態動力学研究部門 特別協力研究員

平成12年3月東北大学大学院理学研究科博士課程後期を修了後、この4月より鈴木俊法先生のもとで研究をさせて頂いております。これまでは水素結合クラスターの振動分光に関する研究をしてきました。現在は、分子集合体における非断熱動力学的実時間観測を目標として研究を行っています。多くの方々、そして数々の刺激的な研究と触れ合いながら、楽しく研究を進めていきたいと考えております。どうぞよろしくお願いいたします。



なか むら り え  
中村 理 枝

技術課 研究支援推進員（広報委員会担当）

京都大学大学院理学研究科修士課程修了。その後3年余り、神戸製鋼所電子技術研究所でダイヤモンド薄膜の研究に携わりました。4月に広報委員会担当として採用されましたが、?年振りの職場に右往左往の毎日です。早く慣れてお役に立てるよう努めますので、よろしくお願いいたします。

## 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
小杉 健太郎	Studies on intermolecular interaction of acetic acid: hydrogen-bonding and charge-transfer interaction in neat liquid, aqueous solutions, and gas phase clusters with benzene cations	理学	H13. 3.23
伊藤 博一	Reverse Phase-Transfer Catalysis of a Self-Assembled Coordination Nanocage	理学	H13. 3.23
梅本 和彦	Assembly of Polyhedra by Molecular Paneling <i>via</i> Coordination	理学	H13. 3.23
野田 英之	埋め込み金属層基板 - 赤外反射吸収分光法によるシリコン表面水素化物の構造と化学反応性に関する研究	理学	H13. 3.23
藤田 典史	Metal-Mediated Construction of Highly Ordered Molecular Arrays: from Synthetic Challenge to Functional Assemblies	理学	H13. 3.23
楊 慧君	STEREOCHEMISTRY IN CATALYTIC OXIDATION BY HEME ENZYMES	理学	H13. 3.23
和田 亨	Studies on Bis(hydroxoruthenium) Complexes with Quinones as Noninnocent Ligands and Their Catalytic Ability for Oxidation Reactions	理学	H13. 3.23

## 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
石内 俊一	IR-UV 多重共鳴法によるフェノール及びその誘導体の分子内振動緩和とクラスター内反応の研究	理学	H13. 3.23

## 総合研究大学院大学平成13年度(4月入学)新入生紹介

平成13年度(4月入学)新入生

専攻	氏名	所属	研究テーマ
構造分子科学	岡 芳 美	相関領域研究系	有機金属化合物の光物性と分子認識
	鈴木 研 二	分子集団研究系	分子性導体における電荷整列現象の研究
	滝 沢 守 雄	極端紫外光科学研究系	Si表面のナノ反応場と生体物質集積化の制御 - STMによる評価 -
	藤 木 聡	極端紫外光科学研究系	フラレンおよびカーボンナノチューブをベースとした新規物質のSTM観察
	山 村 周 作	極端紫外光科学研究系	赤外反射吸収分光法によるシリコン表面に集積した生体物質のその場観察
機能分子科学	荒 正 人	分子集団研究系	SPMによるSi-C接合の物性の研究
	小久保 裕 功	理論研究系	生体高分子構造予測の理論的研究
	榮 慶 丈	理論研究系	タンパク質分子の立体構造予測に関する研究
	高 田 正 基	分子集団研究系	スピン偏極走査型トンネル顕微鏡を用いた表面の磁性に関する研究
	中 井 康 司	錯体化学実験施設	疎水性相互作用を駆動力とするナノ触媒反応場の開発
	村 田 克 美	理論研究系	コンピューターシミュレーションによるタンパク質の立体構造予測
	渡 邊 あゆみ	理論研究系	多孔質物質中の分子性液体の統計力学

# 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 年度末に稼働を開始し、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るようである。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

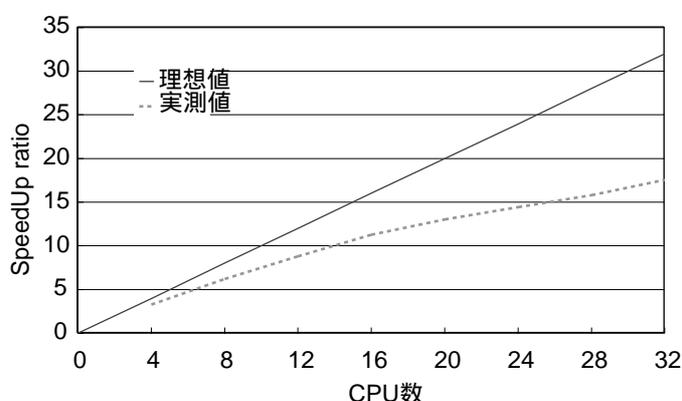


図1 SGI2800での並列計算の速度向上比

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年程度の間には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

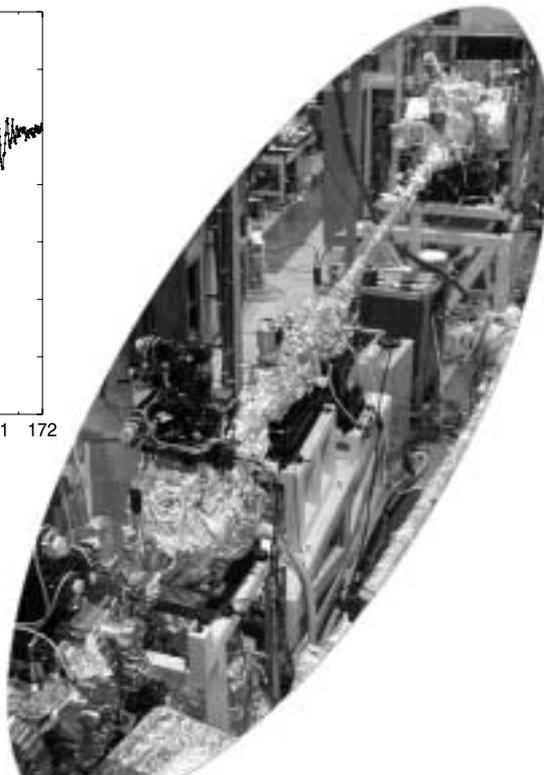
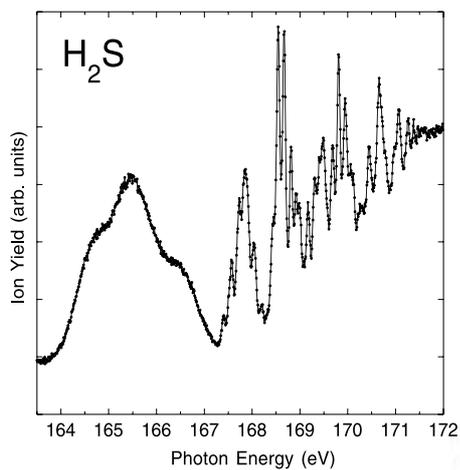
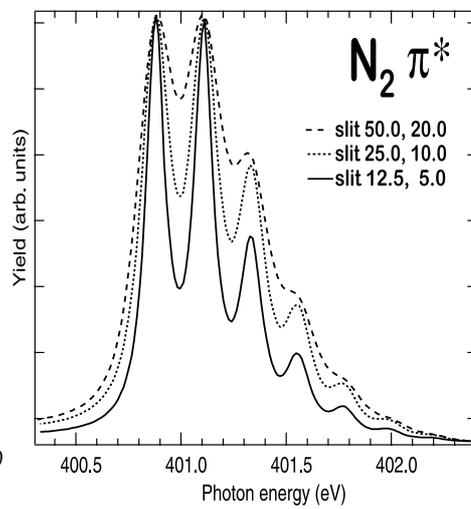
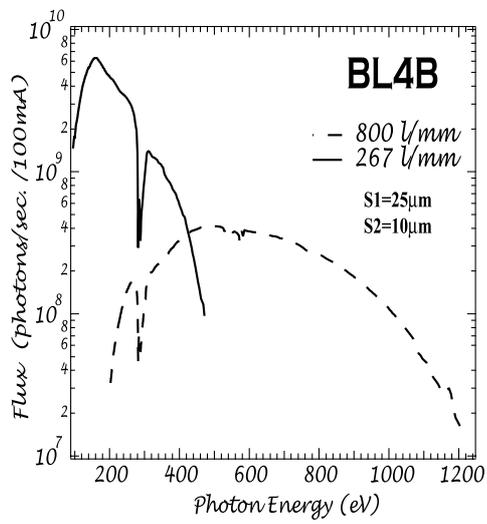
極端紫外光実験施設 (UVSOR) では創設期からいろいろなエネルギー領域で分光器や測定装置を整備してきた。しかし、放射光分光技術に格段の進歩を遂げている他の新しい施設と比較すると創設来 17 年以上も経た UVSOR の分光性能に劣るものが数カ所見られるようになった。そこで特に遅れをきたしていると思われた 100 eV から 800 eV 付近までのエネルギー領域 (イオウやリンの 2p 内殻や炭素、窒素、酸素の 1s 内殻を励起) をカバーする高性能な分光器の開発を目指して、繁政が着任した平成 11 年前期に研究系 (小杉、高田) と施設 (繁政、下條) の連携チームを編成し直ちに設計を開始した。初期のレイアウトによる設計作業は、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

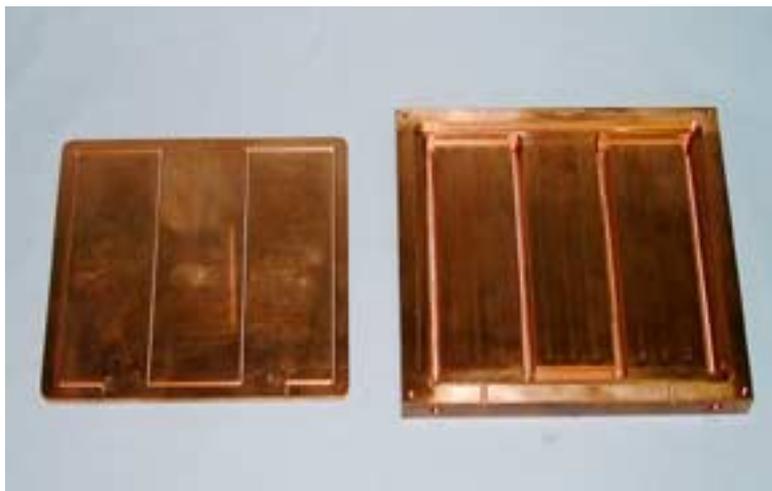
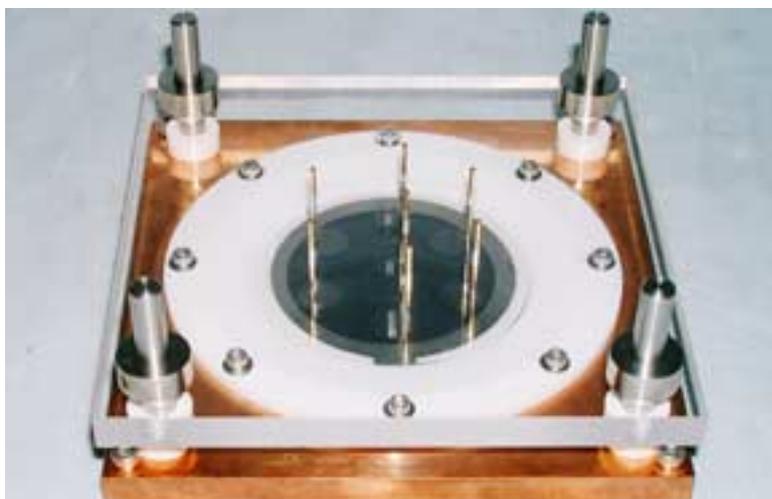


写真2 ロウ接前の温調プレート

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：「スーパーアトムのもつ物性解明」

(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  
ンドフィ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）  
ニトロキッ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）  
八口ゲン架橋金属錯体 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エンの酸化還元  
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)  
スピン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ペンの発生と特性化

- 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)



## 平成12年度（後期） 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723回		2000年10月11日	有機薄膜デバイスと単分子デバイス： 現状と今後の展開	多田 博一
	第29回	10月25日	21世紀・脳科学への期待	伊藤 正男
第724回		11月 8日	電子関連理論の新展開	天能精一郎
第725回		11月22日	モリブデンおよびタングステン-カルコゲニド錯 体の新展開	川口 博之
第726回		12月 6日	衝突準分子のフェムト秒超高速分光とアト秒核 波束エンジニアリング	大森 賢治
	第30回	2001年 1月24日	フリーラジカルの科学	廣田 榮治
	第31回	1月31日	赤外自由電子レーザーとそれをを用いる光科学	黒田 晴雄
第727回		2月 7日	キラル分子の不斉自己増殖と不斉の起源	磯合 憲三
第728回		2月21日	金属ナノクラスターの化学	佃 達哉
	第32回	3月14日	私の研究と物質科学	白川 英樹

## 平成12年度（後期）共同研究

課題研究		
フェムト秒時間分解光電子分光による化学反応の研究	分子科学研究所	鈴木 俊法
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
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
エタノール / 水中におけるタンパク質の構造安定性と溶媒クラスターの関係	福岡大学理学部	山口 敏男 吉田 亨次
金属内包フラレンのイオン種の構造と電子的特性	新潟大学大学院自然科学研究科	若原 孝次 前田 優 白倉 進吾
高周波ESRによる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
Cytochrome P450の電子遷移吸収帯の帰属	慶応大学医学部	江川 毅
異常血色素の構造解析：紫外共鳴ラマン分光による研究	金沢大学医学部	長井 雅子
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 青木 孝之 安藤 智宏
光誘起スピנקロスオーバー錯体の高周波ESR	京都大学大学院理学研究科	白井 正伸 米村 直樹 片山 郁文
C <sub>60</sub> 多価アニオン高スピנקラスターの高分子構造と電子構造	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
誘導ラマン断熱通過法による有機分子のプロトン移動構造異性化の量子制御	金沢大学理学部	太田 西 香織 太田 靖人
酢酸 水およびシクロエーテル-水混合溶液のクラスター構造	佐賀大学理工学部	高椋 利幸 中溝 啓
芳香族分子クラスターのZEKE光電子スペクトル測定	横浜市立大学理学部	三枝 洋之 中村 淳
アミノベンゾニトリル類と極性溶媒分子のクラスターのZEKE光電子分光及び赤外分光	九州大学大学院理学研究科	日野 和之 迫田 憲治 田中 伸幸
高圧下における一次元白金錯体の絶縁体-金属転移と電子スペクトル	室蘭工業大学工学部	城谷 一民 林 純一
キラルな主鎖型液晶のスペーサーのコンホメーション特性	東京工芸大学工学部	比江島俊浩
フラレン錯体の電子物性の研究	豊橋技術科学大学	今枝 健一
電導性有機電荷移動錯体の研究	京都大学大学院理学研究科	前里 光彦 清水 康弘 矢持 秀起
分子性伝導体DCNQI <sub>2</sub> Cu系の高圧金属相の磁氣的性質の研究	千葉大学大学院自然科学研究科	澤 博
TTP系分子性導体の磁性に関する研究	京都大学大学院工学研究科	御崎 洋二 谷口 正輝
有機化合物の極低温領域での物性測定	大阪大学大学院理学研究科	中澤 康浩 佐藤あかね



光機能性有機超薄膜の配向制御と光・電気的特性評価	京都大学大学院工学研究科	石田 謙司 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
希土類金属炭化物の水素吸収効果	横浜国立大学大学院工学研究科	鈴木 和也 小島有紀子
カテコールジオキシゲナーゼ型酸素化機能を発現する金属錯体の設計と反応機構研究	京都大学大学院工学研究科	船引 卓三 杉生 大輔 浅利 大介
Cr-Mnラセン磁性体の磁気円二色性	福島大学教育学部	山口 克彦
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
結晶性分子磁性体の磁気及び光学特性	九州大学大学院理学研究院	大場 正昭 白杵 直樹
液相ナノ空間に置けるラジカル対反応に対する溶媒クラスターの役割	工業技術院名古屋工業技術研究所	岡寄 正治 小西 由也
りん、いおうなどを含む分子の内殻励起の計算	静岡大学工学部	石田 俊正
クラミドモナスの光驚動性の作用スペクトル	北陸先端科学技術大学院大学	高橋 哲郎
内殻励起の大規模SCF計算コードの開発	九州女子大学家政学部	八尋 秀一
単細胞藻ミドリムシの紫外線感覚・応答行動の解析	基礎生物学研究所	渡辺 正勝
金属不対電子をもつポルフィリンダイマーの分子内エネルギー移動	東京工業大学大学院理工学研究科	浅野 素子
赤外反射吸収分光用張り合わせ基板の開発	中部大学工学部	脇田 紘一 森田 洋祐 小島 友和
内殻励起によるリユードベリ状態の生成と、その解離反応過程	東京大学大学院理学系研究科	松村 尚
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 前園 好成
テラヘルツ領域での磁場による非線形制御の研究	東京理科大学理学部	塚本 桓世 樋口 透志 田中 正志
テラヘルツ電磁波による生体分子の骨格振動直接観測	神戸大学理学部	富永 圭介 山本 晃司
テラヘルツ光源用光学素子の開発	石川工業高等専門学校	瀬戸 悟
定比組成LiNbO <sub>3</sub> 単結晶の非線形光学定数評価	無機材質研究所	古川 保典 北村 健二 寺部 一弥
不純物添加LN, LTの特性評価	早稲田大学理工学部	中島 啓幾 福田 武司 幸 雅洋
Yb:GdYCOB単一素子による紫外光発生に関する研究	大阪大学大学院工学研究科	佐々木 孝友 森 勇介 吉村 政志
ポルフィリン鉄(III)錯体のスピン状態に及ぼすポルフィリン環サドル化の効果	東邦大学医学部	中村 幹夫
κ-(BMDT-TTF) <sub>2</sub> X <sup>13</sup> C-NMR用の同位体置換試料の合成	北海道大学大学院理学研究科	河本 充司

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つくば分室	木下 豊彦
高速マルチチャンネル過渡吸収測定システムの開発	東京大学総合文化研究科	渡邊 一雄
Si(III)金属蒸着表面に誘起される 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 神田 一浩 松井 真二
真空封止型軟X線アンジュレータの開発	理化学研究所	北村 英男 原 徹 田中 隆次
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
新しい原子核乾板の特性を調べる	名古屋大学大学院理学研究科	星野 香
金属錯体のレドックスを利用した脱室作用の実現と応用	大阪市立大学大学院理学研究科	杉本 秀樹
多核希土類元素錯体の合成と物性評価	静岡大学大学院理工学研究科	鈴木 浩司 松浦 隆敏 福岡 孝宏 村上 芳伸
分子クラスターの分子間ポテンシャルの実験的決定と理論的研究	九州大学大学院理学研究院	田中 桂一 原田 賢介
協力研究 ( UVSOR 利用分 )		
放射光励起の超微細 AI 膜堆積に関する研究	東北大学金属材料研究所	今泉 吉明
高分子有機材料の軟 X 線照射効果の実験	姫路工業大学高度産業科学技術研究所	服部 正
光電子分光によるシリコン上のフタロシアニン分子の配向に関する研究	筑波大学理工学系	秋本 克洋
ARUPS を用いた配向性テフロン膜表面の分子配向の定量的研究	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
角度分解光電子分光による置換ポリアセチレンの電子構造の研究	名古屋大学大学院理学研究科	石井 久夫
層状複合酸化物 LiNiO <sub>2</sub> の共鳴光電子スペクトル	愛媛大学工学部	宮崎 隆文
研究会		
フラーレン科学における新機能探索の現状と展望	東京都立大学大学院理学研究科	小林 郁
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	名古屋大学大学院工学研究科	田中 信夫
動的側面からみたタンパク質の分子科学 揺らぎを理解するにはどうすればよいか	分子科学研究所	水谷 泰久
有機分子機能体の設計・合成・物性	分子科学研究所	細越 裕子
紫外・真空紫外光領域での新しいニーズと放射光利用	分子科学研究所	福井 一俊
真空紫外線・軟 X 線パルスの利用と将来展望	分子科学研究所	鎌田 雅夫
施設利用 ( I ) 分子制御レーザー開発研究センター		
有機色素分子の歪度計測	宇都宮大学工学部	大庭 亨
蛋白質のカルシウム依存的な構造変化の解析	生理学研究所	井本 敬二
高効率マイクロチップレーザーに関する研究開発	和歌山県工業技術センター	伊東 隆喜



施設利用(1) 分子物質開発研究センター

金属酵素による窒素酸化物の変換に対する分光学的および磁気共鳴アプローチ	金沢大学理学部	櫻井 武
機能性膜の表面状態	豊橋技術科学大学	角田 範義
半導体薄膜の評価	豊橋技術科学大学	吉田 明
金属錯体の構造と物性および反応性	愛知教育大学	中島 清彦
アモルファス合金の磁気特性と電子物性	名古屋工業大学	山田 正明
新規な有機伝導体や有機磁性体の磁気測定と構造決定	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(II)	熊本大学大学院自然科学研究科	市村 憲司
化合物半導体表面層のESCA分析	石川工業高等専門学校	山田 健二
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
Co超微粒子の磁性	三重大学教育学部	佐光三四郎
環状ピロロールメチルオリゴマーの構造と機能に関する研究	愛媛大学機器分析センター	宇野 英満
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
ナノチューブ状物質の構造・物性	科学技術振興事業団ナノチューブ状物質プロジェクト	坂東 俊治
強相関電子系次元ハロゲン架橋ニッケル(III)錯体の電子状態制御	東京都立大学大学院理学研究科	眞鍋 敏夫
フラーレン化合物のESRと磁化率	姫路工業大学理学部	小林 本忠
PLD法により作製したBi <sub>3</sub> Fe <sub>5</sub> O <sub>12</sub> 薄膜の磁気特性	名古屋工業大学	安達 信泰
ランガサイト系圧電結晶の構造解析に基づく圧電特性の解明	名古屋工業大学	大里 齊
準結晶の磁性	名古屋大学情報文学部	松尾 進
金属吸蔵ゼオライトの磁性	防衛大学校	清水文比古
イオン会合を用いた結晶構造制御および新規な反応場の開発研究	名古屋工業大学	小野 克彦
層状硫化クロムの反強磁性転移の研究	広島大学工学部	福岡 宏
施設利用(1) 装置開発室		
真空対応赤外用窓の製作	北陸先端科学技術大学院大学	安 正宣
招へい協力研究		
レーザー2重共鳴分光装置の立ち上げ整備	九州大学大学院理学研究科	関谷 博 迫田 憲治
分子科学研究所に導入された質量分析装置の徹底活用法を探る	関西大学工学部	荒川 隆一
UVSOR 施設利用		
VUV領域におけるBaFBr:Eu <sup>2+</sup> のEu <sup>2+</sup> 発光効率	山形大学理学部	大西 彰正
真空紫外光領域用フォトンディテクタのバンドパス特性測定	千葉大学工学部	日野 照純
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
チタニア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
銅ハライド微粒子が分散したアルカリハライド結晶の真空紫外分光	大阪大学大学院基礎工学研究科	伊藤 正

放射光とレーザー光の同時入射によるフッ化バリウムの内殻準位の励起	大阪歯科大学	辻林 徹
放射光とレーザー光を用いた反射型ポンプ・プローブ分光	岡山大学理学部	有本 収
育成法の異なるスピネル酸化物 $MgAl_2O_4$ の反射・発光スペクトルの測定	海上保安大学校	藤田 正実
真空紫外励起蛍光体の透過スペクトル・PL励起スペクトル測定	鳥取大学工学部	田中 省作
水溶液表面での光イオン化	九州大学大学院総合理工学研究院	旗野 嘉彦
ほう珪酸亜鉛系蛍光体における長残光過程のモデリング	福井工業高等専門学校	北浦 守
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
LiCAF系結晶の真空紫外分光	分子科学研究所	猿倉 信彦
BL1Bの整備	分子科学研究所	鎌田 雅夫
ZnO(1010)表面上のアンモニア分子の吸着状態と共吸着アルカリ金属の影響	東京工業大学理工学研究所	小澤 健一
電子・イオンコインシデンス法を用いたZnO表面に吸着した分子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
電子・イオン・コインシデンス法を用いた自己組織化単分子膜の内殻励起によるイオン脱離の研究	広島大学大学院理学研究科	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
BL2B1における放射光 レーザー同期実験の試行	分子科学研究所	高橋 和敏
遷移金属錯体の軟X線吸収	分子科学研究所	高橋 和敏
有機金属の光分解による薄膜成長	分子科学研究所	黒澤 宏
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
(Pb,Sn)/Si(111)系の高分解角度分解光電子分光II	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
金属/半導体(Fe/GaAs)のスピン及び角度分解光電子分光	香川大学教育学部	高橋 尚志
内殻光電子分光による半導体表面における光誘起現象の研究	分子科学研究所	鎌田 雅夫
BL5A スピン分解光電子分析装置の整備	分子科学研究所	高橋 和敏
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 丈雄
脱離現象から見た希ガス固体表面の光励起とその緩和過程	学習院大学理学部	荒川 一郎
ロケット搭載用観測器の検出効率評価	東京大学大学院理学系研究科	中村 正人
10 - 250 eVでのアントラセン励起子生成効率	学習院大学理学部	小谷 正博
高空間分解能X線CCDカメラの開発	国立天文台太陽物理学研究所	常田 佐久
カルコゲナイド系アモルファス半導体の光誘起光収量変化に関する研究	岐阜大学工学部	林 浩司
低応力軟X線多層膜の光学特性評価III	姫路工業大学高度産業科学技術研究所	新部 正人
ポリエステル、および、ポリカーボネートフィルムの極端紫外反射スペクトル	徳島文理大学工学部	大内 伊助



放射光とレーザーを用いた $C_5H_{10}NH_2PbX_3$ 及び $PbX_2$ における光誘起欠陥状態の赤外吸収	京都大学大学院理学研究科	田中耕一郎
ライトパイプ方式を利用した 2 K での遠赤外反射スペクトル	神戸大学大学院自然科学研究科	難波 孝夫
$LiNiO_2$ のミリ波反射測定とパッチ依存性	神戸大学理学部	太田 仁
$Tl_2Mn_2O_7$ の赤外磁気円二色性	神戸大学理学部	岡村 英一
高圧下におけるリチウムの反射・透過測定	岡山理科大学	森 嘉久
重い電子系物質の遠赤外磁気光学効果	分子科学研究所	木村 真一
BL6A1 共同利用ラインの整備	分子科学研究所	鎌田 雅夫
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
貴金属担持チタニア・マグネシア 3 元系抗菌材料の XAFS 解析	東京学芸大学教育学部	長谷川貞夫
ハライド化合物の発光の軟 X 線領域での波長依存性	名古屋大学情報文化学部	森 昌弘
金属含有アバタイト触媒の局所構造解析 (その 2)	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 寿雄
軟 X 線照射下におかれたシリカガラスからの誘起発光	名古屋大学工学部	吉田 朋子
グリコサール法により合成したシリカ修飾チタニアの熱安定化	京都大学大学院工学研究科	岩本 伸司
$MgO-ZnO$ 固溶体の局所構造の Zn-L 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
微細構造制御したリン酸カルシウム化合物の局所構造解析	京都工芸繊維大学工学部	中平 敦
XANES による担持モリブデンの酸化還元的構造変化の検討	京都工芸繊維大学工学部	有谷 博文
二次電子収量法を用いた Al-K XAFS 測定による樹脂吸着したアルミニウムの局所構造解析	福岡大学理学部	脇田 久伸
KTP 分光結晶を用いた Al 及び Mg-K 殻 EXAFS 測定の試み	分子科学研究所	繁政 英治
$CsI$ , $CsI(Tl)GSO$ , $LSO$ シンチレータの発光機構の研究	立教大学理学部	窪田 信三
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
強相関電子系の反射分光	神戸大学理学部	桜井 誠
アミノ酸蒸着膜の真空紫外吸収スペクトル (3)	神戸大学発達科学部	中川 和道
低密度キャリア 4f 電子系の真空紫外反射分光	分子科学研究所	木村 真一
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
ワイドバンドギャップ半導体の可視-真空紫外光反射測定	分子科学研究所	福井 一俊
水晶を用いた紫外波長変換素子の吸収端評価	分子科学研究所	栗村 直
キセノ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
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
SR を用いた微細構造加工プロセス	名古屋大学工学研究科	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
層状化合物リチウム二次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	小澤 尚志
ペロブスカイト型 3 d 遷移金属酸化物の電子構造の解析	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

オージェ電子-イオン-イオン同時計測法によるカルボニル化合物の内殻励起解離過程の研究	広島大学大学院理学研究科	吉田 啓晃
AlInN半導体混晶の窒素K内殻吸収測定(II)	分子科学研究所	福井 一俊
光電子エネルギーを選別したフラグメントのTOFスペクトルの測定	分子科学研究所	下條 竜夫
真空紫外光CVD成長SiO <sub>2</sub> 薄膜	分子科学研究所	黒澤 宏
BL5Bにおける高次光分布の測定	学習院大学理学部	平山 孝人
真空紫外光解離イオンの蛍光分散スペクトル	分子科学研究所	見附孝一郎
SRミラーのCarbon contaminationテスト	高エネルギー加速器研究機構	浦川 順治
真空紫外光によるフッ素樹脂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
XANESを用いたアルミニウム酸化物でコーティングした黒鉛電極上のアルミニウムの配位状態解析	東京工業大学大学院理工学研究科	内本 喜晴
クラスターイオンビーム形成TiO <sub>2</sub> 薄膜評価	姫路工業大学高度産業科学技術研究所	松井 真二
クラスターイオンビーム形成DLC薄膜評価	姫路工業大学高度産業科学技術研究所	松井 真二
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 丈雄
FELとSRの同期実験	分子科学研究所	下條 竜夫
MgO-ZnO固溶体のZn-L端XANESの熱処理による変化	京都大学大学院エネルギー科学研究科	田中 功



池上 努	理論 研究 系 手 助	12.11.1 ~ 13.3.26	アメリカ	金属クラスター動力学計算を目的とするプエルトリコ大学との共同研究
加藤 政博	極端紫外光実験施設 助 教 授	12.11.5 ~ 12.11.11	中 国	日中拠点大学交流事業（加速器分野：国内拠点は高エネルギー加速器研究機構）実施計画に関する打ち合わせ
猿倉 信彦	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	12.11.5 ~ 12.11.10	アメリカ	フロンティアサテライトに出席。最新の超高速エレクトロニクスとフォトエレクトロニクスのテーマにて会議出席者と議論することにより、今後の新レーザー開発に関する新たな知見と協力を得ることが出来る
渡辺 芳人	相 関 領 域 研 究 系 助 教 授	12.11.18 ~ 12.11.25	イ ン ド	最近の生物無機化学に関する国際シンポジウムで招待講演する
長友 重紀	技 術 課 官	12.11.26 ~ 12.12.3	アメリカ	コヒーレント（COHERENT）社のFreDクリプトン（Kr）レーザーの運転並びにメンテナンスの技術習得のため
井上 克也	相 関 領 域 研 究 系 助 教 授	12.11.26 ~ 12.12.11	イ ン ド	分子磁性に関する国際会議（Indo-French Workshop on "Current Trends in Molecular Magnetism"）に出席発表のため
緒方 啓典	分 子 集 団 研 究 系 助 教 授	12.11.26 ~ 12.12.2	アメリカ	MRS fall meeting に参加し、講演及び関連研究者との共同研究打ち合わせを行うため
笠井 俊夫	相 関 領 域 研 究 系 助 教 授	12.11.27 ~ 12.12.7	スペイン	Stereodynamics2000国際会議とバリエロナ大学において、分子配向により観測できる化学反応の立体ダイナミクス過程についての資料収集及び研究打ち合わせのため
岡本 祐幸	理 論 研 究 系 助 教 授	12.12.2 ~ 12.12.8	オーストラリア	計算物理学国際会議（CCP2000）にて招待講演をする為。講演題名：「タンパク質折り畳みのシミュレーションと構造予測」
平等 拓範	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	12.12.2 ~ 12.12.8	アメリカ	スタンフォード大学にて研究発表、討論を行うため。国際会議「レーザー2000」に参加し研究発表を行うため
猿倉 信彦	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	12.12.10 ~ 12.12.17	台 湾	IPC2000に出席し、最新の超高速エレクトロニクスとフォトエレクトロニクスのテーマについて会議出席者と議論することにより、今後の新レーザー開発に関する新たな知見と協力を得ることが出来る
大竹 秀幸	分子制御レーザー開発研究センター 助 手	12.12.10 ~ 12.12.17	台 湾	IPC2000に出席、発表「光によるスーパークラスターの創製とその光計測：単一分子磁石の実現」に関する情報収集のため
栗村 直	分子制御レーザー開発研究センター 助 手	12.12.11 ~ 12.12.17	台 湾	国際フォトンクス会議2000にて研究発表、討論のため。台湾大学にて討論を行うため
平等 拓範	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	12.12.12 ~ 12.12.16	台 湾	国際フォトンクス会議2000にて研究発表、討論のため。台湾大学にて討論を行うため
魚住 泰広	錯体化学実験施設 助 教 授	12.12.13 ~ 12.12.20	アメリカ	PACIFICHEM2000に参加し研究活動の成果を発表し情報収集するため
宇理須 恒雄	極端紫外光科学研究系 助 教 授	12.12.13 ~ 12.12.17	アメリカ	2000環太平洋国際会議に出席し、講演及び討論を行う
岡本 裕巳	分 子 構 造 研 究 系 助 教 授	12.12.13 ~ 12.12.20	アメリカ	環太平洋国際化学会議（PACIFICHEM2000）に出席、発表及び超高速分光に関する研修のため
田中 晃二	錯体化学実験施設 助 教 授	12.12.13 ~ 12.12.19	アメリカ	研究課題に関してPACIFICHEM2000の参加と招待講演で最近の成果発表を行い同分野の研究者との討論を通して最新の情報を収集し、これからの研究に役立てるため
中村 宏樹	理 論 研 究 系 助 教 授	12.12.13 ~ 12.12.21	アメリカ	PACIFICHEM 2000に参加し、研究成果の発表をし課題研究に関する情報を収集する
藤井 正明	電 子 構 造 研 究 系 助 教 授	12.12.13 ~ 12.12.19	アメリカ	2000環太平洋国際会議にシンポジウムオーガナイザーとして出席するとともに、2件の招待講演をするため
渡辺 芳人	相 関 領 域 研 究 系 助 教 授	12.12.13 ~ 12.12.19	アメリカ	2000環太平洋国際会議にシンポジウムオーガナイザーとして出席するとともに、2件の招待講演をするため
川口 博之	錯体化学実験施設 助 教 授	12.12.13 ~ 12.12.20	アメリカ	「2000環太平洋国際化学会議」に出席するため
田原 太平	極端紫外光科学研究系 助 教 授	12.12.13 ~ 12.12.20	アメリカ	PACIFICHEM 2000における講演、成果の発表

見附 孝一郎	極端紫外光科学研究系 助 教 授	12.12.13 ~ 12.12.21	アメリカ	2000 環太平洋国際化学会議に参加し、講演及び討論を行う
米満 賢治	理論 研究 系 助 教 授	12.12.13 ~ 12.12.20	アメリカ	2000 環太平洋国際化学会議( The 2000 Inernational Chemical Congress of Pacific Basin Societies )に参加し研究発表を行う為
朱 超原	理論 研究 系 助 手	12.12.13 ~ 12.12.21	アメリカ	Pacifi Chem 2000 に参加し、研究成果の発表をし課題研究に関する情報収集をする
中林 孝和	電子構造研究系 助 手	12.12.13 ~ 12.12.19	アメリカ	2000 環太平洋国際化学会議に出席し研究情報の収集
藤原 秀紀	分子集団研究系 助 手	12.12.13 ~ 12.12.21	アメリカ	環太平洋国際化学会議 ( PACIFICHEM2000 ) に出席し研究発表及び資料収集を行う
細越 裕子	相関領域研究系 助 手	12.12.13 ~ 12.12.24	アメリカ	2000 環太平洋国際化学会議 ( PACIFICHEM2000 ) 出席、研究成果発表のため
蔡 徳七	相関領域研究系 助 手	12.12.13 ~ 12.12.20	アメリカ	Pacificchem2000 環太平洋国際化学会議に出席し、分子配向により観測できる化学反応の立体ダイナミクス過程についての情報収集及び研究打ち合わせのため
茅 幸二	分子科学研究所 所 長	12.12.13 ~ 12.12.20	アメリカ	2000 環太平洋国際化学会議に出席のため
笠井 俊夫	相関領域研究系 教 授	12.12.14 ~ 12.12.20	アメリカ	Pacificchem2000 環太平洋化学会議に出席し、分子配向により観測出来る化学反応の立体ダイナミクス過程についての情報収集及び研究打ち合わせのため
西 信之	電子構造研究系 教 授	12.12.14 ~ 12.12.19	アメリカ	2000 環太平洋国際会議に出席発表
井上 克也	相関領域研究系 助 手	12.12.14 ~ 12.12.20	アメリカ	環太平洋国際会議 ( Pacificchem2000 ) に出席、発表のため
鈴木 俊法	電子構造研究系 助 手	12.12.14 ~ 12.12.20	アメリカ	環太平洋化学会議にてシンポジウムのオーガナイザーをつとめ、研究成果の発表、研究情報の収集をするため
夢田 博一	分子集団研究系 助 手	12.12.14 ~ 12.12.19	アメリカ	環太平洋国際化学会議においてシンポジウムのオーガナイズと研究発表
井口 桂哉	電子構造研究系 助 手	12.12.14 ~ 12.12.19	アメリカ	2000 環太平洋国際化学会議に出席及び研究情報収集のため
高口 博志	電子構造研究系 助 手	12.12.14 ~ 12.12.20	アメリカ	環太平洋化学会議にて、研究成果を発表し関連した研究領域の情報を収集する
小林 速男	分子集団研究系 教 授	12.12.15 ~ 12.12.21	アメリカ	2000 環太平洋国際化学会議、とりわけその中のシンポジウム ( #109 ) Twenty Years of Organic Superconductors: New Insights ( Organizer, Urs Geiser, co-organizer, 小林速男, J. Eldridge ) に出席し、発表、座長などを行う
中村 敏和	分子集団研究系 助 手	12.12.15 ~ 12.12.21	アメリカ	2000 環太平洋化学会議に出席・発表し討論する
久保 厚	相関領域研究系 助 手	12.12.15 ~ 12.12.21	アメリカ	Pacificchem2000 環太平洋国際化学会議に出席し、分子配向により観測出来る化学反応の立体ダイナミクス過程についての情報収集及び研究打ち合わせのため
佐藤 啓文	理論 研究 系 助 手	12.12.15 ~ 12.12.21	アメリカ	2000 環太平洋化学会議 ( The fourth International Chemical Congress of Pacificchem 2000 ) に参加し研究発表を行うため
山本 薫	分子集団研究系 助 手	12.12.15 ~ 12.12.20	アメリカ	2000 環太平洋国際化学会議に出席・発表する
DROZDOVA, Olga	分子集団研究系 外国人 研究 員	12.12.16 ~ 12.12.20	アメリカ	2000 環太平洋国際化学会議に出席、発表するため
薬師 久弥	分子集団研究系 教 授	12.12.17 ~ 12.12.21	アメリカ	2000 環太平洋国際化学会議に出席・発表する
平田 文男	理論 研究 系 教 授	12.12.19 ~ 12.12.26	インド	TC2 ( Theoretical Chemistry 2000 : 理論化学国際会議 ) に出席し研究発表をおこなうため



GRAAF, Harald	分子集団研究系 非常勤研究員	12.12.22 ~ 13.1.10	ドイツ	ブルメン大学化学科 Prof. Woehrle との共同研究
田原 太平	極端紫外光科学研究系 助教	13.1.7 ~ 13.1.20	インド	日印セミナー（バンガロー会議）に参加、研究成果の発表のため
中村 宏樹	理論研究系 教授	13.1.10 ~ 13.1.16	アメリカ	Work shop on "Quantum Reaction Dynamics"に参加し、研究成果の発表をする
西 信之	電子構造研究系 教授	13.1.10 ~ 13.1.14	インド	日印自然科学協力事業「化学及び生体系における構造とダイナミクス」実施及び化学動力学に関する国際会議に参加
猿倉 信彦	分子制御レーザー開発研究センター 助教	13.1.25 ~ 13.2.2	アメリカ	第16回先端的固体レーザー国際会議に発表のため出席
平等 拓範	分子制御レーザー開発研究センター 助教	13.1.28 ~ 13.2.5	アメリカ	スタンフォード大学にて研究発表、討論を行うため。国際会議（ASSL）に参加し、研究発表を行うため
谷村 吉隆	理論研究系 助教	13.2.28 ~ 13.3.11	アメリカ ドイツ、オランダ	ベルリン自由大、グロニンゲン大、MITでの招待講演と議論及び研究課題に関する研究成果を発表するため
笠井 俊夫	関連領域研究系 教授	13.3.2 ~ 13.3.13	アメリカ	平成12年度日本学術振興会日米科学協力事業に基づく共同研究実施のため
緒方 啓典	分子集団研究系 助手	13.3.2 ~ 13.3.11	オーストラリア	International Winterschool on Electronic properties of novel Materials (IWEPNM2001)に参加し講演を行うため
井口 佳哉	電子構造研究系 助手	13.3.8 ~ 13.3.22	アメリカ	生体機能に関する分子クラスターの気相分光
緒方 啓典	分子集団研究系 助手	13.3.12 ~ 13.3.18	アメリカ	American Physical society, March Meetingに参加し講演を行うため
繁政 英治	極端紫外光実験施設 助教	13.3.22 ~ 13.4.4	フランス	実験装置及び研究に関する打ち合わせ
清水 雄一郎	関連領域研究系 非常勤研究員	13.3.22 ~ 13.3.27	アメリカ	平成12年度日本学術振興会日米科学協力事業に基づく共同研究実施及び研究打ち合わせのため
笠井 俊夫	関連領域研究系 教授	13.3.23 ~ 13.3.29	フランス オランダ	EGS XXVI General Assembly, Nice, France, March 2001に出席。またライデン大学との共同研究により立体ダイナミクス過程についての情報収集及び研究打ち合わせの為
加藤 立久	分子構造研究系 助教	13.3.24 ~ 13.3.29	アメリカ	199th Meeting of the Electrochemical Society Fullevenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures sessionでの招待講演を行うため出席
黒澤 宏	極端紫外光科学研究系 教授	13.3.26 ~ 13.3.31	アメリカ	アメリカ電気化学会第199回講演会において講演を行う
岡本 祐幸	理論研究系 助教	13.3.29 ~ 13.4.4	アメリカ	課題研究「第一原理からのタンパク質の立体構造予測シミュレーション法の開発(JSPS-RFTF98P01101)」に関する討論及び研究発表のため
高嶋 圭史	極端紫外光科学研究系 助手	13.4.21 ~ 13.4.27	アメリカ	Workshop on Radiation Safety at Synchrotron Radiation Sourcesに参加し発表を行う
畠田 博一	分子集団研究系 助教	13.4.23 ~ 13.4.25	韓国	ナノ・情報・バイオ・高分子に関するワークショップでの招待講演

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
12.11.1	岡本裕巳	転入	分子構造研究系分子構造学第一研究部門教授	東京大学大学院理学系研究科附属スベクトル化学研究センター助教授	
12.11.1	酒井誠	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状態動力学研究部門助手)	
12.11.1	鈴木和治	採用	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	関連領域研究系特別協力研究員	
12.11.1	柳瀬学	採用	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	広島大学大学院理学研究科 博士後期課程 院生	
12.11.1	齊川美穂	改姓	旧姓; 職員	(分子集団研究系事務補佐員)	
12.12.1	岡本裕巳	併任	総合研究大学院大学数物科学研究科教授	(分子構造研究系分子構造学第一研究部門教授)	
12.12.1	ARJANTSEV, S.	採用	極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門非常勤研究員	日本学術振興会外国人特別研究員(分子研にて研究従事)	
12.12.1	岡本佐知子	採用	分子制御レーザー開発研究センター事務補佐員		
13.1.16	赤阪健	本務先更	筑波大学先端学際領域研究センター教授(分子構造研究系分子構造学第二研究部門教授)	新潟大学大学院自然科学研究科教授	客員研究部門
13.1.31	齊川美穂	辞職		分子集団研究系事務補佐員	
13.2.1	渡辺芳人	配置換	統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域 教授	関連領域研究系関連分子科学第一研究部門教授	
13.2.1	藤井浩	配置換	統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域助教授	分子物質開発研究センター 融合物質開発研究部助教授	
13.2.1	船橋靖博	転出	名古屋工業大学工学部助手	分子物質開発研究センター 融合物質開発研究部助手	
13.2.1	渡辺芳人	兼務	分子科学研究所勤務	(統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域教授)	
13.2.1	藤井浩	兼務	分子科学研究所勤務	(統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域助教授)	
13.2.1	南坊城春奈	採用	分子集団研究系事務補佐員		
13.3.30	西川武士	退職		理論研究系分子基礎理論第一研究部門 リサーチ・アソシエイト(未来開拓)	
13.3.30	光武亜代理	退職		理論研究系分子基礎理論第一研究部門 リサーチ・アソシエイト(未来開拓)	
13.3.31	池上努	辞職	米国自治領プエルトリコ大学博士研究員	理論研究系分子基礎理論第一研究部門 助手	
13.3.31	緒方啓典	辞職	法政大学工学部講師	分子集団研究系分子集団動力学研究部門 助手	
13.3.31	三嶋謙二	退職		理論研究系分子基礎理論第二研究部門 非常勤研究員	
13.3.31	鈴木和治	退職		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	



13. 3.31	中井英隆	退職		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
13. 3.31	柳瀬学	退職		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
13. 3.31	橋本昌人	退職		相關領域研究系分子クラスター研究部門 非常勤研究員
13. 3.31	枝連一志	退職		錯体化学実験施設錯体物性研究部門非常勤研究員
13. 3.31	渡辺芳人	併任終了	( 統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域教授 )	分子物質開発研究センター長
13. 3.31	菊地武司	客員終了	( 倉敷芸術科学大学産業科学技術学部教授 )	理論研究系分子基礎理論第三研究部門教授
13. 3.31	木下正弘	客員終了	( 京都大学エネルギー理工学研究科助教授 )	理論研究系分子基礎理論第三研究部門助教授
13. 3.31	赤阪健	客員終了	( 新潟大学大学院自然科学研究科教授 )	分子構造研究系分子構造学第二研究部門 教授
13. 3.31	徳本圓	客員終了	( 通産省工業技術院電子技術総合研究所 )	分子集団研究系分子集団研究部門教授
13. 3.31	森健彦	客員終了	( 東京工業大学大学院理工学研究科助教授 )	分子集団研究系分子集団研究部門助教授
13. 3.31	木村真一	客員終了	( 神戸大学大学院自然科学研究科助教授 )	極端紫外光実験施設助教授
13. 3.31	相田卓三	客員終了	( 東京大学大学院工学系研究科教授 )	錯体化学実験施設配位結合研究部門教授
13. 3.31	菊地格	客員終了	( 九州大学大学院工学研究科助教授 )	錯体化学実験施設配位結合研究部門助教授
13. 4. 1	永瀬茂	採用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門教授	東京都立大学 大学院理学研究科化学専攻 教授
13. 4. 1	古川貢	採用	分子構造研究系分子動力学研究部門助手	大阪市立大学 大学院理学研究科博士後期課程院生
13. 4. 1	藤山茂樹	採用	分子集団研究系物性化学研究部門助手	東京大学 大学院理学系研究科博士後期課程院生
13. 4. 1	山野井慶徳	採用	錯体化学実験施設錯体触媒研究部門助手	日本学術振興会特別研究員(米国マサチューセッツ工科大学にて研究従事)
13. 4. 1	和田亨	採用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門助手	総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程院生
13. 4. 1	松尾司	転入	錯体化学実験施設錯体物性研究部門助手	筑波大学化学系助手
13. 4. 1	北川禎三	併任	分子構造研究系分子動力学研究部門教授	( 岡機構統合バイオサイエンスセンター 生命環境研究領域教授 )
13. 4. 1	木下一彦	兼務	分子科学研究所勤務命令	岡機構統合バイオサイエンスセンター 戦略的方法論研究領域教授
13. 4. 1	森脇喜紀	転出	富山大学 理学部物理学科 量子物理学講座助教授	分子構造研究系分子構造学第一研究部門 助手
13. 4. 1	小宮山政晴	転入	極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門教授	山梨大学工学部循環システム工 流動研究部門 学科教授

13. 4. 1	奥平幸司	転入	極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門助教授	千葉大学大学院自然科学研究科助教授	流動研究部門
13. 4. 1	久保園芳博	転入	極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門助手	岡山大学理学部化学科助手	流動研究部門
13. 4. 1	黒澤宏	転出	宮崎大学工学部電気電子工学科教授	極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門教授	流動研究部門
13. 4. 1	福井一俊	転出	福井大学遠赤外領域開発研究センター助教授	極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門助教授	流動研究部門
13. 4. 1	長岡伸一	転出	愛媛大学理学部助教授	極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門助教授	流動研究部門
13. 4. 1	崔隆基	採用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門非常勤研究員	東京大学 大学院工学系研究科博士後期課程院生	
13. 4. 1	藤崎弘士	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	東京大学大学院理学系研究科博士後期課程院生	
13. 4. 1	外山南美樹	採用	分子構造研究系分子動力学研究部門非常勤研究員	東京工業大学 大学院理工学研究科博士後期課程院生	
13. 4. 1	松本太輝	採用	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	旭硝子(株)中央研究所契約研究員	
13. 4. 1	白沢信彦	採用	分子物質開発研究センター 分子配列制御研究部非常勤研究員		
13. 4. 1	柴富一孝	採用	錯体化学実験施設錯体触媒研究部門非常勤研究員	名古屋市立大学大学院薬学研究科博士後期課程院生	
13. 4. 1	依田隆夫	採用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門リサーチ・アソシエイト(未来開拓)	理論研究系分子基礎理論第一研究部門非常勤研究員	
13. 4. 1	山口毅	採用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門リサーチ・アソシエイト(未来開拓)	日本学術振興会特別研究員(京大 化学研にて研究従事)	
13. 4. 1	小杉健太郎	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)	総合研究大学院大学数物科学研究科博士後期課程 院生	
13. 4. 1	魚住泰広	併任	分子物質開発研究センター長	(錯体化学実験施設錯体触媒研究部門教授)	
13. 4. 1	笠井俊夫	併任	大阪大学大学院理学研究科 化学専攻教授	( 相関領域研究系分子クラスター研究部門 教授 )	14.3.31まで
13. 4. 1	田中晃二	併任	京都大学大学院理学研究科 教授(連携大学院協力)	( 錯体化学実験施設錯体物性研究部門教授 )	14.3.31まで
13. 4. 1	谷村吉隆	併任	京都大学大学院理学研究科 助教授(連携大学院協力)	( 理論研究系 分子基礎理論第二研究部門 助教授 )	14.3.31まで
13. 4. 1	加藤政博	併任	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光源研究系助教授(客員)	( 極端紫外光実験施設助教授 )	14.3.31まで
13. 4. 1	田中彰治	併任	総務省通信総合研究所 関西支所ナノ機構研究室総務技官	( 分子物質開発研究センター バイ電子開発研究部門助手 )	14.3.31まで
13. 4. 1	永瀬茂	併任	総合研究大学院大学数物科学研究科教授	( 理論研究系分子基礎理論第一研究部門 教授 )	
13. 4. 1	岸根順一郎	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四研究部門 助手 )	
13. 4. 1	根岸雄一	併任	総合研究大学院大学先導科学研究科助手	( 電子構造研究系基礎電子化学研究部門 助手 )	



13. 4. 1	伊藤 肇	併任	総合研究大学院大学数物科学研究科助手	(分子物質開発研究センター機能探索研究部助手)
13. 4. 1	阪元 洋一	併任	総合研究大学院大学数物科学研究科助手	(分子物質開発研究センター分子配列制御研究部助手)
13. 4. 1	斎藤 晋	客員	理論研究系分子基礎理論第三研究部門教授	(東京工業学大学院理工学研究科教授)
13. 4. 1	下位 幸弘	客員	理論研究系分子基礎理論第三研究部門助教授	(経済産業省 産業技術総合研究所電子技術総合研究所基礎部主任研究官)
13. 4. 1	阿久津 秀雄	客員	分子構造研究系分子構造学第二研究部門教授	(大阪大学蛋白質研究所教授)
13. 4. 1	加藤 礼三	客員	分子集団研究系分子集団研究部門教授	(理化学研究所分子物性化学研究室主任研究員)
13. 4. 1	小川 琢治	客員	分子集団研究系分子集団研究部門助教授	(愛媛大学理学部助教授)
13. 4. 1	堀 洋一郎	客員	極端紫外光実験施設助教授	(高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光源研究系 助教授)
13. 4. 1	時任 宣博	客員	錯体化学実験施設配位結合研究部門教授	(京都大学化学研究所教授)
13. 4. 1	鬼塚 清孝	客員	錯体化学実験施設配位結合研究部門助教授	(大阪大学産業科学研究所 助教授)
13. 4.16	中村 理枝	採用	技術課研究支援推進員	

御多忙にもかかわらず、快く執筆を引き受けて下さいました方々に感謝致します。職員の異動や各種研究員の増加等で、例年通り人の出入りが激しいですが、本号では4名の方に分子研在任中の思い出を書いて頂きました。その他の方々の分は次号に掲載させて頂きたいと考えています。

本号から分子研広報委員会担当に中村理枝さんが加わり、佐藤敦子さん、企画調査係の神谷良志夫さん、杉江左知江さんとともに、原稿の整理や校正等の実務を担当して頂きました。

(川口博之 記)

分子研レターズ編集委員

藤 井 正 明 (委員長)

川 口 博 之 (本号編集担当)

岡 本 祐 幸

加 藤 立 久

谷 村 吉 隆

長 岡 伸 一

中 村 敏 和

分子研レターズ No. 44

発行年月	平成13年7月
印刷年月	平成13年7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/>