

分子研 レターズ

50
Issue of August 2004



巻頭言

新たな分子科学研究所への期待
.....志村令郎

研究紹介

コアシェル型有機金属クラスターの
精密合成と基本物性の理解に向けて
.....佃 達哉

レターズ

岡崎を見つめて.....茅 幸二



表紙写真説明

左上；実験体験中！（第1回夏の体験入学）

左下；ナノクラスター質量分析装置

（本文6ページからに関連記事）

右下；二期工事が竣工した山手地区（旧E地区）

既にご承知の通り、本年4月1日から、それまで日本各地にあった13の「大学共同利用機関」が、法人化に伴い4つの機構に再編された。分子科学研究所は、他の4つの研究機関、すなわち国立天文台、核融合科学研究所、および岡崎にある基礎生物学研究所、生理学研究所と共に自然科学研究機構（National Institutes of Natural Sciences）に所属することになった。これらの研究機関は、いずれも独自の存立基盤と歴史を持ち、それぞれの分野で先端的な研究がなされてきており、我が国はもとより国際的にも先導的な役割を果たしてきた研究拠点であって、今風に言えばCenter of Excellenceなのである。それが法人化ということで一つの組織に属することになった訳であるが、縁あってその機構の長となった私は、正直に言うと、当初どのようにまとめていくべきか当惑したこともあった。

法人化という名分のもとのこのような再編については、問題は多々あることは確かであるが、私は今や自然科学研究機構に属する5つの異質な研究機関の再編統合の善悪を議論するよりは、寧ろこの新たな再編によってどのような利点が期待できるのかを考え、そのためには何をなすべきかを考えるべきであろうと思う。すなわち、宇宙、物質、エネルギー、生命などの広範な自然科学の領域を担う5つの研究機関においては、それぞれの分野でこれまで通り、あるいはそれ以上の先端的研究を続けていくことは言うまでもなく、更にそれぞれの分野を超えて互いに連携し、新しい自然科学の領域を創成することへ向けての努力をすることであろう。

分子科学研究所は、これまで分子科学の領域で卓越した業績を挙げてきていることは周知のことである。分子科学というとやや漠然とした印象もあるが、物理化学は勿論、錯体化学、有機化学、生物化学等の広い分野にまたがる分子動態の解析を中心に、優れた業績を収めて来られていることと認識している。それは、おそらく設立当初に分子研でなされた研究に比べると、かなり広く総合的な分子科学に様変わりしているのではあるまいかと素人ながら想像している。しかし今回の法人化によって、分子科学研究所で研究する方々は、更に異質な自然科学の分野と接する機会が多くなるものと確信している。そういった中で、これまでの学問から大きく飛躍した、新しい分子科学が生まれるかもしれないと秘かに期待している。

科学が進展していくと、いろいろな学際的な領域が生まれ、次第に科学はグローバル化していくことは避けられないことである。そのなかで絶えず新しい大きな発見がなされ、そして新たな科学が誕生していくのである。今回の法人化がこのグローバル化の勢いを加速し、分子科学研究所の将来にとって多少とも役に立つことを切に願うものである。

新たな分子科学研究所への期待



自然科学研究機構長 志村 令郎

ごあいさつ

中 村 宏 樹

前48号の「レターズ」欄で既に「遺言」を書いたのですが、図らずも寿命が延びて分子研所長を務めることとなり、ここで改めて皆様にご挨拶申し上げますこととなりました。素より微力ですが、まずは、皆様のご支援を宜しくお願い申し上げます。周知の通り、本年4月から岡崎国立共同研究機構はなくなり、分子科学研究所は法人化に伴って、他の4機関（基礎生物学研究所、生理学研究所、国立天文台、核融合科学研究所）と共に自然科学研究機構を構成し新しいスタートを切っています。5機関の独自性と自主性を互いに尊重しつつ更なる発展を行うことが期待されていますが、この法人化は基礎科学、特にスモールサイエンスにとって決して見通しの明るいものではありません。基礎科学のあり方を、我々一致団結して、訴え続ける努力をしていかねばなりません。一方、国の予算に支えられて、比較的恵まれた環境の中で基礎研究を行っている我々は、今まで以上に自己に厳しくあらねばなりません。



分子研は、今や、“IMS”として世界中に広く知れ渡り、分子科学研究のメッカの一つと考えられるまでになっています。この重みを深く受け止め、研究者一人一人がそれぞれの分野において「世界一」を目指した研究を遂行することが必要です。「欧米で上手く行っているからやる」とか「日本では初めての研究だから」と言った思考は止めるべきです。分子研には優れた人材がそろっています。真に独創的な研究を行い、優れた成果を上げていくことこそが、学術行政や世の中の風潮の間違いを正す為に我々が採るべき最も肝要な道



だと思っています。言うまでもなく、最も重要な要素は「人」です。分子研は、法人化に伴う「民法に基づく任期制」を採用せず、分子研が今まで実行してきた「独自の人事政策」を堅持することを決めました。厳しい採用人事を行うと共に、内部昇格を許さないという立場を堅持します。人事部会の外部委員の先生方には、大変なご苦勞をお掛けすることとなりますが、この場を借りて改めてお願い申し上げたいと思います。更には、この様な人事政策が広く各大学で採用される様になることを願っています。

基礎学術研究の理念と精神を守り訴えていくに当たって、大学共同利用機関の役割が以前にも増して重要になっています。大学共同利用機関がお互いの連携を深め、日本のより良い学術研究体制の構築を目指して一層の努力をしていかなばなりません。分子研は、周知の通り、分子を要とする「物質科学」、光を要とする「光分子科学」、及び、「理論・計算分子科学」を3本の大きな柱として、独自の独創的研究を遂行すると共に、それぞれの大型施設を全国の共同利用に供すると言う大きな役割を担っています。新たな導入が決まった世界最高性能の核磁気共鳴装置も、その活用によって世界初の画期的な成果を出すと共に、全国共同利用施設として提供出来る様努めねばなりません。この様な大学共同利用機関としての重要な役割を広く世間に理解してもらうことも益々重要な課題となってきました。全国の分子科学コミュニティの皆様の声と支援をお願いしたいと思います。

最後に、岡崎3研究所のE地区（今後山手地区と呼ぶようになりました）に所属する方々の移転が終了し、分子研関係者も二つのキャンパスに分かれることとなりました。シャトルバスの運行やシャトル運送も開始されました。相互の協力と一体的連携を密に保つ様努めたいと思います。

最後にもう一度、分子科学の発展の為に苦しみながらも楽しく真に独創的な研究に邁進しましょう。

分子研レターズ50 目次

巻頭言	
新たな分子科学研究所への期待	志村令郎 1
ごあいさつ	
ごあいさつ	中村宏樹 2

	研究紹介	
	コアシェル型有機金属クラスターの精密合成と 基本物性の理解に向けて	佃 達哉 6
	New Lab (研究室紹介)	
	分子研、こんにちは	松本吉泰 10
	お茶を一服	櫻井英博 12
	計算センターの外から内へ	森田明弘 15

レターズ		
岡崎を見つめて	茅 幸二	18
ニュース		
UVSOR 高度化と 20 周年記念	小杉信博	20
第 14 回分子科学研究所オープンハウス	川口博之	22
大往生（松戸さん やすらかに）	酒井楠雄	24
分子研を去るにあたり		
夢の実現	加藤立久	26
箱根を越えて	鈴木陽子	27
修行時代	井口佳哉	28
化学者と物理学者が融合できる場所—分子研	藤山茂樹	29
IMS フェローの待遇改善を願う	庄司一郎	30
人生って素敵なものですね	酒井楠雄	32
On leave from IMS	Andriy Kovalenko	33
困ったことになったなあ？	酒井 誠	35
二年一昔？	細越裕子	36
流動研究部門を去るにあたり		
流動研究部門をぜひ続けてください	水野 彰	37
流動部門よ永遠であれ !!!	谷本能文	38
帰ったら法人化	石田俊正	39
流動部門を去るにあたり	大庭 亨	40
外国人研究員の印象記		
Memories of my visit at the Institute for Molecular Science		
	Peter Pulay	41
Clusters at UVSOR	Echart Rühl	43
Oh! My Japanese life!	Roman B. Morgunov	44



	受賞者紹介	
	平等拓範助教授に文部科学大臣賞（研究功績者）	46
	藤原秀紀助手に日本化学会進歩賞	47
	山中孝弥技術班長に日本化学会化学技術有功賞	48
	三浦伸一助手に分子シミュレーション研究会学術賞	49
	外国人研究員の紹介	
	Prof. RÜHL, Eckart	51
	Prof. COUPRIE, Marie Emmanuelle	52
	Prof. BOO, Bong-Hyun	53
	Prof. WAN, Li-Jun	54
	Prof. LABALANQUIE, Pascal	54
	Prof. OSHEROV, Vladimir I.	56
	Prof. VAROTSIS, Constantinos	56
	Prof. SUN, Wei-Yin	57
	新人自己紹介	59
	総合研究大学院大学	74
	平成 15 年度総合研究大学院大学学位取得者及び学位論文名	
	総合研究大学院大学平成 16 年度(4 月入学)新入生紹介	
	岡崎 IMS コンファレンス報告	76
	課題研究報告	
	高速時間分解分光による孤立分子および	
	分子集合体のフォトクロミック機構の解明	80
	溶液中でのナノ会合体の自己組織化に関する理論構築	90
	末端酸化酵素の高酸化状態反応中間体の構造化学	94
	分子研研究会開催一覧	99
	分子研コロキウム・分子科学フォーラム 開催一覧	100
	共同研究実施状況	101
	海外渡航一覧	104
	人事異動一覧	106

コアシェル型有機金属クラスターの精密合成と基本物性の理解に向けて

分子スケールナノサイエンスセンターナノ光計測研究部門 佃 達哉

はじめに

金属クラスターが、ナノデバイスなどの機能単位として興味を集めている最大の要因は、それらがバルク金属ではみられない特異的な性質を示すことと、その性質が構成原子数（クラスターサイズ）や幾何構造などの構造パラメーターによって顕著に変化することであろう。さらに金属クラスターの表面を有機分子で化学修飾することによって、安定性が増すばかりでなく、複合化による相乗的な機能の発現が期待できる。このようなコアシェル型の有機金属クラスターの代表例としては、1994年にSchiffrinらが報告した、チオール単分子膜保護金属クラスター（Monolayer protected clusters: MPCs）が挙げられる¹⁾我々は、数～百量体程度の金属クラスターをコアとするMPCを主として取り上げ、コアサイズやチオールの配位がその構造・安定性・基本物性にどのような影響を及ぼすかを分子科学的な観点から明らかにすることを目指している。特に現段階では、目新しい機能を持つクラスターを追い求めることよりも、ナノマテリアル研究を進める上で基盤となるような普遍性の高い方法論を開発・確立することに主眼を置いて研究を進めている。ここでは、具体例を挙げながら、我々の取り組みについて紹介する。

魔法数金クラスターの単離と同定

塩化金酸 HAuCl_4 の5 mM メタノール溶液に3～6倍等量のカルボン酸チオールRSH（図1）を加えると、 $(-\text{Au(I)}-\text{S(R)})_n$ ポリマーが得られる。これを氷浴下で激しく攪拌しながら、 NaBH_4 の水溶液を加えると、 Au:SR クラスターが黒茶不溶物として

生成する。未反応のチオールなどの不純物を遠心分離法によって除去した後、真空乾燥することによって、粉体としてクラスターを得た。こうして得られた、グルタチオン（GTR）保護金クラスターを透過電子顕微鏡で覗いてみると直径1 nm程度の微小金粒子の存在がcaろうじて確認できる²⁾この Au:GTR クラスターを水に溶かすと茶色の溶液となる。金コロイドに特有のプラズモン吸収が見られないことから、コアサイズが2 nm以下であることは容易に推察できる。

このように調製条件を最適化すれば平均サイズを1 nm程度にそろえることはできるが、金属原子の凝集過程には統計的なばらつきがあるため、すべてのクラスターサイズを原子分解能で揃えることは原理的に不可能である。そこで、高い分解能と再現性をもったサイズ分離法の開発が必要である³⁾アルカリ条件下ではGTRのカルボキシル基が解離するため、 Au:GTR クラスターは負に帯電する。このことを利用して、ポリアクリルアミドゲル電気泳動によるサイズ分離を行った^{4,5)}先に示した Au:GTR クラスターは、6時間程度の泳動後に、色の異なる複数のバンドにはっきりと分離した。各分画成分を含むゲルを切り出し、水中に静置し、水溶液として回収した。

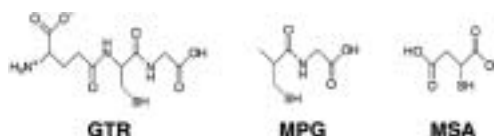


図1 本研究で用いたカルボン酸チオールの構造。

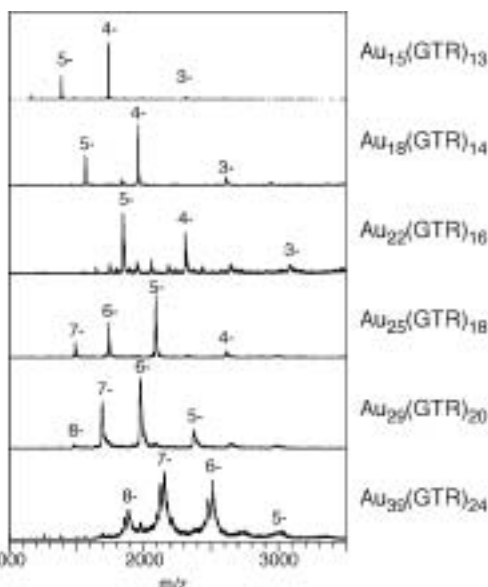


図2 Au:GTR クラスターの各分画成分のESI質量スペクトル．図中の数字は，カルボキシル基の解離によって生じた多価イオンの価数をあらわす．

サブナノ MPC では，金属コアを構成する原子の大部分がチオールとの化学吸着に参与しているため，コアサイズのみならず表面有機分子数を正確に評価することが重要である．そこで我々は，エレクトロスプレーイオン化源とレーザー脱離イオン化源を持つ質量分析装置を自作し，質量分析法による組成評価を進めている．電気泳動によって分離した Au:GTR クラスターの化学組成を，エレクトロスプレーイオン化質量分析法を用いて調べた．クラスターの水溶液を，高電圧（約 3 kV）を印加したニードルから接地キャピラリーに向けて一定流量でスプレーし，クラスターを含む微小な液滴を発生させた．通電過熱したキャピラリー中を通過させることによって脱溶媒化を促進させ，液滴中からクラスターを気相イオンとして非破壊的に取り出した．これを真空中に導入し，飛行時間型質量分析器で検出した．各分画成分の質量スペクトルを図 2 に示す．驚くべきことに，各成分は $\text{Au}_{15}(\text{GTR})_{13}$ ， $\text{Au}_{18}(\text{GTR})_{14}$ ， $\text{Au}_{22}(\text{GTR})_{16}$ ， $\text{Au}_{25}(\text{GTR})_{18}$ ， $\text{Au}_{29}(\text{GTR})_{20}$ ， $\text{Au}_{39}(\text{GTR})_{24}$

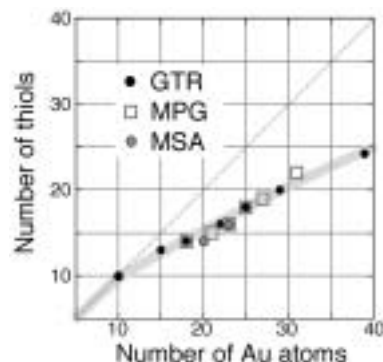


図3 安定に単離した金 MPC の組成プロット．

(GTR)₂₄ など，単一成分のクラスターのみを含むことがわかった．図 1 に示したその他の配位子についても同様の実験を行い，安定に単離されたクラスターの組成を決定し，図 3 にプロットした．

図 3 から，いくつかの新しい知見が得られた．

Au(111)表面でのアルカンチオールの被覆率が 33% であるのに対して，金クラスターに対する被覆率は圧倒的に大きい，特定サイズ of 金クラスターが選択的に得られる，そのサイズが保護配位子の構造によって変化する．の事実，MPC の安定構造や魔法数が主に金属コアの構造的な安定性によって決定されるという従来の概念に一石を投ずるものである．魔法数クラスターが選択的に生成する理由については現在検討中だが，熱力学的な安定性よりもむしろ，速度論的な安定性によって支配されている可能性が高い．すなわち，チオール単分子膜の形成によってコアの連続的な成長が速度論的に阻害されることによって，ある特定サイズの金クラスターが選択的に生成すると考えるのが妥当であろう（図 4）．

MPC の化学組成と電子構造

単離したクラスターの電子構造はコアサイズに依存して顕著な変化を示す．先に述べた Au:GTR クラスターの紫外可視吸収スペクトルと発光スペクトルを図 5 に示す．コアサイズが数個変わるだけで，電

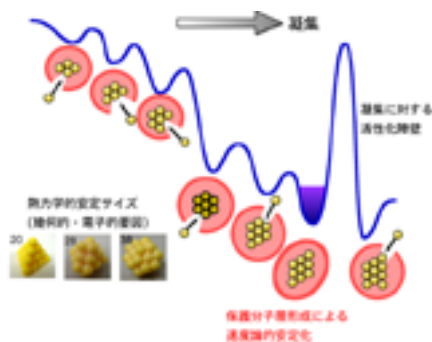


図4 MPCの生成過程に関する模式的ポテンシャル曲線．熱力学的に安定なコアが形成されても保護膜がさらなる金属原子の凝集を防ぐことができなければ，さらに反応は進行してしまう．

子状態が顕著に変化する様子が読み取れる．吸収スペクトルにはHOMO - LUMOギャップに相当する立ち上がりが観測され，サイズの減少と共にブルーシフトする．このことはクラスターの電子準位が離散化され，金属的な性質が失われていることを表している⁶⁾．実際に，バルク金属では見られないフォトルミネッセンスの現象が観測された⁷⁾．発光の量子収率は 10^{-3} のオーダーであり，バルクの金に比べると7桁程度の増大に相当する．さらに，たとえ化学組成が同じであっても，チオールの構造によって電子構造が変化することを初めて見出した（図6参照）．このことは，配位するチオールの構造を反映して金コアの構造変形が誘起される，あるいは金コアに対する配位サイトがチオールの構造によって変化する，などMPCの電子状態の繊細さと柔軟性を示す好例であろう．

おわりに

カルボン酸チオール単分子膜で保護された金サブナノクラスターを対象として，ゲル電気泳動に基づくサイズ選別，および質量分析法による化学組成の評価を行った．その結果，原子分子レベルで厳密に組成が規定された一連の魔法数クラスターの単離・

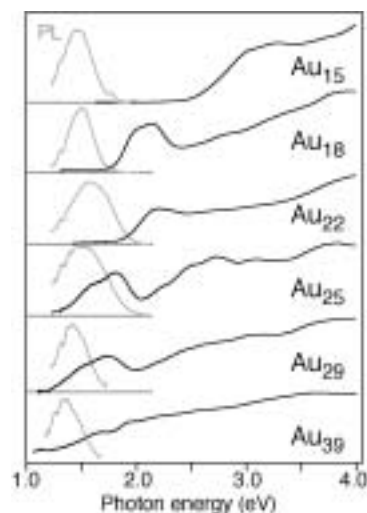


図5 Au:GTRクラスターの吸収スペクトルと発光スペクトル(PL)．

同定に初めて成功した．MPCの安定性や構造について，下記の特徴を明らかにした．

金クラスターに対するチオールの被覆率は，バルク金表面に比べて圧倒的に大きい．

MPCの安定性はコアサイズだけでなくチオールの配位による影響を受ける．

MPCの電子状態はコアサイズおよびチオールの吸着数や構造に敏感に依存する．

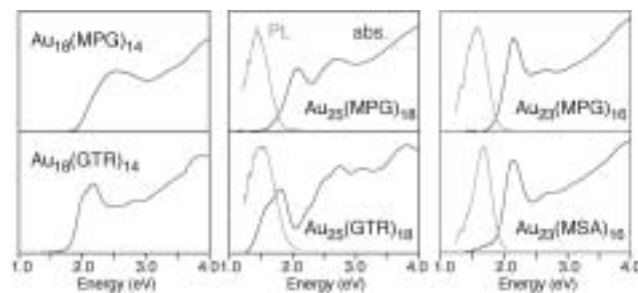
サブナノMPCでは，フォトルミネッセンスなど，バルクにはない性質が発現する．

今後は，これらの精密分離・精密評価技術をさらに発展・深化させ，コアシェル型有機金属クラスターの化学組成を精密かつ自在に合成するための方法論の確立へとつなげてゆきたい．また，得られた有機金属クラスターの基本的性質と構造パラメーターの相関を明らかにすると共に，周辺分野との連係を深めつつ触媒などの新しい機能の探索を進めてゆきたい．

謝辞

最後に，本研究は下記の方々の御尽力によるものです：根岸雄一博士（分子研助手），村山美乃博士

図6 MPCの化学組成と電子状態．



(IMS フェロー), 木村啓作教授(兵庫県立大学), 信定克幸助教授(現分子研), 櫻井英博助教授(現分子研), 一國伸之助教授(千葉大). この場をお借りしてお礼申し上げます.

共同で解析を進めている. K. Nobusada, *J. Phys. Chem. B* **108**, 11904 (2004).

- 7) Y. Negishi and T. Tsukuda, *Chem. Phys. Lett.* **383**, 161 (2004).

参考文献

- 1) M. Brust *et al.*, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 801 (1994).
- 2) チオール還元能を利用した簡便なサブナノMPCの調製法については下記を参照.
Y. Negishi, H. Murayama and T. Tsukuda, *Chem. Phys. Lett.* **366**, 561 (2002); Y. Negishi and T. Tsukuda, *J. Am. Chem. Soc.* **125**, 4046 (2003).
- 3) ゲル浸透クロマトグラフィーによるアルカンチオール保護Pdクラスターのサイズ分離については下記を参照.
H. Murayama, T. Narushima, Y. Negishi and T. Tsukuda, *J. Phys. Chem. B* **108**, 3496 (2004).
- 4) T. G. Schaaff and R. L. Whetten, *J. Phys. Chem. B* **104**, 2630 (2000).
- 5) Y. Negishi, Y. Takasugi, S. Sato, H. Yao, K. Kimura and T. Tsukuda, *J. Am. Chem. Soc.* **126**, 6518 (2004).
本論文掲載後に行った質量分析装置性能の向上・サンプル調製法の改良・ホモグルタチオンを使った参照実験の結果, 各分画成分の化学組成の帰属は本稿の図2に示したものが妥当であることが明らかになった. 以前の帰属との誤差は0.2%程度である.
- 6) 吸収バンドの帰属については, 理論グループと

分子研、こんにちは

分子スケールナノサイエンスセンターナノ光計測研究部門 松 本 吉 泰

分子研の皆さん、はじめまして。総合研究大学院大学から異動となり、この4月1日付けで赴任しました。もっとも、昨年度から総合研究大学院大学からの併任教官として1年間分子研に籍を置いていたので、本当は昨年はこの記事を書くべきだったのかもしれません。

私が電子構造研究系の助教授として分子研で仕事をしていたことを知っておられる方は結構多いかもしれません。しかし、私が分子研に来たのは実はこれで3度目になるということをご存知でしょうか。というのは、短期間ではありましたが私は助教授として赴任する以前にも分子研で仕事をすることがあります。1984年にアメリカで博士研究員を終え、日本での定職が無いまま帰国し、その当時物性化学研究部門の教授をしておられた井口先生（元分子研所長、岡崎国立共同研究機構長）の御好意で正畠先生（当時分子集団研究系助教授）のグループに特別協力研究員として研究をさせていただきました。あの頃は今と違って国内での博士研究員のポジションはほとんど無く、IMSフェローの数もずいぶん少なかったと記憶しています。幸い帰国して分子研に身を寄せてからはまもなく理化学研究所に就職口が決まったので、結局、分子研で研究をしたのは半年ほどでした。ただ、定職につかず妻子をかかえての生活は経済的にはもとより精神的にもきついものでした。その後、1990年に先ほどにも述べた電子構造研究系の助教授として着任し、総研大に転出するまでの約8年を岡崎で過ごしています。自分の新しい研究の進展と小学校から中学校へ進学する育ち盛りの子供たちを見ながら、充実した時間をすご

せました。そして、このたび分子スケールナノサイエンスセンター・ナノ光計測研究部門の教授として総研大・葉山から赴任したわけです。分子研に最初に来たときは30歳そこそこ、2度目は30代後半、そして3度目は50歳そこそこ、岡崎に来た年齢も当然違いますし、立場もずいぶん違います。自分だけのことを考えていればよかった時代から自分の研究チーム、そして今度は多少なりとも所全体のことも考えねばならない……。こんな風に振り返って見るとよくよく私は分子研と縁があるものだと感心してしまいます。また、それだけ私の研究生活の中で分子研の存在はたいへん大きなものといえます。

助教授として赴任した時に私は気相の分子分光の世界から表面科学への世界に足を踏み入れましたので、傍目には大きく分野が変わったと思われています。以来十数年が経ったわけですが、私自身はそれなりに首尾一貫しているつもりです。つまり、研究対象や手法が変わっても私の興味は常に「光が物質と相互作用することによって生じるさまざまな物理、化学過程のメカニズムやダイナミクスを解明し、これらの過程の制御をめざす」ことにあるからです。総研大に転出して光科学専攻を作ったのもこの興味を基礎としています。

さて、気相分子から固体表面と相互作用する分子へ研究対象を変えた大きな理由の一つは、表面は局在化した電子系（原子、分子）と非局在化した電子系（固体）が会うという特殊な場所であるということです。孤立分子系や固体物理の言葉だけでは記述できない難しさが表面にはあり、また、そこに魅



力を感じたわけです。気相では起きそうもない反応がいかに簡単に固体表面で起きてしまいますし、孤立分子系で慣れ親しんだ電子励起状態とその反応性を固体表面に吸着した分子系ではどのように捕らえたいのかという概念的な問題もあります。助教時代は表面での光化学を中心課題として仕事をスタートさせましたが、最近では表面での電子や原子核のダイナミクスを直接とらえるという点に研究の焦点が移ってきました。このダイナミクスの研究は今回こちらで始める研究室でも一つの柱として行っていくつもりです。したがって、私のグループでは、超高真空下でよく規定された固体表面を用い、ここでの分子構造、電子状態、光反応、および、電子や原子核のダイナミクスに関する研究を行っています。主な研究手法としては、紫外光電子分光、X線光電子分光、オージェ光電子分光、低速電子線回折、昇温脱離、反射赤外吸収分光、走査型トンネル顕微鏡など種々の表面科学的手法があげられますが、これに加えて超短パルスレーザーを用いた多光子光電子分光、第二高調波発生、和周波発生などの時間分解非線形分光法を用いています。

現在のグループメンバーは、助手の渡邊一也君、博士研究員の長尾昌志君、猪野大輔君、総研大生の澤田健君、山口大君、冬木正紀君で、これに客員助教授の高木紀明さん（総研大）に共同研究者として参画していただいています。また、8月からはもう一人の助手として松本健俊君が加わる予定です。決して大きなグループではありませんが、すべてのグループメンバーと密にサイエンスを共有できる適正規模であると思っています。助教教授で赴任したとき

半年間ほど一人で過ごしたことを思うとこれだけの仲間と研究をスタートできるのは夢のようなことです。

総研大での6年間に、自分の専門分野とはずいぶん違う分野で仕事をしている人たちと出会う機会がありました。また、分子研を外から見る時間を持ったことにより、自分の仕事、分子研、そして物理化学分野を相対化して考えるという習慣もできました。分子研から自分の関連分野だけを見ていたときは、分子研だけでも広い分野をカバーしていると思ったものですが、世の中は本当に広い。自分ではずいぶんいろいろと分野を変わってきたつもりでしたが、まだまだ狭い分野の中のことに拘泥している部分がずいぶんあると気づきました。

分子研に来た新任教官はだれでも新たな抱負を持って仕事を始めようとするし、それがかなえられる場所であると信じています。私も単に古巣に戻ったということではなく、新たな研究対象、研究方法を物理化学の中に取り入れ、開発していくことにより、この分野の活性化に役立ちたいと思っています。今後ともよろしくお願いします。

お茶を一服

分子スケールナノサイエンスセンターナノ触媒・生命分子素子研究部門 櫻井 英 博

2003年10月1日付で併任、そして2004年4月1日付で専任で、分子スケールナノサイエンスセンターナノ触媒・生命分子素子研究部門の助教授に赴任いたしました。転居の葉書を用意しているときに、正式名称「大学共同利用機関法人～」から書いてみると肩書きが3行にわたってしまい、その長さに自分でも呆れてしまうほどでした。「法人化は肩書きが長くなるだけ」ではないでしょうが……赴任時期等に関しては各方面の方々のお世話になりました。特に前所長の茅先生や、小生の部門の教授である魚住先生には大変お世話になりました。誌面を借りて御礼申し上げます。実は半年の併任期間はほとんど顔を出すことができず、教授会での新任者挨拶というのをしないうまま現在に至っています。

分子研との出会いは3年ほど前にさかのぼります。大学時代の同級生である佃達哉助教授に、彼らの合成している金属ナノクラスターの触媒活性に関して相談に乗っているうちに、協力研究という形でちょくちょく岡崎に寄せてもらうようになりました。お陰様で、岡崎に住むのはもちろん初めてなのですが、その割に東岡崎駅付近の居酒屋は結構知ってたりしますし（今は山手地区なのでかえって行かなくなるかも）、イオンデビューも2年ほど前に果たしています。

その当時の分子研の印象は、たまに行く程度だったのでそれほど強くはないのですが、居室と実験室が各グループ点在していてちょっと不便そうでしたが、その分いろいろな人と廊下等で会う機会も多く、またディスカッションするのに抵抗が少ない、という感じはありました。逆に、今山手地区では私の

グループ以外のほとんどのグループはひとつのフロアにすべて居室・実験室が固まっていた、もちろん運営的には楽になったのですが、むしろ積極的に行かない限りあまり人に会わなくなった気もします。実は前々任地の東大理学部はどちらかというと前者、前任地の阪大工学部は後者のスタイルで、やはりディスカッションに対するしきい値という意味では同じ印象を持っています。実際、学生時代皆さんのいた研究室は、私の研究室とは全く違う分野でしたが実験室は向かい同士で、その当時からよく研究の相談をしていましたので、結構口 케ーション効果はあるのかもしれませんが。もっとも、今でも私のグループは居室、実験室、秘書室と見事にばらばらで、山手3号館、4号館をよく歩き回っていると思いますので、皆様気軽に声をかけて下さい。

それにしても持つべきは良き友人で、2年の協力研究終了後も佃グループとは協力関係が続いていて、赴任直後の一人きりの状態で、本業(?)の方はまだ全く動いていないにも拘わらず、彼らとの共同研究の方はそれなりに進行しており、ばたっと研究がストップする感じにならず、スムーズに本格復帰できそうです。6月1日にはいよいよ助手の東林修平さんも赴任し、このレターズが発行される頃には本業の方も動き出しているのではないかと思います。

さて、ナノクラスター触媒以外にこれから始めようとしているテーマについてですが、バッキーボウル・ヘテロフラレンを研究対象とする予定です。バッキーボウル(bucky bowl)とはフラレンを部分的に切り取ったお椀状化合物群の総称で、6員環と5員環が連なった歪んだ非平面共役化合物です。



これらの化合物は、非平面系における共役効果の観点からフラレーン発見前から一部研究対象とはなっていたのですが、発見後は、フラレーンモデル化合物としても注目されてきました。

バッキーボウル分子には、ボウル型構造に由来する独特の特性も有しています。例えば、溶液状態における動的特性としてボウル構造の反転が挙げられます。これは、半分に切った軟式テニスボールを想像していただければわかりやすいのですが、ある程度の深さのボウル分子までは、ボウルの底の部分が頂点に変わるような反転（傘の反転を思い浮かべていただいても構いません）が起きることがわかっています。これは化学的にはある程度大きな共役系がある一定の規則で方向を変化させていることになり、また、ボウルの内側と外側を交互変換できることを意味します。これらの特徴は、ナノスケールでのスイッチングに応用することが可能です。

一方、ボウル型構造は固体状態でも特徴が見られます。この場合はより堅いボウル、例えば食器のお椀を想像していただければわかりやすいのですが、固体状態ではボウル型分子は同じ向きにしかも垂直方向に揃ったカラム構造をとりやすくなります。これは通常の平面構造分子のカラム構造が必ずしも垂直方向に90度で揃わないのと対照的です。また、それぞれのカラムにおけるボウルの方向が揃った場合、固体状態で双極子モーメントを有することになり、新たな有機導電体の基本骨格として考えることができます。

さらに、これらのバッキーボウル分子はフラレーン分子、特にこれまで調製困難であった人工フラ

レーン分子、フラレーンの一部を炭素以外の他の元素に置換したヘテロフラレーン分子の合成中間体として位置づけることもできます。

このように、基礎化学だけでなく、応用面からもバッキーボウルは興味をそそられる分子なのですが、残念ながらこれまではほとんど研究が進んでいなかったのが実情です。その理由の一つに、合成が極めて困難であったことが挙げられます。バッキーボウル分子の中でも最も精力的に研究が行われているのが C_5 対称基本骨格構造分子であるコラヌレンという化合物ですが、この誘導体は一般に瞬間真空熱分解法（Flash Vacuum Pyrolysis）という手法で合成され、通常の有機合成的手法では極めて多くの段階を必要とします。また、これらの研究はアメリカのいくつかのグループが先行しているため、なかなか新規に参入しにくいという事情もあるようです。さらに、他の対称性を有する分子、例えば C_3 対称基本骨格構造分子であるスマネン、 C_2 対称のピナケンなどは、FVPを用いても合成は達成されていませんでした。合成自体ができない分子に対する研究が進むわけありません。

それではなぜバッキーボウル分子は合成が困難なのか？ の問いに対し、アプローチの方法に問題があると考えたわけです。¹⁾ バッキーボウルは先述したように非平面共役化合物です。従って、ほとんどのグループは共役化合物であることに視点が向いているのか、共役系の平面状の前駆体をまず合成し、それを最後にボウル状に曲げようとする経路を検討していました。この経路の場合、どうしてもその歪みエネルギーを獲得するために、FVPのような過酷

な条件を必要としますし、また限界もあるのは当然です。そうではなく、逆にボウル型の分子をあらかじめ構築しておき、それを最後に芳香族化すれば良いのではないかと、つまり3次元構造を簡単に構築できる飽和炭化水素 (sp^3 炭素) を積極的に利用しようと考えたのです。

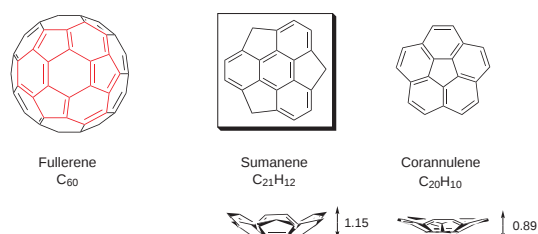
こう書いてしまうとあまりに単純で、なぜ今まで検討されていなかったんだろう? と思ってしまいますが、とにかく、この逆の発想を基に、 C_3 対称分子“スマネン”の初めての合成に成功しました。しかもこの合成経路は、FVPのような特殊な条件は必要とせず、通常のフラスコ反応で、しかも安価で容易に入手可能なノルボルナジエンからわずか3~4段階で達成しています。²⁾

飽和炭化水素を利用した以上のような合成経路の考え方は、スマネンに限らず広く一般的にこれらバッキーボウル分子の新しいアプローチとして通用すると考えられます。また、さらに大きなメリットは、炭素以外の原子、例えば窒素やホウ素、硫黄などを適当な位置に導入する手法の開発が可能になることです。つまり長期的には、ヘテロフラーレン類のテーラーメイド合成にもつながる基礎技術になり得ると考えています。

そこで、我々のグループでは、まずこの(ヘテロ)バッキーボウル合成の新アプローチの一般性を確立することを第一目標に考えています。まずはこれまで合成できなかった他のバッキーボウルやヘテロバッキーボウルを簡便に合成できることを示し、さらに、それらの物性評価、機能性分子への応用を平行して行い、その結果をフィードバックしてさらに新

たな分子設計・合成へとつなげていけるようにしたいと思います。

よく、有機合成による複雑な化合物の合成は積み木に例えられることが多いのですが、我々の場合は、その形状からしてむしろ陶芸に近いかもしれません。そういう意味では、瀬戸や常滑にも近いこの岡崎の地で、新たに窯を立ち上げ、せっせとろくろを回し(むしろ手びねりでしょうか)、至高の抹茶茶碗(さすがに急須分子とまではいきませんので……)を作り上げる気概で始めていきたいと思っています。この文章を読まれた方の中で、お椀作りやあるいはできたお椀分子に興味を持たれた方は、いつでもご連絡頂ければ幸いです。是非お茶を一服、御相伴下さい。



- 1) 「ボウル型共役炭素化合物“スマネン”の実用的合成」, 櫻井英博, 生産と技術 55 (3), p. 52 (2003) .
- 2) “A Synthesis of Sumanene, a Fullerene Fragment,” H. Sakurai, T. Daiko and T. Hirao, *Science* **301**, 1878 (2003).



計算センターの外から内へ

計算分子科学研究系・計算科学研究センター 森 田 明 弘

2004年1月1日付けで岡崎共通研究施設の計算科学研究センターに赴任しました森田です。計算センターには前任地の京都大学の時代から外部ユーザーとしてお世話になっておりましたが、分子研で研究室を構えるというのは心躍る思いでありました。どうぞよろしくお願いいたします。

実際自分が内部の人間になって多少運営にも関わってみて、今まで研究しかしたことのなかった私としては、毎日が新しい経験の連続でした。今まで外部ユーザーとして文句を言っていたことが、今度は自分にそのままはね返ってくることになります。また計算センターは一つの部局としては所帯が非常に小さく、私のような新米でも自分の研究室のことだけにまかしているわけにはいきません。赴任していきなり法人化に伴う改組や計算分子科学研究系の新設など波風の高い政治的に重要な場面に立ち会い、一方でこれは大変なところに来たものだとも思いました。やっと少し慣れてきたところですが、この間センター長の永瀬先生、岡崎先生をはじめ、センターの皆様には、あらゆる面で大変にお世話になりました。改めてお礼を申し上げたいと思います。

さて、計算センターに来て最初に感じたことは、技官の人たちの有能さと役割の重さでした。大学では技官の役割は私にとってやや見えにくいものでしたが、センターでは技官が運営の主役で、教員側と対等かそれ以上の内容をもっておられることは大変に印象的でした。私など教えられることばかりですが、この借りは今後担当する計算機システム更新作業のときに返さなくてはならないと思っています。とはいえ、現在の体制では技官の個人的な有能さに

頼った運営の部分が長く、技官体制のシステムティックな確立と充実は計算センターとしては差し迫った問題です。

計算センターの基本的な役目は言うまでもなく、全国の大学などの研究者に計算機資源とライブラリやノウハウなどを提供して、計算化学・物理などの研究を推進する共同利用施設で、昨年で133グループ、550人のユーザーに利用されています。その意味での重要性には今後も変わりなく、近年では理論家のみならず実験研究者の利用が広がっています。しかし各人が自前でパソコンなどの計算環境をもつようになるにつれて、センターの役割も今水面下で変革の最中にあり、非常に多面的な役割を求められていることに、赴任してすぐに気づかされました。これは決して易しいことではありませんが、センターの生き残りのためには避けて通れない道でもあります。共同利用としても、小口の一般ユーザーへの支援と、先端的な大規模計算研究の推進の両立は以前から多く議論されてきた問題ですが、今でも模索中の最も新しい問題です。昨年は、従来の共同利用に加えてナノグリッド(NAREGI)プロジェクトが動き出し、センターの役割と業務量は一気に2倍になりました。さらに研究者としては、センター業務だけでなく、自らの研究を推進していかななくてはなりません。全体として、センターが計算化学・物理の研究体制の中で能動的な役割を果たすことが、以前にも増して望まれているといえます。

やや責任感を感じすぎて(?)大上段の話になってしまいましたが、少し自分自身の研究や研究室

のことなどをお話したいと思います。私は修士までは物理化学の実験をしており、東大(当時)の朽津耕三先生、梶本興亜先生の指導を受けて気相反応および超臨界流体中の分光実験をしました。分子研に来てみて、久しぶりに再会した先輩方などもおられます。博士課程から京都に移って理論化学に転向し、そのまま京都にいました。京都では、加藤重樹先生のもとでスピン-軌道相互作用の電子状態プログラムを書いて学位をとりました。その後、分子内の電子分極の理論を開発し、分子動力学シミュレーションを併用して溶液内での分子の拡散や振動緩和のダイナミクスなどを研究しました。そうしているうちに、1999 - 2000年にコロラド大学のCasey Hynes教授のところに留学する機会があり、ボールダーは全米でも大気化学のメッカでもあって、不均質大気化学に興味をもつようになりました。気相と凝集相の両方にまたがった化学は界面現象との関係も深く、物理化学としても今後の問題が多く残されています。帰国後は大気化学のsocietyにも首をつっこみ、共同研究で流体力学計算や大気モデル計算の研究までやって、国内外の大気化学の人たちと論争したりしました。こうしてみると自分の研究に一貫性がないと改めて思いますが、研究の視野を広げようとする暗中模索の結果だと思っています。

現在の研究室はまだ私と秘書の川口律子さんの二人ですが、現在助手の方を選考中で、さらにポストクも一人募集中です。これからの研究の主テーマとしては、界面和周波発生分光の理論をやるつもりです。可視-赤外の界面和周波発生分光は、1987

年に初めて報告された比較的新しい分光法ですが、大気圧下での表面やwetな界面なども含めて広い応用性と多くのユニークな特徴をもつために、近年急速に実用化と普及が進みました。しかし実験の進歩に比べて理論的な解析は著しく遅れており、ほとんど経験的な解釈に留まっています。和周波発生的一般論としては1960年代の昔からありますが、物質に即して実験データを解析できるレベルの理論にはなっておりませんでした。私がこの分光法に関心をもったのは、もともと不均質大気化学への応用からでしたが、理論化学として大きな貢献をできることに気づいて研究をスタートしました。今までに私たちは、電子状態理論と分子動力学シミュレーションに基づいて、和周波発生スペクトルを非経験的に計算して解析する理論的方法論を初めて提案し、手始めに水表面のスペクトルはうまくいくことがわかりました。分子研ではこうしたシーズを育て、広く界面構造解析に貢献できる理論に完成させていきたいと思っています。

このテーマの良いところの一つは、日本国内はもとより国際的にも同様の研究を進めている人がまだほとんどいない点で、自分のペースで新しい理論を開拓しているという気分になれます。これが本当にうまくいくようになれば、今後参入してくる人も増えてくると思いますが、それとも関係しますが、第二には基礎的な理論のレベルでやることが多く、基礎理論の開発と大規模計算への発展の両方を自分の課題として視野に入れられる点で、個別の問題に特化していく以前の萌芽的な段階にあるといえます。これは私のように電子状態にもシミュレーションに



も特化できない人間にはふさわしい問題だと思います。第三には、今まであまり付き合いのなかった分野の実験屋さんとの交流が増えることで、実験家にとって役に立つ理論を開発していきたいというのは私の最も基本的な願いです。

最後に京都から岡崎に移って、岡崎での暮らしの印象を記します。現在妻と4歳の娘および岡崎に来てから産まれた0歳の娘の4人暮らしです。以前から岡崎へは研究会などで幾度となく来ていましたが、暮らしてみると言葉は別としてほとんどアメリカのように感じました。車社会でどこでも駐車場は完備されており、ショッピングセンターの規模などもアメリカにいたときを彷彿とさせます。何ごとにせよゆったりとして広いのは気持ちのよいものです。これは京都から来たから特にそう思うのかもしれません。岡崎の八丁みそも愛用するようになりました。田舎過ぎず都会過ぎず、思ったよりも暮らしやすいところで、妻ともども満足しています。

岡崎を見つめて

理化学研究所和光研究所長・中央研究所長 茅

幸 二

5年前に慶應義塾大学で、ささやかながら充実した研究生活を送っていたが、その後の5年間は、岡崎で法人化の荒波にもまれるという貴重な日々を過ごした。その岡崎を離れて4ヶ月以上経過した。3月31日に神谷町の本部で、自然科学研究機構の会合に出席し、翌日の4月1日から理化学研究所の和光キャンパス通いがはじまったが、時間がこのように早く過ぎていく経験は今までになかったことである。筆者は40年近く前に、東京大学での大学院生活を終えて、理研の研究者として5年弱をこの和光の地で過ごした。当時の理研は、私が現在勤務している中央研究所だけで構成されていた。理研はそれ以前は、駒込にキャンパス（現在日本医師会の建物がある）をもっていたが、私の着任時に和光キャンパスに移転した。今免震工事をしている7階建ての研究棟が、主で、加速器施設、工学棟、事務棟それに工作棟で構成され、和光キャンパスはひろびろと緑に囲まれた田園風景を謳歌していた。理研での5年間、真空紫外光領域の顕微分光装置を作り、分子性結晶の光励起子（exciton）を観測する研究に没頭した。放射光およびストレージリングの確立していない時期で、波長領域も150 nm以上に限定されていたが、分光器（Johnson-Onaka式直入射方式）および反射鏡を使った対物レンズを用いた顕微鏡を試作し、真空容器に格納しつつ、外部からマジックハンドで操作する装置を理研工作室に日参して2 - 3年で作り上げた。今からよく考えればかなり無茶苦茶な研究で、分子性結晶の超薄膜（100 nm程度）を分子接着に磨きあげた石英板ではさみこみで成長させ、測定に成功して結果がでて刊行したのは、

1 - 2報という惨めな結果であった。

この研究は、その後の研究開発（共鳴ラマン散乱、光音響分光、多光子分光、ナノ粒子物性研究など）にある程度の自信をもって参加できた基盤となったと同時に、私がナノサイエンスを目指したさきがけになっているものである。このような提案を認め、私の自由な研究を見守っていただいた恩師長倉三郎先生の大きな許容力に今でも深く感謝と尊敬の念を抱いている。同時に、当時の理研のもっていた、自由でのびのびとした研究環境、当時の理（物理・化学）・農・工学主任研究室の自由な交流は私の脳裏に懐かしい記憶として残っている。

この春から和光に戻った私にとって、現在の理研の発展ぶりは目を見張るものがある。キャンパス全体に、整備の整った研究棟が立ち並び、和光だけでも大学院生、PD、研究員、事務を含めて2000名程度の大所帯が世界の第一線の研究を行っている。分野別に区分けされた研究棟間の交流がスムーズに行われ、孤立した環境とならない工夫が、今浦島として理研に戻った私に課せられた重要な課題の一つである。

この春、多くの国立研究機関が法人化された。法人化に伴う自由度の増加によって競争的環境が整い、各研究機関の個性的運営が各機関の未来の成否を決定するとされている。国立大学でもベンチャー立ち上げを含むさまざまな試みが提案されている。研究者が個性的で競争的であるのは当たり前で、法人化にあたって研究機関が行うべきもっとも肝要なことは、いかに研究者に個性を発揮させ、ユニークな研究をさせるかという点にあるのではないのだろうか。



多くの研究の失敗のなかにわずかな卓抜した成果が生まれる。分子科学のリーダーである分子科学研究所が、法人化であたえられた自由度を活用して、以前に増した自由な、闊達とした研究環境を作り上げ、失敗を恐れず大きな問題提起をして次世代の科学を作り上げていかれることを祈っている。

UVSOR 高度化と20周年記念

極端紫外光研究施設 小 杉 信 博

前号でUVSOR施設の加藤政博教授が「相対論的電子ビームによる光発生法の研究」というタイトルで研究紹介されていますが、その中身はUVSOR高度化の現場からの報告ですので、高度化に関する詳細はそちらを読んでいただくとして、ここでは平成15年12月2日、3日と20周年記念を祝った研究会や祝賀会のことについて報告したいと思います。

この20周年はUVSOR施設が最初の放射光を発した昭和58年11月10日を基準にしたものです。何もないゼロの状態から始まった伸び盛りの10年を記念して10年前には10周年記念を祝ったのですが、その後、2期目の10年間は成熟期と言える一方、実態としては施設が飽和状態となり、しかも加速器の老朽化対策が不可欠になる一方、予算も減少してつらい10年間でした(になりそうでした)。幸い4年前に着任した加藤さんの検討結果に基づき、文部科学省に要求してきたUVSOR加速器の高度化計画の予算が平成14年度に認められ、加速器を高性能なものに改造することができました。そのため、20周年を高度化完成披露としても祝うことができ

ました。関係者一同、次の10年間に新たな気持ちで始めることができる幸運を非常に喜んでおります。

さて、当日は100名以上の参加者(半数以上は利用者の皆さんですが、他に文部科学省、分子研評議員、運営協議員、UVSOR運営委員、名誉教授等が所長の招へいによって参加)があり、盛況に20周年記念研究会を実施することができました。12月2日は見学会(来賓他)、高度化完成報告会、特別講演、懇親会(祝賀会)を行い、12月3日は利用者研究報告会を実施しました。会場は岡崎コンファレンスセンター中会議室及び小会議室でした。来賓の見学会は4班に分けて、施設スタッフ4人がそれぞれ分担して実施しました(評議員の方々の見学の様子(写真1))。来賓以外で久々に訪れたOBの人たちなどは施設スタッフが適宜、個別対応しました。そのあとの高度化完成報告会では、過去に振り返るのではなく将来を見据えた報告を施設スタッフの4人である私、加藤さん、繁政英治助教授、木村真一助教授で行いました。特別講演は日本放射光学会長 松下正先生(物質構造科学研究所副所長)に「UVSORへの期待」というタイトルでお話いただきました。UVSOR加速器のパラメータを少し変えると10~100 eVの領域がもう少し強くなって世界最新鋭の第3世代光源の性能になることを示され、UVSOR施設でその領域の強化についてアドバイスされました。



写真1



写真 2

UVSOR 研究会の懇親会として開催した 20 周年祝賀会では文部科学省の基礎研究推進企画官・大型放射光施設利用推進室の金谷史明室長により祝辞を賜り、そのあと、UVSOR 施設の生みの親の井口洋夫名誉教授（現在、宇宙航空研究開発機構顧問）がシャンパンによる乾杯の音頭をとられました（写真 2）。昭和 58 年 11 月 10 日の最初の放射光を一般的な First Light でなく「初点」と命名された経緯（今もコントロール室に当時の長倉三郎所長の筆によるプレートが掲げてあります。前号の加藤さんの報告をご覧ください）を伺いました。これからも気を抜かず「初点」を大事にして、30 周年、40 周年、と祝っていける施設として発展させなければならぬと感じさせるスピーチでした。また、祝賀会の合間には中川和道 UVSOR 利用者懇談会会長、北原和夫分子研運営協議員（前日本物理学会会長）、柳下明 UVSOR 運営委員からそれぞれ祝辞をいただきました。



写真 3

た。2 日目には利用者研究報告会（口頭発表に加え 50 を越えるポスター発表）が中川和道懇談会会長のアレンジで行われました。1 日目、2 日目とも会場にはポスターを常設してあったので、祝賀会の合間にもポスターを前にいろいろな議論が行われました（写真 3）。

UVSOR 施設では、高度化で生まれ変わった加速器を UVSOR-II 加速器と呼んでおります。毎年、発行している Activity Report も 10 年前に装丁を変えたのに倣って、今回、カラー版に刷新したものにしました。ロゴマークも決めました（写真 4）。また、法人化後は、極端紫外光実験施設から極端紫外光研究施設と名称変更しました。それは共同利用実験として実験装置を使っていただくお店のような受動的施設から、いろいろな共同研究の枠組みを使って研究成果を上げていく能動的施設に変わるという意味表示です。今後のご支援をよろしくお願いします。



写真 4

第14回分子科学研究所オープンハウス

2004年5月22日(土)に第14回分子科学研究所オープンハウスが開催されました。この行事は毎年一度春に開催されており、全国の大学院生・学部生および社会人を対象とする見学会です。分子研で行われている研究内容を学生向けにわかりやすく解説するとともに、総合研究大学院大学の基盤機関としての分子研の教育活動について外部の人々に知っていただくことを重要な目的としています。

3月頃から、分子科学関連分野の研究室への電子メールでの案内、全国の大学でのポスター掲示、分子研ホームページでの告知などにより、ひろく参加者を募集しました。所内のみなさんの御協力により、合計106名(学部生 30名、修士1年 36名、修士2年 15名、博士課程 20名、その他 5名)からの参加申し込みがありました。前回のオープンハウスと同様に「分子科学研究会シンポジウム」と連係して開催し、シンポジウムからの参加者も多くありました。

今回は、分子研が明大寺地区(B地区)と山手地区(E地区)の2ヶ所に大きくわかれてからはじめてのオープンハウスでしたが、明大寺-山手間にシャトルバスを30分間隔で運行していただき、両地区間での見学者の移動は円滑に行われました。筆者も実際にこのシャトルバスに乗車しましたが、名鉄の竜美丘循環バスよりも大きな33人乗りであり、両地区間の細い道を行き来するのはハラハラするものがありました。

オープンハウス当日は、参加者に午後2時に岡崎コンファレンスセンターに集まっていただきました。中村宏樹所長が分子研の概要を説明し、つづいて永

瀬教授が総合研究大学院大学の概要を説明しました。そのあと約3時間半にわたって、参加者は研究所内を自由に見学しました。この短い時間で広い所内を見てまわるのが難しかったようで、見学者からは「各研究室での説明は丁寧だったのですが、逆にいろんな研究室を見る時間が無くなってしまったので、30分ぐらいを目安に研究室がまわれるとよいなと思いました」「もっと長い時間見学できるといいと思います」などの見学時間の短さを指摘する意見が多く、今後検討していく必要があります。それ以外の参加者の意見としては「先端技術に触れられて非常によかった」「いろいろなものが拝見できました。研究室の様子が見学できたのはよかったです」「設備等の充実やオープンな雰囲気ですごく魅力的でした」など、おおむね好評でした。

夕方には、参加者と研究所内のメンバーが職員会館に集まり、懇親会を行いました。和やかな雰囲気のなか交流をふかめ、終了しました。

最後に、今回のオープンハウスの開催にあたり、所内のみなさん、および各大学の方々の御協力、御理解に感謝いたします。

(川口博之 記)



大往生（松戸さん やすらかに）

「人間は病気で死ぬんじゃない。寿命で死ぬんだよ」
（二度目の大往生 永 六輔 岩波新書）

平成15年12月26日、松戸さんの訃報が入りました。享年53歳でした。あれから、はや半年が過ぎました。私は今年の3月31日に分子研を定年退職しましたが、5月に分子研レターズ編集委員会より、この項目の原稿依頼がありました。私と松戸さんとの出会いは、筑波の公務員宿舎から始まりました。松戸さんは公害研、私は高工研と勤務先は違っていました。宿舎が同じ棟（105号棟）だったからです。このとき松戸夫妻は、まだ新婚ほやほやだったそうで、奥様と仲睦まじく歩いているのをよく見かけました。このような因縁から、この原稿依頼を快諾しました。

死去された日は、翌日から年末年始の休暇に入るため、研究所の人たちへの連絡が徹底できませんでした。そこで、ご家族の了解を得て、年明けの1月16日に松戸さんのお別れ会をすることにしました。

茅所長は、年末の葬儀に参列できなかったため、年明けに松戸さんの家へお線香をあげに行きました。そのとき奥様は「主人はガンに負けて死んだのではないと思います。寿命だったと思います。死に顔がとても穏やかでした。」とおっしゃっていました。

松戸さんは昭和25年1月15日に生まれ、昭和55年8月、30歳のときに公害研から分子研へ転任してきました。このときはまだ、UVSORの予算が通るかどうか微妙でしたが、UVSOR建設のための業務に専念していました。家庭的には、3人の息子さんに恵まれ、順風満帆の生活でした。しかし50歳前ごろから、病魔が松戸さんを襲ってきました。そして約5年間の闘病生活も空しく、帰らぬ人となってしまいました。

年明けの1月16日、職員会館において松戸さんを送る会を開きました。そして多くの方々にお見送りしていただくことができました。茅所長のお別れの言葉で、「……私は松戸さんの訃報を聞いて、辛



茅所長「お別れの言葉」

松戸 修 技術班長 やすらかに



松戸さんご長男「謝辞」

く苦しく長い闘病から開放されたことを思うとほっとしました。松戸さんは死と真摯に向き合い、そして、それを受け入れたのだと思います……。」とおっしゃっていました。

松戸さん、53年の人生は短すぎるかもしれませんが、お疲れ様でした。やすらかにお休みください。さようなら。

先日私の妻が松戸さんの奥様にお会いしたとき、「……主人が、これからの私たちの生活のことを考えてくれていたおかげで、今は幸せです。幸せすぎて怖いくらい……。でも、今までは、何でも主人と話し合って家庭を築いてきたけれど、話し合う人がいなくなったのは、やっぱり寂しいですね……。」とおっしゃっていたそうです。

(酒井楠雄 記)



献花にてお見送り

夢の実現

城西大学大学院理学研究科教授 加藤 立久
(前 分子構造研究系分子動力学研究部門助教授)

1992年から分子研に助教授として12年間お世話になりました。その前にも、京都大学助手になる前5年足らずですが、技官として分子研時代がありました。助教授で赴任したときには、「立久(りっきゅう)が舞い戻った」と言われましたが、今年4月に「出戻りの立久」も無事に「出所」して、のどかな埼玉の田舎にある私立城西大学大学院に落ち着きました。

在任中、井口所長、伊藤所長、茅所長に物心両面から研究を支えて頂きました。本当に有り難う御座いました。施設技官の方々には、装置の立ち上げ・維持になくてはならぬ多大な援助を頂きました。感謝申し上げます。また、秘書の方々には事務上の助けを頂き研究遂行には欠かせない存在でしたし、「楽しい会話」を有り難う御座いました。事務局の方々には予算獲得、旅費確保、等々数え上げられぬほどのお世話を頂きました。皆様にはいくら感謝しても感謝しきれません。

分子研は「若い研究者のパラダイス」です。お国の援助の下、研究者が自由な発想を現実化できる「パラダイス」です。私は在任前半に松下道雄君(現東工大助教授)と「光ビート検出磁気共鳴法」、後半に古川貢君(現分子研助手)と「超高磁場パルス電子スピン共鳴法」という二つの夢を実現することができました。二つのテーマは本当に京都大学で抱いていた夢です。若い研究者が夢を実現できる、こんな「パラダイスのような研究所」を何時までも残して欲しいものです。

関東平野内陸の埼玉の地は日本で一番暑いところだそうです。この暑さの中、岡崎の「うむうどん」

と駅ビルスポーツクラブのプールが恋しくなり、寒くなれば「味噌煮込みうどん」を思い出すに違いありません。皆さんへの感謝の念と分子研での幸せな日々は忘れることは無いでしょう。有り難う御座いました。



箱根を越えて

明星大学理工学部専任講師 鈴木 陽子
(前 理論研究系分子基礎理論第二研究部門助手)

1996年1月に技官として着任し、2001年に助手として採用していただき、合わせて8年、分子研にてお世話になりました。この場を借りてお礼申し上げます。特に、谷村吉隆助教授(現京都大学教授)には、研究の上で様々なご指導をいただき、大変感謝しております。

分子研では、いろいろな経験をさせていただきました。何よりも、様々な所へ行く機会をいただいたことが一番の思い出だと思います。生まれも育ちも神奈川県という私は、分子研に来る前は、学会などを除いては、箱根の山をこえることがめったにありませんでした。そのため、分子研に来る途中で、新幹線の窓から眺める富士山に感銘をうけた記憶があります。昔、江戸の人で、箱根の山を越える人はめったにいなかったといいますが、箱根のはるか遠くに行って、新しい生活を始めるのだと思いました。しかし、分子研に赴任したときは、まだ博士学位をとっていなかったため、週末は岡崎と大学のある横浜との間を行き来するという生活をする事になり、富士山を何度も横目で見る事となりました。最初は珍しかった新幹線にも慣れてしまい、岡崎と横浜の間が近くなった気がしました。

その後、1年間という短い期間でしたが、今度は箱根の山どころか、海を越えてアメリカで在外派遣研究員として生活することになるとは、あのころは夢にも思いませんでした。そうなると思議なもので、日本とアメリカの距離が今まで感じていたよりも、ほんの少しだけ近くなった気がします。今日で

は、海がかつての箱根の山に相当する役割を持っているのではないかと、ふと思うことがあります。

現在、私は東京日野市にあります明星大学にて新生活を始めています。再び箱根の山を越えて、関東に戻ってきたことになります。戻ってはきたものの、分子研へ赴任する前とは私自身も含めて変わってきています。この世は所詮、不可逆過程なのかもしれません。

修行時代

東京大学大学院総合文化研究科助手 井 口 佳 哉
(前 電子構造研究系電子構造研究部門助手)

西先生が流動部門に赴任された時、私も九大からの特別研究学生として岡崎の地に移り住みました。その時私は博士課程の2年で順調に行けば2年後に学位取得、しかも流動部門は2年の期限付き、ということもあり、岡崎にはきっと長くて2年だろうなと引越の段ボールもそのままにしてあったのですが、流動期間終了後も電子構造の助手としてご厄介になることになり、結局8年も居ついてしまいました。私の研究所での8年間は研究者としての訓練の時期であり、この分野で生きていくための自信を蓄積する過程にありました。岡崎にきて間もない時の事で、今だに忘れられない事があります。ある日、真空部品を製作してもらおうと、図面を片手に装置開発室を訪れました。ある人から、分子研の装置開発室は凄腕の方がそろっている、だからプライドも高く、くだらない物の製作を依頼しようものなら、ひどい扱いを受ける、と聞かされていました。学生時代のうぶな私はそれを鵠呑みにし、大変緊張してドアをノックしました。その時対応してくださったのがH氏だったのですが、まずその目線の鋭さにびびってしまい、しかもOリング溝のサイズが間違っていたからさあ大変、そんな図面なんか受け取れるかよ、とあっけなく突き返されてすごすごと引き返し、やはり装置開発は恐ろしい所だ、という思いだけが残りました。またもう一つ、電子構造全体のセミナーで、大学院生だった僕が話をする機会があったのですが、その時の議論の恐ろしさといったらありませんでした。特にM先生のコメントには震え上がり、自分自身の存在まで否定されたような気になりました。そんな自分をへこませる出来事には枚挙にいと

まがありません。そういった紆余曲折を経ながら、分子研での研究生生活をなんとか送ってきました。そして、その後5年ほどたってから、私が恐れをなした両氏とほんの少しだけ話す機会がありました。ずいぶん時間が経っていたとはいえ、その時の傷を完全に消し去ることの出来ていなかった私はとても緊張して話をしたのですが、そのお二方の物腰はとてもおだやかなものでした。多分、お二人は、以前も今も、何も変わっていないのです。変わったのは、少しずつ自信をつけて、少しだけ余裕の出た自分の受け取り方だと思います。この違いには自分自身本当に驚きました。そして、まだまだ未熟な私ですが、研究者としてやっていく地力を育んでくれた分子研にとっても感謝しています。分子研で得たほんの少しの自信を礎として、これからも研究者として食い下がり生きていこうと思います。

分子研では、本当に多くの人のお世話になりました。西先生には、精神面、経済面の両面で大変大きなサポートをして頂きました。私と同じ時期に電子構造に所属されいろいろと教えて下さった中林さん、藤井さん、俊法さん、佃さん、事務関係でお世話になった秘書の太田さん、優子さん、臼井さん、稲垣さん、小野さん。まだまだたくさんいらっしゃってとても全員を挙げることはできませんが、私はみなさんに大きく影響されながら成長することができました。本当にありがとうございました。

それではみなさん、さようなら。



化学者と物理学者が融合できる場所——分子研

東京大学大学院工学系研究科特任講師 藤 山 茂 樹
(前 分子集団研究系物性化学研究部門助手)

分子研には2001年4月からの3年間、分子集団研究系物性化学部門でお世話になりました。短い籍期間で思い出を語るといってもありませんが、感謝の気持ちをこめて雑文を書いてみたいと思います。

分子研では、助手の立場であった私ですが、中村先生のご配慮もあり、本当に独立して研究することができました。実験装置の設計、作製から実験データの解釈をして論文にまとめる一連の研究プロセスを、試行錯誤を繰り返しながらすすめていく、という(私の場合、効率の悪い)スタイルを、周囲の人も寛容に見てくださり、感謝しています。今からふり返ると、しんどかった思い出の方が多く、自分の非力さを痛感した3年間でしたが、装置を丁寧に作製してくださった装置開発室のみなさんや、日常的に議論にのって下さった米満先生や薬師先生などの力も借りて、研究生活を送ることができました。

分子研を離れてと思いますが、これほどまでに若手が独立した研究をさせてもらえるところは、分子研くらいしかないのではないのでしょうか。この経験は私にとってとても貴重で、現在の研究生活に計り知れない糧となっています。

同時に、若手研究者が勝手に研究してよろしい、というスタイルは(おそらくどの助手も似たような苦労があるからかも知れませんが)、自ずと所内にいる他の分野の研究者との交流を促してもいるように感じます。分子研が人の出入りの多いところである、ということとうまく相互作用して、数多くの研究者と交流することができました。

特に印象的だったことの一つに、合成化学者との交流があります。これまで、物理屋さんは物理屋さ

んの論理で、化学屋さんは化学屋さんの論理でものを考え、お互いの理解が深まることはないだろう、と考えていた私にとって、分子研にいる数多くの合成化学者の方との交流は衝撃的でした。

分子研の合成化学のみなさんは、物理の言葉しか理解できない私の(多くの場合、無理な要求を含む)提案を、本当に粘り強く聞いてくださり「じゃあ、君のやりたいことはこの試料でできるんじゃない?」といった的確な答えをして下さいます。これにはいつも驚かされ、例えば逆に私に分子や結晶作製の指針を話せ、といわれてまともな答えができる自信は微塵もありません。

こういう経験は、物理系研究所出身の私には得難かった経験であり、廊下でたち話したようなことから共同研究が始まった例もあります。現在も、小林速男先生のグループと伝導電子と局在スピンの結合した超伝導物質系を、井上克也先生のグループと光磁気科学への応用が期待されている、カイラル磁性体についての共同研究を続けさせていただいていますが、これらはどちらも所内でのちょっとした会話に端を発しています。

そのほかにも、新プロ関係の各種研究会や、化学系の特定領域研究の研究会にも何度も参加させていただき、単に物性物理学の研究をやっているだけでは出会えないような方と交流することができ、感謝しています。

分子研の皆さんとは、今後も研究会等で出会うことも多いと思います。またいろんなことをお教えいただき、研究の刺激にできれば、と思います。よろしくお願いします。

IMS フェローの待遇改善を願う

中央大学理工学部専任講師 庄 司 一 郎
(前 分子制御レーザー開発研究センター助手)

まず初めに、私が所属しておりましたレーザーセンターを始め、分子研の皆様には在職中大変お世話になりました。心よりお礼申し上げます。

私はIMSフェローとして3年、その後助手として2年、計5年を分子研で過ごしました。5年というのはそれなりにまとまった年月であり、公私に渡って様々なことがありました。その思い出話に花を咲かせても良いのですが、折角いただいた紙面ですので、分子研が今後ますます素晴らしい研究機関となることを願って、ひとつ提言をさせていただきたいと思います。それがタイトルにありますIMSフェローの待遇改善についてです。

IMSフェローというのはいわゆるポスドク職であり、身分は非常勤研究員です。私は分子研に来る前に国立大学で4年ほど助手を勤めていたため、博士課程を修了して直接IMSフェローになった人よりも、その立場や待遇について余計にいろいろと思うところがあったのかもしれません。待遇には大きく分けて研究面での待遇と、日常生活を送っていくのに必要な経済面での待遇があり、どちらも等しく重要であることは言うまでもありません。そして、現状ではいずれの面でも非常勤職であるということがネックとなり、決して恵まれた状況にはないと言えます。研究面では、科研費を始めとする研究助成に応募する権利がほとんどないことがまず挙げられます。私の場合は分子研に来る前年に2年の研究期間で科研費が採択されていたのですが、非常勤職になったということで2年目は辞退を余儀なくされました。科研費では研究分担者にはなれるものの、与えられた研究者番号が99999999と、いかにも半人

前の扱いです。また、(科研費に限らず)出張の際には非常勤研究員だけが「理由書」というのを書かされ、事務的な手続きに時間を余計に奪われるのもおかしなことです。今年になって文科省が非常勤職でも科研費の申請を認めることを決めたようですが、大半の研究助成の応募資格は常勤職となっています。たとえば、学振の研究員のように、個人の裁量で自由に使うことのできる50万円とか100万円の研究費を分子研からIMSフェロー全員に毎年支給することにすれば、各人のインセンティブも高まりますし、IMSフェローを募集する際の大きなセールスポイントになると思いますがいかがでしょうか。

経済面では何といってももらえる手当が通勤手当だけであるというのが問題だと思います。私はIMSフェローのときに一人目の子供が、助手になって二人目が生まれたのですが、一人目の時には何ももらえなかったのに対し、二人目の時には過分なほどの手当が支給されました。住居に関しても非常勤職は公務員宿舎に入れないので民間の住宅で高い家賃を払わなければいけません。手当はもらえません。ポスドクは任期が決まっており将来に何の確約がないという不安定な要素を持っている分、経済面で十分なサポートをしてあげるのが本来の姿ではないかと思うのです。非常勤職も常勤職の諸手当の制度に組み込んでしまおうとか、それが困難なら独自の互助会のような仕組みを作って、十分な手当が支給されるようにできないものなのでしょうか。また、IMSフェローは日本学生支援機構(旧日本育英会)の免除職ではなく、単に猶予職であるのも納得しづらいことです。一方で、同じ所内のポスドクであってもお



金の出所によって免除職だったりボーナスをもらえたりと、待遇がまちまちというのも問題があると思われる。

これらの問題は国の制度そのものを変えないと解決できないことももちろんあるでしょう。しかし、せっかくこの4月から分子研も独法化したのですから、機関としての独立性と裁量権の自由度をぜひ最大限に活かし、とりあえず所内で対応できそうなところから検討していただければと思います。

分子研は総研大があるものの学生数は少なく、限られた人数で成果を挙げていかなければならないことから人材確保の重要性は誰もが認識しているところですが、だからこそ、その一端を支えるIMSフェローの位置付けをこれまで以上に明確にし、分子研にとって真に必要な存在であることを、待遇面でもはっきり示していただきたいのです。「IMSフェロー」という肩書が一つのステータスとして世間に通用するようになることを願ってやみません。

人生って素敵なものですね

酒 井 楠 雄

(前 技術課長)

昭和19年2月29日、私は、東京小石川で生まれました。その日の中部日本新聞朝刊の1面トップ記事は、大本営発表(大機動部隊を補足、空母等五隻撃沈破、マリアナ諸島(東方)で激戦、サイパン、グアム空襲、わが方の被害軽微)で、敗戦色が濃くなっているにもかかわらず、今の北朝鮮のようなやがんだ報道でした。

昭和47年1月、さる民間企業から筑波の高エネルギー物理学研究所に転職しました。この時から国家公務員になりました。当時の高工研はまだ創立したばかりで、ゴルフ場跡のクラブハウスがオフィスでした。そして回りは雑木林で、人家は数キロ行かなければありませんでした。道も舗装されてなく、冬の霜解けや、雨天時はどろどろになりました。野犬もたくさん居ました。ここでの生活必需品は、長靴と野犬よけの棒でした。地元の人たちは、高工研の周りにマムシがよく出るので、「高エネルギー」を精力増強と誤解し、「高エネルギー物理学研究所」とは、マムシを捕まえてスタミナドリンクの研究をする所だと思ったそうです。

昭和54年4月、分子研に転任し、装置開発室に配属されました。そこは、二十歳前後の青年たちばかりでした。毎年5月に分子研創設杯というソフトボール大会がありますが、青年たちは一度も勝った経験がありませんでした。そこで、勝つために、毎日昼休み、E地区(現山手地区)のグラウンドへ行って練習をしました。すぐにその効果が現れ、分子研創設杯のみならず、秋に行う機構全体のソフトボール大会でも優勝してしまいました。数年優勝を続けたため、「分子研のPL学園」と言われ、みんなに

恐れられました。

昭和58年12月、主に極端紫外光実験施設で勤務を命ずる、と言う辞令を長倉所長から頂きUVSORに移りました。昭和63年秋に、今の天皇が皇太子のとき、分子研をご視察されました。当然UVSORもご視察されました。当時エレベーターは内部に荷物専用という札が貼ってありましたが、皇太子が乗られるというので、急遽、人という字を追加して、人荷物専用としました。

平成7年10月から技術課長として勤務しました。夕方5時以降、技術課長室を「い酒屋酒い」に変え、多くの人とコミュニケーションをとることができました。

そして、平成16年3月、定年退職を迎えました。無事これを迎えられたのは、諸先輩はじめ、多くの方々のご指導、ご支援によるものと深く感謝しています。老兵は死なず、ただ消え去るのみ。



On leave from IMS

カナダアルバータ大学助教授 Andriy Kovalenko
(前 理論研究系分子基礎理論第三研究部門助手)

It takes time to figure out what is essential in the life you live, people you work with, and land that endows you. I entered Japan twice, first in 1997 as a visiting professor, and then in the spring of 2000 to become a Joshu in Professor Fumio Hirata's group at IMS. My first arrival to Japan gave an incredible boost to my feelings about Japan and forever caught my imagination with Japan's beauty and diligence of her people. In Okazaki, I found friends whose wonderful features influenced my perception of this land. The time of almost six years in Japan has become an incredible experience and let me look deeper into her essential characteristics.

I was blessed to be born as a scientist at Lviv State University, mature in Bogolyubov's school of physics at Institute for Theoretical Physics and its Lviv offspring in Ukraine, and realize myself at Institute for Molecular Science. Everybody can say you that IMS is very impressive with its scientific tools and research programs tackling essential issues of many fields of modern science, starting from chemical reactions and novel nanomaterials, and ending up with biomolecular systems.

I contributed to theoretical studies of many complex molecular systems in solution and interfaces. A necessary tool for a theoretician is computational power, and it is abundantly available at IMS, ranging from workstations for everyday routine calculations to several supercomputers for really large-scale projects. Although one says there is never enough computational power, it is very important to provide it readily available in excess

for middle-scale calculations to let your mind concentrate on essential theoretical questions. So, tools are there—computers and a library with electronic access to everything—and you can explore flight and joy of creation.

When being overwhelmed with the recent scientific results and looking for some change and relaxation, you can just go downtown, or otherwise take a train to Nagoya on the weekend if you prefer vibrant lifestyle. It is a matter of taste to find various attractions within quick reach in Mikawa area. And if you want a thrilling exercise, go and get the Japanese driver's licence. It costs a bit, but it's a great experience on which you will be amazed of the hard-tempered and precise driving style you acquired.

It is believed that one of key features providing high standards and success of IMS is its system stimulating growth of scientific skills of its researchers and then their promotion to other leading scientific institutions; IMS acts as a respected research center. Indeed, when answering the first “where did you come from” in Canada I mentioned Okazaki and IMS, my company said: “Oh yeah, a known place!” IMS is known everywhere in Canada: in Vancouver, Edmonton, Calgary, Toronto, Montreal. A great continuation and opportunity for me has been National Institute for Nanotechnology (NINT) in Edmonton. It has been a promise to significantly develop theory of molecular liquids, and to make it a

necessary and desired component of modern scientific tools to be used in a variety of scientific communities, as we aimed with Professor Hirata. Building a program of multiple-scale modeling is my mandate as a Group Leader for Theory & Modeling at NINT, National Research Council of Canada. Ahead is an exciting opportunity of further advancing the theory and applying it to many problems of nanoscience and nanotechnology, from nanoporous catalysts and novel nanostructured materials to drug delivery.

Looking at the science and life experiences I had at IMS in Japan as well as in other countries, I think it might be useful to express some thoughts and suggestions about scientific management. It is a strength of this country to be able to work in a team and to concentrate significant and long-time efforts on important projects. The long-history tradition of respect for knowledge and wisdom is a catalyzer helping to maintain a proper level of academic science, which is a cornerstone of the civilization. This feature is a treasure that should be respected and built upon, unlike the nowadays practice of seeking fast success and quick results and shutting down everything else. The latter led, for instance, to underestimation of analytical theoretical approaches, in particular statistical mechanical theory. It is still awaiting to fully reveal its brilliant potential for science and technology. Elimination of this gap requires significant efforts in science and education, starting right from high school and university to find, commend, and grow creative

personalities. This is peculiar to an extent to the educational systems of many developed countries. The Eastern wisdom says that the hard is dead and will be broken by a wind blow strong enough, and the flexible is alive and will spring against all winds. Life is an exciting journey and instant search, with no guarantee. And this is like converging the quantum chemistry or liquid state theory equations. If you try to invert the whole Jacobian and to predict everything at once, you sooner or later fail. And if you otherwise use plain iterations, your solution can end up lingering somewhere in the route, hopelessly slow. The best solution, as usually, is in between the extremes, in the golden middle. Use and combine both of them! Plan and predict maximum of what you can, but do not be afraid of trying the fortune! This is a joky explanation of the direct inversion in the iterative subspace (DIIS) method, introduces in quantum chemistry by Professor Peter Pulay with whom we all had a pleasure to talk during his sabbatical spent at IMS.

I wish to all the colleagues at IMS to have a lot of fun of science with exciting discoveries. Because, as one my acquaintance said recently, life is an intellectual adventure.





困ったことになったなあ？

東京工業大学資源化学研究所助手 酒 井 誠
(前 電子構造研究系電子状態動力学研究部門助手)

「さてさて、困ったことになったなあ。」

分子研から東工大への異動が決まったときに、真っ先に頭に思い浮かんだ言葉がこれである。通常、分子研からの異動は栄転であり、出所？ なる言葉もあるくらい目出度いことである。それにも関わらず、冒頭の言葉。実は、藤井正明先生が東工大へ異動するのに伴い、私も東工大へ異動する、研究室丸ごと東工大への大移動だったのである。

分子研に着任する前に、研究室の大移動を1回経験していたことが、さらに私の心をどんより曇らせる……。そうなんです、研究室の引越ってお金と時間と労力が無茶苦茶かかって大変なんです。分子研から名古屋大へと研究室の引越をした渡辺芳人先生は初年度の公費が1800万円の大借金スタートとこのコラムで述べられておりましたが、数多くのレーザーを有する藤井研では一体いくら借金になるのであろう？ 考えるだけでも恐ろしい。お金のことは藤井先生に全て任せて、私は移動の準備をしましょう。

まずは、移動先の部屋の大きさを調べよう。事務から文章で、実験部屋は5単位との連絡が届く。分子研と同じ5単位なので、一安心。と思いきや、部屋原図を見て愕然とする。部屋の中に1×2mの石机、石流し台、パイプスペース、ボンベ室が張り出しており、実際に使えるスペースは3分の2にも満たない。まあよい、壁は2つばかりぶち抜いてもらおう。石机、石流し台も粉碎してもらおうと、設計図に赤印を入れる。

次は、電気の容量を調べよう。事務からフロア全体で3相200Vは400Aまで使用可能との回答あり。

分子研にある装置の総電力量は450A程度。全装置の同時使用はまず無いから起電力にさえ注意すればなんとかなりそうで、一安心。と思いきや、空調も賄って下さい、との追記を発見して驚愕。大慌てで、装置の熱容量から空調の必要電力量を算出するも、200Aを超える勢い。その旨速攻で伝えたところ、3相200Vは無いが1相200Vは有り余っているとの回答あり。何故に1相200Vなの？ と疑問を抱きつつも、400A増設してもらおうと、設計図に赤印を入れる。

いよいよ梱包作業をしようと引越業者に段ボール400箱を送ってもらう。この時業者の方から400箱では足りないのでは？ との指摘を受けるが、さすがにそんなには必要ないでしょう。作業を初めて3週間後結果が出る。やっぱり足りない。100箱追加で、さらに1週間梱包作業に費やす。実働4名(1人125箱)のマンパワー不足を痛感しつつ移動日前日までに何とか梱包終了。1ヶ月に及ぶ肉体労働から解放されビールで祝杯をあげるも、1週間後からの開梱作業を思いだし我に戻る。

この後移動の作業は天候にも恵まれ、順調に終了。装置もほぼ全てが稼働となりました。平成16年度からは学生も多数加わり、藤井先生を筆頭にシャカリキに研究できる体制がようやく整いました。安芸の分子構造では皆さんとお会いできそうです。またその時はよろしく御願います。

最後に、分子研に在籍した4年半の間、特に電子構造の皆さまには公私ともに本当にお世話になり大変有難うございました。この場をかりて御礼申し上げます。

二年一昔？

大阪府立大学総合科学部助教授 細 越 裕 子
(前 関連領域研究系関連分子科学第一研究部門助手)

1996年4月から2002年9月まで分子研でお世話になりました。井上先生が新しい研究室を分子研に構えて数ヶ月というときにメンバーに加わりました。助手に採用された当時は分子研最初の女性の助手とのことで、みんな見ているよ、などと言われると、少々プレッシャーを感じないわけでもありませんでした。無事に出所が決まったときは、やはりほっとしました。私は周囲に恵まれてきたのでしょうか、これまで自分が女性だからという理由で区別された記憶がありません。自由にのびのびと研究を続けてこられたことに感謝しています。

分子磁性という比較的新しい分野に大学院生時代に出会い、以来研究対象としてきました。院生時代は化学専攻ながら東大物性研で研究を行っていたので、周囲の物理学者から少なからず影響を受けました。分子研に来たとき、物理と化学の研究所では雰囲気少し違うなと感じました。現在は物理系教員として、物質合成と物性測定の両方を行っています。分子研で学んだ化学の知識は貴重なものだったなと感じています。

実に11年半ぶりの大学は思ったほどには騒々しくありませんでした。辞令をもらったその日のうちに学生実験ガイダンス、講義もすぐに始まりました。いきなりの階段教室に驚きつつも、だんだんと慣れていきました。東京生まれなのですが、大阪の雰囲気に特に違和感なくなじんでしまったことは、自分でもちょっと不思議です。

最近、久しぶりに分子研に来る機会があったのですが、この二年間で随分と変わってしまっていることに驚きました。五年前の分子研要覧の顔ぶれは随分違うものですが、いまや二年で大きく変わってしまう、二年一昔、と感じてしまいました。

私の生活も大阪に来てからの二年間で大きく変わってしまいました。互いの職場が近くなったので夫婦同居生活を始め、子供にも恵まれました。研究室は再立ち上げとなってしまいましたが、ぼちぼち軌道に乗せているところです。

分子研は、研究に専念できる、本当に恵まれた環境でした。井上先生も異動されてしまいましたが、井上先生をはじめとするグループメンバー、そして分子研でお世話になった多くの方々に、この場を借りて感謝したいと思います。どうもありがとうございました。



流動研究部門をぜひ続けてください

豊橋技術科学大学工学部教授 水 野 彰
(前 分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門教授)

2003年度より流動研究部門に受け入れていただきましたが、独法化への移行に伴い、予定より早く、1年で豊橋技術科学大学に戻らせていただきました。この間、多くの先生方にたいへんお世話になりましたこと、深く感謝申し上げます。

以前、流動研究部門へ来られていた吉田先生経由で宇理須先生よりご連絡をいただいたとき、創設に関与いたしましたエコロジー工学系も順調に進んでおり、新しい刺激を受けられると思い、受けさせていただきました。地理的に近いこともあり、特に私は豊橋への通勤途中が岡崎のため、たいへん便利でした。豊橋では、研究室に博士課程9名(含社会人)、修士課程学生15名程度ですので、移動が楽でないと、いくらメールが便利でも、難しかったと思います。

私は大気圧プラズマの環境応用を中心に行っており、共同研究を行ったメーカーでは室内空気浄化装置を大量生産しておりますので、工業的には多少お役に立っていると思います。微粒子を帯電して電界で動かして捕集することは効果的です。微粒子制御の応用として、細胞やDNA分子一つを捕まえたり、伸ばして切ることも楽しんでおります。DNA分子の生化学的反応操作も行っていますが、電気工学の時定数に比べ、その時定数はかけ離れて長く、何とかならないものかと思っています。

分子研では、液体中で取扱うDNAなどを真空中に取り出すことで高速度に分析出来ないかと考え、DNA分子一つを電極先端に固定して高電界で伸ばして破壊し、構成要素を分子ビーム化する(であろう)装置を設計させていただきました。装置開発室

の皆様はたいへんお世話になりました。DNA分子は分極で伸び、先端の高電界部分で順番に結合の弱い部分で破壊する可能性があると思っております。もしそれが可能でしたらたいへん面白いのですが、装置の完成がまだ先で、ビーム化が可能かどうか結論を得るにはしばらく時間がかかります。

流動研究部門では委員会などの役を免除していただきました。出身大学にも籍が無く、独法化に伴う事務的な仕事なども、申し訳なかったのですが他の先生に代わってしていただきました。特に、分子研の先生がたのすばらしい基礎的な研究を知り、また分子研の運営を組織内から拝見させていただきましたことは、たいへん良い経験になりました。基礎研究といえども成果が出せないことは税金の無駄遣いと言われた先生もおられ、共感いたしました。当初予定より早く戻ることになりましたので、先生がたと個人的にお話しできる機会が足りませんでしたことがたいへん残念です。

組織に所属したほうが様子が良く分かりますし、その中で新しい刺激を得られることは流動研究部門のたいへん大きなメリットです。交流を深めネットワークを広げるために、流動研究制度を良い形で残していただくことをぜひお願いさせていただきます。また豊橋は近いですので、ぜひお出かけください。最後に、重要な基礎研究を担っている貴研究所のいっそうのご発展を心より祈念申し上げます。1年間たいへんありがとうございました。

流動部門よ永遠であれ !!!

広島大学大学院理学研究科教授 谷 本 能 文

(前 分子スケールナノサイエンスセンター分子クラスター研究部門教授)

分子研流動部門に2年間在籍させていただき大変ありがとうございました。分子研でお世話になりました茅 幸二前所長をはじめとする多数の教職員の皆様に、そして留守中ご迷惑をお掛けしました広島大学の関係者の皆様に、心からお礼を申し上げたいと思います。

さて、3年前になるとは思いますが、流動部門へのお誘いを頂いたときお誘いを受けるべきかお断りするべきか私は躊躇しました。若くもない私の年齢を考えれば、「なにも好きこのんで分子研に行かなくても……」と、周囲の人たちは考えたことと思いますし、また自分でも考えないわけではありませんでした。でも、どうしても研究を続けたいという止むにやまない強い欲求に負けて、分子研にいく決心をしました。分子研ではこれまでやりたくてもできなかった私にとって新しいタイプの磁場効果の研究を行わせていただきました。すなわち直径約80 cm・高さ約1.8 mの小型高磁気力用超伝導磁石(15 T、1500 T²/m)を使い、水などの反磁性物質の磁気浮上、磁気力による擬似微小重力場・過重力場中の化学反応など、垂直磁場による各種の磁場効果を研究するというものです。従来は特殊な大型装置がないと実験できないと思われていたので、この種の研究がどこでもできるということを実証するのはそれだけでも大変意義があると思いますが、この超伝導磁石を用いて「シリケートガーデン反応により生成するケイ酸金属の半透膜チューブの3次元形態的キラリティーの磁気誘導」「フォトクロミック化合物を用いた熱対流の磁気制御のその場観察」など種々の面白い研究ができ、“流動部門で新しい磁場効果の

研究の端緒をつかむ”という当初の目的は達成したと少しばかり満足しています。また話は少し逸れますが、15年秋の分子研公開ではこの超伝導磁石を用いた“ミニトマトの磁気浮上”が大人気を博しました。見学者には科学の面白さ・不思議とその重要性を多少なりとも理解していただけたのではないかとと思っています。

ところで、16年度からの法人化により流動部門の存続が議論されているようですが、2年間流動部門に在籍した研究者として、流動部門を存続・強化していただきたいと強く思います。分子研のおおきな役割のひとつに大学共同利用研究機関として国内の科学の水準の向上を図ることがあると思います。流動部門ではチャンスを与えられた研究者がそれぞれ新しい研究を芽生えさせ、その芽を各地の大学等で大きく展開させています。このことは、わが国の科学の基盤強化に大変有効だと思います。今後法人化と定員削減により人事の交流が難しくなるのは目に見えていますが、人事の交流は健全な科学研究の発展を図る上で大変重要です。研究者個人はもとより、分子研にとっても、研究者を派遣する大学等にとっても流動部門は大変メリットのあるシステムです。制度に改良の余地はあるとは思いますが、今後もこの制度を維持していただきたいと切にお願いしたいと思っています。





帰ったら法人化

静岡大学工学部助教授 石 田 俊 正
(前 分子スケールナノサイエンスセンター分子クラスター研究部門助教授)

分子研での2年間は充実した日々を送ることができました。自分の研究もそうですが、所内・所外の先生方と共同研究をよく進められたのがこれからの研究の大きな糧になると思います。流動で特にお世話になった茅所長・西先生・平田先生はじめ、分子クラスターでご一緒させていただいた谷本先生・藤原先生・大庭先生、秘書の太田さん、ありがとうございました。特に、茅先生が私の流動のお願いのために大学に来られたときには私は家でシャワーを浴びていて他の先生が電話をくださったので慌てて行きましたが、それにも関わらず流動の話がキャンセルされることもなかったのには大変感謝しております。(それからは「あとで連絡します」という事務の人の言うことは信用せず、しつこい確認を心がけています。)

研究同様、岡崎とその周囲も堪能しました。万年混雑と言われる香嵐溪も紅葉のときに朝5時半起きで行って来ました。人が多いことと寒いことを除けば、聞きしに勝るいいところでした。(年賀状の写真に使いました。)そのほか、八丁味噌の工場のミソソフトが掘り出し物でしょうか。概して、私のいる某地方都市浜松より食べ物がおいしかったです。(もちろん選ばないとダメですが、選ぶ余地があったということです。)

さて、分子研での夢のような2年を終え、大学に帰ると毎日の授業が待っていました。文字通り毎日です。その上、半期15回の授業回数はきっちり確保するようになり、休講したらいつ補講するかを明らかにしないといけなくなっていました。補講期間は約一週間とってありますが、二回休むと実質的

に補講をするのがかなり苦しくなりますので、少なくとも今年は学会は半期に一回ずつだけにすることにしました。そもそも研究費が激減しました(13万という話でしたが、水光熱費の10%削減ができないとさらに減るとのこと)。幸い、些少ながら科研費があたったので、何とか凌いでいます。留守の間に私のキャンパスでは*J. Phys. Chem.*の購読が打ち切られたのもショックでしたが、これからは必要な雑誌は自分で取れということなのでしょう。(*J. Chem. Phys.* は1991年を最後としていますので、自分で購読しています。)

大学も10時から翌朝5時まで、日曜・祭日はいたらだめということになっていました。(小声ですが)すでに私も何回か禁を破っています。でもそのようなときに帰っていくとき各建物を見ると、結構電気のついている研究室があるので、そんなきれいごとでは研究が進まないと思っている人がまだまだいるということでしょうか。一体地方大学が今後ともともに研究できるのかどうかは不透明ですが、せっかくの分子研での経験を踏まえて何とかいい成果をあげたいと思っています。

流動部門を去るにあたり

宇都宮大学工学部助手 大庭 亨

(前 分子スケールナノサイエンスセンター分子クラスター研究部門助手)

古巣の宇都宮大学に戻って2ヶ月が経ち、すっかり大学の日常に体が順応しました。順応してしまった今となっては、2年も分子研にいたことがウソのように思われます。思えば分子研で過ごした2年間は苦しくも静謐な時間でした。それはあたかも、石造りのひんやりした修道院の、うす明かり射す祭壇を前に静かに祈りをささげるような、、、いやいや「世界遺産」の見すぎかもしれませんが、じっくりとものを考えるという贅沢を与えてくださったことに感謝せずにはいられません。

2年の時間の多くは、自分のサイエンスとは何かについて考えることに費やされました。所内外の様々な研究者のサイエンスを垣間見る機会に恵まれたことは、もちろん大きな助けとなりました。2年前に私たちが分子研に持ち込んだ研究テーマにはおかげさまで一定の成果を得ることができましたが、その発展方向については考えあぐねていました。しかし、今は私たちの「開放系」分子システムの開放系としての側面を深めていきたいと考えています。というのは、私たちはモノと生物との境目を理解したいと考えているからで、開放系であることが適応や学習を行うような人工システム開発の基礎にあると考えるからです。人工の分子システムにいかにして「エンジン」を組み込むのか、そしてそれをいかにしてシステムの機能とカップリングさせていくかが次の課題です。ここで得られた種を大切に育てていくことに、しばらくは集中したいと考えています。

もうひとつ、学生さんへの接し方についても何かと考える機会に恵まれました。もちろん、教育とか指導などという言葉の口にする資格が、本当に私に

あるのかについては棚に上げての話です。岡崎高校のスーパーサイエンス部に関わらせていただいたことは大きな転機となりました。とりわけ一緒に過ごしていただいた谷本先生(分子クラスター)のスタンス、サイエンスに対する想いには、ハッとさせられることが度々でした。今は、かつて宇都宮にいた時とは方針を変えて取り組んでいます。まだまだ、修行途中ですが、大学に勤める以上は探求し続けなければならない課題であると考えています。

この小稿を書かせていただきながら、そうなのだ、分子研で学べるのは何も最先端のサイエンスばかりではない、サイエンスそのものであり、人間そのものなのだと感じています。それが分子研の魅力であり、また今後も魅力であり続けるだろうと確信しています。

最後になりましたが、すばらしい2年間を過ごさせてくださった茅所長、西先生、分子クラスターのみなさん、関連のみなさん、分子研のみなさん、そして快く流動させてくださった宇都宮大学のみなさんにあらためてお礼を申し上げる次第です。どうもありがとうございました。



Memories of my visit at the Institute for Molecular Science

Peter Pulay

Department of Chemistry, University of Arkansas, Fayetteville, Arkansas, USA

I have spent the first five months of 2004 at the IMS in Professor Shigeru Nagase's group. This was my second invitation to Okazaki. Almost 20 years ago, I was invited to IMS by Professor Morokuma. Although the conditions he offered me at that time were fabulous, I could not accept his invitation. My children were in junior high school at that time, a sensitive period in life, and the nearest English language school was in Kyoto. So my wife vetoed this plan. However, I have always admired Japanese science and culture, and regretted the missed opportunity to get immersed in the Japanese life.

The wish to learn more about Japan was, however, only part of the reason why I was glad to accept Professor Nagase's invitation. A more important reason was scientific. The nature of electronic structure modeling has changed fundamentally in the past 20 years. Most importantly, the price/performance ratio of computers improved by about a millionfold. The laptop computer I am composing this essay on is probably much more powerful than the most powerful computer were 20 years ago. This means that we can now model, at a reasonably accurate level, large molecules and systems that would have been unimaginable 20 years ago. It appears to me that Japanese scientists in the nano-materials field rely more computational modeling more than their US colleagues. I am convinced that this is an important advantage. My main area has always been developing new theoretical methods. I was hoping to get new inspiration by working in a group that has both a number

of collaborative projects covering a wide area of modern chemistry (fullerenes, unusual silicon compounds, supramolecular chemistry, to name a few) and projects in new computational methods, in particular parallel computing. I have also hoped to visit several major centers of theoretical/computational chemistry in Japan. I know most of the leading Japanese scientists in this field but visiting their groups is a different experience. I have also my Japanese scientific heroes, such as Professor Kozo Kuchitsu (retired but still very active), and the late Professor Kenichi Fukui.

I have enjoyed my stay in Okazaki very much. The hospitality of Professor Nagase and his coworkers was overwhelming, and the secretarial staff was also extremely helpful and kind. I had virtually no practical problems. Mishima Lodge, with its fully equipped apartments, is nice, quiet, and convenient. It is a great idea; I wish we had something similar in Arkansas. It even has translations of most of the household appliances (if you have seen the remote control of the heater/air conditioner, with its 30 buttons, most in kanji, you will appreciate this fact). Everything was very well organized, as usual in Japan.

It helped that I have enrolled in a Japanese class for a year before my visit, and also in Okazaki, although a year (or a few year's) of Japanese still leaves you practically illiterate. It also helped that I like Japanese food. I can also testify that it is healthy: I have lost weight,

although I am not sure whether this was due to the food, the sugar-free green tea or bicycling up and down to Jusco, sometimes twice a day. I have even revived my ability to ride a bicycle without holding the handlebar, something I liked to do when I was young but have not practiced for a long time.

The institute is well equipped (and very nicely landscaped). Of course we theoretical/computational chemists need only library facilities and computers. IMS was always noted for its advanced scientific computing capabilities. However, when I arrived, the computers (at least those used by the Nagase group) were similar to those in my group at Arkansas. This has changed dramatically with the installation of the new Hitachi massively parallel computers (two systems, one with 800 and one with 896 processors). This happened toward the end of my stay but I was able to perform a few exploratory calculations, and it works great. During my visit, two meetings were held in Okazaki, affording an opportunity to see old scientific friends and meet new ones. One of these meetings was a major international conference.

Looking back of the science I have done, I feel that I could have done more. But don't we scientists have this feeling all the time? I got involved in three projects, with three coworkers of Prof. Nagase (Dr. Re, Dr. Takagi and Mr. Ishimura), and got acquainted with the other projects in the group. There was a very friendly atmosphere in the group, and in the whole IMS. One thing I regret that I

have not made more contacts with the other groups, working on molecular dynamics and condensed phase simulations.

I would like to thank Professor Nagase, for his friendship and warm hospitality, the members of his group, in particular Dr. Re and Mr. Ishimura, and the secretarial staff, especially Mrs. Ishikawa, Ms. Nogawa, and Ms. Kamo. I owe special thanks to my graceful Japanese teacher, Kumiko Ohkawara. I was probably her most diligent but unfortunately not the most talented pupil. Through her, and her family and friends, I have established contacts with a number of Japanese people outside the narrow circle of scientists. Thanks are due to the volunteers of the Okazaki International Association for their selfless work in the Japanese language class.



Clusters at UVSOR

Eckart Rühl
University of Würzburg

Three months at the IMS and in Okazaki is a fairly short time to set up a new experiment, to use it during the beam time at UVSOR, and to have some experience on everyday life in Japan. After this time is almost over, I have learned that such efficient short-term visit can only be successful in Japan and specifically in the group of Prof. Kosugi at the IMS.

The motivation that bought me during my sabbatical to the IMS was that there are numerous research interests and activities that we share in common. It is fascinating to have the state-of-the-art synchrotron radiation facility UVSOR-II on site that can be used efficiently without strenuous travel and very limited beam time. We had during months before my arrival a skilful preparation time of the experimental setup by the members of the group of Prof. Kosugi, where Dr. Hatsui was able to get a compact cluster jet constructed and commissioned. This device was almost ready to use when I arrived at the IMS in early April in the middle of cherry blossom season. I experienced how the beginning of spring is celebrated in the friendly atmosphere of the IMS and Okazaki. The start of the beam time in May was a real success, where we got clusters from the first day and we were able to measure together with Dr. Setoyama for the first time site-specific core level photoionization of variable size clusters. The experimental work found also immediate support from model calculations, where the outstanding expertise of Prof. Kosugi helped to understand how sensitive molecular orientation in clusters affects the properties of unoccupied electronic levels.

The experiments also allowed us to address the question whether there are changes in electronic relaxation behavior in core-excited clusters compared to the isolated atoms. This was studied by the energy transfer between the photoelectron and the Auger electron in variable size clusters.

I enjoyed the fruitful discussions with professors of the IMS. I was impressed by the activities of the young professors Ohmori and Hishikawa, who set up experiments using state-of-the-art short pulse laser sources for uses in molecular spectroscopy and applications in quantum optics. This is a field that we are in the process to develop in Würzburg in the near future. It was also good to exchange ideas and experiences on core-excited molecules with Prof. Shigemasa.

The near and far surroundings of the IMS has plenty of beautiful spots of which some are easy to discover. Others can only be found by luck and intuition, where no guide book helps. I was mostly successful in this field using a bicycle by going into random directions. This also helped me to discover numerous details of Japanese culture and hospitality.

I will bring home plenty of good memories from an excellent time, where I was able to focus entirely on research and the impressions from my local surroundings. I will not forget that one can do outstanding research at the IMS in its open, friendly, and international atmosphere.

Oh! My Japanese life!

Visiting Professor Roman B. Morgunov

I have a permanent position of leading research scientist in Russian Institute of Solid State Physics in Chernogolovka (small beautiful scientific city near Moscow). I have spent 9 month at IMS because my research group intensively collaborates with Prof. Yoshifumi Tanimoto. He is a great expert in spin chemistry and magnetic field phenomena. We develop methods of control over plasticity of solids by magnetic field influence on nanoclusters forming in crystal lattice. I was happy by good technical equipment of IMS, nice library, and big help from many people. Cordial reception in IMS and every day methodical help shown interest to our investigations and Russian science. I had a big help from Prof. T. Kato in the area of EPR measurements.

One of the impressions is talented Japanese students. One of them Yuusuke Yoshida became really my best friend (fig.1). Yuusuke works under supervision of Prof. K. Inoue. They create chiral molecular magnets which is also area of Russian group interest. Independence, persistence, inquisitiveness are the main characteristics of

Japanese students. I was surprised by every night hard working of many people at IMS. Aspiration to full exploration of scientific equipment is a main reason of this night work.

I didn't take my family to Japan, because my wife is working hardly as a journalist in Russian scientific papers and journals. She described my Japanese life in these editions. My family was very impressed by visit of Prof. Inoue and Prof. Tanimoto to my home. On the fig.2 you can see my daughter and my wife in yukata specially prepared for Japanese guests visit.

Unfortunately, I had no time for studying Japanese language, but there are practically no misunderstandings because Japanese people are usually very attentive and kind. During my work at IMS I was invited to many conferences and I had a nice possibility to know Japan better. Tokyo University, Hiroshima University, Kyoto University are the nice scientific centers that I visited and never forget. Beautiful culture and unusual nature of Japan initiated my creative activity.



fig. 1



fig. 2



fig. 3

I was very disappointed that communication with Russian colleagues at IMS was not so attractive and it was harder in comparison with Japanese scientists. I haven't any reasonable explanation for this phenomenon. When I returned back to my Institute in Russia, my coworkers explained me, that it is typical impressions for people long time staying in abroad.

It is my pleasure that our collaboration with Japanese scientists was not finished after my departure. On the fig.3 you can see Prof. K. Inoue, Prof. Y. Tanimoto and me near Moscow Kremlin. They attend Russian conference and my Institute within 1 month after I returned back to Russia. I hope it was not my last visit to IMS and we will continue our collaboration.

文部科学大臣賞（研究功績者）
日本化学会進歩賞
日本化学会化学技術有功賞
分子シミュレーション研究会学術賞

平等拓範
藤原秀紀
山中孝弥
三浦伸一

**平等拓範助教授に
文部科学大臣賞(研究功績者)**

分子制御レーザー開発研究センターの平等拓範助教授が、「固体レーザーの超小型化と高性能化」に関する業績で文部科学大臣賞を受賞されました。心からお祝い申し上げます。

分子科学の発展の歴史は、レーザー技術の発展と重なります。本研究所では創立以来多くの研究者が常にその時点での最新レーザー装置を用いて、分子分光学、あるいは、光化学の分野で研究を行ってきました。また、レーザーは学術の分野のみならず、工業界をはじめ一般社会の様々な分野で利用されています。したがって、学術・応用両面において新たなレーザー光源の開発を行うことはたいへん重要です。平等氏は次に述べるような新たなレーザー材料を開発し、レーザー装置の顕著な小型化に成功されました。この点が、今回の受賞のポイントになっています。

平等氏の受賞に関する研究業績をもう少し具体的に述べます。平等氏は、結晶長500 μm のNd:YVO₄を用いた半導体レーザー（LD）励起マイクロチップレーザーを世界で最初に実現されました。マイクロチップレーザーは、固体レーザーの小型化の究極ですが従来は励起源にアルゴンレーザーやTi:サファイアレーザーが必要とされ、効率、出力ともに低

く実用性に欠けていました。そこで、同氏は、さらに高出力化、高効率化、多機能化を図るため独自の性能指数を見出し、またM²因子による最適設計法を提案確立されました。これらの指針に基づき、Yb:YAG、セラミックNd:YAGなどの新材料の提案と実用化を推進し、また直接励起方式による量子限界に近い高効率発振や、エッジ励起方式による従来の大型固体レーザーを凌ぐ高出力発振などをマイクロチップレーザーによって実現されています。さらに、受動Qスイッチ型Nd:YAGマイクロチップレーザーによる最初の宇宙実験も実施するなど、マイクロチップ固体レーザー分野を創出ただけでなく、新材料の探索とレーザー最適設計法の提案・実証、新機能の開発から応用の展開など、当該分野の発展に大きな寄与をされました。

このように、分子科学研究所では研究にレーザーを利用するというのが通常の研究形態でしたが、平等氏はマイクロチップレーザーの開発という新たな方向で研究を推進し、レーザー開発研究センターの一員としてきわめて重要な役割を果たされています。この受賞を契機にさらに多くの研究成果を挙げられることを期待します。

（松本吉泰 記）



藤原秀紀助手に 日本化学会進歩賞

昨年(2019)の9月まで分子集団研究系小林グループの助手であった藤原秀紀氏(現、大阪府大)が本年3月、分子性磁性伝導体の開発研究で日本化学会進歩賞を受賞した。

手許にある英国の化学者の書かれた教科書(訳本)によれば、分子結晶の電気的性質の研究の歴史は古く、20世紀初頭にはアントラセンの光伝導性が発見されており、また1940年代後半には英国とロシアの研究者によってフタロシアニンの半導体性の報告がなされているとのことである。同時期に分子研の所長を務められた故赤松先生および井口先生がピオラントロン等の縮合多環芳香族分子の結晶が 10^{-10} Scm $^{-1}$ 程度の室温抵抗であるが真性半導体としての性質を持つことを報告している。最近に至って同一分子のみで金属結合を作って自己集積するような分子も設計・開発され、分子性結晶と金属結晶の間の垣根が完全に消失するに至った。有機超伝導体が初めて欧州の化学者と物理学者の協力によって発見され、分子性伝導体の研究が急速に活性化し始めたのは既に四半世紀も以前のことであるが、1990年代の中葉から、有機 π 分子と遷移金属磁性アニオンの組み合わせによる、磁性有機伝導体の開発研究が活発化し、以前分子研評議員を務められた、P. Day教授(前英国王立研究所長)らのグループにより、常磁性アニオンを内包した有機超伝導体が見いだされ話題となった。また、反強磁性有機超伝導体、

磁場誘起超伝導体あるいは超伝導-絶縁体転移のような前例のない特性を示す物質群も筆者らにより発見され、有機伝導体の研究分野は磁性伝導体の分野にまで拡大した。このような有機伝導体研究の最近の流れの中で藤原氏は、有機伝導体開発の最も大きな目標の一つであった磁気秩序と超伝導が共存する有機伝導体の開発を行った。

π ドナー分子BETS (= bis(ethylenedithio)tetraselenafulvalene)と磁性アニオンFeX $_4$ (X = Cl, Br)が形成する磁性有機伝導体は筆者らによって90年代前半より開発され研究されてきた物質であるが、最近、藤原氏らは κ -(BETS) $_2$ FeBr $_4$ (κ は結晶が有機伝導体特有の代表的な二次元分子配列をとることを示す記号)の伝導度や磁化率を低温および磁場下において詳細に調べ、磁性アニオンが2.5 Kで反強磁性転移を示し、加えて π 電子系は1.1 Kで超伝導転移を示し、系は初めての長距離磁気秩序を持つ有機超伝導体となる事を報告した。この発見と相前後して、欧州の研究者により強磁性秩序と有機 π 金属電子が低温で共存するBEDT-TTF伝導体が報告され有名となったが、この系においてはDay教授らの系と同様、金属 π 電子と磁性イオンとの相互作用は殆ど無い。一方藤原氏は、 κ -(BETS) $_2$ FeBr $_4$ が約1.5 Tの磁場でメタ磁性転移を行う事を発見した。同時に反強磁性超伝導状態は強磁性金属状態に不連続的に転移する。従って外部磁場を1.5 T近傍で変動させるとメタ磁性転移によって発生した内部磁場で超伝導がON/OFFする現象が見られる。このように磁性と(超)伝導が多彩に絡み合う伝導体は他に例がない。更に、藤原氏は12.5 T程度の高磁場では内部磁場と

外部磁場が相殺して、磁場誘起超伝導転移が観測される可能性を見いだした。この κ -(BETS) $_2$ FeBr $_4$ の磁場誘起超伝導転移は、その後、我が国の宇治らのグループによる極低温実験により証明された。有機の磁場誘起超伝導体としては λ -(BETS) $_2$ FeCl $_4$ に続き二番目の例である。これらの磁気超伝導現象は無機伝導体でも希有な現象であり、そのオリジナリティーが高く評価されたものと思われる。

現在、藤原氏はさらに新たな有機伝導体の開発研究を推進しており、今後の発展を期待している。

(小林速男 記)

山中孝弥技術班長に 日本化学会化学技術有功賞

技術課第二技術班長(分子制御レーザー開発研究センター)の山中孝弥氏が、「レーザーを用いる先進的分光計測システム及びその管理システムの開発」に関する業績で日本化学会の化学技術有功賞を受賞されました。心からお祝い申し上げます。

山中さんは昭和56年に文部技官として分子科学研究所・機器センター(現分子制御レーザー開発研究センター)に配属されて以来、レーザー及び軌道放射光という分子科学研究所の有する先進的光源を用いる分光計測装置の構築、及びこれら装置に関わる大学共同利用の運営実務に携わってこられました。山中さんは急速な進歩を続けているレーザー光源の性能を熟知してユーザーへの適切な助言と支援を行

ないつつ、レーザーと測定装置を用いた様々な先進的測定装置を開発してユーザーに提供し、学術研究の推進に大いに貢献され、これが今回の受賞につながっています。

主な業績としては次のようなものを挙げることができます。高速トランジェントメモリを用いたナノ秒蛍光寿命測定装置の開発。これは、高速動作するトランジェントメモリの特性を生かし、当時最新鋭光源であったエキシマーレーザー励起波長可変レーザーを光源として用い、コンピューター制御のナノ秒時間分解蛍光スペクトルと蛍光寿命を短時間で測定する装置です。このナノ秒蛍光寿命測定装置は昭和59年より共同利用機器として公開され、研究所内外の多くの研究者に利用されました。稼働時間は年間1,000時間を優に超え、気相での励起分子のみならず、クラスターや光触媒に至る幅広い試料に対して多くの貴重な学術データが生み出されています。現在でも同等の装置は市販されておらず、光源、測定装置共に先端のものを必要とする本装置は極めて高度な技術レベルを要するものです。いわば、分子研オリジナルで開発した真に学術研究者の必要とする装置といえ、分子研での装置開発の一つのお手本になるものであると言えます。この他にも、この装置のノウハウを活かした軌道放射光のための時間分解分光測定システムの開発も行われました。また、分子科学分野の研究において重要な役割を果たしているチタンサファイアレーザーなどの極短パルスレーザーに関するメンテナンスと測定系の確立にも力を注がれ、自らも同装置による測定結果を学術論文として発表されています。さらに、これら



のハードウェアに関することのみならず、共同利用に資するソフトウェアとして 先駆的オンライン共同利用機器予約システムの構築にも努力されました。多くの共同利用機器の利用に関し、山中さんはインターネットの普及が始まる極めて早い時期からユーザー予約システムとしてネットワークの利用を着想し、平成5年には既に機器予約システムとして実際に運用を開始されています。現在稼動しているwebページと一体化させたシステムも同氏の機器予約管理の経験と卓越したアイデアがその礎になっています。

このように、ややもすると研究者の派手な業績の中で技術職員の働きがなかなか表に出ない傾向がある中で、山中さんは先端機器のシステム化によって容易かつ迅速な測定を可能として最先端の学術研究のニーズに答えてくれました。これは、分子科学研究所などの大学共同利用機関における技術職員のあるべき姿の一つと思われます。今後とも若手の技術職員の育成も含めて山中さんの活躍を期待します。

(松本吉泰 記)

三浦伸一助手に 分子シミュレーション研究会学術賞

このたび、計算分子科学研究系第一研究部門の三浦伸一助手が、分子シミュレーション研究会学術賞を受賞され、2004年1月14日、筑波で開催された国際会議 ICMS-CSW2004 (第17回分子シミュレ

ーション討論会合同会議)の席上において、表彰式の後、約200名の国内外からの参加者の前で英語による受賞講演を行った。

三浦氏は、10年以上の長きにわたり、主として量子液体に対する計算機シミュレーション研究に携わってきており、以下にしめすようにそれまで未解決であった多くの問題に対して方法論開発から始めてシミュレーション手法を確立し、これらを分子論的に解明することに成功し、分野の発展に大きな貢献をなしてきている。今回の受賞は若手として卓越した分子シミュレーション分野に対するこれらの寄与が認められたものである。ここで、三浦氏のこれまでの量子系に対する計算科学研究の道筋をたどってみよう。

まず最初の仕事として、蟻酸2分子間におけるプロトンの同時移動に対し、第一原理経路積分分子動力学法を行っている。そして、これに基づいて反応座標に沿ったエネルギープロファイルを計算することにより、化学反応において反応種の核も量子化されている系に対する解析方法を提示し、反応機構を解明している。

第二に、位置不確定性の大きなヘリウム液体中におけるアルカリ金属と希ガス分子の溶媒和に対し、量子系に対する拡張RISM理論を新たに提案し、精度の高い分布関数の計算に成功している。これにより、親溶媒性溶質におけるsnow ball構造と、疎溶媒性溶質におけるbubbleモデルの分子論を明らかにしている。

第三は、最も大きな課題である、ボソンやフェルミオンに対するシミュレーション手法の確立であり、

より具体的には、粒子の交換を考慮した動力学の解析である。そこでは、交換の効果をあらかじめ厳密に取り入れた擬ポテンシャル法を導入し、そして、この難解な動力学を表現し得る基本的な運動方程式を求めている。その一環として、静的性質に対しても新たな経路積分ハイブリッドモンテカルロ法を提案し、実際にヘリウムの超流動状態をシミュレーションにより実現することに成功している。現在はこの計算を溶液系に拡張し、超流動状態における溶媒和という人間にとってほとんど未知の世界に対し挑戦を続けている。

このように、三浦氏は将来の計算分子科学分野を背負って立つべき中核的若手研究者であり、今後のさらなる発展を期待したい。

(岡崎 進 記)



基礎光化学研究部門（極端紫外光研究部門）
Prof. RÜHL, Eckart

極端紫外光研究施設（分子エネルギー変換研究部門）
Prof. COUPRIE, Marie Emmanuelle

基礎電子化学研究部門
Prof. BOO, Bong-Hyun

反応動力学研究部門（極端紫外光研究部門）
Prof. WAN, Li-Jun

極端紫外光研究施設（極端紫外光研究部門）
Prof. LABLANQUIE, Pascal

分子基礎理論第二研究部門（分子エネルギー変換研究部門）
Prof. OSHEROV, Vladimir I.

統合バイオサイエンスセンター（分子エネルギー変換研究部門）
Prof. VAROTSIS, Constantinos

錯体物性研究部門（極端紫外光研究部門）
Prof. SUN, Wei-Yin



Prof. RÜHL, Eckart

Eckart Rühl教授（以下、Eckart）は近藤保先生や茅幸二先生と昔からのお知り合いでクラスター研究でよく知られた研究者です。私自身はクラスターの研究に関して国内では何もしてきませんでしたが、今回、彼をメンバーに含めた課題研究でUVSORで実現することができました。この課題研究の成果については1年後の分子研レターズでご報告することになるかと思います。

これまで私はEckartとはもっぱら遊びのつきあいでした。カナダではクロスカントリースキー、日本では夫人といっしょに上高地散策や穂高登山、あちこちの温泉保養、明日香観光や吉備路のサイクリングなど。しかし、今回は遊ぶことなく研究に専念したいということで4月から7月まで3ヶ月間と少し、UVSORに籠もりきりです。ドイツで彼の使っている放射光施設はハンブルグやベルリンにあり、許可されたビームタイムに合わせて長い距離を旅して専用装置を運搬しないと実験できないのに比べ、分子研ではドイツの最新鋭の施設に劣らない性能を有す

る UVSOR の専用ラインで時間に追われることなくやるべき実験ができるので大変気に入ったようです。今回の滞在中、共著の論文をすでに 2 報書き上げ投稿しています。将来的にもまた、UVSOR 実験に来所したいとのことでした。

最近まで食事は普通だったのがどんどん菜食になってしまい、夫人も心配しているところです。しかし、体力的には昔のままで、私のグループの体力のなさを思い知った次第です。彼とはローマを丸一日乗り物を一切乗らず、食事パンをかじった程度で炎天下、端から端まであちこち歩き回った経験もあります。今もそのときの元気は維持していて、天気の良い週末（UVSOR は運転していない）は、炎天下、自転車と奥殿陣屋あたりからさらに山奥に行ったり蒲郡まで海を見に行ったり、エンジョイしています。彼は日本の夏は大好きみたいなので驚きです。ドイツでは味わえない気候というのが理由です。日本食は健康食と言われているますが、必ずしも菜食というわけではないので、彼にとっては外食の選択肢もほとんどなく心配でした。でも、ロッジに備え付けの炊飯器で毎日、ご飯を炊いて、みそを使ったりして喜んで食べているようです。日本語にも興味があって少し勉強を始めたのですが、研究優先になってしまい今回は諦めることにしたようです。お互い自国にいる間は雑用に埋もれてしまう立場ですが、彼は C4 教授として 3 度目の大学に移ったばかりのところで 3 ヶ月間のサバティカルをねばり強く勝ち取って分子研に来ることに成功しました。今度は私の番です（所長、よろしく）。

（小杉信博 記）

Prof. COUPRIE, Marie-Emmanuelle

6 月上旬から 9 月上旬までの 3 ヶ月間、Marie-Emmanuelle COUPRIE 博士が分子研の客員助教授に着任することになった。同氏は 1963 年にフランスのマルセイユで生まれ、1989 年 Orsay-Paris XI 大学において、「電子蓄積リング ACO 及び Super ACO における自由電子レーザー」に関する研究で博士号を取得した。学生時代より一貫して電子蓄積リングを用いた自由電子レーザーの研究に従事しており、この分野においては世界的に著名な研究者の一人である。

これまで同氏の活躍の場となってきたのはパリ郊外の放射光研究施設 Lab d'Utilisation du Rayonnement Electromagnetique (LURE) である。Super ACO と呼ばれる電子エネルギー 800 MeV の電子蓄積リングがその中核装置である。UVSOR と同様、極紫外・軟 X 線を得意とする放射光源であり、繁政助教授など、UVSOR 周辺には同研究所に滞在した経験を持つ研究者も多い。ただし Super ACO は既に運転を停止し、現在は、隣接する敷地により大型の放射光源 Soleil が建設されていると聞いている。

自由電子レーザーは、米国スタンフォード大学において、線形加速器を用いて実現されたのがその始まりである。円形加速器の一種である電子蓄積リングを用いて初めて自由電子レーザー発振に成功したのがフランスの LURE のグループであり、その当時使われていたリングが ACO である。わが国で言えば東大物性研の SOR リングと似た規模の小型の



リングである。前述した Couprie 氏の博士論文の題目に ACO の名前も出てくることから、蓄積リング自由電子レーザーの歴史のごく初期から研究者として活躍されてきた方であることがわかる。その後 ACO の後継機である Super ACO を用いた自由電子レーザー研究に参加し、この研究グループのリーダーとして活躍を続けてこられた。現在ヨーロッパの蓄積リング自由電子レーザー研究はイタリアの放射光施設 Elettra に集約されており、同氏も頻繁に訪れて、実験に参加されていると聞いている。

UVSOR では加速器高度化改造により電子ビームの品質が大幅に向上しており、波長 200 nm もしくはそれ以下での発振の実現も視野に入ってきた。3 ヶ月間という比較的短い期間ではあるが、Couprie 博士の参加は、UVSOR 自由電子レーザーの短波長化の研究を進めている我々のグループにとって大変に心強いものである。

(加藤政博 記)

Prof. BOO, Bong-Hyun

夫 奉炫 (Boo, Bong-Hyun) 先生は、1982 年に分子研を 3 ヶ月来訪された故・朱烈光 (Choo, Kwan Y.) 教授のお弟子さんで、Seoul National University で修士課程を終えられた後、米国の Washington 大学で PhD を取られ、カリフォルニア大学 Berkley 校で 2 年間博士研究員を努められ、1987 年から大田の忠南大学 (Chungnam National University) で教授

を務めておられる。2000 年から 2002 年まで、IUPAC の韓国代表をされていた。Berkley 校では、岡崎コンファレンス 2003 にも参加来所された、現ユタ州立大学の Armentrout 教授の研究室でシラン系列分子の反応、特に、生成熱の研究およびイオンビームを用いたシリコンイオンのメタンとの反応などの研究に成果を挙げられた。また、イオンビーム実験の経験を真空紫外光実験にも拡張され、姫路工業大学の小谷野先生との共同研究としてストレージリング放射光を使った塩化シラン等の光解離実験も行われている。また、最近では、米国アクリン大学のエドワード・リム教授の研究室に滞在され、分子内エキシマー生成の仕事も経験された。二人の男のお子さんの教育のため、ご家族はニューヨークに滞在中ということで、韓国の大変教育熱心な気風が伺われる。大変おとなしく控えめな紳士であり、何気なく歩いていても常に研究の話になることから、研究のことしか興味がないように思えるが、日本の中世史にも大変興味をもっておられ、鎌倉、室町から信長、秀吉、家康のことなど、深い知識を持っておられる。分子研では、液相および気相での分子内エキシマー生成、クラスターイオントラップ分光法など幅広い研究を展開される予定である。

(西 信之 記)

Prof. WAN, Li-Jun (万 立駿 教授)

今から1年程前までは、課題研究の提案に3ヶ月滞在の客員外国人教授または助教授を加えるという条件がついていたため、当時小林先生のグループに中国科学院から来ておられたZhang Bin博士に適切な方の紹介をお願いしました。その結果紹介いただいたのがWan教授で、お互いが知り合うきっかけとなりました。一度も会った事がない人と共同研究の提案をしたという少々乱暴な話でしたが、結果的には大成功で、現在とても面白い研究を協力して進めています。提案した課題研究のテーマ『固体表面上の生体分子認識反応系の構築と構造解析』を共同で実施するためには、お互いがまずよく理解する必要があると思い、Wan先生が来日された時お会いしたり、私が北京に訪ねたりと、短時間のうちに親交が深まりました。知り合った当初はまさか、分子研の3倍ほどの規模の化学研究所の所長になるとは想像もしておりませんでした。この2月に所長に就任され非常に忙しい毎日を過ごしておられます。

Wan教授は、1957年7月23日の生まれで、1987年に大連理工大学材料科学科の修士課程を卒業後、1993年から東北大学板谷研究室で工学部博士課程の学生として、さらにその後引き続き、博士研究員、客員教授などを歴任された後、1999年より中国科学アカデミー化学研究所の教授として現在に至っておられます。御経歴から容易に推察されますように、日本語をほとんど不自由なくお話し

になられます。専門は電気化学、とくに固液界面のSTMの業績で高く評価され、中国のナノサイエンスのリーダーの一人です。中国はナノサイエンスに力を入れており、現在中国科学院、北京大学、精華大学の共同で、ナショナルナノサイエンスセンターの建設を進めており、Wan教授は計画推進の重要なメンバーの一人です。趣味は音楽とガーデニングとのことです。奥様は1993年から1999年までの日本滞在中生け花を習われ、準教授の資格を取得しておられるとのことです。

(宇理須恆雄 記)

Prof. LABLANQUIE, Pascal

Pascal Lablanquie博士とは、かれこれ十年以上お付き合いさせて頂いておりますが、ファミリーネームで呼んだことなど一度もありませんので、敢えてパスカルと表して皆さんに紹介させて頂きたいと思っています。

パスカルさんは日本語がとてもお上手です。それは、ほぼ不自由なく日常会話がこなせるに止まらず、漢字を含む読み書きもかなりのレベルです。1990年4月から91年10月までの1年半、西先生の研究グループでポスドクを勤められたこと、また、その間に知り合われた今の奥様が岡崎出身の日本人である事がその要因であることは間違いありません。が、それ以上に、とても几帳面で、どんな難問にも地道にコツコツと取り組まれるご自身の性格が、彼



の日本語力を現在のレベルにまで向上させたのだと思います。そしてそれは、彼の研究スタイルにもそのまま反映されています。

パスカルさんは、フランス南西部の St. Céré (サン・セレ) という町のご出身で、1958 年生まれです。サン・セレは、ワインで有名なボルドーと、美食の都と呼ばれるフランス第二の都市リヨン (もう一つの有名なワイン産地のブルゴーニュに近い) を結ぶ直線の真ん中辺り、やや南に位置します。サン・セレの周辺はフォアグラの産地として有名です。1976 年に高校を卒業されると、フランスのエリート養成学校の一つである Polytechnique (パリ南郊外) に進学されました。ご本人によれば、全寮制で軍隊のような暮らしは (実際にこの期間に 1 年間兵役も経験されています) 非常に辛いものだったそうです。その後、1982 年から Orsay 大学の LURE と呼ばれる放射光研究所において原子分子の光電離の研究を開始され、1984 年に通常の学位を取得されました。通常の学位と書いたのは、フランスでは 3 年程度で学位を取得した後に、更に研究を進めて行き、その成果をもう一度学位論文に纏めて、国が認定した博士 (thèse d'état : 国家博士とでも訳すのでしょうか) を取得する場合があるからです。パスカルさんは 1989 年に、一つの光子の吸収により二つの電子が放出される、いわゆる光二重電離過程に関する論文で国家博士号を取得されています。

さて、パスカルさんの最近の研究についてですが、ホームグラウンドの LURE が、フランスの新しい放射光源、Soleil の建設計画の影響で閉鎖になることが決まった数年前から、イタリアの ELETTRA

や日本の PF などフランス国外の放射光施設を利用して精力的に研究を推進しておられます。特に、運動エネルギーがほぼゼロの電子を積極的に捕集してイオン状態の情報を抽出する、所謂しきい電子分光と呼ばれる実験手法を、他の分光法と組み合わせた同時計測法を駆使した研究が世界的に高い評価を得ています。更に最近では小さなクラスターの光二重電離過程にも興味を持たれており、先日も PF で非常に面白いデータが取れたと喜んでおられました。パスカルさんには、ほぼ一貫した研究スタイルがあります。それは、孤立系の原子や分子の光電離過程について、その本質に迫るための新しい実験手法の開発を地道に行いながら、そこにある物理をより深く理解して行くというものです。UVSOR が最も得意とする深い価電子から内殻電子を励起できる光エネルギー領域において、実験手法に関する独自のアイデアをお持ちであり、また、教育や研究指導にも非常に熱心なので、パスカルさんの滞在期間中、我々も多くの刺激を受けるものと期待しています。

2004 年 9 月から 2005 年 2 月までの半年間、客員教授として滞在される予定ですので、メガネを掛けたスリムな中背で、少し気弱そうな髭面のフランス人を見かけたら、日本語で声を掛けてみて下さい。ちょっと恥ずかしそうに微笑んで、日本語で返事が返ってくると思います。短い期間ではありますが、パスカルさんが、第二の故郷である岡崎での生活を満喫されることを願っています。

(繁政英治 記)

Prof. OSHEROV, Vladimir I.

Osharov 教授は Leningrad 大学卒業後、モスクワ郊外の科学都市であるチェルノゴロフカにある化学物理研究所に勤務され、長年理論グループの長として、また副所長格のスタッフとして活躍しておられる。Landau、Fock、Demkov (70 歳を超えているが、現在 St. Petersburg 大学の Fock チェアーの現役教授) などのロシアの伝統的理論物理の流れを汲む大家である。特に非断熱遷移の理論では顕著な業績をあげておられる。平行な多準位が 1 本の準位と交差している系の厳密解を与える Demkov-Osharov モデルは特に有名である。

1999 年には Award of Russian Academy of Sciences を受賞されており、以下の 3 冊の単行本の著者でもある。

- 1) Radiationless Transition Theory in Polyatomic Molecules (with E.S. Medvedev, Nauka, 1983, in Russian).
- 2) Molecular Reaction Dynamics (with A.I. Voronin, Nauk, 1990, in Russian).
- 3) Radiationless Transitions in Polyatomic Molecules (with E.S. Medvedev, 1995, Springer).

分子研における我々研究グループの非断熱遷移理論の研究 (Zhu-Nakamura 理論を中心とするもの) を高く評価してくださり、10 年に及ぶ協力研究を実施している。1995 年に初めて分子研招聘外国人研究員として 9 ヶ月滞在され、その後、1997 - 1999 年には学術振興会の旧ソ連邦との国際共同

研究の支援を受けて共同研究を実施、2000 年には分子研外国人客員教授として 6 ヶ月滞在、2002 年には学術振興会の旧ソ連邦諸国研究者交流事業で来訪されている。これらの協力研究によって既に 9 報の論文を発表しており、現在も協力研究が進行している。現在の協力研究は「レーザー場中における原子分子過程の理論」であり、既にかんりの進捗を見ている。今回の来日 (平成 16 年 9 月から 4 ヶ月間) での完成を目指している。これ以外にも、実は、現在の中村グループの助手である Gennady V. Mil'nikov は同教授グループの出身である。

Osharov 教授は、夫婦共々大変な日本びいきであり、特に、相撲の大ファンである。理論の面で、あるいは、文化の面で多くの皆さんとの交流が出来れば大変良いがと願っている。

(中村宏樹 記)

Prof. VAROTSIS, Constantinos

C. Varotsis さんは 1960 年ギリシャのクレテ島に生まれた。高等学校はギリシャの Piraeus で過ごした後 1978 年アメリカのシンシナチ大学に進学して化学と物理を学んだ。卒業後ノースイースタン大学の修士課程に入学し、D. Ziegler 教授のもとで気体の紫外共鳴ラマン分光の研究をした。オプティクス中心の物理学をしっかりと身に付けると共に、ラマン散乱の励起波長を変えるとラマンバンドの強度が変わる事から分子の励起電子状態の事を明らかに



する実験をした。測定対象にしたのはスチレン分子で、200 nm 付近のラマン励起プロファイルを C=C 伸縮振動に対して観測し、 $\pi\pi^*$ 励起状態における振電カップリングに関する情報を得た。その後、ミシガン州立大学に進み、1990 年に G. T. Babcock 教授のもとで Chemical Physics の Ph.D. を取得した。1992 年迄同教授のもとでポスドクとして仕事をした後 1993 年にクレーテ大学の助手になり 1999 年に準教授に、2003 年に正教授に昇進した。

博士課程ではヘム蛋白質の共鳴ラマン分光の研究に携わった。すなわちウシ心筋のミトコンドリアに含まれる末端酸化酵素であるシトクロム c 酸化酵素の可視光励起の共鳴ラマンスペクトルの測定をした。1992 年頃に彼が発表した論文は、北川らが報告していた結果と合わなかった。Babcock グループはアメリカでは有名であったので、彼等の結果が一般に信じられがちであったが、我々はその問題を取り上げ、論争を続けた。その後、北川グループで学位を得た D. Proshlyakov が G. T. Babcock 教授のポスドクとなり、そこで北川らの結果を Babcock に納得させるに到った。一方、C. Varotsis がクレーテ大学の助手になった後、自分自身で日本に来て北川グループ内で実験して、その問題は決着がついた。彼がアメリカで測定に用いたレーザーはパルスレーザーで、フォトン密度が高すぎ、光化学反応が起こった事が原因であった。その来日の折りに、それとは全く別の研究として、シトクロム酸化酵素の赤外分光の研究をした。当時の総研大生と共同研究を進めて次の論文を発表した。“Infrared Evidence for Cu_B Ligation of Photodissociated CO of Cytochrome c Oxidase at

Ambient Temperatures and Accompanied Deprotonation of a Carboxyl Side Chain of Protein,” T. Iwase, C. Varotsis, K. Shinzawa-Itoh, S. Yoshikawa and T. Kitagawa, *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 1415–1416 (1999).

クレーテ大学で独立なグループを持った後、彼は好熱菌や大腸菌の末端酸化酵素や一酸化窒素還元酵素を FTIR や共鳴ラマン法で精力的に調べている。生物が酸素呼吸をする前の時代にシトクロム c 酸化酵素の先祖に当る酵素があって、それは NO を N₂O に還元する触媒作用があった。したがって好熱菌のシトクロム c 酸化酵素にはその名残を残す面があり、一酸化窒素に対しても酵素活性を示す。それらは、シトクロム ba₃、bo₃、caa₃ と云ったもので、Varotsis はそれらの振動スペクトルを調べ、最近の Publication は目を見張る勢いである。今回の来日ではそれらの酵素を岡崎にもってきて、こちらの装置を用いて測定し、北川グループで調べている哺乳類の酵素との違いを明らかにしていく予定である。

(北川禎三 記)

Prof. SUN, Wei-Yin

10 月から外国人研究員（客員教授）として 1 年間の予定で滞在する Wei-Yin Sun 先生について紹介いたします。分子研では「高分子金属錯体を用いた光学活性な多孔性物質の設計と合成」で協力研究を行うことになっています。

Sun さんは 1986 年に中国の大学を卒業された後、

大阪大学大学院理学研究科に留学され、1993年に博士号を取得されました。学位のテーマは、ペプチドを配位子とした錯体による生体内金属酵素、とくにFe/Sクラスターのモデル研究についてです。その後、日本の会社で博士研究員として更に2年間滞在されています。そのため、流暢な日本語をはなされ、日本の良いところ悪いところ共によく知っておられます。中国に帰国された後、南京大学配位化学研究所の教授として今日に至っています。現在の研究テーマは、金属錯体を構築単位とした高分子化合物の合成と機能化であり、中国の若手研究者として精力的に研究を行っています。合成実験に関して豊富な知識と経験をもっておられ、我々の研究に関しておおきな刺激になると期待しています。分子研では配位子設計に基づく、光学活性な多孔性物質の合成に関して研究をすすめる予定です。

今回は奥さんと息子さん（10才）の御家族と滞在される予定です。奥さんと息子さんともども、岡崎での生活を楽しんでいただければと思います。

（川口博之 記）



いの うえ ひとし 井 上 仁

理論分子科学研究系分子基礎理論第三研究部門 産学官連携研究員

平成14年に、九州大学大学院理学研究科で博士学位を取得後、平成15年9月より米満グループに研究員としてお世話になっております。九州大学では修士課程で古典スピン系のランジュバンダイナミクス（森方程式など）の解析を、博士課程では共形場理論・繰り込み群をもとに量子スピン系・電子系の研究を行ってまいりました。現在、TTF-CAなど光誘起相転移における緩和過程の機構を研究しております。

趣味は音楽、旅行（アジアなど“熱い”ところ）、釣り、将棋、その他多くのことです。どうぞよろしくお願い致します。



こくぼ ひろ のり 小久保 裕 功

理論分子科学研究系分子基礎理論第一研究部門 産学官連携研究員

平成15年9月まで総合研究大学院大学の博士課程に所属していました。10月よりNAREGI研究員として理論系の岡本グループにお世話になっています。これまで分子シミュレーションによる膜タンパク質の立体構造予測に関する研究に取り組んできました。今後、どのような法則に従って特定の構造を形成し、自己組織化していくかについて明らかにしたいと考えています。



よし おか し ろう 吉 岡 資 郎

関連領域研究系関連分子科学第一研究部門 助手

（統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域）

平成15年11月より現職。1年7ヶ月間のアメリカ田舎生活（テネシー州ナッシュビル）を経験した後、再度、分子研にて皆様のお世話になることになりました。よろしくお願い致します。略歴は「分子研レターズ44号」をご覧ください。金属酵素に関する基礎的研究をさらに発展させることが当面の目標ですが、将来は病気の治療に関する研究を展開したいと考えています。



ZHANG, Dao

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 研究員（科学技術振興調整）

Born in Jiangsu, P. R. China, I got the Ph. D. in August 2003 in Changchun Institute of Applied Chemistry, Chinese Academy of Sciences, ChangChun, P. R. China, in major of organic Chemistry. I joined Professor Kawaguchi's research group as a postdoctoral fellow in November 2003. Present research is mainly synthesis and reactivity to small molecules of early transition metal complexes supported by novel carbene-bridged multidentate ligands.





なか じま ひかり
中 島 彩

理論分子科学研究系分子基礎理論第一研究部門 技術補佐員（産学連携）

平成15年11月より理論分子科学研究系でお世話になっております。全く初めての環境に飛び込んでしまった当初は戸惑いや不安も多かったのですが、最近では逆に新しいことに次々とチャレンジさせていただける毎日を多に楽しんでいます。どうぞよろしくお願いいたします。



KONDORSKIY, Alexey

理論分子科学研究系分子基礎理論第二研究部門 研究員（科学研究）

I was graduated from Moscow Institute of Physics and Technology (State University), Russia, in 1998. I received my Ph.D. in 2001 at the same university. Since 1998, I work at P.N. Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia. Since 2001, I work at IMS as JSPS Fellow (2001 ~ 2003) and researcher (2003 ~ present). My research interests are semi classical theory of electronically no adiabatic chemical dynamics and methods of laser control of molecular dynamics.



まつ がみ まさる
松 上 優

理論分子科学研究系分子基礎理論第三研究部門 産学官連携研究員

初めまして、12月から産学官連携研究員として平田グループでお世話になることになりました。勉強や研究をやる環境としては最高の研究所なので、皆様からいろんなことを学びたいと思います。まだ右も左も分かりませんが、よろしくお願いします。



もり た あき ひろ
森 田 明 弘

計算分子科学研究系計算分子科学第一研究部門・計算科学研究センター 助教授

東京大学理学部、同修士課程、京都大学理学研究科博士課程中退、同化学教室の助手を経て、2004年1月より分子研に来ました。出身は神奈川県鎌倉市で、京都に移るまで過ごしました。趣味はピアノですが、アメリカに留学したときに手放して以来、ここ数年は弾いていません。最近理論の岡本祐幸先生の影響を受けて、朝型人間になろうと努力しています。



はら とし ふみ 原 俊 文

分子集団研究系物性化学研究部門 非常勤研究員

兵庫県立姫路工業大学（現 兵庫県立大学）大学院理学研究科にて昨年9月に学位取得。本年1月より物性化学中村グループでお世話になっています。これまではフラレンドーピング化合物の固体物性を研究していました。こちらでは磁気共鳴を利用した有機導体の電子物性の研究を行っています。研究対象への広い視野とより深く追究する姿勢を磨きたいと思います。よろしくお願いします。



お の ゆりこ 小 野 ゆり子

理論分子科学研究系分子基礎理論第一研究部門 産学官連携研究員

平成16年3月東京工業大学理工学研究科原子核工学専攻博士課程を修了後、同年4月より理論系岡本グループにお世話になっています。これまでは炭素同位体分離に関連する計算及び実験に携わってきました。恵まれた環境を生かして研究の幅を広げていくことができたらと考えております。どうぞよろしくお願い致します。



あか ぎ ふみ お 赤 木 史 生

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 研究員（科学技術振興調整）

平成13年3月大阪大学大学院理学研究科博士後期課程修了後、同研究科研究生、大分大学ベンチャービジネスラボラトリー博士研究員を経て、本年3月より川口グループでお世話になっております。分子研という恵まれた環境の中で多くのことを学び、より幅広い視野をもって研究を展開してゆけるよう努力したいと思っております。よろしくお願いします。



ひ やま みやび 樋 山 みやび

極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門 助手

総合研究大学院大学で博士の学位を取得後、科学技術振興事業団博士研究員、オックスフォード大学博士研究員、日本学術振興会特別研究員（PD）を経て、平成16年3月よりまた分子研に戻ってきてしまいました。実験系の研究室に所属するのは初めてなので、理論系とはちがった雰囲気を楽しんでいます。





たか はし えい じ
高橋 栄治

極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門 助手

平成13年3月宇都宮大学大学院工学研究科修了後、理化学研究所基礎科学特別研究員を経て、3月より分子研でお世話になっております。これまではレーザーを用いた超短パルス軟X線光源の研究開発に携わってきました。分子科学は自分にとっては初めての研究分野ですが、多くの方々と協力して面白い研究ができればと考えております。今後ともよろしくお願いいたします。



か つき ひろ ゆき
香月 浩之

電子構造研究系電子状態動力学研究部門 助手

平成14年3月に京都大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了後、2年間チューリヒ大(Prof. Peter Hamm)のもとで研究員を行い、この4月にこちらに着任いたしました。元々周波数領域での高分解能分光をやっていましたが、量子コヒーレンスや波束のダイナミクスの方に興味に移り、今回こちらで大森先生のもと新たなスタートをきることになりました。他のグループの方々と切磋琢磨しつつ、面白い研究をしていきたいと思っております。どうぞよろしくお願いいたします。



さくら い ひで ひろ
櫻井 英博

分子スケールナノサイエンスセンターナノ触媒・生命分子素子研究部門 助教授

東京大学大学院理学系研究科化学専攻を修了後、同助手、学振海外特別研究員、大阪大学講師、助教授を経て、2004年4月より着任いたしました。表向きの趣味は「茶道」ということになっているのですが、最近全く稽古に行けず看板倒れになっています。また落ち着いたら改めて始めたいと思っていますので、どなたか先生(裏千家)を紹介して頂けると嬉しいです。よろしくお願いいたします。



まつ もと よし やす
松本 吉泰

分子スケールナノサイエンスセンターナノ光計測研究部門 教授

京都大学にて学部、修士課程修了、東京大学大学院にて博士課程修了。工学博士。ピッツバーグ大学博士研究員、理化学研究所研究員、分子研助教授、総研大先端科学研究科教授を経て、2004年4月に現職に着任。分子制御レーザー開発研究センター長併任。専門は、分子分光、表面科学で、光が物質と相互作用することによって生じるさまざまな物理、化学過程のメカニズムやダイナミクスを解明し、これらの過程の制御をめざしています。



つの やま ひろ のり
角 山 寛 規

分子スケールナノサイエンスセンターナノ光計測研究部門 非常勤研究員

平成16年3月に東北大学大学院理学研究科博士課程を修了後、本年4月より佃達哉助教授のグループでお世話になっております。これまでは気相中の金属-分子クラスター内で起こる電子移動および反応について研究を行ってまいりました。こちらでは金属ナノクラスターの性質や反応性について研究を行っていきたいと考えております。皆様どうぞよろしくお願いいたします。



まき すぐる
槇 優

分子スケールナノサイエンスセンターナノ触媒・生命分子素子研究部門 非常勤研究員

平成15年9月大阪大学大学院理学研究科博士課程修了。学振特別研究員(DC2)科学技術振興機構さきがけ研究員を経て、4月より現職。ポルフィリン、金属ナノクラスターを用いた機能性物質の開発に携わっており、永田 央先生をはじめとする関係グループの方々に大変お世話になっております。ここ岡崎で頭と肝臓を鍛えている最中です。よろしくお願いいたします。



なが お まさ し
長 尾 昌 志

分子スケールナノサイエンスセンターナノ光計測研究部門 非常勤研究員

平成16年3月に東京大学大学院理学系研究科博士課程修了後、4月より松本先生のグループでお世話になっております。これまではシリコン表面上での有機分子の吸着構造について研究を行ってきました。これからは、レーザーを用いた研究手法を学び、表面上での分子の反応について研究を行いたいと思います。よろしくお願いいたします。



さくら い よう こ
櫻 井 陽 子

極端紫外光研究施設 非常勤研究員

平成16年3月に名古屋大学大学院理学研究科博士課程を修了。同年4月より木村グループでお世話になっております。これまでは主に赤外反射吸収分光法を用いて有機/金属界面の研究を行ってきました。こちらでは放射光を用いた赤外分光を行なう予定です。趣味は音楽で、珍しい楽器を弾いています。どうぞよろしくお願いいたします。





く ぼ りん
久 保 穂

統合バイオサイエンスセンター生命環境研究領域 非常勤研究員

平成15年3月北海道大学大学院理学研究科博士後期課程を修了後、大阪大学での博士研究員を経て、平成16年4月から北川グループでお世話になっております。これまで量子化学計算やMD計算、フェムト秒分光法を用いてタンパク質やポルフィリン化合物のダイナミクスを研究してきました。今後は時間分解ラマン分光法を用いてタンパク質のダイナミクスの研究を進めます。宜しくお願い致します。



た む ら ひ ろ ゆ き
田 村 宏 之

理論分子科学研究系分子基礎理論第二研究部門 非常勤研究員

東北大学（宮本研究室）で博士課程を卒業後、学術振興会特別研究員として金沢大学（樋渡研究室）およびアイオワ州立大学（Gordon研究室）に滞在し、今年の4月より特別推進研究「Zhu-Nakamura理論に基づく非断熱化学動力学の総合的研究」のポスドクとして岡崎に来ています。現在は、励起分子の反応動力学に関する理論計算を行っています。以前は、潤滑油の分子動力学計算、半導体の電子状態および結晶成長機構の第一原理計算なども行っていました。よろしくお願いいたします。



たに む ら あ ゆ み
谷 村 あゆみ

理論分子科学研究系分子基礎理論第三研究部門 産学官連携研究員

2004年3月総研大単位取得退学。引き続き、平田グループでお世話になっております。

よろしくお願いいたします。



いく た や す ひ ろ
生 田 靖 弘

理論分子科学研究系分子基礎理論第三研究部門 産学官連携研究員

平成16年3月に東京大学大学院理学系研究科（化学）で博士の学位を取得しました。この4月より産学官連携研究員として平田グループでお世話になることになりました。これまでは有機反応における面選択性の研究をしてきました。今後は溶液（溶媒）の視点から有機反応を含め様々な反応の研究を行なっていく予定です。趣味は、料理とドライブです。よろしくお願いいたします。



よし だ のり お
吉 田 紀 生

理論分子科学研究系分子基礎理論第三研究部門 研究員（科学研究）

専門分野は溶液内分子の電子状態理論です。理論構築に興味があり、新しい方法論の開発を行なっていきたいと考えています。趣味は外来魚の駆除です。よろしくお願いします。



は だ まさ ひこ
波 田 雅 彦

理論分子科学研究系分子基礎理論第四研究部門 客員教授

1986年に京都大学大学院工学研究科にて学位取得後、日立製作所生産技術研究所、京都大学工学研究科を経て2002年4月より東京都立大学理学研究科に勤務しております。2004年4月から1年間の予定で本研究所の客員として勤めさせていただきます。理論化学・量子化学を専門としております。研究上でお役に立てることを探したり、四方山話を通して多くの方々と交わりたいと考えておりますのでお声を掛けてください。



なか じま たかし
中 嶋 隆

理論分子科学研究系分子基礎理論第四研究部門 客員助教授

京都大学大学院工学研究科（修士）を修了した後、日本原子力研究所→南カリフォルニア大学→クレタ大学→マックスプランク量子光学研究所→理化学研究所と放浪し、平成10年より京都大学エネルギー理工学研究所に勤務しています。コヒーレントな非線形光学現象に関する理論研究をしてきましたが、最近はアト秒パルスの研究も始めました。様々な意味で自己の新陳代謝が落ちてきているのを痛感する毎日です。



いし もり こういちろう
石 森 浩一郎

分子構造研究系分子構造学第二研究部門 客員助教授

1989年に京都大学大学院工学研究科分子工学専攻博士課程を修了し、そのまま同じ研究室の助手に採用され、もはや20年以上も金属蛋白質、特にヘム蛋白質の物理化学的研究に携わっています。一時、研究し尽くされた感があったヘム蛋白質ですが、最近ヘムに情報伝達因子としての働きがあることが示唆され、また面白くなってきました。分子研には大学院生のときから出入りさせていただいていますが、今回の機会を生かしてさらにいろいろな分野の方々と交流を深めたいと思います。よろしくお願いいたします。





いち むら ていじろう
市村 禎二郎

電子構造研究系電子構造研究部門 客員教授

東京工業大学理工学研究科化学専攻を修了後、同大学の理学部に所属し、平成10年4月、組織替えにより新設の物質科学専攻に移りました。分子研では昭和60年代から断続的に協力研究をさせていただきました。芳香族分子、特にハロゲンやメチル基などで置換したベンゼン誘導体の分子構造と励起状態ダイナミクスを主として研究してきました。波長可変のピコ秒、フェムト秒分光を新規の反応場に応用することを計画しています。よろしくお願いします。



たか ぎ のり あき
高木 紀明

電子構造研究系電子構造研究部門 客員助教授

京都大学大学院理学研究科で学位取得以降、理化学研究所、京都大学大学院理学研究科を経て、現在総合研究大学院大学先端科学研究科に在籍しております。専門は、表面科学で、表面反応ダイナミクス/カイネティクスの解明や新規2次元物質系の開拓を主要テーマとして活動しております。よろしくお願いします。



さい とう まさ お
齋藤 正男

相關領域研究系相關分子科学第二研究部門 客員教授

1975年阪大・基礎工・生物工学修士課程修了、ペンシルバニア大学生化学・生物物理学科（研究員・助教授・準教授）、ケース・ウエスタン・リザーブ大学生理学・生物物理学科（準教授・教授）を経て、東北大学多元物質科学研究所教授。分光法・蛋白質工学・構造生物学の手法を組み合わせた多元的アプローチでヘム関連蛋白質（ヘム分解酵素、ヘムセンサー等）の構造機能相關の解明を目的とする研究を進めています。



なか むら かず たか
中村 一隆

相關領域研究系相關分子科学第二研究部門 客員助教授

1989年に東京工業大学で学位を取得後、科学技術庁金属材料技術研究所研究員、主任研究官を経て、1998年から東京工業大学応用セラミックス研究所に在籍しています。1992年にスタンフォード大学に在外研究員として行ってから、レーザー分光の世界に入りました。現在は強レーザー光子場における量子放出とそれを用いた凝縮系物質の相転移ダイナミクスの研究を行っています。



栗原 正人

錯体化学実験施設錯体触媒研究部門 客員助教授

1995年九州大学大学院理学研究科博士後期課程修了後、1年半ですが分子研の錯体化学実験施設で非常勤研究員として、1997年から2002年まで、東京大学大学院理学系研究科化学専攻助手として、酸化還元活性錯体の機能について研究しました。2002年より山形大学理学部物質生命化学科助教授として現在に到っています。山形大学では界面合成による金属錯体ナノ結晶の作成法の開発と機能性材料への応用についても研究を展開しています。



近藤 聖彦

技術課第三技術班装置開発技術係 技術職員

名古屋大学理学部第一装置開発室との2年間の人事交流を終え、今年の4月から装置開発室で勤務しています。名古屋大学では、特にX線望遠鏡を製作するのに必要な機械技術等を学ぶことができました。交流以前は分子研で約5年間勤務していましたが、新たな気持ちで、技術の向上に努めたいと考えています。また、技術が日進月歩するように、私も自己啓発して進歩できるようにしたいです。よろしくお願いいたします。



青山 正樹

技術課第三技術班装置開発技術係 係長

名古屋大学工学部技術部で技術職員として19年間勤務後、平成16年4月1日から技術課装置開発室にお世話になっております。これまで各種実験装置の設計・試作を行ってきました。こちらでも同様な業務に携わっています。研究者の高度な技術要求・製作依頼に迅速に対応できるようがんばりたいと思いますので、よろしくお願いいたします。

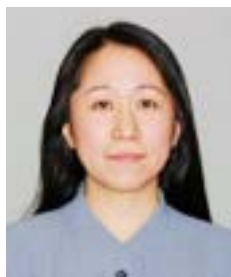


太田 萌代

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 事務支援員

H16年4月より分子集団動力学研究部門にてお世話になっております。お陰様で私の周囲の方々は、先生方をはじめ、皆さん大変親切、且つ明るい方々ばかりなので和気藹藹としたその中で毎日楽しくお仕事をさせていただいております。かつての分子クラスター研究部門となぜかこの顔に見覚えのある方は……、とにもかくにも今後ともどうぞよろしくお願いいたします。





いし かわ ひろ み
石川 浩美

理論分子科学研究系 事務補佐員

平成16年4月1日より、理論分子科学研究系でお世話になっております。慣れない環境の中、周りの方々の暖かいご支援をいただきながらめまぐるしい日々を送っております。戸惑うことも多々ありますが、つまずきながらも自分らしく成長できるよう努力していくつもりです。どうぞ、今後ともよろしくお願い申し上げます。



わた なべ よう子
渡辺 よう子

分子スケールナノサイエンスセンター 事務補佐員

平成16年4月から分子スケールナノサイエンスセンターで、事務補佐員としてお世話になっております。初めは何も分からなかった私ですが、周りの皆様に支えられ、ようやく少しずつ慣れてきました。とはいえ、まだまだ知らない事、分からないことが多々あり、ご迷惑をお掛けすることがあるかと思いますが、宜しくお願い致します。



きら い ひろ まさ
皿井 宏昌

計算科学研究センター 技術補佐員（産学連携等研究費）

愛知県半田市出身。去年10月より業務委託職員としてお世話になっておりましたが、今年4月よりこちらの非常勤職員となりました。Gridコンピューティングシステムの運用管理に携わっております。初めてここでのスーパーコンピュータを見たときの感動を忘れずに、頑張りたいと思っております。皆様どうぞよろしくお願い致します。



PAVEL, Nicolaie

分子制御レーザー開発研究センター 研究員（科学研究）

I graduate from the Faculty of Physics, Bucharest University, Romania in 1990; in the same year I joined the National Institute for Laser, Plasma and Radiation Physics (NILPRF), Bucharest, as a junior scientific researcher. In 1997 I received a Ph.D. in Physics, Optics, Spectroscopy and Lasers field, from the Institute of Atomic Physics, Bucharest. Working/study stages abroad: **A.** 1996-1998, Fukui University, Fukui, Japan, research student, MONBUSHO scholarship; **B.** 1998-1999, Information Technology R&D Center, Mitsubishi Co., Ofuna, Kamakura, visiting researcher; **C.** 1999-2001, Laser Research Center, Institute for Molecular Science (IMS), Okazaki, Japan, postdoctoral fellow of the Japanese Society for the Promotion of Science (JSPS); **D.** 2002-2003, Laser Research Center, IMS, Okazaki, Japan, long-term research scholarship of JSPS; **E.** 2001 and 2003, short visits (up to three months) at Laser Research Center, IMS, Okazaki, Japan. Presently I am with IMS, the research group of Assoc. Prof. Dr. Takunori Taira, under a research grant of the Special Coordination Funds for Promoting Science and Technology of the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology of Japan. I held a permanent position, as a senior researcher, at NILPRF, Bucharest, Romania. Research subjects: study and design of diode-pumped solid-state lasers, nonlinear conversion to visible and uv ranges, industrial and medical applications of lasers, etc.



伊 木 志成子

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 研究補助員

大学では化学を専攻し、会社では分析と研究開発の仕事をしてきました。会社を退職して10年すぎ、ブランクも長くみなさまについていくのもやっとですが、ご迷惑をかけないよう一生懸命やっていますので宜しくお願いします。幸いよい人たちに恵まれて楽しく過ごせそうです。

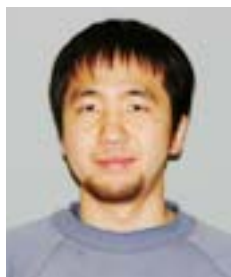


磯 野 裕貴子

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 研究補助員

今年の4月から小林速男先生のグループでお世話になっております。以前企業の研究所に勤めておりましたが、子育てのため十数年のブランクがあります。研究に携わる事ができてうれしく思う反面、不安と緊張の毎日ですががんばっていきたいと思います。どうぞよろしくお願い致します。





おか もと てつ あき
岡 本 哲 明

統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域 研究員（科学研究）

平成15年3月に東京大学大学院農学生命科学研究科で博士（農学）を取得後、同大学院農学特定研究員を経て、平成16年4月より木下教授のグループにお世話になっております。これまで、植物細胞壁中のセルロース微細繊維の構造解析を行っていましたが、とあるセミナーで木下教授と飲み語ったことがきっかけで、一転して、たんぱく質分子機械の働く仕組みを調べる研究を行うことになりました。まだまだわからないことばかりですが、岡崎という研究に打ち込むのに適した環境を活かして頑張りたいと思います。よろしくお願いします。



まえ しま のぶ や
前 島 展 也

理論分子科学研究系分子基礎理論第三研究部門 特別訪問研究員

平成14年3月大阪大学大学院理学研究科博士後期課程修了後、大阪電気通信大学、大阪大学サイバーメディアセンターを経て、平成16年1月より米満グループでお世話になっております。こちらに来る前は数値的手法を用いた低次元磁性体の研究を行ってきました。今後は金属錯体や有機磁性体の研究に取り組む予定にしております。どうぞよろしくお願いします。



RÜHL, Eckart

極端紫外光科学研究系極端紫外光研究部門 外国人客員教授

（極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門 小杉グループ）

I was born in Berlin (Germany) and I obtained a PhD in Physical Chemistry at the Freie Universität Berlin in 1987. After several years abroad as a post-doc I returned to Berlin, where I obtained the Habilitation in Physical Chemistry. In 1995 I was appointed to a Professor of Physics at the Johannes Gutenberg-Universität Mainz (Germany). One year later I moved for six years to the University of Osnabrück (Germany), where I started the environmental physics activities at this university. In 2002 I was appointed to the chair of physical chemistry I at the University of Würzburg (Germany). My current research interests include the photophysics and photochemistry of atoms, molecules, clusters, and nanoparticles, which is the foundation for my collaboration with Prof. Nobuhiro Kosugi at the IMS.



宇野 秀隆

極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門 技術補佐員

本年度4月より宇理須恆雄教授のグループにてお世話になっております。以前はコンピュータを中心とした情報系分野を学び職に就いておりましたので、こちらの環境に対して新鮮味を日々感じております。全くの別路線から研究職への道を歩むべく日々努力を積み重ねていきたいと思っております。知らない事ばかりで皆さんにはいろいろとご迷惑をおかけするとは思いますが、どうぞよろしくお願い致します。



矢崎 穂子

計算科学研究センター 技術補佐員

3月まで山手地区でお世話になっていました。4月に明大寺へ引越し、新人職員として忙しくも楽しい毎日を送っています。好奇心旺盛で色々なことに手を出すのですが、残念ながらどれもここで自慢できる域には達していません。

情報処理に関してもまだまだ勉強不足ですが、計算科学研究センターを世界一のスパコンセンターにするべく、少しでもお役に立ちたいと頑張っています。どうかよろしくお願い致します。



川口 律子

計算分子科学研究系 事務支援員

H6年9月から7ヶ月間、役務職員としてお世話になり、H9年より、理論・生理研・計算センターと転々としてきました。育児、仕事とアップアップしながら約8年。今は子育ても一段落して、趣味のバレーボールにハッスル。ハッスル。初々しさがちょっと？ かけておりますが、どうぞ宜しくお願い致します。



西條 純一

電子構造研究系基礎電子化学研究部門 助手

平成16年3月に東京工業大学大学院理工学研究科博士課程を修了後、(わずか2週間ですが)日本学術振興会特別研究員(PD)を経て4月16日より分子研に着任いたしました。これまでバルクな固体の伝導・磁性を中心に研究を行ってまいりましたが、現在はナノ粒子の磁性・構造を中心とした研究を行っております。よろしくお願い致します。





じゅう だい けん
十代 健

電子構造研究系基礎電子化学研究部門 助手

慶應義塾大学理工学部化学科（茅・中嶋研究室）で博士号を取得、助手を経験後、ドイツ南部のウルム大学で2年半ポスドクとして修行をし、5月から西グループでお世話になっています。ドイツ留学の影響でビール等お酒をこよなく愛する体質となっていました。水=エタノール系クラスターの第一人者、西先生の下に胸を躍らせて帰国したのですが、残念ながら現在はその研究をされてなく、金属クラスター・微粒子の研究をすすめていくことになりそうです。よろしくお願いします。



のぶ きた かつ ゆき
信定 克幸

理論分子科学研究系分子基礎理論第二研究部門 助教授

平成7年東京大学大学院理学系研究科博士課程退学後、分子科学研究所助手、北海道大学助手を経て、再び分子研に戻って来ました。これまでは小さな気相分子の化学反応ダイナミクスの理論的研究を行ってきました。現在は多電子ダイナミクスの研究に力を入れており、多電子・多原子ダイナミクス両方の観点から、分子を統合的に理解したいと思っております。見慣れた顔ですが、あらためて今後ともよろしくお願いします。



やま した やす ふみ
山下 靖文

理論分子科学研究系分子基礎理論第三研究部門 助手

平成14年3月東京大学大学院理学系研究科博士課程物理学専攻修了。シンシナティー大学博士研究員、スイス連邦工科大学博士研究員を経て、本年6月より理論研究系米満グループ助手。これまでは、金属酸化物等の強相関電子系に於ける軌道自由度と幾何学的フラストレーションに関する研究を行って来ました。今後は研究対象を分子性導体、有機磁性体等にも広げて行きたいと考えています。宜しくお願い致します。



ひがし ばやし しゅう へい
東林 修平

分子スケールナノサイエンスセンターナノ触媒・生命分子素子研究部門 助手

平成10年関西学院大学大学院理学研究科化学専攻修士課程修了、平成14年慶應義塾大学大学院理工学研究科応用化学専攻博士課程修了後、米国ハーバード大学化学科博士研究員を経て、平成16年6月より分子科学研究所に参りました。分子研では櫻井グループにてヘテロ元素含有バッキーボールの合成を主に研究しています。赴任して初めて分子研の非常に恵まれた研究環境に驚き、また異なる研究分野間の距離の近さに非常に知的刺激を受ける毎日です。どうぞよろしくお願いします。



わた なべ かず や
渡 邊 一 也

分子スケールナノサイエンスセンターナノ光計測研究部門 助手

1997年大阪大学大学院工学研究科応用物理学専攻博士課程修了後、分子研基礎電子化学研究部門助手、総研大先導科学研究科助手を経て、6月より現職。これまで主に、超短パルスレーザー光を用いたwell-definedな固体表面上での励起状態ダイナミクスの研究を行ってきました。分子研では表面反応の光制御、および高い空間分解能をもった時間分解計測手法の開発を目指します。どうぞよろしくお願い致します。



の と まど み
能 登 円 望

分子構造研究系分子動力学研究部門 事務補佐員

今年の6月から横山グループでお世話になっております。わからない事ばかりで、皆様には色々ご迷惑をお掛けするかと思いますが、一生懸命がんばりますのでよろしくお願い致します。



平成 15 年度総合研究大学院大学学位取得者及び学位論文名

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
岡 芳 美	Studies on Structures and Magnetic Properties of Low-Dimensional Co(II) Complexes with Phenylcinnamic Acid	理 学	H16. 3.24
鈴 木 研 二	Vibrational Spectroscopic Study of Quasi-Two-Dimensional Organic Conductors, θ -(BEDT-TTF) ₂ MM'(SCN) ₄ [M = Cs, Rb, Tl; M' = Zn, Co]	理 学	H16. 3.24
滝 沢 守 雄	シリコン表面へのOTS自己組織化単分子膜の形成と反応機構	理 学	H16. 3.24
山 村 周 作	BML-IRRAS用の新基板作製法の開発とSi基板表面のSAM膜の評価	理 学	H16. 3.24
荒 正 人	Study on Molecular Assemblies Anchored to Silicon Surfaces via Silicon-Carbon Covalent Bonds	理 学	H16. 3.24

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
中 井 康 司	水中機能性固定化触媒による炭素 - 炭素結合形成反応	理 学	H16. 3.24

総合研究大学院大学平成 16 年度(4 月入学)新入生紹介



平成 16 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	西 村 知 紘	分子スケールナノサイエンスセンター	ナノ構造体作製のための新規手法の開発
	沼 田 陽 平	錯体化学実験施設	multiferroic complex の構築と物性
	溝呂木 直 美	理論分子科学研究系	新機能をもつナノスケール分子の理論設計
	馬 暁 東	分子構造研究系	新機能磁性薄膜の探索とその物性・構造評価
機能分子科学	荒 川 孝 保	分子スケールナノサイエンスセンター	クラスター白金高分子触媒による水中酸化反応の開発
	石 塚 良 介	理論分子科学研究系	密度汎関数法による液体金属相転移の理論的研究
	奥 山 健 一	岡崎統合バイオサイエンスセンター	酸化反応に関わるヘム酸素反応中間体の電子構造と反応の研究
	小 澤 寛 晃	分子スケールナノサイエンスセンター	デンドロン保護されたポルフィリンワイヤーの電気特性
	別 府 朋 彦	分子スケールナノサイエンスセンター	ピロロイミダゾロン骨格を有するカルベン錯体触媒の開発
	矢 島 高 志	分子スケールナノサイエンスセンター	カーボンナノチューブの分子エレクトロニクスへの応用

平成 15 年度岡崎 IMS コンファレンス

機能性クラスター・自己組織化ナノ粒子国際会議

International Symposium on Functional Clusters and Cluster-Based Nano-Materials

開催日	2003 年 12 月 15 日 - 18 日	
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 西 信之	
招待外国人研究者	Peter B. Armentrout	(Univ. of Utah, USA)
	Kit H. Jr. Bowen	(Johns Hopkins Univ., USA)
	C. Brechignac	(CNRS, France)
	M. Broyer	(LASIM, France)
	A. W. Castleman	(Pennsylvania State Univ., USA)
	J. Cheon	(Yonsei Univ., Korea)
	J. M. Farrar	(Univ. of Rochester, USA)
	H. Haberland	(Univ. of Freiburg, Germany)
	M. F. Jarrold	(Indiana Univ., USA)
	M. Kappes	(Univ. of Karlsruhe, Germany)
	S. K. Kim	(Seoul National Univ., Korea)
	Müller-Dethlefs Klaus	(The Univ. of York, UK)
	M. B. Knickelbein	(Argonne National Laboratory, USA)
	U. Landman	(Georgia Inst. of Tech., USA)
	J. H. Parks	(Harvard Univ., USA)
	A. Rosen	(Göteborg Univ., Sweden)
	D. J. Schiffrin	(Univ. of Liverpool, UK)
	B. Simard	(National Research Council, Canada)
	L. S. Wang	(Washington State Univ., USA)
	R. L. Whetten	(Georgia Inst. of Tech., USA)

国際コンファレンスの概要

数個から数百個程度の原子で構成されるクラスター・ナノ粒子はサイズ特異的な性質を示すことから、

次世代機能材料の基本物質として大きな注目を集めている。本シンポジウムでは、国内外の第一線の研究者とともに、学問分野や領域を横断した視点から、以下のテーマについて現状と将来への展開について



の議論が行われた。

1) 気相クラスターの熱力学的性質、2) 気相クラスターの幾何学的構造および電子構造、3) クラスターの化学反応性、4) 分子クラスターの構造と反応動力学、5) 担持クラスター、6) クラスターの磁気的性質とナノ単磁区磁石、ナノ粒子とナノクラスター。

最初に、ペンシルバニア州立大学のキャッスルマン教授による「クラスターの反応と物性：クラスターを素材とする物質系の構築を目指して」という題名で基調講演がなされた。教授は、特に炭素を含むナノ金属合金系の構築に対するアプローチに関する研究を詳しく紹介された。次に、カナダのシマード博士が、「機能性物質の創製へ向けた遷移金属クラスターの気相および液相合成」という題名で、高分子中に酸化鉄のクラスターを分散させたり、金と銀との混合クラスターの液相合成に関して興味深い報告を行った。ドイツのフライブルグ大学のハバーランド教授は、ナトリウムの大型クラスターのサイズ効果をしらべ、その熱力学的性質がサイズの変化によって大きく変わることを、また、サイズ次第では負の熱容量を示すことを報告した。インディアナ大学のジャロルド教授は20個から40個の塩化ナトリウムクラスターのナトリウムイオン付加体について、その構造と結合エネルギーのサイズ依存性について実験と理論的な解析を紹介した。ジョンホプキンス大学のボウエン教授はアルミニウム、ニッケルの負イオンクラスターのイオン化ポテンシャルおよび磁気双極子モーメントのサイズ依存性について詳細な内容を報告した。ワシントン州立大学のワン教授は、

金の平面クラスターについて大変興味深い研究を報告した。金のような金属でも、炭素化合物と同様な芳香族性を示すこと、そして、それが車輪のような構造を有することを紹介した。ジョージア工科大学のウエッテン教授は、炭素76ナノ電極や球状スーパーシェルの構造を持つ銀クラスターのナノキャパシタ特性を紹介した。また、同じ大学の物理学教室のランドマン教授は幾つかの金属や半導体クラスターあるいはナノワイヤーの電気的性質についてエネルギー的あるいはエントロピー的な立場からの考察を発表した。これに加えて、茅幸二を始めとする9名の日本人研究者がそれぞれ独創性の高い研究を発表し、高い評価を得た。また、52件の若い研究者によるポスター発表があり、遅くまで、議論が続いた。我が国のクラスター研究の周知とレベル向上に大きな成果があった。

講演プログラム

December 15 (Monday)

- | | |
|-------------|---|
| 8:50- 9:00 | K. Kaya (Director General, IMS)
Opening Address |
| 9:00- 9:50 | A. W. Castleman (Pennsylvania State University)
Cluster reactions and properties: Laying the foundation for cluster assembled materials |
| 9:50-10:35 | B. Simard (National Research Council of Canada)
Transition metal clusters in the gas phase and in solutions—Towards the fabrication of functional materials |
| 10:50-11:35 | H. Haberland (University of Freiburg)
Experimental thermodynamics of small systems: Melting and boiling of clusters |



- | | | | |
|------------------------------|---|--------------------------------|--|
| 11:35-12:20 | M. F. Jarrold (Indiana University)
Melting of clusters and nanocrystals | 11:35-12:20 | A. Rosen (Göteborg University)
Molecular dynamics study of catalysed carbon nanotube growth within the vapor-liquid-solid model |
| 13:40-14:25 | K. Kaya (IMS)
Cluster science in Keio: Creation and development of cluster chemistry | 13:30-14:15 | J. M. Farra (University of Rochester)
Size-dependent electron density redistribution in polar solvent-alkaline earth cluster ions |
| 14:25-15:10 | M. Kappes (Universitat Karlsruhe)
Physical and chemical properties of coinage metal clusters | 14:15-14:35 | F. Misaizu (Tohoku University)
Excited state charge-transfer process and dissociation dynamics of Mg^+ -methyl halide complexes |
| 15:10-15:55 | J. H. Parks (Rowland Institute at Harvard)
Electron diffraction of trapped metal clusters | 14:35-14:55 | K. Fuke (Kobe University)
Electronic properties of hypervalent clusters |
| 16:15-17:00 | K. H. Bowen (Johns Hopkins University)
Photoelectron spectroscopy of cluster anions | 15:15-16:00 | S. K. Kim (Seoul National University)
Conformation dependent structure and dynamics of amino acid and its clusters |
| 17:00-17:45 | L. -S. Wang (Washington State University)
Planar clusters: from aromaticity to molecular wheels | 16:00-16:20 | M. Fujii (Tokyo Institute of Technology)
Picosecond time-resolved IR spectroscopy on 7-azaindole dimer-Bridge from cluster to solution |
| 17:45-18:05 | A. Nakajima (Keio University)
Photoelectron spectroscopy of binary cluster anions | 16:20-16:40 | H. Sekiya (Kyushu University)
Excited-state double proton transfer dynamics in deuterated 7-azaindole dimers studied by hole-burning spectroscopy |
| 18:05-18:25 | A. Terasaki (Toyota Institute of Technology)
Laser spectroscopy of free, trapped, and deposited cluster ions | 16:40-17:00 | A. Fujii (Tohoku University)
Infrared spectroscopy of large sized water containing cluster cations: Development of the three-dimensional hydrogen bond network with the cluster size |
| December 16 (Tuesday) | | 17:00-19:00 | Poster Session |
| 9:00-9:45 | T. Kondow (Toyota Institute of Technology)
Size-dependent physical and chemical properties of metal clusters | December 17 (Wednesday) | |
| 9:45-10:30 | P. Armentrout (University of Utah)
Bond energies of molecular fragments to transition metal clusters | 9:00- 9:45 | U. Landman (Georgia Institute of Technology)
Small is different: self-selection, assembly, and non-scalable evolution of nanoclusters |
| 10:50-11:35 | R. L. Whetten (Georgia Institute of Technology)
Selected gold and metal-oxide clusters as model low-temperature oxidation catalysts | | |



- 9:45-10:05 **J. Murakami** (National Institute of Advanced Industrial Science)
Low-temperature activation and direct oxidation of dinitrogen on supported tungsten nanoclusters
- 10:25-11:10 **C. Brechignac** (CNRS)
Nanosystems from cluster deposition: formation, stability and organization
- 11:10-11:55 **M. Broyer** (CNRS and Universite Lyon)
Clusters on surfaces and embedded in matrix: organization, optical properties and dynamics
- 13:10-13:55 **M. B. Knickelbein** (Argonne National Laboratory)
Toward molecular magnetic materials: Molecular beam characterization of magnetic clusters and complexes
- 13:55-14:15 **N. Nishi** (IMS)
Air-stable Fe nanoparticles and nanorods with graphitic carbon-skins
- 14:15-14:35 **T. Yamase** (Tokyo Institute of Technology)
Quantum tunneling of magnetization of VO^{2+} -triangle-containing polyoxotungstates and self-assembly of polyoxo-molybdates and -tungstates to nano-ring superclusters
- 14:35-14:55 **K. Sumiyama** (Nagoya Institute of Technology)
Composite state control of two different clusters via gas phase
- 15:15-16:00 **D. J. Schiffrin** (University of Liverpool)
Functionalised nanoparticles and molecular linkers: optical and electrical properties
- 16:00-16:45 **J. Cheon** (Yonsei University)
Novel anisotropic inorganic nanocrystals: diamonds, wires and stars
- 16:45-17:05 **T. Teranishi** (Advanced Institute of Science and Technology)
Planar patterning of gold nanoparticles for nanoelectronic devices
- 17:05-17:25 **T. Tsukuda** (IMS)
Photochemical and photophysical properties of subnanometer-sized gold clusters
- 17:25-17:35 **N. Nishi**
Closing Address

高速時間分解分光による孤立分子および分子集合体のフォトクロミック機構の解明

提案代表者	九州大学	教授	関谷 博
提案者及び共同研究者	九州大学	教授	入江正浩
		助手	迫田憲治
		助手	深港 豪
		修士	大坪暢人
		修士	田中伸幸
	分子科学研究所	教授	西 信之
		博士研究員	岡部智絵
	北海道大学	助教授	中林孝和
	東京大学	助手	井口佳哉
	奈良先端科学技術大学院大学	教授	河合 壮

1. 緒言

有機フォトクロミック分子は、分子メモリー材料、調光材料への応用が期待されており、有機合成化学や材料化学の研究者によって広範な研究が行われている。フォトクロミズムを示す分子には、励起状態プロトン移動、Woodward-Hofmann 則に従う光開環 - 光閉環、内部転換、円錐交差などの過程が含まれており、反応ダイナミクスの観点からも興味もたれている。多くのフォトクロミック反応の研究において、提案者である入江らのグループによる、ジアリールエテン類の単結晶に光照射し、分子の収縮に伴う結晶構造の変化の発見¹⁾および単一分子フォトクロミズムの観測の成功²⁾は国内外から注目されている。ジアリールエテン類のフォトクロミズムの研究は、光スイッチング素子などへの応用が期待される。また、単一分子フォトクロミズムの観測は、フォトクロミズムを溶液や固体におけるマクロな現象として眺める従来の描像を大きく変えるものであ

る。今後、単一分子の構造とダイナミクスの視点からのフォトクロミズム研究へのアプローチが益々重要となっている。有機フォトクロミック分子のダイナミクスの研究には、分子の構造と励起状態ポテンシャルについての情報を得るための精密な分光測定および高精度量子化学計算が不可欠である。フォトクロミズムは、物質の色の変化によって現われる現象であるが、光吸収による単一分子の構造異性化が基本となる。したがって、溶媒との相互作用のない孤立状態分子の測定によって、フォトクロミック分子の構造異性化について、従来よりも著しく詳細な描像を得ることが期待できる。精密な分光測定および最新の量子化学計算による孤立状態のフォトクロミズムについての情報は、凝縮相におけるフォトクロミズムの正しい理解と応用に対して寄与できるものと考ええる。

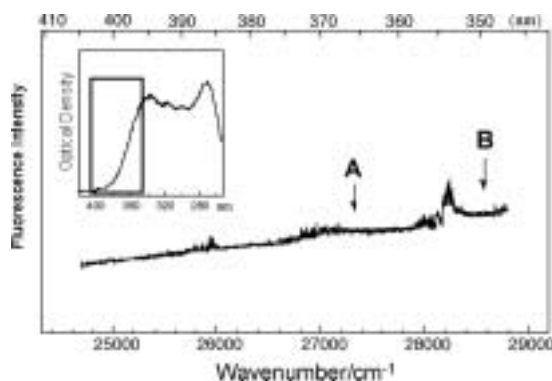


図1 超音速ジェット中のSAのLIFスペクトル。

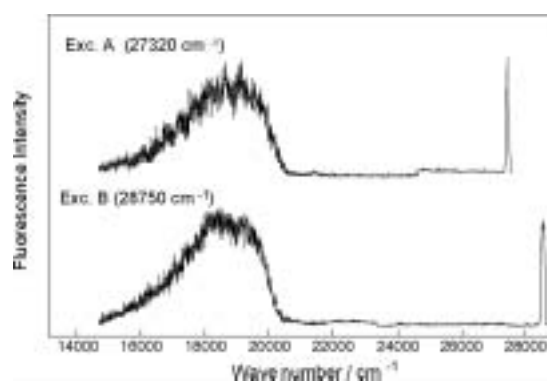


図2 超音速ジェット中のSAの分散蛍光スペクトル。

2. 研究目的

本研究においては、孤立分子状態の有機分子のフォトリミット反応について調査するために、超音速ジェット冷却された*N*-サリチリデンアニリン分子に対して、初めてフェムト秒時間分解分光を行う。また、溶液中のジアリールエテン類の光開環・閉環反応ポテンシャルについて調査するために、ピコ秒時間分解ラマン分光法を適用する。これらの分光測定から得られる結果を解析し、フォトリミット過程の反応中間体の構造、反応を特徴づけているポテンシャル曲面および主要な機構について解明することを目指す。また、孤立分子状態と凝縮相の結果を比較することによって、分子間相互作用がフォトリミット反応に及ぼす効果を明らかにしたい。

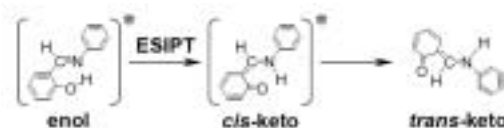
分子の電子構造と励起状態ダイナミクスの実験的研究のためには、周波数領域の分光と時間領域の分光が不可欠である。フェムト秒時間分解分光を用いると非常に短い時間（～100 fs）内に生じるダイナミクスを追跡できる。しかしながら、時間と周波数は不確定性関係によって結び付けられており、フェムト秒時間領域で分子の振動状態を時間追跡することは困難である。したがって、分子振動の時間変化を追跡するためには、ピコ秒領域の時間分解分光が有効である。このような理由で、本研究はピコ秒およびフェムト秒時間分解装置が設置されている分子

科学研究所の研究グループとの共同研究として実施した。

3. *N*-サリチリデンアニリンのフォトリミット反応

3.1 超音速ジェット中の電子スペクトル

N-サリチリデンアニリン（SA）のフォトリミット現象において、スキーム1に示した分子内励起状態プロトン移動（Excited-State Intramolecular



スキーム1

Proton Transfer:ESIPT) が重要な過程である。enol形の分子を光励起し、ESIPTによって生成した *cis*-keto形分子の異性化によって長寿命のコンフォーマー（*trans*-keto形分子と考えられている）が準安定状態として生成し、この分子の吸収波長がenol形分子の吸収波長と著しく異なるので、フォトリミット現象が発現すると考えられている（以下、enolコンフォメーションとketoコンフォメーションの分子を、それぞれenol体、keto体と略す）。

ESIPTによって生成した *cis*-keto体が、どのような電子・振動状態にあるのか、どのような経路を経

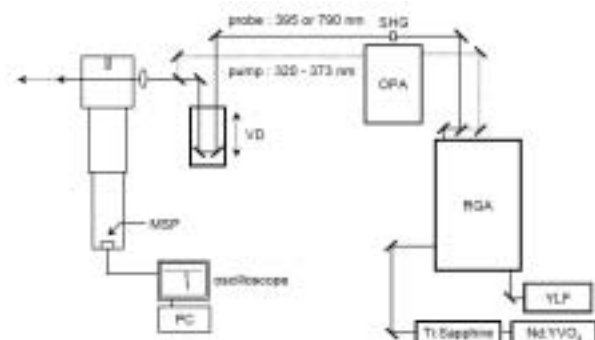


図3 イオン検出フェムト秒時間分解装置。

て *trans*-keto 体が生成するかについては、いくつかのモデルが提案されている。たとえば、溶液中の時間分解分光からは、enol 体の ESIPT から *cis*-keto 体の高振動励起された中間状態が生成し、2つの芳香環がねじれることによって *trans*-keto 体が生成すると考えられている。³⁾ しかしながら、このような中間状態がどのようなものであるか、中間状態がフォトクロミック反応においてどのような役割を果たしているかについて、充分解明されていない。また、SA の enol 体および *cis*-keto 体の励起状態には、 $^1\pi\pi^*$ 状態の近傍に $^1n\pi^*$ 状態が存在し、両電子状態のエネルギー差は、2つのフェニル環のねじれ角に依存することが分子軌道計算から示されている。⁴⁾ しかしながら、 $^1n\pi^*$ 状態が実験的には観測された報告例はない。

SA のフォトクロミック反応は、大きな幾何構造の変化を伴って進行するので、励起状態ダイナミクスは溶媒効果の影響を受ける。したがって、SA の励起状態ダイナミクスとフォトクロミック反応の関係について解明するためには、溶媒との相互作用のない孤立状態の測定が望まれる。本研究では、超音速ジェット冷却した enol 体の SA の蛍光励起スペクトル (図1) と分散蛍光スペクトル (図2) を初めて観測した。⁵⁾ 24800–28800 cm^{-1} 領域の蛍光励起スペクトルを測定したところ、28230 cm^{-1} に未帰属のブロードなバンドが現れているが、このバンドを除くと振動構造が見られない。Tamai らの溶液中の励起状態プロトン移動時間 (210 fs) から振動バンドの寿命広がり は 28 cm^{-1} と推定される。分子軌道計算

からは、SA の enol 体には、28 cm^{-1} 程度の低振動数のバンドは存在しない。したがって、振動構造が見られない理由として、低振動モードの存在だけでなく、速い無輻射過程の存在が予測される。

LIF スペクトルに観測されている波数 A または B に励起光を合わせて分散蛍光スペクトルを測定したところ、励起された enol 体からの共鳴蛍光は観測されず、ブロードな蛍光スペクトルが低波数領域に観測された。励起波数よりも著しくストークスシフトした蛍光は、ESIPT 後の互変異性体による。分散蛍光スペクトルには、18500 cm^{-1} および 19500 cm^{-1} 付近に2つのピークが観測されており、少なくとも2種類の互変異性体からの蛍光が存在することが示唆された。密度汎関数計算から、基底電子状態においては、3つの *cis*-keto 体と1つの *trans*-keto 体が安定に存在することが示された。⁵⁾ 観測された蛍光は、2個の *cis*-keto 体の $^1\pi\pi^*$ 状態からの遷移によると推定される。

図2にヘキサン溶液中のSAの吸収スペクトルが挿入してある。超音速ジェット中のLIFスペクトルの範囲は、ヘキサン溶液中の四角で囲った部分に対応する。これらのスペクトルから、吸収端は400 nm よりも長波長側にあり、 S_1 – S_0 遷移エネルギーが 25000 cm^{-1} よりも小さいことが分かった。この値は、TD/B3LYP/6-31G* 計算から予測されている値より 8000 cm^{-1} 以上小さい。

3.2 イオン検出フェムト秒時間分解分光装置の製作

SA およびジアリールエテン類の励起状態ダイナミクスを時間領域で検討するために、イオン検出フ

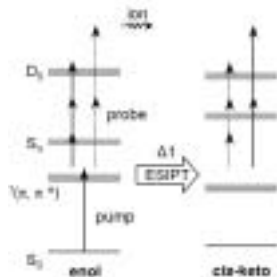


図4 SAのenol体とcis-keto体を選別するための多光子イオン化のスキーム。

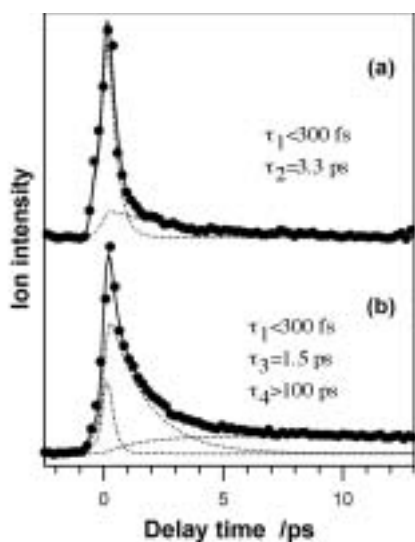


図5 320 nmのポンプ光で励起し、790 nmのプロブ光でイオン化した場合(a)と395 nmでイオン化した場合(b)の減衰曲線。それぞれの減衰曲線は、点線で示した関数に分解される。

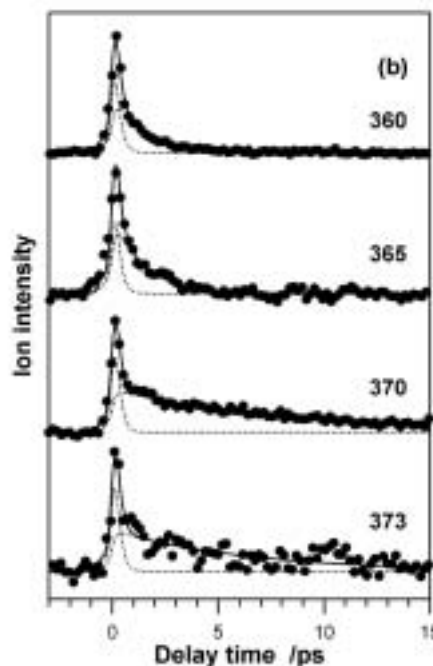
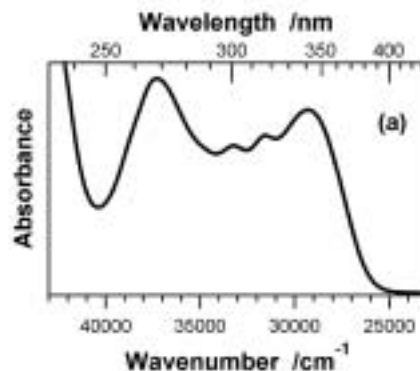


図6 *n*-ヘキサン中のSAの吸収スペクトル(a)。ポンプ光を320 - 373 nmで変え、395 nmのプロブ光でイオン化によって得られた減衰曲線(b)。

エムト秒時間分解装置を製作した。図3に今回製作した超音速ジェット、TOF、およびフェムト秒レーザーを組み合わせた装置のブロックダイアグラムを示した。この装置の時間応答関数は260 fsであり、300–1000 nmの極めて広範囲の波長を出力できる。

3.3 フェムト秒時間分解分光

図4に超音速ジェット冷却されたSAのenol体を320 nmのポンプ光で励起し、790 nmのプロブ光で多光子イオン化する場合、および320 nmのポンプ光で励起し、395 nmのプロブ光で多光子イオ

ン化する場合のイオン化機構をダイアグラムとして示した。図5は、親イオンの強度をポンプ光とプロブ光の遅延時間の関数として測定することによって得られた減衰曲線である。図5aの減衰曲線は2つの時定数、図5bの減衰曲線は3つの時定数をもつ単一指数関数に分解できる。図5aの790 nmのプロブ光の場合は、ほとんどenol体のみが検出されるが、図5bの395 nmのプロブ光の場合には、enol体からのイオン信号だけでなく、keto体からのイオン信号も検出される。このようにプロブ光の

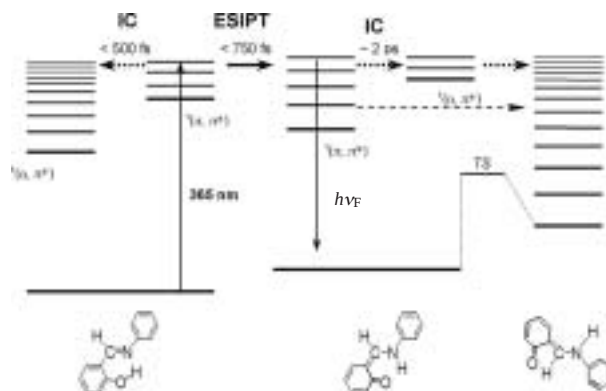


図7 SAの励起状態ダイナミクス。

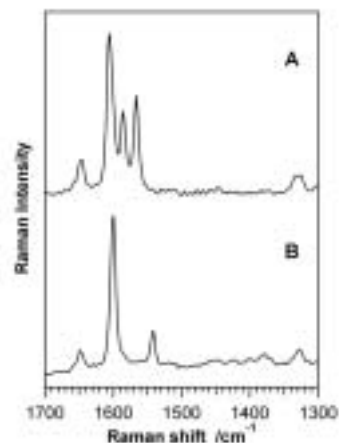
波長を変えることによって、異性体を選択的にイオン化できることが分かった。

超音速ジェット中の蛍光励起スペクトル、報告されている溶液中の励起状態プロトン移動時間、および分子軌道計算の結果から、enol体の $S_1(\pi\pi^*)$ 状態の下に $S_1(n\pi^*)$ 状態が存在することが予測される。⁴⁾もし、enol体 $S_1(\pi\pi^*)$ 状態の下に $S_1(n\pi^*)$ 状態のポテンシャルの極小が存在するならば、enol体の励起状態の減衰は $S_1(\pi\pi^*)$ 状態と $S_1(n\pi^*)$ 状態からの2つの指数関数による減衰を示すはずである。予想されたように、790 nmのプロブ光を用いた場合には、 $\tau_1 < 300$ fs、 $\tau_2 = 3.3 \pm 0.6$ psの時定数をもつ減衰が観測された。 τ_1 と τ_2 を、それぞれenol体の $S_1(\pi\pi^*)$ 状態と $S_1(n\pi^*)$ 状態の減衰に帰属した。 $S_1(\pi\pi^*)$ 状態の減衰には、ESIPTの他に $S_1(n\pi^*)$ 状態への速い内部転換が主に寄与をしていると考えられる。図5の下図の減衰は $\tau_1 < 300$ fs、 $\tau_3 = 1.5$ ps、 $\tau_4 > 100$ psの時定数が得られた。 τ_1 は $S_1(\pi\pi^*)$ 状態の減衰、 τ_3 と τ_4 はプロトン移動によって生成したketo体の異なる2つの電子状態の減衰に帰属される。ESIPTは平面構造の分子においてのみ効率的に生じると考えられるので、enol体励起後にESIPTが生じるとcis-keto体の $^1\pi\pi^*$ 状態が生成することが予測される。

図6にenol体の励起波長を373 nm ~ 320 nmの範囲で変化させた場合の減衰曲線を示す。励起波長が370 nm以下の場合、 τ_3 は8.5 psであるが、365 nmの励起波長において、 τ_3 は1.6 psとなり、急に減少する。この値は、320 nm励起においてもほとんど

変化しない。励起波長依存性の結果は、励起波長が365 nmよりも短くなると新しい減衰経路が生じることを示唆している。溶液中において、励起波長が334 nmの場合、フォトクロミック反応の量子収量は、365 nm励起に比べての3倍大きいことが報告されている。これらの結果は、ESIPTによって生じたcis-keto体の $S_1(\pi\pi^*)$ 状態の内部転換(IC)によって $S_1(n\pi^*)$ 状態が生成すると考えると合理的に説明できる。 S_0 状態のenol体の2つの芳香環の二面角は、HF/6-31G*計算によると44°であるが、紫外光照射によってenol体を高振動励起すると、ねじれた構造から平面構造に変化すると予測される。ESIPTによって生じた $S_1(\pi\pi^*)$ 状態のcis-keto体は平面構造をとるが、 $S_1(n\pi^*)$ 状態では2つの芳香環がほとんど垂直になることが理論計算より予想されている。⁴⁾したがって、平面構造の $S_1(\pi\pi^*)$ 状態よりも $S_1(n\pi^*)$ 状態のSAの方がより容易にtrans-keto体に異性化できる。 $\tau_3 = 8.5$ psから1.6 psへの変化が、全てcis-keto形の $S_1(n\pi^*)$ 状態の内部転換によると仮定すると、内部転換の時定数は約2 psと見積もられる。enol体の励起波長が~370 nmよりも長波長の場合には、cis-keto体の $S_1(n\pi^*)$ 状態がエネルギー的に生成できない。このため、cis-keto体の $S_1(\pi\pi^*)$ 状態からtrans-keto体の生成は効率的に生じないと考えられる。 τ_4 はどのような状態の減衰については本研究からは断定できないが、cis-keto体の異性体、三重項状態、またはtrans-keto体の高振動状態などの可能性が考えられる。

図8 BMTFの開環体(A)と開環体(B)のFTラマンスペクトル。



enol体励起後のダイナミクスを図7のエネルギーダイアグラムにまとめてある。図中のTSは遷移状態を示している。この遷移状態の存在のために、*trans*-keto体は準安定状態として存在する。本研究から、SAの励起状態において、enol体および*cis*-keto体の両方において超高速の内部転換が生じることが示された。2つの内部転換において、平面構造では、 $S_1(n\pi^*)$ 状態がエネルギー的に $S_1(\pi\pi^*)$ 状態の上にあることが理論計算が予測されているので、 $S_1(n\pi^*)$ 状態と $S_1(\pi\pi^*)$ 状態のポテンシャル曲面の円錐交差が生じると推定される。

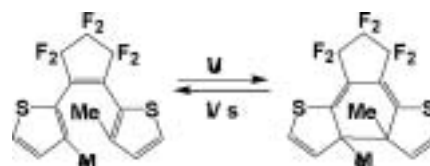
観測された2つの内部転換過程は、SAのフォトクロミック反応に対して逆の効果を及ぼす。enol体の $S_1(\pi\pi^*)$ 状態から $S_1(n\pi^*)$ 状態への内部転換は、フォトクロミック反応の生成物である*trans*-keto形の量子収量を減少させる。これに対して*cis*-keto体の $S_1(\pi\pi^*)$ 状態から $S_1(n\pi^*)$ 状態への内部転換は量子収量を増加させる。

溶液中のSAのフェムト秒時間分解分光からは、enol体の $S_1(\pi\pi^*)$ 状態からのESIPTによって*cis*-keto体の高振動励起された“hot”な状態が生成し、この状態から300～400 fsで*trans*-keto体が生成すると推定されている。本研究の結果は、溶液中の結果とは矛盾しないが、溶液中の測定からは*cis*-keto体の高振動状態のダイナミクスの詳細については明らかにされていない。本研究における孤立状態分子の測定から、初めて $S_1(n\pi^*)$ 状態への内部転換が生じ、引き続き*trans*-keto体へ異性化することが明らかにされた。⁶⁾

4. ジアリールエテン類のフォトクロミック反応

4.1 FTラマンスペクトル

ジアリールエテン類は一般的にスキーム2に示すように、開環 - 閉環反応によってフォトクロミック反応が生じる。ジアリールエテン類のフォトクロミック反応の研究には、これまで主に電子スペクトル



スキーム2

の測定によって行われており、ラマン分光を用いた研究例は報告されていない。

アセトニトリル中のBMTF (1, 2-bis(3-methyl-2-thienyl)perfluorocyclopentene)の開環体のFTラマンスペクトルを観測しながら、開環体にNd:YAGレーザーの3倍波(355 nm)を10 Hzで照射したところ、時間の経過につれて新たなラマンバンドが生じた。これらのバンドを光照射によって生成した閉環体のバンドに帰属した。開環体と閉環体のラマンバンドは異なった波数に観測される。UV照射前と照射後のラマンスペクトルの強度を差し引くことによってBMTFの開環体のラマンスペクトルを得た(図8)。図8のA、Bは、それぞれBMTFの開環体と閉環体のラマンスペクトルである。密度汎関数計算

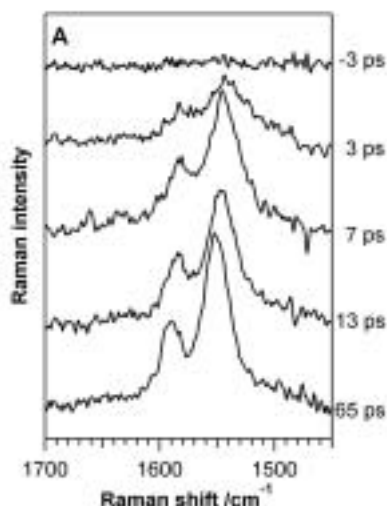


図9 DMTFのストークスラマンスペクトル。

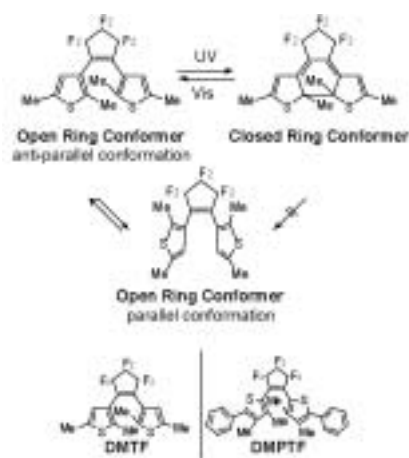
(B3LYP/6-31G**)を用いて、ラマンスペクトルのシミュレーションを行った。計算からは、開環体に対して6個の安定構造、閉環体に対して1個の安定構造が得られた。チオフェン環の回転によって平行構造のコンフォーマーとアンチ平行構造のコンフォーマーの2種類の回転異性体が生じる(次節のスキーム3を参照)。室温溶液中では、これらの構造が共存していると考えられる。アンチ平行構造を光照射すると閉環体が生成するが、平行構造からは閉環体は生成しない。アンチ平行コンフォーマーの最安定構造と平行コンフォーマーの最安定構造についての計算から得られたラマンスペクトルは、極めて類似しており、観測されたスペクトルにおいて2種類のコンフォーマーのバンドを区別することは困難であった。しかし、密度汎関数を用いた基準振動計算によって観測された振動は良く再現されており、振動モードについては、明瞭な帰属ができた。

本研究から、ジアリールエテン類の開環 - 閉環体のFTラマンスペクトルには1400–1650 cm⁻¹領域に開環体、閉環体それぞれに特有の振動が観測されることが分かった。したがって、時間分解ラマン分光を行い、開環体と閉環体特有の振動を観測することによって、フォトクロミック反応を詳細に調査することが可能であることが示唆された。⁷⁾ この成果を

元にしてジアリールエテンのフォトクロミック反応の調査にピコ秒時間分解ラマン分光を導入することにした。

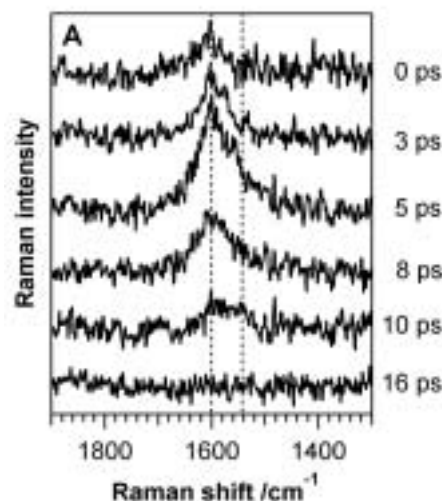
4.2 ピコ秒時間分解ラマン分光

溶液中におけるジアリールエテンのフォトクロミック反応の構造変化と余剰エネルギーの散逸過程を調べることを目的として、ピコ秒時間分解ラマン分光法を用いて研究を行った。⁸⁾ はじめに、試料として1,2-bis(2,5-dimethyl-3-thienyl)perfluorocyclopentene (DMTF)を用い、開環型から閉環型への光反応(有色反応; スキーム3)のピコ秒ダイナミクスを検討した。パルス幅4 ps、波長310 nmのピコ秒パルスを用いて、開環型の試料を光励起し、生成した閉環型のラマンスペクトルをパルス幅4 ps、波長568 nmのピコ秒パルスを用いて測定した。ポンプ光とプローブ光の遅延時間を変化させ、ピコ秒ダイ



スキーム 3

図10 DMPTFのアンチストークスラマンスペクトル。



ナミクスに関する情報を得た。図9に示した閉環型のラマンスペクトルの強度の時間変化の測定から、1-ブタノール中において閉環型のラマンスペクトルは、時間分解能以下 (< 4 ps) で立ち上がりを示し、4 ps 以内で開環型から閉環型への構造変化が起きていることが分った。粘性の極めて高いエチレングリコール中において、4 ps 以下の速い構造変化を示し、閉環反応が溶媒の粘性、つまり周囲の環境との摩擦にあまり依存しないことがわかった。また、両溶媒中において、閉環型のラマンバンドに約10 psの時定数の高波数シフトおよびバンド幅の先鋭化が観測された。この変化は、閉環反応において、準安定状態として閉環型の振動励起状態が生成し、周囲の溶媒に振動エネルギーを渡すことによって、最終生成物（常温の熱平衡状態）に緩和していく過程を観測していると考えられる。反応ダイナミクスを解析するためには、このような準安定状態を考慮することが必要であることが分かる。

次に、1,2-bis(3-methyl-5-phenyl-2-thienyl)perfluorocyclopentene (DMPTF) を用い、閉環型から開環型への光反応（退色反応；スキーム3）のピコ秒ダイナミクスを検討した。実験は、パルス幅4 ps、波長480 nmのピコ秒パルスを用いて、閉環型の試料を光励起し、生成した開環型のラマンスペクトルをパルス幅4 ps、波長395 nmのピコ秒パルスを用いて測定した（図10）。DMTFを用いた閉環反応の実験では、試料からの蛍光のため、振動励起状態のみを観測するアンチストークスラマンスペクトルを測定することができなかった。しかし、DMPTFを用いた開環反応の実験では、生成した開環型のアンチ

ストークスラマンスペクトルを測定することに成功した。アンチストークスラマン強度の立ち上がりから、アセトニトリル中における開環反応が4 ps 以下で進行し、強度の減衰から、準安定状態として開環型の振動励起状態が生成し、その緩和過程が5–10 ps であることが分かった。

図11に遅延時間が2.0 psと8.5 psの場合のDMPTFのアンチストークスラマンスペクトルを示した。2つのスペクトルに現われている1600 cm⁻¹と1545 cm⁻¹のアンチストークスバンドの強度を比較すると、1545 cm⁻¹のバンドの相対強度が8.5 ps後に強度が増大していることが分かる。このデータは、シクロペンテン部位のC=C伸縮振動バンドとチエニル部位の伸縮振動バンドの相対強度がピコ秒の時定数で変化している様子が観測された。これは、開環反応において、シクロペンテン部位のC=C伸縮振動が選択的に励起され、他のモードへの分子内振動緩和過程を観測していると考えられる。この結果から、シクロペンテン部位のC=C伸縮振動が、開環反応においてアクセプティングモード的な役割を果たしていることが示唆される。今回の結果から、

開環反応、閉環反応ともに4 ps 以下で進行すること、両反応において、準安定状態として生成物の振動励起状態が生成すること、シクロペンテン部位のC=C伸縮が、開環反応においてアクセプティ

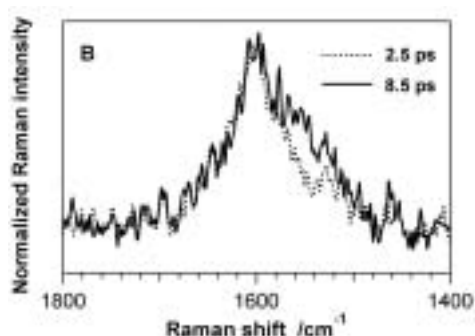


図11 ポンプ光とプローブ光の遅延時間が2.5 psと8.5 psの場合のDMPTFのアンチストークスラマンスペクトル。

ングモードまたはプロモーティングモードの一つであることが分かった。

4.3 ジアリールエテン類とSAの励起状態ダイナミクスの比較

本研究において調査したジアリールエテン類とSAの励起電子状態とダイナミクスについて比較してみる。ジアリールエテン類の電子状態は直鎖ポリエン類と類似しており、光吸収が許容な1B状態の下に光学的禁制状態2Aがある。SAのenol体の場合には光学的に許容な $S_1(\pi\pi^*)$ 状態の近傍に光学的禁制の $^1n\pi^*$ 状態がある。ジアリールエテン類、またはサリチリデンアニリン類を許容な電子状態に光励起すると、禁制状態への高速内部転換が生じる。⁹⁾ ジアリールエテン類の場合は、2A状態が生成物（開環体または閉環体）の基底状態と相関しているので、高い量子収率（0.3–1）で反応が生じる。特に、閉環反応の量子収率が高いことが示されている。しかしながら、SAの場合、*trans-keto*体の $S_1(\pi\pi^*)$ 状態から $S_1(n\pi^*)$ 状態への内部転換は、フォトクロミック反応を促進させている。ところが、enol体の $S_1(\pi\pi^*)$ 状態の内部転換は $S_1(n\pi^*)$ 状態または基底電子状態を生成させ、フォトクロミズムを発現させる*trans-keto*体の生成量を減少させる。SAの蛍光量子収率は 10^{-3} のオーダーであり、極めて小さい。SAのフォトクロミック反応の量子収率もかなり小さいことが予測される。SAのポテンシャル曲面はジアリールエテンよりもかなり複雑であり、多くの反応経路が存在し、*trans-keto*体が生成する反応の分岐

比が小さいことが、SAの量子収率が小さい理由として上げられる。

以上のように、ジアリールエテン類とサリチリデンアニリン類の電子状態とダイナミクスには、光学的許容状態が光学的禁制状態の上に存在すること、これらの状態間の無輻射過程が光異性化反応において重要な役割を果たしているなど、類似点がみられる。一方、ジアリールエテン類は開環体、閉環体ともに熱的に安定であるが、*trans-keto*体は熱的に不安定であることや量子収率に大きな違いが見られる。ジアリールエテン類とサリチリデンアニリン類のダイナミクスの比較により、これらの分子の豊富なダイナミクスについての知見が得られるだけでなく、光異性化を利用した分子設計のための指針を与える。

5. 結論

孤立状態と溶液状態のフォトクロミック反応の研究のために、それぞれイオン検出フェムト秒時間分解分光とピコ秒時間分解ラマン分光を用いた。本研究においては、超音速ジェット装置、TOF装置、およびフェムト秒レーザーを組み合わせイオン検出フェムト秒時間分解分光装置を製作し、これをSAの励起状態ダイナミクスの調査に応用した。その結果、高速内部転換過程がSAのフォトクロミック反応において重要な役割を果たしていることが初めて示された。本研究で観測された2つの高速内部転換には、enol体および*cis-keto*体の $S_1(\pi\pi^*)$ 状態と $S_1(n\pi^*)$ 状態のポテンシャル曲面の円錐交差が含まれると予測されるので、今後、理論的な研究が重要である。



ピコ秒時間分解ラマン分光法からは、溶液中のジアリールエテン類の開環 - 閉環反応のダイナミクスについて新規な結果が得られた。ジアリールエテンのようなサイズの大きな分子の反応において、プロモーティングまたはアクセプティングモードが存在し、反応の余剰エネルギーが非統計的に分配される結果は、注目に値する。今後、時間分解能を上げることによって超高速過程を詳細に追跡するとともに、精度の高いポテンシャル曲面の計算を行うことによって、フォトクロミック反応について、更に鮮明な描像を得ることが期待される。

謝辞

本研究において、時間分解分光による測定には、全て分子科学研究所のピコ秒レーザーとフェムト秒レーザーシステムを使用した。分子科学研究所関係者に感謝の意を表したい。三菱化学計算科学研究所センター長の中村振一郎博士のグループには、ジアリールエテンのポテンシャルについて有用な計算結果を提供していただいた。お礼を申し上げる。

文献

- 1) M. Irie, S. Kobatake and M. Horichi, *Science* **291**, 1769 (2001).
- 2) M. Irie, T. Fukaminato, T. Sasaki, N. Tamai and T. Kawai, *Nature* **420**, 759 (2002).
- 3) S. Mitra and N. Tamai, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **5**, 4647 (2003).
- 4) M. Z. Zgierski and A. Grabowska, *J. Chem. Phys.* **112**, 6329 (2000).
- 5) N. Otsubo, C. Okabe, H. Mori, K. Sakota, K. Amimoto, T. Kawato and H. Sekiya, *J. Photochem. Photobiol. A (Chemistry) Special issue on photo-initiated proton transfer* **154**, 33 (2002).
- 6) C. Okabe T. Nakabayashi, Y. Inokuchi, N. Nishi and H. Sekiya, Submitted for publication in *J. Chem. Phys.*.
- 7) C. Okabe, N. Tanaka, T. Fukaminato, T. Kawai, M. Irie, Y. Nibu, H. Shimada, A. Goldberg, S. Nakamura and H. Sekiya, *Chem. Phys. Lett.* **357**, 113 (2002).
- 8) C. Okabe T. Nakabayashi, N. Nishi, T. Fukaminato, T. Kawai, M. Irie and H. Sekiya, *J. Phys. Chem. A* **107**, 5384 (2003).
- 9) N. Tanaka, C. Okabe, K. Sakota, T. Fukaminato, T. Kawai, M. Irie, A. Goldberg, S. Nakamura and H. Sekiya, *J. Mol. Struct.* **616**, 113 (2002).

溶液中でのナノ会合体の自己組織化に関する理論構築

提案代表者	分子科学研究所	教授	平田文男
提案者および共同研究者	分子科学研究所	助手	A. Kovalenko
	京都大学	助教授	木下正弘
	京都大学	助手	岡村恵美子
	立命館大学	研究員	今井 隆
	崇城大学	教授	上岡龍一
	凝縮系物理学研究所（ウクライナ）	教授	M. Holovko
	凝縮系物理学研究所（ウクライナ）	主任研究員	I. Omelyan

研究目的

水溶液中で起きるミセルやベシクルなどの分子集合体形成は洗剤の洗浄効果などで日常的に馴染みの深い現象であるだけでなく、細胞膜や人口血液など生物や医療とも深く関係した重要な問題である。にもかかわらず、この問題に対する統計力学的研究はほとんど行われておらず、過去に行われた数少ない研究も、熱力学レベルの現象論が分子の化学的個性を無視して極度に単純化したモデルに基づく記述に止まっている。

本研究は水溶液中におけるミセルの安定性、特に、そのサイズ分布を記述する統計力学理論を構築することを目的とする。ミセルの安定性は界面活性剤分子の化学的組成だけでなく、溶媒である水、共溶イオンの種類や濃度など様々な物理化学的要因で決定される。本研究では液体統計力学における二つの方法、すなわち、RISM理論と古典的密度汎関数理論を中心に、分子シミュレーションを併用してこの問題に挑戦する。

研究計画及び成果

本研究の最終目的はミセル形成など液体中に新しい液体相が出現するプロセスとその構造変化を明ら

かにすることであるが、そのためには、まず、水と界面活性剤分子の溶液そのものの取り扱いが前提となる。この問題はそれ自身難しい問題であり、これまで、RISM理論にとっても難しい問題のひとつになっていた。しかしながら、当研究室では最近RISM理論のクロージャーに関する新しい提案（Kovalenko-Hirata (KH) closure）を行い、この課題に挑戦することができるようになった。本課題研究では、まず、中性界面活性剤分子の中で最も簡単な分子であるアルコールと水の混合系を取り上げ、その構造と物性の関係を検討した。

アルコール - 水混合系は人類にとってもっとも身近な溶液である。しかしながら、その構造や物性に関する理解は21世紀に至っても未だ「渾沌」と言っても過言ではない。例えば、アルコールと3級ブタノールはあらゆる濃度で混合し、見掛上、水相とアルコール相への相分離は観測できない。しかしながら、ある温度、圧力では相分離にも近い大きな濃度揺らぎを示すことが知られている。このような事実から、多くの研究者が水 - アルコール中にはミクロスケールではあるがかなり大きな濃度の揺らぎが存在すると考え、これを「ミクロクラスター」とか「疑似相分離」という言葉で表現してきた。最近で

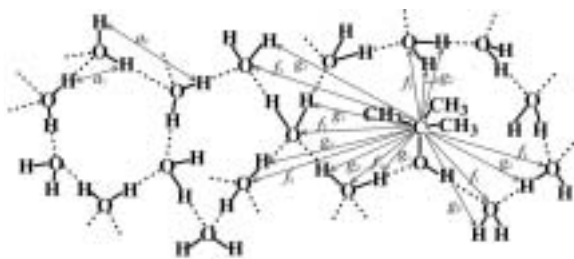


図1 水の中のブタノール（無限希釈）

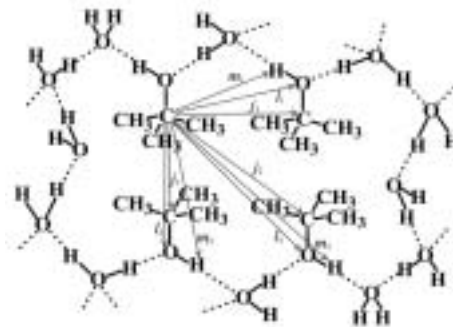


図2 水の中のブタノール（有限濃度）

は水 - プロパノール系にイオンを添加した場合に水相とアルコール相への相分離が観測された。（新潟大、三沢）これは水 - アルコール系が熱力学的な「準安定」状態に近いような混合相を作っていることを示唆している。それでは、その「ミクロクラスター」や「疑似相分離」なるものの構造的実態は一体何か？ 分子研の西教授らは、比較的最近、低振動ラマン散乱実験によってこの疑問に対する一定の見解を示した。西らによれば水とアルコールは非常に低濃度から相分離しており、水同士およびアルコール同士の間には水素結合を作っているが水 - アルコール間には水素結合をつくらない。しかしながら、Soper らが最近行った中性子およびX線の解析実験によると、その水 - アルコール間の動径分布関数に明確な水素結合ピークが観測されており、西らの見解を否定する結果となっている。

われわれは、最近、RISM理論に基づき水 - エタノール系および水 - ブタノール系の溶液構造に関する解析を行った。さらに、水 - ブタノール系に関してはその熱力学的安定性（圧縮率および濃度揺らぎ）を解析した結果、下記のような結論を得ている。

（1）水 - ブタノール系の溶液構造

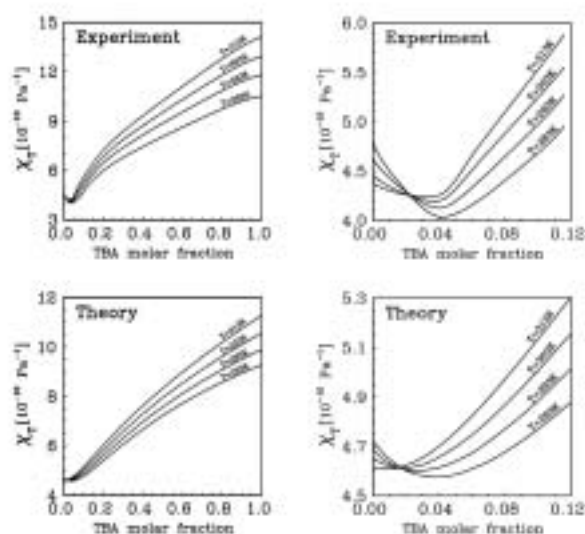
アルコール - 水系の溶液構造に関して以下のような描像を得た。まず、水の中に無限希釈のアルコールが混合している系では、水の水素結合ネットワーク構造が基本となり、そのネットワーク構造の中にアルコールが水と水素結合をつくりながら組み込ま

れている。さらにアルコールの濃度が高くなると、水の水素結合ネットワークに組み込まれたアルコール同士がそのブチル基を接触するように溶け込んでいる。すなわち、一種の小さなミセルが出来たような状態である。逆に、アルコール中に水分子が一個だけ存在する濃度（無限希釈）では、アルコールの水素結合によるジグザグ鎖構造の中に、水分子が水素結合によって組み込まれたような構造をとっている。先に述べたように、アルコール - 水系の溶液構造については様々な実験からいくつかのモデルが予想されているが、今回、分子レベルでの予断のない構造が明らかになったわけである。

上の図で模式的に示した溶液構造は単に水 - アルコール系の一般的な特徴を示唆しているだけでなく、いわゆる疎水相互作用の本質に関して新しい描像を与えるものである。これまで、疎水相互作用の本質的要因は疎水基の周りに形成されたある種の水素結合構造（しばしばicebergなどと呼ばれる）であると考えられている。この水和領域はバルクの水よりさらに秩序の高い（エントロピーの低い）構造になっており、疎水基同士が接近することによってその領域に重なりが生じ、その結果、低いエントロピー状態にある水がバルクに緩和することによってエントロピーを大きくする、すなわち、自由エネルギーを下げるというものである。この描像では疎水基の近傍にあるOH基のような親水基はicebergを壊すた



Compressibility of *tert*-butyl alcohol-water mixture
calculated by RISM/KH theory



RISM/KH theory $\rightarrow$ correlation functions $\rightarrow$ Gibbs energy G

$$\text{Compressibility: } \chi_T = \left[\rho^2 \left(\frac{\partial G}{\partial p} \right)_{V,T} \right]^{-1}$$

めに、むしろ、疎水相互作用にとっては逆に作用すると考えられている。しかしながら、今回、我々が得た描像によると、アルコールのOH基は水の水素結合ネットワークに協同的に組み込まれることにより、疎水基同士が接触する（疎水相互作用）ことを助けているのである。われわれはこの研究で得られた疎水相互作用に関する描像がミセル形成など水中の分子集合体形成の解明にとっても重要な示唆を与えるものであると考えている。

(2) 水 - ブタノール系の圧縮率

水 - アルコール系の物性に示す最も大きな特徴は部分モル容積や圧縮率の濃度依存性が低濃度領域で示す顕著な極小である。（上図の上段ふたつ：右側の図は左側の図の低濃度領域を拡大したものである。）これらの極小はもちろん溶液構造を反映するものであるが、これがどのようなものであるかについては、長年、研究者の中で大きな疑問となってい

た。（亡くなられた藤山教授（分子研）もこの問題に挑戦された一人である。）そこで、本研究ではRISM-KH理論に基づき水 - ブタノール系の圧縮率を求め、実験と比較した。その主な結果を上図（下段）に示す。この結果はブタノール - 水系の圧縮率の実験結果における特徴をすべて定性的に再現している。純水ではこの温度領域において圧縮率が温度上昇とともに減少する。この挙動は水中のバルキーな（圧縮され易い）氷様構造が温度とともに減少するという描像で大雑把に説明できる。純ブタノール系では圧縮率が温度とともに単調に増加するが、これは通常の液体に共通の挙動であり、熱膨張によって圧縮できる空間が増大するという物理で説明することができる。圧縮率の濃度依存性はこの温度領域において極小値を示す。この極小値の出現は圧縮率の濃度依存性に二つの相反する傾向が存在し、それらがある濃度で拮抗することを示している。それらの傾向のうちのひとつはブタノールの高濃度領



域における濃度増加に伴う圧縮率の増大であり、これは理想混合モデルで説明できる。すなわち、混合系の圧縮率を ($\chi_T = (1-x)\chi_{\text{water}} + x\chi_{\text{Butanol}}$) のように水の圧縮率とブタノールのその成分比の重みをつけた単純な重ね合わせとみなせば、水に比べて大きな圧縮率をもつブタノールの寄与が濃度の増加とともに支配的となり、高濃度領域では系全体の圧縮率は濃度とともに増加する。一方、低濃度領域で濃度とともに圧縮率が減少する傾向は、そのような単純な描像では説明できない。この傾向を説明する上で、水 - ブタノール系の液体構造に関する上述の描像が有効である。すなわち、上述のように、低濃度領域においてブタノールはその水酸基を介して水の水素結合ネットワークの中に組み込まれ、そのアルキル基は水の氷様構造の隙間の中に入り込んでいる。すなわち、アルキル基が水の圧縮可能な空間を充たすことにより圧縮率を上げているのである。

末端酸化酵素の高酸化状態反応中間体の構造化学

提案代表者	統合バイオサイエンスセンター	教授	北川 禎三
提案者および共同研究者	兵庫県立大学	教授	小倉 尚志
	東京大学	院生	織田 賢二
	東京大学	院生	高橋 俊成
	兵庫県立大学	教授	吉川 信也
	大阪大学	助教授	高橋 聡
	Univ. of Crete		Constatinos Varotsis
	Hankuk Univ. Foreign Studies		Younkyoo Kim

図 1 にミトコンドリア内膜の呼吸鎖電子伝達系の模式図を示す。地球上の好気的生物による ATP (アデノシン 3 磷酸) 合成は生物種を問わずこのような分子システムにより、“酸化リン酸化反応”によって行われる。図 1 の Complex I、Cyt. *bc*₁、Cyt. *c* Ox. とあるのはいずれもリン脂質二重幕を貫く膜タンパク質である。食物から遊離された電子がこれらのタンパク中をこの図で左から右の向きに伝達されると、これらのタンパク質はプロトンポンプ (水素イオン能動輸送) を行う。こうしてできる、膜を隔てた $\Delta\mu\text{H}^+$ により ATPase (ATP 合成酵素、図 1 右端)

が駆動され、ATP が合成される。なお、逆反応である ATP の加水分解により ATPase の一部が回転することが証明されたことは、記憶に新しい。図 1 に示した 4 つの複合体は分子量 20 万 ~ 100 万の巨大分子であるが、3 つは X 線結晶構造解析により立体構造が明らかになっており、分子科学の研究対象として野心的なものである。本課題研究では、図 1 で Cyt. *c* Ox. と書いてあるチトクロム *c* 酸化酵素 (以下、CcO と略す。) の P 中間体と呼ばれる反応中間体の構造とダイナミクスを詳しく調べた。本稿では、得られた結果をもとに活性部位におけるマイクロ構造と

その反応中間体の安定性の意味について述べる。なお、CcO は電子の最終受容体である酸素分子と反応するので末端酸化酵素とも呼ぶ。機能単位当たりの分子量は 21 万である。

図 2 に X 線結晶構造解析によるウシ心筋 CcO の全体構造を示す。¹⁾ Cu_A という銅二核部位がチトクロム *c* から電子を受け取り、これを heme *a*

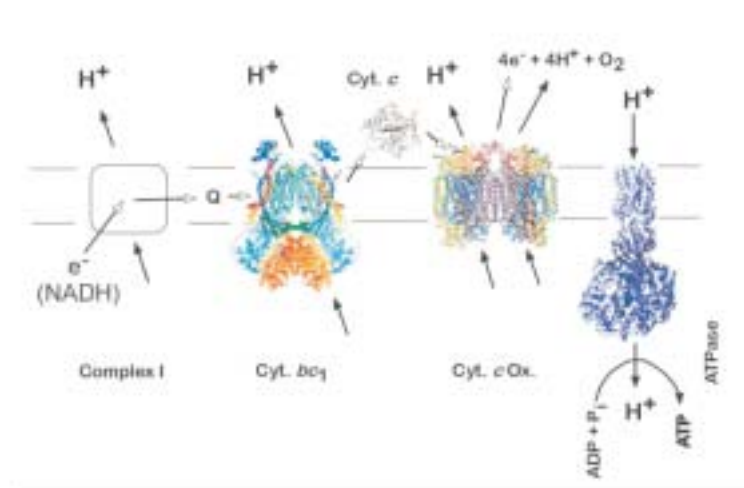


図 1

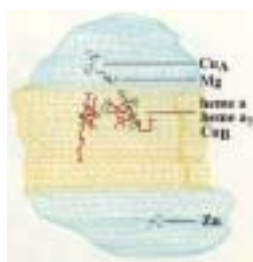


図 2

に渡す。次に heme *a* は heme *a*₃-Cu_B の二核酸素還元部位に電子を渡す。CcO は、分子状酸素 (O₂) と直接反応してこれを水にまで還元するとともに、水素イオンの能動輸送を行う。O₂ の還元反応機構を明らかにするためには反応中間体の構造を詳しく調べることが不可欠である。この目的のために我々は時間分解共鳴ラマン分光法で完全還元型 CcO と O₂ との反応を追跡した。その結果、酸素の同位体シフトを示す 5 本のラマン線を 571、804、356、785、450 cm⁻¹ に検出した。²⁾ 最初の 571 cm⁻¹ のラマン線は Oxy 型反応中間体 (Fe-O₂) の Fe-O₂ 伸縮振動に、最後の 450 cm⁻¹ のラマン線は Hydroxy 型反応中間体 (Fe-OH) の Fe-OH 伸縮振動に帰属できる。Oxy を一電子還元したのが P 中間体、それをさらに一電子還元したのが F 中間体である。P 中間体から F 中間体に行く過程は水素イオンの移動と共役しているので、²⁾ P 中間体はこの酵素の反応中間体の中でも特に重要である。我々は 804 と 785 cm⁻¹ のラマン線をそれぞれ P と F の Fe=O 伸縮振動と考えた²⁾ が、反対意見もあった。^{3, 4)} また、356 cm⁻¹ のラマン線は His-Fe=O 変角振動と思われるが、その由来が P なのか F なのか決着していなかった。^{2, 3)} 酸化型酵素と過酸化水素との反応も調べられ、804、356、785 cm⁻¹ のラマン線が検出されたがこの結果も必ずしも最終決着に貢献しなかった。上に述べた対立点を明らかにするためには、何らかの方法により四電子還元反応を途中で停止させ、生成したものの構造を決定することが必須である。本研究では、新しい反

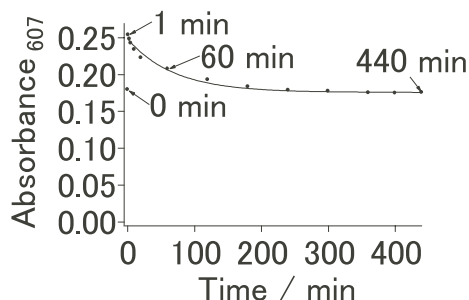
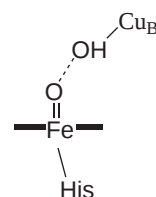


図 3 P 反応中間体濃度の時間変化 (pH 8.0)

図 4



応条件により反応を P 中間体で停止させ、その構造を共鳴ラマン分光法で詳しく調べた。

まず、酸化型 CcO 溶液を 100% 一酸化炭素 (CO) に置換し、20 °C に 12 時間保温し Mixed-Valence 型 CcO (二電子還元型) に CO が結合したものを得た (MVCCO-CO)。次に MVCCO-CO 溶液から CO を除去し、ここに O₂ を加えて反応させると 607 nm に吸収極大を持つ P 反応中間体が生成した。その吸収および共鳴ラマンスペクトルを測定した。図 3 に生成した P 中間体由来の吸収の時間変化を示す。時間は O₂ 添加後の経過時間である。440 分経過するとはじめと比べて約 3 割減少し、その分は酸化型に戻ったと考えられるが、残り約 7 割は P 中間体であり、極めて寿命が長いことがわかった。生成 440 分後の共鳴ラマンスペクトルには 804 cm⁻¹ と 356 cm⁻¹ の二本の酸素同位体敏感ラマン線が現れた。800—900 cm⁻¹ 付近に現れるラマン線は、O-O 伸縮振動あるいは Fe=O 伸縮振動の二つの可能性がある。そこで、¹⁶O/¹⁸O を用いたときのスペクトルを調べたところ、804 cm⁻¹ のラマン線は O-O 伸縮振動ではなく、Fe=O 伸縮振動に由来することがはっきりした。ま

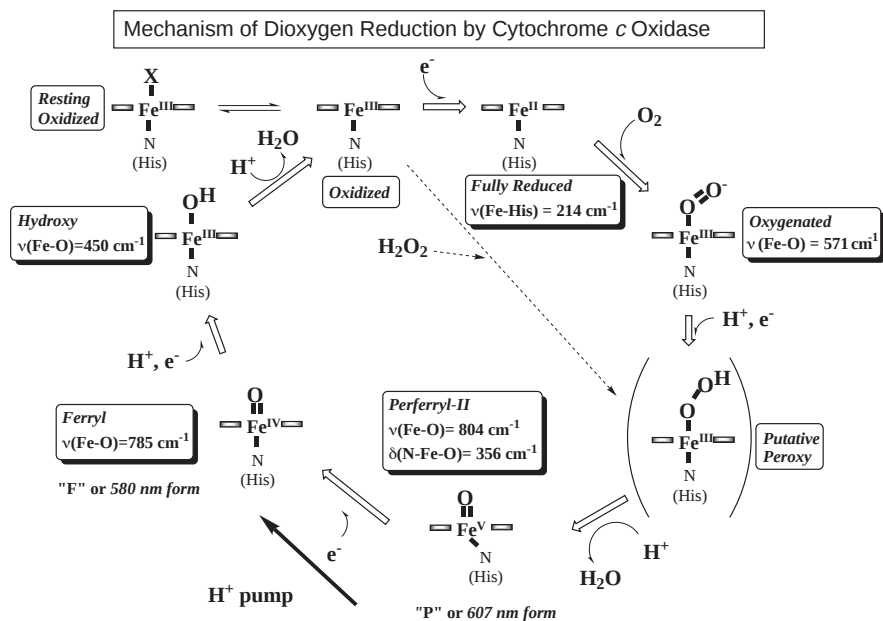


図 5

た、 804 cm^{-1} のラマン線は D_2O 中で 2.3 cm^{-1} だけ高波数シフトを示した。このことはこのO原子が近くにある $\text{Cu}_B\text{-OH}$ と水素結合していることを意味する。⁵⁾以上の結果から得られたP中間体の配位構造を図4に示す。ここで太い横線はヘム面を表す。

次に、 MVCCO-CO と O_2 の反応開始後2 msまでの速い(生理的)反応をpH 6.8で追跡した所、 804 cm^{-1} と 356 cm^{-1} のラマン線の生成速度定数は一致し、それはOxyの 571 cm^{-1} のラマン線の減少の速度定数と一致した。⁵⁾これらの速度定数は、pH 8.0ではpH 6.8のときに比べて約5分の1に小さくなった。このことは、OxyからPへ行くとき水素イオンを必要とすることを意味するが、それはO-O結合が切れて OH^- が生じる時に使われる。また、反応開始100 μs から440分までに 785 cm^{-1} (F中間体)と 450 cm^{-1} (Hydroxy中間体)のラマン線は見られなかった。⁵⁾したがって、この反応系では初め酵素が電子を二個だけ持ち、酸素の還元反応は二電子還元の状態で捕捉されることがはっきりした。

以上のことをもとに、本酵素の反応サイクルを図5に示す。ここではP中間体の高安定性とその意義

を論ずる事にする。CcOの反応はこれまでに3種類の反応系について調べられてきた。それらは、完全還元型 $\text{CcO} + \text{O}_2$ 、完全酸化型 $\text{CcO} + \text{H}_2\text{O}_2$ 、 $\text{MVCCO} + \text{O}_2$ の系である。の反応系はミリ秒の時間領域で反応が進み、P中間体を安定に捕捉できない。また、の反応系では H_2O_2 は酸化剤と還元剤の両方として働くので、定常状態を見ることになる。

ではCOが還元剤として働き、CcOが二電子還元型になると考えられるが、これまで調べられてきたのはCO(還元剤)と O_2 (酸化剤)が共存する系であり、この場合も定常状態を生じる。したがって、P中間体の性質として本来安定なのかどうか調べるために適した実験条件ではない。本研究の実験条件では、 MVCCO-CO の生成後、COを完全に除去したので、余分の還元剤が存在しない条件で O_2 と反応させたことになる。生じたP中間体は極めて安定であり、酸化還元電位が約1.1 Vと見積もられているこの高酸化状態が速やかに消失しないことは、電子の漏れに対して良く遮蔽されていることを意味する。このような遮蔽がしっかりしていないと、タンパクから電子を引き抜いてアミノ酸ラジカルが生じる。



するとタンパクに損傷を与えるとともに高酸化状態への電子伝達を引き金とする水素イオン能動輸送が行われない。P中間体が安定であることは効率的なエネルギー変換にとって不可欠である。

P中間体とF中間体 ($\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}$) を比べたとき、P中間体の方が一等量だけ高酸化状態にあるが、その等量がどこにあるか、という問題も積年のホットな話題であり、最近では電子状態の理論家も研究に参入している。考えられるのは、 Fe^{V} 状態、 $\text{Fe}^{\text{IV}}+$ ポルフィリン π カチオンラジカル、 Fe^{IV} アミノ酸ラジカル、 $\text{Fe}^{\text{IV}}+\text{Cu}^{\text{II}}$ 状態等である。²⁾ ポルフィリン π カチオンラジカルの場合、ポルフィリンの振動スペクトルに特徴があるのでそこに注目し、本研究で ν_4 を 1377 cm^{-1} に、 ν_2 を 1591 cm^{-1} に検出した。CcO は普通のヘムと異なるヘム A を持つので、上の結果の解釈のため、ヘム A に特徴的なフォルミル基を持つモデル化合物の高酸化状態のラマンスペクトルの測定を計画している。

次に、反応開始後 2 ms までの時間分解共鳴ラマンスペクトルにおいて 804 cm^{-1} と 356 cm^{-1} のラマン線は完全に同じ時間振る舞いをした。また、反応開始 1 分後および 440 分後の共鳴ラマンスペクトルに現れる 804 cm^{-1} と 356 cm^{-1} のラマン線の強度は図 1 の吸収強度変化と良く対応した。以上のことから 356 cm^{-1} のラマン線が P 中間体由来であることがはっきりした。我々はこの低波数モードを $\text{His}-\text{Fe}=\text{O}$ 変角振動と帰属した²⁾が、それは最近の計算結果⁶⁾と矛盾しない。

本研究の成果とこれまでの結果をまとめると、CcO と O_2 の反応は $\text{Fe}-\text{O}_2$ (571 cm^{-1}) $\rightarrow$ $\text{Fe}=\text{O}$ (804 ,

356 cm^{-1}) $\rightarrow$ $\text{Fe}=\text{O}$ (785 cm^{-1}) $\rightarrow$ $\text{Fe}-\text{OH}$ (450 cm^{-1}) の順に進むことがはっきりした。これをまとめると図 5 のようになる。我々が肺から取り込んだ分子状酸素はこのようにして水にまで還元されることがわかった。

なお、共鳴ラマン分光から見た P 中間体について総説として文献 7) にまとめた。

引用文献

- 1) Tsukihara, T., Aoyama, H., Yamashita, E., Tomizaki, T., Yamaguchi, H., Shinzawa-Itoh, K., Nakashima, R., Yaono, R. and Yoshikawa, S., *Science* **269**, 1069–1074 (1995).
- 2) Kitagawa, T. and Ogura, T., “Prog. Inorg. Chem. 45,” Karlin, K. D., Ed., John Wiley & Sons, 431–479 (1997). and references therein.
- 3) Han, S., Takahashi, S. and Rousseau, D. L., *J. Biol. Chem.* **275**, 1910–1919 (2000).
- 4) Ferguson-Miller, S. and Babcock, G. T., *Chem. Rev.* **96**, 2889–2907 (1996).
- 5) Oda, K., Ogura, T., Appelman, E. H. and Yoshikawa, S., *FEBS Letts in press* (2004).
- 6) Ghosh, A. and Skancke, A., *J. Phys. Chem. B* **102**, 10091–10093 (1998).
- 7) Ogura, T. and Kitagawa, T., *Biochim. Biophys. Acta* **1655**, 290–297 (2004).

最後に本課題研究により行った P 中間体に関する研究会のプログラムを掲げる。岡崎国立共同研究機構 (現自然科学研究機構) および統合バイオサイエ

ンスセンターのお世話になった方々にお礼申し上げます。

チトクロム *c* 酸化酵素の P 反応中間体：構造と反応

日時：平成 16 年 1 月 8 日(木)13 時～17 時 30 分

場所：岡崎統合バイオサイエンスセンター 2 階会議室

(持ち時間には討論時間を含む)

- 13:00-13:30 チトクロム *c* 酸化酵素の水素イオン輸送
経路
吉川信也(姫路工大・院・理)
- 13:30-14:00 酸素化型反応中間体の配位構造の予測
松本和優(姫路工大・院・理)
- 14:00-14:30 Mixed-Valence 型チトクロム *c* 酸化酵素
から生成した P 中間体の構造と安定性
織田賢二(姫路工大・院・理、東大・
院・総合文化)
- 14:30-14:40 休憩
- 14:40-15:00 *The study of P intermediate of cytochrome
oxidase in the different pH
Younkyoo Kim (岡崎・統合バイオ)
(*This presentation will be in English.)
- 15:00-15:25 P 中間体の DFT 理論計算
北川禎三・太田雄大(岡崎・統合バイ
オ)
- 15:25-15:40 ミトコンドリア中に生成した P 中間体を
捉える
高橋俊成(姫路工大・院・理、東大・
院・総合文化)
- 15:40-15:50 休憩
- 15:50-16:00 マルチチャンネル赤外分光光度計とそ
の性能
山口 悟(姫路工大・院・理)
- 16:00-16:20 チトクロム *c* 酸化酵素の赤外分光法
(FT-IR) による研究
奥野大地(岡崎・統合バイオ)
- 16:20-16:50 ウシチトクロム酸化酵素のプロトン能
動輸送：H-pathway のアミノ酸残基の変
異
下方国稔(慶大・医)
- 16:50-17:30 総合討論
討論参加者(順不同)：
島田秀夫、片山幸江、向井政博、新澤
伊藤恭子、青山 浩、小倉尚志、月原
富武、三上 潤、門川宗史

平成15年度(後期) 分子研研究会



開催日時	研究会名	提案代表者	参加人数
2003年12月22日(月) ～24日(水)	生体分子ダイナミクスと機能・立体構造形成研究会	北尾 彰朗	73名
2004年 1月19日(月) ～20日(火)	ナノ反応場におけるサイズ効果	真船 文隆	18名

* プログラムの詳細は「分子研レポート」に掲載することになりました。

また、http://www.ims.ac.jp/events/oldj_symposium.html も御参照下さい。

平成15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47回	2003年11月12日	エントロピーは環境問題に役立つか？	坂東 昌子
第763回	11月26日	実験の人たちのための分光理論の基礎	谷村 吉隆
第48回	12月10日	物質科学への招待	福山 秀敏
第49回	2004年 1月21日	元素科学：新機能発現を目指した有機典型元素化学	玉尾 皓平
第764回	2月25日	STMをもちいた分子振動測定による化学種同定	米田 忠弘
第50回	3月 3日	電子・イオンビームで作るナノテクノロジーの世界	松井 真二
第765回	3月10日	クロロフィル分子の「裏」と「表」～環状テトラピロールの化学～	大庭 亨

平成15年度（後期）共同研究



課題研究

○ は提案代表者

内殻励起における交換相互作用とスピン軌道相互作用

分子科学研究所教授

○ 小杉 信博

姫路工業大学大学院理学研究科助教授

下條 竜夫

分子科学研究所助教授

石田 俊正

Würzburg 大学教授

Rühl Eckart

東京大学大学院総合文化研究科学振特別研究員

樋山みやび

分子科学研究所助手

初井 宇記

固体表面上の生体分子認識反応系の構築と構造解析

分子科学研究所教授

○ 宇理須恒雄

(独)産業技術総合研究所グループリーダー

玉田 薫

(独)産業技術総合研究所グループリーダー

山田 耕一

(独)産業技術総合研究所関西センター研究員

森垣 憲一

(独)産業技術総合研究所四国
センター重点研究支援協力員

渡邊 秀和

(独)理化学研究所基礎科学特別研究員

古川 雅士

(独)理化学研究所播磨研究所研究員

原田 慈久

横浜国立大学大学院工学研究部教授

荻野 俊郎

岡山大学理学部教授

川口建太郎

岡山大学大学院自然科学研究科大学院生

桑原 英治

岡山大学大学院自然科学研究科大学院生

泉 和夫

京都大学再生医科学研究所教授

岩田 博夫

九州大学情報基盤センター教授

青柳 睦

九州大学情報基盤センター産学連携研究員

渡邊 秀和

九州大学大学院理学研究院助教授

田中 桂一

総合研究大学院大学名誉教授

廣田 栄治

大阪大学産業科学研究所教授

岩崎 裕

大阪大学産業科学研究所助教授

吉信 達夫

中国科学アカデミー教授	Wan Li-jun
東京大学大学院総合文化研究科教授	菅原 正
東京大学大学院理学系研究科大学院生	松島 毅
東京農工大学大学院生物システム応用科学研究所教授	中田 宗隆
東北大学電気通信研究所教授	庭野 道夫
徳島大学ゲノム機能研究センター教授	篠原 康雄
徳島大学ゲノム機能研究センター助教授	片岡 正俊
日本原子力研究所グループリーダー	横山 淳
日本原子力研究所研究員	赤木 浩
姫路工業大学高度産業科学技術研究所助教授	内海 裕一
分子科学研究所教授	岡崎 進
分子科学研究所助手	南部 伸孝
北陸先端科学技術大学院大学副学長	吉原経太郎
名古屋大学大学院理学研究科助教授	中島 洋
立命館大学理工学部教授	難波 秀利

自由電子レーザーの短波長化とその応用

分子科学研究所助教授	○ 加藤 政博
(独)科学技術振興機構エントロピー制御プロジェクト研究員	西野 英雄
東北大学大学院理学研究科教授	浜 広幸
姫路工業大学大学院理学研究科助教授	下條 竜夫
名古屋大学大学院工学研究科助手	高嶋 圭史
(独)理化学研究所研究員	原 徹

協力研究

「タンパク質の折り畳みに対する溶媒効果の分子論的研究」を始め45件



招へい協力研究

「光合成水分解酵素マンガンの高周波数EPR測定」

協力研究（ナノ支援）

「電析法による酸化亜鉛／色素複合薄膜素子の作製と評価」を始め30件

研究会

生体分子ダイナミクスと機能・立体構造形成研究会

東京大学分子細胞生物学研究
所助教授

北尾 彰朗

ナノ反応場におけるサイズ効果

東京大学大学院総合文化研究
科助教授

真船 文隆

施設利用

「超微粒子磁性（Co超微粒子系の磁性）」を始め26件

UVSOR 施設利用

「水熱合成したゼオライト系多孔体材料のXAFSによる局所構造解析」を始め74件

施設利用（ナノ支援）

「大規模分子系の物性に対する理論計算」を始め11件

* 共同研究実施一覧（各課題名等）は「分子研リポート」に掲載することになりました。

大庭 亨	分子スケールナノサイエンスセンター助	手	15.10.5 ~ 15.10.12	ドイッ	“Conference on Tetrapyrrole Photoreceptors in photosynthetic organisms”に出席、発表
水野 彰	分子スケールナノサイエンスセンター教	授	15.10.7 ~ 15.10.14	中国	プラズマ理工学に関する研究協力の一環として中国の大学などに訪問し講義ならびに研究打ち合わせを行う
井上 克也	相関領域研究系助	授	15.10.7 ~ 15.10.20	フランス	Conference on Molecular Magnetic Materialsで発表、及びレンヌ大Lahcene Ouahab教授及びボルドー-ICMCB Jean-Pascal Sutter教授との共同研究打ち合わせのため
田中 晃二	錯体化学実験施設教	授	15.10.11 ~ 15.10.17	韓国	第7回二酸化炭素有効利用に関する国際会議での研究発表
宇理須 恒雄	極端紫外光科学研究系教	授	15.10.12 ~ 15.10.19	スペイン スイス	APHYS-2003 International Conferenceに参加し論文を発表及びスイス連邦工科大学にて情報収集するため
猿倉 信彦	分子制御レーザー開発研究センター助	授	15.10.19 ~ 15.10.24	フィリピン	The 21 st Samahang Pisika ng Pilipinas Congressに出席
青野 重利	統合バイオサイエンスセンター教	授	15.10.20 ~ 15.10.24	ベトナム	8 th Eurasia Conference on Chemical Scienceに出席、研究成果発表のため
北川 禎三	統合バイオサイエンスセンター教	授	15.10.25 ~ 15.10.30	中国	12 th National Conference on Light Scattering Plenary Lectureに出席
宇理須 恒雄	極端紫外光科学研究系教	授	15.11.2 ~ 15.11.5	中国	中国科学院アカデミーLijun Wang教授と面談し平成16年度共同研究について打ち合わせ、また精華大学、北京大学を訪問し放射光ナノバイオエレクトロニクス研究の情報収集をおこなう。
水野 彰	分子スケールナノサイエンスセンター教	授	15.11.5 ~ 15.11.7	中国	第10回中国電気集塵学会に出席し、研究発表を行うため
米満 賢治	理論研究系助	授	15.11.21 ~ 15.11.30	ポーランド	光誘起相転移について研究成果の発表(2件)及び、研究課題に関する討論・情報収集のため
井上 克也	相関領域研究系助	授	15.11.26 ~ 15.12.4	カナダ	新プロで進めている中間子測定をTRIUMFで行う
小川 琢治	分子スケールナノサイエンスセンター教	授	15.12.1 ~ 15.12.6	アメリカ	2003 MRS FALL MEETING参加のため
鈴木 敏泰	分子スケールナノサイエンスセンター助	授	15.12.1 ~ 15.12.9	アメリカ	2003 MRS FALL MEETING参加のため
大森 賢治	電子構造研究系教	授	15.12.7 ~ 15.12.12	ドイツ	The 3 rd International Workshop on Optimal Control of Quantum Dynamics:Theory and Experiment Workshopにおいて招待講演を行う
大森 賢治	電子構造研究系教	授	15.12.16 ~ 15.12.19	台湾	The 5 th Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Opticsにおいて招待講演を行う
水野 彰	分子スケールナノサイエンスセンター教	授	15.12.14 ~ 15.12.18	台湾	The 3 rd Asia-Pacific International Symposium on the Basic and Application of Plasma Technologyに出席し、招待講演を行う
谷本 能文	分子スケールナノサイエンスセンター教	授	15.12.14 ~ 15.12.18	シンガポール	国際シンポジウム「Singapore International Chemical Conference III: Frontiers in Physical and Analytical Chemistry」に出席し、研究成果発表および研究情報収集のため
木下 一彦	統合バイオサイエンスセンター教	授	15.12.25 ~ 15.12.29	台湾	“Nano-science and technology : Frontiers and opportunities”参加発表
木下 一彦	統合バイオサイエンスセンター教	授	16.1.5 ~ 16.1.9	インド	Mechano-Mechanical Coupling in F ₁ -ATPase にて研究発表を行う
木下 一彦	統合バイオサイエンスセンター教	授	16.1.11 ~ 16.1.30	スイス スウェーデン	“39 th Winter Seminar Biophysical Chemistry, Molecular Biology and Cybernetics of Cell Functions”にて参加発表, Chalmers Univ. of Technology にて Owe Orwar 教授と共同研究する(共同発表)
水野 彰	分子スケールナノサイエンスセンター教	授	16.1.11 ~ 16.1.19	オランダ	Eindhoven 工科大学での研究打ち合わせを行いまた International Workshop on CAPPSA204 に出席し招待講演を行うため
魚住 泰広	分子スケールナノサイエンスセンター教	授	16.1.25 ~ 16.1.30	韓国	Hanyang 大学 Rhee 教授と「両親媒性レジン分散型パラジウムナノ粒子触媒を利用した有機変換反応」に関する研究打ち合わせを行う。また KAIST Sungkyunkwan 大学にて韓国での環境ナノ触媒領域に関する情報交換、及び講演を行う。



足立健吾	統合バイオサイエンスセンター 助 手	16. 1.25 ~ 16. 1.31	スウェーデン	Chalmers Univ. of Technology にて Owe Orwar 教授と共同研究のための実験をおこなう
平等拓範	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	16. 1.31 ~ 16. 2.8	アメリカ	先端固体フォトリクス国際会議 ASSP にて研究成果発表、スタンフォード大学にて研究、討論を行う
庄司一郎	分子制御レーザー開発研究センター 助 手	16. 1.31 ~ 16. 2.6	アメリカ	先端固体フォトリクス国際会議 ASSP にて研究成果発表
岡本祐幸	理論研究系 助 教 授	16. 2.13 ~ 16. 2.21	韓 国	大田にて KAIST の Eok Kyun Lee 教授と研究打ち合わせ、Theory and Applications of Computational Chemistry に出席し研究発表および研究課題に関する討論、情報収集をするため
足立健吾	統合バイオサイエンスセンター 助 手	16. 2.13 ~ 16. 2.22	アメリカ	“Biophysical Society 48th Annual Meeting” 出席・研究発表
永瀬 茂	理論研究系 教 授	16. 2.14 ~ 16. 2.21	韓 国	Theory and Applications of Computational Chemistry に出席し研究発表及び研究課題に関する討論、情報収集するため
石村和也	理論研究系 技 官	16. 2.14 ~ 16. 2.21	韓 国	Theory and Applications of Computational Chemistry に出席し研究発表及び研究課題に関する討論、情報収集するため
平田文男	理論研究系 教 授	16. 2.14 ~ 16. 2.20	韓 国	Theory and Applications of Computational Chemistry に出席し研究発表及び研究課題に関する討論、情報収集するため
小林 郁	理論研究系 助 手	16. 2.14 ~ 16. 2.21	韓 国	Theory and Applications of Computational Chemistry に出席し研究発表および研究課題に関する討論、情報収集をするため
奥村久士	理論研究系 助 手	16. 2.15 ~ 16. 2.27	アメリカ	17 th annual workshop Recent Development in Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics に出席し研究発表及び研究課題に関する討論、情報収集、ジョージア大学 David Landau 教授と研究打ち合わせ、フロリダ州立大学 Bernd Berg 教授と研究打ち合わせ
水野 彰	分子スケールナノサイエンスセンター 教 授	16. 2.22 ~ 16. 2.24	韓 国	放電プラズマによる空気清浄など、民生用への応用技術に関する調査のため
高橋正彦	分子スケールナノサイエンスセンター 助 教 授	16. 3. 6 ~ 16. 3.13	中 国	西北師範大学でプラズマ中の原子・分子過程に関する日中セミナーに参加し招待講演を行うため
木下一彦	統合バイオサイエンスセンター 教 授	16. 3.10 ~ 16. 3.19	ド イ ツ スウェーデン	“Symposium Life Sciences on the Nanometer Scale - Physics Meets Biology” 参加発表、Universitaet Bayreuth にて講演、研究打ち合わせ、スウェーデン/Chalmers University of Technology にて Owe Orwar 教授と共同研究
谷本能文	分子スケールナノサイエンスセンター 教 授	16. 3.16 ~ 16. 3.21	アメリカ	International Workshop on Materials Analysis and Processing in Magnetic Fields に出席し研究成果発表および研究情報収集のため
加藤正博	極端紫外光実験施設 助 教 授	16. 3.21 ~ 16. 3.27	韓 国	アジア加速器会議・研究発表
保坂将人	極端紫外光実験施設 助 手	16. 3.21 ~ 16. 3.27	韓 国	国際会議 APAC2004 に出席、発表
持箸 晃	極端紫外光実験施設 助 手	16. 3.21 ~ 16. 3.27	韓 国	アジア粒子加速器国際会議で研究成果発表を行うとともに最新の研究情報について意見交換を行う、並びに同地域での粒子加速器科学の今後の在り方を議論し当該研究領域の格段の進歩発展を図る

人事異動一覧

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
15.10.1	田中 啓文	採用	分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子分子エレクトロニクス研究部門助手	米国ペンシルバニア州立大学理学部化学科博士研究員	
15.10.1	彦坂 泰正	採用	極端紫外光実験施設助手	物質構造科学研究所研究機関研究員	
15.10.1	山田 陽一	採用	錯体化学実験施設錯体触媒研究部門助手	米国スクリプス研究所博士研究員	
15.10.1	長友 重紀	配置換	分子構造研究系分子動力学研究部門助手	技術課第一技術班分子構造研究系技術係員	
15.10.1	長友 重紀	勤務命	統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域勤務命令	分子構造研究系分子動力学研究部門助手	
15.10.1	Khajuria, Yugal	採用	分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門非常勤研究員	東北大学多元研究所研究機関研究員	
15.10.1	小久保 裕功	採用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門産学官連携研究員	総合研究大学院大学数物科学研究科博士課程院生	
15.10.1	Slanina, Zdenek	採用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門産学官連携研究員	学振外国人招へい研究員（分子科学研究所勤務）	
15.10.1	Lu, Jing	採用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門産学官連携研究員	日本学術振興会外国人特別研究員	
15.10.1	石田 豊和	採用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門産学官連携研究員	京都大学大学院理学研究科博士後期課程院生	
15.10.1	石田 豊和	勤務命	産業技術総合研究所計算科学研究部門北浦和夫総括研究員	理論研究系分子基礎理論第一研究部門産学官連携研究員	
15.10.1	秋永 宜伸	採用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門産学官連携研究員	米国アイオワ州立大学博士研究員	
15.10.1	秋永 宜伸	勤務命	東京大学工学系研究科応用化学専攻平尾公彦研究室勤務	理論研究系分子基礎理論第一研究部門産学官連携研究員	
15.10.1	宮田 竜彦	採用	理論研究系分子基礎理論第四研究部門産学官連携研究員	独立行政法人産業技術総合研究所第一号非常勤職員	
15.9.29	佐藤 庸一	退職	分子制御レーザー開発研究センター特殊波長レーザー開発研究部研究員(科学技術振興調整)	分子制御レーザー開発研究センター特殊波長レーザー開発研究部研究員(科学技術振興調整)	
15.10.1	佐藤 庸一	採用	分子制御レーザー開発研究センター特殊波長レーザー開発研究部研究員(科学技術振興調整)	分子制御レーザー開発研究センター特殊波長レーザー開発研究部研究員(科学技術振興調整)	
15.9.30	齊川 次郎	辞職	分子制御レーザー開発研究センター特殊波長レーザー開発研究部研究員(科学技術振興調整)	分子制御レーザー開発研究センター特殊波長レーザー開発研究部研究員(科学技術振興調整)	
15.10.1	齊川 次郎	採用	分子制御レーザー開発研究センター特殊波長レーザー開発研究部研究員(科学技術振興調整)	分子制御レーザー開発研究センター特殊波長レーザー開発研究部研究員(科学技術振興調整)	
15.10.1	藤原 秀紀	辞職	大阪府立大学先端科学研究所助手	分子集団研究系分子集団動力学研究部門助手	
15.9.30	小久保 裕功	辞職	理論研究系分子基礎理論第一研究部門産学官連携研究員	理論研究系リサーチ・アシスタント	
15.9.30	榮 慶丈	辞職	広島大学理学部化学科助手	理論研究系リサーチ・アシスタント	
15.9.30	村田 克美	辞職	京都大学大学院薬学研究科助手	理論研究系リサーチ・アシスタント	



15.10. 1	櫻井英博	併任	分子スケールナノサイエンスセンター/触媒・生命分子素子研究部門助教授	(大阪大学大学院工学研究科物質化学専攻講師)
15. 9.30	藤井正明	併任解除	東京工業大学資源化学研究所教授	(電子構造研究系電子状態動力学研究部門教授)
15. 9.16	戸谷明子	採用	技術課第三技術班電子計算機技術係技術補佐員(産学連携等研究費)	
15. 9.29	小野陽子	退職	分子制御レーザー開発研究センター特殊波長レーザー開発研究部事務補佐員(科学技術振興調整)	分子制御レーザー開発研究センター特殊波長レーザー開発研究部研究員(科学技術振興調整)
15.10. 1	小野陽子	採用	分子制御レーザー開発研究センター特殊波長レーザー開発研究部事務補佐員(科学技術振興調整)	分子制御レーザー開発研究センター特殊波長レーザー開発研究部研究員(科学技術振興調整)
15. 9.30	神本文市	退職		技術課第四技術班極端紫外光実験技術係技能補佐員
15.11. 1	吉岡資郎	採用	相關領域研究系相關分子科学第一研究部門助手	Vanderbilt University School of Medicine 博士研究員
15.11. 1	吉岡資郎	勤務命	統合バイオサイエンスセンター戦略的方法論研究領域勤務命令	相關領域研究系相關分子科学第一研究部門助手
15.11. 1	段文勇	採用	分子スケールナノサイエンスセンター分子クラスター研究部門非常勤研究員	中国南井大学化学学院助教授
15.11. 1	Zhang, Dao	採用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究員(科学技術振興調整)	中国 Changchun 応用化学研究所大学院博士後期課程学生
15.11. 1	中島彩	採用	理論研究系分子基礎理論第四研究部門技術補佐員(産学連携)	
15.12. 1	長友重紀	転出	筑波大学化学系講師	分子構造研究系分子動力学研究部門助手
15.11.15	Kondorskiy, Alexey	採用	理論研究系分子基礎理論第二研究部門研究員(科学研究)	日本学術振興会外国人特別研究員
15.12. 1	松上優	採用	理論研究系分子基礎理論第四研究部門産学官連携研究員(テクニカル・アシスタント)	総合研究大学院大学研究科博士課程院生(在学中)
16. 1. 1	加藤政博	昇任	分子スケールナノサイエンスセンターナノ光計測研究部門教授	極端紫外光実験施設助教授
16. 1. 1	南部伸孝	配置換	理論研究系分子基礎理論第三研究部門助手	計算科学研究センター助手
16. 1. 1	奥村久士	併任	総合研究大学院大学数物科学研究科助手	(理論研究系分子基礎理論第一研究部門助手)
16. 1. 1	中川剛志	併任	総合研究大学院大学数物科学研究科助手	(分子構造研究系分子動力学研究部門助手)
16. 1. 1	三浦伸一	併任	総合研究大学院大学数物科学研究科助手	(分子スケールナノサイエンスセンターナノ光計測研究部門助手)
15.12.31	竹中和浩	辞職	科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業研究員	錯体化学実験施設錯体触媒研究部門非常勤研究員
16. 1. 1	水谷雅一	復職	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門助手	
15.12.26	松戸修	死亡		技術課第一技術班長(休職中)
16. 1. 1	天野亜希代	採用	技術課第五技術班分子スケールナノサイエンスセンター技術第一係員	

16. 1.16	原 俊 文	採用	分子集団研究系物性化学研究部門非常勤研究員	姫路工業大学大学院客員研究員
16. 2. 1	小 野 ゆり子	採用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門産学官連携研究員(テクニカル・アシスタント)	(東京工業大学理工学研究科博士課程院生)
16. 1.16	當 舎 武 彦	採用	電子構造研究系基礎電子科学研究部門産学官連携研究員	統合バイオサイエンスセンター生命環境研究領域研究員(科学研究)
16. 3. 1	赤 木 史 生	採用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究員(科学技術振興調整)	大分大学ベンチャービジネスラボラトリー博士研究員
16. 2.29	近 藤 美穂子	辞 職		分子集団研究系事務補佐員
16. 4. 1	中 村 宏 樹	昇 任	分子科学研究所長	理論研究系分子基礎理論第二研究部門教授
16. 3.31	茅 幸 二	辞 職	分子科学研究所名誉教授	分子科学研究所長
16. 3.31	茅 幸 二	称号授与	分子科学研究所名誉教授	分子科学研究所長
16. 4. 1	鄭 誠 虎	採用	理論研究系分子基礎理論第四研究部門助手	仏国モンペリエ第二大学数理物理研究室博士研究員
16. 4. 1	香 月 浩 之	採用	電子構造研究系電子状態動力学研究部門助手	スイス国チューリヒ大学博士研究員
16. 3.16	高 橋 一 志	採用	分子集団研究系分子集団動力学研究部門助手[[短期]]	JST CREST 研究員(岡崎国立共同研究機構勤務)
16. 3.16	樋 山 みやび	採用	極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門助手	日本学術振興会特別研究員(東京大学勤務)
16. 3.16	高 橋 栄 治	採用	極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門助手	理化学研究所基礎科学特別研究員
16. 4. 1	櫻 井 英 博	転 入	分子スケールナノサイエンスセンターナノ触媒・生命分子素子研究部門助教授	大阪大学大学院工学研究科物質化学専攻助教授
16. 4. 1	松 本 吉 泰	転 入	分子スケールナノサイエンスセンターナノ光計測研究部門教授	総合研究大学院大学先端科学研究科教授
16. 4. 1	槇 優	採用	分子スケールナノサイエンスセンターナノ触媒・生命分子素子研究部門短時間契約職員研究員	科学技術振興事業団さきがけ博士研究員
16. 4. 1	長 尾 昌 志	採用	分子スケールナノサイエンスセンターナノ光計測研究部門短時間契約職員研究員	東京大学大学院理学系研究科 COE アシスタント
16. 4. 1	角 山 寛 規	採用	分子スケールナノサイエンスセンターナノ光計測研究部門短時間契約職員研究員	東北大学大学院博士課程院生
16. 4. 1	櫻 井 陽 子	採用	極端紫外光実験施設短時間契約職員研究員	名古屋大学大学院理学研究科博士課程院生
16. 4. 1	久 保 稔	勤務命令	分子科学研究所勤務命令	岡崎統合バイオサイエンスセンター短時間契約職員研究員
16. 4. 1	趙 聖 行	採用	理論研究系分子基礎理論第二研究部門短時間契約職員研究員理化学研究所勤務(鈴木俊法研究室)	
16. 4. 1	田 村 宏 之	採用	理論研究系分子基礎理論第二研究部門短時間契約職員研究員	日本学術振興会特別研究員 PD
16. 4. 1	谷 村 あゆみ	採用	理論研究系分子基礎理論第三研究部門特定契約職員専門研究職員	



16. 4. 1	生 田 靖 弘	採 用	理論研究系分子基礎理論第三研究部門特定契約職員専門研究職員	東京大学大学院理学系研究科博士課程院生	
16. 4. 1	吉 田 紀 生	採 用	理論研究系分子基礎理論第三研究部門特定契約職員専門研究職員	(株)富士総合研究所	
16. 4. 1	山 口 大	採 用	分子スケールナノサイエンスセンターナノ光計測研究部門短時間契約職員研究員	総合研究大学院大学先導科学研究科博士課程院生 (在学中)	
16. 4. 1	小 野 ゆり子	退職・採用	理論研究系分子基礎理論第一研究部門特定契約職員専門研究職員	理論研究系分子基礎理論第一研究部門産学官連携研究員(テクニカル・アシスタント)	
16. 4. 1	近 角 真 平	退職・採用	理論研究系分子基礎理論第二研究部門短時間契約職員研究員	理論研究系分子基礎理論第二研究部門非常勤研究員	
16. 4. 1	岡 部 智 絵	退職・採用	電子構造研究系基礎電子化学研究部門特定契約職員専門研究職員研究員	電子構造研究系基礎電子化学研究部門産学官連携研究員(テクニカル・アシスタント)	
16. 4. 1	森 崇 徳	退職・採用	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門特定契約職員専門研究職員	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門非常勤研究員	
16. 3.31	白 沢 信 彦	退職・採用	分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子・分子エレクトロニクス短時間契約職員研究員	分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門非常勤研究員	
16. 4. 1	赤 木 史 生	退職・採用	錯体化学実験施設錯体物性研究部門短時間契約職員研究員	研究員 (科学技術振興調整) (助手相当)	
16. 3.31	鈴 木 陽 子	辞 職	明星大学専任講師	理論研究系分子基礎理論第二研究部門助手	
16. 3.31	加 藤 立 久	辞 職	城西大学理学部化学科教授	分子構造研究系分子動力学研究部門助教授	
16. 3.31	藤 山 茂 樹	辞 職	東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻特任講師	分子集団研究系物性化学研究部門助手	
16. 4. 1	井 上 克 也	転 出	広島大学大学院理学研究科教授	相關領域研究系相關分子科学第一研究部門助教授	
16. 4. 1	井 口 佳 哉	転 出	東京大学大学院総合文化研究科広域科学専攻助手	電子構造研究系電子構造研究部門助手	
16. 3.31	水 谷 雅 一	辞 職	名古屋大学太陽地球環境研究所非常勤職員	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門助手	
16. 3.31	庄 司 一 郎	辞 職	中央大学理工学部専任講師	分子制御レーザー開発研究センター特殊波長レーザー開発研究センター助手	
16. 3.31	渡 辺 三千雄	辞 職		装置開発室助教授	
16. 4. 1	水 野 彰	転 出	豊橋技術科学大学工学部教授	分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門教授	流動研究部門
16. 4. 1	高 橋 正 彦	在籍出向	東北大学多元物質科学研究所助教授	分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門助教授	流動研究部門
16. 4. 1	渡 邊 昇	在籍出向	東北大学多元物質科学研究所助手	分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門助手	流動研究部門
16. 4. 1	解 良 聡	在籍出向	千葉大学大学院自然科学研究科助手	分子スケールナノサイエンスセンター界面分子科学研究部門助手	流動研究部門
16. 4. 1	谷 本 能 文	転 出	広島大学大学院理学研究科教授	分子スケールナノサイエンスセンター分子クラスター研究部門教授	流動研究部門
16. 4. 1	石 田 俊 正	転 出	静岡大学工学部助教授	分子スケールナノサイエンスセンター分子クラスター研究部門助教授	流動研究部門

16. 4. 1	藤 原 昌 夫	転 出	広島大学大学院理学研究科数理分子生命理学専攻助手	分子スケールナノサイエンスセンター分子クラスター研究部門助手	流動研究部門
16. 4. 1	大 庭 亨	転 出	宇都宮大学工学部応用化学科助手	分子スケールナノサイエンスセンター分子クラスター研究部門助手	流動研究部門
16. 3.31	西 野 正 理	退 職	独立行政法人物質・材料研究機構研究員	理論研究系分子基礎理論第一研究部門非常勤研究員	
16. 3.31	Slanina,Zdenek	退 職		理論研究系分子基礎理論第一研究部門産学官連携研究員	
16. 3.31	秋 永 宜 伸	退 職		理論研究系分子基礎理論第一研究部門産学官連携研究員	
16. 3.31	Lu, Jing	退 職		理論研究系分子基礎理論第一研究部門産学官連携研究員	
16. 3.31	山 崎 健	退 職	University of Alberta National Research Canada 研究員	理論研究系分子基礎理論第四研究部門産学官連携研究員	
16. 3.31	井 上 仁	退 職	東京大学物性研究所高山研究室産学連携等研究員	理論研究系分子基礎理論第四研究部門産学官連携研究員	
16. 3.31	小 杉 健太郎	退 職		電子構造研究系基礎電子化学研究部門研究員(科学研究・間接経費)	
16. 3.31	今 井 宏 之	退 職		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	
16. 3.31	M. Junaid B.	退 職	Dept. of Physics University of Kerala Technical Assisstant	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	
16. 3.31	當 舎 武 彦	退 職		電子構造研究系基礎電子化学研究部門産学官連携研究員	
16. 3.31	成 島 隆	退 職		電子構造研究系基礎電子化学研究部門産学官連携研究員(テクニカル・アシスタント)	
16. 3.31	李 艶 君	退 職	大阪大学大学院工学研究科研究員	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門研究員(科学研究)	
16. 3.31	王 志 宏	退 職	名古屋大学物質科学国際研究センター COE 博士研究員	極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門研究員(科学研究)	
16. 3.31	Ouenzerfi, R.	退 職		分子制御レーザー開発研究センター放射光同期レーザー開発研究部非常勤研究員	
16. 3.31	Quema, Alex	退 職	学振外国人特別研究員	分子制御レーザー開発研究センター放射光同期レーザー開発研究部研究員(科学研究)	
16. 3.31	伊 藤 歌奈女	退 職	三洋電機(株)技術開発本部契約社員	分子スケールナノサイエンスセンター分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門非常勤研究員	
16. 3.31	細 川 洋 一	退 職	(株)豊田中央研究所研究員正社員	分子スケールナノサイエンスセンターナノ触媒・生命分子素子研究部門非常勤研究員	
16. 3.31	Dunin-Barkov	退 職	露国 Institute of Solid Stute Physics, RAS Cheuhogolvka Research Associate	分子スケールナノサイエンスセンター分子クラスター研究部門非常勤研究員	
16. 3.31	段 文 勇	退 職	広島大学大学院理学研究科研究員	分子スケールナノサイエンスセンター分子クラスター研究部門非常勤研究員	
16. 3.31	結 城 雅 弘	退 職	理化学研究所有機金属化学研究室博士研究員	錯体化学実験施設錯体物性研究部門非常勤研究員	
16. 3.15	安 江 崇 裕	退 職	大韓民国サムソン電子研究員	錯体化学実験施設錯体物性研究部門研究員(科学技術振興調整)	



16. 3.31	江 潤 卿 退 職	日本電子株式会社研究員	
16. 4. 1	平 田 文 男 併 任	理論研究系研究主幹	
16. 4. 1	薬 師 久 弥 併 任	相關領域研究系研究主幹	
16. 4. 1	松 本 吉 泰 併 任	分子制御レーザー開発研究センターセンター長	
16. 4. 1	宇理須 恒 雄 併 任	装置開発室研究施設長	
16. 4. 1	中 村 宏 樹 併任終了	理論研究系研究主幹	
16. 4. 1	青 野 重 利 併任終了	相關領域研究系研究主幹	
16. 4. 1	岡 本 裕 巳 併任終了	分子制御レーザー開発研究センターセンター長	
16. 4. 1	薬 師 久 弥 併任終了	装置開発室研究施設長	

分子研レターズ50号も無事発刊になりました。今号はいよいよ大学共同利用機関法人である自然科学研究機構の分子科学研究所として最初の発刊です。志村機構長から広い視野から新たな分子科学の創成へといった巻頭言をいただきました。お忙しい中ご執筆いただいた皆さまに編集委員一同お礼申し上げます。法人への移行に際しているいろいろな面でごたごたが続いているようです。ともあれ中村新所長の書かれたように基礎学術研究を今後一層進めていく上で、本誌が研究所内外の交流の場を提供できれば幸いです。

(米満賢治 記)

分子研レターズ編集委員

大 森 賢 治(委員長)

米 満 賢 治(本号編集担当)

川 口 博 之

櫻 井 英 博

平 等 拓 範

中 村 敏 和

南 部 伸 孝

彦 坂 泰 正

菱 川 明 栄

横 山 利 彦

吉 岡 資 郎

分子研広報委員会担当

中 村 理 枝

岡崎統合事務センター総務課総務係

加 藤 さち子

稲 津 善 子

分子研レターズ No. 50

発行年月	平成16年8月
印刷年月	平成16年9月
発行	自然科学研究機構 分子科学研究所
編集	分子研レターズ編集委員会
印刷	株式会社ヨシノ印刷

自然科学研究機構
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/>