

されながらあれこれコメントをされていた。「研究会、またやろうや」と仰っていたが叶わなかった。学生時代から「君ら若い世代が僕らの世代を超えてか

な（超えていかなきゃ）」とアジられ続け、折に触れて研究・教育そして学問に関するご教示を頂戴した。病床でも伺ったが「やっぱり、これからの若い

人が……」といういつものフレーズが耳に残る。ご冥福をお祈りするとともに、不肖の弟子なりに少しでも恩返しをと決めている。

受賞報告 ■ OBの今



富宅 喜代一 神戸大名誉教授に第2回(2010年度)分子科学会賞

この度、「気相クラスター分光による構造と反応機構の分子科学の先導的研究」の理由で平成22年度分子科学会賞を頂いた。受賞対象になった研究の多くは分子科学研究所で芽生えたテーマである。

1988年11月に分子科学研究所に赴任し、機器センターの維持、管理をしながら研究を進めることになった。研究の方は前任地の慶応大学で茅幸二教授と共同で温めた気相クラスターの研究の発展を目指してスタートした。当時すでに溶液や固体・固体表面の微視的モデルの視点からクラスターの研究が始まっていたが、溶液化学との接点での研究では、主にクラスターの熱力学量の測定に限られていた。新しい展開として電子の局在化・非局在化を伴った溶媒和金属原子(イオン)クラスターの分光研究を提案した。井口洋夫所長に御配慮頂き、翌年には美齊津文典氏にグループに加わって頂くことになり、また装置開発室の支援もあって、光解離分光装置の開発が一気に進み実験に取り掛かることができた。この装置をアルカリ土類金属イオン(Mg^+ 、 Ca^+)の水和クラスターに適用して電子スペクトルを測定することにより水和構造が詳細に分かってきた。さらに金属イオンの酸化反応経路と水和水数や構造の相関が分子レベルで初めて明らかに

なり、同様の研究が国内外で活発に行われるようになった。またアルカリ原子を含む溶媒和分子のクラスターの生成法と負イオン光電子分光法を開発し、クラスター内で溶媒和電子が生成する臨界サイズと生成初期過程を分光学的に捉えることを試みた。他方、半導体素子の超集積化で問題となるナノサイズ領域での構造と物性の情報を得るために、真空紫外レーザー光源を開発し、数百個以下の原子からなるシリコンクラスターのイオン化過程を調べ、サイズ毎にイオン化エネルギーを決定した。

地震の半年後の1995年7月に赴任した神戸大学では、分子研で芽生えた研究をさらに発展させることができた。特にアルカリ原子や NH_4 のクラスター内での溶媒和電子の生成初期過程が詳細に解明できた。半導体クラスターの研究もゲルマニウムに拡張でき、得られた測定値は標準データとして現在も世界中で広く引用されている。新たな取り組みとして電気スプレー法を用いた光解離分光法を開発し、ポリペプチド等の水和過程の検討をした。また、実験的に温度制御が困難な気相クラスターの新規な温度制御法を開発し、生体分子イオンの溶媒和効果と温度依存性の研究を進めている。

最近、生命科学を始め多くの分野で質量分析を用いた分子の構造解析が盛

んに行われているが、この方法では質量の情報しか得られず構造解析に著しい制限があり、研究の進展の大きな障害となっている。この問題を克服するため、クラスター研究の延長として磁気共鳴加速原理に基づいた気相イオンのNMR検出法を新たに発案し、科学技術振興機構の支援のもとで質量分析機能を備えた気体NMR分光法の開発を進めている。

今回の受賞は茅幸二先生、そして岩田末廣先生や橋本健朗氏等の理論グループや多くの方々のご協力と分子研装置開発室や機器センターのご支援のお蔭であり、皆様方にこの場を借りて、改めて感謝の意を表したいと思います。



富宅 喜代一 (ふけ・きよかず)
元 分子科学研究所機器センター 助教授
現 神戸大学大学院理学研究科 名誉教授



天能 精一郎 神戸大教授に第2回(2010年度)分子科学会賞

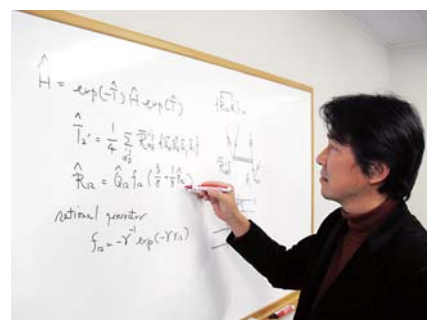
この度、「露に電子相関を考慮した高精度電子状態理論の開発」に関する研究成果に対しまして、第2回(2010年度)分子科学会賞を頂きました。身に余る賞であり、推薦して頂いた先生からメールを頂いた時は、あて馬役を引き受ける心算で書類を準備したのですが、本当にもらおうとは思っていませんでした。ただに申し訳ない気がしています。露に電子相関を考慮した電子状態理論は歴史の古い分野なのですが、分子研・岩田グループの助手時代に関心を持ち、1999年に名大に移ってから直ぐに始めた研究テーマです。Slaterジェミナルや電子間カスプ条件を用いたSP仮説の提案が現在F12理論と呼ばれる分野の基礎に寄与しましたが、Slater関数を相関因子に用いるという考えは、平尾公彦先生など国内外の他の量子化学者も持っておられたようです。Boys関数を拡張した解析的な積分表現を見つけてプログラム実装出来たのは、当初の着想から5年も後の事であり、幸運であったと思っています。論文がア

クセプトされると同時にACSで結果を示し、帰国直後に慌ただしく森野基金の受給式の言葉を緊張しながら述べた事を覚えています。量子化学の基礎研究は直接実験と関係する結果をもたらすものではありませんので、ある程度分野の理解が無いと継続していきません。これまで数々の支援を頂きました理論化学の諸先輩方と国内外の共同研究者たちに心から感謝しています。

中村前所長も同じような事を言われていたと思いますが、分子研は特に准教授にとって最も魅力的な所ではないでしょうか。私が名大の情報化学部(人間情報学研究科)に移った時は、教養の化学実験や講義が多く残っており、夏休みにまとめてとか、通勤電車の中で研究をするような感じでした。スタッフはもちろん学生も殆ど居らず、いつも何か新しい成果を出さないといけない焦燥感にかられていた気がします。分子研の規模が云々と言う声もありますが、研究環境としては随分優遇されており、ここで准教授だったら全く違っ

た展開もあったのかなと思う事があります。現在、神戸大の計算科学に関係した新研究科では、恵まれた研究環境を与えて頂きました。

これからも少しでも世界をリードする研究を行い、微力ながら分子科学の発展に貢献出来ればと願っています。又、F12理論以外の研究テーマでは、タンパク質中の動力学を絡めたCDスペクトルやNMR遮蔽テンソルの計算など色々面白い事がやれるようになって来ました。共同研究の話などありましたら、どうぞ気楽にお声がけ下さい。



天能 精一郎 (てんのう・せいいちろう)
元 分子科学研究所理論研究系 助手
現 神戸大学大学院システム情報学研究科 教授