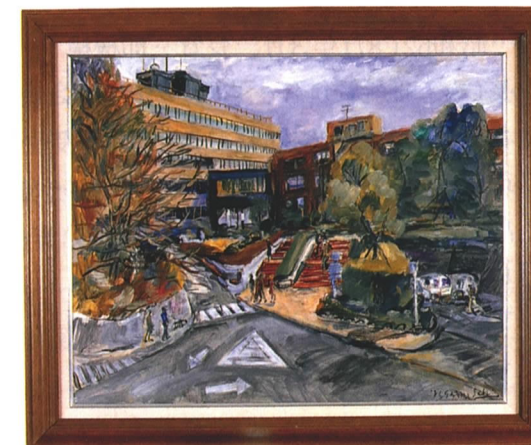


分子研リポート'93

現状・評価・課題



分子科学研究所



市川 晃 画

昭和62('87)年3月、長倉三郎機構
長(分子研所長併任、当時)から寄贈
された絵で、元愛知教育大学教授の
市川 晃画伯に依頼して描いていた
ものです。研究棟と実験棟を
正門脇にある職員会館から見た画で
す。現在研究棟の201セミナー室に飾
ってあります。

「分子研レポート'93」目次

1. 序 言	1
2. 分子科学研究所の概要	3
2-1 研究所の目的	3
2-2 沿 革	3
2-3 現在の組織とその発足	7
2-4 研究所の運営	9
2-4-1 評議員会	9
2-4-2 運営協議員会	10
2-4-3 人事選考部会	10
2-4-4 共同研究専門委員会	11
2-4-5 学会等連絡会議	12
2-4-6 教授会議	12
2-4-7 主幹会議	12
2-4-8 大学院委員会	12
2-4-9 特別研究生受入れ審査委員会	13
2-4-10 各種の委員会	13
2-4-11 岡崎国立共同研究機構の委員会	15
2-5 構 成 員	16
2-5-1 現在の構成員	16
2-5-2 定員・現員	21
2-5-3 人事異動状況	22
2-6 研究活動の概要	23
2-6-1 研究系および研究施設	23
2-6-2 技術課	29
2-7 特別研究と岡崎コンファレンス	30
2-7-1 特別研究	30
2-7-2 岡崎コンファレンス	36
2-8 共 同 研 究	43
2-9 国際交流と国際共同研究	48
2-9-1 国際交流	48
2-9-2 国際共同研究	51
日米科学技術協力事業	51
日英共同研究	52
日韓共同研究	52
日中共同研究	53
日本・イスラエル共同研究	53

日本・スペイン共同研究	53
日・旧ソ連協力	54
2-10 予 算	55
2-10-1 予算の推移	55
2-10-2 科学研究費補助金	57
2-11 共 通 設 備	59
2-11-1 図 書 館	59
2-11-2 宿泊施設	59
2-11-3 職員会館	59
2-12 地域社会との交流	60
2-12-1 国研セミナー	60
2-12-2 一般公開	61
2-12-3 見学受入状況（団体）	61
3. 研究系及び研究施設の現状	63
3-1 理論研究系	63
3-1-1 分子基礎理論第一研究部門	63
3-1-2 分子基礎理論第二研究部門	67
3-1-3 分子基礎理論第三研究部門	
3-2 分子構造研究系	72
3-2-1 分子構造第一研究部門	72
3-2-2 分子構造第二研究部門	
3-2-3 分子動力学研究部門	76
3-3 電子構造研究系	82
3-3-1 基礎電子化学研究部門	82
3-3-2 電子状態動力学研究部門	90
3-3-3 電子構造研究部門	93
3-4 分子集団研究系	96
4-1 物性化学研究部門	96
4-2 分子集団動力学研究部門	100
4-3 分子集団研究部門	106
3-5 相關領域研究系	109
3-5-1 相關分子科学第一研究部門	109
3-5-2 相關分子科学第二研究部門	
3-5-3 有機構造活性研究部門	112
3-6 極端紫外光科学研究系	121
3-6-1 基礎光化学研究部門	121
3-6-2 反応動力学研究部門	127
3-6-3 界面分子科学研究部門	131

3-7. 錯体化学実験施設	139
現状と将来	139
錯体合成研究部門	139
錯体触媒研究部門	143
錯体物性研究部門	152
3-8 研究施設	157
3-8-1 電子計算機センター	157
3-8-2 極低温センター	160
3-8-3 機器センター	160
3-8-4 化学試料室	162
3-8-5 装置開発室	165
3-8-6 極端紫外光実験施設	168
4. 研究施設の業務と実施状況	175
4-1 電子計算機センター	175
4-2 極低温センター	175
4-3 機器センター	177
4-4 化学試料室	178
4-5 装置開発室	178
4-6 極端紫外光実験施設	182
4-7 大型研究設備	183
5. 大学院教育	185
5-1 総合研究大学院大学	185
5-2 特別研究学生	187
6. 点検・評価と課題	189
6-1 論文の発表状況	189
6-1-1 発表論文数	189
6-1-2 引用状況	190
6-2 将来計画ワーキンググループの報告	190
6-2-1 理論分野	192
6-2-2 分子科学分野	193
6-2-3 物性科学分野	195
6-2-4 極端紫外光科学分野	197
6-2-5 相關領域・錯体化学分野	198
6-3 所外の分子科学研究者による評価	203
6-3-1 理論分野	204
6-3-2 分子科学分野	206

6-3-3 物性化学分野	213
6-3-4 極端紫外光科学分野	218
6-3-5 相関領域・錯体化学分野	226
6-4 受賞および表彰	230

7. 自己点検・評価の組織と実施状況.....	233
点検評価委員会委員名簿.....	233
分子科学研究所点検評価規則.....	234

8. 資 料	237
8-1 歴代の評議員	237
8-2 歴代の運営協議員	239
8-3 教官の在任期間一覧	243
8-4 転出職員の現状	265
8-5 研究会開催一覧	266
8-6 定期刊行物一覧	273

序言

本報告書は分子科学研究所の活動の現状を、外部からの視点から客観的に把握し、現状と重要な課題を明確に認識し、分子研の将来像を描く目的で作成された。

分子研は文部省直轄の大学共同利用研究機構として設立され、今日まで15年を経過した。現在、6研究室、7研究施設、専攻員100名、専任職員100名、共同利用研究施設として大きく成長した。分子研は設立以来、共同利用研として、国内外の研究者の共同利用の支援に力を注いできた。Annual Review（英文）、分子研要覧、分子研年報（日本語）が毎年発行され、分子研の現状を外部に広く知らせることに努めてきた。また、点検・評価にも努めてきた。とりわけ、この点では、幅を収めて型にはまらず、個性ある研究を推進することを旨とされている。この点に留意し、必要資料等を提出し、点検・評価委員の全体像を明確にすることは、外部に対してはもとより、研究所の研究者にとっても非常に有意義なものである。また、外部からの客観的な評価を受けることも望まれる。

さらに分子研は分子科学研究のセンサースタッフとして、国内はもとより国際的にも大きな期待を背負っている。この期待に応えるべく、分子研に求められている研究の内容とその質については常に自ら厳しく問わなければならない。分子研の活動の場では、二つのことを取り入れた。一つは個々の研究者の研究活動状況を客観的に把握し、分子研としてこれらに対する評価を行ったことである。とくに評価の対象は専任・専攻員に限定し、国内外の分子科学研究者18名（6名国内研究者12名、外国人研究者6名）の意見を聴取し、評価委員会による国内研究者とのinterviewを含む会合は通常の活動の一環として行われた。本報告書にはこれらの評価をできるだけ忠実に再録するよう努めた。また、分子研の活動および個々の研究者の活動は今後の分子研の研究、運営にとって極めて貴重なものである。

本報告書によって分子研がどのような現状にあるのか、どのような課題を担っているのか、それがどのように評価され、またどのような問題を抱えているのか、またどのような成果を挙げ、どのようなことが見えてきたか、などのことが、これにより一般の方々の分子研に対する理解が深められれば幸いであり、また社会各方面からの分子研に対する建設的な提言を期待する。また、専任・専攻員が本報告書によって分子研の現状を一層認識し、その使命をさらに自覚し、分子研の分子科学研究の水準の向上に努めることを希望する。

本報告書の作成にあたり、丸山育成教授をはじめ多くの先生方、また研究主幹、研究施設長の方々にはそれぞれの関係する部分を担当していただいた。また、事務局の方々には資料収集、編集、印刷にあたり大変ご尽力いただいた。ここにこの報告書の作成に協力した方々に感謝の意を表したい。

分子科学研究所長 伊 藤 元 一

1. 序 言

本報告書は分子科学研究所の活動の全体像を示すことによって、現状と重要な課題を明確に認識し、もって分子研の将来像を探る目的で作られたものである。

分子研は文部省直轄の大学共同利用研究機関として昭和50年に設立され、今日で18年を経過した。現在、6研究系、7研究施設、構成員161名を擁し分子科学の中核研究所として大きく成長した。分子研は設立以来、共同利用研としての性格から常にその活動状況の広報に意を用いてきた。Annual Review (英文)、分子研要覧、分子研レターズ、UVSOR Activity Report (英文)、技術報告書等は毎年出されており、分子研の現状をこれらを通じて紹介すると共に自己点検・評価にも努めてきたつもりである。この点では、稿を改めて現状報告書を作る必要はないとも思われるが、個々の報告書の内容を整理統合し、さらに必要な資料等を加えることによって分子研の活動状況の全体像を明確にすることは、外部に対してはもとより、研究所の構成員にとっても認識を新たにするうえで非常に有意義なものと思われる。

さらに分子研は分子科学のセンター・オブ・エクセレンスとして国内はもとより国際的にも大きな期待を背負っている。この期待に応える意味からも、分子研で行われている研究の内容とその質については常に自ら厳しく問わなければならない。この事を考慮して本報告書では二つのことを取り入れた。一つは個々の研究者の研究活動状況を資料を付して紹介したこと、もう一つはこれらの研究活動に対する評価を行ったことである。とくに評価については第一線で活躍中の著名な国内、国外の分子科学研究者18名(所外国内研究者12名、外国人研究者6名)にフランクな評価をお願いした。評価員による所内研究者とのinterviewを含む会合は通算20数回にのぼり約半年にわたった。本報告書にはこれらの評価をできるだけ忠実に再録するよう努めた。評価員によるこれらの評価および種々の提言は今後の分子研の研究、運営にとって極めて貴重なものである。

本報告書によって分子研がどのように運営され、どのような研究を行っており、それがどのように評価され、またどのような問題を抱えており、どのような方向を模索しているかが分かっていただけるものと思う。これにより一般の方々の分子研についての理解がえられれば幸いであり、また社会各方面からの分子研に対する建設的な提言を期待したい。同時に分子研の構成員が本報告書によって分子研の現状を一層認識し、その使命をさらに自覚し、日本のひいては世界の分子科学の水準の向上に努められることを希望する。

本報告書の作成にあたり、丸山有成教授に全体のまとめをお願いし、また研究主幹、研究施設長の方々にはそれぞれの関係する部分を担当していただいた。また管理局の方々には資料収集、編集、印刷にあたり大変ご尽力いただいた。ここにこれらの方々に関心より感謝の意を表したい。

分子科学研究所長 伊 藤 光 男

2-1 研究所の目的

分子科学研究所は、物質の基礎である分子の構造・反応・機能を究める基礎的研究並びに産業研究を旨とする。化学と物理学の境目に沿って分子の構造・反応・機能を究めるための中核として、他の研究者の共同利用に供することを目的として設けられた。分子の構造・反応・機能を、分子を構成、構成を電子及び電子のレベルで説明することにより化学・物理の現象を説明することから、分子科学は分子の化学・物理の、人間生活に役立つ基礎を造る研究である。分子科学の発展は、物質の基礎を造る研究である。

限られた資源のなかで、生産と消費の両方を同時に達成するためには、物質の機能を深く理解し、その正しい利用をいかにするかを、通じて物質の原理を取り入れなければならない。分子科学研究所が対象とする分子の構造・反応・機能を、分子と光との相互作用、分子を通じて行われるエネルギー変換の現象に於いて、いづれも物質現象の原理に立つ新しい科学・技術の開発に貢献するものである。

2-2 沿革

昭和36年頃から分子科学研究者の間で研究所の設置が盛んになり、東京に社団法人日本化学会の化学研究推進財団委員会においてその検討が始められた。その後、日本学術会議から「分子科学研究所」(仮称)の設置について内閣府に諮問がなされた(その内容は附記1を参照)。その結果、化学研究推進委員会に分子科学研究所の設置が決定され、東京理科大学が設置を担当することになった。

これと並行して、研究者の間は研究所の設置が「研究費の増減(特定研究「分子科学」)の交付を受け、昭和46年度と47年度の2年度にわたって研究費の増減が行い、分子科学全般の基礎となる研究方法を開発するとともに、物質の構造・反応・機能の有機的な整備を図ることが検討された。

昭和48年10月、学術審議会会長から文部省に提出された「分子科学研究所の設置に関する調査報告書」(附記2)に示したような報告がなされた。

次いで、昭和49年度予算において創設が決定された。昭和49年1月16日、文部大臣蔵相の諮問「分子科学研究所創設準備金(定員2名)の交付に関する件」が閣議決定された。その中で、文部省において研究所の具体化が審議され、昭和49年度予算に「分子科学研究所創設準備金」が明記された。この結果、分子科学研究所の設置が決定された。昭和49年度予算に「分子科学研究所創設準備金」が明記された。この結果、分子科学研究所の設置が決定された。

昭和49年1月には、文部省と関係機関との間で「分子科学研究所の設置に関する調査報告書」が提出された。この報告書は、分子科学研究所の設置に関する調査報告書であり、分子科学研究所の設置に関する調査報告書である。この報告書は、分子科学研究所の設置に関する調査報告書であり、分子科学研究所の設置に関する調査報告書である。

分子科学研究所の設置に関する調査報告書は、分子科学研究所の設置に関する調査報告書であり、分子科学研究所の設置に関する調査報告書である。この報告書は、分子科学研究所の設置に関する調査報告書であり、分子科学研究所の設置に関する調査報告書である。

分子科学研究所の設置に関する調査報告書は、分子科学研究所の設置に関する調査報告書であり、分子科学研究所の設置に関する調査報告書である。この報告書は、分子科学研究所の設置に関する調査報告書であり、分子科学研究所の設置に関する調査報告書である。

分子科学研究所の設置に関する調査報告書は、分子科学研究所の設置に関する調査報告書であり、分子科学研究所の設置に関する調査報告書である。この報告書は、分子科学研究所の設置に関する調査報告書であり、分子科学研究所の設置に関する調査報告書である。

分子科学研究所の設置に関する調査報告書は、分子科学研究所の設置に関する調査報告書であり、分子科学研究所の設置に関する調査報告書である。この報告書は、分子科学研究所の設置に関する調査報告書であり、分子科学研究所の設置に関する調査報告書である。

分子科学研究所の設置に関する調査報告書は、分子科学研究所の設置に関する調査報告書であり、分子科学研究所の設置に関する調査報告書である。この報告書は、分子科学研究所の設置に関する調査報告書であり、分子科学研究所の設置に関する調査報告書である。

2. 分子科学研究所の概要

2-1 研究所の目的

分子科学研究所は、物質の基礎である分子の構造とその機能に関する実験的研究並びに理論的研究を行うとともに、化学と物理学の境界にある分子科学の研究を推進するための中核として、広く研究者の共同利用に供することを目的として設立された大学共同利用機関である。分子の構造，機能を原子及び電子のレベルで究明することにより化学現象の一般法則を把握するとともに、分子のもつ未知の性質を解明し、人類にとって有用な新しい物質の合成の方法を探索することをめざしている。もって物質観の基礎を培う研究機関として広く物質科学の諸分野に共通の知識と方法論を提供することを意図している。

限られた資源のなかで、生産と消費の上に成り立つ物質文明が健全に保持されるためには、諸物質の機能を深く理解し、その正しい利用をはかるのみでなく、さらに進んで物質循環の原理を取り入れなければならない。分子科学研究所が対象とする分子の形成と変化に関する原理，分子と光との相互作用，分子を通じて行われるエネルギー変換の機構等に関する研究は、いずれも物質循環の原理に立つ新しい科学・技術の開発に貢献するものである。

2-2 沿 革

昭和36年頃から分子科学研究者の間に研究所設立の要望が高まり、実際に社団法人日本化学会の化学研究将来計画委員会においてその検討が進められた。昭和40年に至り、日本学術会議から「分子科学研究所」（仮称）の設置について内閣総理大臣に対し勧告がなされた（その内容は附記1を参照）。その結果、化学研究連絡委員会に分子科学研究所小委員会が設けられ、研究所設立の推進に当たることとなった。

これと並行して、研究者の間に研究会が組織され、科学研究費補助金（特定研究「分子科学」）の交付を受け、昭和46年度と47年度の2年間にわたり、分子科学に関する研究を行い、分子科学全般の基礎となる研究方法を開発するとともに、研究所発足に際して施設・設備の円滑な整備を図ることが検討された。

昭和48年10月、学術審議会会長から文部大臣に対し、分子科学研究所を緊急に設立することが適当であるとの附記2に示したような報告がなされた。

次いで、昭和49年度予算において創設準備経費が計上され、同年4月10日、文部大臣裁定により分子科学研究所創設準備室（定員3名）及び分子科学研究所設立準備会議が設置された。その準備会議において研究所の具体化が審議され、昭和50年4月に分子科学研究所が創設された後、そこで行われた審議に基づいて研究所が具体的に組立てられていった。その際、準備会議座長からの申し送り事項として附記3に示した研究所運営の基本精神が示された。

昭和56年4月には、岡崎国立共同研究機構の創設に伴い、分子科学研究所及び生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所、生理学研究所）は一体化され、3研究所は岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることとなった。また、管理局は岡崎国立共同研究機構管理局に、技術課が研究所所属となった。

附記 1) 日本学術会議の勧告書（昭和 40 年 12 月 13 日）

分子科学研究所（仮称）の設立について

標記のことについて、本会議第 44 回総会の議に基づき、下記のとおり勧告します。

記

分子科学は、分子の本性をその原子的構造及び電子的構造に基づき明らかにするとともに、物質の物理的、化学的性質を分子レベルにおいて系統的に理解することを目的とする科学である。

分子科学は、科学の関連する各分野の研究の共通な基盤として、また、化学と物理学の境界領域の科学として、近年急速に発達したものであり、その重要性はますます高くなっている。化学研究推進の方策として総合的研究計画をたてるに当り、分子科学の研究を強化することは、その性格からみて最も有効な効果が期待されるものである。特に、わが国におけるこの分野の研究は、世界の趨勢においても重要な地位を占めているが、さらにこれを強化し、ひとり国内のみでなく世界における関連分野の科学に貢献するためには、この際、新たに分子科学研究所を設立し、化学と物理学が一層強く協力することを可能とする場を設けることが最も適切な方策である。よって、ここに共同利用研究所として分子科学研究所を速やかに設置されるよう要望する。

分子科学研究所（仮称）設立趣旨ならびに設立案

設 立 趣 旨

分子科学の立場

今日の科学は極めて広範な経験則の集積に基づいて成立した科学である。しかるにその特徴は物質の構成単位である分子を対象の中心として展開された科学であるとみなすことができる。従ってもし個々の分子の本性を明らかにし、これに基づいて物質の性質相互間の変化の原理を理解することができれば、それは化学終極の目的に沿うものである。化学はこの線に沿って近年目覚ましい進歩をとげつつあるが、その大きな原因は物理的方法を化学の研究にとり入れたことによると言っても過言ではない。すなわち、マイクロ波、赤外線、可視紫外線の吸収、核磁気共鳴吸収など各種の分光学的方法や、電子線回折、X線結晶解析、質量分析計などの物理的実験方法と共に量子力学に基づく理論的方法を分子に適用することによってその実体を正確に促えることが可能になりつつある。

化学における物理学的方法の導入とそれによって得られた目覚ましい成果は必然的に化学と物理学特に分子物理学との緊密な連繫をもたらし、両者の融合した新しい境界領域の研究分野に発展した。すなわち分子科学とよばれるものである。

分子科学は分子の個性をその原子的構造および電子的構造に基づいて詳細に促えることを目的とするが、また同時にこれらの構造と物質の物理的、化学的性質との関係を研究するものである。従って化合物を研究対象とする化学の広い関連分野に対して最も基礎的知識を提供すると共に、またその発展に役立つ方法論を分子レベルにおいて開発することが分子科学の役割である。

分子科学はその性格からみて、これが関連する学問分野は極めて広い。有機化学、無機化学をはじめとする化学の諸分科をはじめ、生物現象を分子レベルまたは原子・電子レベルで理解しようとする分子生物学もその基礎的方法論は分子科学に負う所が多い。さらにまた、分子科学は分子反応の基礎的研究やラジカルなど不安定な化学種の研究を通して一見無関係と思える大気上層の科学的研究とも

関連している。特に分子科学の主要な目的である分子の個性の研究が進むときは新しい興味ある物質の開発が期待され、種々の合成材料を生み出すための分子の設計が可能となり、またレーザーの如き分子のエネルギー準位を利用した新技術の発展において分子工学というような新しい応用分野の展開が期待される。すなわち分子科学は種々の関連分野の研究の発展に寄与するのみでなく、また応用分子科学とも言うべき広範な研究分野につながりをもつものである。（以下略）

附記 2) 学術審議会の報告書（昭和 48 年 10 月 31 日）

分子科学研究所、基礎生物学研究所及び生理学研究所（仮称）の設立について（報告）

本審議会は、日本学術会議から設立の勧告があった研究所について、慎重に検討を行ってきましたが、そのうち「分子科学研究所」、「基礎生物学研究所」（勧告当初「生物研究所並びに生物科学研究交流センター」）及び「生理学研究所（仮称）」（勧告当初「人体基礎生理学研究所」）については、その基礎構想について審議のうえ、別紙により緊急に設立することが適当であるとの結論に達しましたので、ここに報告いたします。

分子科学研究所の設立について

1. 設立を緊急に必要とする理由

分子は物質の基本的構成単位であり、物質の示す性質や機能を担う根源であるとみなされる。そのため、諸物質の機能を深く知り、あるいは、これを高度に利用するためには、分子レベルにおける理解が望まれる。分子科学は、従来の化学に立脚しつつ、分子の持つ性質と機能を物理及び化学的な手法で体系づけようとする物理学と化学の境界領域の科学である。

分子科学は化学領域の最も基礎となる分野であって、この進展は、分子生物学など生命現象に関する分野や、化学、薬学、工業化学、宇宙科学さらには環境・資源・エネルギー問題にも新しい研究方法や概念を開発し、提供することが期待されるものである。

分子科学に関連するわが国の研究者の層は厚く、特に分子構造論、分子分光学、量子化学などの分野においては、すぐれた伝統を持ち、国際的にも高く評価された研究者を擁している。このすぐれた研究者を集め、異なる分野の研究者の協力のもとに分子科学の研究を格段に推進するとともに、全国関連研究者の共同研究の場として、さらには研究者の交流、国際学術交流への寄与、専門的基盤に立つ高度の研究者の養成、国際的な研究センターとしての機能を持つ総合的な共同利用の研究所を設立することが緊急に必要である。

2. 目 的

分子のもつ性質や機能を物理及び化学的方法を用いて、原子及び電子のレベルで研究し、更に新しい物質をつくり出す一般法則を探究することを目的とする。

3. 設置の形態

文部大臣所管の国立大学共同利用機関とする。（以下略）

附記 3）分子科学研究所創設準備会議山下次郎座長からの申し送り事項（昭和50年4月18日）

分子科学研究所創設の計画が、御関係の皆様の御尽力により、予定のとおり進行し、新研究所が発足する事態を迎えましたことは、創設準備会議委員一同ひとしく喜びに堪えないところであります。

われわれはまた新研究所が発展し、分子科学の研究諸分野において輝かしい成果を挙げられることを深く期待すると共に、国立大学共同利用機関としての特徴を発揮せられ、全国の大学附置研究所に対しても良い刺激を興えられることを強く望んでおります。

創設準備会議の専門分科会は全国の共同利用研究所の運営の経験に学び、分子科学研究所の組織、運営に関して種々の創意を盛り込んだ構想を立案いたしました。創設準備会議はこれらの構想について慎重に審議を重ね、結論を得たものにつきましては議事要旨に記録としてとどめてあります。また、上記結論に至る審議の経緯につきましては、各専門分科会議事要旨に記録がとどめてあります。もとより、分子科学研究所の組織、運営の大綱につきましては、法令によって定められておりますが、教授会の設置とその運営をはじめ、研究所が設置された段階で内規または運営上の処置にまかされるべき重要な問題が残されています。

こうした点につきましても十分御配慮下さいますよう要望いたします。なお、上記構想のうち組織運営に関する部分の主要点を整理すれば大要次のとおりであります。

(1) 教授会

分子科学研究所に内規により教授会を設置することはこの研究分野の実状にかんがみて最も適当と思われるます。

創設準備会議におきましても教授会の性格、機構、運営等について検討し、内規案として一応の成案をえておりますが、今後研究所内部において十分御検討をいただきたく存じます。

国立大学共同利用機関におきましては教授会は公的には設置されておらず、従って教授会の自治の慣習も存在いたしません。が、名目はともかく実質において、教授会が良識をもって自らを正し、所長のよき補佐として、その意志が尊重せられる慣習が確立されるよう切望いたします。

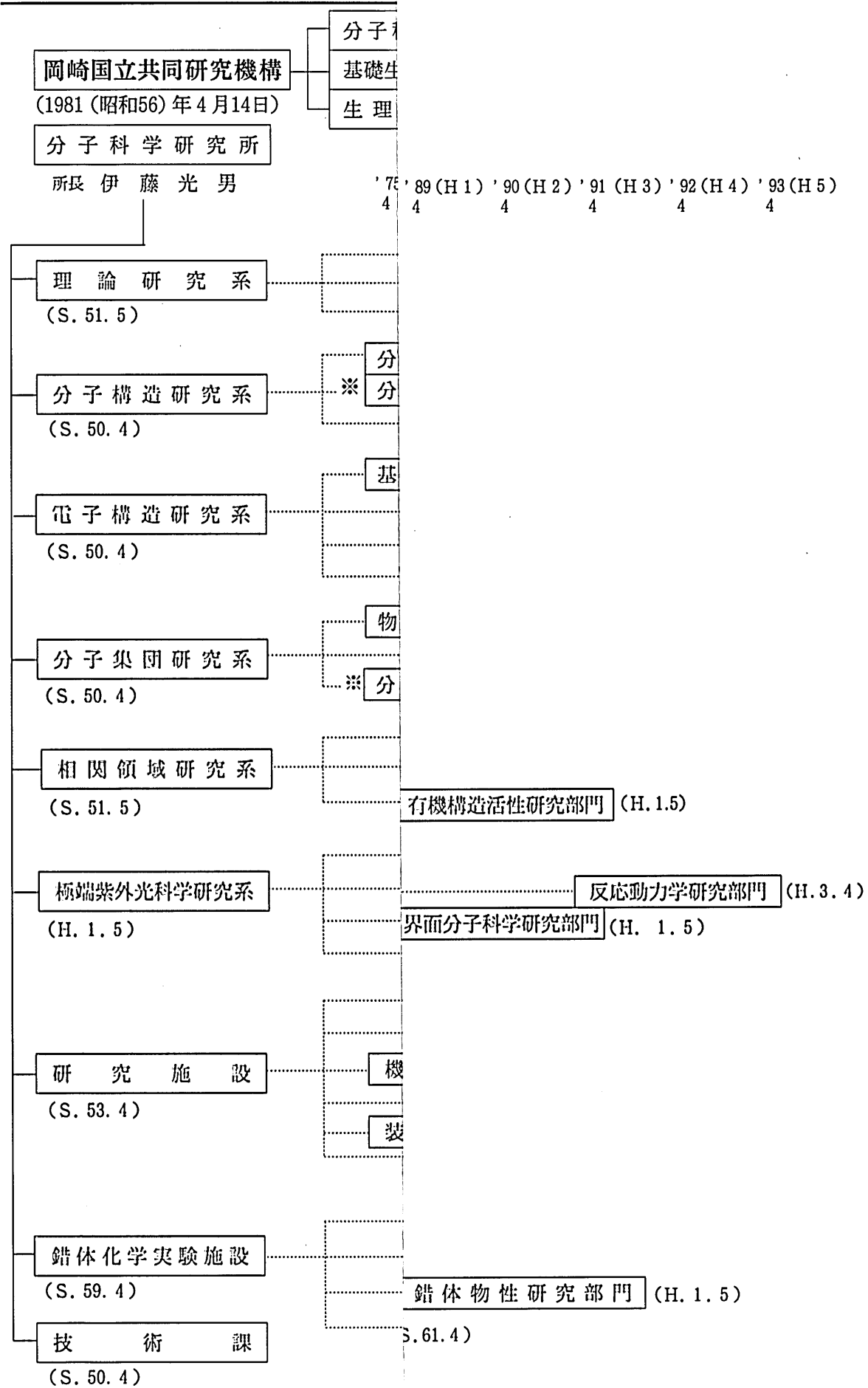
(2) 組織運営に関する分科会は、教授会は併任の客員部門を含む全教授、助教授が参加すること、教授会の下部機構として専門委員会を置くべきであり、これらの専門委員会には所外の研究者が約半数加わるべきであるとの案を立ててあります。御参考までに申し上げます。

(3) 分子科学研究所の教授、助教授および助手の採用及び昇任の選考は所長の推薦にもとづいて行われるものと了解しております。われわれとしてはこの方式の利点を認識するにやぶさかではありませんが、他面これは国立大学における人事が教授会の議を経て行われる慣習と異なるため、国立大学の教官側ではこの方式に対する疑念も少なくない現状であります。分子科学研究所におきましては、内規により教授会が設置されるならば、所長が教官の人事について教授会の意向を反映させることができると存じます。

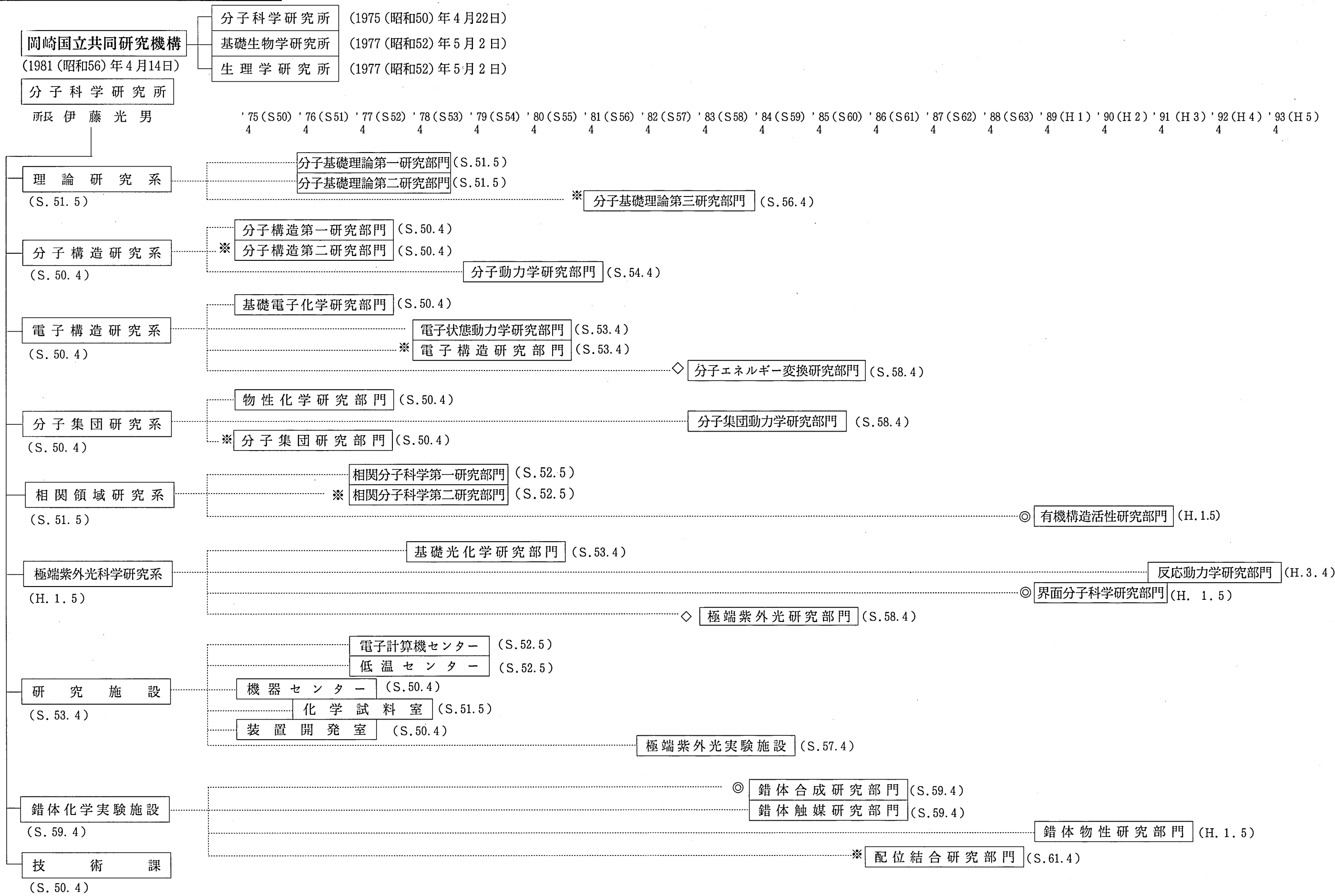
この点に関しましては格別の御配慮を要望する次第であります。

(4) 分子科学研究所の所長の選考は評議員で構成する会議が推薦したものについて行われることに定められています。申すまでもなく、これは広い視野から公正に適材を求めるという目的に合致した方式であります。が、形式的に申せば、教授会メンバーの意向とは無関係に所長の選考が行われることになります。この方式では評議会の意志と教授会の意図とを結ぶ役割は所長にゆだねられていると察せられますので、所長が両者の意志の疎通を計ることに努力され、運用の妙を発揮されることを要望いたします。

2-3 現在の組織とその発足



2-3 現在の組織とその発足



2-4 研究所の運営

分子科学研究所は、全国の大学共同利用機関としての機能をもつと同時に独自の研究・教育のシステムを有している。この項では、この両面についての研究所の運営のメカニズム（組織とそれぞれの機能）について説明する。

2-4-1 評議員会

分子科学研究所の運営は、基本的には研究所長の責任において行われているが、この所長を指名（選考）するのは評議員会である。評議員会はその他にも研究所の事業計画、その他の管理運営に関する重要事項について所長に助言する機能をもっている。現在（平成5年度）の評議員会の構成メンバーは下記の通りである。又、分子研創設以来の評議員メンバーの一覧表も資料として8-1に示してある。評議員会の大きな特長は2名の外国人評議員（在任機関は1期2年間で通常は2期在任）が存在することである。現在は、トロント大学の J. C. Polanyi 教授とロンドン王立研究所長の P. Day 教授にお願いしている。この外国人評議員は年に1回研究所を訪問する。この際所長は臨時評議員会を開催し研究所の現状を説明し、それに対して外国人評議員は提言をのべることになっている。この過程は研究所の点検・評価という見地から大変重要かつ有効である。

評 議 員

赤 池 弘 次	統計数理研究所長
秋 本 俊 一	東京大学名誉教授・学士院会員
伊 藤 昌 寿	東レ(株)会長・元日本化学会会長
岩 村 秀	東京大学大学院理学系研究科教授
加 藤 延 夫	名古屋大学総長
朽 津 耕 三	城西大学理学部教授
黒 田 晴 雄	東京理科大学総合研究所教授
佐々木 真 一	豊橋技術科学大学長
齋 藤 一 夫	国際基督教大学教授
櫻 井 英 樹	東北大学理学部教授
塩 野 宏	成蹊大学法学部教授
田 中 久	前京都薬科大学長
千 原 秀 昭	大阪大学名誉教授・(株)化学情報協会専務理事
堀 幸 夫	東京大学名誉教授・日本学術振興会理事
松 永 義 夫	神奈川大学理学部教授
森 本 英 武	豊田中央研究所長
守 谷 亨	東京理科大学理工学部教授
米 澤 貞次郎	近畿大学理工学部教授
John C. Polanyi	トロント大学教授
Peter Day	ロンドン王立研究所長

2-4-2 運営協議員会

運営協議員会は、通常は研究所内の教授11名、所外の大学等の教授10名によって構成され、共同研究計画に関する事項その他の研究所の運営に関する重要事項で、所長が必要と認めるものについて所長の諮問に応じる。所外委員は後述する学会等連絡会議によって推せんされる。運営協議員会は研究所の運営に関する全ての事項の議決・承認機関であり、特に重要な教官の選考を行う「人事選考部会」と、全国の大学等との共同研究の実施に関する諸事項を審議する「共同研究専門委員会」をその下部組織としてもっている。

所長選考に際しては、運営協議員会は評議員会会長の依頼に応じて2名の所長候補者を評議員会に推せんすることになっている。現委員（平成5年度）を以下に、又創設以来の委員を8-2に示す。外部委員の任期は原則として4年である。

運営協議員

飯 島 孝 夫	学習院大学理学部長
伊 藤 公 一	大阪市立大学理学部教授
小 川 禎一郎	九州大学大学院総合理工学研究科教授
小 尾 欣 一	東京工業大学理学部長
川 崎 昌 博	北海道大学電子科学研究所教授
京 極 好 正	大阪大学蛋白質研究所教授
近 藤 保	東京大学理学部教授
斎 藤 軍 治	京都大学理学部教授
塚 田 捷	東京大学理学部教授
山 口 兆	大阪大学理学部教授
宇理須 恆 雄	極端紫外光科学研究系教授
北 川 禎 三	分子構造研究系教授
齋 藤 修 二	分子構造研究系教授
田 中 晃 二	錯体化学実験施設教授
中 筋 一 弘	相関領域研究系教授（併）・大阪大学理学部教授
中 村 晃	錯体化学実験施設教授
中 村 宏 樹	理論研究系教授
花 崎 一 郎	電子構造研究系教授
丸 山 有 成	分子集団研究系教授
薬 師 久 彌	分子集団研究系教授
吉 原 經太郎	電子構造研究系教授

2-4-3 人事選考部会

人事選考部会は、教官候補者の選考に関する事項の調査審議を行う。委員は運営協議員会の所内委員5名と所外委員5名の計10名によって構成され、任期は4年である。教授・助教授および

助手候補者の選考は全て人事選考部会において行われ、最終1名の候補者が部会長より所長に答申される。なお所長はオブザーバーとして会議に参加する。助手候補者の選考においては、部会の下に助手選考小委員会を設置する。その委員は部会の所内、所外委員各1名以上および専門委員を含む通常は5名によって構成される。専門委員は部会委員以外の教員である。小委員会での選考の結果、その主査は最終1名の助手候補者を部会長に答申し、部会長は部会に報告し審議を行う。

所長は、部会長から受けた答申結果を教授会議（後述）に報告し、そこでの審議を終えたのち票決により教授会議としての可否を問うことになっている。

分子科学研究所における教官の任用は、“短期助手”の場合を除いて全て公募と部会委員の推せんによる候補者の中から選考される。教授又は助教授を採用する場合には、まず教授・助教授懇談会において当該研究分野及び募集方針の検討を行い、それに基づいて作成された公募文案を人事部会、教授会議で審議した後公募に付する。研究系でのいわゆる内部昇格は慣例として認められていない（但し、技官又はIMSフェローから助手への採用、あるいは総研大生又はその卒業生から助手への採用は妨げていない）。助手には任期が定められており、通常は6年（新設部門の場合は7年）とされており、任期を越えて在職を希望する場合は1年ごとに所長に申請してその許可を得なければならない。全ての教官及び職員の停年は60才である。

以下に現在（平成5年度）の人事選考部会委員を示す。

人事選考部会委員

伊 藤 公 一	（大阪市立大教授）	北 川 禎 三	（分子研教授）
川 崎 昌 博	（北大教授）	中 村 宏 樹	（分子研教授）
京 極 好 正	（阪大教授）	花 崎 一 郎	（分子研教授）
近 藤 保	（東大教授）	薬 師 久 彌	（分子研教授）
山 口 兆	（阪大教授）	吉 原 經太郎	（分子研教授）

2-4-4 共同研究専門委員会

全国の大学等との共同研究は分子研の共同利用研としての最も重要な機能の一つである。本委員会では、共同研究計画（課題研究、協力研究、招へい研究、研究会、施設利用等）に関する事項等の調査を行う。実際には、半年毎（前、後期）に、申請された共同研究に対して、その採択及び予算について審議し、運営協議員会に提案する。又、UVSOR 施設（極端紫外光実験施設）に関する共同研究については、別に専門委員会を設け、各研究者からの申請について審議し、運営協議員会に提案する。

共同研究専門委員会の委員は、運営協議員6名以内と学会等連絡会議（後述）の推挙に基づいて所長が委嘱する運営協議員以外の者6名以内によって構成される。現在（平成5年度）の委員の一覧表を示す。

共同研究専門委員会委員

小 川 禎一郎	（九大教授）	齋 藤 修 二	（分子研教授）
菅 原 正	（東大教授）	田 中 晃 二	（分子研教授）
閑 春 夫	（群馬大教授）	花 崎 一 郎	（分子研教授）

関一彦	(名大教授)	磯邊清	(分子研助教授)
塚田捷	(東大教授)	大峯巖	(分子研助教授)
		宮島清一	(分子研助教授)

2-4-5 学会等連絡会議

所長の要請に基づき学会その他の学術団体等との連絡，運営協議員及び共同研究専門委員各候補者等の推薦等に関することについて，検討し，意見をのべる。現在（平成5年度）の委員を以下に示す。

学会等連絡会議構成員

秋葉欣哉	(広大教授)	菅滋正	(阪大教授)
芦田玉一	(名大教授)	田中武彦	(九大教授)
岩村秀	(東大教授)	塚田捷	(東大教授)
宇田川康夫	(東北大教授)	西信之	(九大教授)
大橋裕二	(東工大教授)	齋藤修二	(分子研教授)
梶本興亜	(京大教授)	丸山有成	(分子研教授)
加藤肇	(神大教授)	吉原經太郎	(分子研教授)
茅幸二	(慶大教授)	磯邊清	(分子研助教授)
川崎昌博	(北大教授)	大峯巖	(分子研助教授)
小間篤	(東大教授)		

2-4-6 教授会議

2-2の（附記3）に示されている分子科学研究所創設準備会議山下次郎座長の申し送り事項に基づいて，分子研に教授会議をおくことが定められている。同会議は分子研の専任・併任の教授・助教授で構成され，研究及び運営に関する事項について調査審議し，所長を補佐する。所長候補者の選出にあたっては，教授会議は独立に2名の候補者を選出し，運営協議員会に提案しその審議に委ねる。又，教官の任用に際しては人事部会からの報告結果を審議し，教授会議としての可否の投票を行う。

2-4-7 主幹会議

主幹会議は所長の私的機関であり，所長の諮問に応じて研究所の運営等の諸事項について審議し，所長を補佐する。そこでの審議事項の大半は教授会議に提案されそこでの審議に委ねる。主幹会議の構成員は各研究系の主幹及び錯体化学実験施設長で，所長が招集し，主催する。

2-4-8 大学院委員会

総合研究大学院大学の運営に関する諸事項，学生に関する諸事項等の調査審議を行い，その結果を大学院専攻委員会に提案し，その審議に委ねる。大学院委員会は各系及び錯体化学実験施設か

らの各1名の委員によって構成される。

2-4-9 特別研究学生受入れ審査委員会

他大学大学院からの研究学生（特別研究生，従来受託学生と呼ばれていたもの）の受入れ及び修了認定等に関する諸事項の調査，審議を行う。同委員会は，各系及び錯体化学実験施設からの各2名の委員によって構成される。

2-4-10 各種の委員会

上記以外に次表に示すような“各種の委員会”があり，研究所の諸活動，運営等に関するそれぞれの専門的事項が審議される。詳細は省略する。

分子科学研究所各種の委員会

会 議 の 名 称	設 置 の 目 的 ・ 審 議 事 項	委 員 構 成	設 置 根 拠
* 点 検 評 価 委 員 会	研究所の設置目的及び社会的使命を達成するため自ら点検及び評価を行ない研究所の活性化を図る。	所長, 研究主幹 研究施設の長, 技 術課長, 他	点検評価規則
* 放 射 線 安 全 委 員 会	放射線障害の防止に関する必要な事項改善措置の勧告	放射線取扱主任者 職員 6, 技術課長	障害防止規程 障害予防規則
* 電 子 計 算 機 セ ン タ ー 運 営 委 員 会	計算機センターの管理運営に関する重要 事項 共同研究の採択に関する調査	センター長 センターの助教授 教授又は助教授 2 基生研・生理研の 教授又は助教授各 1 機構職員以外の学 識経験者 4	センター規則 委員会規則
* 極 端 紫 外 光 実 験 施 設 運 営 委 員 会	実験施設の運営に関する重要事項 共同研究の採択に関する調査	実験施設長 実験施設の助教授 教授又は助教授 4 職員以外の研究者 7	実験施設規則 委員会規則
* 錯 体 化 学 実 験 施 設 運 営 委 員 会	実験施設の運営に関する重要事項	実験施設長 施設の教授又は助 教授 2 施設以外の教授又 は助教授 2 職員以外の研究者 4	実験施設規則 委員会規則
日米科学技術協力にお ける「光合成による太 陽エネルギーの転換」 に関する計画委員会	協力事業の企画、立案及び実施に関する こと。他	関係研究者のう ち から13	委員会要項 (所長裁定)
* 実験廃棄物処理委員会	実験廃棄物の処理に関する指導及び 監督。処理方式の選定。貯蔵、処理施 設の運営に関すること。他	研究系の教官 3 化学試料室長, 同 助教授, 担当者等	委員会規則
* 極低温センター運営委員会	極低温センターの運営に関する重要事項	(原則) 各研究系から各 1 当該施設から若干 他の施設から若干	
* 機器センター運営委員会	機器センターの運営に関する重要事項		
* 装置開発室運営委員会	装置開発室の運営に関する重要事項		
* 設備・安全・節約委員会			
* 図 書 委 員 会	購入図書の選定。他		
アニュアルレビュー委員会	アニュアルレビューの出版		
分子研レターズ編集委員会	分子研レターズの出版		
* 情報ネットワーク委員会	情報ネットワークの維持、管理運営		

- 会議の名称欄* は, 「分子科学研究所」を省略
○ 設置根拠の欄 規則=岡崎国立共同研究機構で定めた規則, 略式で記載。記載なきは規定文無し。
○ 表以外に, 分子研コロキウム係, 自衛消防隊組織がある。

2-4-11 岡崎国立共同研究機構の委員会

会 議 の 名 称	設 置 の 目 的 ・ 審 議 事 項	分子研からの委員	設 置 根 拠
* 連 絡 会 議	機構の円滑な運営を図る	所長, 研究主幹 2 技術課長	連絡会議規程
岡 崎 研 究 所 長 会 議	研究所相互に関連のある管理運営上の重 要事項について審議するとともに円滑な 協力関係を図る。	所長	岡崎所長会議に 関する申合せ
* 点検評価連絡調整委員会	3 研究所共通の事項に関し点検及び評価 を行なう。	所長, 研究所点検評 価委員会委員各 2	通則 委員会規程
* 職 員 福 利 厚 生 委 員 会	レクリエーションの計画及び実施に関す ること, 職員会館の運営に関すること。他	教官 1 技官 1	委員会規程
* 共通施設等企画委員会	共通施設の将来計画に関する事項その他 共通施設の企画に関し必要な事項。	所長 研究主幹 1	委員会規程
* 情 報 ネ ッ ト ワ ー ク 管 理 運 営 委 員 会	情報ネットワークの管理運営に関する必 要事項。	所長, 研究主幹 1 電算機センター長	委員会規程
* 宿泊施設・宿舍委員会	宿泊施設(ロッジ)の運営方針・運営費 に関すること。(公務員) 宿舍の入居者 (入替えを含む)を選考すること。他	研究主幹 1	委員会規程
* 発 明 等 委 員 会	発明に係る権利, 民間等との共同研究・ 受託研究により作成したデータベース等 の帰属等に関する事項。これらの権利の 帰属について必要な事項。	研究主幹 2, 電算 機センター長 研究施設の長 1 技術課長	発明規程 データベース取 扱規程 委員会規程
* 放射線障害防止委員会	放射線施設の設置, 変更, 廃止に関する 事項。放射線障害の防止に関する重要事 項・研究所間の連絡調整。他	教授又は助教授 2 放射線取扱主任者 技術課長	障害防止規程
* 情報図書館運営委員会	情報図書館の運営に関する重要事項	教授 1 助教授 1	情報図書館規程 委員会規程
* 防 火 対 策 委 員 会	防火管理に関する内部規程の制定改廃 防火施設及び設備の改善強化 防火教育, 防火訓練の実施計画 防火思想の普及及び高揚 他	研究主幹 1 技術課長 放射線取扱主任者 高圧ガス保安員及 び作業責任者	防火管理規程 委員会規程
* 動 物 実 験 委 員 会	動物実験に関する指導及び監督 実験計画の審査。他	技官 2 技術課長	実験の指針 委員会規程
文 部 省 共 済 組 合 * 支 部 食 堂 運 営 委 員 会	営業種目, 営業時間。他	研究主幹 1 技術課長	委員会規程
岡 崎 ロ ー タ リ ー ク ラ ブ と の 交 流 委 員 会	岡崎南ロータリークラブが行なう交流事 業等に関する協議及び事業への協力	教官 1	

- 会議の名称欄* は, 岡崎国立共同研究機構を省略
○ 設置根拠の欄 規程=岡崎国立共同研究機構が定めた規程, 略式で記載。記載なきは規定文無し。

2-5 構 成 員

2-5-1 現在の構成員

伊藤光男 所長

植村泰忠 研究顧問
田丸謙二 研究顧問
長倉三郎 研究顧問, 名誉教授
福井謙一 研究顧問
田中郁三 研究顧問
廣田榮治 名誉教授
木村克美 名誉教授
諸熊奎治 名誉教授

理論研究系	研究主幹（併） 中村宏樹	
分子基礎理論第一研究部門	J.-F. Riehl	学振外国人特別研究員 5. 12. 7
岩田末廣 教授	吉田統	民間等共同研究員
大峯巖 助教授	分子基礎理論第二研究部門	
首藤啓 助手	中村宏樹	教授
J.L. Anchell 文部省外国人研究員 5. 12. 20～	朱超原	助手
Young Kee Kang 文部省外国人研究員 5. 12. 20～	森林健吾	学振特別研究員
J. Moc 学振外国人特別研究員 ～4. 10. 14	分子基礎理論第三研究部門（客員研究部門）	
D.G. Musaev 学振外国人特別研究員 ～5. 1. 16	北浦和夫	教授（大阪府立大 総合）
	上村正康	助教授（九州大理）
	染田清彦	助手

分子構造研究系	研究主幹（併） 北川禎三	
分子構造学第一研究部門	尾関博之	助手
齋藤修二 教授	分子動力学研究部門	
森田紀夫 助教授	北川禎三	教授
高野秀路 助手	加藤立久	助教授
Sang K. Lee 文部省外国人研究員 5. 12. 20 ～	松下道雄	助手
	水谷泰久	助手
	中島聡	協力研究員
	P. Stein	文部省外国人研究員 5. 7. 31～
	P.J. Jewsbury	学振外国人特別研究員 4. 2. 23～
三谷忠興 教授（北陸先端科学技術大学院大学）		
川口建太郎 助教授（国立天文台）		
小倉尚志 助手		

電子構造研究系	研究主幹（併） 吉原經太郎	
基礎電子化学研究部門	吉原經太郎	教授
松本吉慧 助教授	安積徹	教授（東北大理）
沢邊恭一 助手	中垣良一	助教授（金沢大薬）
富永圭介 助手	森義仁	助手
Yaung Sik Choi 文部省外国人研究員 5. 12. 26 ～	小林敬道	助手
内藤幸人 学振特別研究員	分子エネルギー変換研究部門（外国人客員研究部門）	
V.F. Kamalov 学振外国人招へい研究者 ～5. 10	Rull Perez Fernando	教授
Yuri A.Gruzdikov 学振招へい外国人研究者	（スペイン, ベラドリド大学 教授） 6. 3. 10（予定）～	
Lee, Jihwa 文部省外国人研究員 ～5. 8. 31	Gyula Rabai	助教授
Kim,Bongsoo 学振外国人特別研究員 5. 10. 31～	（ハンガリー, コッシュスラジヨス大学助教授） 5. 10. 1～	
Bongsoo Kim 特別協力研究員	E.L.Frankevich	教授
電子状態動力学研究部門	（ロシア化学物理エネルギー研究所研究室長） ～5. 6. 30	
花崎一郎 教授	L.S.Grigoryan	助教授
鈴木俊法 助教授	（アルメニア 物理学研究所固体物理及び高温超伝導部門磁気共鳴研究室室長） 5. 8. 31～	
高采正夫 助手		
戸野倉賢一 助手		
Lizala S.Bontuyan 特別協力研究員		
Vladimir Karlovich Vanag 文部省外国人研究員 5. 9. 3～		

分子集団研究系	研究主幹（併） 丸山有成	
物性化学研究部門	鈴木敏泰	助手
薬師久彌 教授	山室憲子	協力研究員
鹿野田一司 助教授	Jan Kalinowsky	文部省外国人研究員 5.9.24～5.12.22
鶴川彰人 助手	R.J.Whitehead	学振外国人特別研究員
中澤康浩 助手	中野千賀子	特別協力研究員
佐藤博彦 協力研究員	李永舫	特別協力研究員
I.I.Khairullin 学振外国人特別研究員 ～5.10.24	小浜恵一	受託研究員
Grigoryan Leonid 特別協力研究員	分子集団研究部門（客員研究部門）	
宮崎隆文 特別協力研究員	吉田明	教授（豊橋技大工）
分子集団動力学研究部門	大内幸雄	助教授（名大理）
丸山有成 教授	森健彦	助手
宮島清一 助教授	長谷川真史	助手
緒方啓典 助手		

相関領域研究系	研究主幹（併）吉原 經太郎
相関分子科学第一研究部門 中 筋 一 弘（併）教 授（大阪大理） 磯 邊 清 助教授 田 所 誠 助 手 阿 部 正 明 助 手 下 村 博 志 協力研究員	相関分子科学第二研究部門（客員研究部門） 青 山 安 宏 教 授（長岡技大工） 植 村 元 一 助教授（大阪市大理） 豊 田 二 郎 助 手 鈴 木 孝 義 助 手 有機構造活性研究部門（流動研究部門） 根 本 尚 夫 助教授 成 田 吉 徳 助教授 浅 尾 直 樹 助 手 白 井 聡 助 手
極端紫外光科学研究系 基礎光化学研究部門 小 杉 信 博 教 授 高 田 恭 孝 助 手 奥 山 克 彦 助 手 M. C. R. Cokett 学振外国人特別研究員 ～5. 1. 8 反応動力学研究部門 宇理須 恆 雄 教 授 見 附 孝一郎 助教授 間 瀬 一 彦 助 手 吉 田 啓 晃 助 手 Y-P.Zhang 学振外国人特別研究員 ～5. 11. 26 界面分子科学研究部門（流動研究部門） 川 副 博 司 教 授	研究主幹（併）宇理須 恆 雄 西 尾 光 弘 助教授 植 田 尚 之 助 手 林 浩 司 助 手 林 茂 利 受託研究員 極端紫外光科学研究部門(外国人客員研究部門) Valery A. Ivanov 教 授 （ロシア、ビルケント大学（トルコ）客員教授） 6. 3. 25（予定）～ Yuri A. Berlin 助教授 （ロシア、ロシア科学アカデミー セミョーノフ研究所室長） 5. 11. 1～ K.Stefanski 助教授 （ポーランド、ニコラス・コペルニクス大学 物理科助教授） ～5. 8. 31
研 究 施 設 電子計算機センター センター長（併）中 村 宏 樹 青 柳 睦 助教授 南 部 伸 孝 助 手 後 藤 稔 民間等共同研究員	極低温センター センター長（併）丸 山 有 成 機器センター センター長（併）齋 藤 修 二 富 宅 喜代一 助教授 坂 東 俊 治 助 手

美齊津 文 典 助 手 桑 原 大 介 助 手 化学試料室 室 長（併）花 葛 一 郎 山 下 敬 郎 助教授 田 中 彰 治 助 手 刈 込 道 徳 文部省内地研究員	装置開発室 室 長（併）北 川 禎 三 浅 香 修 治 助 手 北 川 宏 助 手 安 正 宣 助 手
極端紫外光実験施設 渡 邊 誠（併）教 授（東北大科学計測研） 磯 山 悟 朗 助教授 鎌 田 雅 夫 助教授 中 川 和 道 助教授〔神戸大（客員）〔発達科学部〕〕	施設長（併）薬 師 久 彌 田 中 慎一郎 助 手 平 谷 篤 也 助 手 濱 広 幸 助 手 木 村 真 一 助 手
錯体化学実験施設 錯体合成研究部門（流動研究部門） 福 田 豊 教 授 澤 田 清 助教授 市 田 光 助 手 佐 藤 敬 一 助 手 Magnus K. E. Sandstrom 文部省外国人研究員 5. 10. 7～ Farideh Jalilehvand 特別協力研究員	施設長（併）中 村 晃 長 尾 宏 隆 助 手 鈴 木 敦 之 助 手 石 田 豊 久 協力研究員 D.Y.Kondakor 学振外国人特別研究員 ～5. 6. 19 M.Kotora 学振外国人特別研究員 5. 5. 10～ 席 振 峰 特別協力研究員 K.M.Eduardovna 特別協力研究員 Waheeda Jahan Puspita 特別協力研究員
錯体触媒研究部門 中 村 晃 教 授 生 越 久 靖 教 授（京大工（客員）） 川 泉 文 男 助教授（名大工（客員）） D. T. Peter 助 手	配位結合研究部門（客員研究部門） 松 本 和 子 教 授（早稲田大理工） 永 澤 明 助教授（埼玉大理）
錯体物性研究部門 田 中 晃 二 教 授 高 橋 保 助教授	
技 術 課 第1技術班 理論研究系技術係 技官 齊 藤 真 司 技官 高 田 彰 二 分子構造研究系技術係 係長 岡 田 則 夫 技官 佐 藤 信一郎 技官 熊 倉 光 孝 電子構造研究系技術係	課長 内 田 章 技官 渡 邊 一 雄 技官 熊 葛 茂 一 技官 片 采 英 樹 第2技術班 班長 早 坂 啓 一 分子集団研究系技術係 係長 今 枝 健 一 技官 賀 市 幹 大

技官 宮 川 和 也	
関連領域研究系技術係	
技官 西 岡 孝 訓	
極端紫外光科学研究系技術係	
技官 服 部 秀 男	
技官 大 橋 治 彦	
技官 永 園 充	
第3技術班 電子計算機技術係	
係長 西 本 史 雄	
技官 手 島 史 綱	
技官 田 中 邦 彦	
技官 南 野 智	
極低温技術係	
(班長 早 坂 啓 一)	
係長 加 藤 清 則	
技官 高 山 敬 史	
第4技術班	
班長 酒 井 楠 雄	
研究機器技術係	
機器センター 技術主任 山 中 孝 弥	
技官 酒 井 雅 弘	
化学試料技術係	
技官 戸 村 正 章	

- * 整理日付は平成6年1月1日。
- * 外国人の研究者については5年4月以降概ね3ヵ月を越えて滞在した者及び整理日付（校正期間を含む）において滞在し3ヵ月を越えて滞在が予定される者を掲載した。
- * 特別協力研究員は整理日付（校正期間を含む）現在で掲載した。但し、3ヵ月以内の者は除いた。

2-5-2 定員・現員（平成5年6月28日 現在）		（現員／定員）				
	研 究 部 門	教 授	助教授	助 手	技 官	備 考
理 論 研 究 系	分 子 基 礎 理 論 第 一	0／1	1／1	1／2	…	
	分 子 基 礎 理 論 第 二	1／1	0／1	1／2	…	
	分子基礎理論第三（客員）	(1)／(1)	(1)／(1)	1／2	…	
分 子 構 造 研 究 系	分 子 構 造 学 第 一	1／1	1／1	2／2	…	
	分子構造学第二（客員）	(1)／(1)	(1)／(1)	2／2	…	
	分 子 動 力 学	1／1	1／1	1／2	…	
電 子 構 造 研 究 系	基 礎 電 子 化 学	1／1	1／1	2／2	…	
	電 子 状 態 動 力 学	1／1	1／1	2／2	…	
	電子構造（客員）	(1)／(1)	(1)／(1)	1／2	…	
	分子エネルギー交換(外国人客員)	(1)／(1)	(1)／(1)	…	…	
分 子 集 団 研 究 系	物 性 化 学	1／1	1／1	2／2	…	
	分 子 集 団 動 力 学	1／1	1／1	2／2	…	
	分子集団（客員）	(1)／(1)	(1)／(1)	2／2	…	
相 関 領 域 研 究 系	相 関 分 子 科 学 第 一	1／1	1／1	3／2	…	
	相関分子科学第二（客員）	(1)／(1)	(1)／(1)	2／2	…	
	有機構造活性（流動）	0／1	2／1	2／2	…	
極端紫外光化学 研 究 系	基 礎 光 化 学	1／1	1／1	1／2	…	
	反 応 動 力 学	1／1	1／1	2／2	…	
	界面分子科学（流動）	1／1	1／1	2／2	…	
	極端紫外光（外国人客員）	(0)／(1)	(1)／(1)	…	…	
電 子 計 算 機 セ ン タ ー		…	2／1	1／1	…	
極 低 温 セ ン タ ー		…	…	0／1	…	
機 器 セ ン タ ー		…	1／1	2／3	…	
化 学 試 料 室		…	1／1	1／2	…	
装 置 開 発 室		…	0／1	3／2	…	
極 端 紫 外 光 実 験 施 設		…	3／3	3／3	…	
(客員)		…	(1)／(1)	…	…	
錯 体 化 学 実 験 施 設	錯 体 合 成 （ 流 動 ）	1／1	1／1	2／2	…	
	錯 体 触 媒	1／1	…	1／1	…	
	(客員)	(1)／(1)	(1)／(1)	…	…	
	錯 体 物 性	1／1	1／1	2／2	…	
配 位 結 合 （ 客 員 ）		(1)／(1)	(1)／(1)	0／1	…	
技 術 課		…	…	…	42／49	
合 計		14／16	22／22	46／54	42／49	
(客員)		(7)／(7)	(8)／(8)			
(外国人客員)		(1)／(2)	(2)／(2)			

（ ）客員数で外数

2-5-3 人事異動状況（平成6年2月1日 現在）

(1) 専任研究部門人事異動

	所 長	教 授	助 教 授	助 手	技 官	IMSフェロー
就 任 者 数	4	21	35	116	109	38
転 出 者 数	3	9	20	72	68	32
現 員	1	12	15	44	41	6

(2) 流動研究部門人事異動

	錯 体 合 成			有 機 構 造 活 性			界 面 分 子 科 学		
	教 授	助教授	助 手	教 授	助教授	助 手	教 授	助教授	助 手
就 任 者 数	5	5	11	1	4	4	2	3	6
転 出 者 数	4	4	9	1	2	2	1	2	4
現 員	1	1	2	0	2	2	1	1	2

(3) 客員研究部門人事異動

	教 授	助 教 授
就 任 者 数	61	69
現 員	7	8

(4) 外国人客員研究部門人事異動

	教 授	助 教 授
分 子 エ ネ ル ギ ー 変 換 部 門	11	8
極 端 紫 外 光 部 門	9	8

2-6 各研究系の概要

2-6-1 研究系および研究施設

理論研究系

研究目的 分子科学は量子力学を中心とする理論の進歩に基づいて発展した。また実験的研究の成果は新しい理論の開発をうながすものである。本系では、実験部門と密接に連携した分子科学の基礎となる理論的研究を行う。

分子基礎理論第一研究部門

研究目的 分子科学の基礎となる理論的方法の開発及び分子の電子状態と化学反応性・分子構造の理論的研究

研究課題 1. 分子軌道計算に基づいて電子状態及び反応の動的機構に関する研究
2. 励起分子及び溶液内反応過程の電子論及び反応動力学的研究・溶液の構造とダイナミックス

分子基礎理論第二研究部門

研究目的 原子分子の動的諸過程、及び分子集合体の物性と構造の変化に関する理論的研究。

研究課題 1. 化学反応諸過程の動力学に関する理論的研究
2. 原子分子過程における電子状態遷移の理論的研究
3. 結晶における相転移と集団運動の理論的研究
4. 凝縮系における電子的励起の緩和と伝播の理論的研究

分子基礎理論第三研究部門

研究目的 原子、分子、凝縮物質の電子状態、動的過程及び構造の理論的研究

研究課題 1. 化学反応動力学の理論的研究
2. 分子間相互作用と分子集合体の構造と物性についての理論的研究
3. 化学反応動力学の理論的研究

分子構造研究系

研究目的 分子科学では分子内における原子の立体的配置を正確に知ることが重要であり、そのための実験手段としては回折法と分光法が用いられる。これらの方法を高感度化、高精密化すると共に新しい手段の開発を行う

分子構造学第一研究部門

研究目的 1. 分光学的方法による分子の構造の精密な決定と星間分子の

	観測への応用
	2. レーザーによる気体原子の運動の制御とその応用の研究
研究課題	1. ミリ波・サブミリ波実験室分光及び宇宙電波光による星間短寿命分子の研究
	2. 赤外半導体レーザーによる星間関連分子の分光とその帰属
	3. レーザー多光子励起による原子・分子の高電子励起状態の分光と動特性の研究
	4. 中性原子のレーザー冷却・トラッピングの研究とその応用
分子構造学第二研究部門	
研究目的	準一次元系の物質開拓。赤外半導体レーザー及びマイクロ波分光による星間分子の研究
研究課題	1. 特殊条件下におけるラマン分光技術の開発
	2. タンパク質におけるプロトン移動と電子伝達の構造化学
	3. 実験室分光による新しい星間分子の同定
	4. 波長可遠赤外レーザーを用いた高分解能分光法の開発
分子動力学研究部門	
研究目的	機能をもつ分子の動的構造とその反応性の研究
	凝集性物質中の分子の動的構造と機能性の関連性の研究
研究課題	1. ラマン分光法による生体分子反応中間体の分子構造の研究
	2. 磁気共鳴分光とラマン分光法による凝集系中の分子構造の研究

電子構造研究系

研究目的	分子の個性と電子構造との関係を実験的立場から研究し、分子のかくれた機能を開発するとともに、またこれを応用する研究を行う。
基礎電子化学研究部門	
研究目的	電子励起状態の研究及びその化学反応，エネルギー変換への応用
研究課題	1. 超高速レーザー誘起化学反応の研究
	2. 固体表面でのレーザー誘起化学反応
電子状態動力学研究部門	
研究目的	1. 化学反応及びこれに伴う緩和の素過程を明らかにする
	2. 自己秩序形成化学反応系の機能を明らかにする
研究課題	1. 励起分子の化学反応および緩和過程に関する研究
	2. 自己秩序形成化学反応の機構に関する研究
	3. 原子分子衝突や化学反応素過程に関する分光学的研究
電子構造研究部門	
研究目的	励起分子の動的挙動及び化学反応に及ぼす磁場効果の研究

研究課題	1. 励起分子の動的挙動の研究
	2. 化学反応に対する磁場効果の研究
分子集団研究系	
研究目的	新しい物性をもつ物質の構築ならびにその物性の研究
	分子と凝縮相の接点を求めながら，分子集合体の物性・反応の新領域の開発に取り組む
物性化学研究部門	
研究目的	分子性固体の化学と物理
研究課題	1. 導電性有機固体の合成と電子構造の研究
	2. 導電性有機固体の電子物性の研究
分子集団動力学研究部門	
研究目的	興味ある物性をもつ新しい物質あるいは物質状態の構築と解析探究
研究課題	有機電荷移動錯体，層状物質，薄膜，液晶などにおける構造及び電子状態の動力学的研究
分子集団研究部門	
研究目的	分子及び分子集団の構造と物性の研究
研究課題	興味ある物性を持つ新物質の開発

関連領域研究系

研究目的	分子科学の成果を関連分野の研究に反映させ，また関連分野で得られた成果を分子科学の研究に取り入れるなど両者の連携をはかるための関連領域に関する研究を行う
関連分子科学第一研究部門	
研究目的	有機化学や有機金属錯体化学をはじめとする分子科学関連分野の諸問題を，特に分子の構造とその機能という分子科学の観点から研究
研究課題	1. 新共役電子系の設計，構築と新物質開発
	2. 複核遷移金属錯体の合成。構造と化学特性
関連分子科学第二研究部門	
研究目的	有機化学や有機金属化学をはじめとする分子科学関連分野の諸問題を，特に分子の構造と反応性の観点から研究
研究課題	1. 遷移金属錯体を用いた新しい電子系の開拓
	2. 遷移金属錯体を用いた新しい有機合成反応の開拓
有機構造活性研究部門	
研究目的	有機反応の詳細機構及び構造と反応性・選択性との関係の解明並びに有機反応制御のための分子設計と新方法論の開発
研究課題	1. 金属酵素活性中心の人工設計と機能に関する研究

	2. 光加溶媒分解反応の反応機構に関する研究
	3. 新機能性有機金属化合物の設計と合成
	4. 有機金属を用いた新反応開発
極端紫外光科学研究系	
研究目的	極端紫外光実験施設のシンクロトロン光源は、軟X線領域から遠赤外光までの広範囲な光を安定に供給している。本研究系では、この放射光源を用いて、極端紫外光科学の新分野を進展させる中核としての役割を果たす。特に極端紫外光による気相・固体・固体表面の光化学及び新物質合成を目指した研究を展開する。
基礎光化学研究部門	
研究目的	分子及び分子集合体の光化学反応並びに化学反応素過程の研究
研究課題	1. 軟X線分光による分子及び分子集合体の光化学・光物性研究 2. 電子励起分子・分子クラスターの光化学と反応素過程の研究
反応動力学研究部門	
研究目的	極端紫外光を用いた化学反応動力学の研究
研究課題	1. 極端紫外光による表面光化学反応とその場観察の研究 2. 負イオン光脱離法による分子あるいは分子集合体の反応素過程の研究 3. 分子の超励起状態の検出とその緩和過程の追跡 4. 極端紫外光を用いた表面反応動的過程の研究
界面分子科学研究部門	
研究目的	極端紫外光を用いる表面・界面現象の原子・分子レベルでの研究
研究課題	1. 無機ワイドキャップ結晶の電子構造と伝導性 2. シンクロトロン放射光励起によるII, VI族化合物のCVD 3. 極端紫外光照射によるアモルファス半導体の光誘起現象の解明
極端紫外光研究部門	
研究目的	世界唯一の化学専用極端紫外光を利用した化学の反応、合成等全般についての研究
研究課題	1. 多次元非可積分系動力学の半古典論的研究 2. 高分子における電気伝導機構の解明

研究施設

電子計算機センター		化学反応素過程の理論的研究
研究目的		
研究課題	1. 化学反応動力学の基礎的研究 2. 分子科学大規模計算の手法の開発とその応用	
極低温センター		低温での物性研究
研究目的		
研究課題	新しい機能性物質の低温物性の研究	
機器センター		有機分子集合体の電子励起状態に関する動力学的研究及び分子凝集体の物性的研究
研究目的		
研究課題	1. 金属クラスターの構造と反応性の研究 2. 分子クラスターの反応動力学 3. ピコ秒時間分解けい光分光法の開発 4. 研究機器の利用技術ソフトウェアの開発 5. 超微粒子の物性研究	
化学試料室		分子科学的に興味ある芳香族化合物の合成及び複素環化合物の合成
研究目的		
研究課題	1. 新規な芳香族化合物と性質 2. 新機能性複素環化合物の開発 3. 芳香環及び複素環を含む分子集合体の性質	
装置開発室		新しい実験装置の設計及び製作，既設装置の性能向上に関する研究
研究目的		
研究課題	1. 精密物性測定装置の開発 2. 低次元物質の物性研究 3. 赤外領域での非線型分光法の研究 4. 研究機器の自動制御の研究	
極端紫外光実験施設		シンクロトロン放射による極端紫外光源の研究・開発とこれを用いた分子科学の研究
研究目的		
研究課題	1. 極端紫外光源の研究・開発 2. 極端紫外用観測システムの開発と気体及び固体の分光学的研究	
錯体化学実験施設		金属原子を含む化合物を中心とする広範な物質を対象とし，その構造，物性，反応性等を研究し，新物質創造のための設計，
研究目的		

錯体合成研究部門

研究目的

研究課題

開発を目的とする。

特色ある物性，機能を持つ金属錯体の合成

- 1．クロモトロピックな金属錯体の合成機能と溶液内挙動の研究
- 2．非極性溶媒中の錯体の生成反応と構成

錯体触媒研究部門

研究目的

研究課題

新しい型の遷移金属錯体の合成とそれからの選択的触媒反応の研究

- 1．低原子価モリブデン錯体の合成と構造的決定
- 2．錯体触媒作用の研究
- 3．選択的な錯体反応の探索

錯体物性研究部門

研究目的

研究課題

金属錯体の合成と物質変換に関する研究

- 1．二酸化炭素固定と窒素サイクルの解明
- 2．前周期遷移金属錯体上での選択的な物質変換

配位結合研究部門

研究目的

研究課題

金属錯体における配位結合と錯体の構造と物性に関する研究

- 1．分子集合体の化学と集合効果
- 2．生体関連錯体化学とその応用

2-6-2 技 術 課

技術課はその形態上一つの孤立したグループではなく， 7 付属研究施設及び6 研究系に配属された技官によって構成されている。しかし，この形態は技官をそれぞれの付属研究施設や研究系に“はりつける”ことを意味しているのではなく，その間の積極的な交流の促進に対する期待感から採用されたものである。技術課は，このようないわば開かれたシステムをもつことにより，研究系，付属研究施設と縦糸，横糸の関係を保ちつつ分子科学という布の作成に寄与している。また，技術レベル向上と全国理工系技術者の相互の技術交流をはかることを目的として，毎年「技術研究会」を開催し，その報告書として「技術研究会報告」を出版していたが，現在は高エネルギー物理学研究所，核融合科学研究所及び分子科学研究所の間で回り持ちで開催し，全国の大学，研究所等より多数の技術者が参加している。

2-7 特別研究と岡崎コンファレンス

2-7-1 特別研究

特別研究は、研究系各研究部門及び研究施設で行われている研究を基盤とし、研究所内外の研究者が協力して行う独創的かつ開発的な研究であり、特に研究系及び研究施設の枠を超えて、研究者が協力集中して行っている。その発展に資するため、国際的規模での研究集会——岡崎コンフェレンス——を年2～3回開催している。これらの研究の推進のためリサーチ・フェロー（特定領域奨励研究員）やIMSフェロー（協力研究員）も参加する。

研究所創設以来、4期に亘って下記の特別研究を実施している。

第一期特別研究

- (1) 興味ある物性をもつ分子設計の研究（昭和50～54年度）
- (2) 分子との相互作用にもとづくエネルギー変換の研究（昭和50～54年度）

第二期特別研究

- (1) 分子機能の開発ならびに制御に関する研究（昭和55～59年度）
- (2) 分子過程によるエネルギー移動、エネルギー変換の研究（昭和55～59年度）
- (3) 物質進化の分子科学に関する研究（昭和57～61年度）

第三期特別研究

- (1) 分子場の設計・構築とそれによるエネルギーの化学的変換の研究（昭和60～平成元年度）
- (2) 分子素子の基礎研究（昭和60～平成元年度）
- (3) 物質進化と自己秩序形成の分子科学（昭和62～平成3年度）

第四期特別研究

- (1) 分子制御の化学と物質変換・エネルギー変換に関する研究（平成2～5ケ年計画）
- (2) 分子素子研究の物質科学的展開（平成2～5ケ年計画）

以下に、これらの特別研究の主旨および具体的テーマと研究代表者をあげる。

第一期特別研究

- (1) 興味ある物性をもつ分子設計の研究（昭和50～54年度）

資源有限の時代を迎えて、天然の有用物質に代るものを生み出し、さらに進んで天然にはない新しい物性を持った物質を設計し、生み出すのは分子科学の一つの使命である。

具 体 的 な 研 究 テ ー マ	研究代表者
素反応過程のポテンシャル面の動力学	諸 熊 奎 治
固体表面の電子構造と触媒作用	塚 田 捷
興味ある物性をもつ有機結晶の研究	井 口 洋 夫
縮合多環芳香族化合物をもとにした三次元化合物の合成と反応	岩 村 秀
レーザー誘起による高選択性有機反応	吉 原 經太郎 高 谷 秀 正

- (2) 分子との相互作用に基づくエネルギー変換の研究（昭和50～54年度）

エネルギー問題の重要性は言をまたないが、これを解決するのも分子科学の大きな使命であるとの立場に立って、他に先駆けて、エネルギー変換の研究の重要性を提案し、その基礎並びに応用の研究を推進する。

具 体 的 な 研 究 テ ー マ	研究代表者
高励起原子分子及び分子イオンの構造と反応	廣 田 榮 治 齋 藤 修 二
高等植物の光合成初期過程	吉 原 經太郎
固体界面を利用した光エネルギー変換	坂 田 忠 良
イオンー分子反応におけるエネルギー変換	小谷野 猪之助

第二期特別研究

- (1) 分子機能の開発ならびに制御に関する研究（昭和55～59年度）

分子の持つ機能を、分子構造に基づいて理解するのが、分子科学の立場である。分子構造の研究と機能の開発は、表裏一体の関係にある。新しく開発された分子の機能は、しばしば分子構造の研究に新しい手段をもたらし、また分子構造の研究から新しい分子機能を持つ分子の設計を可能とする。

あるいは、機能を制御する手段が見出される。新しい分子構造の開発は、望ましい物性を持つ物質系の開発につながるものである。また分子機能の制御により、分子間相互作用や化学反応の制御を可能とし、好ましい化学反応の設計を行うことができる。

分子機能の開発と制御に関する研究は、互いに綿密な関係にあり、これを総合して行うことによってさまざまな発想を促し、大きな成果が期待されるものである。このような観点からの総合研究は、分子科学研究所のような組織によってはじめて行うことができるものであり、特別研究にふさわしいものである。

主 題	具 体 的 な 研 究 テ ー マ	研究代表者
分子設計による新材料の開発	電荷移動錯体の機能開拓	井 口 洋 夫
	有機基底多重項種の設計・構築および反応	岩 村 秀
	環状構造をもつ金属錯体の構造と化学特性	伊 藤 翼
	新しい反応活性有機遷移金属錯体の合成とその機能の開発	高 谷 秀 正
分子制御による化学反応の制御と設計	金属ポルフィリンおよびヘム蛋白による酸素分子活性化構造	北 川 禎 三
	活性化分子の動的分子構造と制御に関する研究	廣 田 榮 治 齋 藤 修 二
	X線分光法の開発とその触媒構造研究への応用	宇田川 康 夫

- (2) 分子過程によるエネルギー移動・エネルギー変換の研究（昭和55～59年度）

現代は、新しいエネルギーの原理を探究する時代である。太陽エネルギーはもとより、各種の手段で開発される熱や電気もこれを広く利用するためには、化学エネルギーとして物質に託して貯蔵し得る形、すなわち、燃料に変えねばならない。これまでは、石炭、石油のもつ化学エネルギーを熱や電気に変えて利用してきたが、これとは正に逆の過程が要求される。光や電気・熱によって水を分解し、得られる水素を燃料とするのはその例である。石炭、石油に代って水素を用いる時代が来るであろう。植物が太陽エネルギーによって水を分解する光合成の過程は、分子間のエネルギー移動を通して行われる。広く分子過程によるエネルギー移動とエネルギー変換の原理を追求することは、分子科学の発展の上からも基本的課題である。同時に時代の要請に沿う責務である。

エネルギー問題の重要性を早くから予見し、分子科学の立場から「分子との相互作用によるエネルギー変換」を主題とする特別研究を行ってきた。その結果、エネルギー変換に関する分子の機能、特に光子との相互作用について理解を深めるとともに、実験と理論の両面から研究手段の開発を行った。この間エネルギー事情の推移は、世界的規模においてあらゆる面から研究の推進を要請するに至っている。ここに上記の特別研究の成果を土台として、さらに広い立場から、かつ具体的な問題意識のもとに研究を発展し、エネルギー問題の解決に貢献する意図がある。

主 題	具 体 的 な 研 究 テ ー マ	研究代表者
分子内および 分子間エネ ルギー移動の研 究	分子内エネルギー移動	吉 原 經太郎
	分子による光エネルギー変換における磁場効果	林 久 治 谷 本 能 文
	イオンー分子衝突におけるエネルギー移動	小谷野 猪之助
	レーザー励起状態光電子分光法の開発と励起分子の動的過程の研究への応用	木 村 克 美
	分子クラスター内での振動エネルギー移動および活性ラジカル種の関与する反応の動力学の分子線法による研究	正 島 宏 祐
光エネルギー の電気および 化学エネルギー への変換	光合成に関する理論的研究	柏 木 浩
	エネルギー変換システムとしての固体界面	塚 田 捷
	色素・半導体の光触媒作用と光エネルギー変換への応用	坂 田 忠 良

(3) 物質進化の分子科学に関する研究（昭和57年～61年）

創成期の大爆発以後、我々の宇宙は地球上における生命の発生、進化を含む百数十億年の歴史を経て来ている。この間初期に存在した水素のような軽い原子から次第に重い原子を生じ、これらが結合して分子を作り、さらに次第に成長して生命発生のもとになる各種有機物分子を生ずる過程が存在した。このような過程を物質の進化という概念でとらえることができる。近年、電波天文学や宇宙探査技術の進歩に伴い、宇宙空間の色々な場所で驚くべき多種の有機分子が発見され、今後ますます多くの分子が見つかるものと期待される。このような分子は宇宙空間の特定の場所（星間雲中あるいは惑星上）における固有の環境、たとえば分子密度、温度、輻射源の有無あるいは原料物質の存在比等に依存してそれぞれ固有の進化過程を経ると考えられ、いかなる環境のもとで、どのような化学反応が起きたかを知ることが我々の宇宙およびその進化に対する認識を深める上で重要である。従来この点について、ある程度の推測が行われているが、分子科学

的な見地から詳しく研究された例はほとんどない。この点で、分子科学の立場からこの進化過程を詳しく調べることは宇宙の進化及び生命の発生という重要な問題の解明に大きく寄与するとともに、分子科学の分野における新しい発展の緒口をもたらすものと期待される。

主 題	具 体 的 な 研 究 テ ー マ	研究代表者
宇宙における 分子の形成	高励起振動状態における分子の性質と化学反応	花 崎 一 郎
	星間分子のミリ波、サブミリ波分光	齋 藤 修 二
凝縮系にお ける物質進化	低温におけるイオンー分子放射性結合反応	小谷野 猪之助
	低温凝縮系における光および粒子衝撃による分子進化	西 信 之

第三期特別研究

(1) 分子場の設計・構築とそれによるエネルギーの化学的変換の研究（昭和60年～平成元年度）

本研究では、制御された条件のもとに高効率・選択的なエネルギー変換を行うことを目的としている。そのために電磁波や静磁場等の外場と分子の相互作用の研究及び特別の機能をもった微視的な反応環境（分子場）の構築とその解析を行った。

具 体 的 な 研 究 テ ー マ	研究代表者
活性分子の選択的生成と動的分子構造	廣 田 榮 治
励起分子のエネルギー移動と反応に対する外部磁場効果の研究	中 垣 良 一
レーザー多光子イオン化による励起状態の光電子分光の研究	木 村 克 美
光化学反応におけるホット分子機構	吉 原 經太郎
分子線法による表面反応の光励起促進効果の研究	正 畠 宏 祐
触媒過程による炭酸ガス・窒素の還元	坂 田 忠 良
新しい高機能遷移金属錯体の設計と合成	高 谷 秀 正
配位化合物の励起状態に対する時間分解ESR法の応用	高 木 芳 弘
X線ラマン散乱EXAFSの軽原子への拡張	宇田川 康 夫

(2) 分子素子の基礎研究（昭和60年～平成元年度）

物質の最小単位である分子の持つ固有の特性を用いて構築した素子を分子素子と呼び、その機能はそれを構成する1個1個の分子が所有している。従って兆の単位（ 10^{12} 個）原子の集合を単位とする現在の半導体素子の数億倍の機能をその分子素子に持たせることが可能であると同時に、分子の機能が使えるので全く新しい素子機能の発現も期待できる。

分子素子の基本的な機能としては、電子の輸送、貯蔵及び制御の三つが重要であるので、それぞれを達成するための基礎研究を行った。

具 体 的 な 研 究 テ ー マ	研究代表者
有機電導体の理論及び実験的研究：輸送に関する研究分野	井 口 洋 夫
混合原子価を基盤とする新物質の開発：輸送・貯蔵・制御に関する研究分野	丸 山 有 成
有機固体中のスピンの挙動：制御に関する研究分野	岩 村 秀
有機固体中のプロトンの挙動：輸送・貯蔵・制御の全てに関する研究分野	三 谷 忠 興

(3) 物質進化と自己秩序形成の分子科学（昭和62～平成3年度）

創成期の大爆発以後、地球上における生命の発生、進化を含む百数十億年の宇宙の歴史において、初期に存在した水素のような軽い原子が次第に成長して生命発生のもとになる有機物分子を生ずる過程が存在した。このような過程を物質の進化という概念でとらえることができる。近年、電波天文学や宇宙探査技術の進歩に伴い、宇宙空間の色々な場所で多種の有機分子が発見され、今後ますます多くの分子が見つかるものと期待される。このような分子が宇宙空間のいかなる環境のもとで、どのような化学反応によってできるかを知ることが我々の宇宙及びその進化に対する認識を深める上で重要である。また非線形の化学反応によって反応系が自己制御を行う結果として起る自己秩序形成（振動反応、空間的秩序の形成）の現象は生命の発生や生命体の機能にとって本質的に重要であると考えられているが、我々は生命発生以前の進化過程においてもこのような現象が重要な役割を果たしたと考えている。分子科学の立場からこの進化過程を詳しく調べることは宇宙の進化及び生命の発生という重要な問題の解明に大きく寄与するとともに、分子科学の分野における新しい発展の緒口をもたらすものと期待される。

具 体 的 研 究 テ ー マ	研究分担者
星の生成と進化における分子とその役割	廣 田 榮 治 小谷野 猪之助
凝縮系における物質進化と自己組織化	西 信 之
自己秩序形成	花 崎 一 郎* 中 村 宏 樹

* 研究代表者

第四期特別研究

(1) 分子制御の化学と物質変換・エネルギー変換（平成2～5ケ年計画）

エネルギー変換に関する第一～三期の特別研究によって多くの新しい知見を得たが、より高効率を目指すには、制御された条件のもとに選択的に反応を進行させることが重要である。第四期においては、分子を物理的あるいは化学的に制御して特異な状態におく“分子制御” 技術を確立し、規定された状態にある分子の示す化学反応性やその集合体がつくる分子場の特徴を調べることによって、物質変換やエネルギー変換の新しい方法を見つけることを目標とする。

主 題	具 体 的 研 究 テ ー マ	研究代表者
精密に状態制御した分子系の創出とその反応性	レーザー冷却及びトラッピングによる原子・イオンの運動制御	森 田 紀 夫
	分子状態の精密制御とこれにもとづくエネルギー変換	吉 原 經太郎
	高励起分子・イオンの動的過程	木 村 克 美
	生物系のエネルギー変換	北 川 禎 三
	新しい型の金属酸化物・硫化物のクラスター合成	磯 邊 清
	超臨界状態における電解質溶液の構造と物性	大 瀧 仁 志
分子集積場の構築による高次機能発見と物質変換・エネルギー変換	金属錯体や固体表面の触媒反応機構の理論	諸 熊 奎 治
	表面反応の動力学的研究	正 畠 宏 祐
	X線分光法によるin situ条件下での吸着相の研究	宇田川 康 夫
	固体表面でのレーザー誘起光化学反応	松 本 吉 泰
	分子間ポテンシャルとシミュレーションによる分子集合体の構造と物性	北 浦 和 夫

(2) 分子素子の物質科学的展開（平成2～5ケ年計画）

本特別研究の目的は、将来分子素子の主要な素材となるであろう新しい物質系及びその物性を支配する新しい概念を見出すことである。その意味において、具体的な柱としては以下にのべる4つの分野をとりあげ、研究を進めた。

具 体 的 研 究 テ ー マ	研究代表者
有機電導体の理論及び実験的研究	薬 師 久 彌
混合原子価を基盤とする新物質の開発	丸 山 有 成
有機固体中の電子スピンの挙動	丸 山 有 成
有機固体中のプロトンの挙動	三 谷 忠 興

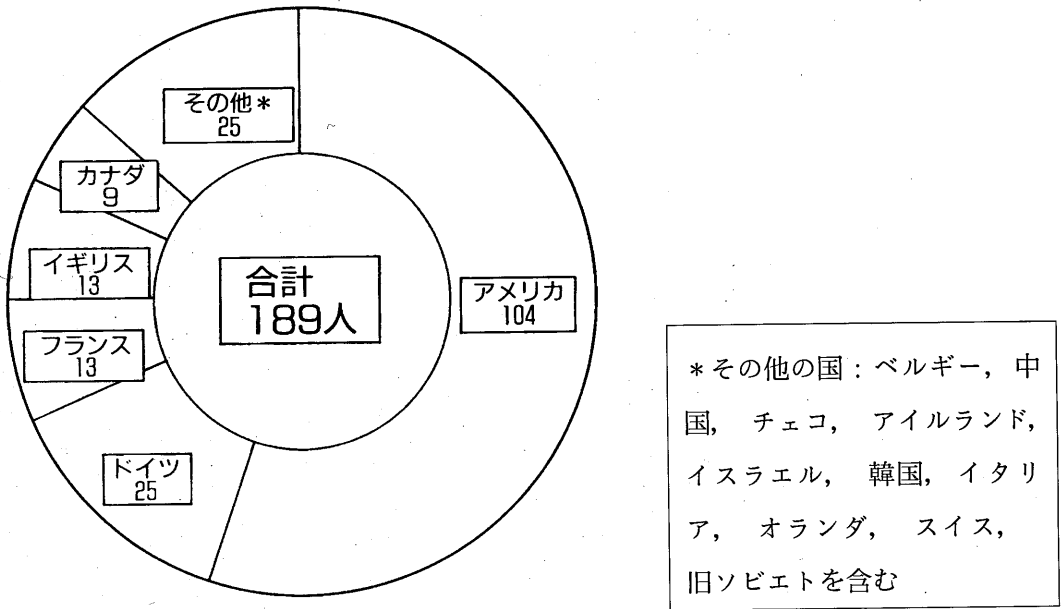
2-7-2 岡崎コンファレンス

岡崎コンファレンスは分子科学研究所の特別研究の一環として昭和51年に始められ、以来50回を数えようとしている。コンファレンスの性格はこの会の提案者であった赤松秀雄初代所長の次の言葉につきる。

“会議は研究発表を主旨とするものではなく、共通の興味と問題に関して、いわば思索の過程において相互に経験や意見を交換することを主旨とする非公式の会合である。そのためには、参加者相互の信頼と尊敬が基調となるものであって、会議は非公開であり、また参加者の意見は当人の許可なくして公表してはならない。(赤松秀雄、分子研レターズ、1号より)”

この方針は今日まで貫かれており、討論の場であることが明記されている。コンファレンスの主題は全国の研究者の提案を受けて選考し、採択された主題の提案者を中心とした世話人に、外国人招待者を含めたすべての運営を一任することになっている。その分野で活発に研究を行っている第一線の外国人研究者と国内の研究者がひざをまじえて非公式に論議を交わすことによって、問題に対する意識を深め展望を拓く契機となっている。またそこで形成された人間関係は研究面のみならずあらゆる面で大きな影響を及ぼしている。若い研究者を刺激し彼らの研究意欲をかきたてていることも重要である。平成5年3月までに46回開催され、その成果は内外の研究者から高く評価されている。

岡崎コンファレンス招へい外国人の国別人員 (1993年3月現在)



1976年1月に行われた第1回岡崎コンファレンスから現在までの参加研究者総数2,000名、その内外国人研究者は約190名である。参加者はノーベル賞受賞者を含む研究の第一線に立つ研究者であり、毎回活発な議論が重ねられてきた。また外国人研究者の重複招待者は10周年記念の岡崎コンファレンスを除くと皆無であった。これは課題の選択が「十分に議論し尽くせるように限定した内容とする」ことが徹底したことと分子科学の広い視野からなされたことによると考えられ、今後ともこの方針で進められる。

開催一覧及び参加外国人研究者（招待）

回	課題，開催日，提案代表者	外国人招待者及び参加者
1	「光電極過程」 S. 51. 1.14～1.16 坪村 宏（大阪大学教授）	H. Gerischer（フリッツハーバー研究所,分子研評議員,マックスプランク協会会長） A. J. Bard（テキサス大学,現アメリカ化学会誌編集委員長）
2	「分子設計の基礎としての理論化学」 S. 51. 2.15～2.18 土方 克法（電通大学教授）	P. W. Atkins（オックスフォード大学） P. S. Bagus（IBMサンノゼ研究所） C. Moser（CECAM, パリ）
3	「分子個体における運動自由度」 S. 51. 2.15～2.18 千原 秀昭（大阪大学教授）	J. G. Powles（ケント大学） C. H. Wang（ユタ州立大学, 分子研招へい外国人研究員）
4	「共鳴及び非線型ラマン分散」 S. 52. 1.18～1.20 坪井 正道（東京大学教授） 田隅 三生（東京大学）	T. G. Spiro（プリンストン大学） F. A. Miller（ピッツバーグ大学） W. Siebrand（カナダ国立研究所）
5	「分子・分子結晶の高エネルギー励起状態」 S. 52.12. 4～12. 7 田仲 二郎（名古屋大学教授）	E.E. Koch（ドイツ電子シンクロトロン研究所） 井口 道生（アルゴンヌ国立研究所） G. E. Leroi（ミシガン州立大学）
6	「興味ある物性をもつ有機半導体－その電子構造の解明を求めて」 S. 53. 2.13～2.15 佐野瑞香（電通大学助教授） 井口洋夫（分子研）	F. Willig（フリッツハーバー研究所） L. B. Schein（ゼロックス社）
7	「高分解能分子分光の現状と将来」 S. 53. 9.4～9. 5 廣田 榮治（分子研）	J. W. C. Johns（カナダ国立研究所） S. G. Kukolich（アリゾナ大学）
8	「原子・分子・固体表面間の相互作用」 S. 54. 2.19～2.21 諸熊 奎治（分子研）	W. A. Goddard Ⅲ（カリフォルニア工科大学） R. P. Messmer（ジェネラルエレクトリック社） J. C. Tully（ベル研究所）
9	「反応性中間体の分子設計－カルベン種を中心として」 S. 55. 1. 7～1.9 岩村秀（分子研）	R. A. Moss（ラトガース大学） M. Jones, Jr.（プリンストン大学） P. P. Gaspar（ワシントン大学）
10	「分子性結晶の励起子－輸送過程の見地から」 S. 55. 2.4～2. 6 井口洋夫（分子研）	H.C. Wolf（シュトゥットガルト大学） G.J. Sloan（デュボン研究所,ウィルミントン） A. Zewail（カリフォルニア工科大学）

回	課題, 開催日, 提案代表者	外国人招待者および参加者
11	「分子内ポテンシャル研究の展望」 S. 12. 3~12. 5 鈴木 功 (筑波大学教授) 町田勝之輔 (京都大学助教授) 田隅 三生 (東京大学)	I. M. Mills (リーディング大学) G. Zerbi (化学工業研究所, イタリア) A. C. Albrecht (コーネル大学) R. N. Jones (東京工業大学) S. Krimm (ミシガン大学)
12	「化学及び生化学過程における遷移金属錯体の役割」 S. 55.12.11~12.13 高谷 秀正 (分子研)	J. P. Collman (スタンフォード大学) R. Pettit (テキサス大学, オースチン校) J. K. Stille (コロラド州立大学)
13	「短寿命分子とイオン-星間過程におけるその役割」 S. 56. 9. 8~9.10 齋藤 修二 (分子研)	G. Herzberg (カナダ国立研究所) 岡 武史 (シカゴ大学) G. Winnewisser (ケルン大学)
14	「光化学反応初期過程」 S. 56.10.20~10.22 又賀 昇 (大阪大学教授) 吉原経太郎 (分子研)	G. Porter (王立研究所) R. M. Hochstrasser (ペンシルバニア大学) A. Weller (マックスプランク研究所, 生物物理化学研究所) J. K. Thomas (ノートルダム大学)
15	「分子線によって生成する分子及びクラスターの分光学と動力学」 S. 57.11.15~11.17 伊藤 光男 (東北大学教授) 近藤 保 (東京大学助教授) 茅 幸二 (慶應大学教授) 木村 克美 (分子研) 花崎 一郎 (分子研)	J. Jortner (テルアビブ大学) R. N. Zare (スタンフォード大学) J. P. Simons (ノッティングダム大学) R. E. Smalley (ライス大学, ヒューストン)
16	「分子の動的挙動に対する磁場効果」 S. 58.1.17~1.19 林 久治 (理化学研究所)	Yu. N. Molin (ソビエト科学アカデミー, 化学動力学・燃焼研究所) G. L. Closs (シカゴ大学) A. Tramer (パリ南大学) M. Lambardi (グルノーブル理科医科大学)
17	「芳香族性と芳香族化合物」 S. 58. 9. 26~9. 28 村田 一郎 (大阪大学教授) 井口 洋夫 (分子研)	F. Vogtle (ボン大学, 有機化学, 生化学教室) W. Schmidt (アーレンスブルグ大学, 生化学教室) W. C. Herndon (テキサス大学, エルパソ校)
18	「化学反応機構の理論の現状と将来」 S. 59. 1. 19~1. 21 西本 吉助 (大阪市立大教授)	J. T. Hynes (コロラド大学) D. G. Truhlar (ミネソタ大学) T. H. Dunning, Jr. (アルゴンヌ国立研究所) J. C. Lorquet (リエージュ大学) 吉峰 恵 (IBMサンノゼ研究所)

回	課題, 開催日, 提案代表者	外国人招待者及び参加者
19	「宇宙空間における分子の形成と進化」 S. 59. 3.19~3.21 花崎 一郎 (分子研)	D. K. Bohme (ヨーク大学, カナダ) A. Bossard (パリバラルデマルネ大学) E. Herbst (デューク大学) W. M. Irvine (マサチューセッツ大学) J. L. Stief (NASAゴダード宇宙飛行センター)
20	「機能化界面を用いた光化学的電子移動」 S. 59. 8.18~8.20 田伏 岩夫 (京都大学教授)	M. A. Fox (テキサス大学オースチン) A. J. Frank (太陽エネルギー研究所) M. Gratzel (EPF, ローザンヌ) A. Heller (ベル研究所) G. Hodes (ワイツマン研究所) M. G. Kinnaird (京都大学) A. Mackor (応用有機化学研究所) T. J. Meyer (ノースカロライナ大学) A. J. Nozik (太陽エネルギー研究所) J. L. Sessler (京都大学) F. Willig (フリッツハーバー研究所)
21	「特異な電子状態を有する金属ボルフィリン及びヘムタンパク質の物性」 S. 60. 1.29~1.31 小林 宏 (東京工業大教授) 北川 禎三 (分子研)	D. A. Reed (南カリフォルニア大学) A. Dedieu (ルイパスツール大学) J. W. Buchler (有機化学研究所) T. Yonetani (ペンシルバニア大学) J. Zimmer (フロリダ州立大学)
22	「EXAFSとその物性への応用」 S. 60. 3.18~3.20 黒田晴雄 (東京大学教授)	E. A. Stern (ワシントン大学) F. W. Lytle (ボーイングアエロスペース社) D. C. Koningsberger (アイントホーヘン工科大学) P. H. Citrin (ベル研究所)
23	「分子科学10年, 進歩と将来動向」 S. 60. 5. 7~5. 8 井口 洋夫 (分子研) 廣田 榮治 (分子研)	G. Herzberg (カナダ国立研究所) W. Klemperer (ハーバード大学) G. C. Pimentel (カリフォルニア大学) S. A. Rice (シカゴ大学) A. Weller (マックスプランク研究所) H. C. Wolf (スタットガルト大学) P. O. Lowdin (フロリダ大学) R. G. Parr G. C. Hall (京都大学) 全 武植 (韓国高等科学技術院)
24	「凝一次元系に於ける新物性の展望-電荷移動と電子-格子相互作用」 S. 60.12.12~12.14 辻川 郁二 (京都大学教授) 丸山 有成 (分子研) 三谷 忠興 (分子研) 那須奎一郎 (分子研)	P. Day (オックスフォード大学) A. J. Heeger (カリフォルニア大学サンタバーバラ) T. J. Marks (ノースウエスタン大学) M. H. Whangbo (ノースカロライナ州立大学) B. K. Chakraverty (フランス国立科学研究所)

回	課題, 開催日, 提案代表者	外国人招待者及び参加者
25	「光異性反応の動的過程」 S. 61. 1.16~1.18 伊藤 道也 (金沢大学教授) 廣田 襄 (京都大学教授) 関 春夫 (群馬大学教授)	J. C. Scaiano (カナダ国立研究所) H. P. Trommsdorff (グルノーブル科学薬学大学) R. A. Mathies (カリフォルニア大学バークレー) M. A. El-Sayed (カリフォルニア大学ロサンゼルス) P. F. Barbara (ミネソタ大学)
26	「星間空間及び彗星における分子過程」 S. 61. 6.26~6.28 花崎 一郎 小谷野猪之助 (分子研) 齋藤 修二 (分子研) 西 信之 (分子研)	J. M. Greenberg (ライデン大学) A. Hjalmarsen (シャルマース工科大学) D. Smith (バーミンガム大学) N. G. Adams (バーミンガム大学)
27	「高スピン分子とスピン整列」 S. 61. 9. 8~9.10 伊藤 公一 (大阪市立大教授) 岩村 秀 (分子研)	D. J. Klein (テキサスA&M大学) A. A. Ovchinnikov (ソ連科学アカデミー化学物理研究所) W. Weltner, Jr. (フロリダ大学)
28	「極端紫外光による物性化学」 S. 62. 2.5~2. 7 井口 洋夫 (分子研) 渡邊 誠 (分子研)	F. C. Brown (イリノイ大学) J. C. Klein (ストラスブール大学) V. Saile (ハンブルグシンクロトン放射研究所) T. K. Sham (ブルックヘブン研究所) R. Stockbauer (アメリカ国立標準局)
29	「イオン-イオン並びにイオン溶媒相互作用に関する分子論的考察」 S. 62. 5.26~5.28 大瀧 仁志 (東京工業大学教授) 齋藤 一夫 (国際基督教大学教授) 大峯 巖 (分子研)	J. Barthel (レーゲンスブルグ医学) Y. Ducommun (ローザンヌ大学) P. J. Rossky (テキサス大学オースティン)
30	「化学過程における電子のダイナミックス」 S. 62.10.28~10.30 田仲 二郎 (名古屋大学教授) 吉原経太郎 (分子研)	A. J. Hoff (ライデン州立大学) S. R. Ovshinsky (エネルギーコンバージョンデバイス研) G. W. Robinson (テキサス工科大学) J. R. Miller (アルゴンヌ国立研究所) R. A. Marcus (カリフォルニア工科大学)
31	「気相クラスターのイオン化過程」 S. 63. 2.10~2.12 朽津 耕三 (東京大学教授)	H. Haberland (フライブルグ大学) E. Recknagel (コンスタンツ大学) W. C. Lineberger (コロラド大学) K. D. Jordan (ピッツバーグ大学) A. W. Castleman, Jr. (ペンシルバニア州立大学) L. Woste (ローザンヌ工科大学)
32	「励起分子の化学挙動についての理論化学」 S. 63. 9.27~9.29 笛野高之 (大阪大学教授)	R. J. Buenker (ウッパタル大学) S. R. Langhoff (アメリカ航空宇宙局エームス研究センター) J. P. Malrieu (ツールズ大学・フランス科学財団) R. Schinke (マックスプランク流体力学研究所) M. Shapiro (ワイツマン研究所) D. R. Yarkony (ジョン・ホプキンス大学)

回	課題, 開催日, 提案代表者	外国人招待者及び参加者
33	「生化学分子の前生物的合成とキラリティの起源」 S. 63.12. 1~12. 3 原田 馨 (筑波大学教授)	J. R. Cronin (アリゾナ州立大学) G. E. Tranter (ウェルカム研究所) L. Barron (グラスゴー大学) W. Thimann (ブレーメン大学)
34	「燃料における化学反応」 S. 63.12.20~12.22 神野 博 (京都大学) 幸田清一郎 (東京大学助教授) 林 光一 (名古屋大学講師)	D. Gutman (カソリック大学) L. B. Harding (アルゴンヌ国立研究所) R. K. Hanson (スタンフォード大学) T. Just (カリフォルニア大学) C. K. Westbrook (カリフォルニア大学) J. Wolfrum (ハイデンベルク大学)
35	「金属クラスター化合物の合理的合成と金属多中心骨格構造に基づく協同現象」 H. 元. 5.23~5.25 齋藤 太郎 (大阪大学教授) 山崎 博史 (理化学) 伊藤 翼 (東北大学教授) 磯邊 清 (分子研)	B. F. Johnson (ケンブリッジ大学) A. Simon (マックスプランク研究所) R. D. Adams (サウスカロライナ大学) J. K. Burdett (シカゴ大学)
36	「水素-電子結合系での物性の創造」 H. 元.11.13~11.15 三谷 忠興 (分子研) 榎 敏明 (東京工業大学助教授) 中筋 一弘 (分子研)	A. J. Epstein (オハイオ州立大学) S. I. Chan (カリフォルニア工科大学) F. Fillaux (CNRS) J. Halpern (シカゴ大学) U. Haeberlen (マックスプランク研究所)
37	「酸性物高温超伝導体-その物質と超伝導機構-」 H.2. 2.13~2.15 田仲 二郎 (名古屋大学教授) 武居 文彦 (東京大学教授) 北沢 宏一 (東京大学教授)	C. Vettier (ラウエ・ランジェバン研究所) J. M. Tranquada (ブルックヘブン国立研究所) N. P. Ong (プリンストン大学) T. Timusk (マクマスター大学) F. J. Himpsel (IBM研究所センター (ヨークタウンハイツ)) N. Nucker (核物理研究所)
38	「生体系金属錯体の構造と動的側面」 H.2.10.16~10.18 山内 脩 (名古屋大学教授) 森島 績 (京都大学教授) 北川 禎三 (分子研)	H. Sigel (バーゼル大学無機化学研究所) I. Bertini (フィレンツェ大学) T. O'Halloran (ノースウェスタン大学) T. M. Loehr (オレゴン科学技術大学院大学)
39	「分子素子を目指した機能分子の開発とその組織化」 H. 2.10.25~10.27 清水 剛夫 (京都大学教授) 小林 孝嘉 (東京大学助教授) 丸山 有成 (分子研)	J. L. Bredas (モン大学) I. Brus (AT&Tベル研究所) C. Flytzanis (エコール・ポリテクニク量子化学研究所) J. Simon (ESPI無機化学研究所)

回	課題，開催日，提案代表者	外国人招待者及び参加者
40	「非線型化学反応と自己秩序形成」 H. 3. 2.23～1. 2 5 北原 一夫（東京工業大学教授） 中村 宏樹（分子研） 花崎 一郎（分子研） 吉川 研一（名古屋大助教授）	A. Zhabotinsky（生物物理学研究所） I. R. Epstein（ブランディス大学） J. P. Laplante（カナダ陸軍士官学校） K. Showalter（ウェストバージニア大学） R. Harding（W.R. グレース社研究所） G. J. D. Dewel（ベルギー自由大学） R. Larter（パデュー大学）
41	「有機反応過程研究における理論化学と物理有機化学との接点」 H. 3.9.30～10. 2 速水 醇一（京都大学教授） 西本 吉助（大阪市立大教授） 野依 良治（名古屋大学教授）	A. Pross（ベングリオン大学） R. M. O'Ferrall（ダブリン大学） I. H. Williams（バス大学） J. P. Richard（ケンタッキー大学） J. F. Bunnett（カリフォルニア大学）
42	「分子科学：現状と将来」 H. 4. 1. 7～1. 9 井口 洋夫（分子研） 正畠 宏祐（分子研） 中村 宏樹（分子研）	M. S. John（KAIST） C. T. Chang（原子分子研究所） M. Inokuti（アルゴンヌ国立研究所） W. H. Miller（カリフォルニア大学及びローレンス・バークレイ研） R. M. Noyes（オレゴン大学） Z. Herman（ヘイロフスキー物理化学・電子化学研究所）
43	「レーザー光電子分光の新展開」 H. 4. 3.10～3.12 木村 克美（分子研）	K. H. Bowen（ジョンホプキンス大学） P. M. Johnson（ニューヨーク州立大学ストーニブルック校） H. O. Lutz（ビーレフェルト大学） K. M. Dethlefs（ミュンヘン工科大学） M. White（ブルックヘブン国立研究所） R. N. Compton（オークリッジ国立研究所）
44	「化学反応理論の新しい展開」 H. 4.11. 4～11. 6 諸熊 奎治（分子研） 中村 宏樹（分子研） 中辻 博（京都大学教授） 岩田 末廣（慶應大学教授）	T. Ziegler（カルガリー大学） H. J. Werner（ビーレフェルト大学） D. C. Clary（ケンブリッジ大学） J. M. Bowman（エモリー大学） K. Wilson（カリフォルニア大学） K. Schulten（イリノイ大学）
45	「金属錯体における分子内及び分子間電荷移動の化学」 H. 4.12. 8～12.10 中村 晃（大阪大学教授） 大瀧 仁志（分子研）	A. G. Sykes（ニュー・キャッスル・アポン・タイン大学） N. D. Yordanov（ブルガリア科学アカデミー）
46	「シンクロトロン放射による分子科学研究の現状と将来の展望」 H.4.12.16～12.18 正畠宏祐（分子研） 渡邊 誠（分子研） 鎌田雅夫（分子研） 磯山悟朗（分子研）	W. Braun（ドイツ電子シンクロトロン放射研究所） S. Krinsky（ブルックヘブン国立研究所） P. Lablanquie（パリ南大学） Y. T. Lee（カリフォルニア大学） I. Lindau（ルント大学） P. Weightman（リバプール大学） G. Zimmerer（ハンブルグ大学）

2-8 共同研究

大学共同利用機関の重要な機能として，所外の分子科学及び関連分野の研究者との共同研究を積極的に推進している。そのために共同利用研究者宿泊施設を用意し，共同研究専門委員会で採択されたテーマには，旅費及び校費の一部を支給する。次の7つのカテゴリーに分類して実施している。（公募は前期・後期（年2回），関係機関に送付。）

- (1) 課題研究：所外の複数のグループと所内のグループが特定の課題について行う研究で2年間にまたがることも可能。
- (2) 協力研究：所内外の研究者が相互に協力して行う研究。
- (3) 研究会：分子科学の研究に関連した特定の課題について，所内外の研究者によって企画される研究討論集会。
- (4) 施設利用：研究施設に設置された機器の個別的利用。
- (5) UVSOR 課題研究：数名の研究者又は複数のグループによる開発的な研究で，1年あるいはそれ以上にわたるもの。
- (6) UVSOR 協力研究：所内外の研究者が協力して行う研究。（原則として1対1による研究で所内用の観測システムの使用を含む。）
- (7) UVSOR 施設利用：所内外の研究者が原則として共同利用の観測システムを使用する研究。

平成4年度

- (1) 課題研究

課 題 名	提 案 代 表 者
反応素過程における溶媒分子の関与とそのダイナミックス 遷移金属錯体のd電子- π 電子相互作用の制御と固体物性 励起金属原子の緩和と反応 欠電子性遷移金属錯体の機能	梶本興亜（京大・理） 小林速男（東邦大・理） 綱島 滋（東工大・理） 高橋 保（分子研）

- (2) 協力研究及び招へい協力研究

「光解離反応のダイナミックスに関する理論的研究」

始め 129件

(3) 研 究 会

研 究 会 名	提 案 代 表 者
有機無機複合系の導電性と磁性	薬師久彌（分子研）
液体及び混合液体中の分子配列	大瀧仁志（分子研）
若手分子科学者のための物理化学研究会	野々瀬真司（東大・理）
構造制御された多中心金属イオンによる複合反応場の設計	市川 勝（北大・触媒研）
振動分光法による物質の時間・空間変化の追跡	中島信一（阪大・工）
分子動力学と化学反応性に関する研究会	大峯 巖（分子研）
Dynamical Processes in Molecules and Molecular Assemblies（分子及び分子集合体における動的過程）	花崎一郎（分子研）
サブミリ波望遠鏡建設による星間化学と星間物理の新展開	山本 智（名大・理）

(4) 施 設 利 用

① 機器利用

「ポルフィリン金属錯体の分子内磁氣的相互作用の機構」始め 85件

② 計算機利用

「遷移金属錯体の単結晶X線回折の解析」始め 188件

(5) UVSOR 課題研究

課 題 名	提 案 代 表 者
SOR を利用した赤外分光法の開発	薬師久彌（分子研）
分子の内殻イオン化及び多価イオン化に伴う解離過程の研究	小谷野猪之助（姫工大・理）

(6) UVSOR 協力研究及び招へい協力研究

「真空紫外光源を用いたシアン化合物の解離過程の研究」始め 46件

(7) UVSOR 施設利用

「層状絶縁体（雲母）の光物性」始め 109件

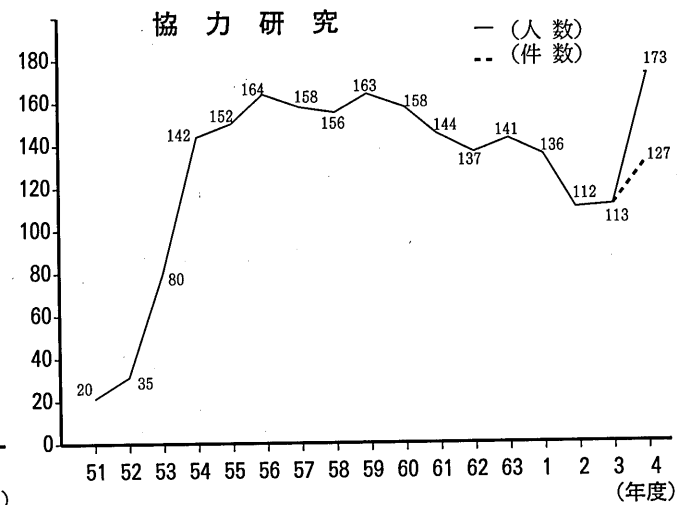
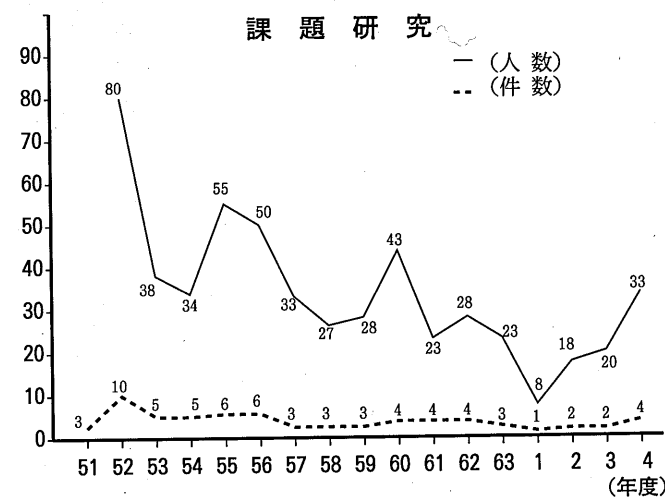
分子科学研究所共同研究実施一覧

年 度 項 目	昭和51	52	53	54	55	56	57	58	59	備 考
	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	
課 題 研 究	3	10	5	5	6	6	3	3	3	人数:登録人数
協 力 研 究	20	35	80	142	152	164	158	156	163	
招へい協力研究	0	9	23	25	18	13	23	15	12	
所長招へい	0	12	25	16	31	49	35	48	44	
研 究 会	13	9	14	16	11	11	12	8	8	人数:旅費支給者
施設利用Ⅰ	25	37	40	60	68	58	56	49	57	件数:許可件数 人数:許可人数
施設利用Ⅱ			30	92	109	112	127	139	145	”
合 計	61	112	217	356	395	413	414	418	432	

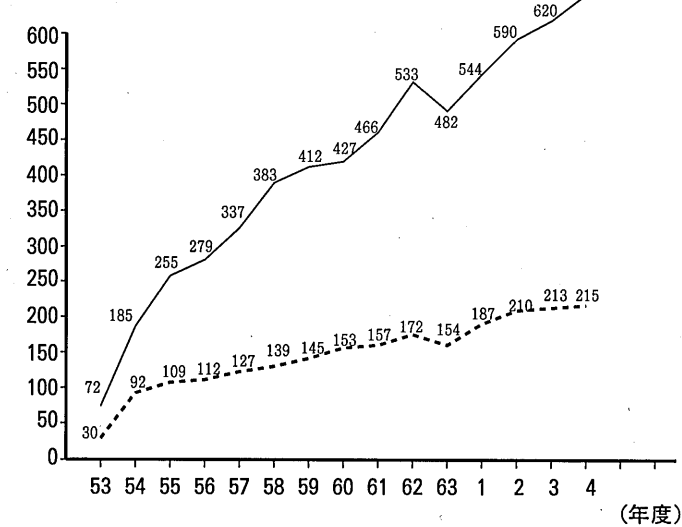
年 度 項 目	昭和60	61	62	63	平成元	2	3	4	5	備 考
	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	
課 題 研 究	4	4	4	3	1	2	2	4		人数:登録人数
協 力 研 究	158	144	137	141	136	112	113	127		
招へい協力研究	12	10	8	6	1	3	2	2		
所長招へい	57	56	88	95	77	161	175	141		
研 究 会	10	9	9	9	10	10	10	8		人数:旅費支給者
施設利用Ⅰ	68	54	67	85	79	77	88	85		件数:許可件数 人数:許可人数
施設利用Ⅱ	153	157	172	154	187	210	213	215		”
合 計	462	434	485	493	490	575	603	582		

分子科学研究所UVSOR共同研究実施一覧

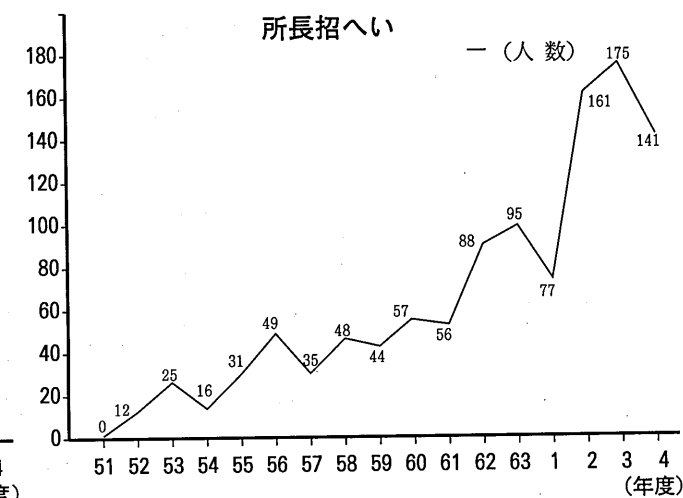
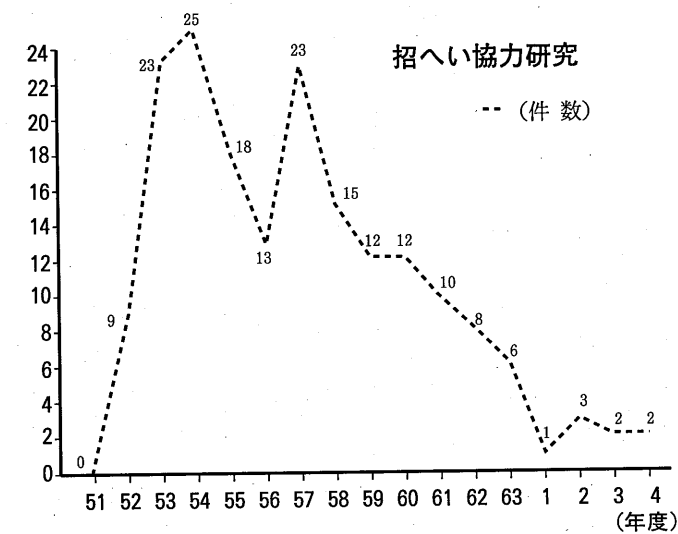
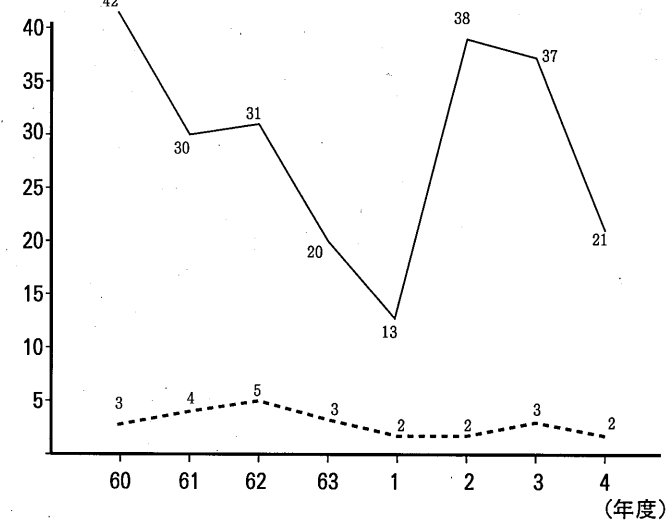
年 度 項 目	昭和60	61	62	63	平成元	2	3	4	5	備 考
	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	件数: 人数	
課 題 研 究	3	4	5	3	2	2	3	2		人数:登録人数
協 力 研 究	14	15	12	15	19	28	27	39		
招へい協力研究	10	9	7	5	2	4	5	7		
研 究 会	4	3	3	2	3	2	2	2		人数:旅費支給者
施 設 利 用	33	59	75	89	107	105	111	109		件数:許可件数 人数:許可人数
合 計	64	90	102	114	133	141	148	159		



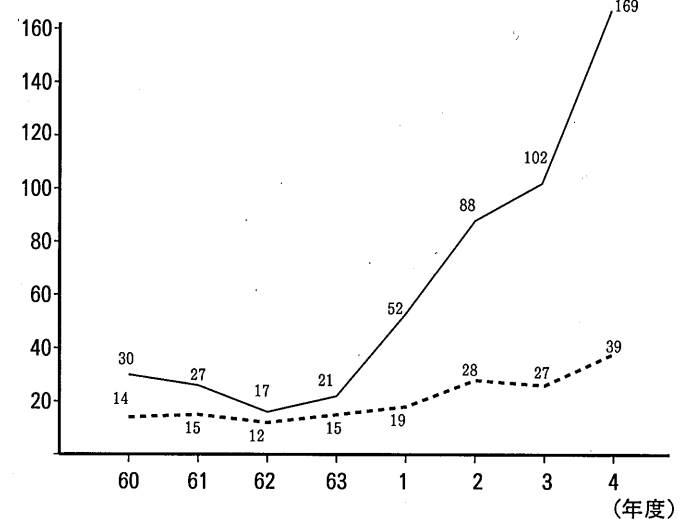
施設利用 (II)



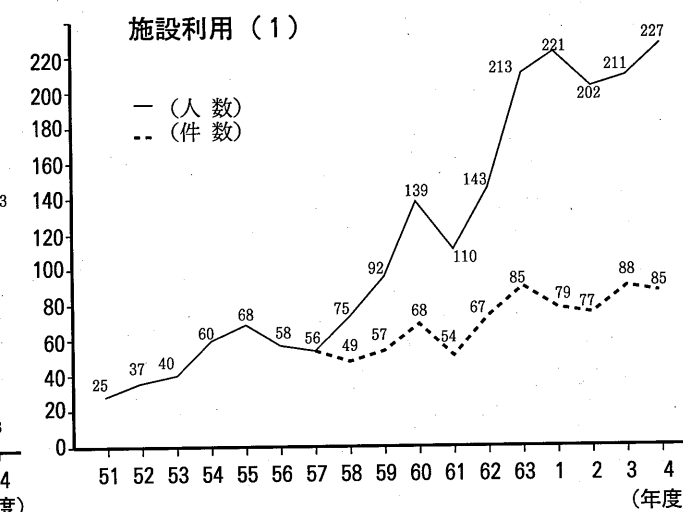
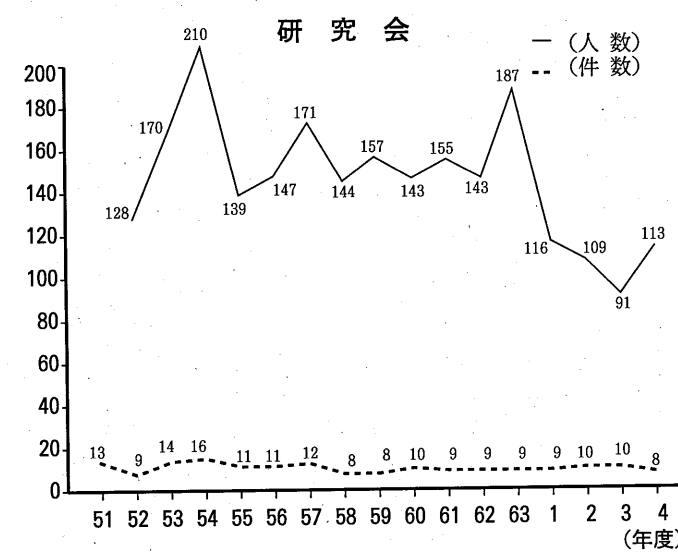
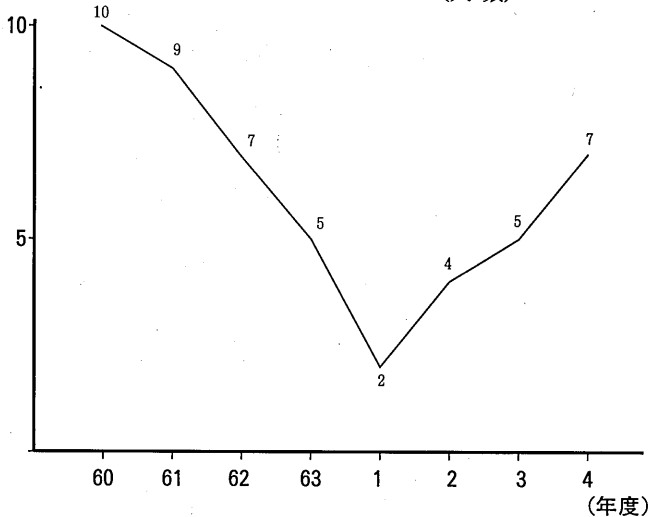
UVSOR 課題研究



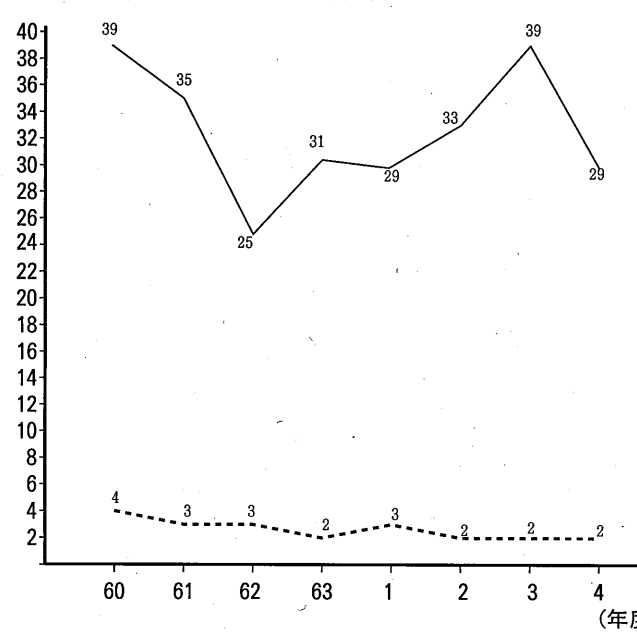
UVSOR 協力研究



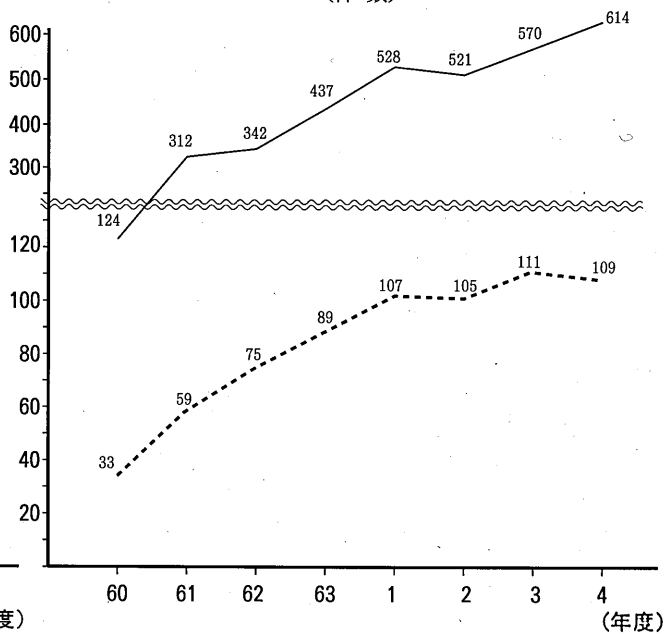
UVSOR 招へい協力研究



UVSOR 研究会



UVSOR 施設利用



2-9 国際交流と国際共同研究

2-9-1 国際交流

分子科学研究所には1ヶ月以上滞在して共同研究を実施する長期滞在者と研究会や見学・視察等で来所される短期訪問者を合わせて、毎年200名前後の外国人研究者が訪れている。前者には外国人客員教官（教授2名、助教授2名）、文部省招へい外国人研究員（毎年3～5名、3ヶ月以上滞在）、日本学術振興会招へい外国人研究者、日韓協力による来訪研究者（毎年3名、1人4ヶ月滞在）及び特別協力研究員（私費や委任経理金等により共同研究実施のために来訪する研究者）等がある。短期訪問者とは岡崎コンファレンスを始めとして次項で述べる様な色々な国際共同研究事業に基づく研究会への参加者及び短時日の見学来訪者を意味する。

以下に今迄の来訪者のデータを分類別及び国別に示す。昭和55年以前のデータは残念ながら不確実であるので省略してある。表中「文部省外国人招へい研究者」とは(1)外国人客員教官、(2)文部省招へい外国人研究者及び(3)日韓協力による韓国人研究者の総計である（年度を越えて滞在している人は二度勘定されている）。図の長期滞在者とは「文部省外国人招へい研究者」、「学術振興会招へい研究者」、「特別協力研究員」の合計で、短期滞在者とは「研究会出席者」と「訪問者」の合計である。

表 1 外国人研究者数の推移

年 度	文部省外国人招へい研究者	日本学術振興会外国人招へい研究者	特別協力研究員	研 究 会	訪 問 者	合 計
昭 56	7	4	6	28	45	90
57	7	14	6	22	58	107
58	8	12	9	47	40	116
59	13	11	10	79	103	216
60	12	3	16	69	78	178
61	14	6	19	57	66	162
62	14	5	28	60	80	187
63	13	9	23	67	93	205
平 元	17	16	18	73	50	174
2	16	13	22	52	50	153
3	17	21	49	159	82	328
4	16	17	56	112	47	248
合 計	154	131	262	825	792	2,164

表 2 外国人研究者の国別内訳の推移

年 度	アメリカ	イギリス	ド イ ツ	フランス	韓 国	中 国	旧 ソ 連	ポーランド	そ の 他	合 計
昭 56	26	18	8	4	1	5			28	90
57	47	9	9	6	1	2		1	32	107
58	55	9	10	4		15			23	116
59	80	17	18	10	21	25	2	3	40	216
60	54	22	21	9	8	29	9		26	178
61	48	13	10	6	7	34	5	4	35	162
62	47	27	15	7	18	27	3	2	41	187
63	46	21	16	21	20	31	4		46	205
平 元	38	36	12	15	9	13	4		47	174
2	41	14	8	10	8	13	8	2	49	153
3	108	24	23	7	34	29	36	4	63	328
4	48	28	6	5	49	45	20	6	41	248
合 計	638	238	156	104	176	268	91	22	471	2,164

図 1 外国人研究者数の年度別内訳（昭和56～平成4）

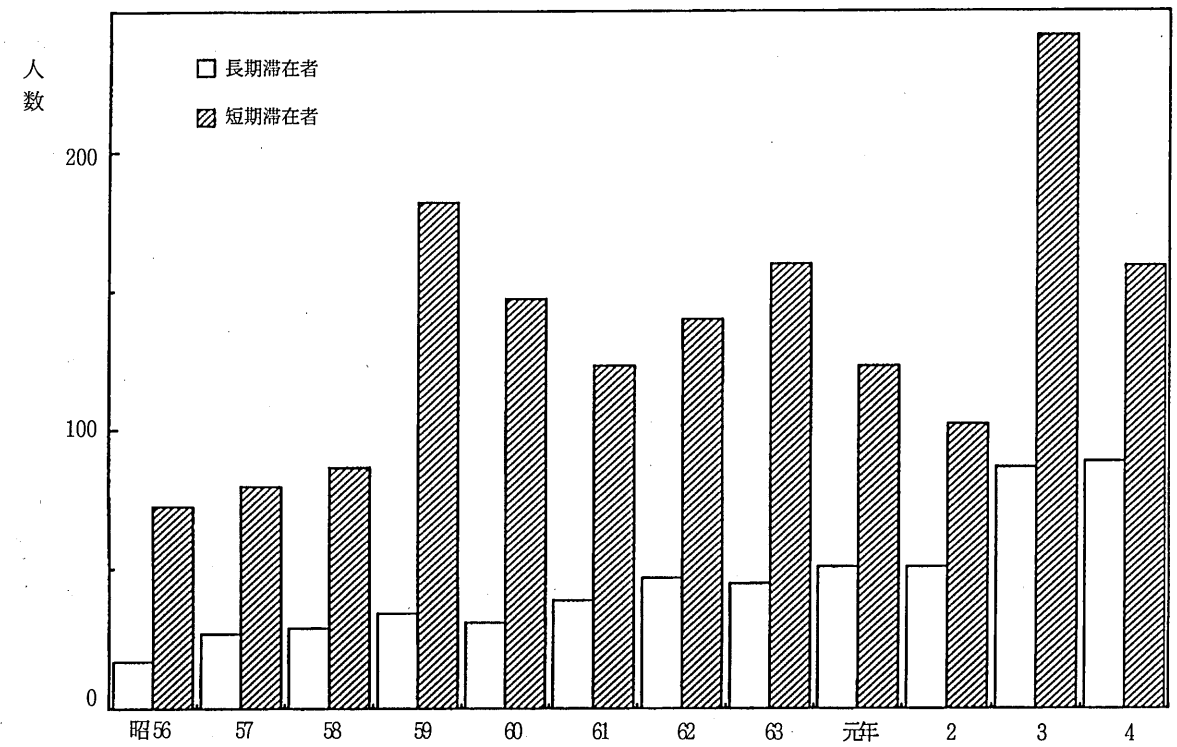
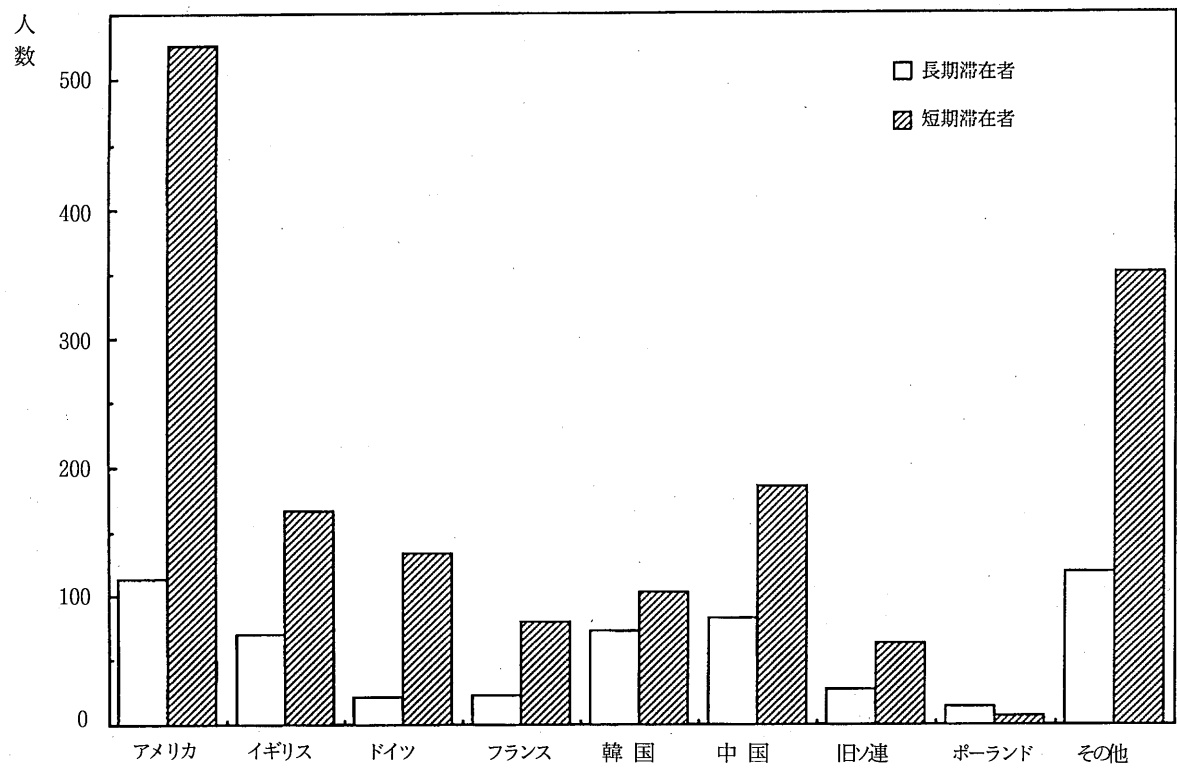


図 2 外国人研究者数の国別内訳（昭和56～平成4）



2-9-2 国際共同研究

(i) 日米科学技術協力事業

「光合成による太陽エネルギー転換」

分子科学研究所は、昭和54年締結の「エネルギー及びこれに関連する分野における研究開発のための協力に関する日本国政府とアメリカ合衆国政府との間の協定」及び翌年締結の「科学技術における研究開発のための協力に関する日本国政府とアメリカ合衆国政府との間の協定」に基づく研究分野のうち、エネルギー分野「光合成による太陽エネルギー転換」の企画立案及び実施に関する連絡調整の担当機関となり、事業の推進に当たっている。平成2年両国の合意により協定が5年間さらに継続されることになった。広く関係研究者の意見を反映させるため、所長の下に13名の委員から成る研究計画委員会を設置しており、これまでに下記の事業を行った。また日米の研究推進機関（文部省と全米科学財団）の間で研究実施、企画、評価のために、ステアリングコミッティーを設置している。

ステアリングコミッティー	第5回	平成元年8月	東京
	第6回	平成2年8月	ホノルル
研究計画委員会及び幹事会	昭和54年6月から平成5年3月まで55回開催		
研究者派遣	昭和54～63年度	短・中・長期派遣	79名
	平成元年度	〃	7名
	平成2年度	〃	7名
	平成3年度	〃	4名
	平成4年度	〃	7名
研究者受入	昭和58～60年度	調査・研究のための研究者受入	202名
	平成2年度	〃	2名
日米合同研究会	昭和56, 57, 58, 59, 60年度	各1回, 61年度	2回,
	62年度	1回, 63年度	2回

(情報交換セミナー)

平成2年3月	「光合成の機能タンパク質複合体—その分子構造, 反応機構および生合成」	ハワイ
平成2年12月	「エネルギー移動と光化学過程への理論的アプローチ」	ハワイ
平成3年8月	「金属錯体を用いる人工光合成」	愛知県・岡崎
平成3年12月	「10周年記念シンポジウム」	愛知県・岡崎
平成4年3月	「光合成を制御する遺伝子と酸素の分子機構」	愛知県・犬山
平成4年4月	「光化学変換における光化学の新しい展開」	茨城県・筑波
平成5年3月	「生体および人工系分子組織体における光物理化学の新展開」	カリフォルニア

「新材料」

1985年度より日米科学技術協力事業として4工学分野が発足し、その中の一つとして「新材料」分野が取上げられた。その世話機関として分子科学研究所が当たることとなった。その推進方法として、昭和59年度より発足している科学研究費補助金に基づく調査研究「新材料創成に関する基礎研究」の研究

グループと協力して、国内の組織づくりを行ってきた。一方、1986年5月米国マサチューセッツ工科大学において広範な分野を持つ新材料についての情報交換を行うと共に協力分野の検討を行い、金属・セラミックス及び有機材料の三分野に於ける「境界界面現象」(インターフェイス)に絞った。現在は研究者の交流を中心に情報交換を進めている。即ち、昭和63年度は高分子、金属、セラミックス、有機物の各分野の研究者を米国のそれぞれの研究機関に派遣し最新情報についての意見交換を行った。平成元年度は有機電子材料、表面物性の若手研究者を各1名、又平成2年度にはセラミックス、有機電子材料について各1名づつを米国に派遣し、実験研究を行った。さらに、アラバマ大学情報材料センターにおいて先端的材料に関する日米合同会議を行った。平成3年度は2名の研究者の派遣、及びニューヨーク州立大学物質科学センターにおける合同セミナーを行った。平成4年度も2名の研究者の派遣(マサチューセッツ工科大、フロリダ大)と、IBMアルマデン研究所におけるC₆₀等に関するミニワークショップを開催した。

(ii) 日英共同研究

昭和55年から文部省並びに分子科学研究所と英国科学工学研究会議(SERC)及びダースベリー研究所との間で分子科学に関する日英共同研究について協議が重ねられた。その結果昭和56年9月文部省とSERCとの「日英学術協力に関する会議」において、分子科学分野での研究協力を推進する事の合意が得られ、その後具体的協力が下記5つの分野において進められている：

- ① 分子計算化学(Molecular computational chemistry)
- ② 高分解能分光学(High resolution spectroscopy)
- ③ 電子構造動力学(Electronic structures and dynamic behaviour of excited molecules)
- ④ 放射光利用化学(Application of synchrotron radiation to molecular spectroscopy and photochemistry)
- ⑤ 物質化学(Material chemistry)

昭和59年11月には長倉分子研所長(当時)とキングマンSERC会長(当時)との協議により本事業の一層の推進が確認された。昭和56年9月以来研究者交流を中心に活発に共同研究が遂行されており、両国間の研究者派遣は総計200名以上に及んでいる。

また、これまでに①分子計算化学(昭和60年9月、平成2年9月、平成5年7月)、②高分解能分光学(平成元年9月、平成4年3月)、③電子構造動力学(平成元年3月、平成3年9月)、④放射光利用化学(昭和59年9月、平成元年9月、平成5年10月)、⑤物質化学(昭和59年4月、昭和62年5月、平成3年3月、平成4年1月)の各分野において計15回の日英シンポジウム(いわゆる5+5ミーティング)が開催されている。平成5年10月には英国Abingdonにおいて五分野合同のミーティングを開催し、一層の推進を確認しあった。

なお、文部省とSERCは研究協力が順調に進展している事を評価し、平成元年及び5年に上記覚書を改訂し協力事業を更に継続・推進する事に合意している。

(iii) 日韓共同研究

分子科学研究所及び韓国高等科学技術院の話し合いに基づき、昭和59年度から日韓合同研究会及び韓国側研究者の分子科学研究所への受入れの二事業が行われている。前者については、理論化学を主テーマとして昭和59年5月23日～25日分子科学研究所において第1回合同シンポジウムが、韓国側9つの

大学から14名、日本側分子研所外14名、所内十数名の参加を得て行われ、また、第2回分子科学合同シンポジウムは昭和61年5月13～15日ソウルで開催された。第3回合同シンポジウムは昭和63年6月7日～9日分子科学研究所で、“化学反応”を主テーマとして開催された。第4回合同シンポジウムは平成3年3月11～13日ソウルで“凝縮系の分子科学”のテーマで開催された。平成5年1月11日～13日には分子及び分子集合体の動的過程をテーマとする第5回合同シンポジウムが分子研において行われた。また、研究者受入れについては、若手研究者を中心に、昭和59年度は4名を各々約3ヶ月、昭和60～平成4年度は毎年3名(昭和61年度は2名)を各々約4ヶ月招へいし、共同研究を実施して成果をあげた。平成5年度も3名各4ヶ月の招へいが予定されている。共同研究の結果はいくつかの論文となって発表されている。また、本共同研究に参加した後も何年かにわたって研究協力を行っている例も多く見られるようになり成果が着実に上りつつある。

(iv) 日中共同研究

日中共同研究は、昭和48年以来の相互の研究交流を経て、昭和52年の分子科学研究所と中国科学院化学研究所の間での研究者交流で具体的に始まった。昭和58年4月に日本学術振興会・中国科学院主催による分子研・化学研共同シンポジウムが北京において開催された。59年度には化学研究所より招へい研究員1名を受け入れ、分子研及び関連する機関から5名が日本学術振興会共同研究事業の一環として訪中した。60年度は化学研究所から1名(特別協力研究員)の研究者を受け入れた。さらに、両研究所間の協議に基づき、今後当面の共同研究分野として、(1)有機固体化学、(2)化学反応動力学、(3)レーザー化学、(4)量子化学、をとりあげることをきめ覚書きを交換した。そして、61年度は化学研究所より、2名の研究者(文部省外国人研究員、特別協力研究員)を受け入れた。また、61年11月には、有機固体に関する第2回日中合同シンポジウムが分子研において開催した。昭和63年3月に、胡亜東化学研究所長の来所を得て今後の協力方針について協議を行った。又、平成元年5月に第3回日中合同シンポジウムが中国合肥において開催された。中国科学院化学研究所を通しての中国研究者の受け入れも順調に進んでいる。平成4年10月には第4回日中合同シンポジウムを分子研で開催した。

平成5年11月には、朱道本化学研究所長の来所を得て、前記覚書の延長を行った。

(v) 日本・イスラエル共同研究

文部省の国際学術研究によって平成2年度から3年計画として認められた共同研究事業である。ヘブライ大学のフリッツ・ハーバー分子動力学研究センターが先方の世話役機関で理論研究が主である。平成2年度第1回の合同シンポジウムをイスラエルで開催した。イスラエルは人口400万程度の小国であるが、分子動力学分野における学術水準は高く有意義な共同研究が進められている。若手研究者の交流、実験研究における交流、第2回合同シンポジウム開催等を推進した。平成5年度は中断しているが、平成6年度以後改めて国際学術研究への申請を行い更に推進していく計画である。

(vi) 日本・スペイン共同研究

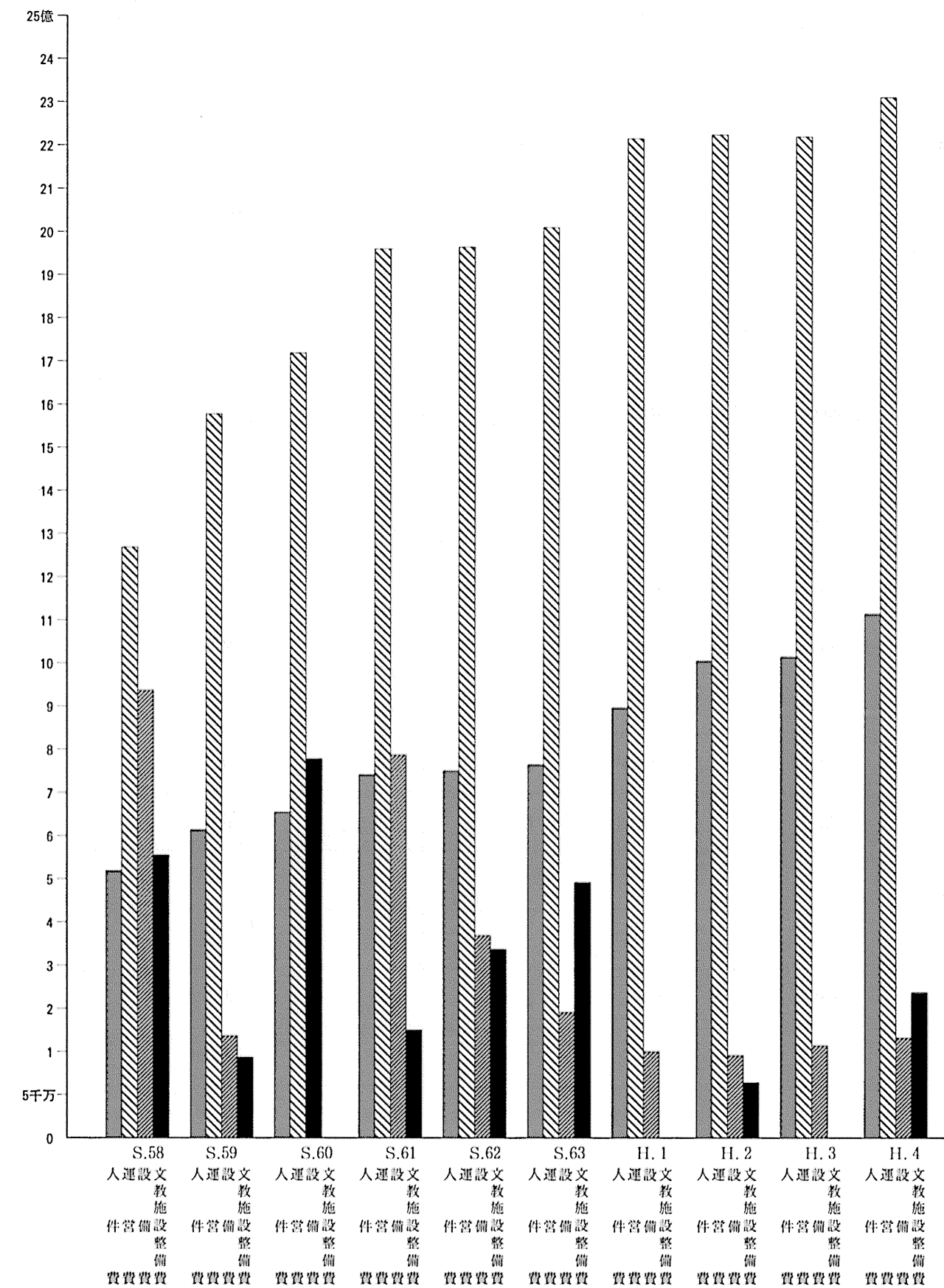
平成元年以来の分子科学研究所とアルカラ・デ・エナレス大学の研究交流を経て、両機関の協議に基づいて、学生・教官・研究者の交流及び学術に関する情報・出版物・資料の交換による研究協力推進のための覚書きが平成3年に交換された。それにもとづいて、平成4年度にスペインで3+3ミーティングが開催された。なお、平成5年度には分子科学研究所にて日本-スペイン二国シンポジウムを開く予定にしている。

(vii) 日・旧ソ協力

理論科学，低温，高压，レーザー科学等で，独自の研究を展開している旧ソ連邦との協力研究は，1990年春，Agranovich 教授を森野基金で迎えたのを動機に加速された。ソ連邦解体はそれに拍車をかけ，現在レーザー科学，シンクロトン放射科学，固体科学の分野で積極的な協力研究を推進している。

2.10 予 算

2-10-1 予算の推移



2-10-2 科学研究費補助金

(単位：千円)

研究種目		昭和58（'83年）		昭和59（'84年）		昭和60（'85年）		昭和61（'86年）		昭和62（'87年）		昭和63（'88年）		平成1（'89年）		平成2（'90年）		平成3（'91年）		平成4（'92年）	
		件数	金額	件数	金額	件数	金額	件数	金額	件数	金額	件数	金額	件数	金額	件数	金額	件数	金額	件数	金額
特別研究		1	1,400																		
特定研究		3	37,300	6	58,900	6	67,800	5	28,800	3	16,600	1	24,000								
重点領域	1									4	37,600	5	34,900	7	45,300	7	43,300	5	100,800	7	130,600
	2																	7	32,500	9	16,900
総合研究	A	1	5,300	1	1,700	1	5,000	3	8,200	3	8,700	2	13,000	1	4,100	3	14,500	1	3,400		
	B																	2	4,900	1	2,600
一般研究	A																	1	6,320		
	B	7	17,200	11	16,100	7	15,900	7	11,000	10	11,500	12	23,150	12	23,800	13	52,000	4	10,700	1	1,300
	C一般																	7	9,000	9	14,300
	C萌芽																	4	4,200	3	3,800
	C時限																				
奨励研究A	一般	3	2,800	5	3,800	7	5,400	10	8,650	8	7,300	7	5,450	7	10,800	15	13,500	9	8,400	15	13,200
	萌芽																	3	2,300	2	1,900
試験研究B	1	1	1,000					1	6,000	1	1,400	1	4,300	1	2,300	2	10,100				
	2																				
特別研究員 奨励費	日本人																	2	2,200	8	8,900
	外国人																	7	6,900	7	7,200
国際学術研究*		1	5,400	1	5,700	2	10,000	4	29,500	3	17,500	4	16,860	6	23,600	8	32,200	10	37,500	13	53,000
創成的基礎研究																		1	140,000	1	200,000
合計		17	70,400	24	86,200	23	104,100	30	92,150	32	100,600	32	121,660	34	109,900	48	165,600	63	369,120	76	453,700

。金額は研究代表者への交付額

* 昭和63年度は「海外学術研究」，昭和62年度以前は「海外学術調査」

2-11 共通設備

2-11-1 図書館

情報図書館は機構の共通施設として3研究所の図書雑誌等を収集・整理・保存し、機構の職員や共同利用研究者等の利用に供している。現在分子科学研究所は雑誌132種（和24，洋108），単行本10,941冊（和3,869，洋7,072）を保有している。情報図書館では専用の電子計算機を使用して，図書の貸出しや返却の処理，単行本ならびに雑誌の検索等のサービスを行っている。このほか学術文献検索システムによるオンライン情報検索のサービスも行っている。またライブラリーカードを使用することによって，情報図書館は24時間利用できる体制になっている。



2-11-2 宿泊施設

機構の共通施設として「三島ロッジ」と「山手ロッジ」があり，共同利用研究者をはじめ外国人研究員等に利用されている。三島ロッジには個室51，特別個室13，家族室10が，山手ロッジには個室11，特別個室4，家族室2が用意されている。



2-11-3 職員会館

職員会館は機構の福利厚生施設として建てられ，食堂，喫茶室，和室，会議室，トレーニング室等が設けられている。



2-12 地域社会との交流

2-12-1 国研セミナー

このセミナーは、岡崎国立共同研究機構と岡崎ロータリークラブとの交流事業の一つとして行われているもので、岡崎市内の小・中学校の理科教員を対象として、機構の教官が講師となって昭和60年12月から始まり、昭和61年度から毎年度6回、各研究所が2回ずつ担当している。因に平成5年度の最終回には50回を数える。分子研担当分を以下に示す。

回数	開催日	テーマ	講師	備考
2	S. 61. 1.18	分子研の紹介	諸熊 奎治教授	
3	S. 61. 6. 7	シンクロトロン放射とは	渡邊 誠助教授 春日 俊夫助教授	
6	S. 61.10. 4	人類は元素をいかに利用してきたか	齋藤 一夫教授	
9	S. 62. 6.13	レーザーの応用について	吉原経太郎教授	
12	S. 62. 9.26	コンピュータで探る分子の世界	柏木 浩助教授	
15	S. 63. 7. 2	目で見える低温実験発光現象と光酸化現象	木村 克美教授	
18	S. 63.10.29	人工光合成とは何か	坂田 忠良助教授	
21	H. 1. 6.24	星間分子と水 ―生命を育む分子環境―	西 信之助教授	
24	H. 1. 10.21	常温での超伝導は実現できるか	那須奎一郎助教授	
27	H. 2. 6.23	眼で見る決勝の生成と溶解 ― 計算機による実験ビデオ ―	大瀧 仁志教授	
30	H. 2.10.20	電気と化学	井口 洋夫 所 長	
33	H. 3.6.22	自己秩序形成の分子科学―分子はどのようにしてリズムやパターンを作り出すか―	花崎 一郎教授	
37	H. 3.12.14	からだの酸素, そしてエネルギー:その分子科学	北川 禎三教授	
39	H. 4. 7. 7	サッカーボール分子の世界	加藤 立久助教授	
42	H. 4.11.13	炭酸ガスの化学的な利用法	田中 晃二教授	
45	H. 5.6.22	化学反応はどのように進むか?	正畠 宏祐助教授	
48	H. 5.10. 1	宇宙にひろがる分子の世界	齋藤 修二教授	

2-12-2 一般公開

研究活動や内容について、広く一般の方々に理解を深めていただくため研究所内を公開し、説明を行っている。現在では研究機構の研究所が輪番に公開を実施しているので、3年に1回の公開となっている。公開日には実験室の公開と講演会が行われ、約3,000人の見学者が分子研を訪れる。

回数	実施月日	備考
第 1 回	昭和54年11月 9日 (金)	創設記念一般公開
第 2 回	昭和55年11月15日 (土)	
第 3 回	昭和56年11月14日 (土)	3研究所同時公開
第 4 回	昭和60年 5月11日 (土)	10周年記念一般公開
第 5 回	昭和63年11月 5日 (土)	
第 6 回	平成 3 年10月26日 (土)	



2-12-3 見学受入状況（団体）

年 度	S 60年度	S 61年度	S 62年度	S 63年度	H 1 年度	H 2 年度	H 3 年度	H 4 年度
受入件数	23	22	20	21	15	10	3	7
見学者数	567	639	628	480	454	250	110	162

理論研究系

分子基礎理論系 研究部門

佐 藤 聖 治 (教授)

研究系及び研究施設の状況

I-1) 専門

I-1-1) 研究課題

- 化学系反応のメカニズム
- 分子クラスターの電子構造
- 遷移金属錯体の構造と反応性
- 気相遷移金属イオンとその錯体
- オクサ族化合物の構造と反応性
- 超原子錯化合物の構造と反応性
- 有機化学における選択性の研究
- 固体表面における化学反応性
- 電子移動反応の理論的研究

I-1-2) 研究活動の概略と成果

- 化学系反応のメカニズムとその理論的研究
H₂の光解離反応に伴う、H₂分子の電子状態の遷移を説明した。また、メチレン、クロロメチレン類の光分解反応機構について研究を進め、提案を提出している。また、H₂分子の電子状態の遷移を説明した。また、メチレン、クロロメチレン類の光分解反応機構について研究を進め、提案を提出している。
- 分子クラスターの電子構造
H₂(H₂)₂クラスター、H₂(H₂)₃クラスター、H₂(H₂)₄クラスターの電子構造を計算した。また、H₂(H₂)₂クラスター、H₂(H₂)₃クラスター、H₂(H₂)₄クラスターの電子構造を計算した。
- 遷移金属錯体の構造と反応性
数多くの錯体について計算を行った。また、H₂(H₂)₂錯体の構造と反応性について研究を進め、提案を提出している。

化学系反応のメカニズムとその理論的研究
H₂の光解離反応に伴う、H₂分子の電子状態の遷移を説明した。また、メチレン、クロロメチレン類の光分解反応機構について研究を進め、提案を提出している。また、H₂分子の電子状態の遷移を説明した。また、メチレン、クロロメチレン類の光分解反応機構について研究を進め、提案を提出している。

分子クラスターの電子構造
H₂(H₂)₂クラスター、H₂(H₂)₃クラスター、H₂(H₂)₄クラスターの電子構造を計算した。また、H₂(H₂)₂クラスター、H₂(H₂)₃クラスター、H₂(H₂)₄クラスターの電子構造を計算した。

遷移金属錯体の構造と反応性
数多くの錯体について計算を行った。また、H₂(H₂)₂錯体の構造と反応性について研究を進め、提案を提出している。

3. 研究系および研究施設の現状

理論研究系

分子基礎理論第一研究部門

諸 熊 奎 治 (教授)

I-1) 専門領域：理論化学

I-2) 研究課題

- a) 化学素反応のポテンシャルエネルギー面と動力学の理論的研究
- b) 分子クラスターの電子構造, 安定性, 分光的性質の理論的研究
- c) 遷移金属錯体の構造と反応性の理論的研究
- d) 気相遷移金属イオンとその錯体の構造, 電子状態, 反応性の理論的研究
- e) ホウ素化合物の構造と反応性の理論的研究
- f) 超原子価化合物の構造と反応性の理論的研究
- g) 有機化学における選択性の理論的研究
- h) 固体表面における化学反応性の理論的研究
- i) 電子移動反応の理論的研究

I-3) 研究活動の概略と成果

- a) 化学素反応のポテンシャルエネルギー面と動力学の理論的研究

ICNの光解離反応についての研究を継続し, その動力学を解明した。また, エチレン, クロロエチレン類の光ならびに熱解離反応のポテンシャル面について研究を進め, 従来容易と考えられていた1, 2-H₂ 脱離反応が, 1, 1- 脱離より困難なことを示した。

- b) 分子クラスターの電子構造, 安定性, 分光的性質の理論的研究

H₃(H₂)_n⁺クラスター, H₂CO (H₂O)_nクラスターの構造, 安定性, 吸収スペクトルについての研究を継続した。また, Na (H₂O)_n, Na (NH₃)_n について, n=4 以上で前者は表面クラスターに, 後者は包含クラスター構造をとることをはじめて示した。

- c) 遷移金属錯体の構造と反応性の理論的研究

数多くの課題について成果が上がったが, 特筆すべきは次の通り。

[Os(PR₃)₃“H”₃] 錯体の構造は実験的にも多くの議論があり不明であったが, 可能な全ての構造についての計算と解析から, 十面体8配置ペンタヒドリド構造を予測したが, 最近の実験でこの予想が正しいことが確認された。また多核錯体における異性化反応経路も明らかにした。さらに, Si-H, Si-Si活性化のC-H, C-C活性化との比較も行ったほか, ジルコノセン錯体によるオレフィン重合反応における立体制御機構に関し新しいモデルを提唱した。

- d) 気相遷移金属イオンとその錯体の構造, 電子状態, 反応性の理論的研究

特に気相反応 $MCH_2^+ + H_2 = M^+ + CH_4$, ($M = Co, Rh, Ir, Fe$) について, 種々の電子状態におけるポテンシャル面を明らかにした。

e) ホウ素化合物の構造と反応性の理論的研究

ホウ素クラスターおよびボランの構造, 安定性と骨格異性化反応機構, $B_2H_6 + SH_2$ 反応のポテンシャル面, ボラン錯体の構造とNMR ケミカルシフト, メタラボランの構造と安定性について研究成果をあげた。

f) 超原子価化合物の構造と反応性の理論的研究

XL_n^q ($X = P, As, Sb, Bi; L = H, F; n = 4, 5, 6, 7; q = 0, -1$) で表される超原子価化合物の構造と安定性を支配する因子を理論的に解明した。

II-1) 学術論文

H. KAWAMURA-KURIBAYASHI, N. KOGA, and K. MOROKUMA, "An Ab Initio MO Study on Ethylene and Propylene Insertion into the Ti-CH₃ Bond in CH₃TiCl₂ as a Model of Homogeneous Olefin Polymerization," *J. Am. Chem. Soc.* **114**, 2359 (1992).

U. NAGASHIMA, H. TANAKA, and K. MOROKUMA, "An Ab Initio and Monte Carlo Study on Structure and Stability of $H_3^+(H_2)_n$ ($n = 3-16$)," *J. Phys. Chem.* **96**, 4294 (1992).

K. YAMASHITA, K. MOROKUMA, F. LEQUERE, and C. LEFORESTIER "New Ab Initio Potential Surfaces and Three-Dimensional Quantum Dynamics for Transition State Spectroscopy in Ozone Photodissociation," *Chem. Phys. Lett.* **191**, 515 (1992).

F. MASERAS and K. MOROKUMA, "Application of The Natural Population Analysis to Transition Metal Complexes. Should The Empty Metal p Orbitals be Included in The Valence Space?" *Chem. Phys. Lett.* **195**, 500 (1992).

N. KOGA and K. MOROKUMA, "Ab Initio MO Study of C_{∞} Anion Radical: The Jahn-Teller Distortion and Electronic Structure," *Chem. Phys. Lett.* **196**, 191 (1992).

E. NAKAMURA, Y. MIYACHI, N. KOGA, and K. MOROKUMA "Theoretical Studies of Heteroatom-Directed Carbometalation. Addition of MeCu, Me₂Cu⁺ and MeLi to Substituted Acetylenes," *J. Am. Chem. Soc.* **114**, 6686 (1992).

H. KAWAMURA-KURIBAYASHI, N. KOGA, and K. MOROKUMA, "An Ab Initio MO and MM Study on Homogeneous Olefin Polymerization with Silylene-Bridged Zirconocene Catalyst and Its Regio- and Stereoselectivity," *J. Am. Chem. Soc.* **114**, 8687 (1992).

K. SAWABE, N. KOGA, and K. MOROKUMA, "An Ab Initio MO Study on Adsorption at the MgO Surface I. H₂ Chemisorption on the (MgO)₄ Cluster," *J. Chem. Phys.* **97**, 6871 (1992).

N. KOGA and K. MOROKUMA, "Ab Initio MO Calculation of $(\eta^2-C_{\infty})Pt(PH_3)_2$: Electronic Structure and Interaction between C_{∞} and Pt," *Chem. Phys. Lett.* **202**, 330 (1992).

H. FUKUNAGA and MOROKUMA, "Cluster and Solution Simulation of Formaldehyde-Water Complexes and Solvent Effect on Formaldehyde $^1(n, \pi^*)$ Transition," *J. Phys.*

Chem. **97**, 59 (1993).

M. OHSAKU, N. KOGA, and K. MOROKUMA, "Triplet-Singlet Intersystem Crossing as the Second Step of Cycloaddition of Triplet Penta-1,4-Diene. An Ab Initio MO Study," *J. Chem. Soc. Perkin 2*, **71**, (1993).

E. NAKAMURA, M. NAKAMURA, Y. MIYACHI, N. KOGA, and K. MOROKUMA, "Theoretical Studies on Carbometalation of Cyclopropene. Transition Structures of Addition of Me⁺, MeLi, MeCu, and MeCu⁺ and Origin of High Reactivity of the Strained Double Bond," *J. Am. Chem. Soc.* **115**, 99 (1993).

J. MOC, A. DORIGO, and K. MOROKUMA, "Transition Structures for H₂ Elimination from XH₄ Hypervalent Species (X=S, Se and Te): Ab Initio MO Study," *Chem. Phys. Lett.*, **204**, 65 (1993).

II-4) 招待講演

諸熊奎治, 化学反応のポテンシャル面と動力学, 分子構造総合討論会: 京都, 92.9

K. MOROKUMA and N. KOGA, "Ab initio MO Studies of Catalytic Reaction of Transition Metal Complexes," 8th International Symposium on Homogeneous Catalysis: Amsterdam (Holland), 92.8

II-5) 受賞, 表彰

国際量子分子科学アカデミー賞: 1978

英国王室化学会ファラデー部門パークレクチャーシップ: 1992

世界理論有機化学者連合年次賞: 1993

日本化学会賞: 1992

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

国際量子分子科学アカデミー副会長: 1991 - 現在

世界理論有機化学者連合副会長: 1985 - 現在

学会の組織委員

第3回世界理論有機化学者会議組織委員長: 1993. 7 (豊橋)

学会誌編集委員

Chemical Physics Letters: 1979-現在

International Journal of Quantum Chemistry: 1979 - 87

Journal of Molecular Structure (Theochem): 1980 - 現在

Journal of Chemical Physics: 1982 - 84

Theoretica Chimica Acta: 1985 - 現在

Journal of Physical Chemistry: 1988 - 93

Accounts of Chemical Research: 1991 - 93

II-7) 他大学での講義

大阪市立大学理学部

岡山大学工学部

名古屋大学理学部

大 峯 巖 (助教授)

I-1) 専門領域: 理論化学

I-2) 研究課題

- a) 溶液, クラスターの構造とダイナミックス
- b) 溶液内化学反応: 水内のプロトンの移動のダイナミックス
- c) 励起状態の反応: ポリエンの光異性化反応

I-3) 研究活動の概略と成果

- a) 溶液, クラスターの構造とダイナミックス

溶液, クラスターのミクロレベルの運動, 特に揺らぎと集団運動の様相を明らかにし, それが溶媒として如何なる効果を化学反応系に影響を及ぼすかの研究を行った。

最も代表的な溶液である水を対象として, 水素結合ネットワークの時間変化, 分子運動の様相を解析し, 数十個の水分子の集団がその変化の基本となっていること, またポテンシャルエネルギーの揺らぎの周波数成分がいわゆる $1/f$ ノイズの型をしていることなどを見つけた。この水のダイナミックスが誘電緩和, ラマン散乱などの物理量に如何に反映されるかを調べた。クラスターにも同様の解析を行いポテンシャルエネルギー面, ダイナミックスの様相と物理観測量の関係を明らかにした。

- b) 溶液内化学反応

溶液化学反応の1つとして水中でのプロトン移動反応を取り上げ, 水の水素結合のネットワーク上を幾つかのプロトンがある種の協調的な移動をする速い過程について調べた。この反応のポテンシャルエネルギー面の特徴を非経験的分子軌道法により調べ, また新しいエネルギー分割法を用いて多体の分子間相互作用の様相を明らかにした。これに基づき新しい半経験的ポテンシャルを開発している。

- c) 励起状態の反応

光化学反応の一例としてポリエンの異性化を取り上げ, そのポテンシャル曲面, 基準振動の様相などを明らかにした。現在, 振電相互作用, 溶液内反応について調べている。

II-1) 学術論文

M. SASAI, I. OHMINE, and R. RAMASWAMY, "Long time fluctuation of liquid water; $1/f$ spectrum of energy fluctuation in hydrogen bond network rearrangement dynamics", *J. Chem. Phys.* **96**, 3045 (1992)

D. WALES and I. OHMINE, "Structure, dynamics and thermodynamics of model $(H_2O)_8$

and $(H_2O)_{20}$ clusters", *J. Chem. Phys.* **98**, 7245 (1993).

D. WALES and I. OHMINE, "Rearrangement model of $(H_2O)_8$ and $(H_2O)_{20}$ clusters", *J. Chem. Phys.* **98**, 7257 (1993).

I. OHMINE, "Inherent Structure Analysis for Liquid Water Dynamics", *Atti Di Conferenze, Italian Physical Society* **43**, 7 (1993)

II-2) 総説, 著書

I. OHMINE and H. TANAKA, "Dynamics of Liquid Water; Fluctuations and Collective Motions" in 'Molecular Dynamics Simulations', Springer Series in Solid State Sciences, Springer Verlag, **130**, (1992)

II-4) 招待講演

I. OHMINE, "Water Dynamics; relaxation, fluctuation and chemical reactions", Gordon Research Conference, New Hampshire (USA), Aug. 1992.

I. OHMINE, "Inherent Structure Analysis of Water Dynamics", European Biophysical Societies Association (E.B.S.A) Workshop, Palermo (Italy), May, 1992.

II-6) 学会および社会的活動

学会の組織委員

WATOC (世界理論有機化学会議, 1993年) 組織委員

学会誌編集委員

Computer and chemistry, International Journal, Editorial Board (1991)

III 研究活動の課題と展望

溶液内化学反応を理解するために, 溶媒である溶液自身のダイナミックスの特徴を調べ, それが溶質の化学反応系のダイナミックスに如何に影響を及ぼすかを明らかにする。特に, 溶媒に内在する大きな揺らぎ, 集団的運動が化学反応系の電子状態, 運動, 反応に効果を及ぼすかを調べている。また水素結合系の分子では運動に長時間の記憶効果があり, 溶液の水やクラスターの物理科学的性質に大きく影響を及ぼしており, ポテンシャルエネルギー面, 運動の周波数成分の解析などを通じてこれら運動の特徴が如何に生じているかを調べている。

分子基礎理論第二研究部門

中 村 宏 樹 (教授)

I-1) 専門領域: 分子過程動力学の理論

I-2) 研究課題

- a) 少数原子系化学反応の量子力学

- b) 多自由度系の動力学
- c) 非断熱遷移の理論
- d) 多次元トンネルの半古典論
- e) 超励起分子の特性と動力学

I-3) 研究活動の概略と成果

a) 少数原子系化学反応の量子動力学

3 原子系の反応動力学を量子力学的に正しく理解する為の超球座標系に基づいた方法論と計算機コードを開発した。又、ポテンシャルエネルギー曲面の稜線の重要性を指摘し、反応動力学機構の解明を進めた。

b) 多自由度系の動力学

多自由系に対して、位相空間内で変数分離を行う方法論を提唱し、反応動力学の定性的解析や不規則散乱系の解析を行った。又、RRKM理論の成立条件や、統計性と選択性の出現条件を明確にした。

c) 非断熱遷移の理論

線型ポテンシャルモデルでの非断熱遷移のS-行列に対する量子力学的厳密解析解及び半古典的簡便近似公式の開発に成功した。有名なLandau-Zenerの公式を塗り替える簡便公式を求めた。一次元非断熱トンネル系におけるスイッチング機構の可能性を指摘した。4 種類の一般的な2階線形常微分方程式のストークス定数の解析解を得た。

d) 多次元トンネルの半古典論

多次元トンネルのWKB 理論を二重井戸におけるエネルギー分裂に対して開発した。トンネル領域が2種類あること、又振動励起がトンネル確率を低下させる可能性がある事を始めて指摘した。

e) 超励起分子の特性と動力学

超励起状態の関与する動力学過程、特に自動イオン化と解離性再結合過程を量子欠損理論により解明した。又、第一種超励起状態(2電子励起状態)における電子相関効果を解明した。

II-1) 学術論文

C. ZHU and H. NAKAMURA, "The Two-State Linear Curve Crossing Problems Revisited, II. Analytical Approximations for the Stokes Constant and Scattering Matrix: The Landau-Zener Case", *J. Chem. Phys.* 97, 8497 (1992).

C. ZHU and H. NAKAMURA, "Numerical Method for the Two-State Linear Curve Crossing: Nonadiabatic Tunneling Case," *Comp. Phys. Commun.* 74, 9 (1993).

K. SOMEDA, R. RAMASWAMY, and H. NAKAMURA, "Decoupling Surface Analysis of Classical Irregular Scattering and Clarification of Its Icicle Structure", *J. Chem. Phys.* 98, 1156 (1993).

C. ZHU and H. NAKAMURA, "The Two-State Linear Curve Crossing Problems Revisited III. Analytical Approximations for Stokes Constant and Scattering Matrix: Nonadiabatic Tunneling Case", *J. Chem. Phys.* 98, 6208 (1993).

M. IWAI, S. LEE, and H. NAKAMURA, "Electron Correlation in Doubly Excited States of the Hydrogen Molecule", *Phys. Rev. A* 47, 2686 (1993).

I. BANNO, "Electron Density in a Half-filled Shell Atom", *Prog. Theor. Phys.* 89, 935 (1993).

II-4) 招待講演

H. SUN, K. NAKASHIMA, and H. NAKAMURA, "Characteristics of Superexcited States of Molecules and MQDT Studies of NO⁺ Dissociative Recombination", NATO Advanced Research Workshop on Dissociative Recombination, St. Jacut (France), 1992. 5. 3-8.

H. NAKAMURA, "Theoretical Studies of Chemical Reaction Dynamics: Effects of Potential Energy Surface Topography and Stability Analysis", MOLEC IX (European Conference on Dynamics of Molecular Collisions), Prague (Czechoslovakia), 1992. 8. 30-9. 4.

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

原子衝突研究協会委員 (1981~)

学会の組織委員

ICPEAC (原子衝突物理学国際会議) 第9回 (1979) 組織委員長担当

ICPEAC (第17回及第18回) (1991, 1993) 全体会議委員

文部省, 学振等の委員会委員

学術審議会専門委員 (1991~1992)

学会誌編集委員

「Computer Physics Communication」誌のSpecialist editor (1986.10-)

科研費の班長, 研究代表者等

重点領域研究班長 (1992~1993)

III 研究活動の課題と展望

「研究活動の概略と主な成果」の所で述べた研究を更に進めていく。少数原子系の反応を理解する方法論と概念を確立し、多自由度系に対する方法論の開発とともに前者の理論を有効に利用していく。同時に、統計性が主となる現象も解明する。一方、動的過程の重要な基本的メカニズムである非断熱遷移と多次元トンネルについては理論の拡充と概念の確立を更に進める。また、新しい分野としての超励起分子の研究と一次元スイッチング素子の可能性追求の研究をも一層推進していく。

那 須 奎一郎 (助教授)

I-1) 専門領域: 固体物性理論

I-2) 研究課題

- a) 擬一次元ハロゲン架橋型混合原子価遷移金属錯体の光物性
- b) 高温超伝導の理論
- c) C_{60} 結晶の光物性, 強磁性, 超伝導

I-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 擬一次元ハロゲン架橋型混合原子価遷移金属錯体の光物性

擬一次元ハロゲン架橋型混合原子価金属錯体に於けるパイエルス転移と, それに伴う非線形励起 (ソリトン, ポーラロン, 自己束縛励起子等) の諸性質を世界に先がけて理論的に解明した。これにより, 分子科学研究所を中心にして, この物質群に関する合成の研究, 物性の実験的研究等が急速かつ大規模に発展し, 現在では, この物質に関連する国際会議が開かれる毎に, 分子科学研究所に関連した日本人の誰かが招待講演をする程になっている。

- b) 高温超伝導の理論

強い電子とフォノンとの相互作用による超伝導の予想される性質を総合的観点から理論的に解明した。特に, 「BCS の壁」等と呼ばれ, フォノン機構では超伝導の転移温度が30 Kを越える事が出来ないとこれまで広く信じられてきた事に対し, それが単なる偏見に過ぎない事を理論的に示した。

- c) C_{60} 結晶の光物性, 強磁性, 超伝導

この物質の光学的素励起が一個の C_{60} 分子には存在し得ない C_{60} 分子間電荷移動型励起子である事を理論的に明らかにした。又, LUMOが T_{1u} 軌道であり, それが三重縮退した軌道である事がこの物質の強磁性発現機構にとって最も重要である事を示した。

II-1) 学術論文

- L. LI, X. SUN, and K. NASU: "Spectrum of Third Harmonic Generation of MX Complex," *Chinese Phys. Lett.* 9, 431 (1992).
- X. SUN, K. NASU, C. WU, L. LI, D. LIN, and T. GEORGE. "Frequency dependence of two-photon resonance and damping in polymers," *Synthetic Metals*, 49/45 141 (1992).
- J. LUI, X. SUN, R. FU, and K. NASU, "Effect of electron interaction on two-dimensional instability," *Phys. Rev.* B46, 1710 (1992).
- B. S. LEE and K. NASU, "Stationary Localized Modes in an Anharmonic Molecular Crystal Model" *Phys. Lett.* A167, 205 (1992).
- Y. INADA and K. NASU, "Enhancement, Reduction and Inversion of Isotope Effect due to Anharmonic Phonons, -Migdal-Eliashberg Theory for Superconductivity-, " *J. Phys. Soc. Jpn.* 61, 4511 (1992).

那須奎一郎, 鈴木正人「励起子緩和現象の新しい曲面: 非線形格子緩和過程」日本物理学会誌, 47462 (1992).

稲田安治, 那須奎一郎「非線形振動と強く結合する電子系の超伝導, 金属絶縁体転移の抑制と同位元素効果の消失, 逆転, 増大」, 固体物理, 27, 578 (1992).

X. SUN, L. LI, R. FU, and K. NASU, "Third Nonlinear Optical Spectrum of Pt-Cl Complex, *Synthetic Metals*, 55/57, 3986 (1993).

K. IWANO and K. NASU, "Nonlinear Optical Spectra in Halogen Bridged Mixed-Valent Platinum Complexes," *J. Phys. Soc. Jpn.* 62, 1778 (1993).

K. NASU, "Many Electron System Coupling Strongly with nonlinear Phonons, New Functionality Materials," Vol. C, ed. by T. Tsuruta Elsevier, Amsterdam, p. 35. (1993).

II-4) 招待講演

K. NASU, Cinvestave Conference for Phonon Mechanism of High Temperature Superconductivity," Mexico, Nov. 4-10, 1992.

II-7) 他大学での講義

大阪大学理学部物理, 強い電子格子相互作用と多体問題, 1992年12月。

III 研究活動の課題と展望

擬一次元ハロゲン架橋型混合原子価金属錯体の光物性に関しては, 今後, 益々発展していくものと思われる。特に, 物性理論から錯体合成化学までを巻き込んだ新しい研究分野となって発展していくと思われる。高温超伝導の理論では, これから, 特にフォノンとの相互作用による問題が重要であり, この認識は国際的にも高まっている。 C_{60} 結晶に関しても解明すべきことは山ほどある。

分子構造研究系

分子構造第一研究部門

齋藤修二(教授)

I-1) 専門領域：高分解能分子分光，宇宙電波分光

I-2) 研究課題

- a) 星間関連短寿命分子のミリ波，サブミリ波分光と分子構造
- b) 星間関連短寿命分子の赤外レーザー分光
- c) サブミリ波，遠赤外高感度分光法の開拓
- d) 分子雲における星間化学の解明
- e) サブミリ波望遠鏡の開拓

I-3) 研究活動の概略と成果

- a) 星間関連短寿命分子のミリ波，サブミリ波分光と分子構造
既設のミリ波，サブミリ波分光器を再整備，再調整し，これを用いて星間関連の新しいラジカル ND, PH, CaNC, ZnH(D), AlH, CH₂ のミリ波，サブミリ波スペクトルを明らかにし，詳細な分子定数を決定した。
- b) 星間関連短寿命分子の赤外レーザー分光
既設の赤外ダイオードレーザー分光装置を再整備しつつある。
- c) サブミリ波，遠赤外高感度分光法の開拓
高安定高出力 CO₂ レーザー，CO₂ 励起遠赤外レーザーを新たに導入し，遠赤外レーザー光とマイクロ波を非線形素子で混合し，波長可変な側波帯を取り出すためのマウントを設計，開発している。
- d) 分子雲における星間化学の解明
国立天文台野辺山宇宙電波観測所の 5 素子干渉計を用い，分子雲オリオン A 領域での NH₂D, CH₃OD の分布を測定した。解析の結果，オリオン A 領域に存在する大部分の NH₃, CH₃OH が星間塵より生成したことが判明した。この結果はこれまでの気相反応を中心とした星間化学に星間塵関連反応をも同等に考慮することを要請している。
- e) サブミリ波望遠鏡の開拓
国内で唯一の適地である富士山頂にサブミリ波望遠鏡を建設すべく，そのための調査，望遠鏡本体，受信機，分光器，通信回線の設計を進めている。実験室サブミリ波分光およびサブミリ波天文学の密接な協力で新しい学問領域の展開を目指す。

II-1) 学術論文

S. SAITO and M. GOTO, "Laboratory Submillimeter-Wave Observation of the N=1-0 Transition of the ND (³Σ⁻) Radical", *Astrophys. J.* 410, L53 (1993).

T. C. STEIMLE, S. SAITO, and S. TAKANO, "Laboratory Measurement of the Millimeter-Wave Spectra of Calcium Isocyanide," *Astrophys. J.* 410, L49 (1993).

M. GOTO and S. SAITO, "Submillimeter-Wave Spectra of the PH and PD Radicals in the ³Σ⁻ State", *Chem. Phys. Letters*, 211, 443 (1993).

II-3) 総説，著書

齋藤修二「宇宙に漂うフリーラジカル」，化学工業，45, 2024 (1992).

II-5) 受賞，表彰

仁科記念賞 (1991).

東レ科学研究賞 (1993).

II-6) 学会および社会的活動

学会の組織委員

第14回フリーラジカル国際会議組織委員，三田，(1989).

International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, "The Chemistry and Spectroscopy of Interstellar Molecules", 組織委員，Honolulu, (1989).

第20回フリーラジカル国際会議組織委員，裾野，(1989).

第19回赤外，ミリ波国際会議組織委員，仙台 (1994).

文部省，学振等の委員会委員

文部省学術審議会専門委員 (1990).

国立天文台電波専門委員会プログラム小委員会委員 (1991~).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (1991, 1992).

科研費の班長，研究代表者等

文部省科学研究費補助金重点領域「星間物質」研究班長 (1991-1994).

II-7) 他大学での講義

学習院大学理学部，化学特別講義，1992年4月。

III. 研究活動の課題と展望

- 課題
- a) 星間関連短寿命分子のミリ波，サブミリ波分光と分子構造
 - b) 星間関連短寿命分子の赤外レーザー分光
 - c) サブミリ波，遠赤外高感度分光法の開拓
 - d) 分子雲における星間化学の解明
 - e) サブミリ波望遠鏡の開拓

展望：今後の主な研究活動としては，課題c) およびe) に力を入れる。

森田 紀 夫 (助教授)

I-1) 専門領域: レーザー分光学, 量子エレクトロニクス

I-2) 研究課題

- a) 原子の2電子励起状態の分光と電子相関の研究
- b) 分子の超励起状態の分光とダイナミクスの研究
- c) 中性原子のレーザー冷却・トラップの研究
- d) エキゾチック原子(分子)のレーザー分光

I-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 原子の2電子励起状態の分光と電子相関の研究
カルシウム原子の2電子励起状態の5光子イオン化レーザー分光を行うと共に, 電子相関の様子を理論計算によって調べた。実験では, 同一の高励起軌道に2電子が入った最も電子相関の強い状態を初めて観測し, それらの状態が分子状で, しかも水分子のように曲がっている可能性を理論計算で示した。
- b) 分子の超励起状態の分光とダイナミクスの研究
超励起状態における自動電離過程と前期解離過程の競合状況をNO分子を対象として調べた。窒素原子の四重項状態への前期解離の重要性, 競合における強い回転準位依存性とその原因, 回転自動電離と前期解離の速さの比較, 高電子軌道角運動量状態における競合状況などを初めて明らかにした。
- c) 中性原子のレーザー冷却・トラップの研究
レーザー冷却可能な最も軽い原子であるヘリウム原子を対象として, レーザー冷却・トラップの研究を行った。直径0.8mmのほぼ球形の領域に 10^8 個の準安定ヘリウム原子を230 μ Kの並進温度でトラップすることに成功した。
- d) エキゾチック原子(分子)のレーザー分光
反陽子を高密度のヘリウム原子中に注入したときに生成されることが推定されている反陽子ヘリウム原子(分子)をレーザー分光によって観測する方法を提案し, それに基づいてCERN研究所の反陽子ビームを用いた実験を準備している。

II-1) 学術論文

- M. KUMAKURA and N. MORITA, "Visible Observation of Metastable Helium Atoms Confined in an Infrared / Visible Double Resonance Trap", *Jpn. J. Appl. Phys.* 31, L276 (1992).
- A. FUJII and N. MORITA "Rotational State Dependence of Decay Dynamics in the Superexcited 7f Rydberg State ($v=1$) of NO", *J. Chem. Phys.* 97, 327 (1992).
- A. FUJII and N. MORITA, "Laser Investigation of the Competition between Rotational Autoionization and Predissociation in Superexcited np Rydberg States of NO", *J. Chem. Phys.* 98, 4581 (1993).

- N. MORITA, K. OHTSUKI and T. YAMAZAKI, "Laser Spectroscopy of Metastable Antiprotonic Helium Atomcules", *Nucl. Instrum. Methods A* 330, 439 (1993).
- E. WIDMANN, H. DANIEL, J. EADES, T. von EGIDY, F. J. HARTMANN, R. S. HAYANO, W. HIGEMOTO, J. HOFFMANN, T. M. ITO, Y. ITO, M. IWASAKI, A. KAWACHI, N. MORITA, S. N. NAKAMURA, N. NISHIDA, W. SCHMID, I. SUGAI, H. TAMURA, and T. YAMAZAKI, "Antiproton Trapping in Various Helium Media: Report of the HELIUMTRAP Experiment at LEAR", *Nucl. Phys. A* 588, 679 (1993).

II-2) 国際会議プロシーディングス

- A. FUJII and N. MORITA, "Laser Investigation of Decay Dynamics in Superexcited Rydberg States of NO", in "Laser Techniques for State-Selected and State-to-State Chemistry", C. Y. Ng Ed., The International Society for Optical Engineering, pp. 184-195 (1993).

II-4) 招待講演

- 森田紀夫「原子の二電子励起状態のレーザー分光と電子相関」, 日本分光学会装置部会シンポジウム, 理化学研究所, 1992年5月。
- N. MORITA, "Laser Investigation and R-matrix Calculation of Two-Electron Excited States of Ca", International Workshop "New Developments in Two Electron Atoms and Ions", University of Colorado (USA), July 1992.
- 森田紀夫「反陽子ヘリウム原子のレーザー分光実験計画について」, 研究会「エキゾチック原子の動的過程の理論的研究」, 理化学研究所, 1992年9月。
- 森田紀夫「ヘリウム原子のレーザー冷却・トラップ」, レーザー分光と原子物理研究会, 東伊豆町稲取, 1992年11月。
- 藤井朱鳥, 森田紀夫「NO超励起状態のレーザー分光: 回転自動イオン化・前期解離競合過程」, 第11回宇宙空間原子分子過程研究会, 宇宙科学研究所, 1992年12月。
- A. FUJII and N. MORITA, "Laser Investigation of Decay Dynamics in Superexcited Rydberg States of NO", International Symposium "Laser Techniques for State-Selected and State-to-State Chemistry", Los Angeles (USA), January 1993.

II-6) 学会および社会的活動

- 学協会役員, 委員
応用物理学会量子エレクトロニクス研究会幹事 (1984-1987)

III 研究活動の課題と展望

これまでに行った超励起状態の研究では, 振動回転エネルギーによってイオン化しきい値を越えている, いわゆる第二種の超励起状態のみを扱ってきた。今後は二電子励起状態である第一種の超励起状態の研究にも挑んでみたい。レーザー冷却・トラップについては, トラップされる原子数の増加が重要な課題であるが, それを克服して今後はボーズ凝縮などの基礎的物

理現象の研究や、原子波干渉計、原子・分子衝突反応等への応用研究を進めてみたい。また、分子のレーザー冷却法の開発もその応用性の広さを考えると重要な課題である。

分子動力学研究部門

北 川 禎 三 (教授)

I-1) 専門領域：振動分光学, 生物物理化学

I-2) 研究課題

- 1) 生体系における酸素活性化機構
- 2) タンパク質高次構造による機能制御と紫外共鳴ラマン分光
- 3) タンパク質高次構造及びそのダイナミックス
- 4) ポルフィリンの励起状態の構造及びそのダイナミックス
- 5) 振動分光学の新テクニックの開発
- 6) 呼吸系及び光合成反応中心における電子移動/プロトン輸送カップリング機構

I-3) 研究活動の概略と主な成果

時間分解共鳴ラマン分光法を主たる実験手法とし、反応中間体や励起状態のように寿命の短い分子種の振動スペクトルを観測することにより、反応する分子の動的構造を解明して機能との関係を明らかにする方向で研究を進めている。扱う物質としては金属タンパクとそのモデル化合物が主で、次のように分類される。

1. 生体系における酸素活性化機構, $O_2 \rightarrow H_2O$ のチトクロム酸化酵素, $O_2 \rightarrow H_2O + SO$ のチトクロム P-450, $H_2O_2 \rightarrow H_2O + 1/2O_2$ のペルオキシダーゼ等のヘム環境の特色, その反応中間体である高酸化ヘムの $Fe^{IV} = O$ 伸縮振動の検出等, この分野の国際的フロンティアをつくっている。チトクロム酸化酵素による O_2 還元機構の研究は平成5年の化学会進歩賞受賞の栄誉に輝いた。
2. タンパク質高次構造による機能制御と紫外共鳴ラマン分光。ヘモグロビンの4次構造を反映するラマン線を見つけ帰属した。また200 nm付近のレーザー光でラマン散乱を測定できる実験系を制作し、タンパク質の高次構造の研究に応用した。
3. 時間分解法によるタンパク質動的構造の解明。ミオグロビンCO付加体の光解離・再結合過程をナノ秒可視ラマンで追跡した。多数の人口変異体を用いた研究を進めつつある。時間分解紫外共鳴ラマンも同時に調べている。
フィトクロム, 光合成反応中心タンパク等も取り扱っている。
4. 励起状態の構造及びそのダイナミックス。ポルフィリンの一重項, 三重項励起状態をナノ秒ラマンで, 金属ポルフィリンの(d d)励起状態の振動緩和をピコ秒ラマンで解明した。
5. 新しい原理を用いたフーリエ変換ラマン分光計の試作及びCCDを用いたスキャンニング・マルチチャンネルラマン分光器の試作。

II-1) 学術論文

S. SATO, K. KAMOGAWA, K. AOYAGI, and T. KITAGAWA, "Time-resolved resonance Raman investigation of photoreduction of ironoctaethylporohyrin complexes by using quasi-simultaneous pump/probemeasurement technique.", *J. Phys. Chem.* 26, 10676 (1992).

S. KAMINAKA and T. KITAGAWA, "A novel idea for practical UV resonance Raman measurement with a double-monochromator and its application to protein structural studies.", *Appl. Spectrosc.* 46, 1804 (1992).

S. ADACHI, S. NAGAMO, K. ISHIMORI, Y. WATANABE, I. MORISHIMA, T. EGAWA, T. KITAGAWA, and R. MAKINO, "Role of proximal Ligand in heme proteins: Replacement of proximal histidine of human myoglobin with cysteine and tyrosine by site-directed mutagenesis as models for P-450, chloroperoxidase, and catalase," *Biochemistry* 32, 241 (1993).

S. TAKAHASHI, T. OGURA, K. SHINZAWA-ITOH, S. YOSHIKAWA, and T. KITAGAWA, "Resonance Raman studies on the Cu_A site of cytochrome c oxidase using a multichannel scanning Raman spectrometer with a CCD detector.", *Biochemistry* 32, 3664 (1993).

T. LIAN, B. LOCKE, T. KITAGAWA, M. NAGAI, and R. M. HOCHSTRASSER, "Determination of Fe-CO geometry in the subunits of carbonmonoxy hemoglobin M Byoston using femtosecond infrared spectroscopy.", *Biochemistry* 32, 5809 (1993).

Y. SAKAN, T. OGURA, T. KITAGAWA, F. A. FRAUNFELTER, R. MATTERA, and M. IKEDA-SAITO, "Time-resolved resonance Raman study on the binding of carbon-monoxide to recombinant human myoglobin and its distal histidine mutants." *Biochemistry* 32, 5815 (1993).

Y. MIZUTANI, S. TOKUTOMI, S. KAMINAKA, and T. KITAGAWA, "Ultraviolet resonance Raman spectra of pea intact, Large, and small phytochromes: Differences in molecular topography of the red and far-red absorbing forms.", *Biochemistry* 32, 6916 (1993).

S. TAKAHASHI, J. S. AHN, S. ASAKA, and T. KITAGAWA, "Multichannel Fourier transform spectroscopy using two-dimensional detection of interferogram and its application to Raman spectroscopy.", *Appl. Spectrosc.* 47, 863 (1993).

II-2) 国際会議プロシーディングス

T. KITAGAWA, Y. SAKAN, T. OGURA, F. A. FRAUNFELTER, R. MATTERA, and M. IKEDA-SAITO, "Time-resolved resonance Raman study of recombination intermediates of photodissociated CO of myoglobin and its E7 mutants." in "Laser Spectroscopy of Biological Molecules.", J. E. I. Korppi-Tommola Ed., *SPIE* 1921, 187 (1993).

T. KITAGAWA, Y. SAKAN, T. OGURA, F. A. FRAUNFELTER, R. MATTERA, and M. IKEDA-SAITO, "Recombination dynamics of photodissociated CO of myoglobin and its E7 mutants studied by time-resolved resonance Raman spectroscopy." in "Frontiers of photobiology.", A. Shima, M. Ichihashi. Y. Fujiwara, and H. Takabe Eds., pp. 205-207, *Excerpta Medica*, Tokyo (1993).

S. SATO, K. AOYAGI, and T. KITAGAWA, "Time-resolved resonance Raman study of the lowest excited singlet and triplet states of free-base porphyrins.", *ICORS Würzburg 92*, W. Kiefer, M. Cardona, G. Schaack, F. W. Schneider, H. W. Schröter Eds., p. 174-175, Wiley (1992).

T. KITAGAWA, Y. SAKAN, T. OGURA, R. S. LUTZ, L. L. MONETTE, R. MATTERA, and M. IKEDA-SAITO, "Time-resolved resonance Raman study on recombination dynamics of photodissociated CO of human myoglobin and its mutants.", *ICORS Würzburg 92*, W. Kiefer, M. Cardona, G. Schaack, F. W. Schneider, H. W. Schröter Eds., *ibid*, p. 506-507, Wiley (1992).

II-3) 総説, 著書

小倉尚志, 北川禎三「共鳴ラマンスペクトルとシトクロム」, 「新生化学実験講座」5, 97-105 (1992) 東京化学同人
北川禎三「時間分離ラマン分光法よりみたアロテリック転移」生物物理32, 7-11 (1992)

II-4) 招待講演

T. KITAGAWA, Y. SAKAN, T. OGURA, and M. IKEDA-SAITO, "Time-resolved resonance Raman study on recombination dynamics of photodissociated carbonmonoxy-myoglobin", 4th Intl. Conf. on Laser Applications in Life Sciences, Jyväskylä (Finland), 7-11 September 1992

T. KITAGAWA, Y. SAKAN, T. OGURA, and M. IKEDA-SAITO, "Time-resolved resonance Raman study on recombination dynamics of photodissociated carbonmonoxy-myoglobin" 11th Intl. Congress on Photobiology, Kyoto (Japan), 7-12 September 1992

II-5) 受賞, 表彰

日本化学会 学術賞 北川禎三 1988
日本化学会 進歩賞 小倉尚志 1993

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

日本分光学会 東海支部 幹事, 1986.4~1991.3
評議員, 1987~

日本化学会 東海支部 代議員, 1986~1988

〃 幹事, 1988~1990

化学展 92 企画委員会 副委員長 1991

学会の組織委員

International Conference on Raman Spectroscopy, International Steering Committee 1988~

International Conference on Time Resolved Vibrational Spectroscopy, International Organizing Committee 1989~

11th International Congress on Photobiology, Symposium organizer 1992

Vth Intl. Conf. on Time-resolved Vibrational Spectroscopy (Tokyo), Local Organizing Committee 1991

文部省・学振等の委員

文部省 学術審議会 専門委員会 (科研費 審査委員) 1991~1993

学 振 特別研究員等審査会専門委員, 1992, 1993

学会誌編集委員

Journal of Molecular Liquids (Editorial Board)

Asian Journal of Physics (Advisory Board)

科研費の班長研究代表者等

重点研究「生物無機」, 班長 1991~1993

II-7) 他大学での講義

岡崎女子大学, 1993 1月~2月

東京工業大学, 1993 2月

III 研究活動の課題と展望

1. シトクロム酸化酵素における電子移動とプロトン輸送とのカップリング機構の解明
 2. 生体NOの合成及び反応機構: 時間分解赤外分光
 3. 鉄ポルフィリン及びヘムタンパク質の光還元機構: ピコ秒時間分解共鳴ラマン分光
 4. 光合成反応中心タンパク質のキノンBにおける電子移動/プロトン輸送のカップリング: 紫外共鳴ラマン分光
 5. タンパク質の速いダイナミックスとそれに対するアミノ酸置換の効果: 時間分解共鳴ラマン分光
 6. 生体における酸素活性化機構
- 以上のテーマを中心に時間分解振動分光の手法をシャープに行かした研究を進めていきたい。

加 藤 立 久 (助教授)

I-1) 専門領域: 凝集系の分子分光学

I-2) 研究課題

- a) 凝集系における分子運動のコヒーレンスの検出
- b) フラーレン類のラジカルの分子分光学的研究
- c) 光ラマンビート検出法による磁気共鳴分光

I-3) 研究活動の概略と成果

- a) 凝集系における分子運動のコヒーレンスの検出
一般的回折格子分光器とファブリペロー干渉計の組み合わせによるタンデム分光器を組み立てることで、低波数シフトラマン線の観測や超高分解ラマン線形解析が可能になった。また動的な外部関数の変動に対する系の応答を、タンデム分光器を用いて観測して、溶液系、液晶系、高分子系の分子運動を詳しく調べることができるようになった。
- b) フラーレン類のラジカルの分子分光学的研究
 C_{60} のアニオンラジカルの吸収、発光、ESRスペクトルを観測して、分子構造にヤーンテラー歪みがかかっている実験的証拠を示した。また、金属内包フラーレンについて ESR測定の変温度変化から磁氣的相互作用の大きさを見積もり、電子構造に関する新しい情報を得た。
- c) 光ラマンビート検出法による磁気共鳴分光
現在進行中の研究計画であり、レーザー光を用いた磁気共鳴分光を試みる。光を用いることにより、高スピン分子や金属錯体などの、状態や種を選択した磁気共鳴が可能になる。また、条件が揃えば電子励起状態の磁気共鳴が可能で電子励起状態のスピン状態が直接観測できる。

II-1) 学術論文

S. SUZUKI, S. KAWATA, H. SHIOMARU, K. YAMAUCHI, K. KIKUCHI, T. KATO, and Y. ACHIBA, "Isomers and ^{13}C Hyperfine Structure of Metal Encapsulated Fullerenes, $M@C_{82}$ ($M=Sc, Y, \text{and } La$).", *J. Chem. Phys.* 96, 7159 (1992).

S. NAGASE, K. KOBAYASHI, T. KATO, and Y. ACHIBA, "A Theoretical Approach to C_{82} and $La@C_{82}$.", *Chem. Phys. Lett.* 201, 475 (1993).

T. KATO, T. KODAMA, and T. SHIDA, "Spectroscopic studies of the Radical Anion of C_{60} : Detection of the Fluorescence and Reinvestigation of the ESR Spectrum.", *Chem. Phys. Lett.* 205, 405 (1993).

II-4) 招待講演

T. KATO, "Studies on Radical Ions of Fullerenes", The American Electrochemical Society Meeting, St. Louis (U.S.A.), May 17 - 22, 1992.

T. KATO, "Spectroscopic Studies on Radical Ions of Fullerenes", Gordon Research Conference on Radical Ions, Wolfeboro, New Hampshire (U.S.A.), June 22 - 28, 1992.

III 研究活動の課題と展望

現在進行している“凝集系における分子運動のコヒーレンスの検出”と“光ラマンビート検出法による磁気共鳴分光”は、凝集系の動力学をエネルギースペクトルやスペクトル線形解析の立

場から研究するものであり、今後実時間変化を直接追跡する方法との整合性と、対照点を明確にしていきたい。また新しい物質として我々が注目しているフラーレン類についても、我々が進めている新しい分光学的手段の測定対象と捕らえていきたい。

電子構造研究系

基礎電子化学研究部門

吉原 経太郎 (教授)

I-1) 専門領域: 光化学, レーザー化学

I-2) 研究課題

- a) 分子間電子移動機構の研究
- b) ラマンエコー法による振動の位相緩和の研究
- c) 光合成化学系反応中心におけるエネルギー移動, 初期電子移動の研究
- d) 色素J-会合体の励起状態ダイナミックスの研究
- e) アルカリ金属二量体の光解離ダイナミックスにおける共鳴効果の研究
- f) 直鎖ポリエンの分光とダイナミックスの研究

I-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 電子供与性溶媒中と電子受容体色素の系を用いて, 超高速 (フェムト秒) の分子間電子移動を発見した。この反応は溶媒和過程より速く起こる新しい機構によるものであることを明らかにした。
- b) ラマンエコー法は物質の7次の非線感受率の測定を通じて, 振動の位相緩和に及ぼす均一効果と不均一効果を区別することができる手法である。ラマンエコーを測定できるフェムト秒時間分解分光装置を試作し, ベンゾニトリルのC≡N伸縮振動などの均一効果を測定した。
- c) 本来の電子受容体であるフィロキノンを除去した反応中心と, 合成キノンであるメナキノンを再構成した反応中心とのあいだで過渡吸収変化を比較することによって, キノンの前段の電子受容体の存在を明らかにし, 再構成キノンが天然キノンと同様に働いていることを示すことができた。
- d) シアニン色素 (BIC) のJ-会合体の蛍光時間分解スペクトルを観測し, 励起状態の緩和過程を測定した。また, ピコ秒過渡分光法によって会合体内の1励起子および多励起子ダイナミックスを観測した。
- e) 高温パルスノズルを開発し, 共鳴多光子イオン化法によって, セイウム二量体のいくつかの新しい準位を見い出した。特に, Cs₂の前期解離において多チャンネル量子干渉効果を見い出した。
- f) 超音速自由噴流中の低温直鎖ポリエン (トリエン, テトラエン) 分光を行い, 励起状態の構造とダイナミックスについていくつかの新しい知見を得た。

II-1) 学術論文

H. KANDORI, K. YOSHIHARA, and S. TOKUTOMI, "Primary Process of Phytochrome : Initial Step of Photomorphogenesis in Green Plants", *J. Am. Chem. Soc.* 114, 10958

(1992).

R. INABA, H. OKAMOTO, K. YOSHIHARA, and M. TASUMI, "Observation of the Dephasing of the C≡N Stretching Vibration in Liquid Nitriles by Femtosecond Time-Resolved Coherent Anti-Stokes Raman Scattering", *J. Phys. Chem.* 96, 8385 (1992).

J. HERBICH, J. KARPIUK, Z. R. GRABOWSKI, N. TAMAI, and K. YOSHIHARA, "Modification of the Intramolecular Electron Transfer by Hydrogen Bonding: 4-(Dialkylamino) Pyrimidines", *J. Lumines.* 54, 165 (1992).

M. J. E. MORGENTHALER, S. R. MEECH, and K. YOSHIHARA, "The Inhomogeneous Broadening of the Electronic Spectra of Dyes in Glycerol Solution. A Time-Resolved Fluorescence Study", *Chem. Phys. Lett.* 197, 537 (1992).

H. OKAMOTO and K. YOSHIHARA, "Femtosecond Time-Resolved CARS: Time Domain Observation of Molecular Vibrational Dynamics", *Time Resolved Spectroscopy V*, H. Takahashi Ed., Springer, Berlin, 231 (1992).

H. OKAMOTO, R. INABA, K. YOSHIHARA, and M. TASUMI, "Femtosecond Time-Resolved Polarized Coherent Anti-Stokes Raman Studies on Reorientational Relaxation in Benzonitrile", *Chem. Phys. Lett.* 202, 161 (1993).

B. KIM and K. YOSHIHARA, "Determination of Adiabatic Ionization Potentials of Cs₂ and Cs₃ in a Very Cold Molecular Beam Using Time-of-Flight Mass Spectrometry", *Chem. Phys. Lett.* 202, 437 (1993).

B. KIM and K. YOSHIHARA, "Triplet-Triplet Transition of Cs₂ Studied by Multiphoton Ionization Spectroscopy in a Very Cold Pulsed Molecular Beam", *Chem. Phys. Lett.* 204, 407 (1993).

R. B. PANSU, K. YOSHIHARA, T. ARAI, and K. TOKUMARU, "Convolution Analysis of the Pyrene Excimer Formation in Membranes", *J. Phys. Chem.* 97, 1125 (1993).

H. PETEK, A. J. BELL, Y. S. CHOI, K. YOSHIHARA, B. T. TOUNGE, and R. L. CHRISTENSEN, "The 2¹Ag State of trans,trans-1, 3, 5, 7,-Octatetraene in Free Jet Expansions", *J. Chem. Phys.* 98 (5), 3777 (1993).

A. YARTSEV, Y. NAGASAWA, A. DOUHAL, and K. YOSHIHARA, "Solvent and Nuclear Dynamics in Ultrafast Intermolecular Electron Transfer in a Diffusionless, Weakly Polar System", *Chem. Phys. Lett.* 207, 546 (1993).

H. OKAMOTO, R. INABA, M. TASUMI, and K. YOSHIHARA, "Femtosecond Vibrational Dephasing of the C≡N Stretching in Alkanenitriles with Long Alkyl Chains. Dependence on the Chain Length and Hydrogen Bonding", *Chem. Phys. Lett.* 206, 388 (1993).

R. F. BORKMAN, A. DOUHAL, and K. YOSHIHARA, "Picosecond Fluorescence Decay in Photolyzed Lens Protein α -Crystallin", *Biochem.* 32, 4787 (1993).

B. KIM and K. YOSHIHARA, "The 480 nm System of Cs₂ Studied in a Very Cold Molecular Beam: Direct Observation of a New E⁻ and the Ion-Pair State", *J. Chem. Phys.* 98, 5990 (1993).

R. F. BORKMAN, A. DOUHAL, and K. YOSHIHARA, "Picosecond Fluorescence Decay of Lens Protein γ -Crystallin", *Biophys. Chem.* 32, 4787 (1993).

K. YOSHIHARA, A. YARTSEV, Y. NAGASAWA, H. KANDORI, and K. KEMNITZ, "Femtosecond Intermolecular Electron Transfer between Dyes and Electron-Donating Solvents", *Pure & Appl. Chem.* 65, 1671 (1993).

R. INABA, H. OKAMOTO, K. YOSHIHARA, and M. TASUMI, "Femtosecond Time-Resolved Coherent Anti-Stokes Raman Scattering of the C $\equiv$ C Stretching in Liquefied Alkanes", *J. Phys. Chem.* 97, 7815 (1993).

R. INABA, K. TOMINAGA, K. A. NELSON, and K. YOSHIHARA, "Observation of Homogeneous Vibrational Dephasing in Benzonitrile by Ultrafast Raman Echoes", *Chem. Phys. Lett.* 211, 183 (1993).

B. KIM and K. YOSHIHARA, "Multichannel Quantum Interference in the Predissociation of Cs₂: Observation of q-Reversal in a Complex Resonance", *J. Chem. Phys.* 99, 1433 (1993).

A. E. JOHNSON, S. KUMAZAKI, and K. YOSHIHARA, "Pump-Probe Spectroscopy of Exciton Dynamics of J-Aggregate at High Pump Intensity", *Chem. Phys. Lett.* 211, 511 (1993).

H. KANDORI, K. YOSHIHARA, H. TOMIOKA, H. SASABE, and Y. SHICHIDA, "Comparative Study of Primary Photochemical Events of Two Retinal Proteins, Bacteriorhodopsin and Halorhodopsin, by Use of Subpicosecond Time-Resolved Spectroscopy", *Chem. Phys. Lett.* 211, 385 (1993).

Y. NAGASAWA, A. P. YARTSEV, K. TOMINAGA, A. E. JOHNSON, and K. YOSHIHARA, "Substituent Effects on Intermolecular Electron Transfer: Coumarins in Electron-Donating Solvents", *J. Am. Chem. Soc.* 115, 7922 (1993).

II-2) 国際会議プロシーディングス

T. SUZUMOTO, K. KEMNITZ, K. YOSHIHARA, and T. TANI, "Measurement of Picosecond Fluorescence Lifetimes of J-Aggregates of Cyanine Dye Adsorbed on AgBr", in *"Chemistry of Functional Dyes"*, Vol. 2, Eds. Z. Yoshida and Y. Shirota, *Mita Publ.*, Tokyo, 140 (1993).

H. KANDORI, K. YOSHIHARA, H. TOMIOKA, H. SASABE, and Y. SHICHIDA, "Primary Events in Retinal Proteins", in *"Recent Advances in Photosciences"*, Eds. M. Yong and P. S. Song *Chungnam National University*, Taejon (Korea) 90 (1993).

K. YOSHIHARA, H. PETEK, Y. FUJIWARA, J. H. PENN, and J. H. FREDERICK, "Vibrational Mode Dynamics of Photocyclization in *cis*-Stilbene and Its Related Compounds", in *"Time Resolved Vibrational Spectroscopy V"*, H. Takahashi Ed., *Springer*, Berlin, 194 (1992).

H. OKAMOTO and K. YOSHIHARA, "Femtosecond Time-Resolved CARS: Time Domain Observation of Molecular Vibrational Dynamics". in *"Time Resolved Vibrational*

Spectroscopy V", H. Takahashi Ed., *Springer*, Berlin, 231 (1992).

K. YOSHIHARA, A. YARTSEV, Y. NAGASAWA, H. KANDORI, A. DOUHAL, and K. KEMNITZ, "Femtosecond Intermolecular Electron Transfer: Dye in Weakly Polar Electron-Donating Solvent", in *"Ultrafast Phenomena VIII"*, Eds. J. L. Martin, A. Migus, G. Mourou, A. Zewail, *Springer*, Berlin, 571 (1993).

V. F. KAMALOV, R. INABA, and K. YOSHIHARA, "Dephasing and Beats of Excitonic-Enhanced Transitions of J-Aggregates Measured by Femtosecond Time-Resolved Resonance CARS", in *"Ultrafast Phenomena VIII"*, Eds. J. L. Martin, A. Migus, G. Mourou, A. Zewail, *Springer*, Berlin, 87 (1993).

H. KANDORI, K. YOSHIHARA, H. TOMIOKA, H. SASABE, and Y. SHICHIDA, "Subpicosecond Time-Resolved Spectroscopy of Halorhodopsin and Comparison with Bacteriorhodopsin" in *"Ultrafast Phenomena VIII"*, Eds. J. L. Martin, A. Migus, G. Mourou, A. Zewail, *Springer*, Berlin, 566 (1993).

II-3) 総説, 著書

S. R. Meech, 吉原経太郎「2次非線形光学効果の表面, 界面研究への応用」, 日本物理学会誌 48, 29 (1993)

吉原経太郎「ピコ秒およびフェムト秒時間分解分光」, 入門レーザー応用技術, 高分子学会編集, 共立出版, 東京 p61 (1993).

II-4) 招待講演

K. YOSHIHARA, "Ultrafast Electron Transfer in Adjacent Molecular Systems," US-Japan Seminar on "New Aspects of Molecular Photochemistry in Photoconversion" Tsukuba (Japan), April 1992.

K. YOSHIHARA, A. DOUHAL, Y. NAGASAWA, A. YARTSEV, H. KANDORI, and K. KEMNITZ, "Femtosecond Intermolecular Electron Transfer: Dyes in Weakly Polar Electron-Donating Solvents," Eighth International Conference on Ultrafast Phenomena, Antibes (France), June 1992.

K. YOSHIHARA, "Femtosecond Intermolecular Electron Transfer and Its Mechanism" Department of Chemistry, Ecole Normale Supérieure, Cachan (France), June 1992.

K. YOSHIHARA, "Ultrafast Electron Transfer in Adjacent Molecular Systems: Femtosecond Intermolecular Electron Transfer between Dyes and Electron-Donating Solvents," Symposium on Subpicosecond Processes in Physics, Chemistry and Biology, Imperial College of Science, Technology, and Medicine, London (UK), July 1992.

K. YOSHIHARA, "Primary Events in Retinal Proteins," International Symposium on Photochemistry, Photobiology, and Photomedicine, Taejon (Korea), September 1992.

K. YOSHIHARA, A. YARTSEV, Y. NAGASAWA, H. KANDORI, A. DOUHAL, and K. KEMNITZ, "Femtosecond Intermolecular Electron Transfer between Dyes and

Electron-Donating Solvents,” Experimental and Theoretical Aspects of Excited State Electron Transfer and Related Phenomena, Pultusk (Poland), September 1992.

K. YOSHIHARA, A. YARTSEV, Y. NAGASAWA, H. KANDORI, A. DOUHAL, and K. KEMNITZ, “Observation of Direct and Solvent-Controlled Electron Transfer in Femtosecond Timescale”, Israel-Japan Joint Symposium on Molecular Dynamics and Chemical Reactivity, Okazaki (Japan), October 1992.

吉原経太郎, 「反応の追跡とフェムト秒分光」, 日本分光学会シンポジウム, 東京, 1992年11月

K. YOSHIHARA, A. YARTSEV, Y. NAGASAWA, H. KANDORI, A. DOUHAL, and K. KEMNITZ, “Femtosecond Intermolecular Electron Transfer: A Reaction beyond Solvent Control” International Meeting on Dynamic Control of Electron Transfer in Molecular Systems, Kyoto (Japan), November (1992).

吉原経太郎, 「電子移動反応: その動的な側面」, 第24回物理化学セミナー, 京都, 1993年1月

K. YOSHIHARA, “Femtosecond Phenomena in Molecular Science” Tata Institute of Fundamental Research Seminar, Bombay (India), March 1993.

K. YOSHIHARA, “Ultrafast Electron Transfer in Adjacent Molecular Systems” US-Japan Seminar on Molecular Photophysics of Molecular Assemblies, Palm Springs (USA), March 1993.

H. PETEK, A. J. BELL, R. L. CRISTENSEN, and K. YOSHIHARA, “Structure and Dynamics of Linear Polyenes”, The International Laser Science Conference, Albuquerque (USA), September 1993.

II-5) 受賞, 表彰

レーザー学会進歩賞, 高木芳弘, 住谷実, 中島信昭, 吉原経太郎, 光パラメトリック発振器による高出力ピコ秒連続波長可変レーザー, 1983年
レーザー学会功勞表彰, 吉原経太郎, 1993年

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

日本化学会 東海支部幹事 1983

レーザー学会 理事, 編集委員 1980 - 現在

光化学協会 常任委員, 委員 1980 - 現在

総合研究大学院大学 評議員 1993 - 現在

レーザー技術総合研究所 評議員 1988 - 現在

光科学技術研究所振興財団 審査委員 1991 - 現在

学会の組織委員

第5-8回超高速現象国際会議 プログラム委員 1986, 1988, 1990, 1992

第6回 超高速現象国際会議 組織委員 1987-1988

第12回 国際光化学会議 組織委員

1975ルミネッセンス国際会議 組織委員会 1974 - 1975

文部省, 学振等の委員会

科学科技会議 専門委員 1984

文部省学術審議会 専門委員 1986 - 1988, 1993

日本学術会議 専門委員 1974 - 1975

日本学術振興会 特別研究員等選考委員会委員

日米科学協力事業委員会委員 1993

日韓基礎科学合同委員会専門委員会委員 1993

学会誌編集委員

「分光研究」編集委員 1971 - 1973

「レーザー研究」編集委員 1984 - 現在

Bulletin of Chemical Society of Japan 編集委員 1975

「光化学」編集委員長 1989 - 1991

Photochemistry and Photobiology, Associate Editor 1984 - 1987

Chemical Physics, Editorial Board Member 1980 - 現在

Laser Chemistry, Editorial Board Member 1989 - 現在

Journal of Luminescence, Editorial Board Member 1990 - 現在

Chemical Physics Letters, Editorial Board Member 1992 - 現在

II-7) 他大学での講義

大阪大学工学部応用物理学科, 電子移動反応, 1992年12月

九州大学総合理工学部, 分子工学特別講義, 1992年12月

III 研究活動の課題と展望

フェムト秒電子移動は電子移動機構に新しい論点をもたらすと同時に, 非平衡反応の機構を研究する新しい研究手段となることを期待している。また, 新たに簡単な分子の溶液中の基本的な反応を超高速分光の立場から詳細に調べて行くことを企画している。ラマンエコー法は液体の構造と動的挙動を微視的な立場から調べる新しい手法となるものと期待される。色素会合体や光合成系のエネルギー移動や電子移動のダイナミックスについても集中的に調べていきたい。アルカリ金属の分光, 前期解離については, 量子準位の干渉効果の面から更に研究を進める。ポリエンの励起状態のダイナミックスが分子環境の変化をこれまでの分光研究の成果をもとにクラスターの問題として発展させる。反応中心濃縮粒子を用いて高等植物の光化学反応初期過程の詳細を明らかにしてゆく。

松 本 吉 泰 (助教授)

I-1) 専門領域: 表面科学

I-2) 研究課題

a) 固体表面上でのレーザー誘起反応ダイナミックス

b) 金属表面上での分子状酸素の反応性

I-3) 研究活動の概略と成果

a) 固体表面上でのレーザー誘起反応ダイナミックス

固体表面上では吸着種と表面との間の強い相互作用のため吸着種の励起状態は寿命が短く、その余剰エネルギーは迅速に固体中に散逸される。したがって、固体表面上の吸着種を光で励起して化学反応を誘起することは困難であると従来考えられてきた。本研究では、金属および半導体表面上に単分子層吸着した分子種に紫外レーザー光を照射することにより多様な非熱的過程を誘起することができることを示した。更に、表面からの脱離種の並進速度分布やその脱離角依存性を測定することにより、光励起の初期過程のメカニズムや反応のダイナミックスについて研究をおこなった。具体的な例としては、金属表面としてPt (111)、半導体表面としてはSi (100)の清浄表面を用い、吸着種としてはNO、N₂Oなどを用いた。特に、Pt (111)上での酸素原子とN₂Oの共吸着系では、N₂Oの光解離の結果生じた活性な酸素原子が表面とあらかじめ強く吸着していた酸素原子と反応するという新しいタイプの反応を見出した。

b) 金属表面上での分子状酸素の反応性

固体表面上での酸化反応をはじめとする酸素の反応は学術的にも実用面でも重要である。これまででは表面上の酸素原子に関する反応性について多くの研究がなされてきたが、分子状に吸着した酸素の反応性はほとんど知られていない。本研究では、Pt (111)上で酸素とNOとの間の酸素交換反応において分子状酸素が極めて高い反応性を示すことを初めて見出した。

II-1) 学術論文

K. SAWABE and Y. MATSUMOTO, "Structure of Adsorbed N₂O on a Pt (111) Surface and Photodissociation at 193 nm: Effective Formation of Oxygen Adatoms", *Chem. Phys. Lett.* 194, 45 (1992).

K. SAWABE and Y. MATSUMOTO, "Laser-induced Photochemistry of Nitrous Oxide on a Pt (111) Surface" *Surf. Sci.* 283, 126 (1993).

K. SAWABE, J. LEE, and Y. MATSUMOTO, "Dynamics of the Oxygen Combination Reaction on Pt (111) Initiated by Photodissociation of N₂O at 193 nm: O* + O(ad) → O₂(g)", *J. Chem. Phys.* 99, 3143 (1993).

T. MAJIMA, Y. MATSUMOTO, and M. TAKAMI, "On the SF₆-Sensitized IR Photodecomposition of Fe(CO)₅: 5 μm Transient Absorption Measurements and Absorption Energy Measurements", *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.* 71, 213 (1993).

II-2) 国際会議プロシーディングス

Y. MATSUMOTO, K. SAWABE, and J. LEE, "Photochemistry and Photodissociation Dynamics of N₂O on Metal Surfaces", in "Laser Techniques for State-Selected and State-to-State Chemistry", C.-Y. -Ng Ed., SPIE-The International Society for Optical Engineering, 1858, 378 (1993).

II-3) 総説、著書

松本吉泰「表面科学における状態から状態への化学」, 表面科学, 13, 572 (1993)

松本吉泰「ダイオードレーザー分光・二重共鳴」, 実験化学講座, 分光, 8, 148 (1993)

II-4) 招待講演

Y. MATSUMOTO, "Ultraviolet Photo-induced Reactions of N₂O Adsorbed on a Pt (111) Surface", Symposium on Molecular Science, Taipei (中華民国) 1992年12月

Y. MATSUMOTO, K. SAWABE, and J. LEE, "Photochemistry and Photodissociation Dynamics of N₂O on Metal Surfaces", SPIE Conference on "Laser Techniques for State-Selected and State-to-State Chemistry", Los Angeles (米国) 1993年1月

松本吉泰 「レーザー誘起表面化学反応のダイナミックス」物理化学セミナー, 京都, 1993年4月

III 研究活動の課題と展望

現在は主に「固体表面上でのレーザー誘起反応ダイナミックス」の研究課題のもとで金属や半導体の清浄表面に吸着した分子種の光誘起過程に関する研究をおこなってきた。今後は、更に脱離種のエネルギー状態分布の精密な測定とともに吸着種の幾何学的・電子的構造を明らかにすることにより、光誘起過程の機構と動的挙動に関する分子論的な理解を深めることに研究の主眼を置く。

電子状態動力学研究部門

花 崎 一 郎 (教授)

I-1) 専門領域：物理化学, 化学反応論

I-2) 研究課題

- a) 光分解反応の機構
- b) ファンデルワールス錯体の光化学反応
- c) 自己秩序形成系の光応答

I-3) 研究活動の概略と成果

- a) 光分解反応の機構
アセトアルデヒドの (n, π^*) 3 重項励起状態からのH C Oの生成過程を詳しく調べ, (n, π^*) 状態の振電構造を短波長にいたるまで決定した。また, 反応によって励起されるH C Oの回転エネルギー, 振動分布を決定した。さらに, 回転エネルギーの励起波長依存性から回転励起の機構を明らかにした。
- b) ファンデルワールス錯体の光化学反応
N₂O・H₂Oなどのファンデルワールス分子を光分解し, 生成するOHの振動回転分布をL I F法により測定し, 対応する2分子反応と比較して, 反応機構に分子間結合の効果がどのように発現するかを調べた。
- c) 自己秩序形成系の光応答
ベルーゾフ・ジャボチンスキー系などの振動化学反応について, 光照射による振動の誘起および抑止の初期過程をアクション・スペクトルによって決定する方法を提案し, これにもとづいて反応機構を論じた。また, 光強度を外部パラメーターとして相図を決定し, 分岐の構造について詳細な実験的検討を加えた。この結果, 従来ほとんど知られていなかった, 自己秩序形成系の光応答の様子が明確になってきた。とくに, 光照射が強度によって化学振動の誘起と抑止の双方向の働きをしよう, という興味深い事実をみいだした。

II-1) 学術論文

- Y. MORI and I. HANAZAKI**, "Primary Photochemical Processes of Light-Induces pH Oscillation in the Fe(CN)₅⁴⁻/H₂O₂ System", *J. Phys. Chem.* 96, 9083 (1992).
- M. TAKAYANAGI and I. HANAZAKI**, "SEP-LIF Spectra of Some Molecules and van der Waals Molecules in a Molecular Beam", *Springer Proceedings in Physics* 68, 245 (1992).
- I. HANAZAKI**, "Formation of Lambde-doublet Components of OH in the Bimolecular Reactions: H + OX → OH + X" *Chem Phys. Lett.* 201, 301 (1993).
- T. KONO, M. TAKAYANAGI, T. NISHIYA, and I. HANAZAKI**, "Photodissociation of Acetaldehyde Studied by the Photofragment Excitation Spectroscopy in a Supersonic

Free Jet", *Chem Phys. Lett.* 201, 166 (1993).

M. YOSHIMOTO, K. YOSHIKAWA, Y. MORI, and I. HANAZAKI, "Experiment in Coupled Chemical Oscillators Asymmetric Coupling Stabilizes Anti-Phase Mode", *Forma* 7, 39 (1992).

M. TAKAYANAGI and I. HANAZAKI, "Dynamics of Vibrationally Excited van der Waals Complexes : Stimulated-emission-pumping Laser-induced-fluorescence Spectroscopy of the Anisole・Ar Complex", *J. Chem. Phys.* 98, 6985 (1993).

M. TAKAYANAGI and I. HANAZAKI, "Observation of Intermolecular Vibrational Modes in the 2, 3-dihydrobenzofuran dimer", *Chem Phys. Lett.* 208, 5 (1993).

Y. MORI and I. HANAZAKI, "Bifurcation Structure of the Chemical Oscillation in the Fe(CN)₅⁴⁻-H₂O₂-H₂SO₄ System" *J. Phys. Chem.* 97, 7375 (1993).

N. OKAZAKI, Y. MORI and I. HANAZAKI, "Effect of Adding Starch on the Photoinhibition of Oscillation in the Briggs-Rauscher Reaction", *Chem. Lett.* 1135 (1993).

T. SEKIGUCHI, Y. MORI and I. HANAZAKI, "Photo-response of the [Ru(bpy)₃]²⁺/Br O₃/H⁺ System in a Continuous-Flow Stirred Tank Reactor", *Chem. Lett.* 1309 (1993).

II-3) 総説, 著書

- 花崎一郎, 森義仁, 関口哲生, 岡崎紀明, 「振動化学反応系の光応答」電子情報通信学会技術研究報告, NLP93 - 4 (1993)
- 花崎一郎「非線形現象と自己秩序形成」, 化学, 48, 387 (1993)

II-4) 招待講演

花崎一郎「振動化学反応系の光応答」電子情報通信学会研究会山口大学 (1993年5月)

II-7) 他大学での講義

群馬大学工学部, 物理化学, 1992年6月

III 研究活動の課題と展望

- a) 光分解反応の機構——解離生成物が2原子分子より大きい場合について, その振動回転励起を定量的に扱えるような理論と実験の解析法を開発する。
- b) ファンデルワールス錯体の光化学反応——錯体の構造と反応の特異性との関連をさらに明確にする。
- c) 自己秩序形成系の光応答——このような化学反応系の基本である自己触媒反応と系のゆらぎ等との関連を明らかにする。また, 振動反応系同志の相互作用について詳細に調べ, 生体系における情報伝達の機構との関連を明らかにする。

鈴木俊法（助教授）

I-1) 専門領域：レーザー分光学，化学反応動力学

I-2) 研究課題

- a) レーザー分光と画像観測を利用した化学反応実験法の開発
- b) 光解離および反応性散乱の動力学

I-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) レーザー分光と画像観測を利用した化学反応実験法の開発
レーザー共鳴多光子イオン化法により，化学反応生成物を「量子状態選択的に」イオン化し，その荷電雲の3次元空間分布を，2次元検出器に射映して撮像することに成功した。これにより，反応生成物の電子，振動，回転，および並進状態（速度ベクトル）が同時決定できるようになった。
- b) 光解離および反応性散乱の動力学
二つの発色団を持つ小さな有機分子について，光励起波長を選ぶことによって，特定の発色団を選択的に励起し，エネルギー緩和や解離のダイナミクスがどのように変化するかを，解離生成物の並進速度ベクトル分布から研究した。また，反応性散乱の研究を行う目的で，高輝度水素原子線源の開発を行った。

II-1) 学術論文

V. P. HRADIL, T. SUZUKI, S. A. HEWITT, P. L. HOUSTON, and B. J. WHITAKER, "An Investigation of the 355-nm Photodissociation of NO₂ by State-Resolved Photofragment Imaging", *J. Chem. Phys.* 99, 4455 (1993)

M. J. J. VRAKKING, A. S. BRACKER, T. SUZUKI, and Y. T. LEE, "Ultrasensitive Detection of Hydrogen Molecules by (2 + 1) REMPI", *Rev. Sci. Inst.* 64, 645 (1993)

T. SUZUKI and E. HIROTA, "Vibrational Distribution of CH₃ Produced by the Reaction of O(¹D₂) Atom with Methane", *J. Chem. Phys.* 98, 2387 (1993)

II-4) 招待講演

鈴木俊法「レーザー分光法による化学反応素過程の研究」，日本化学会東北支部物理化学コロキウム，平成4年11月

鈴木俊法，「化学反応における微分散乱断面積測定への画像観測法の応用」，第18回原子衝突研究協会研究会，平成5年8月

II-5) 受賞，表彰歴

分子科学研究奨励森野基金，平成5年度

III. 研究活動の課題と展望

荷電雲の3次元分布を射映として観測するのではなく，直接断層撮影する方法を現在開発中である。これにより，化学反応における微断面積の観測を，速度ベクトルと分子回転ベクトルの相関を取り入れた形で観測することが初めて可能になる。これは，現時点における最も詳細な化学反応実験の一つとなる。成層圏オゾン層の破壊機構は，現時点では65%程度しか明らかにされていない。その化学を解明するために，酸素原子や塩素原子を含むラジカル線源を開発し，画像観測法を導入した交差分子線実験を行う。

電子構造研究部門（客員部門）

鈴木 薫（助手）

I-1) 専門領域：物理化学，化学反応論

I-2) 研究課題

化学反応と磁場効果

I-3) 研究活動の概略と成果

1970年代後半から，わが国の研究者が中心になって，簡単な気相分子のけい光の磁場消光について研究例が増加してきた。その結果，磁場消光に関しては機構についてもかなり理解が深まってきた。しかし，気相化学反応に関しては，磁場の影響について研究例がいまだに限られているのが現状である。この理由の一つは，反応生成物を直接効率よく検出する手段が用いられていなかったことによると思われる。そこで，本研究では気相化学反応には磁場効果が発現する要因を調べ，またその類型化を行うことを目的として，反応生成物を直接検出して，反応の磁場効果を測定することを試みた。

1. NO β バンドの磁場消光 放電フロー中の化学反応で生成されるNOの励起状態では β バンド (B $\rightarrow$ X) 発光のみに大きな磁場効果が現れることを本研究室で見いだした。しかし，その機構はいまだに不明であるので，NO (B) を光励起で振動状態を選択して直接生成し，その発光の磁場効果を測定した。その結果，B 状態の $v=0, 1, 2$ からの発光では放電フロー実験に対応する磁場消光はまったく観測できなかった。したがって，NO (B) 状態の脱励起過程は外部磁場によらないとの結論が得られた。
2. CN B² Σ^+ $\sim$ A₂ 摂動の磁場効果 ($v=0$) と A ($v=11$) 間の $J=59\frac{1}{2}$ 準位での摂動に着目した。励起状態間の混ざり合いの係数， ρ ，の磁場依存性を調べた。摂動項およびゼーマン項を取り入れたハミルトニアン行列の対角化により求めた値と実測の摂動線の寿命から算出した値を比較した。実験した磁場の範囲では， ρ の変化は大きくはないが，ハミルトニアンの対角化から予想される寿命の変化は，実験結果と同一の傾向を示した。

II-1) 学術論文

K. KANDA, H. ITO, K. SUZUKI, T. KONDOW, and K. KUCHITSU, "Pressure-Dependent Intensity Anomalies in the $B^2\Sigma^+ \sim ^4\Pi$. Perturbed Rotational Lines of the CN ($B^2\Sigma^+ - X^2Z^+$) 14-14 Band," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **65**, 481 (1992).

H. ITO, Y. OZAKI, K. SUZUKI, T. KONDOW, and K. KUCHITSU, "Emission Spectrum of the CN ($B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$) Tail Band System. $B^2\Sigma^+ \sim ^4\Pi$ Perturbations in the $v_b = 9, 12$, and 17 Levels," *J. Chem. Phys.* **96**, 4195 (1992).

K. KANDA, H. ITO, K. SUZUKI, T. KONDOW, and K. KUCHITSU, "A Comment on the Vibrational Assignment of the CN($^4\Pi$) in 'Pressure-Dependent Intensity Anomalies in the $B^2\Sigma^+ \sim ^4\Pi$ Perturbed Rotational Lines of the CN($B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$) 14-14 Band'," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **65**, 1195 (1992).

H. YASUMATSU, K. SUZUKI, and T. KONDOW, "Vibrational Distributions of the CN($B^2\Sigma^+$) in the Dissociative Excitation of KCN and NaCN with Ar Metastable Atoms: Bimodal Vibrational Distributions from KCN," *J. Phys. Chem.* **97**, 6788 (1993).

H. ITO, K. SUZUKI, T. KONDOW, and K. KUCHITSU, "An Analysis of the $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ Emission of SiN. Dependence of the Electronic Transition Moment on the Si-N Internuclear Distance," *Chem. Phys. Lett.* **208**, 328 (1993).

II-3) 総説, 著書

近藤保, 鈴木薫「2.1 分子線の反応」, 大学院物理化学 (中巻), 講談社サイエンティフィク, 東京 (1992), pp. 345-363

鈴木薫「真空技術」第4版実験化学講座8, 分光, 第2章, 丸善, 東京 (1993), pp. 85-90

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

日本化学会「化学と工業」誌編集委員会委員 (1986年4月-1988年2月)

日本化学会「化学と工業」誌編集委員会トピックス小委員会幹事 (1987年3月-1988年2月)

III 研究活動の課題と展望

気相反応における磁場効果が発現すると予想される典型的な系として, オゾンの光解離を提案している。この系では, 一重項および三重項解離ポテンシャル経路の生成物が分岐してくる。したがって, 反応経路の途中で直接磁場効果を受けて分岐比が変化する事が期待される。反応生成物をレーザー共鳴多光子イオン化法で効率よく検出して, この分岐の磁場効果を測定する。ポテンシャルの乗り移りの効率は, 交差点を通過する速度と関連しているから, 励起波長を変えて実験を行い, 磁場効果との関連を調べると, 気相化学反応の磁場効果を類型化するための基礎的な知見が得られると期待される。

また, NO β バンドの磁場消光の問題については, さらに検討を加える必要がある。現段階で残された課題は, 生成過程におけるNOの他の電子励起状態との関連を詳しく調べることにある。

小林 敬道 (助手)

I-1) 専門領域: 分子分光学

I-2) 研究課題

- 1) 放射過程に及ぼす外部磁場効果
- 2) 光解離反応に及ぼす外部磁場効果

I-3) 研究活動の概略

- 1) 放射過程に及ぼす外部磁場効果

マイクロ波放電により主に二原子及び三原子分子 (ラジカル及びイオン) を作り, その発光励起スペクトルに及ぼす外部磁場の影響を観測する。

- 2) 光解離反応に及ぼす外部磁場効果

光解離反応の生成物をレーザー共鳴多光子イオン化法を用いて検出することにより, 外部磁場が光解離反応に及ぼす影響を観測するための準備を進めている。

III 研究活動の課題と展望

外部磁場の影響は気相分子では例が少なく統一的な理解は十分になされていない段階にある。発光励起スペクトルの強度及び光解離反応に及ぼす外部磁場の影響を系統的に調べることににより, その発現のための条件を見だし, 外部磁場効果の機構を統一的に解明することを試みる。

分子集団研究系

物性化学研究部門

薬 師 久 彌 (教授)

I-1) 専門領域: 物性化学

I-2) 研究課題

- a) 遷移金属を含む導電性物質における π 電子・d 電子相互作用の研究
- b) 新しい導電性有機物の探索
- c) C_{60} およびその関連物質の固体物性
- d) 導電性物質の遠赤外領域の分光学

I-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 遷移金属を含む導電性物質における π 電子・d 電子相互作用の研究
極めて安定な導電性フタロシアニン単結晶を作成し、遷移金属に局在する d 電子スピンの履歴する π 電子系の電子構造に大きな影響を与えることを明らかにした。
- b) 新しい導電性有機物の探索
新しい電荷移動錯体, (TSeT) (BTDA-TCNQ), の多形の一つが 1.5 K まで金属性を保持することを発見し、この希有な性質の起源を構造的な観点から明らかにした。また最近、固体状態で負の電子間反発つまり電子間引力をもつ分子に注目し、この新物質について系統的な研究を展開しつつある。
- c) C_{60} およびその関連物質の固体物性
 K_3C_{60} , Rb_3C_{60} における超伝導転移の同位体シフトが顕著であることを見出した。また $Na_xN_xC_{60}$ という Na をドーピングした系では初めての超伝導体を見出し、その合成法を確立するとともに、現在その構造の解明に努めている。
- d) 導電性物質の遠赤外領域の分光学
フェルミ準位近傍の状態密度を知るため遠赤外領域における分光研究を計画し、シンクロトロン放射光の偏光性と指向性の良さを利用した装置を製作している。

II-1) 学術論文

- K. TANAKA, A. A. ZAKHIDOV, K. YOSHIZAWA, K. OKAHARA, and T. YAMABE, K. YAKUSHI, K. KIKUCHI, S. SUZUKI, I. IKEMOTO, and Y. ACHIBA, "Magnetic Properties of TDAE- C_{60} and TDAE- C_{70} ", *Phys. Rev. B* 47, 7554 (1992).
- K. IWASAKI, T. IDA, A. KAWAMOTO, A. UGAWA, Y. YAMASHITA, K. YAKUSHI, and T. SUZUKI, "Structure of the Charge-transfer Complex of (DBTTF) (BTDA-TCNQ)", *Acta Cryst. C* 48, 1982 (1992).

K. IWASAKI, A. UGAWA, A. KAWAMOTO, Y. YAMASHITA, K. YAKUSHI, T. SUZUKI, and T. MIYASHI, "Crystal Structures of Metallic and Insulating Molecular Complexes between Tetraseleno-naphthacene and bis (1, 2, 5, -thiadiazolo) tetracyanoquinodimethane: (TSeN) (BTDA-TCNQ) and (TSeN) (BTDA-TCNQ) (C_6H_5Cl)", *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 65, 3350 (1992).

K. IMAEDA, K. YAKUSHI, H. INOKUCHI, K. KIKUCHI, I. IKEMOTO, S. SUZUKI, and Y. ACHIBA, "ESR and Low-field Microwave Absorption Studies of Potassium Doped C_{70} : Observation of Possible Metallic State in $K_x C_{70}$ ", *Solid State Commun* 84, 1019 (1992).

K. IMAEDA, I. I. KHAIRULLIN, K. YAKUSHI, M. NAGATA, N. MIZUTANI, H. KITAGAWA, and H. INOKUCHI, "New Superconducting Sodium-Nitrogen- C_{60} Ternary Compound", *Solid State Commun.* 87, 375 (1993).

II-2) 国際会議プロシーディングス

- A. A. ZAKHIDOV, K. YAKUSHI, K. IMAEDA, H. INOKUCHI, K. KIKUCHI, S. SUZUKI, I. IKEMOTO, and Y. ACHIBA, "Microwave Spectroscopy of Fullerene based Molecular Superconductors in Low Magnetic Field: $M_n C_n$ ($M = K, Rb, I, Ga, In$), $M_n C_n$ ($n = 70, 76, 78, 84, 90$) and $M_n (C_{60})_{1-y} (C_{70})_y$ ($M = K, Rb$)", *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 218, 299 (1992).
- V. N. DENISOV, A. A. ZAKHIDOV, R. DANIELI, G. RUANI, R. ZAMBONI, C. TALIANI, K. IMAEDA, K. YAKUSHI, H. INOKUCHI, Y. ACHIBA, "Evidence for Jahn-Teller Coupling and Fano Resonance of Lower H_g Modes in K_3C_{60} and Rb_3C_{60} Films from Raman Scattering", *Int. J. Mod. Phys. B* 6, 4019 (1992).
- K. TANAKA, A. A. ZAKHIDOV, K. YOSHIZAWA, K. OKAHARA, T. YAMABE, K. YAKUSHI, K. KIKUCHI, S. SUZUKI, I. IKEMOTO, and Y. ACHIBA, "Ferromagnetic TDAE- C_{60} versus Paramagnetic TDAE- C_{70} : Faraday Balance and ESR Study", *Int. J. Mod. Phys. B* 6, 3953 (1992).
- A. UGAWA, K. YAKUSHI, K. KIKUCHI, S. SUZUKI, K. SAITO, Y. ACHIBA, and I. IKEMOTO, "Infrared and Transport Properties of K_3C_{60} ", *Synth. Met.* 56, 2997 (1993).
- A. A. ZAKHIDOV, I. I. KHAIRULLIN, P. K. KHABIBULLAEV, V. Yu. SOKOLOV, K. IMAEDA, K. YAKUSHI, H. INOKUCHI, Y. ACHIBA, "Air Stability of K_3C_{60} Superconductors: Low Field Microwave Absorption and ESR Study", *Synthetic Metals* 55-57, 2967 (1993).
- S. HINO, K. MATSUMOTO, S. HASEGAWA, K. IWASAKI, K. YAKUSHI, T. MORIKAWA, T. TAKAHASHI, K. SEKI, K. KIKUCHI, S. SUZUKI, I. IKEMOTO, Y. ACHIBA, "Photoelectron Spectra of Higher Fullerene Compound C_{82} and its Potassium Complex", *Synthetic Metals* 55-57, 3191 (1993).
- H. YAMAKADO, K. YAKUSHI, K. AWAGA, Y. MARUYAMA, T. NAKANO, and K. KASUGA, "Ferromagnetic Interaction in Solid Octabutoxyphthalocyaninato cobalt", *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 218, 219 (1992).

K. YAKUSHI, H. YAMAKADO, T. IDA, A. UGAWA, K. AWAGA, Y. MARUYAMA, K. IMAEDA, and H. INOKUCHI, "Structure and Solid State Properties of Conductive (Phthalocyaninato) cobalt Salt, $\text{CoPc}(\text{AsF}_6)_{0.8}$ ", *Synthetic Metals* 55-57, 1699 (1993).
 L. S. GRIGORYAN, Y. NAKAZAWA, and K. YAKUSHI, "Intercalation of High-Tc Oxides with Organic Molecules," *Advances in Superconductivity* V, 287 (1993).

II-3) 総説, 著書

薬師久彌「シンクロトン放射光は赤外領域にも使える」, 一億人の化学・光が活躍する, 178 頁, 1993
 鶴川彰人「アルカリ, フレライドの超伝導」, 炭素, 157巻, 99頁, 1993

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員・委員

日本化学会関東支部幹事 (1984 - 1985)

日本化学会東海支部常任幹事 (1993～)

新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO), 国際共同研究評価委員 (1990)

チバ・ガイギー科学振興財団, 選考委員 (1993～)

学会誌編集委員

日本化学会欧文誌編集委員 (1985-1986)

II-7) 他大学での講義

東京大学・理学部, 物理化学特論Ⅲ, 1993年, 11月

III 研究活動の課題と展望

課題としては「導電性分子性固体」に新しい切り口を開くことであるが, (1) 従来の π 電子系の中に遷移金属を導入した分子と(2) 分子内バイポーラロンとでもいうべき負の電子間反発力つまり電子間引力を持つ分子に新しい方向を見出せると考えて研究を推進している。(1)についてはこの分野では例えば DCNQI 塩において新しい方向が見えてきている。(2) は分子研山下敬郎助教授との共同研究で従来にない全く新しい発想に基づくもので, BDNT という興味深い分子が合成されたので, 大きな期待を抱いている。

鹿野田 一 司 (助教授)

I-1) 専門領域: 物性物理学 (実験)

I-2) 研究課題

- 核磁気共鳴 (NMR) と電子輸送特性の測定による有機伝導体の金属-非金属転移の研究
- ^{13}C -NMR による有機超伝導体の電子状態の研究
- ^{13}C -NMR と比熱の測定による有機伝導体の磁気転移の研究
- 複素交流磁化率と磁場中電子輸送特性の測定による有機伝導体の擬 2 次元超伝導の研究

I-3) 研究活動の概略と主な成果

- まず, 固体のための NMR 測定装置並びに熱起電力測定装置を完成した。有機伝導体 κ -(BMDT-TTF) $_2$ Au(CN) $_2$ において, κ -1 型としては珍しく観測されている低温での高抵抗状態への転移を ^1H -NMR と熱起電力測定で調べた結果, 従来言われてきた金属-絶縁体転移のような単純なものではなく, 低温相も金属的な性質を示し, この転移の起源について再考の必要性を指摘した。
- BEDT-TTF 分子の中心 2 重結合炭素の ^{13}C 置換体を合成し, この分子を含む有機伝導体を電解法で作成した。そして, 分子内のこの核サイトで, 初めて, NMR 実験に成功し, 伝導電子状態を微視的に研究した。
- 一連の有機導体 α -(BEDT-TTF) $_2$ MHg(SCN) $_4$ ($M=\text{K, Rb, Tl}$) の低温電子状態に見られる異常については, 反強磁性転移と考えられているが, はっきりした結論は未だ得られていない。我々は, ^{13}C -NMR により, 少なくとも強磁場においては, この異常が磁氣的なものではない証拠を得た。さらに, 比熱測定装置を製作し, これを用いた測定の結果, 初めて, 比熱に相転移のピークを見出した。
- 一連の 2 次元有機超伝導体の磁場侵入長を複素磁化測定により決定し, 層状構造からくる超伝導の異方性を mK 領域まで調べた結果, 極めて強い 2 次元性が明らかになった。さらに, 磁場中での電気抵抗の振る舞いに, 超伝導の 2 次元性と層間ジョセフソン結合からくるとされる新たな超伝導特性の兆候を見出した。

II-2) 国際会議プロシーディングス

K. KANODA, Y. TSUBOKURA, K. IKEDA, T. TAKAHASHI, N. MATSUKAWA, G. SAITO, H. MORI, T. MORI, B. HILTI, and J. S. ZAMBOUNIS, "Magnetic Penetration Depth of the κ -Phase Family of Organic Superconductors", *Synth. Met.* 55 - 57, 2865 (1993).
 T. TAKAHASHI, Y. KOBAYASHI, K. KANODA, T. INUKAI, and G. SAITO, "Pressure Dependence of the SDW Transition in (MDT-TTF) $_2$ Au(CN) $_2$ ", *Synth. Met.* 55-57, 2814 (1993).
 K. KANODA, K. KATO, Y. KOBAYASHI, M. KATO, T. TAKAHASHI, K. OSHIMA, B. HILTI, and J. S. ZAMBOUNIS, "Upper Critical Field and NMR Relaxation Studies of an Organic Superconductor, κ -(MDT-TTF) $_2$ AuI $_2$ ", *Synth. Met.* 55-57, 2871 (1993).

K. ISHIDA, Y. KITAOKA, H. MASUDA, K. ASAYAMA, T. TAKAHASHI, K. KANODA, A. KOBAYASHI, R. KATO, and H. KOBAYASHI, "Cu NMR Study of the Organic Conductor (DMe-DCNQI)₂Cu", *Physica B* 186-188, 1059 (1993).

T. TAKAHASHI, R. TSUCHIYA, K. KANODA, M. WATABE, T. SASAKI, and N. TOYOTA, "¹H-NMR Studies of the Low Temperature Phase of α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄", *Synth. Met.* 55-57, 2513 (1993).

K. KANODA, K. KATO, A. KAWAMOTO, K. OSHIMA, T. TAKAHASHI, K. KIKUCHI, K. SAITO, and I. IKEMOTO, "de-Haas-van Alphen Effect in κ -(DMET)₂AuBr₂", *Synth. Met.* 55-57, 2309 (1993).

T. TAKAHASHI, K. KANODA, T. TAMURA, K. HIRAKI, K. IKEDA, R. KATO, H. KOBAYASHI, and A. KOBAYASHI, "Magnetism of DCMQI-Cu Salts", *Synth. Met.* 55-57, 2281 (1993).

II-6) 学会および社会的活動

日本物理学会 分子性固体液晶有機導体分科 世話人 (1993年5月より)

III 研究活動の課題と展望

本研究グループは、有機物質における多様な電子物性発現の機構を明らかにすることを目的としている。実験的には、スペクトロスコピーとしてNMR、熱力学的測定として比熱、輸送特性として電気抵抗、熱起電力、超伝導磁化率、という複数の方法を採用すべく、それぞれの装置の立ち上げを並行して行った。そして、最初に出揃った結果が前述の通りであるが、今後、それぞれの課題での問題点をしぼり、物質とパラメーターを変えた系統的な実験へと進む。

分子集団動力学研究部門

丸 山 有 成 (教授)

I-1) 専門領域: 固体物理化学

I-2) 研究課題

特異な分子性固体の構造と物性に関する研究

I-3) 研究活動の概略と成果

分子性固体の物性研究を行うことを目的としているが、特異な構造をもつ分子性固体に特に注目し、その構築から構造評価及び物性測定にわたる研究を行っている。その具体的内容は、

a) 有機物質超薄膜の構築とその物性

各種フタロシアニン超薄膜を分子線エピタキシャル蒸着法により構築し、その構造の電子顕微鏡等による評価、非線形光学効果等の物性測定を行っている。成果としては、フタロシアニ

ンの単結晶性超薄膜をエピタキシャル成長させることに成功したこと、又それを用いて3次非線形光学感受率と膜の対称性との関係を明らかにしたこと、さらには多層膜のエピタキシャル成長に成功したことなどがあげられる。

b) C₆₀を中心とするフラーレン固体の物性

C₆₀類結晶及びその各種電荷移動錯体の電子物性、特に導電性、磁性について、分子構造との相関に注目しつつ研究を進めている。成果としては、初めて単結晶を用いて導電性からこの錯体の金属性、超伝導性を明らかにしたこと、又その電子構造についての重要な知見を得たことなどがあげられる。

c) 走査プローブ顕微鏡法によるマイクロ構造と物性の研究

トンネル顕微鏡や原子間力顕微鏡を用いて、薄膜や結晶のマイクロ構造と物性の研究を行っている。成果としては、極低温トンネル顕微鏡の試作に成功したこと、有機導体の電子構造の2次元性を明らかにしたことなどがあげられる。

d) プロトン-電子相互作用をキーとする新しい有機電導体の研究

サリチリデンアニリン類をモデル系としてプロトン-電子相互作用に由来する新しい有機電導体を開発する基礎研究を行っている。

II-1) 学術論文

A. WILSON, G. P. RIGBY, J. D. WRIGHT, S. C. THORPE, T. TERUI, and Y. MARUYAMA, "Effect of Heat Treatment on Chemical, Morphological and NO₂-Sensing Properties of Lead Phthalocyanine Films", *J. Mater. Chem.* 2, 303 (1992).

A. MANIVANNAN, H. HOSHI, L. A. NAGAHARA, Y. MORI, Y. MARUYAMA, K. KIKUCHI, Y. ACHIBA, and A. FUJISHIMA, "Scanning Probe Microscopic Investigation of Epitaxially Grown C₆₀ Film on MoS₂", *Jpn. J. Appl. Phys.* 31, 3680 (1992).

T. INABE, H. OGATA, Y. MARUYAMA, Y. ACHIBA, S. SUZUKI, K. KIKUCHI, and I. IKEMOTO, "Electronic Structure of Alkali Metal Doped C₆₀ Derived from Thermoelectric Power Measurements", *Phys. Rev. Lett.* 69, 3797 (1992).

A. MANIVANNAN, L. A. NAGAHARA, H. YANAGI, T. KOUZEKI, M. ASHIDA, Y. MARUYAMA, K. HASHIMOTO, and A. FUJISHIMA, "Scanning Tunneling Microscopy Observations of Zinc Naphthalocyanine on MoS₂", *Thin solid Films*, 226, 6 (1992).

T. TERUI, R. J. FLEMING, and Y. MARUYAMA, "Atomic Layer-by-Layer Deposition of La-Sr-Cu-O Films." *Chem. Lett.* 137 (1993).

H. HOSHI, S. L. FANG, and Y. MARUYAMA, "Epitaxial Growth of Lead Phthalocyanine Film on KI crystal", *J. Appl. Phys.* 73, 3111 (1993).

Y. MARUYAMA, T. INABE, M. OGATA, Y. ACHIBA, K. KIKUCHI, S. SUZUKI, and I. IKEMOTO, "Electron Transport Probes of Alkali Metal-Doped C₆₀ Single Crystals", *Mater. Sci. Eng.* B19, 162 (1993).

H. HOSHI, K. KOHAMA, S. L. FANG, and Y. MARUYAMA, " $\chi^{(3)}$ Components of Single-Crystalline Vanadyl Phthalocyanine Film", *Appl. Phys. Lett.* 62, 3080 (1993).

T. NAKAMURA, T. KOMATSU, G. SAITO, K. KATO, Y. MARUYAMA, and T. MORI, "Transport Properties and Electronic Structure of the Novel Organic Superconductor κ -(BEDT-TTF)₂Cu(CN)[N(CN)₂] (T_c=11.2K)", *Synth. Met.* 55-57, 2905 (1993).

K. AWAGA, T. INABE, Y. MARUYAMA, T. NAKAMURA, and M. MATSUMOTO, "Ferromagnetic Properties and Crystal Structures of Pyridyl and Pyredinium α -Nitronyl Nitroxides", *Synth. Met.* 55-57, 3311 (1993).

A. YAMAGUCHI, K. AWAGA, T. INABE, T. NAKAMURA, M. MATSUMOTO, and Y. MARUYAMA, "Crystal Structures and Magnetic Properties of the *p*-N-Methylpyridinium Nitronyl Nitroxide Cation Radical Salts, *p*-MPYNN. ClO₄", *Chem. Lett.* 1443 (1993).

K. OICHI, E. ITO, K. SEKI, T. ARAKI, S. NARIOKA, H. ISHII, T. OKAJIMA, T. YOKOYAMA, T. OHTA, T. INABE, and Y. MARUYAMA, "XANES Spectroscopic Study of Chemical Bonding in Amides and *N*-Salicylideneanilines", *Jpn. J. Appl. Phys.* 32, 818 (1993).

L. A. NAGAHARA, A. MANIVANNAN, H. YANAGI, M. TORIIDA, M. ASHIDA, Y. MARUYAMA, H. HASHIMOTO, and A. FUJISHIMA, "Scanning Probe and Transmission Electron Microscopy Observations of Cobalt Naphthalocyanine Molecules Deposited onto a NaCl Substrate", *J. Vac. Sci. Technol.* A11, 781 (1993).

K. OSHIMA, H. YAMAZAKI, K. KATO, Y. MARUYAMA, R. KATO, A. KOBAYASHI, and H. KOBAYASHI, "De Haas-van Alphen Effect and the Fermi Surface in κ -(BEDT-TTF)₂I₃", *Synth. Met.* 55-57, 2334 (1993).

K. OSHIMA, T. DOI, Y. TOKUDA, H. YAMAZAKI, K. KATO, Y. MARUYAMA, H. MORI, and S. TANAKA, "Quantum Oscillation and Transport Property in κ -(BEDT-TTF)₂Ag(CN)₂H₂O" *Synth. Met.* 55-57, 2339 (1993).

K. OSHIMA, K. KATO, Y. MARUYAMA, R. KATO, A. KOBAYASHI, and H. KOBAYASHI, "The Field-Induced Transitions in a Novel Organic System, (DMETSeF)₂AuI₂", *Synth. Met.* 55-57, 2780 (1993).

II-3) 総説, 著書

T. INABE, K. OKANIWA, H. OGATA, H. OKAMOTO, T. MITANI, and Y. MARUYAMA, "Crystal Structure and Transport Properties of a Hydrogen-Bonded 1:1 Charge Transfer Complex Composed of 1,6-Pyrenediamine and 7,7,8,8-Tetracyanoquinodimethane (DAP-TCNQ)⁺", *Acta Chimica Hungaria-Models in Chemistry*, 130, 537 (1993).

丸山有成, 「宇宙空間の科学から出てきた駒」, 化学と工業, 45, 58 (1992).

丸山有成, 「C₆₀の固体物性—超伝導を中心に」, 固体物理, 27, 231 (1992).

丸山有成, 「フラーレンの固体物性」現代化学, 1992, 56.

丸山有成, 「フラーレンの化学と物理—C₆₀の固体物性」フラーレン化学, 98 頁, 化学同人(1993).

丸山有成, 「トンネル分光法」実験化学講座(物質の機能性)井口洋夫編67頁, 丸善(1993).

II-4) 招待講演

Y. MARUYAMA, "Electrical Properties of Alkali-Metal Doped C₆₀ Solids", 6th International Conference on Electrical and Related Properties of Organic Solids, Capri (Italy), May 1992.

Y. MARUYAMA, "Electron Transport and Electronic Structure of Alkali Metal-Doped C₆₀ Crystals", EMRS 1992 Spring Meeting: International Conference on Electronic Materials, Strasbourg (France), June 1992.

丸山有成, "有機超薄膜" 日本化学会第64秋季年会シンポジウム(非線形光学材料), 新潟, 1992年10月

Y. MARUYAMA, "Electron Transport in Single Crystal C₆₀ Systems Doped with Alkali Metals", International Conference on Nanoscale Science-Present and its Future, Sendai (Japan), Sept. 1992.

Y. MARUYAMA, "Electrical Properties of Alkali Metal Doped C₆₀ Solids", New Directions in Chemistry towards Early 21st Century, Alcala de Henares (Spain), Sept. 1992.

Y. MARUYAMA, "Electron Transport of Alkali Metal-Doped C₆₀ Single Crystals", The 4th NEC Symposium on Fundamental Approaches to New Material Phases: Physics and Chemistry of Nano-Scale Materials, Karuizawa (Japan), Oct. 1992.

Y. MARUYAMA, "Some Aspects of Electrical Conduction in Metal-Doped C₆₀", The 4th China-Japan Joint Symposium on Conduction and Photoconduction in Organic Solids and Related Phenomena, Okazaki (Japan), Oct. 1992.

Y. MARUYAMA, "Electron Transport Properties of Alkali Metal-Doped C₆₀ Solids, Single Crystals and Thin Films", 1992 Fall Meeting, MRS: Science and Technology of Fullerene Materials, Boston (USA), Nov. -Dec., 1992.

Y. MARUYAMA, "Electron Transport Probes of Alkali Metal-Doped C₆₀ Single Crystals", Sixtieth Anniversary of Chinese Chemical Society: Symposium on Molecular Science, Taipei (Taiwan), Dec. 1992.

Y. MARUYAMA, "Electron Transport Probes of Alkali Metal-Doped C₆₀ Single Crystals", International Winter School on Electronic Properties of Novel Material: Fullerenes and Related Compounds, Kirchberg (Austria), March 1993.

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

日本化学会東海支部学会賞等推薦委員 (1990 - 1991年)

学会の組織委員

第2, 4回日中共同セミナー組織委員 (1986, 1992年)

EMRS 1992 Spring Meeting: Symposium E 組織委員

- 第4回NEC シンポジウム組織委員(1992年)
 文部省, 学振等委員会委員
 日本学術振興会「原子クラスターに関する研究開発専門委員会」委員(1991-現在)
 学会誌編集委員
 日本化学会 欧文誌編集委員(1980-1982年)
 日本化学会 速報誌編集委員(1992-1995年)

Ⅲ 研究活動の課題と展望

現在分子研での研究活動にくぎりをつける段階にきており人員の補充よりも整理を行う段階にきている。しかし、この段階でも研究活動を低下させないようにすることは必要で、短期的研究者あるいは複数指導教官制の学生などを配置させることも大切であると考えている。将来的には、現在の研究のある部分を集中的に発展させていくことになる。

宮 島 清 一 (助教授)

I-1) 専門領域：凝縮系の磁気共鳴分光学

I-2) 研究課題

- 液晶の相転移とダイナミクス
- グラファイト層間化合物の電子物性
- 固体における分子運動

I-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 液晶の相転移とダイナミクス

この数年間、強い極性基を持つ液晶の示す特異な性質に注目してきた。純物質のリエントラント液晶におけるNMRの実験をもとに、並進格子の生成消滅が分子骨格部の配向秩序パラメータと殆ど結合しないこと、一方で末端鎖の重原子置換の影響を強く受けることを見出した。また、これらのスメクティック液晶における拡散係数テンソルを決定した。その結果、非常に大きな粘性係数を持ちながら拡散の特徴は全くネマティック流体のそれであり、古典的なスメクティック液晶のモデルから大きく逸脱していることを見出した。

b) グラファイト層間化合物の電子物性

アルカリ金属-グラファイト層間化合物が水素を吸収することが知られていたが、こうしてできる化合物の性質には不明な点が多かった。水素のNMR実験を行い、固体中の水素の化学種、格子配列、ホスト格子との間の電子移動の度合い、フェルミ準位における状態密度への1 s電子の寄与など、水素の電子物性に関する多くの問題をほぼ定量的に解くことができ、2次元金属水素と呼べる状態が実現していることを指摘した。

c) 固体における分子運動

硫酸根、硝酸根などの陰イオン原子団は、化学全般において重要な化学種であるにも拘らず、

NMRの実験が困難であるために固体中での動的振舞いが殆ど知られていなかった。部分的に重酸素置換した硫酸アンモニウムを対象として酸素-水素核磁気二重共鳴の手法で低磁場緩和を測定し、硫酸イオンの運動を定量的に明らかにした。そして、それが強誘電性相転移の発現に深く係わるものであることを示した。

II-1) 学術論文

S. MIYAJIMA, AND T. CHIBA, "Proton NMR Study of CBOOA, NBOOA, and Their Chain-Deuteriated Homologues in Smectic Ad and Nematic Mesophases", *Liquid Crystals* 11, 283 (1992).

S. MIYAJIMA, A. F. MCDOWELL, AND R. M. COTTS, "Pulsed-Field-Gradient Stimulated-Spin-Echo NMR Study of Anisotropic Self-Diffusion in Smectic Ad Liquid Crystal CBOOA", *Chem Phys. Lett.* 212, 277 (1993).

II-3) 総説, 著書

宮島清一「NMR, ESR」, 第4版実験化学講座第12巻「物質の機能性」頁396 (1993)

II-4) 招待講演

S. MIYAJIMA, "Orientational Order and Molecular Motion in Reentrant Liquid Crystals", in Anglo-Japanesa (N+N) Meeting on Materials Chemistry "Molecular Photoactive and Magnetic Solids" (January, 24-27, 1993, IMS, Okazaki)

II-7) 他大学での講義 (単年度)

日本大学文理学部, 「物理化学Ⅱ」(1992年4月-1993年3月)

日本大学文理学部, 「有機化学実験」(1992年4月-7月)

日本大学文理学部, 「化学特別実験」(1992年4月-7月)

岐阜大学工学研究科大学院, 博士後期課程特別講義, 「NMRで見る分子のダイナミクス」(1993年10月-1994年3月, 1993年11月)

Ⅲ 研究活動の課題と展望

NMR分光学の手法を凝縮系の物性研究に創造的に適用すること、及びそれを基礎に新しい物質系を開拓することが一貫した課題である。方法論としては当面、パルス磁場勾配スピネコーNMR装置と低温での固体高分解能NMR装置を完成させること、対象としては液晶の分子ダイナミクスと炭素化合物の電子物性の解明に取り組む。一方、固体内での原子核の運動が電子状態に強い変調を与える物質系の研究を模索しつつある。

分子集団研究部門 (客員部門)

森 健 彦 (助手)

I-1) 専門領域: 物性物理化学

I-2) 研究課題

有機伝導体の開発とその構造と物性

I-3) 研究活動の概略と成果

これまでの研究活動としては、有機超伝導体を中心とする新規な伝導性物質の研究を、合成、構造の解明、物性の測定、電子状態の理論計算といったさまざまな角度から行ってきた。特に4種の新しい有機超伝導体を含む多数の新規有機伝導体を開発し、その構造を明らかにし、物性の基本的キャラクターゼーションを行ってきた。これらのうちいくつかは今日でも多方面でさらに詳しく研究されている。また有機伝導体のフェルミ面を理論計算する単純な方法を開発し、多くの有機伝導体のフェルミ面を計算してきた。これによって特にBEDT-TTFの伝導体が二次元的フェルミ面を持つことを明らかにし、その後の分子設計に大きな影響を与えた。また、このようにして計算されたフェルミ面がシュブニコフドハース効果などの実験とも非常によく一致することが明らかとなり、有機伝導体のフェルミ面を調べるフェルミオロジーがさかんとなり、今日有機伝導体のフェルミ面は詳細に至るまできわめてよく理解されるに至っている。こうした研究は有機伝導体のあらゆる物性を理解する上での重要な出発点になっている。さらにCu(DMDCNQI)₂の研究においては銅が混合原子価をとるためにその上の局在電子が伝導電子と相互作用して奇妙な磁気的物性を示すことを発見し、この系は今日でも活発な研究の対象となっている。

II-1) 学術論文

T. MORI and H. INOKUCHI, "Synthesis of Tetrathiafulvalene Derivatives by the Use of Organo-aluminium Reagents," *Chem. Lett.*, 1873 (1992).

H. FUJIMOTO, K. KAMIYA, S. TANAKA, T. MORI, Y. YAMASHITA, H. INOKUCHI, and K. SEKI, "Electronic Structure of bis [1, 2, 5] thiadiazolo-p-quinobis (1, 3 - dithiole) (BTQBT) Studied by Ultraviolet Photoemission Spectroscopy," *Chem. Phys.* 165, 135 (1992).

Y. MISAKI, H. NISHIKAWA, T. YAMABE, T. MORI, H. INOKUCHI, H. MORI, and S. TANAKA, "Bis (methylthio) Substituted Unsymmetrical 2, 5 - Bis (1', 3' - dithiol - 2' - ylidene) -1, 3, 4, 6 - tetrathiapentalenes," *Chem. Lett.*, 729 (1993).

T. MORI, H. INOKUCHI, Y. MISAKI, H. NISHIKAWA, T. YAMABE, H. MORI, and S. TANAKA, "Structure and Conducting Properties of TMET - TTP Radical - Cation Salts," *Chem. Lett.*, 733 (1993).

P. WANG, T. MORI, S. BANDOW, Y. MARUYAMA, X. WANG, B. CHEN, D. ZHU, K. TSUJIKAWA, K. SUZUKI, and T. ENOKI, "Band Structure and Physical Properties of an Organic Conductor (BEDT-TTF)₄Cu(C₂O₄)₂," *Synth. Metals.* 49, 253 (1992).

II-2) 国際会議プロシーディングス

T. MORI, K. KATO, Y. MARUYAMA, H. INOKUCHI, H. MORI, I. HIRABAYASHI, and S. TANAKA, "Physical Properties of New Organic Superconductors, (BEDT-TTF)₄M(CN)₄H₂O [M=Pt and Pd]," *Synth. Metals.* 56, 2911 (1993).

H. MORI, I. HIRABAYASHI, S. TANAKA, T. MORI, Y. MARUYAMA, and H. INOKUCHI, "Preparation and Crystal Structures of New Organic superconductors, (BEDT-TTF)₄Pt(CN)₄H₂O (Tc=2 K, 6.5 Kbar), (BEDT-TTF)₄Pd(CN)₄H₂O (Tc=1.2 K, 7 Kbar), and Related Materials," *Synth. Metals.* 56, 2044 (1993).

H. MORI, I. HIRABAYASHI, S. TANAKA, T. MORI, Y. MARUYAMA, and H. INOKUCHI, "Critical Temperature (Tc) and Crystal Structures of κ -(BEDT-TTF)₂Ag(CN)₄H₂O (Tc=5 K), and κ -(BEDT-TTF)₂Ag(CN)₂H₂O (Tc=6 K)," *Synth. Metals.* 56, 2437 (1993).

H. MORI, I. HIRABAYASHI, S. TANAKA, T. MORI, H. INOKUCHI, K. OSHIMA, and G. SAITO, "Magnetic Susceptibility and Electrical Resistivity of (BEDT-TTF)₂MHg(SCN)₄ (M=K, NH₄, and Rb)," *Synth. Metals.* 56, 2443 (1993).

G. SAITO, H. YAMACHI, T. NAKAMURA, T. KOMATSU, N. MATSUKAWA, T. INOUE, H. ITO, T. ISHIGURO, M. KUSUMOTO, K. SAKAGUCHI and T. MORI, "Structural and Physical Properties of Two New Ambient Pressure κ -type BEDT-TTF Superconductors and their Related Salts," *Synth. Metals.* 56, 2883 (1993).

T. NAKAMURA, T. KOMATSU, G. SAITO, K. KATO, Y. MARUYAMA, T. MORI, K. OSHIMA, T. OSADA, K. KAGOSHIMA, N. MIURA, and T. TAKAHASHI, "Transport Properties and Electronic Structure of the Novel Organic Superconductor κ -(BEDT-TTF)₂Cu(CN) [N(CN)₂] (Tc=11.2K)," *Synth. Metals.* 56, 2905 (1993).

R. MASUDA, H. TAJIMA, H. KURODA, H. MORI, S. TANAKA, T. MORI, and H. INOKUCHI, "Reflectance Spectra of κ -(BEDT-TTF)₂X," *Synth. Metals.* 56, 2489 (1993).

H. NISHIKAWA, H. KAWAKAMI, H. FUJIWARA, T. UEHARA, Y. MISAKI, T. YAMABE, T. MORI, and M. SHIRO, "Synthesis and Properties of New Tetrathiafulvalenes Condensed with 1, 3-Dithiol-2-ylidenes," *Synth. Metals.* 56, 1983 (1993).

H. MORI, I. HIRABAYASHI, S. TANAKA, T. MORI, Y. MARUYAMA, and H. INOKUCHI, "New Organic Superconductor, (BEDT-TTF)₄M(CN)₄H₂O (M=Pt and Pd)," in "Advances in Superconductivity V," ed by Y. Bando and H. Yamauchi, *Springer*, Berlin (1993) p. 259.

II-4) 招待講演

T. MORI, "Physical Properties of New Organic Superconductors, (BEDT-TTF)₄M(CN)₄H₂O (M=Pt and Pd),"

H₂O [M=Pt and Pd],” International Conference of Synthetic Metals, Gothenburg (Sweden), April 1992.

T. MORI, “Electronic Structure of Organic Superconductors,” Korean-Japan Joint Seminar on New Functional Materials, Seoul (Korea), February 1993.

II-5) 受賞, 表彰

日本化学会進歩賞, 森健彦 (1992)

II-6) 学会および社会的活動

学会の組織委員

東京大学物性研究所国際セミナー “International Symposium on Organic Superconductors” 組織委員 (1990 東京)

III 研究活動の課題と展望

現在の研究活動の中心は有機超伝導をめざした新しい有機伝導の開発と, その構造, 物性, 電子状態の解明である。具体的には, われわれが「ダブルTTF」と読んでいる拡張された骨格をもつ新しいタイプの一連のドナーが最近得られるようになったので, これを元にした多くの伝導体を合成し, 多数の低温まで金属的伝導性を示す物質などを得ている。

関連領域研究系

関連分子科学第一研究部門

中 筋 一 弘 (教授)

I-1) 専門領域: 有機化学 (構造, 物性)

I-2) 研究課題

- a) 多段階レドックス系の開発
- b) スピン分極型安定中性ラジカルの開発
- c) プロトン-電子連動系の開発
- d) 特異な電子系を有する金属錯体の開発

I-3) 研究活動の概略と成果

共役電子系を設計・合成し, 集合体場を構築して, 特異な機能・物性を発現する分子性物質を開発する研究を行っている。

- a) 多段階レドックス系は固体中での電子移動における電子間反発を緩和できる。縮合多環ヘテロサイクルを基盤とする多段階レドックス系を設計・合成し, それらの電荷移動錯体を合成して, 分子性金属の開発にも成功した。また, 電気化学的に高度な両性の性質を示す両性多段階レドックス系も開発した。
- b) 興味ある磁氣的性質を発現する分子性物質開発へ向け, 奇交互共役型ヘテロ原子ラジカルを設計し, スピン分極性を活用して, スピン整列を制御する研究を行っている。フェナレノキシル型共役系を中心とする新しいスピン分極型中性ラジカル設計・合成を行っている。
- c) 水素結合と電荷移動相互作用が連動可能な分子集合体はその相互作用の形態および強さに応じて種々の興味ある機能・物性を発現すると期待される。現在, このようなプロトン-電子連動系の実現を目指し, 分子設計指針を構築しつつ, 実際に分子設計・合成を行っている。電子供与・授与基を持つキンヒドロノ, 拡張共役型キンヒドロノ, ヘテロ環キンヒドロノの開発を行っている。
- d) フェナレニル共役系にヘテロ原子を導入した新しい配位子の設計・合成を行い, 種々の遷移金属錯体を開発する研究を行っている。また, 研究課題c)への展開を目指し, 新しい水素結合型遷移金属錯体の設計・合成にも着手している。

II-1) 学術論文

Y. MORITA, T. OHMAE, J. TOYODA, S. MATSUDA, F. TODA, and K. NAKASUJI, “Synthesis and Properties of 1,6-Diselenapyrene (DSPY) and Its Methyl Chalcogeno Derivatives”, *Chem. Lett.* 1993, 443.

J. TOYODA, A. ODA, I. MURATA, A. KAWAMOTO, J. TANAKA, and K. NAKASUJI, “Crystal Structure of an Alternated Stacking Charge-Transfer Complex of 2,7-Bis

(methylthio)-1, 6-dithiapyrene (MTDTPY) with Tetracyano2, 6-naphthoquinodimethane (TNAP)", *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **66**, 2115 (1993).

II-5) 受賞, 表彰

有機合成化学協会賞 村田一郎, 中沢知男, 山本景祚との共同受賞 1983年度

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

日本化学会近畿支部幹事 (1987年度)

日本化学会東海支部幹事 (1992年度)

日本化学会学術賞部門別選考委員 (1990, 1991年度)

日本化学会若い世代の特別講演会部門審査委員 (1990, 1991年度)

有機合成化学協会東海支部代議員 (1991年度-)

学会誌編集委員

日本化学会欧文誌編集委員 (1990, 1991年度)

有機合成化学協会誌編集委員会協力委員 (1993年度-)

II-7) 他大学での講義

群馬大学・工学部, 有機機能性分子の科学, 1992年6月

九州大学・機能物質科学研究所, 物質合成 (電子機能分子), 1992年7月

広島大学・工学部, 工業化学特別講義, 1992年7月

豊橋技術科学大学, 物質工学特別講義, 1992年10月

III 研究活動の課題と展望

共役電子系を設計・合成し, 集合体場を構築して, 特異な機能・物性を発現する分子性の物質を開発する研究を行っている。既存の設計指針の活用に留まらず, 物理, 化学, 生物の学際的領域に新しいヒントを求めている。現在, 物性物理学との共同で, 分子レベルのみならず, 分子間の相互作用形態にも特異性を発現させ得る新しい概念の構築を模索する研究に力を注いでいる。プロトン-電子連動系の開発がその一例である。このような研究を通じ, 有機化学を主体とした学際的相関物質科学の開拓を目指している。

磯 邊 清 (助教授)

I-1) 専門領域: 錯体化学

I-2) 研究課題

a) 有機金属酸化物クラスターの合成と反応に関する研究

b) 有機金属硫化物クラスターの合成と反応に関する研究

c) 立方体積層型クラスターをモデル化合物として用いた固体表面の触媒反応の解明

d) ヘリカルキラリティーを持つ高分子錯体の合成的研究

I-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 有機金属酸化物クラスターの合成と反応に関する研究

新しいタイプのクラスターである立方体積層型骨格を持つ $[(\text{RhCp}^*)_4\text{Mo}_4\text{O}_{16}]$ や $[(\text{RhCp}^*)_4\text{V}_6\text{O}_{18}]$ ($\text{Cp}^* = \eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5$) 等の合成に成功し, いずれも単結晶 X 線回析によって分子構造を明らかにした。これらのクラスターにおいて立方体単位の増減が起こる珍しい反応を見出した。

b) 有機金属硫化物クラスターの合成と反応に関する研究

当研究グループで合成した $[(\text{RhCp}^*)_2(\mu\text{-CH}_2)_2(\mu\text{-SH})][\text{BF}_4]$ を用いて, シクロブタジエン類似の骨格を持つ D_{2h} 対称の S_4 を含む $[(\text{Rh}_2\text{Cp}^*(\mu\text{-CH}_2)_2(\mu\text{-S}_4))][\text{BF}_4]_2$ を得た。これは, X 線回析によってはじめて明らかにされた D_{2h} 対称の S_4 であり, その電子状態の理論的解明が待たれている。

c) 立方体積層型クラスターをモデル化合物として用いた固体表面の触媒反応の解明

合成した三重立方体酸化物クラスター $[(\text{RhCp}^*)_4\text{Mo}_4\text{O}_{16}]$ の分子構造は MoO_3 の部分構造と類似している。このクラスターを用いて MoO_3 上でのメタノールの部分酸化のモデル反応を行ったところ, 架橋 $\mu\text{-OMe}$ 基と隣接する $\text{Mo}=\text{O}$ との相互作用が非常に重要であることが分かった。

d) ヘリカルキラリティーを持つ高分子錯体の合成的研究

光学活性な酒石酸ピリジン誘導体を配位子に用いて銀 (I) のヘリケートの合成に成功した。これは, 銀イオンを含む主ラセンの左右に, さらに配位子によるラセンを持つ特異な無限鎖構造を有している。不斉中心とラセン構造との相関を明らかにしつつある。

II-1) 学術論文

K. UMAKOSHI, K. MURATA, S. YAMASHITA, and K. ISOBE, "Reactivity of $[\text{Cp}^*\text{RhPtCl}_6]$ ($\text{Cp}^* = \eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5$). Synthesis and Structures of $[\text{Cp}^*\text{Rh}]_2(\mu\text{-Cl})_3$, $[\text{PtCl}_5(\text{CH}_3\text{CONH}_2)]$ and $(\text{Cp}^*\text{Rh})_2(\mu\text{-Cl})_3]_2$ $[\text{PtCl}_6]^-$.", *Inorg. Chim. Acta* **190**, 185 (1991).

H. AKASHI, K. ISOBE, Y. OZAWA, and A. YAGASAKI, " β -Methallylrhodium (III) Supported on a Vanadium Oxide Cluster: Synthesis, Structure, and Reaction.", *J. Cluster Sci.* **2**, 291, (1991).

M. EBIHARA, K. ISOBE, Y. SASAKI, and K. SAITO, "Synthesis, Structure, and Properties of Oxidized Hexamolybdenum Clusters $[\text{Mo}_6\text{X}_7\text{Y}]\text{X}'_6]^{2-}$ ($\text{X}=\text{X}'=\text{Cl}, \text{Br}; \text{Y}=\text{S}, \text{Se}$).", *Inorg. Chem.* **31**, 1644 (1992).

Y. OZAWA, A. VAZQUEZ DE MIGUEL, and K. ISOBE, " μ -Methylene Rhodium Complexes with SH Ligand: Synthesis and Structures of $[\text{Rh}_2\text{Cp}^*_2(\mu\text{-CH}_2)_2(\mu\text{-SH})]$ BPh_4 and trans- $[\text{Rh}_2\text{Cp}^*_2(\mu\text{-CH}_2)_2(\text{SH})_2]$ ($\text{Cp}^* = \eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5$).", *J. Organomet. Chem.* **433**, 183 (1992).

S. OKEYA, Y. FUJIWARA, S. KAWASHIMA, Y. HAYASHI, K. ISOBE, Y. NAKAMURA, H. SHIMOMURA, Y. KUSHI, "Novel Bis (triphenylphosphine) platinum (II) Complexes

Containing a Thiourea or a 1,3-Diethylthiourea Dianion as an N,S-Chelating Ligand." *Chem. Lett.* 1832 (1992).

K. ISOBE AND A. YAGASAKI, "Cubane-Type Clusters as Potential Models for Inorganic Solid Surfaces." *Acc. Chem. Res.* 26, 524 (1993).

II-3) 総説, 著書

磯邊 清「新しい型のポリ酸化合物—有機金属基をもつポリ酸化合物の合成, 構造および反応性」, 季刊 化学総説 No20, ポリ酸の化学, 第2章8節, 865, 1993年

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

日本化学会 東海支部 幹事 1987年4月 - 1988年3月

学会の組織委員

"Seventh International Symposium on Relation Between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis" May 17-21, 1992, Tokyo

学会誌編集委員

"Journal of Cluster Science" Editorial Board

II-7) 他大学での講義

岡山理科大学・理学部, 特別講義 IV (有機金属化学)

平成4年11月26日～11月27日

III 研究活動の課題と展望

当研究グループで見い出された立方体積層型クラスターは, 反応性, 物性あるいは, 固体表面反応の反応活性中心のモデルという点で, 重要な位置を占めていると考えている。更に, 特異な反応性の付与あるいは固体表面反応の活性中心の精密なモデル化のためには, クラスター骨格上に特殊な反応場を設定する必要がある。その手掛かりのひとつとしてクラスター骨格のフラグメンテーション法による不完全立方体積層型クラスターの合成を計画している。また, これまで開発したクラスター合成法を用いて, ヘリカルキラリティーを持つ錯体高分子の合成を行い, 不斉中心とラセンの相関を明らかにしたい。

有機構造活性研究部門 (流動研究部門)

稲 永 純 二 (助教授)

I-1) 専門領域: 有機合成化学

I-2) 研究課題

a) 低原子価サマリウムを用いる新規合成反応の開発

b) ランタノイド (III) 錯体を用いる触媒反応の開発研究

c) 反応中間体の設計に基づく新反応開発

d) 遠隔不斉誘導分子素子, 配位子, および触媒の開発研究

I-3) 研究活動の概略と成果

a) 低原子価サマリウムを用いる新規合成反応の開発

サマリウム (II) 錯体の一電子還元能や大きなイオン半径などを巧みに用いて, ヘテロ環の合成, デオキシ糖の合成, カルボニル化合物のアミノメチル化, アルキンから Z-アルカンへの選択的還元, 中員炭素環化合物の環化反応による高収率合成, 不飽和カルボン酸アミドの高立体選択的二量化, d-ブロック遷移金属触媒との複合化によるキノジメタンの新規合成法, ケチルラジカルの生成とその立体化学制御に基づく高立体選択的分子間ラジカル反応など多数の新反応開発を達成した。

b) ランタノイド (III) 錯体を用いる触媒反応の開発研究

13種のランタノイド (III) 錯体を合成し, 中心原子の違いによる反応性の違いを系統的に調べるとともに, これらを用いる新しい触媒的グリコシル化法やエステル交換反応を開発した。

c) 反応中間体の設計に基づく新反応開発

ヒドロキシラジカルのフラグメンテーションによる糖類の一減炭素反応や三価の有機リン化合物を触媒とするアクリル酸アリルの [3, 3] シグマトロピー反応など, 天然物合成に有用な新反応の開発に成功した。

d) 遠隔不斉誘導分子素子, 配位子, および触媒の開発研究

不斉空間拡張のための置換基として *p*-ビフェニル基や *m*-ターフェニル基が有望であることを, モデル化合物の合成と, その X線構造解析や核磁気共鳴スペクトル解析により実験的に明らかにした。

II-1) 学術論文

J. INANAGA, Y. SUGIMOTO, Y. YOKOYAMA, and T. HANAMOTO, "One-Carbon Extrusion from Carbohydrates via Cl-Alkoxy Radical Fragmentation. An Easy Access to Erythrose and Threose", *Tetrahedron Lett.* 33, 8109 (1992).

J. INANAGA, Y. YOKOYAMA, and T. HANAMOTO, "Study on the Catalytic Activities of Lanthanoid (III) Triflates in the Glycosylation of 1-O-Methoxyacetyl Sugar", *Nippon Kagaku Kaishi, Special Articles on Lanthanide Chemistry (in Japanese)* 52 (1993).

J. INANAGA, Y. YOKOYAMA, and T. HANAMOTO, "Utility of 3,4-Dimethoxybenzyl (DMPM) Glycosides. A New Glycosylation Triggered by 2,3-Dichloro-5,6-dicyano-*p*-benzoquinone (DDQ) Oxidation", *Chem. Lett.* 85 (1993).

J. INANAGA, O. UJIKAWA, Y. HANDA, K. OTSUBO, and M. YAMAGUCHI, "Samarium-Mediated Acyclic Stereoselection in a Radical Reaction", Proceedings of the International Conference, Rare Earths '92 in Kyoto: *J. Alloy and Compounds* 192, 197 (1993).

J. INANAGA, Y. BABA, and T. HANAMOTO, "Organic Synthesis with Trialkylphosphine Catalysts. Conjugate Addition of Alcohols to α , β -Unsaturated Alkynic Acid Esters", *Chem. Lett.* 241 (1993).

J. INANAGA, Y. YOKOYAMA, and T. HANAMOTO, "1-O-Methoxyacetyl Sugars as a New Glycosyl Donor. Zinc (II) -Promoted Synthesis of O- and S- Glycosides", *Chem. Express* 8, 165 (1993).

T. HANAMOTO, Y. BABA, and J. INANAGA, "Utility of Phosphonium - Substituted Ester Enolates as Synthetic Intermediates. A Novel Trialkylphosphine - Catalyzed [3, 3] Rearrangement of Allylic Acrylates", *J. Org. Chem.* 58, 299 (1993).

J. INANAGA, Y. YOKOYAMA, and T. HANAMOTO, "Lanthanoid (III) Triflates as New Glycosylation Catalysts. Selective and Efficient Activation of 1-O-Methoxyacetyl Sugars", *Tetrahedron Lett.* 34, 2791 (1993).

J. INANAGA, Y. YOKOYAMA, and T. HANAMOTO, "Catalytic O- and S-Glycosylation of 1-Hydroxy Sugars", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1090 (1993).

II-2) 国際会議プロシーディングス

J. INANAGA, O. UJIKAWA, Y. HANDA, K. OTSUBO, and M. YAMAGUCHI, "Samarium-Mediated Acyclic Stereoselection in a Radical Reaction", Proceedings of the International Conference, Rare Earths '92 in Kyoto: *J. Alloy and compounds* 192, 197 (1993).

II-4) 招待講演

J. INANAGA, "Samarium-Mediated Acyclic Stereoselection in a Radical Reaction", RARE EARTHS '92 IN KYOTO, Kyoto (Japan), June, 1992.

稲永純二, 「還元的電子移動課程を経る有機合成—サマリウム(II)の利用」,
日本化学会第64回秋季年会, 新潟, 1992年10月

II-5) 受賞, 表彰

有機合成化学奨励賞, 1988年

III 研究活動の課題と展望

ランタノイド化合物を反応剤あるいは触媒として用いる有機合成反応の開発研究において今後重要なことは, 有機分子とランタノイドイオンとの相互作用が中心元素の違いによりどのように変わってくるのかを系統的に調べ, ランタノイド元素間の化学反応の面における類似性と特異性を明らかにすることであろう。これによって, より精密な有機合成のための方法論が導き出されるに違いない。遠隔不斉誘導のためのポリアリール基を有する不斉素子は, 将来性が高いと考えられるので, その早急な合成と有効性の検証が急がれる。

新名主 輝 男 (助教授)

I-1) 専門領域: 構造有機化学

I-2) 研究課題

- 多架橋 [3_n] シクロファン類の合成と構造の研究, ならびにそれらの光異性化によるプリズマン誘導体への変換
- [3. 3] アヌレノファンをモデル化合物として用いる渡環 π - π 相互作用の基礎研究
- 新しい環化反応の開発
- ビスベンゼンクロム誘導体を用いる新しい有機電導体および磁性体の開発

I-3) 研究活動の概略と主な成果

- 多架橋 [3_n] シクロファン類の合成と構造の研究, ならびにそれらの光異性化によるプリズマン誘導体への変換
[3. 3] シクロファン化学分野における最終的な合成目標化合物の一つである [3_n] (1, 2, 3, 4, 5, 6) シクロファンの合成に取組み, まず, 新しい架橋鎖導入法を開発し, この方法を用いて五架橋体までの合成に成功した。また, これらの化合物の動的な構造を実験結果と理論計算結果に基づいて明らかにした。
- [3. 3] アヌレノファンをモデル化合物として用いる渡環 π - π 相互作用の基礎研究
二個の π 電子系を近付けた場合に働く渡環 π - π 相互作用の本質を明らかにするためのモデル化合物として, (4n+2) π 系 [n=2(10 π), n=3(14 π)] および (4n) π 系 [n=3(12 π)] を含む [3. 3] アヌレノファン類を設計し, 10 π 系の目標化合物の合成に成功した。現在, 12および14 π 系化合物の合成を進めている。
- 新しい環化反応の開発
[3_n] アザシクロファン類の簡便合成法としてトリフルオロアセトアミド法 (n=4) およびシアナミド法 (n=2,4) を開発し, これらの方法により新規抱接ホスト分子を合成した。
- ビスベンゼンクロム誘導体を用いる新しい有機伝導体および磁性体の開発
金属蒸着法によるクロム原子がシクロファン内部の空洞に配位した化合物の生成条件を検討した。

II-1) 学術論文

H. TAKEMURA, K. YOSHIMURA, I. U. KHAN, T. SHINMYOZU, and T. INAZU, "The First Synthesis and Properties of Hexahomotriazacalix [3] arene," *Tetrahedron Lett.* 33, 5775 (1993).

K. SAKO, T. SHINMYOZU, H. TAKEMURA, M. SUENAGA, and T. INAZU, "A Conformational Study of [3,3] Metacyclophanes Through Variable Temperature ¹H NMR and Optical Rotations," *J. Org. Chem.* 57, 6536 (1993).

T. SHINMYOZU, S. KUSUMOTO, S. NOMURA, and T. INAZU, "Synthesis of [3. 3. 3. 3] (1, 2, 3, 5) -and (1, 2, 4, 5) Cyclophanes," *Chem. Ber.* 126, 1815 (1993).

- I. U. KHAN, H. TAKEMURA, M. SUENAGA, T. SHINMYOZU, and T. INAZU, "Azacalixarenes: New Macrocyclic Molecules with Dimethyleneaza Bridging of Calix [4] arene System," *J. Org. Chem.* 58, 3158 (1993).
- Y. KUBOZONO, T. MIYAMOTO, T. SHINMYOZU, M. AOYAGI, Y. GONDO, H. TAKEMURA, and M. SHIOTANI, "An ESR and MO Study of the Butatriene and Tetramethylbutatriene Radical Cations," *Spectrochimica Acta*. 49A, 1187 (1993).

II-3) 総説, 著書

- 新名主 輝男, 「ヨウ素化合物」, 第4版実験化学講座, 19巻, 460.
- 新名主 輝男, 「芳香族化合物」高等学校化学1B (数研出版), 264
(新指導要領に基づく新しい教科書, 平成6年度使用開始)

II-6) 学会および社会的活動

- 学協会役員, 委員
有機合成化学協会九州山口支部会計幹事 (平成5年度)

III 研究活動の課題と展望

将来的には研究対象を架橋芳香族化合物に限らず, 構造的ならびに理論的に興味ある化合物に拡張して新しい有機化合物の創製を目指す。また, 遷都金属の π 錯体に注目して, それらの有機磁性体や電導体, ならびに有機反応触媒への応用を検討したい。上記の研究遂行上最も重要な要素の一つが良質なマンパワーであるが, 残念ながら, 流動部門であるために大学院生の確保が難しく, また外国人共同研究者も得にくい状況にあり非常に困った。

根 本 尚 夫 (助教授)

I-1) 専門領域: 有機金属化学, 有機合成化学

I-2) 研究課題

- a) 中性子補足療法による癌治療のためのホウ素キャリアーの設計と合成
- b) マスクされたアシルシアニド型フォルマートアニオンROCH(CN)₂を用いた有機合成
- c) 活性化イミンの化学とその含窒素生理活性化合物への合成的応用

I-3) 研究活動の概略と成果

- a) 中性子補足療法による癌治療のためのホウ素キャリアーの設計と合成
同位体高選択的な¹⁰Bと¹¹n (熱中性子) の局所的核反応を利用して癌細胞致死を行う原理に基づいた新しい癌治療法が, 世界では, 日本でのみ臨床治療実績をあげている。これをより確実な治療法に導くのは, 現段階で用いられているホウ素化合物を越える癌細胞集中性を有する新有機ホウ素の設計である。この目的のための有機ホウ素化合物新合成法を種々開発した。これ

らの合成法により実際に臨床応用されている化合物を越える新有機ホウ素の創製に成功し, 現在臨床応用に向けて検討中である。

- b) マスクされたアシルシアニド型フォルマートアニオンROCH(CN)₂を用いた有機合成
ROCH(CN)₂は, 筆者による新開発アシルアニオン等価体であり, 世界初の, 活性化エステル構造 (アシルシアニド) を簡便に発生する反応剤である。これを利用した合成応用を行っている。
- c) 活性化イミンの化学とその含窒素生理活性化合物への合成的応用

イミンと求核剤の反応はアミン合成における重要な化学変換法である。しかし通常のイミンは反応性が低く, 有機合成応用にはその活性化のくふうが不可欠な場合が多い。そこでイミンのN上に電子吸引基を付けた「活性化イミン」を用いて, 簡便で効果的な炭素-炭素結合生成過程を含むアミン合成について研究している。これまでにアシルイミニウムイオンの低温NMRによる初めての検証, 活性化イミン等価体の新合成, アミノ酸・ペプチド合成応用などを行っている。現在は不斉合成への応用の検討中である。

II-1) 学術論文

- H. NEMOTO, J. G. WILSON, H. NAKAMURA, and Y. YAMAMOTO, "Polyols of a Cascade Type as a Water-Solubilizing Element of Carborane Derivatives for Boron Neutron Capture Therapy", *J. Org. Chem.* 57, 435 (1993).
- Y. YAMAMOTO, T. NAKADA, and H. NEMOTO, "NMR Detection of *N*-Acyliminium Ion Intermediates Generated from α -Alkoxy carbamates", *J. Am. Chem. Soc.* 114, 112 (1992).
- Y. YAMAMOTO, T. SEKO, H. NEMOTO, H. HOJO, N. MUKAI, and Y. HASHIMOTO, "Synthesis of Carboranes Containing Nucleoside Bases. Unexpectedly High Cytostatic and Cytocidal Toxicity toward Cancer Cells", *J. Chem. Soc. Commun.* 157, (1992).
- H. NEMOTO, S. IWAMOTO, H. NAKAMURA, and Y. YAMAMOTO, "A New Water-soluble p-Boronophenylalanine for Boron Neutron Capture Therapy", *Chem. Lett.* 465 (1993).
- Y. YAMAMOTO, N. ASAO, M. MEGURO, N. TSUKADA, H. NEMOTO, N. SADAYORI, J. G. WILSON, and H. NAKAMURA, "Regio- and Stereo-selective Ring Opening of Epoxides with Amide Cuprate Reagents", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1201 (1993).
- H. NEMOTO, Y. KUBOTA, N. SASAKI, and Y. YAMAMOTO, "Carbon-Carbon Bond Formation between Activated Imines and ROCH(CN)₂ under Essentially Neutral Conditions at High Pressure", *Synlett*, 465 (1993).

II-3) 総説, 著書

根本尚夫「がん治療のためのホウ素キャリアーの設計と合成」, 化学と工業, 46巻, 218ページ, 1993年

II-5) 受賞・表彰

平成4年度有機合成化学協会 研究企画賞, 根本尚夫, 1992年

平成5年度有機合成化学協会 奨励賞, 根本尚夫, 1993年

Ⅲ 研究活動の課題と展望

活性化イミンの光学活性体合成などへ更に展開する。中性子補足療法の化学としては、投与する薬剤の癌細胞と正常細胞を識別するかという複雑な「機能」が、単純明快でデジタル化できる「水溶性の度合」に深く関連しているらしい端緒をつかんだ。その水溶性制御のために我々が新たに開発した分子ユニットを活用して、構造との相関を研究する。

成 田 吉 徳 (助教授)

I-1) 専門領域: 生物無機化学

I-2) 研究課題

- 一酸素添加酵素チトクロームP-450活性中心の精密モデル化と酸素活性化機構の研究
- 光合成反応中心における水の酸化分解酵素の機能モデルによる研究
- 高カタラーゼ活性を有する新しい分子集合体の分子設計と反応機構解明
- チトクロームCオキシターゼ活性中心モデルによる酵素反応機構の解明
- 光合成系をモデルとする光エネルギー伝達システムの設計とその基礎的研究

I-3) 研究活動の概略と成果

- 一酸素添加酵素チトクロームP-450活性中心の精密モデル化と酸素活性化機構の研究
これまで合成が困難であった、両面に分子空隙をもつポルフィリンを合成し、その分子認識を不斉酸化反応により立証した。また酸素分子の配位と活性化に有用であるモデル錯体の合成に成功した。
- 光合成反応中心における水の酸化分解酵素の機能モデルによる研究
金属間距離ならびにその相対配置の固定されたマンガンポルフィリン二量体を合成し、これを触媒として陽極酸化により4電子酸化をへて水からの酸素発生に世界で始めて成功した。
- 高カタラーゼ活性を有する新しい分子集合体の分子設計と反応機構解明
マンガンポルフィリン二量体は過酸化水素の不均化に対して極めて高活性を示すことが明らかとなった。これはマンガンカタラーゼの機能モデルとして良好であることを提唱した。
- チトクロームCオキシターゼ活性中心モデルによる酵素反応機構の解明
酸素分子を4電子還元している酵素として、活性中心に鉄-銅の二核錯体を持つモデルを合成に成功してその物性を種々の物理化学的方法により研究している。
- 光合成系をモデルとする光エネルギー伝達システムの設計とその基礎的研究
光エネルギーの効率の伝達を行っているアンテナクロロフィルの機能の再現を目指して、水素結合ネットワークによるポルフィリン多量体の生成に成功した。
以上のように構造が未確定の多くの天然の金属分有酵素の人工モデルを合成しその特異な機能を再現することにより酵素反応に要求される問題点の解明を行っている。特に問題としている反

応は高度に最適化された環境下で始めて可能となっているものであり、有機合成法を駆使してモデル錯体を合成し、物理化学的手法により特性の解明を行っているのが特徴である。

II-1) 学術論文

- Y. NARUTA, F. TANI, and K. MARUYAMA, "meso-Perfluorination of Porphyrins with N-Fluoropyridinium Triflate", *Tetrahedron Lett.* 33, 1069 (1992).
- Y. NARUTA, M. SASAYAMA, and K. MARUYAMA, "Catalytic Activity of m-Phenylene- and 2, 6-Pyridinediyl-linked Manganese Porphyrin Dimers. Role of Nitrogen Bases on the Development of Catalase Activity", *Chem. Lett.* 1267 (1992).
- Y. NARUTA, F. TANI, and K. MARUYAMA, "Remarkable Effects of Metal Ions and Axial Bases on Catalytic and Asymmetric Oxidation of Simple Olefins with a "Twin-coronet" Porphyrin", *Tetrahedron Lett.* 33, 6323 (1992).
- Y. NARUTA, N. ISHIHARA, F. TANI, and K. MARUYAMA, "Asymmetric Epoxidation of Simple Olefins by Chiral Bitetraline-Linked "Twin-Coronet" Porphyrin Catalysts", *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 66, 158 (1993).
- Y. NARUTA, Y. NISHIGAICHI, and K. MARUYAMA, "Tributyl (3-methyl-2-butenyl) tin", *Org. Synth.* 71, 118 (1992).
- Y. NARUTA, and K. MARUYAMA, "Uniquinone-1", *Org. Synth.* 71, 125 (1992).

II-2) 国際会議プロシーディングス

- Y. NARUTA, M. SASAYAMA, and K. MARUYAMA, "High Oxygen Evolving Activity of Rigidly Linked Manganese (III) Porphyrin Dimers", *Proc. of 203rd Meeting of ACS, Part II*, INOR 237 (1992).
- Y. NARUTA, and K. MARUYAMA, "Modeling Reaction of Water Oxidation with Manganese Porphyrin Dimers", in "Research in Photosynthesis", *Proc. of the IXth International Congress on Photosynthesis*, ed. by N. Murata, Kluwer Academic Publishers, Vol. II. 813-816 (1992).

II-3) 総説, 著書

- 成田吉徳, 実験化学講座21 有機合成Ⅲ, キノン, 丸善 (1992) pp. 355-374.
- 成田吉徳, 実験化学講座21 有機合成Ⅲ, ケテンおよびケテン二量体, 丸善 (1992) pp. 375-386.
- 成田吉徳, チトクロームP-450を規範とした不斉酸化触媒の分子設計, 酵素工学ニュース, 27, 3 (1992).
- K. MARUYAMA, Y. NARUTA, Y. NISHIGAICHI and N. TACHIKAWA, "Synthesis of Coenzyme Qn and Quinonoid Antibiotics by Using Allyltrialkyltins: Control of Regio- and Stereochemistry in Fluxional Pentadienyltins and Their Application to Chiral Anthracyclinone Synthesis", in "Chemistry and Technology of Silicon and Tin" (V. G. Kumar Das, N. S. Weng, and M. Gielen, Eds.) pp. 479 - 508 (1992).

II-4) 招待講演

Y. NARUTA, M. SASAYAMA, and K. MARUYAMA, "High Oxygen-evolving Activity of Rigidly Linked Manganese (III) Porphyrin Dimers. A Functional Model of Manganese Catalase", 203rd Meeting of the American Chemical Society, U.S.A., April 1992.

II-5) 受賞, 表彰

日本化学会進歩賞, 成田吉徳, 昭和58年
倉田奨励賞, 成田吉徳, 昭和58年

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

日本化学会 近畿支部幹事 (1988 - 1989)

近畿化学協会 合成部会幹事 (1987~)

学会の組織委員

国際有機化学京都会議 (IKCOC) 実行委員 (1987, 1991)

日本化学会 年会プログラム委員 (1989)

III 研究活動の課題と展望

天然の金属酵素は人工的な反応に見られない高度な制御を行っているのが特徴である。有機合成法を縦横に駆使して天然の金属酵素の活性中心に求められる要素を備えた精密人工モデルを合成し、酵素機能、特に安定性等によりその構造が明確となっていない酵素の反応を人工的に再現し、その解明を行うことは非常に重要である。物理化学的手法や理論的なアプローチを併用することにより新たな反応システムの構築も可能であり、それにより天然のシステムを大きく上回るような人工反応系の創出へと展開することが期待される。

極端紫外光科学研究系

基礎光化学研究部門

小 杉 信 博 (教授)

I-1) 専門領域: 軟X線光物性, 光化学

I-2) 研究課題

- X線吸収スペクトル (XANES) による局在状態の電子構造研究
- 広域X線吸収微細構造 (EXAFS) 法による局所構造の研究
- 内殻励起分子の解離ダイナミックスの研究
- 分子の励起状態, イオン化状態の量子化学
- 固体中局在状態の量子化学

I-3) 研究活動の概略と主な成果

- X線吸収スペクトル (XANES) による局在状態の電子構造研究

酸化物超伝導体など銅化合物の銅Is内殻励起スペクトルを解析することで、銅が関与している局在状態の電子構造を明らかにし、伝導性などの物性との関係を解明することに成功した。その他、広く遷移金属を含んだ系の電子構造の研究に応用し、指紋的使い方しかされてこなかったXANESスペクトルから電子構造の詳細な情報が得られることを示してきた。

- 地域X線吸収微細構造 (EXAFS) 法による局所構造の研究

EXAFS法によって触媒や非品質固体の局所構造を明らかにしてきた。独自の解析プログラムを広く配付することにより、EXAFS解析法の確立に貢献した。

- 内殻励起分子の解離ダイナミックスの研究

内殻励起分子の振動準位まで分離できる高分解能内殻吸収スペクトルを測定し、リドベリー・原子価混合状態を発見し、解離ダイナミックスとの関係を解明することに成功した。

- 分子の励起状態, イオン化状態の量子化学

分子の価電子, 内殻電子の高励起状態の電子構造を量子化学的にアプローチする方法を確立させ、実験的によくわかっていない深い価電子帯や内殻サテライト帯に関わる電子状態の多電子相関やポテンシャル面を明らかにすることに成功した。

- 固体中局在状態の量子化学

固体のバンド理論では固体中にできる色中心や不純物準位を調べることは困難である。そのような領域に量子化学を応用する可能性を調べ、F中心や酸化物超伝導体中の不純物準位に対して新しい知見が得られることを示した。

現在は、上記の実験的研究と理論的研究をそれぞれ発展させるとともに、放射光を利用した新しい軟X線分光法の確立と応用を目指して研究を行っている。本グループは内殻電子が局在して

いることを利用した新しいタイプの物性研究や光化学研究を実験、理論両面から広範にわたり研究しているところに特徴がある。

II-1) 学術論文

N. KOSUGI, J. ADACHI, E. SHIGEMASA, and A. YAGISHITA, "High-resolution and Symmetry-resolved N and O K-edge Absorption Spectra of NO", *J. Chem. Phys.* **97**, 8842 (1992).

H. SHIMADA, N. MATSUBAYASHI, T. SATO, Y. YOSHIMURA, A. NISHIJIMA, N. KOSUGI, and H. KURODA, "XAFS Study of Molybdenum Oxide Catalysts on Various Supports", *J. Catalysis* **138**, 746 (1992).

S. NAKAGAWA and N. KOSUGI, "Polarized One-electron Potentials Fitted by Multicenter Polarizabilities and Hyperpolarizabilities", *Chem. Phys. Lett.* **210**, 180 (1993).

II-2) 国際会議プロシーディングス

N. KOSUGI, "Ab initio Molecular Orbital Theory of X-ray Absorption Spectra of Simple Molecules and Transition Metal Complexes", *Jpn. J. Appl. Phys.* **32-S2**, 13 (1993).

K. AKEYAMA, H. KURODA, and N. KOSUGI, "Cu K-edge XANES and Electronic Structure of Trivalent, Divalent and Monovalent Cu Oxides", *Jpn. J. Appl. Phys.* **32-S2**, 98 (1993).

H. ISHII, K. ASAKURA, H. NAMBA, T. OHTA, Y. KITAJIMA, N. KOSUGI, and H. KURODA, "SEXAFS Studies of Sulfur Adsorbed on a Nickel Stepped Surface", *Jpn. J. Appl. Phys.* **32-S2**, 365 (1993).

II-3) 総説, 著書

小杉信博, 「XANESの分子軌道理論」日本放射光学会誌, **6**, 73 (1993).

II-4) 招待講演

小杉信博, 「内殻励起分子の高分解能スペクトルと理論」日本物理学会, 東京, 1992年9月

N. KOSUGI, "Ab initio Molecular Orbital Theory of X-ray Absorption Spectra of Simple Molecules and Transition Metal Complexes", 7th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure, Kobe, Japan, 1992.8.

II-5) 受賞, 表彰

分子科学研究奨励森野基金研究助成, 1987年

III 研究活動の課題と展望

我々は、放射光の特徴を生かした新しい軟X線分光法の確立と応用を目指して研究を行っている。軟X線で物質を励起すると軽元素の内殻電子が関与した種々の現象が起き、物質と光の

相互作用として基礎面でも応用面でも重要な研究分野である。しかし、軟X線分光は放射光が利用できるようになってから本格的に開拓された分野であり、分光技術や計測技術は発展途上で、理論的アプローチも確立しているとは言えない。このような未開拓の分野で研究を続けて行くには、分光器、測定装置、データ解析、理論などの面で新たに越えなければならないハードルが多くある。また、加速器である放射光リングの新しい展開も諸外国では始まっているので、研究を展開していく上で、単独の研究グループや国内のグループばかりでなく、外国も含めて各放射光施設との情報交換や人的交流の重要度が増すと考えている。

正 畠 宏 祐 (助教授)

I-1) 専門領域: 化学反応動力学, シンクロトロン放射 (SOR) 光化学, 表面反応動力学

I-2) 研究課題

- a) 気相分子, 分子間化合物の真空紫外光化学過程の研究
- b) 半導体表面のSOR光励起表面反応機構及び動力学の研究
- c) 分子線法による固体表面反応動力学の研究

I-3) 研究活動の概略と成果

- a) 気相分子, 分子間化合物の真空紫外光化学過程の研究

シンクロトロン放射光源を用いて、気相分子及び分子間化合物の真空紫外光化学反応過程を研究している。今年度は、約800℃まで加熱できる高温吸収セルを開発し、シアニ化アルカリ (NaCN, KCN, RbCN) 及びC₆₀の吸収スペクトルの測定に成功し、その電子励起状態を明らかにした。また、各種シアニ化合物の光励起解離過程によって生成した励起分解片CN(B)からの発光の空間異方性を測定し、その励起状態の動的過程を明らかにした。

- b) 半導体表面のSOR光励起表面反応機構及び動力学の研究

SiO₂やSiCのSF₆気体中でのSOR光励起によるエッチング反応速度の圧力依存性を測定し、その反応機構を明らかにした。また、Si (100) 面のXeF₂によるエッチング反応のSOR光励起光効果を、表面から脱離する中性生成物の速度分布を測定することによって研究し、その生成物を同定し反応機構を明らかにした。

- c) 分子線法による固体表面反応動力学の研究

Rd (110) 表面に共吸着した¹⁸O原子とCO分子との熱的な反応によって生成したCO¹⁸Oの速度ベクトル分布を飛行時間 (TOF) 法を用いて測定し、生成過程の動力学を明らかにした。また、希ガスと水素処理したSi (100) 表面との散乱過程をTOF法を用いて研究し、並進-表面振動エネルギー移動に付いて明らかにした。

II-1) 学術論文

Y. OHNO, T. MATSUSHIMA, K. SHOBATAKE and H. NOZOE, "Reaction Diagram of Carbon Monoxide and Oxygen on Palladium (100) and Angular Distribution of

Reactive Carbon Dioxide Desorption," *Surf. Sci.* 273, 291 (1992).

T. IBUKI, A. HIRAYA, and K. SHOBATAKE, "Vacuum Ultraviolet Absorption Spectra and Photodissociative Excitation of CHBr_2Cl and CHBrCl_2 ," *J. Chem. Phys.* 96, 8793 (1992).

F. TANAKA, S. HIRAYAMA, and K. SHOBATAKE, " $\text{S}_1\text{-T}_2$ Level Inversion of 9,10-Dimethylanthracene Caused by the Coordination of One Rare-Gas Atom," *Chem. Phys. Lett.* 195, 243 (1992).

T. MATSUSHIMA, K. SHOBATAKE, Y. OHNO, K. NAGAI, and K. TABAYASHI, "Anisotropic Velocity Distribution of Desorbing Product in Carbon Monoxide Oxidation on Palladium (110)," *J. Chem. Phys.* 97, 2783 (1992).

M. KONO, Y. KUBO, S. HIRAYAMA, and K. SHOBATAKE, "Radiative Lifetime and Electronic Relaxation of 9-Cyanoanthracene in Rare Gas Clusters and in Rare Gas Matrices," *Chem. Phys. Lett.* 198, 214 (1992).

S. HIRAYAMA, M. KONO, Y. KUBO, F. TANAKA, and K. SHOBATAKE, "Single Vibronic Level Relaxation in Photoreactive 9-*tert*-Butylanthracene," *J. Phys. Chem.* 96, 10666 (1992).

T. MATSUSHIMA, K. SHOBATAKE, and Y. OHNO, "Spatial and Velocity Distributions of Product Desorption in Carbon Monoxide Oxidation over Palladium (110) and Reconstructed Platinum (110) (1x2) Surfaces," *Surf. Sci.* 283, 101 (1993).

H. OHASHI, A. YOSHIDA, K. TABAYASHI, and K. SHOBATAKE, "Mechanisms of Synchrotron Radiation-Excited Etching Reactions of Semiconductor Materials," *Appl. Surf. Sci.* 69, 20 (1993).

II-3) 総説, 著書

正畠宏祐「分子線」実験化学講座, 第4版, No. 11, 反応と速度, 日本化学会編(丸善, 東京, 1993), pp. 125-149.

正畠宏祐, "状態から状態への化学の進歩," 化学, 48(2), 146(1993).

II-4) 招待講演

K. SHOBATAKE, "Mechanisms of Synchrotron Radiation-Excited Etching Reactions of Semiconductor Materials", European Material Research Society, Strasbourg (France), June 2-5, 1992.

K. SHOBATAKE, "Solvent Effects on the Excited Dynamics of Substituted Anthracene Compounds," International Symposium on Photochemistry, Photobiology and Photomedicine, Sept. 13-16, 1992. Taedok Science Town, Taejon (Korea).

K. SHOBATAKE, "Chinese Chemical Society," Synchrotron Radiation-Excited Etching of Semiconductor Materials Surface," Symposium of Molecular Sciences, Taipei (Republic of China, Taiwan), Dec. 28-29 (1992).

II-2) 国際会議プロシーディングス

H. OHASHI, A. YOSHIDA, K. TABAYASHI, and K. SHOBATAKE, "Mechanisms of Synchrotron Radiation-Excited Etching Reactions of Semiconductor Materials", *Appl. Surf. Sci.* 69, 20 (1993).

M. KONO, Y. KUBO, S. HIRAYAMA, F. TANAKA, and K. SHOBATAKE, "Solvent Effects on the Excited Dynamics of Substituted Anthracene Compounds" in *Recent Advances in Photosciences-Proceedings of Int. Symp. on Photochemistry, Photobiology, and Photomedicine*-Ed. by M.-J. Yoon and P.-S. Song (Chungnam Natl. Univ., Taedok Science Town, Korea, 1993), pp. 44.

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

分子科学研究会 委員会副委員長 (1982-1983)

原子衝突協会 委員会委員 (1981 - 1982, 1992 - 1993)

学会誌編集委員

日本放射光学会 編集委員 (1991 - 1992)

III 研究活動の課題と展望

気相反応の動力学は, 多くの反応に付いて明らかにされてきたが, 10eV以上の励起エネルギーにある分子の起こす反応過程は予測がつかない場合が多い。その解明に向けてシンクロトロン放射光源を用いた分子, 分子間化合物の光化学反応過程を続けたい。また, 巨大分子の熱浴に接した反応場で進む表面反応は, 複合反応を経て進む。その個々の素反応過程を解明し更には制御するために, 種々のビーム法を駆使して分子-固体表面の分子間相互作用を決定し, その動力学との関連を明らかにする。

奥 山 克 彦 (助手)

I-1) 専門領域: 物理化学

I-2) 研究課題

レーザー光電子分光学

I-3) 研究活動の概略と成果

我々のグループではこの10年来レーザー光電子分光法の確立と応用を手掛けました。その中で, 最近1年間の活動はしきい光電子分光法を用いた陽イオン分子の高分解能振動分光の研究に主力を注いだ。この活動内容は, 陽イオン分子の大振幅運動, 分子内水素移動反応, Van der Waals 錯合体, 回転異性体, 振動分光の五つの課題である。何れの課題も対象は π 電子を持つ芳香族化合物で, これらの陽イオンの基底電子状態は中性分子の最外殻 π 電子を放出した状態

である。この状態で分子は、骨格構造は大きく変わることはなく、分子内の電子的状況を変えていることになり、この状況下で上記の現象が如何に変わるか観察し、その理由を中性状態と比較することで議論を進めることが興味の中心である。

II-1) 学術論文

K. OKUYAMA, M. C. R. COCKETT, and K. KIKURA, "Observation of Torsional Motion in the Ground-State Cation of Jet-Cooled Toluene by Two-Color Threshold Photoelectron Spectroscopy", *J. Chem. Phys.* **97** 1649 (1992).

M. TAKAHASHI and K. KIKURA, "Cation Vibrational Spectroscopy of *Trans* and *Gauche* *n*-Propylbenzene Rotational Isomers, Two-Color Threshold Photoelectron Study and *ab initio* Calculations", *J. Chem. Phys.* **97** 2920 (1992).

J. M. DYKE, H. OZEKI, M. TAKAHASHI, M. C. R. COCKETT, and K. KIKURA, "A Study of Phenylacetylene (PA) and Styrene (ST), and their Argon Complexes, PA-Ar and ST-Ar, with Laser Threshold Photoelectron Spectroscopy", *J. Chem. Phys.* **97** 8926 (1992).

M. TAKAHASHI and K. KIKURA, "Reply to the Comment on: Cation Vibrational Spectroscopy of *Trans* and *Gauche* *n*-Propylbenzene Rotational Isomers, Two-Color Threshold Photoelectron Study and *ab initio* Calculations", *J. Chem. Phys.* **98** 5109 (1993).

M. C. R. COCKETT, H. OZEKI, K. OKUYAMA, and K. KIKURA, "Vibronic Coupling in the Ground Cationic State of Naphthalene: a Laser Threshold Photoelectron [Zero Kinetic Energy (ZEKE) -Photoelectron] Spectroscopic Study", *J. Chem. Phys.* **98** 7763 (1993).

H. OZEKI, M. TAKAHASHI, K. OKUYAMA, and K. KIKURA, "The Role of Electronic and Geometric Factors in 'Proton Tunneling', as Revealed by a Comparative Photoelectron Spectroscopic Study of Tropone and 9-Hydroxyphenalenone in their Cation Ground State", *J. Chem. Phys.* **99** 56 (1993).

II-3) 総説、著書

奥山克彦「光電子エネルギー分析器」, 第4版実験化学講座 分光Ⅲ, 8巻, 21項, 1993年.

奥山克彦「陽イオン分子の高分解能振動分光」, 第4版実験化学講座 分光Ⅲ, 8巻, 61項, 1993年.

III 研究活動の課題と展望

我々は、現在抱えている研究課題 (I-3) に記した) を十分に魅力的なものと考えている。従って、研究活動の大きな変更や新領域への展開は考えておらず、当分はこの路線に従って研究を進めていくと考えられる。その中で、「有機超伝導現象における電子供与性分子の大振幅運動の果たす役割の探究」(平成5年度奨励研究(A)採択課題)と言った、他の領域との接点になるような研究を積極的に進めていくことになると思われる。

反応動力学研究部門

宇理須 恒 雄 (教授)

I-1) 専門領域: 電子シンクロトロン放射光光化学反応

I-2) 研究課題

- 新しいVUV表面光反応系の探索
- 高感度FTIR技術と反応その場観察技術の開拓
- FTIR用埋め込み金属層基板の開発と反応機構の解明
- 電子イオンコインシデンス法による光刺激脱離種の検出と反応素過程の解明

I-3) 研究活動の概略と成果

- 新しいVUV表面光反応系の探索
放射光励起表面反応を利用し、原子層エッチング、原子層エピタキシャル成長などの反応を各種の反応ガスと基板の組み合わせで試み、新しい光化学現象の発見とその反応機構の解明を進める。反応装置を設計し、制作した。
- 高感度FTIR技術と反応その場観察技術の開拓
10⁴以上のS/Nで、エッチングやエピタキシャル反応をその場観察できる測定系を制作する。実時間その場観察で表面での光反応を追跡し反応機構の解明を進める。平成4年度は光学系の設計を進めた。
- FTIR用埋め込み金属層基板の開発と反応機構の解明
金属薄膜表面に200Å前後の半導体膜あるいは絶縁膜を堆積し、化学反応の場としては半導体あるいは絶縁膜の性質を有するが、光学的には金属の性質を有する基板を制作し、半導体表面でモノレーヤ以下の吸着種の観察が可能であることを確認した。
- 電子イオンコインシデンス法による光刺激脱離種の検出と反応素過程
オージェ電子と相関のある光刺激脱離イオンをコインシデンス法により測定し、表面光反応の素過程を明らかにする。光励起反応への二次電子や光電子の寄与を明らかにする。

II-1) 学術論文

M. NAGASE, Y. UTSUMI, H. AKAZAWA, and T. URISU, "Oxygen Desorption from Molybdenum Oxide by Synchrotron Radiation and Its Surface-cleaning Applications", *Appl. Phys. Lett.* **62**, 234 (1993).

Y. UTSUMI, H. AKAZAWA, M. NAGASE, and T. URISU, "Perfectly Selective Si Epitaxial Growth Due to Synchrotron Radiation Irradiation During Disilane Molecular Beam Epitaxy", *Appl. Phys. Lett.* **62**, 1647 (1993).

T. URISU, J. TAKAHASHI, Y. UTSUMI, T. AKUTSU, and K. KUCHITSU, "Synchrotron

Radiation Assisted Si Epitaxial Growth-Comparison of Growth Characteristics Between Si_2H_6 and SiH_2Cl_2 ”, *Appl. Phys. Lett.* 62, 31 (1993).

K. MASE and Y. MURATA, “LEED study of NO adsorption-induced restructuring of a single-domain Pt(001)-(20x5) surface at 80-410 K”, *Surface Sci.* 277, 97 (1992).

K. FUKUTANI, A. PEREMANS, K. MASE, and Y. MURATA, “Photo-stimulated desorption of NO from a Pt(001) surface”, *Surface Sci.* 283, 158 (1993).

A. PEREMANS, K. FUKUTANI, K. MASE, and Y. MURATA, “UV photodesorption of CO from Pt(001) at 193 nm investigated by state-selective detection”, *Surface Sci.* 283, 189 (1993).

K. FUKUTANI, A. PEREMANS, K. MASE, and Y. MURATA, “Photodesorption of NO from Pt (001) at $\lambda = 193, 248$, and 352 nm ”, *Phys. Rev. B* 7, 4007 (1993).

A. PEREMANS, K. FUKUTANI, K. MASE, and Y. MURATA, “CO and CO^+ Photodesorption from Pt (001) at 193 nm”, *Phys. Rev. B* 7, 4135 (1993).

T. MUNAKATA, K. MASE, and I. KINOSHITA, “Two-photon photoemission from NO adsorbed on Cu (111)”, *Surface Sci.* 286, 73 (1993).

II-3) 総説, 著書

Y. MURATA, K. FUKUTANI, A. PEREMANS, and K. MASE, “Desorption of ions and neutrals with $> 6 \text{ eV}$ laser light”, in: Desorption Induced by Electron Transitions DIET V, eds. A. R. Burns, E. B. Stechel, and D. R. Jennison (Springer-Verlag, Berlin, 1993) p. 75.

II-4) 招待講演

T. URISU, “Application of Synchrotron Radiation Photochemical Reaction to Semiconductor Process”, RIKEN International Symposium-Application of VUV Radiation, Wako Japan, February 1993.

宇理須 恒雄, 「放射光励起半導体プロセスと反応機構」, 第10回プラズマプロセッシング研究会, 大阪(豊中市), 1993年1月

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

レーザ学会評議員 (1983年~1985年)

放射光学会評議員 (1993年, 1994年)

電気学会, 放射光励起プロセス技術調査専門委員会幹事 (1992年, 1994年)

学会誌編集委員

JJAP 特集論文特別編集委員 (1992年, 1993年)

III 研究活動の課題と展望

放射光励起表面反応については特異な材料選択性など面白い現象が発見されているにもかかわらず反応機構の解明がほとんど進んでいない, この観点から, 今後反応のその場観察と, 励起波

長の依存性の測定が特に重要である。上記課題推進の体制が整い次第, 励起波長依存性の研究を計画したい。又光刺激脱離の研究については, レーザー多光子イオン化による中性種の検出により反応機構をより詳細に解析することも考えたい。

見 附 孝一郎 (助教授)

I-1) 専門領域: 化学反応素過程

I-2) 研究課題

- 粒子同時測定法の開発とそれを用いた原子・分子・マイクロクラスターの光イオン化過程の研究
- 分子の真空紫外超励起状態の分光学と動力学。
- 原子・分子衝突における相互作用ポテンシャルとエネルギー移行現象の解明。
- ファンデルワールスおよび金属クラスターの電子構造の研究。
- ファンデルワールスおよび金属クラスターの酸化還元反応の動力学。

I-3) 研究活動の概略と成果

- 正イオン・負イオン同時測定法を世界で初めて開発し, 複数の光解離過程の識別と並進エネルギーの放出量測定を可能とした。また, 光電子・イオン飛行時間同時測定法により始状態が選別されたイオンの光解離の研究を行った。
- 軌道放射光施設に分子線光解離装置を製作し, 二酸化炭素, 二酸化硫黄, ハロゲン化メチル, フロンなど20種余の分子についてイオン対を生成する過程を世界で初めて見いだした。さらに, 超励起状態の自動イオン化や前期解離のダイナミックス, 分子の2電子励起状態の性質などについて考察した。
- 励起準安定原子が関与する衝突イオン化過程について, 電子の角度分布測定およびイオン化断面積の衝突エネルギー依存性を測定し, 標的分子やイオン終状態による著しい違いを観測した。励起原子をプローブにして, 分子の電子密度やポテンシャルエネルギーの異方性を精度良く決定するという新しい分野を開拓した。
- 分子線電子分光・質量分析装置を設計・製作し, サイズを選択したファンデルワールスクラスターの光電子スペクトルの測定を可能とした。また, 金属や半導体のクラスターの深い価電子状態を研究する目的で, クラスターイオンの光脱離電子分光装置を軌道放射光施設に建設した。
- 希ガス高励起原子とクラスター分子の衝突電子移動によって負イオンクラスターが効率よく生成することを見だし, 十数種以上のクラスターについて研究を行った。この過程は我々が初めて発見したものであり, 従来の手法と違ってイオン化の際の分子の解離を最小限に抑えられるという特徴を持ちクラスターの検出法として極めて優れたものであることが広く認められた。

II-1) 学術論文

S. SUZUKI, K. MITSUKE, T. IMAMURA, and I. KOYANO, “Negative-Ion Mass Spectrometric Study of Ion-Pair Formation in the Vacuum Ultraviolet. VI. $\text{CH}_3\text{X} \rightarrow$

$X^- + CH_3^+(X=F, Cl, Br)$ ”, *J. Chem. Phys.* **96**, 7500 (1992).

K. MITSUKE, S. SUZUKI, T. IMAMURA, and I. KOYANO, “Negative-Ion Mass Spectrometric Study of Ion-Pair Formation in the Vacuum Ultraviolet. VII. $SO_2 \rightarrow O^- + SO^+, O^- + S^+ + O$ ”, *Org. Mass Spectrom.* **28**, 335 (1993).

K. MITSUKE, H. YOSHIDA, and H. HATTORI, “Positive Ion-Negative Ion Coincidence Spectroscopy of O_2 and H_2 Using Synchrotron Radiation”, *Zeit. Phys. D* **27**, 267 (1993).

II-3) 総説, 著書

見附孝一郎, 「原子・分子クラスター—クラスター作成法」

実験化学講座 (第4版), 巻8 (分光Ⅲ), 255頁, 1993年

見附孝一郎「原子・分子クラスター—構造」

実験化学講座 (第4版), 巻8 (分光Ⅲ), 277頁, 1993年

II-4) 招待講演

見附孝一郎「分子の超励起状態からのイオン対生成」, 宇宙空間原子分子過程研究会, 宇宙科学研究所 (日本), 1992年12月

見附孝一郎「真空紫外領域における正・負イオン対生成」, 負イオン基礎過程研究会, 核融合科学研究所 (日本), 1993年2月

見附孝一郎「中性励起原子衝突による化学イオン化」, 質量分析連合討論会, 岡崎 (日本), 1993年5月

見附孝一郎「負イオン生成とビーム制御に関する研究会」, 高エネルギー物理学研究所 (日本), 1993年8月

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

原子衝突研究協会役員(1987)

学会の組織委員

質量分析連合討論会, 実行委員(1993)

III 研究活動の課題と展望

気相や溶液における化学反応の動力学現象の解明を目的として, まず, 負イオン光脱離法によってこれまで知られていなかった中性励起状態を生成し電子分光法でその振動電子状態を研究したい。究極的には溶媒分子の個数や内部温度を制御して, 溶媒和状態の動力学的效果について分子論的描像を与えることを目標とする。また, 同様の手法で金属クラスターの幾何構造や電子状態に関する基礎的データを得たいと考えている。次に, 光電子分光, 蛍光分光, 質量分析などを駆使して真空紫外領域の中性励起状態の分光学的情報を集積し励起分子の動力学を明らかにしたい。

界面分子科学研究部門

吉 田 明 (教授)

I-1) 専門領域: 電子材料工学

I-2) 研究課題

- シンクロトロン放射光による次世代半導体プロセスの開発
- 新しい化合物半導体混晶単結晶薄膜成長と特性評価
- 真空紫外光による高品質アモルファス半導体薄膜作製とその応用
- カルコパイライト系薄膜作製と応用
- リモートプラズマによる半導体薄膜の作製
- 半導体薄膜形成の理論的研究

I-3) 研究活動の概略と主な成果

- マイクロ波励起プラズマCVD法を提案し, InN, InAlN 単結晶を始めて作製し, 電気的光学的各種特性を明らかにするとともに, オプトエレクトロニクス材料としての可能性を検討した。
- 窓なしマイクロ波励起水素放電管を採用し, ジシラン, トリシランを用いて, 光感度の非常に大きい高品質水素化アモルファスシリコン膜を作製した。太陽電池, 薄膜トランジスタ, 薄膜センサへの応用を検討した。
- 高周波スパッタ法などにより, $CuIn_xGa_{1-x}Se_2$ 薄膜を作製し, 電気的光学的特性をはじめ, 成膜条件や酸素導入効果などを明らかにするとともに, 低価格無劣化太陽電池材料への応用を進めた。
- シンクロトロン放射光により有機金属原料を用いて, 金属・半導体・絶縁膜を作製するとともに, リソグラフィ技術の開発を進めた。
- プラズマダメージを軽減するため, 高周波リモートプラズマを用い, 低温下においてジシランガスを分解して, 高品質シリコン薄膜を作製することが可能となった。また, 水素プラズマによるシリコン表面のエッチング条件を調べた。
- 分子軌道法を用いて, 水素-シリコン結合状態の変化によるギャップ中の欠陥準位を求め, アモルファスシリコンの光誘起劣化機構の解明を行った。また, ドーピングや成長機構の検討も行った。

II-1) 学術論文

T. YAMAGUCHI, J. MATSUFUSA, and A. YOSHIDA, “Optical transitions in RF sputtered $CuIn_xGa_{1-x}Se_2$ thin films”, *Jpn. J. Appl. Phys.* **31**, L703 (1992)

T. YAMAGUCHI, J. MATSUFUSA, and A. YOSHIDA, “Thin films of $CuInSe_2$ prepared by RF sputtering from various compositional powder targets”, *Solar Energy Mat. and Sol. Cells* **27**, 25 (1992)

Y. SAITO, M. HIRABARU, and A. YOSHIDA, "Plasmaless dry etching of silicon nitride films with chlorine trifluoride Gas", IEICE Trans. Electron. E75-C, 834 (1992)

Y. SAITO and A. YOSHIDA, "Vacuum-ultraviolet-light-induced defects in hydrogenated amorphous silicon films", *Philos. Mag. B* 66, 219 (1992)

Q. X. Guo, O. KATO, and A. YOSHIDA, "Chemical etching of indium nitride", *J. Electrochem. Soc.* 139, 2008 (1992)

Q. X. Guo, O. KATO, M. FUJISAWA, and A. YOSHIDA, "Optical constants of indium nitride", *Solid State Commun.* 83, 721 (1992)

T. YAMAGUCHI, J. MATSUFUSA, and A. YOSHIDA, "Thermal crystallization of Copper Indium Diselenide film with oxygen-doped layer", *Jpn. J. Appl. Phys.* 31, 2877 (1992)

T. YAMAGUCHI, J. MATSUFUSA, and A. YOSHIDA, "Structural properties of $\text{CuIn}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Se}_2$ thin films prepared by rf sputtering", *J. Appl. Phys.* 72, 5657 (1992)

Y. SAITO and A. YOSHIDA, "A simple process for removing residual fluorine and chlorine on silicon surface by low temperature annealing in hydrogen ambient", *J. Electrochem. Soc.* 139, L115 (1992)

II-2) 国際会議のプロシーディング

A. YOSHIDA, Q. X. Guo, O. KATO, and N. ITOH, "Improved crystalline quality of InN by thermal annealing," 12th Int'l Vac. Conf. Sol. Surf., The Netherland, (1992, Oct.) p. 378.

T. YAMAGUCHI, J. MATSUFUSA, and A. YOSHIDA, "Optical properties in rf sputtered $\text{CuIn}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Se}_2$ thin films", 12th Int'l Vac. Cong. and 8th Int'l Conf. Sol. Surf., The Netherlands, (1992, Oct.) p. 307.

II-3) 総説, 著書

吉田 明「シンクロトン放射光励起CVDによる薄膜形成」, 光・薄膜技術マニュアル (増補改訂版) 第5部第6章, P. 495 (1992)

II-4) 招待講演

A. YOSHIDA, "InN crystalline thin films by microwave-excited metalorganic vapor phase epitaxy", 2nd Int'l. Conf. and Intensive Tutorial Course on Semicon.Mat., New Delhi (India), 1992, Dec.

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員

電子通信学会東海支部庶務幹事 (1973-1974)

応用物理学会東海支部幹事 (1989~)

電子情報通信学会シリコン材料・デバイス研究会委員 (1980~)

文部省・学振等の委員会委員

日本学術振興会154委員会委員 (1989~)

II-7) 他大学での講義

山梨大学工学部, 特別講義, 平成4年12月

豊橋技術科学大学, 半導体工学II, 平成4年9-11月

豊橋技術科学大学, 電磁気学III, 平成4年9-11月

III 研究活動の課題と展望

次世代半導体エレクトロニクスにおいては, 新しい高性能材料および低温における新しいプロセス技術の開発が不可欠となる。我々は, 前者としてInN, InAlN 混晶半導体単結晶薄膜やカルコパイライト混晶薄膜を作製したが, 今後ドーピングや結晶性向上が実現されれば, 新しいオプトエレクトロニクス材料となる。後者としては, プラズマおよび真空紫外光励起による成膜, エッチング, ドーピング, リソグラフィ技術の開発を進めており, 低温化, 高性能化が可能となった。今後, 理論的検討や超微細加工の可能性を追及し, 将来の新しいプロセス技術の基礎を提供することを目指している。

佐藤 真理 (助教授)

I-1) 専門領域: 表面光化学, 触媒化学

I-2) 研究課題

- 固体表面に吸着した有機金属錯体の光分解とそのメカニズムの研究
- ディーゼル排ガス窒素酸化物の触媒による除去とそのメカニズムの研究
- 酸化チタン薄膜の光触媒作用の研究

I-3) 研究活動の概略と主な成果

- 固体表面に吸着した有機金属錯体の光分解とそのメカニズムの研究

光CVDによる半導体及び金属薄膜作成のメカニズムを高感度反射赤外分光, X線光電子分光, 昇温脱離種質量分析などによって研究している。100K以下に冷却した基板に吸着した有機金属錯体をSOR光によって照射して光化学初期過程で生成する中間体を作り出し, 二次過程(熱反応過程)における中間体の挙動を観測する手法により, 全反応のメカニズムを明らかにする。これまでに吸着鉄カルボニルの光化学反応の中間体を決定し, その立体構造に関する知見を得た。

- ディーゼル排ガス窒素酸化物の触媒による除去とそのメカニズムの研究

ディーゼル排ガスのような酸素過剰な条件下で, 窒素酸化物を炭化水素などを還元剤とする触媒反応で除去できることが, 最近, 見出された。この反応における反応中間体がイソシアネート(-NCO)であることを赤外分光によって決定した。中間体の振舞いと触媒特性の関係を研究することにより触媒設計の指針が得られた。

c) 酸化チタン薄膜の光触媒作用の研究

ゾル・ゲル方で作成した酸化チタン薄膜は微粒子から構成されており、その光触媒特性に量子サイズ効果があらわれていることを見出した。また、この薄膜を用いて光化学ダイオードを作成し、その特性を検討した結果、光触媒の新しい作成法に関する知見が得られた。

II-1) 学術論文

Y. UKISU, S. SATO, G. MURAMATSU, and K. YOSHIDA, "Activity enhancement of copper-containing oxide catalysts by addition of cesium in the reduction of nitric oxide." *Cat. Lett.* 16, 11 (1992).

Y. UKISU, S. SATO, and T. OHMORI, "Spectroscopic studies on adsorption states of iron pentacarbonyl adsorbed on titanium dioxide," *J. Mol. Catal.*, 78, 287-294 (1993)

S. SATO and Y. UKISU, "Mechanism of the photolysis of iron pentacarbonyl adsorbed on a Pt surface." *Surf. Sci.* 283, 137-142 (1993).

Y. UKISU, S. SATO, A. ABE, and K. YOSHIDA, "Possible role of isocyanate species in NO_x reduction by hydrocarbons over copper-containing catalysts." *Appl. Catal. B:Env.* 2, 147-152 (1993).

II-3) 総説, 著書

佐藤 真理, 角田範義「二酸化チタン膜の調製と光触媒作用」, 金属アルコキシドを用いる触媒調製 アイピーシー出版, P. 435, 1993.

S. SATO, "Study on VUV photochemical reactions over solid surfaces", in "New Functionality Materials", Vol. C "Synthetic process and Control of Functionality Materials", Ed. T. Tsuruta, M. Doyama and M. Seno, p. 201, Elsevier, 1993.

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

日本化学会: 幹事 (1987)

触媒学会: 幹事 (1988)

学会誌編集委員

「触媒」誌編集委員 (1983-1986)

III 研究活動の課題と展望

固体表面を反応場とする化学反応は気相, 液相とは異なる化学となる。吸着鉄カルボニルの光化学反応を表面化学的手法によって研究し, 反応中間体の立体構造を検討しているが, 種々の表面分光法の組み合わせによる, より精度の高いデータが求められている。しかしながら, 大学の研究費では一部の機器さえも購うことは困難であり, また共同利用の機器も実質的利用価値が薄く, いかにして経費のかからない固体表面の分子科学研究を行うかを模索している。

川 副 博 司 (教授)

I-1) 専門領域: 無機材料化学

I-2) 研究課題

- a) n型伝導性無機ワイドギャップ結晶の電子構造, 結晶構造設計とその合成, 評価
- b) p型伝導性無機ワイドギャップ結晶の電子構造, 結晶構造設計とその合成, 評価
- c) 鉄系複酸化物の電子構造と電気磁気的性質
- d) 合成シリカガラス中の欠陥とその応用に関する研究

I-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 可視光線を透過し (バンドギャップが3.1eV以上), 且つ金属的なn型伝導性を示し得る物質に適した電子構造とそれを実現し得る結晶構造とを提案し, スピネル構造酸化物, トリルチル構造酸化物, パイロクロア構造酸化物などについて約10種の新透明n型伝導性物質を発見した。またこれらの電子構造をSR-UPS, TB および APW バンド計算により評価した。
- b) 可視光線を透過し, 且つp型伝導に適した電子構造とそれを実現し得る結晶構造とを提案した。AgSbO₃についてp型伝導性を確認した。これは, ワイドギャップp型伝導無機物質の初めての発見である。
- c) SrLaFeO_{4+x}となる酸素過剰型を含む結晶を酸素分圧をかえて合成し, Feの原子価状態の変化と物性との関係を検討した。高酸素分圧下では, 抵抗率ρ及び反強磁性ネール点が減少することを見出した。この時Feは, 高スピンのFe³⁺状態にとどまっていることを明らかにした。
- d) 合成シリカガラス中の酸素欠損 Si-Si の生成原因についてVUV吸収を用いて検討した。≡Si-Clからの脱塩素, および≡Si-O-Si≡結合の高温での解裂の結果, 酸素欠損が生じることを初めて明らかにした。この結果は, 高機能光ファイバー及びUV領域の光学素子の作製に応用されはじめています。

本研究室は無機光・電子機能材料を電子構造及び結晶構造設計から新たに発見し, 発見された物質を題材として定量科学を確立し, 正統的材料設計手法の確立を意図しているところに特徴があり, 現教官のうち1名が日本セラミック協会学術賞を受けている。

II-1) 学術論文

N. UEDA, T. OMATA, N. HIKUMA, K. UEDA, H. MIZOGUCHI, T. HASHIMOTO, and H. KAWAZOE, "New Oxide Phase with Wide Band Gap and High Electroconductivity, MgIn₂O₄," *Appl. Phys. Lett.* 61, 1954 (1992)

K. AWAZU, K. HARADA, H. KAWAZOE, and K. MUTA, "Structural Imperfections in Silica Glasses with an Optical Absorption Peak at 3.8 eV" *J. Appl. Phys.* 72, 4696 (1992)

H. HOSONO, Y. ABE, D. L. KINSER, R. A. WEEKS, K. MUTA, and H. KAWAZOE, "Nature and Origin of the 5-eV Band in SiO₂:GeO₂ Glasses" *Phys. Rev. B* 46, 11445

(1992)

Y. WATANABE, M. SAKAI, M. TAKATA, N. UEDA, and H. KAWAZOE, "Third Order Nonlinear Optical Susceptibility for Transparent Tin Oxide Thin Films" *Ferroelectrics* 131, 111 (1992)

K. AWAZU, H. KAWAZOE, and K. SEKI, "Growth Mechanism of Silica Glasses Using the Liquid Phase Deposition (LPD)." *J. Non-Cryst. Solids* 151, 102 (1992)

II-2) 国際会議プロシーディングス

H. KAWAZOE and K. AWAZU, "Nonstoichiometry and Defects in Bulk α -SiO₂", Proc. 2nd. Symp. Phys. Chem. of SiO₂ and Si/SiO₂ Interface, American Electrochemical Soc., 1992

K. AWAZU, H. KAWAZOE and K. MUTA, "Optical Properties of Silica Glasses Having O₂ and Cl₂ Molecules" *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 244 21 (1992)

II-3) 総説, 著書

川副 博司「新透明導電膜材料の探索」, ニューセラミックス 1992, 63

II-4) 招待講演

H. KAWAZOE and K. AWAZU, "Nonstoichiometry and Defects in Bulk α -SiO₂", The 2nd. Symp. on the Phys. and Chem. of SiO₂ and the Si/SiO₂ Interface (American Electrochemical Soc.), St. Louis (U.S.A.), June, 1992

H. KAWAZOE, "Electronic Structure and Third-Order Nonlinear Susceptibility of Rutile Type Oxides", International Conference on Computer Applications to Materials and Molecular Science and Engineering-CAMSE '92 Yokohama Japan, September, 1992

II-5) 受賞, 表彰

窯業協会(現日本セラミックス協会)学術賞, 昭和57年

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

日本セラミックス協会理事, 1992 - 1993

“ 教育委員長, 1993

“ 企画委員会委員, 1985 - 1990

学会の組織委員

The First International Symposium on Effects of Modes of Formation on the Structure of Glass, 1984, Advisory and Program Committee.

The Second International Symposium on Effects of Modes of Formation on the Structure of Glass, 1987, International Advisory Committee.

6th International Conference on Physics of Non-Crystalline Solids, 1987, Organizing Committee

5th International Symposium on Halide Glasses, 1988, Program Committee
International Symposium on Structural Imperfections in SiO₂-Based Amorphous Materials (MRS-Japan), 1990, Organizer

Materials Research Society Symposium on Optical Waveguide Materials (Symposium J), 1991, Organizer

Annual Meeting of the American Ceramic Society, 1991-1995, Program Committee.

International Conference on Computer Applications to Materials and Molecular Science and Engineering-CAMSE '92, 1992, Organizing Committee

7th International Conference on Radiation Effects in Insulators, 1993, Program Committee

学会誌編集委員

日本化学会誌編集委員, 1987 - 1988

日本セラミックス協会誌編集委員, 1985 - 1988

ニューガラスフォーラム機関誌編集委員長, 1990 - 1992

Journal of Non-Crystalline Solids, Regional Editor, 1992~

II-7) 他大学での講義

川副 博司, 横浜市立大学文理学部, 物性論II, (平成4年度後期)

III 研究活動の課題と展望

本研究の課題のひとつは、電子構造と光学的及び電気的性質との間の定量的相関の解明である。そのためには、電子構造の定量的評価が前提となる。理論的評価は、エネルギーバンド構造の粗い把握には有用であるが、欠陥や界面あるいは長周期変調構造を含む結晶には役立たない。むしろ多種の分光学的評価を併用し、実験的に把握することが重要と考える。そこで本研究室では、特に伝導帯の状態密度を評価するために、逆光電子分光装置の作製を計画している。これを加えることにより、占有バンド及び非占有バンドの全体的把握が可能になる。

西 尾 光 弘 (助教授)

I-1) 専門領域: 電子材料

I-2) 研究課題

a) シンクロトロン放射光を光源とした有機金属化学気相成長

b) 有機金属化学気相成長法によるテルル化亜鉛の不純物ドーピング

c) 有機金属化学気相成長への可視光照射効果

I-3) 研究活動の概略と成果

a) シンクロトン放射光を光源とした有機金属化学気相成長

有機金属を原料としたII-VI族化合物半導体薄膜の形成に初めてシンクロトン放射光を利用した。従来法よりも格段と低い温度でエピタキシャル成長でき、成長膜には炭素、酸素の取り込みが認められないことを明らかにした。本法がII-VI族化合物半導体薄膜の新しい低温成長技術となり得ることを示した。

b) 有機金属化学気相成長法によるテルル化亜鉛の不純物ドーピング

本法によりテルル化亜鉛のA1ドーピングを試み、エピタキシャル層について電気的性質、フォトルミネッセンス特性のTEA1供給量依存性を明らかにした。この結果、TEA1を用いると低抵抗率のn形テルル化亜鉛結晶が実現できることを初めて示した。

c) 有機金属化学気相成長への可視光照射効果

テルル化亜鉛の有機金属化学気相成長において、結晶品質の改善、成長速度の促進に可視光照射が効果的であることを既に示したが、成長機構に関する知見を得るため、成長速度の波長依存性、キャリアガスや原料の種類の違いによる可視光照射効果を明らかにした。テルル化亜鉛のバンドギャップより高いエネルギーをもつ光子が成長速度の促進に密接に関係し、光触媒効果が重要であることが分かった。

II-1) 学術論文

M. IKEJIRI, H. NAKAYAMA, M. NISHIO, H. OGAWA, and A. YOSHIDA, "ZnTe Growth by Photo-Assisted Metal-organic Vapor Phase Epitaxy." *Applied Surface Science* 70/71, 755 (1993).

II-7) 他大学での講義

佐賀大学・理工学部, 電子物性論II 平成5年, 7月

III 研究活動の課題と展望

有機金属を原料としたII-VI族化合物半導体の結晶成長に関する課題a), b), c)を更に進める。

a) 原料の供給方法, 基板温度等の条件を変えて成長特性, 膜質を系統的に調べると共に, 原子層成長の可能性を追及し, 本法の特徴を見い出したい。

b) ドーピングメカニズムの解明, 特性制御, 発光素子の試作を目指したい。

c) フォトルミネッセンスの成長条件依存性を詳細に調べ, 不純物, 固有欠陥と光照射との関係を見いだしたい。

錯体化学実験施設

現状と将来

錯体化学実験施設は1984年に専任教授と流動部門(錯体合成)より始まり, 次第に拡充してきた。現在の研究活動としては, 専任部門として, 錯体触媒部門では, 主として有機金属錯体触媒の基礎化学を, 電子状態や、反応性の面から研究している。錯体物性部門では、Ru, Moの錯体による炭酸ガスの反応を調べているほか, Zrの有機金属錯体を用いた合成反応を研究している。流動部門では、主にクロモトロピズムに注目した錯体の合成と性質, および非水溶媒を含む溶液内錯形成反応を研究している。客員部門として錯体配位結合部門がありPt, Ru, Nb, Vの錯体を研究している。

これらの現在の研究体制に将来新たに専任部門などを加えて, さらに完成した錯体化学研究の世界的拠点の一つとなるべく計画している。

錯体合成研究部門(流動部門)

福田 豊(教授)

I-1) 専門領域: 無機合成化学, 錯体化学

I-2) 研究課題

- a) 金属錯体のサーモクロミズム
- b) 金属錯体のクロモトロピズム
- c) 光応答性錯体の合成と立体構造制御
- d) 金属錯体結晶相のガラス転移

I-3) 研究活動の概略と成果

a) 金属錯体のサーモクロミズム

熱による金属錯体の色変化をプローブとして, 種々の新しい錯体の合成を検討しているが, H4年度には「スピントロニクス錯体」を新しく合成し, その反応機構を明らかにした。クロソオーバ現象に重要な役割を果たしているのは, 幾何異性体の構造である事が明らかとなった。

b) 金属錯体のクロモトロピズム

上記のスピントロニクス錯体の他に, テトラケトンを含む複核金属配位子錯体の合成をおこなった。サーモクロミズム(熱), ソルバトロピズム(溶媒)が観測され, 複核錯体内での金属間相互作用(反強磁性)についても検討した。

c) 光応答性錯体の合成と立体構造制御

光官能基であるスチルベン系を含む架橋型配位子を合成し, その複核錯体の合成を試みた。現在, 得られているものは, スチルベントランス体で銅(II)複核錯体が得られたところである。今後, シス錯体の単離と光反応性について検討する。

d) 金属錯体結晶相のガラス転移

金属錯体単結晶相でも、ガラス転移が見出されたこと、さらに分子性錯体において、新しくプラスチック性のある事もわかり、これらの問題について現在、熱測定、構造解析を進めている。

II-1) 学術論文

N. SHINTANI, J. KOTAKI, K. SONE, and Y. FUKUDA, "Studies on Mixed Chelates. XX. Mono- and Binuclear Nickel(II) and Copper(II) Complexes with N, N, N', N'', N''', N'''- Hexamethyltriethylenetetramine and β -Diketonates", *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 66, 784 (1993).

Y. YAMADA, K. HORI, and Y. FUKUDA, "Structure of μ -(Carbonato) bis [(acetylacetonato) (N, N, N', N'-tetramethylethylenediamine) nickel (II)] [(Acetylacetonato) aqua (methanol) (N, N, N', N'-tetramethylethylenediamine) nickel(II)] Tetraphenylborate", *Acta Cryst.* C49, 445 (1993).

N. SATO and Y. FUKUDA, "Anion-sensing electrodes based on nickel(II) and copper(II) mixed ligand complexes", *Sensors & Actuators* B13-14, 743 (1993).

K. YAMADA, Y. FUKUDA, T. KAWAMOTO, Y. KUSHI, W. MORI, and K. UNOURA, "Studies on Mixed Chelates. XXI. Synthesis and Crystal Structure of the Binuclear Nickel(II) Complex, μ -(Oxalato) bis [(acetylacetonato) (N,N,N',N'-tetramethylethylenediamine) - nickel (II)]", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 66, 2758 (1993).

II-2) 国際会議のプロシーディングス

K. YAMADA, and Y. FUKUDA, "Dinuclear Complexes Composed by Mono-nuclear Mixed Ligand Nickel(II) Complexes", 29th ICCC (International Conference on Coordination Chemistry) Abstract P540, Lausanne (Switzerland, July, 1992).

Y. MORI, H. HOSOI, and Y. FUKUDA, "Synthesis and Characterization of Photosensible Dinuclear Complexes", 10th ISPPCC (International Symposium on the Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds) Abstract P20, Sendai (Japan, July, 1993)

II-3) 総説, 著書

福田 豊「金属錯体のサーモクロミズム」, *Petrotech* (石油学会誌), 16, 786 (1993).

II-4) 招待講演

福田 豊, 「金属錯体の配位不飽和性に基づく反応と機能」, 日本化学会第66秋季年会, 西宮 (Sept., 1993).

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

日本化学会関東支部幹事, 常任幹事, 化学教育委員長 (1992, 10-現在にいたる)

日本化学会学会賞等選考委員 (1989 - 90)

学会の組織委員

第40回配位化学国際会議組織委員 (1993 - 94)

学会誌編集委員

化学と教育編集委員 (1990 - 91)

日本化学会誌編集委員 (1992 - 93)

II-7) 他大学での講義

お茶の水女子大学理学部, 無機化学 I 4 単位, 1992 (併任) -93 (非常勤)

千葉大学教育学部 (大学院), 無機化学特論 2 単位, 集中講義 (1992, July) (非常勤)

高知大学理学部, 錯体化学 2 単位, 集中講義 (1993, July) (非常勤)

III 研究活動の課題と展望

金属錯体のクロモトロピズムについての研究は、おおむね順調に推移しているところである。中でも、この1-2年は光応答性錯体の合成に注目しているところで、trans-cis 光変換とシス固定化反応を新しく開発する事を目指している。今後の研究としては、固体錯体の熱物性、さらにもう一つの柱として、今までの研究にも含まれていたが、多核錯体の構造制御と機能について、検討して行く予定である。

澤 田 清 (助教授)

I-1) 専門領域: 溶液錯体化学

I-2) 研究課題

- a) アミノポリホスホン酸の錯形成
- b) 非配位性溶液中の錯形成反応
- c) ポリエーテル錯体の溶液内平衡
- d) 炭酸塩の結晶成長と阻害機構

I-3) 研究活動の概略と成果

- a) アミノポリホスホン酸の錯形成

キレート試薬として最もよく用いられ、かつ情報量の多いアミノポリカルボン酸の類縁化合物であるアミノポリホスホン酸の錯形成反応の熱力学、錯体の溶液内構造について調べた。これらの錯体が溶液中で8員環という特殊な構造を持つことを明らかにした。置換不活性な錯体を合成、単離しそれぞれの構造を明らかにし、錯形成の反応機構を明らかにした。

- b) 非配位性溶媒中の錯形成反応

非配位性溶媒中の反応は、溶液内反応と気相反応の橋渡しとなる系として重要な研究分野で

ある。最も単純な錯形成反応の系と考えられる金属ハロゲン化物のピリジン誘導体錯体の生成平衡を分光法、熱測定、2相間分配等で調べた。錯形成の熱力学的データより、配位原子上の電子密度、立体的構造の影響についての最も基礎的な知見をえた。これらの結果を固体の錯体の構造、熱力安定性とも比較検討した。

c) ポリエーテル錯体の溶液内構造

環状ポリエーテル及び非イオン性界面活性材として用いられている直鎖状ポリエーテルの、主にアルカリおよびアルカリ土類金属錯体の非水溶媒中の錯形成反応を調べた。また、2相間分配、電位差測定、電導度測定、浸透圧測定、NMR等により溶液内構造を明らかにした。

d) 炭酸塩の結晶成長と阻害機構

炭酸カルシウムの生成機構を明らかにした。イオンの吸着平衡を定量的に調べ、阻害機構を明らかにした。

II-1) 学術論文

Y. KIKUCHI, N. TAKAHASHI, T. SUZUKI and K. SAWADA, "Liquid-liquid extraction of alkali metal ions with non-ionic surfactant having poly (oxyethylene) chain," *Anal. Chem. Acta* 256, 311 (1992).

Y. KIKUCHI, Y. NOJIMA, H. KITA, T. SUZUKI, and K. SAWADA, "The solvent extraction and dissociation of alkali metal complexes of monodisperse poly(oxyethylene) derivatives with picrate ion," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 65, 1506 (1992).

Y. KIKUCHI, T. SUZUKI, and K. SAWADA, "Liquid-liquid extraction of alkaline earth metal ions with nonionic surfactant having poly(oxyethylene) chain," *Anal. Chim. Acta*, 264, 65 (1992).

K. SAWADA, S. YOSHIDA, T. SUZUKI, "Adsorption of phosphate on vaterite," *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* 88, 2227 (1992).

M. HANDA, H. MIYAMOTO, T. SUZUKI, K. SAWADA and Y. YUKAWA, "Formation of acetylacetonato iron complexes in acetonitril and their resonance Raman spectra," *Irorg. Chim. Acta* 203, 61 (1992).

K. SAWADA, K. SATOH, C. HONDA, T. ISHIYAMA, and T. SUZUKI, "Thermodynamic study of steric effect on the formation of tetrahedral pyridine base complexes of cadmium halides," *J. Chem. Soc. Dalton Trans.*, 377 (1993).

A. MINAGAWA, K. SAWADA and T. SUZUKI, "Determination of bismuth(III) by graphite furnace atomic absorption spectroscopy combined with liquid-liquid extraction with trioctylmethylammonium nitrate," *Anal. Chim. Acta* 278, 287 (1993).

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

日本化学会 : 常議員 (1989,1990), 関東支部幹事 (1987, 1988)

日本分析化学会 : 常議員 (1991, 1992), 関東支部常任幹事 (1990,1991)

関東支部新潟地区部会幹事 (1985-1991), 同部会長 (1991)

日本地球化学会 : 1990年度年会 事務局長 (1990)

溶液化学研究会 : 運営委員 (1986-), 第13回シンポジウム事務局長 (1990)

学会の組織委員

IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) National Representative (V8) (1990-)

ITAS (International Trace Analysys Symposium) Organizing Committee (1990)

ISSP (International Symposium on Solubility Phenomina) Organizing Committee (1992)

学会誌編集委員

日本化学会欧文誌編集委員 (1987, 1988)

II-7) 他大学での講義

新潟大学理学部, 「溶液化学」, 1992年7月および1993年2月。

III 研究活動の課題と展望

非配位性溶媒中の錯形成反応は溶液化学と気相反応との橋渡しとなる重要な研究分野である。したがって、溶媒の関与がほとんどない系において錯形成の本質を調べることができ、分子間の非常に弱い相互作用も明らかにしてきた。しかし、溶質と溶媒の相互作用が非常に弱い場合、溶質の溶解度が低い場合が多く、高感度、高精度の測定が要求される。したがって、基礎的データの蓄積も十分でない。これらの全体的な知見を得ることにより、新しい反応系の構築が可能と考えられる。

錯体触媒研究部門

大 瀧 仁 志 (教授)

I-1) 専門領域 : 錯体化学, 溶液化学

I-2) 研究課題

- 液体のX線構造解析
- 水和イオンならびに各種溶媒中での溶媒和イオンの構造解析
- 溶存錯体の反応とX線構造解析
- 結晶生成機構の分子論的解明
- ストップド・フロー・EXAFS法による反応中間体の構造解析
- 超臨界電解質溶液のX線構造解析

I-3) 研究活動の概略と主な成果

- 液体のX線構造解析

水並びに各種液体の構造を決定し、液体中の分子配列、溶媒和イオンの構造を決定した。この結果、従来熱力学に考察されていた液体物性を構造論的立場から解明することができた。

b) 水和イオンならびに各種溶媒中での溶媒和イオンの構造解析

溶媒和イオン, 特に水和イオンの構造について溶液X線回析法を用いて研究し, 多くの新しい知見を得た。この研究は電解質溶液の化学の進歩に大きく貢献した。

c) 溶存錯体の反応とX線構造解析

ポテンショメトリー, カロリメトリーなどを用いて溶液中の錯形成反応について研究し, また反応に関与する錯体の構造を溶液X線回析により決定し, 溶液中の錯形成反応を熱力学と構造化学の両面から解明した。

d) 結晶生成機構の分子論的解明

結晶の溶解と結晶核生成の機構について分子動力学シミュレーションを用いて解析し, 且つ, 飽和溶液あるいは過飽和溶液中に存在する会合体について溶液X線回析法を用いてその存在を実証した。さらに結晶の溶解, 結晶核生成の反応機構をビデオにより視覚化することに成功した。製作されたビデオはわが国の各大学, 放送大学, NHKなどのほか, アメリカ, カナダ, ハンガリー, 南アフリカ, チェコなど世界数ヶ国において研究・教育の資料として利用されている。

e) ストップド・フロー・EXAFS法による反応中間体の構造解析

ストップド・フロー法とEXAFS法とを組み合わせ, 短寿命の反応中間体の構造を決定できる迅速EXAFS測定装置を開発し, はじめて水銀(II)ポルフィリン錯体が銅(II)イオンと反応する際に生ずる水銀(II)-銅(II)ヘテロ二核反応中間体の構造を決定することに成功した。

f) 超臨界電解質溶液のX線構造解析

400°C, 8000気圧まで使用可能な溶液X線回析装置を完成し, 水並びに塩化ナトリウム水溶液の構造について, 22-200°C, 1-2000気圧の領域で測定を行い, 水の構造並びにイオンの水和構造に対する温度, 圧力の影響について検討した。

発表論文, 研究活動について

II-1) 学術論文

K. WAIZUMI, H. MASUDA, H. OHTAKI, K. A. Burkov, and L. Chernykh: Structure of $2\text{RbCl} \cdot \text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, Acta Crystallogr. C48 1374 (1992)

K. WAIZUMI, H. MASUDA, and H. OHTAKI: X-Ray Structural Studies of $\text{FeBr}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, $\text{CoBr}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, $\text{NiCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, and $\text{CuBr}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$. Cis/trans Selectivity in Transition Metal(II) Dihalide Tetrahydrate, Inorg. Chim. Acta 192 173 (1992)

T. RADNAI, S. ISHIGURO, and H. OHTAKI: X-Ray Diffraction Studies on the Structure of the Tri- and Tetrathiocyanatomanganate(II) Complexes and Solvated Lithium Ion in *N, N*-Dimethylformamide, Bull. Chem. Soc. Jpn. 65, 1445 (1992)

K. OZUTSUMI, T. TAKAMUKU, S. ISHIGURO, and H. OHTAKI: EXAFS and X-Ray Diffraction Studies on the Structure of the Tetrathiocyanatocadmte(II) Complex in Dimethyl Sulfoxide, Bull. Chem. Soc. Jpn. 65 2104 (1992)

K. WAIZUMI, H. OHTAKI, H. MASUDA, N. FUKUSHIMA, and Y. WATANABE: Density Function Calculations on the Geometries and Dissociation Energies of $[\text{M}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ Ions. $\text{M}^{2+} = \text{Cr}^{2+}, \text{Mn}^{2+}, \text{Fe}^{2+}, \text{Co}^{2+}, \text{Ni}^{2+}, \text{Cu}^{2+}$, and Zn^{2+} , Chem. Lett. 1489 (1992)

T. RADNAI and H. OHTAKI: Intramolecular and Liquid Structures of Tetramethylurea Studied by Means of X-Ray Diffraction, Z. Naturforsch. 47a 1003 (1992)

H. OHTAKI: Molecular Aspects on the Dissolution and Nucleation of Ionic Crystals in Water, Adv. Inorg. Chem. 39 401 (1992)

H. OHTAKI: Structure of Divalent Metal Complexes with Halide and Thiocyanate Ions in Solution, J. Indian Chem. Soc. 69 442 (1992)

H. OHTAKI: Dissolution and Nucleation Phenomena of Salts in Water. Molecular Dynamic Approaches and Supporting Solution X-Ray Diffraction Measurements, Pure & Appl. Chem. 65 203 (1993)

S. PATNAIK, M. SESHASAYEE, T. YAMAGUCHI, M. NOMURA, and H. OHTAKI: A Structural Study on $\text{AgI-Ag}_2\text{O-CrO}_3$ Glass, J. Phys. Soc. Jpn., 62, 536-543 (1993)

H. OHTAKI and T. RADNAI: Structure and Dynamics of Hydrated Ions, Chem. Rev. 93 1157 (1993)

II-2) 国際会議プロシーディングス

H. OHTAKI, M. MIKAMI, and Y. TAGO, "Molecular Dynamics Simulations for Dissolution and Nucleation Processes of Alkali Halide Crystals in Water" in "Computer Aided Innovation of New Materials II" Eds. M. DOYAMA, J. KIHARA, M. TANAKA, and R. YAMAMOTO (Proceedings of the Second International Conference and Exhibition on Computer Applications to Materials and Molecular Science and Engineering -CAMSE '92, Yokohama, September, 1992), North-Holland, Amsterdam, pp. 265-268 (1993).

K. WAIZUMI, H. OHTAKI, H. MASUDA, N. FUKUSHIMA, and Y. WATANABE, "Density Functional Calculations on the Geometries and Dissociation Energies of $[\text{M}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ and $[\text{MCl}_2(\text{H}_2\text{O})_4]$; $\text{M}^{2+} = \text{Cr}^{2+}, \text{Mn}^{2+}, \text{Fe}^{2+}, \text{Co}^{2+}, \text{Ni}^{2+}, \text{Cu}^{2+}, \text{Zn}^{2+}$ " in "Computer Aided Innovation of New Materials II" Eds. M. DOYAMA, J. KIHARA, M. TANAKA, and R. YAMAMOTO (Proceedings of the Second International Conference and Exhibition on Computer Applications to Materials and Molecular Science and Engineering-CAMSE '92, Yokohama, September, 1992). North-Holland, Amsterdam, pp. 861-864 (1993).

II-3) 総説, 著書

T. RADNAI, T. YAMAGUCHI, and H. OHTAKI: Structures of Liquids and Solutions by X-Ray and Neutron Diffraction, in "Structure and Dynamics of Solutions", Eds. H. OHTAKI and H. YAMATERA, Elsevier (1992) 15-24.

H. OHTAKI, N. FUKUSHIMA, and Y. YAMAGUCHI: Structure of Solvated Ions and Complexes in Solution Studied by the Diffraction Method, in "Structure and Dynamics of Solutions", Eds. H. OHTAKI and H. YAMATERA, Elsevier (1992) 24-39.

H. OHTAKI and K. HEINZINGER : The Structure of Hydrated Ions in Aqueous Solutions as Studied by the Molecular Dynamics Simulations, in "Structure and Dynamics of Solutions", Eds. H. OHTAKI and H. YAMATERA, Elsevier (1992) 105 - 115.

S. ISHIGURO and H. OHTAKI : Thermodynamic Aspects of Complex Formation Reactions in Nonaqueous Solutions, in "Structure and Dynamics of Solutions", Eds. H. OHTAKI and H. YAMATERA.

小堤和彦, 大瀧仁志, 「水の構造」 p.27, 横山晴彦, 大瀧仁志, 「水和現象」, p.47, 山口敏男, 大瀧仁志, 「X線回析法」 p.126, “新しい水の科学と利用技術” (綿抜邦彦, 久保田昌治編) 1992。
「電気化学における電解質溶液化学の役割」電気化学, 61, 6, 1993。

II-4) 招待講演

H. OHTAKI, "Dissolution and Nucleation of Salts in Water. MD Approaches and Some Supports from Solution X-Ray Diffraction Measurements", 5th International Symposium on Solubility Phenomena, Moscow (Russia), July, 1993.

H. OHTAKI, "Numerical Expression of Structure of Solvents - Structuredness Parameter, S_p ." XXIX International Conference on Coordination Chemistry, Lausanne (Switzerland), August, 1993

II-5) 受賞, 表彰

松永賞, 大瀧仁志, 1976年

手嶋記念研究論文賞, 大瀧仁志, 石黒慎一, 1989年

電気化学協会武井賞, 大瀧仁志, 1990年

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

日本化学会 編集委員 (1972~1974), 常議員 (1974~1976, 1979~1981), 理事 (1997~1979), 国際交流専門委員会委員長 (1992~)。

日本分析化学会 関東地区副支部長 (1981~1982)。

電気化学協会 編集委員 (1972~1974, 1976~1977), 編集理事 (1974~1976), 電解質溶液の化学懇談会主査 (1975~1980), 理事 (1977~1981), 溶液化学専門委員会委員長 (1980~1990), 庶務理事 (1981~1983), 評議員 (1983~1985), 編集委員長・理事 (1985~1987), 参与 (1987~1989)。

錯体化学研究会 運営委員 (1982~1959), 運営委員長 (1988~1990), 会長 (1990~)。

溶液化学研究会 代表・事務局長 (1980~1988), 会長 (1993~)。

科研費の班長, 研究代表者等

重点領域研究「溶液の非平衡過程の分子論的アプローチ」代表者 (1990~), (班長: 1990~1993)

学会の組織委員

溶液化学国際会議 運営委員 (1982~)。

錯体化学国際会議 計画委員 (1986~)。

第6回溶質-溶質-溶媒相互作用に関する国際シンポジウム 事務局長 (1982)。

国際シンポジウム「Molecular and Dynamic Approaches to Electrolyte Solutions」組織委員長 (1988)。

日米セミナー「Macromolecule-Metal Complexss」代表者 (1989)。

第40回国際電気科学会 組織委員, 広報委員長 (1989)。

1989 環太平洋国際化学会議 国内組織委員長 (1985~1989)。

1995 環太平洋国際化学会議 組織委員会副委員長 (1990~)。

IUPAC 国際分析化学会議 組織委員 (1991)。

ユーラシア化学会議 国際組織委員 (1988~), 第2回ならびに第4回ユーラシア化学会議 国際組織委員長 (1990, 1994)。

第30回錯体化学国際会議 組織委員長 (1991~1994)。

国際純正・応用化学連合 (IUPAC) 分析化学部会平衡データ委員委員会 (1985~1981), 同副委員長 (1981~1983), 同委員長 (1983~1985), 無機化学部会委員 (1985~1989), 分析化学部会協力委員 (1989~1993)。

アジア化学会連合 日本化学会代表 (1989~1993)。

学会誌, 編集委員

Journal of Solution Chemistry, Editorial Board Member (1985~)。

Journal of Brazilian Chemical Society, Editorial Board Member (1987~)。

文部省・学振等の委員会委員

文部省学術審議会 専門委員 (1983~1985, 1987~1989, 1991~1993)。

文部省大学設置・学校法人審議会 専門委員 (1985~1988, 1993~)。

日本学術会議化学研究連合委員会 委員 (1981~), 同幹事 (1985~1991)。

超純水の利用技術に関する委員会委員 (1984~1988)。

山田科学振興財団審査委員 (1993~)。

小型高輝度放射光 (SR) 利用技術に関する調査委員会委員 (1993~現在)。

東京工業大学教育研究振興事業実施委員会小委員会委員 (1992~現在)。

II-7) 他大学での講義

佐賀大学理工学部, 分析化学特論, 1992年4月~1994年3月。

大瀧仁志, 筑波大学化学系, 分析化学特別講義, 1993年1月~1993年3月。

III 研究活動の課題と展望

1993年3月末日をもって分子科学研究所を定年退官し, 立命館大学理工学部に就職した。今後はこれまでの研究をさらに発展させたい。特に分子科学研究所において緒についた反応中間体の構造解析並びに超臨界電解質溶液の構造解析の展開に努力したい。またこれまでの手法をさらに拡張させ, これまでよりも一層巨大な分子系を用いて結晶の溶解並びに結晶核生成の機構を研究したい。もし, 結晶そのものの形にイオンが配列するところまでシミュレーションを実行することができれば素晴らしい。混合溶液中の選択溶媒和の構造を研究するのも興味があ

る。これからはこれまでにない多くの学生の指導をすることになるが、若い学生との交流は興味あることである。

中 村 晃 (教授)

I-1) 専門領域: 錯体触媒

I-2) 研究課題

- a) 機能性錯体の合成
- b) 有機金属錯体の触媒作用
- c) 金属酸素モデル錯体の合成と触媒作用

I-3) 研究活動の概略と成果

a) 一次元金属クラスター

各種の機能が期待される新しい集積金属錯体を直線3座配位子を用いて系統的に合成し、4核の直線状クラスター、たとえばPt-Mo-Mo-Ptの様な金属-金属結合をもつ錯体を得て電導性を示すことを見出した。

b) 前周期遷移金属錯体の嵩だかいフェノキシ基を持つ4-6族錯体を系統的に合成し、これにアルキル化試剤を加えて触媒活性を発現させ、置換アセチレンの高重合に成功した。これらの触媒作用に関連した新型の有機ニオブ、タンタル錯体などを合成して、さらに重合触媒として検討した。

c) ペプチド金属錯体

金属蛋白質での金属の周りに見い出される不変性のアミノ酸配列は、その化学的機能との関連で重要である。これらの配列を持つオリゴペプチドを系統的に合成し、鉄やモリブデンなどと結合させモデル錯体を合成した。システインをもつペプチドは、電子伝達蛋白質の中心をなしているので特に重要であり、数多くの錯体を合成してきたが、これらのなかでは、ペプチド結合のNH基とシステインチオラト基の硫黄との間にNH...S水素結合が生成し、金属の性質をコントロールしていることがわかった。アミノ酸配列によって蛋白質の機能が制御される機構のひとつとして基礎的に重要な結論が、こうして得られたのである。

II-1) 学術論文

W.-Y. SUN, A. KAJIWARA, N. UHEYAMA, and A. NAKAMURA, An Iron (II) Complex with a Tetradentate Peptide Ligand, cis-1, 2-C₆H₁₀(CO-Cys-Pro-Leu-Cys-OMe)₂-1,2, as a Model of Reduced Rubredoxin, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* 3255 (1992).

N. UHEYAMA, W.-Y. SUN, and A. NAKAMURA, Evidence for Intramolecular NH...S Hydrogen Bonds from ¹H-NMR Spectroscopy of Reduced Rubredoxin Model Fe(II) Complexes with Bidentate Peptide Ligands. *Inorg. Chem.* 31, 4035 (1992),

N. UHEYAMA, H. OKU, and A. NAKAMURA, cis-Dioxobis(benzenedithiolato) tungsten (VI) and the Related Monooxotungsten (V) and - (IV) Complexes. Model of Tungsten

Oxidoreductases. *J. Am. Chem. Soc.* 114, 7310 (1992)

W.-Y. SUN, N. UHEYAMA, and A. NAKAMURA, Spectral and Electrochemical Properties of an Iron(II) Complex of Z-Cys-Ala-Pro-Cys-OMe and New Synthesis of the Corresponding Z-Cys-Ala-Ala-Cys-OMe Analogue. *Inorg. Chim. Acta* 197, 47 (1992)

N. UHEYAMA, H. OKU, and A. NAKAMURA, Two-Electron-Transfer Oxidation by Polymer-supported [Fe₄S₄(SR)₄]²⁻ Complex. *J. Mol. Catal.* 451 (1992).

H. ADACHI, N. UHEYAMA, and A. NAKAMURA, ¹⁹⁹Hg NMR Investigation on the Solution Structure of Hg(II) Complexes of Oligopeptides Containing Cysteine and Histidine Residues. *Inorg. Chim. Acta* 198-200, 805 (1992).

N. UHEYAMA, T. OKAMURA, and A. NAKAMURA, Intramolecular NH...S Hydrogen Bond in o-Acylamino Substituted Benzenethiolate Iron(II) and Cobalt(II) Complexes. *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* 1019 (1992).

N. UHEYAMA, T. OKAMURA, and A. NAKAMURA, Structure and Properties of Molybdenum(IV, V) Arenethiolates with a Neighboring Amide Group. Significant Contribution of NH...S Hydrogen Bond to the Positive Shift of Redox Potential of Mo(V)/Mo(IV). *J. Am. Chem. Soc.* 114, 8129 (1992)

U. UHEYAMA, S. UENO, A. NAKAMURA, K. WADA, H. MATSUBARA, S. KUMAGAI, S. SAKAKIBARA, and T. TSUKIHARA, A Synthetic Analogue for the Active Site of Plant-Type Ferredoxin: Two Different Coordination Isomers by a Four-Cys-Containing [20]-Peptide. *Biopolymers* 32, 1535 (1992).

N. UHEYAMA, H. OKU, W.-Y. SUN, A. NAKAMURA, and K. FUKUYAMA, Nature of Fe-Se Bond in (NR₄)₂ [Fe(SePh)₄]. *Phosphorus, Sulfur, and Silicon* 67, 151 (1992).

W.-Y. SUN, N. UHEYAMA, and A. NAKAMURA, Catalytic Oxidation of Benzoin and p-Substituted Benzhydrol by p-Benzoquinone or Air in the Presence of [Fe^{II}(SPh)₄]²⁻ and [Fe^{II}(SePh)₄]²⁻. *J. Mol. Catal.* 71, 391 (1992).

W.-Y. SUN, N. UHEYAMA, and A. NAKAMURA, An Oxidation of p-Substituted Benzoin to the Corresponding Benzil Catalyzed by Fe(II) - Cysteine Peptide Complexes. *Tetrahedron* 48, 1557 (1992).

K. MASHIMA, Y. YAMANAKA, S. FUJIKAWA, H. YASUDA, and A. NAKAMURA, Convenient Synthesis of Pentamethylcyclopentadienyltantalum - Diene Complexes via the Reaction of Cp*TaCl₄ with Methylated - allyl Anions. *J. Organometal. Chem.* 428, C5 (1992)

K. MASHIMA, A. MIKAMI, and A. NAKAMURA, 16 Electron Half-sandwich Ru(II) - Thiolate Complexes, Ru(SAr)₂ (η⁶-p-cymene) (Ar=2,6-dimethylphenyl; 2,4,6-triisopropylphenyl). *Chem. Lett.* 1473 (1992).

K. MASHIMA, A. MIKAMI, and A. NAKAMURA, Preparation and Crystal Characterization of Cationic Dinuclear Ru(II) - Thiolate Complex, [Ru₂(SPh)₃(η⁶-p-cymene)₂] Y (Y=Cl and PF₆). *Chem. Lett.* 1795 (1992).

Y. NAKAYAMA, K. MASHIMA, and A. NAKAMURA, Bulky Aryloxo Complexes of

Tungsten and Niobium as Precursors for High Polymerization of 1-Alkynes. *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1496 (1992).

N. KITAJIMA, K. FUJISAWA, C. FUJIMOTO, Y. MORO-OKA, S. HASHIMOTO, T. KITAGAWA, K. TORIUMI, K. TATSUMI, and A. NAKAMURA, A New Model for Dioxygen Binding in Hemocyanin. Synthesis, Characterization, and Molecular Structure of the μ - η^2 : η^2 peroxo Dinuclear Copper (II) Complexes, $[\text{Cu}(\text{HB}(3,5\text{-R}_2\text{pz})_3)_2(\text{O}_2)]_2$ (R=i-Pr and Ph). *J. Am. Chem. Soc.* 114 1277 (1992).

H. YASUDA, M. FURO, H. YAMAMOTO, A. NAKAMURA, S. MIYAKE, and N. KIBINO, New Approach to Block Copolymerizations of Ethylene with Alkyl Methacrylates and Lactones by Unique Catalysis with Organolanthanide Complexes. *Macromolecules* 25, 5115 (1992).

N. KANEHISA, Y. KAI, N. KASAI, H. YASUIDA, Y. NAKAYAMA, and A. NAKAMURA, Unique Molecular Structures of Tungsten Phenoxides. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 65, 1197 (1992).

H. YASUIDA, H. YAMAMOTO, K. YOKOTA, S. MIYAKE, and A. NAKAMURA, Synthesis of Monodispersed High Molecular Weight Polymers and Isolation of an Organolanthanide(III) Intermediate Coordinated by a Penultimate Poly(MMA) Unit. *J. Am. Chem. Soc.* 114, 4908 (1992).

K. MASHIMA, and A. NAKAMURA, Agostic Interaction in Early Transition Metal Alkyls and Their Role in Catalytic Activity for Olefin Polymerizations. *J. Organometal. Chem.* 428, 49 (1992).

H. HIRAKAWA, F. KAWAIZUMI, and H. MOMURA "Sedimentation Potential Measurement of Alkali Chloride in Water and Methanol Containing 18-Crown-6." *Denki Kagaku* 61, 936 (1993)

II-3) 総説, 著書

中村 晃「硫黄と架橋した多核錯体の合成と表面化学との関連」表面, 30, 576, 1992

II-4) 招待講演

中村 晃 “前周期遷移金属錯体の触媒作用”, 触媒学会秋期年会, 11月1992年

中村 晃 “前周期金属錯体の構造と反応性” 日本化学会春季年会, 1993年3月

A. NAKAMURA and N. UHEYAMA, "Importance of NH...S Hydrogen Bonding at the Metal-Sulfur Sites of Some Metalloenzymes", Annual Meeting of ACS, San Francisco, U.S.A., April 1992.

A. NAKAMURA, "Synthesis, Characterization, and Reactivity of the Allyl Complexes Containing Cp*Ta Group", 3rd Int. Conf. on Chemistry of Early Transition Metals, University of Sussex, Brighton, U.K. July 1992.

A. NAKAMURA, "Allyl and Diene Complexes of Early Transition Metals", Int. Conf. on Inorganic and Organic Chemistry, 60th Anniversary of the Chinese Chemical

Society, Taipei, Taiwan, Nov. 1992.

A. NAKAMURA, "Metal-Thiolate Complexes as Models of Metalloenzymes", Int. Conf. at Tsinghua University, Hsinchu, Taiwan, Nov. 1992.

II-5) 受賞歴

大阪科学賞(第一回) 中村 晃 1983年

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

日本化学会近畿支部長(1990~92)

日本化学会国際交流専門委員(1992~)

日本化学会命名法委員(1986~1992)

日本化学会化学普及委員(1990~91)

日本化学会編 “第4版実験化学講座” 編集理事(1988~)

近畿化学協会理事(1980~85)

近畿化学協会有機金属部会長(1993~)

日本化学会化学展1977年, そごう百貨店, 実行委員

学会の組織役員

第63回日本化学会春季年会実行委員長

7th Int. Symp. on Homogeneous Catalysis, Chairman, Kobe, Japan (Sept. 1986)

Int. Symp. Homogeneous Catalysis, Organizing Committee (1984~)

Int. Symp. on the Relation between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis, Organizing Committee (1988~) Treasurer, for the 7th Symp. in Tokyo (1992)

Int. Conf. Organometallic Chemistry, Organizing Committee (1993~)

文部省, 学振等の委員会委員

文部省学術審議会専門委員(10回) (1986~1993)

日本学術会議化学研究連絡委員(1988~90)

井上科学振興財団選考委員(1989~)

学会誌編集委員

J. Organomet. Chem., Regional Editor (1990~)

J. Organomet. Chem., Editorial Board (1984~)

Organometallics, Editorial Board (1986-88),

Catalysis Letters, Editorial Board (1990~)

Polymer International, Editorial Board (1992~)

Textbook Series-Inorganic Chemistry, Editorial Board, J.Wiley (1991~)

Book series, "Catalysis by Metal Complexes", Editorial Board,

Kluwer Scientific Press (1990~)

科研費の班長, 研究代表者等

重点研究班長(1990~93)

特定研究班長(1985~1989)

II-7) 他大学での講義

京都大学 理学部, 有機金属化学, 1993年6月

京都大学 工学部 分子工学研究科, 金属酵素化学, 1993年11月

大阪市立大学 工学部 触媒化学 1993年12月

III 研究活動の課題と展望

これまで研究が進んでいなかった, 5族のNb, Ta錯体での基礎研究をさらにを行い, 新しい触媒作用を見出す。特に, モノシクロペンタジェニル錯体を中心に研究する。昨年見出した16電子のルテニウム錯体についても各種の反応を調べる。直線状のクラスターについてさらに金属の種類を拡げてさらに長いものをめざす。Fe, Mo, Wなどのチオラト錯体に関して電子移動などの物性を調べる。特に酸化還元触媒作用を検討する。

錯体物性研究部門

田 中 晃 二 (教授)

I-1) 専門領域: 錯体化学

I-2) 研究課題

1. 金属錯体による二酸化炭素還元反応
2. 銅錯体による亜硝酸イオン還元酸素モデル反応
3. 高電位鉄-イオウたん白モデル化合物の合成

I-3) 研究活動の概略と成果

- 1) ルテニウム金属錯体を触媒として, 二酸化炭素の電気化学的還元反応を行い, 初めて均一系触媒により, 一酸化炭素, ギ酸以外にホルムアルデヒド, メタノールおよびグリオキシル酸, グリコール酸等のC2化合物の生成に成功した。これらの反応ではRu-CO₂, Ru-COOH, Ru-CO, Ru-CHO, Ru-CH₂OH 錯体を經由して二酸化炭素の還元反応が進行することを明らかにし, Ru-CHO錯体を除く他の全ての反応中間体の構造を結晶解析により明らかにした。この成果は二酸化炭素をC1原料としてC2化合物を生成する反応および機構を最初に明らかにした研究である。
- 2) 銅錯体と亜硝酸イオンとの反応で亜硝酸イオンが窒素原子で銅に結合したニトロ体と酸素原子で結合したニトリト体が生成し, 溶液中では両者が共存することを明らかにした。水中, ニトリト体を電気化学的に還元すると, 銅に結合した亜硝酸は銅-酸素結合の解裂により, 遊離NO発生した後, 再び銅に結合して2分子反応によりN₂Oに還元されるのに対して, ニトロ体の亜硝酸は銅-窒素結合は開裂することなく, 遊離のNOを経ずにN₂Oに還元されることを明らかにした。以上の結果は酵素による亜硝酸還元反応でのNO発生を合理的に説明した最初の研究である。

3) [Fe₄S₄]²⁺ 骨格を活性中心とする高電位鉄-イオウたん白は[Fe₄S₄]^{2+/3+}の酸化還元対により, 電子伝達を行っている。化学的に合成された超酸化型の[Fe₄S₄]³⁺ 骨格を有するモデル化合物はいずれも水に極めて不安定であるために, 生体系でも[Fe₄S₄]³⁺ 骨格は完全な疎水空間にあると考えられていたが, 水に不溶性のアダマンタンチオール基を鉄原子に結合させることにより, 初めて水中で安定な[Fe₄S₄]³⁺ 骨格を有する高電位鉄-イオウたん白モデル化合物の生成に成功した。

II-1) 学術論文

H. TANAKA, H. NAGAO, and K. TANAKA, "Evaluation of Acidity of CO₂ in Protic Media. Carboxylation of Reduced Quinone", *Chem. Lett.* 541 (1993).

H. NAGAO, T. MIZUKAWA, and K. TANAKA, "Carbon-Carbon Bond Formation in Multi-electron Reduction of Carbon Dioxide Catalyzed by [Ru(bpy)(trpy)(CO)]²⁺ (bpy = 2,2'-bipyridine; trpy = 2,2':6',2"-terpyridine)", *Chem. Lett.* 955 (1993).

H. TANAKA, B-C. TZENG, H. NAGAO, S-M. PENG, and K. TANAKA, "Comparative Study on Crystal Structure of [Ru(bpy)₂(CO)₂](PF₆)₂, [Ru(bpy)₂(CO)(C(O)O-CH₃)]B(C₆H₅)₄CH₃CN, and [Ru(bpy)₂(CO)(η⁻¹-CO₂)] · 3H₂O (bpy = 2,2'-bipyridine)", *Inorg. Chem.* 32, 1508 (1993).

H. KANBAYASHI, H. NAGAO, K. TANAKA, M. NAKAMOTO, and S-M. PENG. "Stabilization of Superoxidized form of Synthetic Fe₄S₄ Cluster as the First Model of High Potential Iron Sulfur Proteins in Aqueous Media", *Inorg. Chim. Acta.* 209, 143 (1993)

N. KOMEDA, H. NAGAO, G. ADACHI, M. SUZUKI, A. UEHARA, and K. TANAKA, "Molecular Structure of Copper Nitrito Complexes as the Reaction Intermediate of Dissimilatory Reduction of NO₂⁻", *Chem. Lett.* 1521(1993).

II-4) 招待講演

K. TANAKA, "Carbon Dioxide Fixation Catalyzed by Metal Complexes", International Symposium on Inorganic & Organic Chemistry, (Taiwan) Novemver 20-23, 1992.

K. TANAKA, "Electrochemical Activation of CO₂ Catalyzed by Metal Complexes", 183rd Meeting of the Electrochemical Society cosponsored by the Electrochemical Society of Japan", (Honolulu) May 16-21, 1993.

田中晃二「錯体触媒による二酸化炭素還元と固定反応」日本化学会第66秋期年会(西宮市) 9月27-30日, 1993

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

地球環境関連研究動向の調査化学委員会委員(平成2年-5年)

学会の組織委員

第30回錯体化学国際会議事務局長

文部省、学振等の委員会委員

学術審議会専門委員（化学研究費分科会）（平成4年－6年）

科研費の班長、研究代表者等

文部省重点領域研究「生物無機化学」班長（平成4年－6年）

II-7) 他大学での講義

大阪大学基礎工学部 生物無機化学 平成4年6月

岡山理科大学理学部 錯体化学 平成5年11月

III 研究活動の課題と展望

金属錯体上では二酸化炭素と一酸化炭素が溶媒中のプロトン濃度調整のみで平衡系で存在することを利用して、錯体触媒による二酸化炭素還元反応により炭素－炭素結合生成を伴った多電子還元反応が起こることを初めて明らかにした。しかしながら、反応条件としては熱力学的な平衡電位に比べてかなりの過電圧を必要としている。したがって、金属錯体を用いた二酸化炭素の多電子還元では、金属に結合した二酸化炭素および一酸化炭素の電子密度を規定している金属および配位子の調整を行うことにより、熱力学的平衡電位に近いエネルギーで二酸化炭素の多電子還元反応が進行することが期待できる。

高 橋 保（助教授）

I-1) 専門領域：有機金属錯体化学

I-2) 研究課題

- 新しい前周期遷移金属錯体の合成
- 金属錯体上における新しい結合生成反応の開発
- 金属錯体上における選択性発現に関する研究
- 炭素炭素結合活性化と骨格変換反応の開発
- 有機金属錯体を用いた機能性材料の開発

I-3) 研究活動の概略と成果

近年Kaminsky触媒というジルコノセン錯体を用いたアルケン類の重合触媒が1980年に開発され、ジルコノセン錯体上でのアルケンの挙動特にアルケンの結合生成反応における選択性の制御が産業界を中心に注目を浴びていたが、これまでこのジルコノセン錯体にアルケン類が配位した化合物は知られていなかった。このような状況のもとで我々のグループは初めてジルコノセナーアルケン錯体を合成、構造決定したのを出発点として、ジルコノセン錯体上でのアルケン類の反応を詳細に調べ、高選択的な炭素炭素結合生成反応を見だし、さらに触媒反応への展開にも成功するなど以下に述べるような成果をあげた。

- 初めてのジルコノセナーアルケン錯体であるスチルベン錯体の合成と構造の決定。

- ジルコノセナーアルケン錯体を用いた高選択的炭素炭素結合生成反応の開発。
- ジルコノセン錯体を用いた炭素炭素結合活性化による新しい選択的な骨格変換反応の開発。
- 高い選択性を持つ(2)の量論反応を触媒反応へ展開することに成功した。
- ジルコノセン錯体上での高い選択性発現のメカニズムの解明。
- ジルコノセナーアルケン錯体を触媒とするアルケンの高位置選択的ヒドロシリル化反応の開発。

このように2価のジルコノセンを巧みに用いて選択的な炭素炭素結合生成反応を開発するのみならず、炭素炭素結合の活性化による分子骨格の選択的な変換という新しい概念の展開を行うなど活発な研究活動を行っている。平成5年3月に研究成果が評価され有機合成化学協会奨励賞を受賞している。

II-1) 学術論文

T. TAKAHASHI, N. SUZUKI, M. HASEGAWA, Y. NITTO, K. AOYAGI and M. SABURI, "Zirconium Mediated Regioselective Carbon-Carbon Bond Formation Reactions", *Chem. Lett.*, 331(1992).

T. TAKAHASHI, K. AOYAGI, R. HARA, and N. SUZUKI, "Monohalogenation of Zirconacyclopentane Complexes via Alkylalkoxyzirconocene", *Chem. Lett.*, 1693 (1992).

E.-I. NEGISHI, T. NGUYEN, J. P. MAYE, D. CHOUERI, D. R. SWANSON, N. SUZUKI and T. TAKAHASHI, "Factors Affecting the Unusual Reactivity Order in the β -Hydrogen Abstraction of Dialkylzirconocenes", *Chem. Lett.*, 2367 (1992).

N. SUZUKI, Y. MIYAMA, T. TAKAHASHI, H. NOGUCHI, M. SABURI, and Y. UCHIDA, "Polymerization of Epoxides Catalyzed by Early Transition Metal Compounds. Role of the Ligands of Catalysts", *J. Polymer. Sci. Part A: Polym. Chem.*, 30, 2067 (1992).

C. J. ROUSSET, E.-I. NEGISHI, N. SUZUKI and T. TAKAHASHI, "Novel Head-to Tail Alkyl-Alkene Coupling via Zirconium Catalyzed Reactions of Alkylmagnesium Derivatives with Monosubstituted Alkenes", *Tetrahedron Lett.*, 33, 1965 (1992).

II-4) 招待講演

T. TAKAHASHI, D. KONDAKOV, and N. SUZUKI, "Zirconium catalyzed highly selective allylation reactions" National Meeting of American Chemical Society in Denver (U.S.A.) March, 1993.

II-5) 受賞、表彰

有機合成化学協会奨励賞、高橋 保、(1993年3月)

II-6) 学会および社会的活動

学会の組織委員

第30回錯体化学国際会議組織委員 (1992－現在)

研究施設

電子計算機センター

北浦和夫(助教授)

I-1) 専門領域: 計算化学

I-2) 研究課題

- a) 水素結合性液体の構造と熱力学的性質の理論的研究
- b) 神経伝達分子とその類似分子の電子分布の研究

I-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 水素結合性液体の構造と熱力学的性質の理論的研究

分子シミュレーションのための独自分子間ポテンシャルを提案し、これを応用して液体HFのモンテ・カルロシミュレーションを行い、構造と熱力学的性質を研究した。また、いろいろな熱力学量を簡単な分配関数を用いて分析し、それらに対する水素結合の効果を明らかにした。

- b) 神経伝達分子とその類似分子の電子分布の研究

伝達分子であるGABAとその類似分子の電子分布を分子軌道法で計算し、これらについて静電ポテンシャルを比較、解析することにより、GABAの主な活性サイトはアミノ基であること、また、GABAは非常にフレキシブルで容易にコンフォメーション変化できることにより、周知の2つのGABAレセプターと結合できることを明らかにした。

我々のグループは、分子間相互作用の理論的研究と分子シミュレーションのためのポテンシャル関数の研究など凝縮系の構造と性質、さらに凝縮相における化学反応を分子シミュレーションで研究するための汎用な方法を開発している。我々の特徴は、従来の機械的なポテンシャル関数とは異なって、量子論的な効果を考慮している点にある。とくに、凝縮相での化学反応を扱うためには量子論的なポテンシャル関数を開発することが不可欠であり、我々の当面の研究目標もここにあるが、このような研究を行っている研究グループは非常に少数である。

II-1) 学術論文

K. HANDA, K. KITaura, and K. NISHIMOTO, "Theoretical study of structure and thermodynamic properties of liquid hydrogen fluoride", *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 65, 3122 (1992).

M. TSUDA, T. TAKADA, M. MIYAZAKI, Y. UDA, S. KUZUHARA, and K. KITaura, "A study of GABA and its analogues using the molecular orbital method", *J. Mol. Struct. (THECHEM)* 280, 261 (1993).

II-7) 他大学での講義

- 1) Lyon(ESCIL, CNRS)大学(フランス)(1992年7月)
- 2) Darmstadt工科大学(ドイツ)(1992年7月)
- 3) Münster大学(ドイツ)(1992年7月)
- 4) Marburg大学(ドイツ)(1992年7月)
- 5) Marseburg大学(ドイツ)(1992年7月)
- 6) South Carolina大学(アメリカ)(1993年3月)

講演題目

'Selective Reactions of Zirconocene-Alkene Complexes'

III 研究活動の課題と展望

現在我々は前述したように前周期遷移金属錯体を用いて研究を行っており、1つには前周期遷移金属錯体に特徴的な反応を開発することを目的としているが、主たる研究の目的は1つの金属錯体を通して深く化学を理解することにあると考えている。従って、常に新しい概念の創造と反応の設計を行っており、新しい結合の生成や選択性の発現などといった金属錯体上で繰り広げられる重要な問題を、有機化学や無機化学といった従来の分類にとらわれずに、取り扱っている。

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

近畿化学協会 コンピューターケミストリー部会 幹事, 1988～
第3回世界理論有機化学者会議 組織委員, 1992～1993

青 柳 睦 (助教授)

I-1) 専門領域: 理論化学

I-2) 研究課題

- a) 高振動励起状態の理論的研究
- b) 気相素反応機構の理論的研究
- c) 分子軌道並列計算手法の開発研究

I-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 高振動励起状態の理論的研究

分子内振動エネルギー再配分 (IVR) 過程における振動回転結合の役割を理論的に明確化する目的で, 非経験的配置間相互作用計算による精密なポテンシャル関数を用いた振動回転準位の変分計算と計算された準位に対する各種の解析を行った。ホルムアルデヒド分子, CH_2F_2 C_1 分子を具体例として, その高エネルギー領域 (臨界領域) を境に, 振動モード間の結合様式が著しく変化することを見いだした。また臨界領域の配置は分子の全角運動量量子数 J に大きく依存し J が高い場合, 分子回転が IVR に重要な働きをしていることを示した。

b) 気相素反応機構の理論的研究

燃焼中の素反応 $\text{CH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_2 + \text{H}$ について, 大規模な多配置参照配置間相互作用計算を行い, その反応機構, 反応速度の温度依存性を解析した。その結果, 反応 $\text{CH} + \text{H}_2$ は C_2v 経路に高い反応障壁をもつこと, 中間体として高振動励起された CH_3 の IVR 過程が $\text{CH}_2 + \text{H}$ 反応速度に大きく寄与することを示した。

新規冷媒候補化合物の大気中での寿命を推算する目的でフッ素化エーテル類の OH ラジカルとの反応速度定数の計算を行った。

c) 分子軌道並列計算手法の開発研究

非経験的分子軌道計算を並列処理するための手法を開発し, 生体関連分子, 金属クラスター等, 従来の理論では計算が困難な系に並列手法を応用した。例としてネットワークで結合された複数代的高速計算機を用い, レチナール分子, ベリリウムクラスターの構造最適化計算を行った結果, 従来の手法の数十倍の速度で構造, 電子密度などが計算できることを示した。

Science”, *Suuchikaisei* 44, 9 (1992).

J. SUGA, Y. MOCHIZUKI, T. GOTO, H. ITO, M. TAKAHASHI, K. YAMASHITA, M. AOYAGI, S. SEKIYA, S. KONDO, T. HAKUTA, “Estimated Lifetimes of Fluorinated Ethyl Methyl Ethers in Atmosphere”, *Chemistry Express* 8, 205 (1993).

II-3) 総説明, 著書

青柳 睦「高振動励起状態の理論的研究: 分子内エネルギー移動における回転自由度の役割」, 化学技術研究所研究報告, 87, 319 (1992).

II-4) 招待講演

M. AOYAGI, 「Theoretical Study of Highly Excited Vibrational States in H_2CO and CHF_2Cl Molecules」, The Third World Congress of Theoretical Organic Chemists, Toyohashi (Japan), July 18-24, 1993

II-6) 社会的活動

学協会役員, 委員

1992年理論化学シンポジウム組織委員

1993年分子科学若手の会 (夏の学校) 講師

文部省, 学振等の委員会委員

新規冷媒安全評価委員会 委員 (通商産業省, 1992年4月～1993年3月)

III 研究活動の課題と展望

今まで分子の電子状態理論とポテンシャル曲面への応用および分子内ダイナミックスに関わる重要な課題の一つである高振動励起状態の問題を主な研究テーマとしてきた。電子状態理論の分野では今後, 配置間相互作用法等の電子相関を記述する既存理論の検討と並列処理に適した新たな方法論の開発を行って行きたい。これによって化学的に興味のある大規模系への応用が可能となるだけでなく, 反応動力学の基礎となるポテンシャル曲面を精密計算できる範囲が拡張される。また分子内のダイナミックスを理解する上で非常に重要なIVRの諸問題を, これまでと同様に現実的な系の特徴と結びつけて考察してゆくだけでなく, 量子カオス分野で活発に議論されているレベル統計, ユニバーサリティークラス等のより基礎的な概念とも結び付けて発展させたい。

II-1) 学術論文

U. NAGASHIMA, M. AOYAGI, “Workstation and Parallel Computing for Molecular

極低温センター

早坂啓一（技官） 加藤清則（技官）

II-5) 受賞, 表彰

早坂啓一（技官） 永年勤続表彰（東京大学）（昭和56年）
日本化学会化学研究技術有功賞（昭和60年）
低温工学協会功労賞（低温工学協会）（平成3年）
加藤清則（技官） 永年勤続表彰（平成5年）

機器センター

富宅喜代一（助教授）

I-1) 専門領域: 物理化学

I-2) 研究課題

- 溶媒和アルカリ金属原子の電子構造
- 金属イオンの溶媒和ダイナミックス
- 半導体クラスターの光イオン化過程
- 励起金属原子の衝突誘起電子緩和過程と反応ダイナミックス

I-3) 研究活動の概略と成果

- 中性Cs原子を含む種々の溶媒分子クラスターの光イオン化過程を調べることで、溶媒和電子の生成過程に関連したクラスターのイオン対状態の基礎的情報を得た。また、イオン化ポテンシャルのサイズ依存性の測定により、バルクの液体の光電子放出のしきい値を決定した。
- $\text{Mg}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ の光解離過程を調べ、段階的水和に伴う水和殻の幾何構造と Mg^+ イオンの電子構造を明らかにした。また水素原子の脱離を伴った光化学反応を発見し、反応のダイナミックスのクラスターサイズ依存性を検討した。
- ラマンシフト法を用いた高出力の真空紫外レーザーを開発し、シリコンクラスターのイオン化ポテンシャル (IP) の測定に成功した。またIPのサイズ依存性を検討することにより、クラスターの構造転移の存在を実証した。
- 励起亜鉛原子の衝突誘起電子緩和過程を検討し、系間交差過程の速度と機構を明らかにした。またパルスノズルを利用した新しい反応セルを開発し、励起亜鉛原子の反応のダイナミックスを解明した。

II-1) 学術論文

- F. MISAIZU, K. TSUKAMOTO, M. SANEKATA, and K. FUKU, "Photoionization of Clusters of Cs Atoms Solvated with H_2O , NH_3 , CH_3CN ," *Chem. Phys. Lett.* 188, 241 (1992).
- F. MISAIZU, M. SANEKATA, K. TSUKAMOTO, and K. FUKU, "Photodissociation of Size-Selected $\text{Mg}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ Ions for $n=1$ and 2," *J. Phys. Chem.* 96, 8259 (1992).
- K. FUKU, F. MISAIZU, M. SANEKATA, K. TSUKAMOTO, and S. IWATA, "Electronic Structure and Reactivity of $\text{Mg}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ Cluster Ions," *Z. Phys. D* 26, S180 (1993).
- F. MISAIZU, K. TSUKAMOTO, M. SANEKATA, and K. FUKU, "Photoionization and Photodissociation Studies on Aluminum-Water Clusters and their Ions", *Z. Phys. D* 26, S177 (1993).
- K. FUKU, K. TSUKAMOTO, and F. MISAIZU, "Photoionization of Small Silicon Clusters: Ionization Potentials for Si_2 to Si_{10} ," *Z. Phys. D* 26, S204 (1993).
- K. KUWAHARA, H. IKEDA, H. UMEMOTO, T. SATO, K. TAKANO, S. TSUNASHIMA, F. MISAIZU and K. FUKU, "Nascent Rotational and Vibrational Distributions in Both Products of the Reaction: $\text{Zn}(4^1\text{P}_1) + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{ZnH}(\text{X}^2\Sigma^+) + \text{OH}(\text{X}^2\Pi)$," *J. Chem. Phys.* 99, 2715 (1993).
- K. FUKU, K. TSUKAMOTO, F. MISAIZU, and M. SANEKATA, "Near threshold Photoionization of Silicon Clusters in the 248-146nm: Ionization Potentials of Si_n ," *J. Chem. Phys.* 99, 7807 (1993).

II-2) 国際会議プロシーディングス

K. FUKU, F. MISAIZU, K. TSUKAMOTO and M. SANEKATA, "Photoionization of Solvated Cs Atoms", *Physics and Chemistry of Finite System: From Clusters to Crystals*, ed by P. Jena, S. N. Khanna, and B. K. Rao, NATO ASI Ser., Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 925 (1992).

II-3) 総説, 著書

富宅喜代一「クラスターを用いた化学反応の研究の新しい展開」, 真空 35, 719(1992).
富宅喜代一「気相シリコンクラスターの物理的および化学的性質」, 表面化学 14, 222(1993).

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員
日本分光学会東海支部幹事 (1990-1992)

III 研究活動の課題と展望

我々は金属原子（イオン）を含むクラスターおよび半導体クラスターの物理および化学的性質の検討を進めている。前者では、溶液化学や界面化学で重要な金属原子と溶媒分子間の基本的相互作用（イオン対生成）の解明をめざしており、今後は光電子分光法およびフェムト秒レー

ザー分光法を導入してクラスターのダイナミックスを総合的に検討する。後者では、半導体クラスターの電子構造と緩和過程の検討を進める計画である。また、化学反応の制御の観点からクラスター内反応のダイナミックスを系統的に調べる予定である。

化学試料室

山下 敬 郎 (助教授)

I-1) 専門領域: 有機化学

I-2) 研究課題

- a) 新しいドナーおよびアクセプター分子の合成
- b) 新規な有機電導体の開発
- c) 単一成分有機導体の分子設計
- d) 小さなバンドギャップ有機ポリマーの開発
- e) 有機電子移動反応の研究

I-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 新しいドナーおよびアクセプター分子の合成
 - 1, 2, 5-チアジアゾール, 1, 3-ジチオールなどのヘテロ環を有する新規なドナーおよびアクセプター分子を合成した。これらの中にはヘテロ原子の相互作用で特異な分子集合体を形成するものがあつた。
- b) 新規な有機電導体の開発
 - 新しく合成したドナーおよびアクセプター分子を成分とする高電導体の電荷移動錯体およびイオンラジカル塩を開発した。これらの中には低温まで金属的性質を示すものがある。
- c) 単一成分有機導体の分子設計
 - ヘテロ環の性質を利用して新しいドナー- π -アクセプター系分子を設計合成し、単一成分での高い電導性やホール効果等の興味ある物性を見つけた。
- d) 小さなバンドギャップ有機ポリマーの開発
 - 縮合チアジアゾール環を利用することで約0.9eVの小さなバンドギャップを持つポリチオフェン誘導体の合成に成功した。
- e) 有機電子移動反応の研究
 - 電子移動を経由する新しい有機反応を見つけ、新規物質の合成に応用した。

II-1) 学術論文

Y. YAMASHITA, S. TANAKA, and M. TOMURA, "Structure and Redox Reactions of Tricyclic Pyridinium N-Imines", *Heterocycles*, **33**, 47 (1992).

Y. TSUBATA, T. SUZUKI, Y. YAMASHITA, T. MUKAI, and T. MIYASHI, "Tetracyano-

quinodimethanes Fused with 1, 2, 5-Thiadiazole and Pyrazine Units," *Heterocyclis*, **33**, 337 (1992).

Y. YAMASHITA, S. TANAKA, and M. TOMURA, "Tetrathio-Derivatives of *p*-Quinodimethanes Fused with Selenadiazole Units: A Novel Type of Electron Donors," *Phosphorous, Sulfur, and Silicon*, **67**, 327 (1992).

K. IMAEDA, Y. YAMASHITA, Y. LI, T. MORI, H. INOKUCHI, and M. SANO, "Hall effect Observation in the New Organic Semiconductor Bis (1, 2, 5-thiadiazolo)-*p*-quinobis (1, 3-dithiole) (BTQBT)," *J. Mater. Chem.* **2**, 115 (1992).

Y. YAMASHITA, S. TANAKA, K. IMAEDA, H. INOKUCHI, and M. SANO, "4, 7- Bis (1, 3-dithiol-2-ylidene) -4, 7- dihydro-2, 1, 3- benzothiadiazoles. A Novel Type of Electron Donors Affording Organic Metals", *Chem. Lett.* 419 (1992).

T. SUZUKI, H. SHIOHARA, M. MONOBE, T. SAKIMURA, S. TANAKA, Y. YAMASHITA, and T. MIYASHI, "Tetrathienyethylenes, a New Class of Electron Donors...Dications Twisted by 90° Stabilized by Formation of Polymethine Units", *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **31**, 455 (1992).

T. SUZUKI, H. FUJII, Y. YAMASHITA, C. KABUTO, S. TANAKA, M. HARASAWA, T. MUKAI, and T. MIYASHI, "Clathrate Formation and Molecular Recognition by Novel Chalcogen-Cyano Interactions in Tetracyanoquinodimethanes Fused with Thiadiazole and Selenadiazole Rings", *J. Am. Chem. Soc.* **114**, 3034 (1992).

M. KOZAKI, S. TANAKA, and Y. YAMASHITA, "Preparation and Properties of Poly-4- (1, 3- dithiol- 2-ylidene) -4H-cyclopenta [2, 1- b; 3, 4- b'] dithiophene and its Derivatives", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1137 (1992).

H. FUJIMOTO, K. KAMIYA, S. TANAKA, T. MORI, Y. YAMASHITA, H. INOKUCHI, and K. SEKI, "Electronic Structura of Bis [1, 2, 5] thiadiazolo-*p*-quinobis (1, 3-dithiole) (BTQBT) Studied by Ultraviolet Photoemission Spectroscopy", *Chem. Phys.* **165**, 135 (1992).

E. HASEGAWA, K. ISHIYAMA, T. KATO, T. HORAGUCHI, T. SHIMIZU, S. TANAKA, and Y. YAMASHITA, "Photochemically and Thermally Induced Free-Radical Reactions of α , β -Epoxy Ketones with Tributyltin Hydride: Selective C-O Bond Cleavage of Oxiranylmethyl Radicals Derived from α , β -Epoxy Ketones", *J. Org. Chem.* **57**, 5352 (1992).

Y. YAMASHITA, S. TANAKA, K. IMAEDA, H. INOKUCHI, and M. SANO, "Preparation and Properties of Bis [1, 2, 5] thiadiazolo-*p*-quinobis (1, 3- dithiole) (BTQBT) and Its Derivatives. Novel Organic Semiconductors", *J. Org. Chem.* **57**, 5517 (1992).

T. SUZUKI, H. FUJII, T. MIYASHI, and Y. YAMASHITA, "Molecular Recognition through C-H---O Hydrogen Bonding in Charge-Transfer Crystals: Highly Selective Complexation of 2, 4, 7- Trinitrofluorenone with 2, 6- Dimethylnaphthalene", *J. Org. Chem.* **57**, 6744 (1992).

Y. TSUBATA, T. SUZUKI, T. MIYASHI, and Y. YAMASHITA, "Single-Component

Organic Conductors Based on Neutral Radicals Containing the Pyrazine-TCNQ Skeleton”, *J. Org. Chem.* 57, 6749 (1992).

K. IWASAKI, A. UGAWA, A. KAWAMOTO, Y. YAMASHITA, K. YAKUSHI, T. SUZUKI, and T. MIHASHI, “Crystal Structures of Metallic and Insulating Molecular Complexes between Naphthaceno [5, 6 - c, d : 11, 11 - c', d'] bis [1, 2] diselenole and 4, 8- Bis (dicyanomethylene) - 4H, 8H - benzo [1, 2 - c : 4, 5 - c'] bis [1, 2, 5] thiadiazole : (TSeT) (BTDA-TCNQ) and (TSeT) (BTDA-TCNQ) (C₈H₈Cl)”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 65, 3350 (1992).

K. IWASAKI, T. IDA, A. KAWAMOTO, A. UGAWA, Y. YAMASHITA, K. YAKUSHI, and T. SUZUKI, “Structure of the Charge-Transfer Complex of (DBTTF) (BTDA-TNNQ)”, *Acta Crystallogr., Sect. C48*, 1982 (1992).

II - 3) 総説, 著書

T. MIYASHI, Y. YAMASHITA, and T. MUKAI, “Cage Molecules in Photochemistry” in “Carbocyclic Cage Compounds” E. OSAWA and Y. YONEMITSU, ed, VCH, pp.365-382 (1992).

II - 5) 受賞, 表彰

有機合成化学奨励賞 (1988年度)

II - 6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

日本化学会東海支部代議員 (1991-1992年度)

III 研究活動の課題と展望

有機電導体分野の研究の発展には, 新規化合物の開発が極めて重要であるので, 「新規な有機電導体の合成研究」の研究課題を続行する。今までに金属的性質を示す電導体の合成に成功しているので, 今後, 超伝導性を示す物質の開発を行う。また, ドナー- π -アクセプター系分子で単一成分として高電導性の実現を計るとともに, ドーピングなしでの金属的性質や非線形光学効果などの物性で非常に興味を持たれている小さなバンドギャップポリマーの開発も行う。

装置開発室

三 谷 忠 興 (助教授)

I - 1) 専門領域: 光物性

I - 2) 研究課題

- a) ハロゲン架橋金属錯体の物性研究
- b) 電荷移動型錯体における素励起に関する研究
- c) プロトノエレクトロニクス分野の確立

I - 3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ハロゲン架橋金属錯体についての構造解析, 電気的, 光学的及び磁気的性質を系統的に調べ, この物質の特徴である一次元混合原子価状態を実験的及び理論的に解明した。
- b) 以前提唱した電荷移動型錯体におけるソリトンモデルを実験的に確証した。上記のハロゲン架橋金属錯体との類似性を実験的及び理論的に確証した。
- c) 水素結合を介して一次元金属錯体と電荷移動型錯体との複合体を創造して, この系における特異性を明らかにすると共に, プロトンと電子の連係を基盤とする新しい物性発現機構を見いだした。

II - 6) 学会および社会的活動

学会の組織委員

第6回光活性固体国際会議実行委員長

III 研究活動の課題と展望

個性豊かな分子 (例えば一次元鎖, C60* など) を用いて, 分子内と分子間に存在するさまざまな相互作用を競合もしくは協調させることにより, 新しい集団的性質をもった物質を創り出す。そこでは, 物理と化学の分野において構築された概念の融合を計り, 合成から物性解析まで一貫した研究を行う。特に, 水素結合を介して異なる電子状態を結合させた新しいタイプの分子システムを用いて, 新しいタイプの超電動性, 磁性や光応答性を求めて, 「プロトノエレクトロニクス」ともいうべき創造的分野を確立することを目指す。

浅 香 修 治 (助手)

I-1) 専門領域: レーザー分光

I-2) 研究課題

a) 赤外光直接励起による非線型分光法の開発

I-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 赤外光直接励起による光線型分光法の開発

従来、分子振動に関する分光としては、吸収やラマン分光など線型分光のみが行われていた。十分強い(赤外)光による分子振動の直接的励起により、分子振動の非線型性をより明確に探る手段を得ることが出来る。現在、その目的のための励起光源を製作している。

II-1) 学術論文

Satoshi TAKAHASHI, Jeung Sun AHN, Shuji ASAKA, and Teizo KITAGAWA, "Multi channel Fourier Transform Spectroscopy Using Two-Dimensional Detection of the Interferogram and Its Application to Raman Spectroscopy", *Appl. Spectrosc.* 47, 863 (1993).

III 研究活動の課題と展望

分子振動に共鳴する中赤外～遠赤外の波長可変光源は市販品がなく、その製作自体が技術的に新しいものを要求する。この装置が完成すれば、分子分光に大きな影響を与え得るものである。また、分子振動の非線型性は分子反応経路とも密接な関係があり、その直接観測は、化学反応機構の解明に新しい知見をもたらすと期待される。

安 正 宣 (助手)

I-1) 専門領域: レーザー固体分光

I-2) 研究課題

a) 非晶質系にドーブした色素分子のサイト選択分光

b) 非晶質系のミクロな構造変化を調べるための分光法の開発

I-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 非晶質系にドーブした色素分子のサイト選択分光

これまで測定が不可能だったポリマー中の色素分子の共鳴蛍光の測定に成功し、サイト選択励起をした際の蛍光スペクトルから単一のサイトにある分子のスペクトルを決め、さらにその解析から電子格子相互作用強度で重み付けされた振動モードの状態密度スペクトルが得られた。

これにより、色素分子を含む非晶質系の電子格子相互作用の定量的な研究が可能になり、現在、色素分子をドーブした非晶質(ポリマー、有機ガラス)や色素蛋白質等、組成の大きく異なった非晶質中の局在中心を対象に、この新しいサイト選択分光を行っている。

b) 非晶質系のミクロな構造変化を調べるための分光法の開発

非晶質にドーブした色素分子の永続的ホールのスペクトル幅は極めて狭いことから、エネルギー準位の正確な決定、外部場(電場、磁場、応力、等)の影響を感度良く測定することができる。赤外域の波長可変レーザーにより分子振動モードを選択的に励起し、ホールスペクトル及び赤外吸収スペクトルの変化をプローブすれば、非晶質の光誘起構造変化のミクロな特徴を調べることができる。現在、そのための分光システムを制作中である。

II-1) 学術論文

Satoshi TAKAHASHI, Jeung Sun AHN, Shuji ASAKA, and Teizo KITAGAWA, "Multichannel Fourier Transform Spectroscopy Using Two-Dimensional Detection of the Interferogram and Its Application to Raman Spectroscopy", *Appl. Spectrosc.* 47, 863 (1993).

II-2) 国際会議のプロシーディングス

YASUO KANEMATSU, JEUNG SUN AHN, and TAKASHI KUSHIDA, "Resonance Fluorescence Spectra of Dye-Doped Polymers", *J. Lumin.* 53, 235 (1992).

YASUO KANEMATSU, JEUNG SUN AHN, SEISIRO SAIKAN, and TAKASHI KUSHIDA, "Low Frequency Modes of Polymers Studied by Laser-Induced Fluorescence Line Narrowing Technique", *Proc. The Spectral Hole-Burning and Luminescence Line-Narrowing*, 87 (1992).

III 研究活動の課題と展望

次世代の大容量記憶方式といわれる光化学ホールバーニング分光は現在実用化を目指して盛んに行われている。特に、色素をポリマーにドーブした系は不均一広がり的大小さとバーニング効率の良さから注目を浴びている。しかし現状では、この系でホールバーニングが可能なのは80 K以下であり、実用化するうえで最大のネックになっている。もっと高温でホールバーニングを可能にするには、電子格子相互作用の弱い材料とホールのスペクトルが安定な材料を開発する必要がある。我々の分光法はホールバーニングの材料の開発に大きく影響すると思われる。

永 田 正 明 (技官), 水 谷 伸 雄 (技官)

II-1) 学術論文

K. IMAEDA, I. KAIRULLIN, K. YAKUSHI, M. NAGATA, N. MIZUTANI, H. KITAGAWA and H. INOKUCHI, "New Superconducting Sodium-Nitrogen-C₆₀ Ternary Compound", *Solid State Commun.* 87, 375 (1993).

岡 田 則 夫 (技官)

特許

岡田則夫, 青木潤次: “光透過窓取り付け機構”

特願平5-250008 (浅香修治, 堀場 厚)

極端紫外光実験施設

渡 邊 誠 (助教授)

I-1) 専門領域: 極端紫外・軟X線分光学

I-2) 研究課題

- a) 極端紫外・軟X線光学素子の開発
- b) 極端紫外・軟X線分光器の製作
- c) 絶縁体結晶の内殻吸収スペクトルの研究

I-3) 研究活動の概略と成果

- a) シンクロトロン放射の軟X線領域での分光を実現するために, 回折格子と分光結晶の開発を行った。2nm以下でも十分使用できるラミナ型回折格子 (基板: 石英, SiC) と, 2-1nm領域で利用できる分光結晶 β アルミナを開発した。
- b) 軟X線領域の分光器として, 二結晶分光器を製作した。分光された光を集光させることにより, 微小な試料でも測定ができる。また, 数種の分光結晶を用いることにより, 2-0.3nm領域で単色光を得ることができる。さらに, 回折格子分光器の設計も行い, 現在組み立て中である。
- c) Pbハライドの浅い内殻Pb-5dからの吸収スペクトル (～50nm付近) を測定し, そのスペクトル線 (励起子線) の構造を解析した。解析は内殻励起子遷移を原子内遷移と仮定し, 結晶場分裂を考慮して行い, 実験結果とのよい一致を見た。さらに, 固体希ガスの深い内殻Ne-1s, Ar-1s, Kr-2p, Xe-3pの吸収スペクトルを測定した (1.4-0.3nm)。気体状態では観測されなかった吸収ピークがイオン化準位よりも高いエネルギー側で多数観測された。これらのピーク位置と格子定数の関係が, Natoliの経験則を満足していることを見いだした。

II-1) 学術論文

E. ISHIGURO, H. MAEZAWA, M. SAKURAI, M. YANAGIHARA, M. WATANABE, M. KOEDA, T. NAGANO, K. SATO, Y. AKUNE, and K. TANINO, “Test of Holographic SiC Gratings for High-Power Synchrotron Radiation”, *SPIE* 1739, 592 (1992).

T. MURATA, K. HARADA, S. EMURA, M. NOMURA, K. R. BAUCHSPIESS, H. MAEDA, A. HIRAYA, and M. WATANABE, “X-Ray Excited Luminescence Yield Spectra of NaBr and NaBr:Cu Single Crystals”, *Jpn. J. Appl. Phys.* 32, Suppl. 32-2, 217 (1993).

W. F. PONG, R. A. MAYANOBIC, K. T. WU, P. K. TSENG, B. A. BUNKER, A. HIRAYA,

and M. WATANABE, “X-Ray Absorption Near Edge Structure (XANES) Studies of Diluted Magnetic Semiconductors (DMS) $Zn_{1-x}Y_xS$ (Y=Mn, Fe, Co) Systems”, *Jpn. J. Appl. Phys.* 32, Suppl. 32-2, 722 (1993).

II-6) 学会および社会的活動

学会の組織委員

Int. Conf. on Synchrotron Radiation Instrumentation: 国際助言委員 (1991), プログラム委員 (1991)

文部省・学振等の委員会委員

科学技術庁: 研究開発局「新ビーム技術による高性能機能材料の分析・評価技術に関する調査」調査推進委員会 SOR作業部会委員 (1985-1986)

科学技術庁: 航空・電子等技術審議会 光科学技術分科会委員 (1986-1987)

日本原子力研究所, 理化学研究所: 大型放射光施設計画検討委員会 加速器小委員会委員 (1989-1992)

III 研究活動の課題と展望

気体や固体の内殻吸収スペクトルが高分解能で得られるようになれば, スペクトル構造の同定がより精密になり, より詳しく電子状態を理解することができる。しかしながら軟X線領域において, シンクロトロン放射を高分解能で分光することはまだまだ今後の課題である。そのために分光性能のよい回折格子 (多層膜回折格子など) や分光結晶の開発を引続き行う。またこれらの光学素子を搭載した分光器を製作していく。そして実際にスペクトルを測定し, 物質の電子状態の研究を行う。対象とする物質を広げていくことも今後の課題である。

磯 山 悟 朗 (助教授)

I-1) 専門領域: 加速器物理学

I-2) 研究課題

- a) バンチ長の測定
- b) 短いバンチの発生
- c) 自由電子レーザーの基礎研究
- d) 電子ビームの縦方向ビーム不安定性の安定化

I-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) バンチ長の測定

UVSORストレージリングのバンチ長を広い電子エネルギーとビーム電流の範囲にわたり測定し, UVSORストレージリングのバンチがポテンシャル井戸歪みにより引き起こされていることを明らかにした。また, 縦方向の有効インピーダンスをバンチ長の関数として求めた。

b) 短いバンチの発生

電子ビームのバンチを極端に短くする研究と、これに関連するビームダイナミックス、コヒーレント放射の発生の研究。現状では、モーメントコンパクションファクターを制御することにより、バンチ長を通常の10分の1以下にすることに成功している。

c) 自由電子レーザーの基礎研究

電子ストレージリングで、短波長領域の自由電子レーザーの基礎研究を行っている。波長488nmのアルゴンレーザーを使い、自由電子レーザーの増幅率を測定した後、可視領域で発振を達成した。その後、紫外領域での発振にも成功した。

d) 電子ビームの縦方向ビーム不安定性の安定化

高調波加速空洞を使い、縦方向バンチ結合型ビーム不安定性の安定化に成功した。

II-1) 学術論文

G. ISOYAMA, "Present Status of the UVSOR Light Source", *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res.* A308, 31 (1991).

A. LIN, H. HAMA, S. TAKANO, and G. ISOYAMA, "Measurement of the Bunch Length on the UVSOR Storage Ring", *Jpn. J. Appl. Phys.* 31, 921 (1992).

II-2) 国際会議プロシーディングス

H. HAMA, S. TAKANO, and G. ISOYAMA, "Control of the Bunch Length on the UVSOR Storage Ring", Workshop on Fourth Generation Light Sources (February 24-27, 1992, Chairmen M. Cornacchia and H. Winick) SSRL 92/02, Stanford Synchrotron Radiation Laboratory, p.208

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

日本放射光学会 評議委員 1993年4月~1995年3月

日本放射光学会 会計幹事 1993年4月~1994年3月

日本放射光学会 第四会年会 実行委員 1991年4月

III 研究活動の課題と展望

研究活動の中心は、極端紫外光実験施設のシンクロトロン放射光源であるUVSORストレージリングを使い、将来の新型光源を開発することである。シンクロトロン放射光源に関しては、次世代の光源に実現されるであろう極端に短いバンチの生成の基礎研究と電子ビーム安定化法の開発を行っている。自由電子レーザーのダイナミックスを研究し、電子ストレージリングに基づいた自由電子レーザーの出力パワー飽和のメカニズムを明らかにする。

鎌田 雅夫 (助教授)

I-1) 専門領域: 放射光科学, 光物性

I-2) 研究課題

- a) 固体の内殻励起状態とその減衰過程の研究
- b) イオン結晶表面における光スパッタリング過程の研究
- c) 半導体清浄表面における吸着・結合状態の研究
- d) スピン分解光電子分光システムの開発

I-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 固体の内殻励起状態とその減衰過程の研究

内殻励起に伴う新しい発光現象を示すセシウム化合物について、光電子測定を行い、無輻射遷移の確率を見積ることに成功し、内殻励起子の減衰過程を明らかにした。また、類似のバリウム化合物について、より深い内殻領域での無輻射遷移の確率を求め、結晶場の影響が大きいことを明らかにした。

- b) イオン結晶表面における光スパッタリング過程の研究

従来検出されていなかった励起状態の構成原子の放出を測定すると共に、その時間応答性を観測することに成功した。

- c) 半導体清浄表面における吸着・結合状態の研究

Si表面におけるハロゲンとアルカリの共吸着系について内殻レベルシフトを測定し、イオン結合性と共有結合性の移り変わりが生じていることを明らかにすると共に、吸着原子の置き代わりが起こっていることを見いだした。

- d) スピン分解光電子分光システムの開発

光電子分光システムの建設を終了し、スピン偏極検出器を製作した。また、新しいマルチマウント型の分光器の設計を終了し、建設を開始した。いずれも世界的に新しい技術開発を伴うものである。

いずれも、世界に有数の放射光施設であるUVSORを利用することによって可能な課題であり、国内外の研究者と協力して研究を進めている。

II-1) 学術論文

V. G. STANKEVITCH, N. YU. SVECHNIKOV, K. V. KAZNACHEEV, M. KAMADA, S. TANAKA, S. HIROSE, R. KINK, G. A. EMEL' CHENKO, S. G. KARABACHEV, T. WOLF, H. BERGER, and F. LEVY, "Luminescence of high-temperature single-crystal superconductors cleaved in ultrahigh vacuum", *Phys. Rev.* B47, 1024 (1993).

M. KAMADA, K. ICHIKAWA, and O. AITA, "Solid-state effects on nonradiative decay of $4d^9 4f^1$ states in barium halides", *Phys. Rev.* B47, 3511 (1993).

Y. OHNO, T. MATSUSHIMA, S. TANAKA, and M. KAMADA, "Desorption, Dissociation and Orientation of Oxygen Admolecules on a Reconstructed Platinum (110) (1×2)

Surface Studied by Thermal Desorption and Near-edge X-ray-Absorption Fine-Structure”, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 32 Suppl. 32-2, 383 (1993).

J. YOSHINOBU, S. TANAKA, and M. NISHIJIMA, “Elementary Chemical-Reaction Processes of Silicon Surfaces”, *Jpn. J. Appl. Phys.* Vol.32 1171-1181 (1993).

II-2) 国際会議プロシーディングス

Y. OHNO, T. MATSUSHIMA, S. TANAKA, and M. KAMADA, “Desorption, Dissociation and Orientation of Oxygen Admolecules on a Reconstructed Platinum (110) (1×2) Surface Studied by Thermal Desorption and Near-edge-X-ray-Absorption Fine-Structure”, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 32 Suppl. 32-2 (1993) 383. (Proc. 7th Int. Conf. X-ray Absorption Fine Structure, Kobe, 1992.)

II-3) 総説, 著書

鎌田雅夫, 広瀬サユミ, 「SR光によるアルカリハライドからの原子放出」, 固体物理, 別冊特集号「電子励起による非平衡固体ダイナミクス」, p.39. 1993.

鎌田雅夫, 広瀬サユミ, 「SR光によるアルカリハライド表面の動的過程の研究」, 表面科学, Vol.14, p.16 (1993).

II-4) 招待講義

鎌田雅夫, 「SR光による内殻電子励起」, 応用物理学会シンポジウム, 青山学院大, 1993. 3.

MASAO KAMADA, “Research activities and future projects of UVSOR”, 5th Synchrotron Radiation User Workshop, Pohang (Korea), 1993, 2.

II-6) 学会および社会的活動

学会の組織委員

8th Int. Symp. on Exoelectron Emission and Applications, Osaka, 1985. (1984-1985),
(常任幹事)

II-7) 他大学での講義

MASAO KAMADA, Postech (Korea), “Photoemission and Photodesorption studies on solids and surfaces”, 1993. 2.

III 研究活動の課題と展望

固体の内殻励起状態とその減衰過程の研究: 輻射および無輻射過程の両面からの研究によって, 全体像の理解と新しい概念の発展が期待される。b) イオン結晶表面における光スパッタリング過程の研究: SR光のパルス性を利用した時間応答実験によって, 表面での光励起による動的過程が明白になる。c) 半導体清浄表面における吸着・結合状態の研究: 共吸着状態が電荷や原子移動を伴う新しい結合状態であることが明らかになりつつある。d) スピン分解光電子分光システムの開発: 電子の運動エネルギーや運動量の加えて, スピン状態についての情報が得られる様になり, “完全実験” が可能となる。

注1。研究系および研究施設の現状の記載に当たって, 客員研究部門に関しては, 専任研究部門と一体的な運営がなされている場合, この中に含めて記述した。なお, その研究活動の概要については2-6-1を参照されたい。

注2。学術論文(II-1), 国際会議プロシーディングス(II-2), 及び総説・著書(II-3)は, 1992年9月から1993年8月末までの1年間のものを掲載した。その他の年間活動, 他大学での講義(II-7)は, 平成4年度(平成4年4月-平成5年3月)のものを掲載した。

社会新闻

4. 研究施設の業務と実施状況

4-1 電子計算機センター

スーパーコンピュータを中心とする計算機システムは導入以来運転も順調で、従来不可能であった超大型計算がこれを用いて盛んに実行されている。スーパーコンピュータ-HITAC S-820/80 は最高速度 3GFLOPS (1GFLOPS : 浮動小数点演算を毎秒10億回) であるが、これに大量データに高速にアクセスできる拡張記憶やパラレルディスク入出力機能が整備されるなど、中間データを大量に処理する必要のある分子科学計算に最も適した、他には例のない設計になっている。

平成4年度末のプロジェクト数は271件、利用者数は804人で、同年度中に処理したジョブ数は約30万件、S-820/80と汎用機M-680Hの両計算機で利用された総CPU時間はM-680H換算で約12,500時間である。このうち、約60%は共同研究や施設利用を通して所外利用者の利用に供されている。特に、大学などでは実行不可能な長時間・大主記憶容量、大中間データの超大型計算が行われ、分子の電子状態、化学反応のポテンシャル面、溶液や高分子のシミュレーションなどの分野で成果を上げている。

分子科学プログラムライブラリも年々充実の度を加え、約500本のQCPEプログラムの外利用者によって開発された150本のプログラムを有し、世界で最も充実したライブラリとなっている。また、量子化学文献データベース (QCLDB) は、センターでオンライン利用されるのみでなく、世界中に配付されて、この分野の研究に不可欠のものとなっている。

また所内ローカルエリアネットワークが稼働しているほか、学術情報センター情報網を通じて大学間計算機ネットワークにも加入して、所外利用者の便宜をはかっている。平成3年度からは、イーサネットと接続し世界各国からアクセスできるようになっている。さらに、計算結果の視覚化を行うためのグラフィックステーションIRIS4D/70GTをはじめとして、IBM POWERステーション580, Sun SPARC Station 2, SONY NEWS1460ワークステーションとMackintoshなどのパーソナルコンピュータを設置してスーパーコンピュータの利用環境の充実をはかっている。

平成5年度中にはスーパーコンピュータの新機種 SX-3/34R への入換えが行われ、更に計算機環境の整備が進められる。同機種の主記憶容量は2GB、拡張記憶8GB、最高演算速度 19.2GFLOPSである。通常の大規模計算センターでは実行出来ないユニークな分子科学計算を今後以上に奨励していく予定である。

4-2 極低温センター

液体ヘリウム、及び液体窒素を研究系・研究施設及び共同利用研究者へ供給すると共に、低温領域における研究設備や技術の研究・開発を行い、関連する低温技術に関するサービスも行っている。又、低温分子科学に関する独自の研究及び研究系あるいは外部との共同研究も行っている。

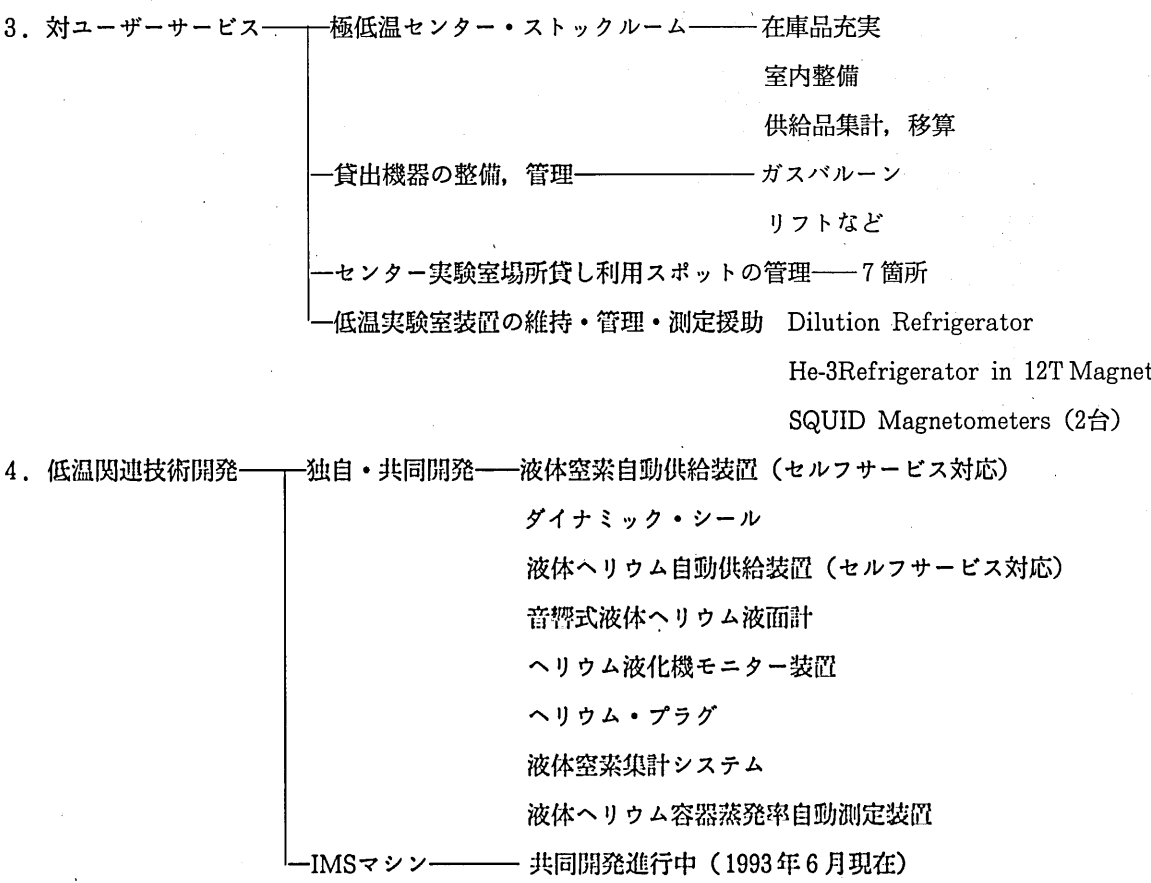
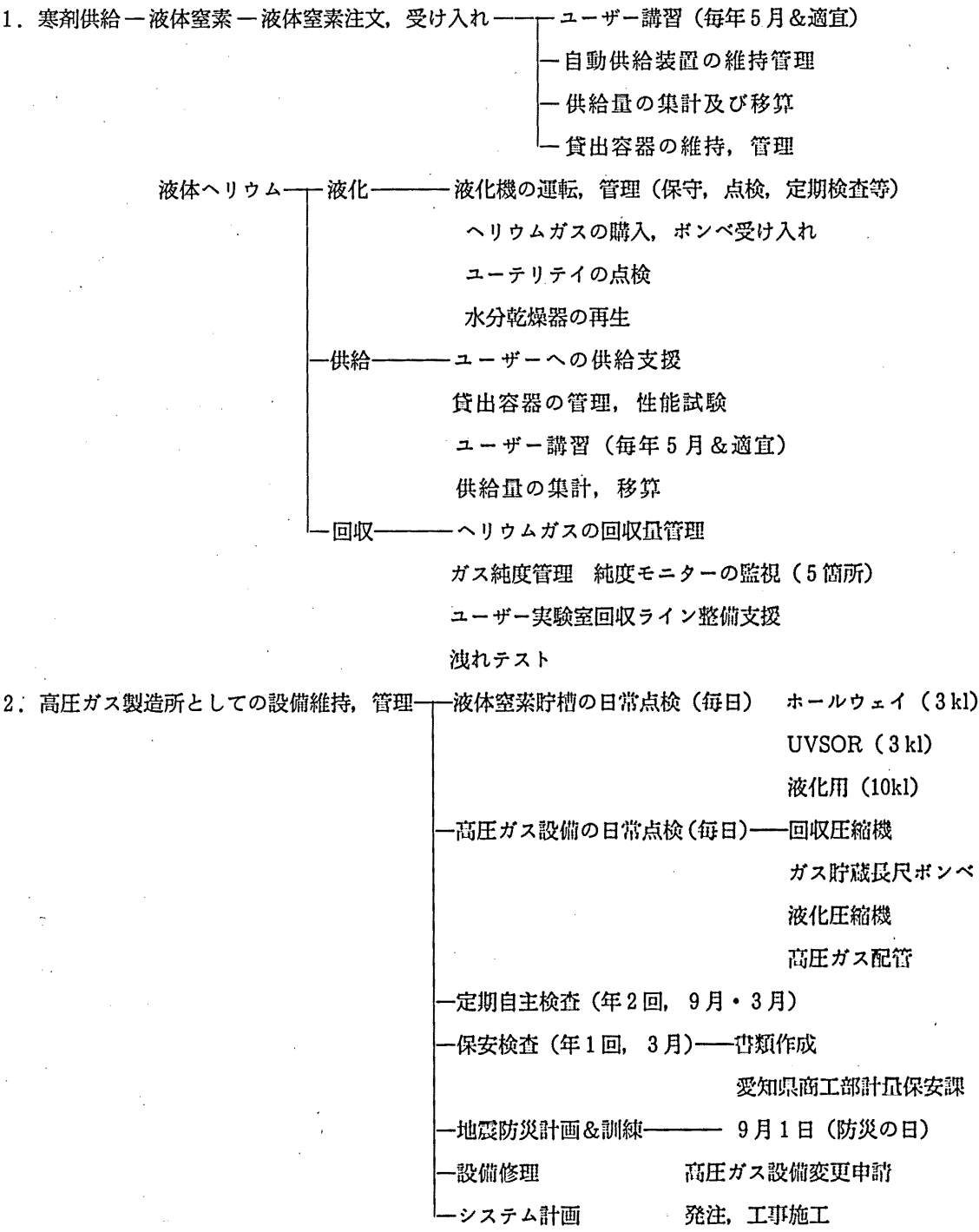
主要設備についての状況：ヘリウム液化機は神戸製鋼所製内部精製器付タービン型 KOBELCO L H-150 で、純度95%ガスを用いて150ℓ/時の液化力を持ち、現在順調に稼働している。ヘリウム精製・回収圧縮機 (90Nm³/時)、純ガス気蓄器 (480Nm³)、回収ガス気蓄器 (2,835Nm³)、液体窒素貯槽 (10,000ℓ) 及びヘリウム貯槽 (3,000ℓ) が設置されている。運転は全自動方式でクールダウン時間は約2.5時間である。平成4年度の液体ヘリウム供給実績は年間約22,000ℓで (液化量約30,000

れ), 今後の使用量の増加にも充分対応できる見込みである。

低温実験装置として, 超伝導マグネット, 各種クライオスタット, ³He極低温発生装置(岡山大との共同研究), 超高圧極低温用磁化率測定装置, SQUID(機器センター設備), 希釈冷凍機などが設置されている。

又, 低温分子科学に関する研究として, 有機導電体の強磁場下での振舞(導電性, 強磁性)についての研究を行っている。

センター業務の詳細をまとめて以下に示す。



4-3 機器センター

機器センターは研究用機器のうち共通性があり, かつ最高級のものを集中管理し, 二重投資を防止するとともに常時高性能を維持し, 研究所内外の研究者の利用に供する。近年研究用機器の進歩は, 目覚ましく, 測定精度の向上も著しい。このため, より複雑な分子が研究対象となったり, 方法論として新しい分野が開けたりする。当センターでは, 以上のような考え方や情報から, 研究所内外の必要度等の要請に基づいて十分選択された機器について高い性能を保つと共に, 設備更新については特別に配慮している。

平成4年度の施設利用は85件の申請があり, 使用件数は301件あった。また協力研究を通して150件の利用があった。各設備の利用件数は下記の通りである。平成4年度は特別設備として光エネルギー変換動力学システムを導入した。本システムは, 固体波長可変超短パルスレーザー(Spectra Physics, Tunami, 再生増幅器)とストリークカメラ方式の検出器からなり, 現在周辺機器の整備を含め研修を進めており, 平成6年度4月より公開の予定である。

主な設備備品と利用件数

高分解能核磁気共鳴装置(日本電子 GX400) 816件, 電子スピン共鳴装置(Varian E-112/E-900, Bruker ESP-300E) 382件, 四軸型単結晶X線回折装置(理学電機 AFC-5, AFC-5R, ENRAF NONIUS CAD4) 199件, 粉末X線回折装置(マックサイエンス MXP³VA) 302件, 帯磁率測定装置(Oxford) 35件, 走査型熱解析計(Du Pont 9990) 45件, 固体表面解析装置(VG ESCALAB

MKⅡ) 212件, フーリエ変換赤外分光光度計(BOMEM DA3) 29件, 走査型電子顕微鏡(日立 S-450, S-900) 186件, レーザーラマン分光光度計(日本電子 JRS-400T) 36件, アルゴンイオンレーザー(Spectra Physics 2030) 17件, 電気化学解析装置(PAR370) 2件, 固体波長可変超短パルスレーザー(Spectra Physics, Tunami, 再生増幅器)(研修中), モードロック Nd:YAG レーザー(Coherent Antares) 58件, Nd:YAG 励起色素レーザー(Quanta-Ray DCR 2A, PDL3) 26件, エキシマー励起色素レーザー(Lambda Physik EMG 50 E FL2002, EMG 104, FL 3002 E) 60件, フッ素系エキシマーレーザー(Lambda Physik LPX110i) 28件, 高感度蛍光分光光度計(Spex Fluorolog) 20件, 紫外分光光度計(Cary 2390, 日立 U-3400) 98件。

このほか貸出用(所内における共同研究, 短期の開発研究等の目的のため) 小型機器として, 高圧電源, アンメーター, オシロスコープ, ボックスカー積分器, ロックイン増幅器, シグナルアベレージャー, 記録計等を備えており, 随時所内利用に供している。

4-4 化学試料室

所内研究者が研究対象とする化学物質の合成, 精製, 単結晶作成などの作業を行う。また, 得られた物質の純度や分子構造を決定するための各種クロマトグラフィーによる分析, 質量分析, 元素分析などのサービス業務を行っている。1992年度には二重収束質量分析計で461件, 元素分析で621件の依頼測定を行った。さらに, 分子科学的に興味ある新化合物の分子設計, 合成等の研究開発を行う。また, 研究所で開発された新しい原理に基づく実験的手法を, 実際の化学反応や化合物の分析等に積極的に適用する。研究所の実験廃棄物の処理, 管理に関与する。

化学試料棟(1,060 m²)には, 合成実験室(5室), 機器分析室(3室), 高圧実験室のほかに, クリーンルーム・結晶作成室, 機器装置室, 廃棄物処理室, 試薬ストックルーム等が設けられている。

主な設備備品

二重収束質量分析計(島津 CONCEPT 1S), ガスクロマトグラフ質量分析計(島津 QP1000), 核磁気共鳴装置(Varian EM-390), 元素分析計(柳本 MT-3), ICP発光分光分析装置(セイコー SPS7000), 高純度不活性ガス雰囲気装置(Vacuum Atmosphere), 精密分留装置(Perkin Elmer 251), 高速液体クロマトグラフ(島津 LC-9A), リサイクル分取液体クロマトグラフ(日本分析工業 LC-908), フーリエ変換赤外分光光度計(Perkin Elmer 1640), 赤外分光光度計(日立295), 分光光度計(島津 UV-2100), 施光計(日本分光 DIP-4), 分析用ガスクロマトグラフ(大倉電気701), 凍結乾燥機(RFS-5000), プレハブ低温室(三洋4℃)

4-5 装置開発室

本装置開発室は, メカトロニクス, エレクトロニクス, およびニューマテリアルの三つのセクションで構成されており(これらをまとめてテクニカルサービスと呼ぶ), 最新技術の導入, 装置開発室独自の技術開発および所内外の研究者との共同技術開発を基盤として, 新しい実験装置の開発を行っている。日常的には, 分子科学研究所における創造的研究がより円滑に行われるように, それぞれの

セクションの特徴を活かした技術支援・技術指導を行っている。また, 装置開発室の内部組織として技術開発推進本部を設けて, 各セクション間の技術融合や他の研究機関との技術交流を計ると共に, “新しいアイデアの実現”に向けて分子科学研究所独自の研究装置(名付けて「IMSマシン」)を設計して, テクニカルサービスの協力のもとにその試作に当たっている。

メカトロニクス・セクションでは, 超高真空技術や極低温技術を駆使した数多くの超高真空実験装置やクライオスタットを製作している。その製作技術をさらに高めるために, コンピュータを中心とした機械加工システムを導入して, 設計から製作までの作業を一貫して行っている。

エレクトロニクス・セクションでは, プログラマブル・デバイス等の新しい回路構成技術を積極的に取入れ, 高速信号処理技術や, インターフェイス技術高めるとともに, 設計から検査までをコンピュータ化して, 信頼性の高い装置を短期間で製作する体制を作り上げている。

ニューマテリアル・セクションでは, 従来のガラス工作技術の他に新素材関連技術を導入し, 新たな利用方法を開拓している。また, 最近製作したC₆₀製造装置を用いて, C₆₀粉末試料の提供を行っている。

主な設備備品

[メカトロニクス・セクション]

マシニングセンター(マキノ BN1-85), NCフライス盤(マキノ KGNCC-70), 放電加工機(ソデックA35R), ワイヤ放電加工機(三菱DWC90H), 電子ビーム溶接機(日本電気EWB), 正面旋盤(西部工機LHS-3616), 他一般工作機械およびCAD・CAMシステムなど。

[エレクトロニクス・セクション]

2G サンプリング デジタルオシロスコープ(レクロイ7200A), 1GHzオシロスコープ(テクトロニクス7104), スペクトラムアナライザー(アドバンテストR3361B), サンプリングスコープ(岩通SUS601B), ネットワークアナライザー(YHP8754A), ロジックアナライザー(バイオメーションK100D), LCA開発システム(AMD), プリント基板自動製作システム(LPKF), インピーダンス・ゲインフェース・アナライザー(YHP)など。

[ニューマテリアル・セクション]

ガラス旋盤(理研GL-4DLH), 超音波加工機(日本電子工業UM500), バンドソーイングマシン(LUXO VW-55) など。

平成4年度の活動状況

平成4年度の部門別活動状況を以下に示す。

I メカトロニクス・セクション

- | | |
|----------|-----|
| 1. 総件数 | |
| 工作依頼伝票の数 | 184 |
| 2. 処理数 | |
| 保留した依頼 | －1件 |
| 3. 内作件数 | 183 |

装置開発室の内部で完全に処理されたもの 96

4. 外注件数

処理件数から内作件数を引いたもの 88

- a. (100%外注に依存している処理) 内部での組立作業を含んでいるものがあるが、作業時間の比率が少ないので、この項目にカウントした。…57
- b. (内作含む処理) 内部の組立作業にある程度作業時間を費やしたもの、又は、製品の内ある比率の部品等を装置開発室で製作し処理されたもの。…14
- c. (設計+外注) 上記の a. b. において設計したもののトレースしたものが含まれているが、作業の比率を考慮した。ここでは装置開発室で設計作業を行って外注処理されたもの。…17

5. 設計 (トレース)

4のc.と重複するが、CADを利用したものとする。 39

6. 依頼者数

工作依頼を提出した人 (メカトロセクションの利用者) 64 人

II. エレクトロニクス・セクション

- 1. 総件数 24
- 2. 内作件数 21 うち製作に1ヶ月以上要するもの 9
- 3. 外注件数 3
- 設計およびプリント基板の製作を内作で行い、実装を外注で行った。
- 4. その他 (工作依頼データには残らないもの)
機器の故障修理件数 5

III. ニューマテリアル・セクション

A) ガラス工作

- 1. 依頼件数 27 件
- 2. 内作処理件数 27 件
- 3. 外注件数 0 件

B) C₆₀ 粉末試料

- 1. 供給量 C₆₀ (99.9% 以上) 35g, C₆₀ (99.5%) 12g, C₇₀ (99.9% 以上) 5g
- 2. 供給先 所内 3グループ, 所外 2グループ

工作依頼件数の最近の推移

最近3年間における工作依頼件数とその内の外注件数は次のようになっている。

平成2年度工作依頼処理件数	メカトロニクスセクション	131 件 (外注53件)
	エレクトロニクスセクション	37 件 (外注 0件)
	ニューマテリアルセクション	92 件 (外注14件)

平成3年度工作依頼処理件数	メカトロニクスセクション	176 件 (外注66件)
---------------	--------------	---------------

平成4年度工作依頼処理件数	エレクトロニクスセクション	18 件 (外注 0件)
	ニューマテリアルセクション	42 件 (外注 0件)
	メカトロニクスセクション	183 件 (外注88件)
	エレクトロニクスセクション	21 件 (外注 3件)
	ニューマテリアルセクション	27 件 (外注 0件)

注1

注1 C₆₀ 製造開始。

装置開発室の今後について

I) 現状分析

分子科学研究所創立以来 装置開発室技官の人事異動は少なく、技官の平均年齢は時の経過とともに上昇しているので、日常の仕事がマンネリ化する恐れをはらんでいる。一方、分子科学のブレークスルーをつくるには 最先端の技術をもって分子研研究者を支援することが望まれており、技官一人一人の向上意識を高めること、すなわち単なる工作室ではなく、優れた実験家のユニークなアイディアを実現していく真の装置開発室でなければならない。このような認識のもとに3年前に次の項目に関して議論を重ねた。

- 1. 分子科学関連技術の広がり
- 2. 装置開発技術の深化の必要性
- 3. 分子科学研究所創設15年
 - i) 分子研内研究内容の細分化
 - ii) 分子研内長期技術開発研究の減少
 - iii) 分子研独自技術開発の減少
 - iv) 技術内容・研究者意識・技官意識の定常化
- 4. 新技術・新装置開発への期待
- 5. 装置開発室人事の流動化
- 6. 技官の地位・待遇の向上を期して
- 7. 技術の評価の必要性

II) 今後の方向

(I)における議論にもとづき、今後の努力目標を短期、中期、長期の3段階に分けて考えた。

短期計画

- 1. 専門技術官の導入
- 2. 客員制度の導入
- 3. 共同開発 (専門技術官・客員・装置開発室・分子研研究者および民間研究者)
- 4. 名付けて「IMS マシン」開発
- 5. 「IMS マシン」検討会の開催
- 6. 技術開発推進センターの設置

中期計画

- 1. 技術開発推進センターの拡充
- 2. 民間との共同研究の推進

長期計画

- 1. 開発技術のオープン化
- 2. 技術開発推進センターから分子科学技術開発（ミニ）研究所へ

Ⅲ）技術開発推進センターの発足とIMS マシン構想の実施

（Ⅱ）で議論した短期計画のうち実施できるものから実施している。装置開発室はこれまでに高度の技術を蓄積してきたが、近年の分子科学関連技術の急速な広がりを考慮し、技術進歩に即応できること、外部からの技術導入が容易に行われること、さらに人的交流が活発に行えることを実行するための内部組織として技術開発推進センターを発足させた。現状では、装置開発室助手2名、技官3名（技術主任）がその任にあたっており、さらに客員教授（または助教授）や民間共同研究者の参加を期待している。

技術開発推進センターの具体的役割は、「アイディアの重視」と「所内外との共同開発」を基本とした新しい発想の研究装置（名付けて「IMS マシン」）の企画・技術的調査・設計を行うことである。その具体的製作は装置開発室の3工作セクションの協力のもとに行うこととしている。IMS マシンの実施に当たっては、毎年ある時期に「IMS マシン課題研究」として所内にてIMS マシンの公募を行い、教授会議の承認を得た「IMS マシン選考委員会」がその機種を2,3 件選定する。その製作費は 毎年一定額配分される IMSマシン予算による。その選定方針は ① 分子線や分光装置など分子研独自技術の開発、② 新技術・新装置の開発、③ 技官の技術向上につながる、等を基本にしており通常業務の仕事と区別している。

平成3年度は IMS マシンに対して8件の応募があり、次の3件を選定した。①超高速サイクリック・ボルタンモグラフ、②高感度・高分解能マルチチャンネルFT分光器、③超高真空内の高精度試料搬送機構付き低温マニピュレーターの開発。

平成4年度は16件の応募があり、次の5件が採択された。①前年度 ③(継続)、②中赤外域光源・分光システムの開発、③低温クライオスタット用光学窓の開発、④液体ヘリウム自動供給システム、⑤ファブリーペロー干渉分光器の高速超安定化装置。

平成5年度は10件の申請があり、その内次の2件を新規採択した。①広帯域赤外窓付超高真空ビューポート、②High-Mass用 TOF型質量分析装置の試作。

IMSマシンの装置に関して特許になるものはそれを申請していくことにした。この方針にしたがい平成5年には3件特許を申請し、その他も準備中である。特許にならない場合でも、技術者の努力を研究者が感謝し評価すること、装置の性能向上のために情報をフィードバックすることが強く望まれている。また制度においても技術者の技術レベルを評価する方向で改善していき、技官の一人一人にとって働きがいのある職場にするために不断的努力を重ねることが重要である。

4-6 極端紫外光実験施設

高速で円運動する電子はシンクロトロン放射（SOR）と呼ばれる光を円軌道の接線方向に放出する。このSORは極端紫外からX線にわたる領域で他の方法ではえられない理想的な光であり、分子科学の重要な研究手段の一つである。このSORを利用する極端紫外光実験施設は大型研究設備とし

て建設され、1982年から研究施設として独立した。極端紫外光実験施設の光は15MeVの線形加速器と600MeVのシンクロトロンを入射器とする750MeVの電子ストレージリング（最高貯蔵電流500mA）より発生される。通常の偏向部からは数オングストロームのまた超伝導ウィグラーでは約2オングストロームまでの光を利用できる。この外直線部に挿入したアンジュレーターからは波長可変の輝度の高い純単色光が得られる。

極端紫外光実験施設では安定で良質の光を提供すると同時に各波長領域のSORを利用するための分光器ならびに観測システムの開発と建設を行い、現在下記の18組の観測システムを利用者に公開している。

BL1A（6-15A）	集光型軟X線分光器	内殻励起
BL1B（300-6500A）	1m瀬谷波岡型分光器	固体の吸収・反射・発光
BL2A（300-4000A）	1m瀬谷波岡型分光器	気体の吸収・発光
BL2B1（15-600A）	2mグラスホッパー型斜入射型分光器	固体の吸収と光電子分光
BL2B2（300-2000A）	1m瀬谷波岡型分光器	光イオン化反応
BL3A1（250-1500A）	アンジュレーター	光 CVD その他
BL3A2（100-1000A）	2.2m定偏角斜入射分光器	気体のイオン化
BL3B（300-4000A）	3m直入射分光器	気体の光化学反応
BL4A	分光器なし	表面光化学反応
BL4B	分光器なし	表面光化学
BL5B（20-2400A）	機器校正	標準光源、その他
BL6A1（40-3000μm）	マーチンパブレット型干渉計	固体の吸収・反射
BL6A2（80-6500A）	平面回折格子	光電子分光
BL7A（2-15A）	2結晶分光器	固体の内殻励起
BL7B（300-6500A）	1m瀬谷・波岡	固体の吸収・反射・発光
BL8A	分光器なし	光 CVD その他
BL8B1（20-400A）	2.2mローランド円型斜入射分光器	固体・気体の内殻励起
BL8B2（80-6500A）	平面回折格子	光電子分光

この研究施設では主として、①分光、②光電子分光、③光化学、④化学反応素過程、⑤固体・表面光化学、⑥光励起新物質合成、の6つの研究分野に力点をおいて、気相ならびに凝縮相の分子の研究を行っている。またストレージリングの電子ビームを用いて自由電子レーザーの研究も行い、1993年7月には295～305nmの紫外領域における発振実験に成功した。

1984年9月から所内外の利用を開始したが、利用件数は毎年増加し平成4年度は課題件数159件、利用延人数840名に達している。

4-7 大型研究設備

「高精度分光・超高速度パルス観測システム」

1. 時間分解スペクトル測定装置

昭和51、52年に製作したモード同期 YAG レーザーは使用に耐えられなくなったので設備を更

5 . 大 学 院 教 育

5-1 総合研究大学院大学

総合研究大学院大学は昭和63年10月1日に発足し、初代学長に長倉三郎岡崎国立共同研究機構長が就任した。更に平成2年1月廣田栄治教授が同大学副学長に就任した。分子科学研究所は、同大学院大学に参加し、構造分子科学専攻及び機能分子科学専攻を受持ち、平成3年3月には6名の第一回博士課程後期修了者を誕生させた。

その専攻の概要は次の通りである。

構造分子科学専攻

分子・分子集合体の構造の解析を通じて分子の実態を明らかにするとともに、静的及び動的物質像を確立することを目的とする教育研究を行う。従来の分光学的方法をはじめ種々の構造解析法や理論的方法による静的な構造研究に係る分野のほか、新しい動的構造研究方法等を駆使する最新の研究分野をも積極的に対象とする。

機能分子科学専攻

分子・分子集合体の持つ多種多様な機能を対象とし、主として原子・分子のレベルからその発現原理等の本質を明らかにすることを目的とする教育研究を行う。特に、分子・分子集合体の新しい機能を探求し、望ましい機能を有する分子・分子集合体の設計・創成に必要な基盤の開拓に関する分野をも積極的に対象とする。

これら2専攻は平成元年4月に11大学から11名の博士課程後期学生（外国人1名を含む）を初めて受け入れ、平成2年4月に10大学から11名、平成3年4月に9大学から10名（編入者1名を含む）、平成4年4月に7大学から11名（外国人1名を含む）を受け入れた。さらに平成5年4月には、15大学から20名（外国人3名を含む）の学生が新たに加わった。

これら学生に対して、毎年8人の教授、助教授による8単位の講義を実施してきた。学生はその講義を4単位とることが要求され、その他にサマースクール、学生セミナー、国際シンポジウム等に出席して視野を広めることが勧められている。必要とされる10単位をとり博士論文を提出して受理されたものは、平成4年3月に6名、9月に2名、平成5年3月に5名、9月に2名あった。

参考のために大学開設以来の分子科学2専攻の出願者数、合格者数、入学者数の推移及び各年度における入学者の出身大学の分布を表にして以下に示す。

1. 出願者・合格者・入学者数

年 度	構 造 分 子 科 学 専 攻			機 能 分 子 科 学 専 攻			備 考
	出 願 者	合 格 者	入 学 者	出 願 者	合 格 者	入 学 者	
平成元年度	3	3	3	10	9	9	
平成2年度	6	6	6	8	7	7	
平成3年度	6	5	5	7	6	6 (1)	()は内数で転入学生
平成4年度	8	7	7	7	7	6	機能分子1名入学辞退
平成5年度	12	12	12	9	9	9	
計	35	33	33	41	38	37	

2. 大学別入学者数

大 学 等 名	構 造 分 子 科 学 専 攻					機 能 分 子 科 学 専 攻					計
	元年度	2年度	3年度	4年度	5年度	元年度	2年度	3年度	4年度	5年度	
北 海 道 大 学								1			1
室 蘭 工 業 大 学						1					1
東 北 大 学						1					1
筑 波 大 学							1				1
山 形 大 学									2		2
千 葉 大 学		1									1
東 京 大 学	1	1						1	1	1	5
東 京 理 科 大 学					1		1				2
東 京 工 業 大 学								1			1
東 京 電 機 大 学					1						1
お 茶 の 水 女 子 大 学			2							1	3
中 央 大 学						1					1
早 稲 田 大 学		1	1								2
学 習 院 大 学						1					1
慶 應 義 塾 大 学								1		1	2
日 本 大 学								1			1
明 星 大 学					1						1
横 浜 国 立 大 学		1									1
富 山 大 学					1						1
信 州 大 学				1	1						2
名 古 屋 大 学						1	1				2
名 古 屋 工 業 大 学			1								1
豊 橋 技 術 科 学 大 学					1						1
三 重 大 学				1							1
京 都 大 学				2		1	2		1	1	7
京 都 工 芸 繊 維 大 学									1		1
立 命 館 大 学						1					1
大 阪 大 学	1	1		2	1					2	7
大 阪 府 立 大 学			1		1						2
姫 路 工 業 大 学							1				1
岡 山 大 学		1								1	2
山 口 大 学						1					1
九 州 大 学					1					1	2
熊 本 大 学					1						1
そ の 他	1			1	2	1	1	1	1	1	9
計	3	6	5	7	12	9	7	6	6	9	70

3. 学位取得状況

専 攻	平成3年度	平成4年度	平成5年度	計
構 造 分 子 科 学 専 攻	1	3		4
機 能 分 子 科 学 専 攻	5	4	2	11

5-2. 特別研究学生

分子科学研究所は、分子科学に関する研究の中核として、共同利用に供するとともに、研究者の養成についても各大学の要請に応じて、大学院における教育に協力し、学生の研究指導を行うことが定められている。(国立学校設置法第9条の2第3項、大学院設置基準第13条第2項、大学共同利用機関組織運営規則第2条第3項) この制度にもとづいた特別研究学生(旧称:受託大学院学生)は平成5年度前期は23名、後期は26名在籍しており、研究所のもつ独自の大学院制度(総合研究大学院大学)と調和のとれた発展を図りつつある。

尚、平成5年度までの年度別、特別研究学生受入状況を下に表で示す。

特別研究学生の所属別内訳

所 属	52~57	58	59	60	61	62	63	元	2	3	4	5
北 海 道 大 学	4				1	2	2	1				
室 蘭 工 業 大 学						1	1					
東 北 大 学	2	1	2	2				1	1			2
群 馬 大 学												1
埼 玉 大 学	1				1							
東 京 大 学	1	2	3	3	3	1	5	3	2	2	2	1
東京工業大学	4	2		3	2	2	1	1				
お茶の水女子大学	1		2	1							1	1
横浜国立大学	1											
金 沢 大 学					1	2						
新 潟 大 学					1	1					1	1
福 井 大 学	2											
信 州 大 学											1	1
岐 阜 大 学												1
名 古 屋 大 学	12	6	4	4	3	1	6	5	4	5	3	2
名古屋工業大学	2			1	1	1	1					
豊橋技術科学大学	1	1	2	3	3	2	4	6	3	3	2	
京 都 大 学	2			1	1	1		1	2	2		4
京都工芸繊維大学				2	1	2	1					
大 阪 大 学	5	5	3	2	1	1			2	2	2	1
奈良教育大学												1
奈良女子大学			1									
広 島 大 学			1		1	2	6	5		1	1	1
山 口 大 学	1											
愛 媛 大 学	2									1		
高 知 大 学										1	1	
九 州 大 学	2			1	2	2	1	7	8	5	4	1
佐 賀 大 学					1						2	4
熊 本 大 学		1	1	1	1							2
東京都立大学	9	1	1	1	1	1	1	1	1			
大阪市立大学	1			1		1						
慶應義塾大学						1	1	1	1			
上 智 大 学	1											
東 海 大 学					1							
星 薬 科 大 学							1					
早 稲 田 大 学	1											
計	55	19	20	26	26	24	31	32	24	22	20	24

本書は、分子研で行われていた研究手法で行った各研究分野についての総点検である。

6-1には分子研の発表論文数の推移を示した。その中で、分子研が研究分野と論文数の関係について述べている。

点検・評価と課題

6-1 論文の発表状況

分子研では毎年Annual Review (年次報告) を発行している。その中で、分子研の論文のリストを掲載している。

6-1-1 発表論文数

発表対象期間	ANNUAL REVIEW	論文数	総論文数
～ 78.8	1979	18	18
78.9 ～ 79.8	1979	7	25
79.9 ～ 80.8	1980	31	56
80.9 ～ 81.8	1981	28	84
81.9 ～ 82.8	1982	34	118
82.9 ～ 83.8	1983	29	147
83.9 ～ 84.8	1984	36	183
84.9 ～ 85.8	1985	31	214
85.9 ～ 86.8	1986	45	259
86.9 ～ 87.8	1987	45	304
87.9 ～ 88.8	1988	39	343
88.9 ～ 89.8	1989	59	402
89.9 ～ 90.8	1990	50	452
90.9 ～ 91.8	1991	23	475
91.9 ～ 92.8	1992	41	516
92.9 ～ 93.8	1993	31	547

6. 点検・評価と課題

本章は、分子研で行われている研究とその評価について、関連資料を提示するとともに分子研独自の
方法で行った各研究分野についての検討，評価等をまとめたものである。

6-1には分子研の発表論文数の推移と最近アメリカの雑誌に発表された論文の引用回数データーを
示した。6-2，6-3は分子研独自で実施した点検・評価及び将来計画策定に関する諸活動とそこで行われ
た議論，提言，評価をできる限り忠実に報告したものである。

6-1 論文の発表状況

分子研では毎年Annual Review（英文）を発刊し、これに発表した全ての学術論文のリストを記載し
ている。

6-1-1 発表論文数

編 集 対 象 期 間	ANNUAL REVIEW	原著論文の数	総説等の数
～ '78.8	1978	25	13
'78.9 ～ '79.8	1979	55	7
'79.9 ～ '80.8	1980	85	21
'80.9 ～ '81.8	1981	114	24
'81.9 ～ '92.8	1982	149	14
'82.9 ～ '83.8	1983	177	29
'83.9 ～ '84.8	1984	153	26
'84.9 ～ '85.9	1985	196	31
'85.9 ～ '86.8	1986	207	45
'86.9 ～ '87.8	1987	287	42
'87.9 ～ '88.8	1988	247	39
'88.9 ～ '89.8	1989	281	60
'89.9 ～ '90.8	1990	320	60
'90.9 ～ '91.8	1991	260	23
'91.9 ～ '92.8	1992	303	41
'92.9 ～ '93.8	1993	298	41

6-1-2 引用状況

論文の引用状況に関しては、Science誌（258, 565（1992））、（日本の科学特集号）に最近10年間の統計が発表されている。Basic Science in Japan, “The most productive and most cited institutes, 1981-1991” と題した表で、1000報以上の報文を出している研究機関（Physical Sciencesの項）は、

	1 報当たりの 平均引用回数	出版論文数
分子科学研究所	9.89	1,471
日本電信電話(株)研究所	8.50	2,400
東京大学	8.22	10,982
京都大学	7.05	8,853
大阪大学	6.54	7,549
理化学研究所	6.50	1,439
東京工業大学	6.49	6,037
名古屋大学	6.29	4,851
東北大学	6.27	6,797
筑波大学	6.09	2,784
広島大学	5.58	2,666

となっており、分子科学研究所の論文の引用回数は第1位である。

6-2 将来計画ワーキンググループの報告

分子研は創設以来18年を経過し、分子科学研究の将来について真剣に検討すべき時期に来ている。そこで分子研の将来計画の策定にあたり、まず分子科学研究の国際的な動向の把握、その中における分子研の位置付けと研究の評価、これらのうえにたった今後の分子研としてあるべき姿等、主に研究面について自由な意見交換、議論を行うことが必要と考えられた。自由な議論の場として、平成5年6月、所長への諮問委員会を設けた。

分子科学を5つの研究分野に大別し、それぞれについて所内、所外同数の当該分野の研究者で構成したワーキンググループを設けた。ワーキンググループの委員の方々と会の開催状況は次の通りである。尚、所長はオブザーバーとして随時出席した。

1. 理論分野（理論研究系に対応）

開催日 平成5年7月31日, 8月19日, 9月29日

委員 岩田 末廣（慶應義塾大学理工学部教授）

北原 和夫（東京工業大学理学部教授）

中村 宏樹（分子研教授）

大峯 巖（分子研助教授）

2. 分子科学分野（分子構造研究系及び電子構造研究系に対応）

開催日 7月20日, 9月29日

委員 広田 襄（京都大学理学部教授）

茅 幸二（慶應義塾大学理工学部教授）

浜口 宏夫（神奈川科学技術アカデミー研究室長）

加藤 重樹（京都大学理学部教授）

吉原経太郎（分子研教授）

北川 禎三（分子研教授）

加藤 立久（分子研助教授）

松本 吉泰（分子研助教授）

3. 物性科学分野（分子集団研究系に対応）

開催日 8月24日, 10月2日

委員 斎藤 軍治（京都大学理学部教授）

十倉 好紀（東京大学理学部助教授）

丸山 有成（分子研教授）

鹿野田一司（分子研助教授）

4. 極端紫外光科学分野（極端紫外光科学研究系及びUVSOR施設に対応）

開催日 8月28日, 9月25日

委員 小谷野猪之助（姫路工業大学理学部教授）

菅 滋正（大阪大学基礎工学部教授）

宇理須恒雄（分子研教授）

小杉 信博（分子研教授）

5. 相関領域・錯体化学分野（相関分子科学研究系及び錯体化学実験施設に対応）

開催日 7月29日

委員 吉田 寿勝（大阪府立大学総合科学部教授）

菅原 正（京都大学教養学部教授）

中村 晃（分子研教授）

磯邊 清（分子研助教授）

ワーキンググループでは全く自由な意見の交換をおこない、とくに統一的な議論としてまとめることはしなかった。しかし一応の討議項目として

研究の評価（とくに国際的評価）

研究の独創性

さらに力を入れるべき研究分野

研究の新しい方向

研究活動をさらに活性化するための提言

共同研究、国際協力についての提言

研究グループ間の交流

他研究機関との交流

研究費の投資、配分方針

研究者の任用方法について

支援体制について

大型研究施設について

等について意見を求めた。

各ワーキンググループでなされた議論の要約を次に掲げる。まとめ方は各ワーキンググループでばらばらであり、とくにそのスタイルを統一することはしなかった。

6-2-1 理論分野

(1) 制度・運営上の問題について

教官が研究に十分専念出来、研究効率を上げる事が出来る様に委員会・雑用を減らしていく事が何よりも大事であろう。実際にこれを実行していくのはなかなか困難の多い事であろうが、これは、特に教授の場合に焦眉の急であると思われる。例えば、今迄にもしばしば議論された事であるが、(i) 副所長を設ける、(ii) 英語に堪能な事務職員を採用する、(iii) 秘書の正規職員化を進める、等が考えられる。また、研究の活性化を促進する方策として、(i) サバティカル制度を導入する、(ii) 強制的に休養をとる、(iii) 分子研独自に外国人ポスト・ドクを採用する、(iv) ビールを飲みながらの研究発表会を設ける、等が考えられる。なお、理論特有の問題として、近年のワークステーションの必要性等に伴う理論への予算配分の見直し（増額）及び研究室スペースの見直しが検討されるべきであろう。人事面からの活性化も非常に大事である。何よりも、優秀な若手研究者を採用し自由な発想での優れた研究を伸ばしていける様にする事が一番大事である。大学院の奨学金制度を充実し国内外の優れた学生を受入れる事も重要である。

最後に、分子研は人事の流動性で輝かしい実績を有しているので、「人事流動率」の様な量を定義して予算・人事要求等に活用していったらどうか。

(2) 理論研究の発展方向について

分子科学の理論は実に幅広いが、大雑把には電子状態、動力学、統計力学（凝縮系の物性と動力学）に分類されるであろう。現在（及び現在迄）の理論研究系（電子計算機センターを含む）の研究内容及び活動に対する評価は別途外部委員によって行われるので（6-3 参照）、ここでは上記各分野における将来の発展方向についての討議内容を要約する。電子状態理論については今後励起状態の研究が益々重要になるであろう。そして、その基本である電子相関を理解する為の努力がもっとなされるべきであろう。また、今迄どちらかと言うと電子計算機の進歩に伴う技術的発展に目覚ましいものがあったが、今後はそれらと共にもっと概念化を計る研究が必要である。動力学理論は電子状態理論に比べまだ揺籃期にあり、反応動力学の基本メカニズムの理解と理論の構築をなお一層進めていく必要がある。将来は、ミクロの動力学が巨視的系の現象にどの様に発現していくか、ミクロとマクロの繋りを解明する事が重要になるであろう。凝縮系についてはその多様性から、非平衡系、溶液系、界面、生物系等の新しい分野への挑戦が一層大事になるのであろう。最後に、実験との「真の協力」を有意義に進めていくべきである。ややもすると実験から下請け的協力研究を要求される事があるが、そうではないむしろ実験を先導する様な協力をすべきであろう。

(3) 日本における理論化学充実の必要性について

後継者育成の問題はかなり深刻である。東大と東工大の理学部化学に理論研究室がないという事実にかかなり如実に現れている様に、「理論」に対する認識が必ずしも十分ではないのではないだろうか。因みに現在実施されている「化学反応理論」の重点領域の計画班員25名の中なんと16名が工学博士である。一頃に比べて理論研究室の数が若干増加したのは事実であるが、依然として理学博士を育成出来る所は大変限られている。もっと深刻な問題は理論研究を行うのに十分な基礎教育が必ずしも十分でないと思われる点である。これには学部での（あるいは高等学校での）化学の教育の改善が必要なのではないかと思われる。物理化学（あるいは化学物理）にとっては物理学科との広範囲な交流がもっと促進されるべきである。

(4) 分子研電子計算機センターの役割について

言うまでもなく、理論研究にとって電子計算機の果す役割は非常に大きい。特に、分子科学理論における分子研電算センターの役割は大変重要である。ワークステーションの普及とともに一部理論計算は各研究室で実行されう様になってきた。しかし、計算の種類によっては大型スーパーコンピュータの高速処理性能及び大容量メモリーに頼らなくてはならないものが沢山ある。一方、ワークステーションで処理出来るものであっても、ネットワークの活用及び大並列化によって斬新な研究を推進していく事が出来る様になる。どちらのスタイルでも通常的大型計算機センターでは実行出来ない様な超大型計算を可能にし量的のみならず質的にも新しいブレイクスルー的研究を奨励・推進していく事が大事である。分子研電算機センターにおいては、常に最先端の大型スーパーコンピュータと並列計算機システムの両者を維持・活用していく努力を続けるが、最大の悩みは人員不足である。研究を犠牲にした教官の努力や技官の献身的貢献にばかり頼っている訳にはいかない。ユーザー、特に理論研究系の色々な形での援助は不可欠である。しかし、やはりそれでは問題の根本的解決にはならない。将来是非とも人員増を検討していく必要がある。

6-2-2 分子科学分野

(1) 分子研の18年と他の大学との相対的な関係の変化

過去18年間は分子研は分子科学を引っ張ってきたが、現在は大学と分子研の差がなくなった。これからの分子研の方向は、他ではできない大きな装置を建設するとか、ユニークなアイデアの仕事をするとかではないか。paperの“数”ではなく、研究の“質”が要求されている。

第一期の助手はやりたかったことの実現の為に、論文を発表する必要のない3年間のセットアップ期間が許された。分子研全体に、それだけの余裕があった。今後も研究を引き続き進展させて、もう一段階上に日本の研究を引っ張っていく先導役としての分子研の役割がある。

(2) 分子研の中の研究に対する意識など

総研大への参加によって、安価なマンパワーを得たことと、大学院生の教育に手を取られることによって、分子研の意識が、大学並の意識に落ちてきている。労働力が必要ならポスドクを採用することが良い。研究のプロフェッショナルに徹することが望ましい。

学生が来ることによって研究が進んだ。

海外との交流事業など忙しくやり過ぎている。研究に費やす時間の絶対量が減少している。研究にもっと時間を使え。

コンファレンスを開催するよりも、国際共同研究で、実質的なディスカッションと研究ができるほうがいい。若い連中が中心のコンファレンスを開く。

—昨年開いた「若い人のコンファレンス」では、テニアちょっと前という連中を中心に、30分のTalkの後、1時間のDiscussionという形式をとり、大変勉強になった。

(3) 予算配分

三年間は若い人にだまって金を投入することが必要。予算の絶対量が不足していることが問題。研究所全体枠は小さくなっていないが、流動部門や錯体施設などが増加したために、一部門当りの予算が減少している。任務の終わったと思われる流動部門から閉じる。

分子研の良い面は、若い人が独立できることだ。また助手など人事の交流が盛んなことだ。助教授層はユニークな仕事をしてきた。金のサポートは、賭けをすることが必要。

分子研ではお金の配分は所長の権限で行なえる。それならば責任の所在がはっきりしているし、一箇所に予算を集中させることができる。

(4) 分子研の中での研究者間の交流

分子研のなかで横のつながり、交流が無くなってきている。とくに若い助手層の交流が少ない。その上の層からも心掛けるべき。

(5) 研究体制

分子研らしいテーマというものがあるか？ 大学で考えるテーマ選択と分子研のそれと同じで良いのか？

そのように考えると方向が限定される。研究の形態ではなく、どのように研究を進めていくかを考えるべきだ。

各個人の興味で研究をやっていけばよいが、いい仕事が出たらそれを伸ばす方向で人もお金も集中して付けてサポートする体制も考えるべきである。現在の分野設定は、なるべく重ならないようにという方針だが、その反対もある。特徴ある研究を推進するために、施設を作ることも考えられる。

特別部門の体制をとる場合には責任の所在を、明確にしておく必要がある。その方向は大学の講座制と同じだ。特別サポートを受けられる可能性の範囲を助教授にまで拡げておくこと。

所長の集中責任で行なうべきだ。委員会を開いてでることではない。評価機構がしっかりしていないとだめだ。

ベル研の方式が分子研には適している。研究者が集まって議論を重ねながら新しいことをやって、終われば解散する。この方式では、お金が必要だが、そのお金をいい人材で使っていくことが重要だ。

人の問題は大きい。助手の制度を再検討して、ポストクを増やせないか？

(6) 研究テーマなど

これまで分子研ではレーザーを用いた研究に一つの特徴があったが、現在では、装置、設備の面で一般化して、分子研以外にはなかったような、またはそれ以上のレーザーが市販されるようになっている。それらの装置が一般化するようになったときどうするかを考えることが遅れた。特色を出すためには時間分解をするか、特別な波長領域の測定をするかが必要になっている。研究そのもののアイデアで勝負しなければならない。

分子線を用いた研究は大きく発展したが、日本では立ち遅れた。分子線は化学反応の分野で依然

重要であるので、今後もその発展に寄与して欲しい。

分子研は電子論家と振動論家と一緒にいて、交流できるところだ。本将来計画ワーキンググループでは「分子構造」と「電子構造」の2つの系と一緒に議論している。研究の独立性は必要だが、ここでしかできない協力関係がこの特徴を伸ばすために必要だ。学生の意識では、最近分野を越えた相互作用が減っている。

(7) 今後期待できる分野

気相で蓄えた知識を凝集系に発展させることで、もっと現実的な描写ができる。昔の連続体のモデルではなく、凝縮系の反応や分子間相互作用のspecific descriptionが可能になってきている。理論も実験も事実そのような方向で研究が進んでいる。

粒子間の弱い相互作用が化学を支配している。一点対一点ではなく多点对多点の相互作用、とくに、大きな分子における相手の認識には多点相互作用が重要。

クラスターは凝集系と原子分子の中間で、独立した中間相としてのクラスターが興味深い。揺らぎの問題との関係もある。また有機化学の不整合成などの問題は溶媒の働きが絡んでいる。錯体も面白い。複雑な系だが実際に機能を持つので、その指導原理があるはずだ。

生物関連の方向は大変重要な問題だ。例えばNOの様な簡単な分子も神経伝達物質として生物にとってたいへん重要であるが、そのメカニズムはまだよく解っていない。

生体関連の研究はこれから重要だが、中途半端なモデル系としての生物系の扱いではこれからはだめだ。もっと化学の人が生体分子に興味をもてばよい。

工学部の中には面白い研究があるが、分子研があえて工学的な研究を看板に掲げることはない。やはり純粋科学研究のできる研究所として、今後も、発展すべきである。

6-2-3 物性科学分野

分子研が創設されてからの約20年間に物性科学の分野ではめざましい発展があり、数多くの新しい物質の発見に伴われて多数の新しい現象が見い出され、いくつかの新しい概念の確立をめざした努力が進められてきた。それら新物質群は有機電導体（電荷移動錯体）・超伝導体や導電性（機能性）高分子、酸化物超伝導体、又最近では炭素クラスターなどである。これらの進展に対して、分子研においては、主として化学の立場から有機物質の導電性、あるいは磁性研究の面で大きな寄与をなしてきたと評価できる。しかし光物性や物質合成の面では十分といえなかったし、又、分子研で芽生えたものを十分に伸ばしていくという面でも不十分であった。又、分子研ではこの分野の理論の専門家の数が極端に少なく実験家との対話、共同研究という面では十分とはいえなかった。このような反省に基づいて、又今後の物性科学の発展の方向を考慮しつつ分子研のこの分野について考えてみる。

まずこれまでの経過からもわかるように、これからも物質づくりはなんといってもこの分野での基本であろう。これまでは分子研では物づくりと物性とが比較的分離した形で進められてきたが、今後はできるだけ両面が一体化した形をとることが望ましい。又、物づくりの体制としては、現在の研究室制は不利であり、一人のボスの下に興味を同じくする（同じ目的を持つ）グループがいくつかに集まって、共通の目標を達成するための工場のような組織も場合によっては必要と考えられる。これを一つの系内につくる場合も、系にわたって、さらには系外につくことも考えられる。又、物づくりに限らず、このようなチームをプロジェクトに応じて編成できるような柔軟性が欲しい。

系外にこのような物質合成を中心とした組織をつくる場合には、合成した物質の評価、構造や物性の解析さらに可能ならば理論的な解析や設計もできるような一体化した組織を構築することが望ましい。現代の物質科学では、何度も指摘したように物質及びその合成が出発点となると同時に、それらを直ちに評価、解析できること、さらにはこれらの解析に最適な装置の開発を行う事も極めて重要である。しかし、そのような設備、人員を部門単位で考える事は不可能に近い。その点を解決するために合成を中心とした主スタッフ、評価、解析、測定を行う支援スタッフと装置類を効率よく配備した、いわゆるセンター、例えば“分子機能研究センター”のような組織をスタートすることは大変望ましく、これは分子研だけでなく他大学研究者にとっても大変有効であろう。但し、これを設置するためには現存の施設、特に低温センター、機器センター、装置開発室の役割・機能とどのように調和をとるかを慎重に考える必要がある。

さて、今後発展が期待される分野（内容）としては、具体的には室温超伝導体、室温分子強磁性体などが挙げられる。その様な物質にたどりつくためにはあまり近距離的な視野には立たないで、特に若い人はだれもやっていないような物質をねらい（例えばヘテロ原子化合物、特異な金属錯体などに宝庫があるかもしれない）、5～10年間位ががんばってみる必要がある。その際導電性だけでなく光物性、磁性などの研究にも十分配慮する必要がある。特に超伝導と磁性の絡み合いの問題、又、分子研の特徴を生かして孤立分子と分子性固体とをつなぐような研究も近未来的に重要なテーマとなろう。

物性理論の面でこれまでの分子研はいかにも手薄であった。人員、分野の面（部門）で増強する必要があり、又、実験との交流にも十分配慮する必要がある。そのためには分子集団研究系内に理論の部門又は研究室をおくことも考慮すべきである。

博士研究員（日本人、外国人）の数ももっと増やすべきである。又、皆無に近い女性研究員の問題も考えてみる必要がある。

以上まとめると、組織の面では、大研究室制の導入、センター構想の実現、物性理論部門の充実、博士研究員の充実などが検討すべき点であり、学問的内容としては、少し長い視野に立ったホームラン性仕事を追求する事、物質づくりを中心とした体制と考え方の展開、理論研究の増強、光物性、磁性に関する研究の充実、などが重要と考えられる。

最後に、異なった視点からの基本的に重要な指摘が外部委員の一人からなされた。それは現在の分子研には研究に対する熱意、努力の量の低下が痛感されるということで、例えば、それは土曜日に研究所にきて仕事をしている研究者の数がいかにも少ないという事実を示されているとの指摘であった。

6-2-4 極端紫外光科学分野

大別して、(1) この10年間の極端紫外光分子科学の世界的発展の状況、日本における発展と国際的位置づけ、分子研の果たした役割とその評価。(2) 今後、力を入れるべき研究分野と分子研に期待されるもの。(3) 支援体制、大型研究施設の問題、その他。について議論した。以下概略を報告する。

(1) 極端紫外光科学分野の発展と分子研の果たした役割

UVSORが建設された1983年頃に、世界的にも分子科学への極端紫外光の本格的利用がスタートしたとも言っても良いが、この10年間でもっとも急速に発展した分野のひとつである。EXAFS、PSD、内殻励起、超励起状態、Site-specific-fragmentationなどの概念や現象の研究が急速に発展した。また、超伝導材料、C₆₀などの各種の新物質の光物性研究の他、しきい光電子分光、遠赤外分光、ジェットノズルの利用、コインシデンス技術、シングルバンチオペレーション、アンジュレータ、自由電子レーザなどの、測定、計測、光源技術が開発された。これらは分子研が世界に先駆けて、あるいは同時期に着手したものである。その後、世界的なこの分野の急速な発展において、最初に着手はしたものの、あとで追いつかれ、追いこされたケースが多く、必ずしも頂点にたつて牽引したとは言えないが、分子研の果たした役割は極めて大きい。また、放射光による遠赤外分光は国内では分子研でのみ利用できる技術であり、世界的にもこれが可能な施設は極めて少ない。

(2) 今後力を入れるべき分野と、分子研に期待されるもの

分光技術に力を入れる必要がある。特に内殻励起領域の高分解能分光、アンジュレータと組み合わせた価電子領域の高分解能分光、遠赤外分光が重要である。高分解能分光については、気相のみならず、固相の研究においても重要となる。またこれらと光電子分光を組み合わせた、高分解能光電子分光装置も開発整備する必要がある。高分解能分光により、振動準位を選択して種々の緩和過程を解析できる。世界的趨勢からみて、分解能としては5000以上が必要である。現在分子研の技術は1000以下であり、SX700などの市販の装置を購入するか、内部の技術力を高めて内製するかは判断が必要である。市販装置を購入する場合は、1.5 から2億円の費用が見込まれる。アンジュレータについては、フリーチューニング技術を開発して分光装置の駆動と同期させる必要がある。高分解能分光としてのみならず、表面光反応などの照射応用においても分光特性が今後重要で、ニーズが高い。また、円偏光アンジュレータなど、特徴のあるアンジュレータを設置し分子科学に応用することも必要であろう。遠赤外分光応用は小型リングに適しており、また、気相、表面、固体物性の分子科学の広い分野において、遠赤外領域が未踏領域として認識されていることから、特に分子研において今後、開発が期待される技術である。以上、指摘された種々の技術の開発にあたっては、分子研内部のより多くの分子科学研究者の利用を呼びかけるとともに、外部ユーザからも幅広く意見を聞いて装置開発を進めることが望ましい。それにより外部からの支援も期待できる。

(3) 支援体制、大型研究施設の問題、その他

(a) 最近、UVSORにおける所内外の研究者間でコミュニケーションが十分でなく、全体的に熱気に欠けるきらいがある。固定ユーザーばかりになるとどうしても沈滞化しやすいので、新しいユーザの活動を取り込むことが必要である。

- (b) UVSOR の場合、ユーザーに対する旅費の支給人数や回数が高エネ研と比較して少ない場合が多いので利用しにくい。
- (c) 研究系と施設の間でのコミュニケーションを良くすることが支援の大前提である。ビッグサイエンスの場合、多数の人の協力がどうしても必要なので、情熱や熱気をベースにした研究協力体制づくりが必要である。
- (d) 支援の中心的役割を期待されている技官の人達を対象として、放射光学会への出席、さらには発表の機会を作り他機関の人と交流する機会を増やすことなども重要である。
- (e) 国際交流については、日英、日韓などの成果もあるが一層実質的な実りのあるものにするための努力が望まれる。

6-2-5 関連領域・錯体化学分野

1. 分子研創設以来、この18年間におけるこの分野の世界的発展

有機化合物及び無機錯体の合成を主とした分野では、分子研の創設と前後して世界的に大型測定装置（固体超電導 NMR, ESR, X線解析, マススペクトロメーター, EXFAS, XPS, ラマン, STM, 迅速反応測定装置）の普及と新しい技術（たとえば、時間分解、顕微測定、NMR や ESR における二次元、三次元測定法等）の開発、コンピューターの飛躍的な発展、不安定物質の取扱いの技術の向上、逆に不安定化合物の安定化手法、理論化学と実験化学との緊密な連係等が見られた。このため両分野とも内的小および外的要因からしても大きな変貌を遂げざるを得なかった。つまり、より精密な化学へ深化するとともに、巨大分子や分子集合体へ研究対象が広がっていったこと、両分野とも異分野との交流が進み、新しい境界領域が生まれ発展したことである。

特に生命科学や物性科学との境界領域に注目が集まり、生物無機および生物有機、物理有機化学、均一系触媒化学等は学問分野として認知されるまでにいたっている。このため錯体、有機金属化学や有機化学における従来の概念や物質も新しい視点から見直され、大きく発展したものもある。それらを含めて、世界的に見い出された新しい概念、現象、方法、物質等をあげていくと次の様なものが考えられる。

i) 概念、方法

概念的なものとして、分子軌道理論や配位子場理論の精密化と有機反応や錯体反応への適用、電子移動理論、有機分子認識、アイソローバルアナロジー、新しい結合や相互作用の概念（たとえば金属-金属および金属-配位子間結合の多重結合性、分子間強磁性的相互作用、分子内磁気スピンのトポロジカルな相互作用）などがあげられる。

新しい方法や手法としては、分子軌道や反応ポテンシャル面の計算における *ab initio* 法の開発、角重なり模型による配位子場計算法の開発の様な物理化学的なものがあげられる。

合成反応では立体選択的反応、不斉触媒反応、天然物合成における逆合成法（レトロシンセシス）の開発、自己集合化反応、鋳型反応、極性変換反応、不活性小分子の活性化（水の酸化、 N_2 , CO_2 の還元、飽和炭化水素の官能基導入等を含む）、新型のオレフィン重合反応（カミンスキー触媒、メタセシス重合等）などがあげられる。これらの他に物理的手段による新しい方法：

超音波、超臨界状態を利用した合成法、高電圧の放電等を利用した気相合成法（有機金属化合物、フラーレン類の合成に用いられる）、低温マトリックス法（不安定化合物の単離）も導入された。

ii) 新しいインパクトのある物質

C_{60} をはじめとする各種フラーレン、無機物質として BaLaCuO 系等の各種銅酸化物高温超伝導物質が代表としてあげられる。その他、有機および錯体分子による強磁性体（ポリカルベン、ニトロニルニトロキシラジカル誘導体、 $[Fe(C_6Me_6)_2][TCNE]$ ）がある。有機化学では、生理活性物質の合成（制ガン剤；シスプラチン、プロスタグランジン等）、酵素およびタンパク質活性中心のモデル化合物（各種ヘムおよび非ヘムタンパクの活性中心モデル、光合成における金属酵素モデル、大環状分子（ホスト-ゲスト分子）およびスプラ分子、有機電導分子一次元化合物等）があげられる。

高機能性の錯体として、飽和炭化水素を活性化する Rh および Ir 錯体、オレフィン重合触媒としてのメタロセン系有機金属錯体、二酸素、二窒素、二水素錯体、あるいは酸化物、硫化物、窒素化合物等の無機多面体クラスター、ヘリカルキラリティーを持つ有機及び無機化合物等もこの分野でインパクトのあった化合物である。

極端に複雑な巨大分子を対象にした研究：疎水性膜タンパクである光合成細菌の構造あるいは窒素固定酵素の活性中心であるモリブデン-鉄イオウクラスターの中心構造の精密化、さらにはヘムタンパクおよび酵素活性中心の挙動の解明等も注目を集めた。

2. 日本におけるこの分野の発展とその国際的位置づけ

有機・錯体化学の大部分の領域では常に物質の発見が研究をリードしていると考えることができる。合成方法が確立されたあとに物質の化学的性質、物理的性質等の解明がおこなわれ、分子の特性を利用した効率的な物質変換法が開発されることになる。

日本の有機・錯体化学における理論化学は分子軌道計算、反応のポテンシャル面の解明、配位子場理論の発展に大きく貢献し、世界をリードする研究が報告されている。とくに有機金属錯体を用いる均一系触媒反応の理論的解明、錯体化合物の電子遷移と構造との相関に関する研究等があげられる。

立体選択的有機合成および不斉触媒反応の分野から、世界的に評価の高い研究が続出している。特に野依良治、高谷秀正の研究成果は著名である。これらは不斉配位子を有する金属錯体によって金属イオンへの基質配向を規制したもので高効率の選択率の良い反応が開発された。

さらにランタニドやタンタルのメタロセン（中村兄）あるいはアルミニウムのポルフィリナ錯体（井上祥平）を触媒に用いたオレフィン重合反応は世界的にオリジナリティーの高いものである。

バイオミメティック関係ではタンパク分子、ホスト-ゲストの分子、ポルフィリン分子、環状化合物分子を用いた分子認識の研究が行われ新概念を構築しつつある。酵素およびタンパク質の活性中心モデル化合物の合成についてはいくつかの優れた研究が日本で芽を出しつつある。たとえばヘモシアニン内の銅-酸素結合や反応性のモデル化（北島信正）、Mn 多核錯体を用いた水の光分解、アザマクロ環亜鉛錯体を用いた Zn 酵素（木村栄一）、オリゴペプチド Fe 錯体を用いたフェレド

キシンの活性中心のモデル化合物が合成されている(中村 晃)。

この分野は配位子合成が重要なファクターであり、有機合成との連携がうまく進むと、オリジナルな分野が切り開かれる可能性が十分にある。錯体を用いた不活性小分子の活性化についてもさかんに研究が展開されている。とくに金属に配位した二窒素配位子の反応性に関する研究(干鯛真信)、Ru錯体を用いた炭酸ガスの一酸化炭素への変換(田中晃二)、有機基質中の C-H, C-C, C-O, C-S 結合の切断あるいは生成に関する基礎的研究も大いに注目を集めている分野である。

有機・錯体分子強磁性体に関する研究では一連のポリカルベンが設計され、対応するポリジアゾ前駆体が多数合成され、世界をリードする研究が展開されている(岩村秀)。これは、有機基底多重項種の理論的解明、ESR 測定法とその解析、そして有機合成とがうまく結びついた研究である。またニトロニルニトロキシド安定ラジカルを用いた有機強磁性体の合成も質の高い研究である。また有機超伝導物質関係では BEDT-TTF 類縁体, M(dmit)₂ (M=Ni, Pd, Pt; dmit=C₈S₈) 誘導体等の合成、物性測定に関する研究も世界をリードしているといえる。

さらに溶液内反応の研究では溶液 X 線回折を用いた中間体の構造を直接決定した研究(大滝仁志)が注目される。炭素、硫化物、酸化物多面体クラスター分野では新しい構造をもつ化合物が次々と合成され、また金属イオン取り込み反応(柴原隆志)、立方体単位増減反応等(磯邊清)が見つかり、オリジナルなクラスター化学が育ちつつある。

3. 分子研が果たした役割とその評価

基底多重項である有機強磁性体の設計・合成に成功し、スピン整列した高スピン分子を出現させた。これは構造有機化学、物性理論、磁気スピン共鳴の物理化学、ポリマー化学を融合した質の高い、オリジナルな研究と評価される。また有機立体化学を制御する高機能遷移金属錯体触媒の開発が行われた。カチオン性の新規ルテニウム錯体等を用いた反応は非常に高い評価を受けている。また有機結晶中での分子間あるいは分子内水素結合を通してのプロトン移動とそれに連動した電子状態変化を組み込んだ系が開発されつつあり、物性科学へのインパクトが期待されている。

新しい有機電導体として、縮合複素環を有するドナーおよびアクセプターの開発研究では、非常に高い導電率を示す BTQBT (C₁₂H₈N₄S₆) が合成され注目を集めている。また、含窒素大環状配位子を持つ錯体の合成に早くから着目し、この分野の研究の先駆けをなし、異常原子価遷移金属イオンの安定化あるいは CO₂ の取り組みとその変換反応の先駆的な研究を行った。さらに有機金属化学とポリ酸化学、固体触媒化学を接点とする立方体積層型酸化物クラスターの合成を行い、立方体単位増減反応や、固体触媒反応のモデル化などに成功し、新しいクラスター化学の局面を切り開きつつある。

錯体反応の分野では二酸化炭素の固定、窒素サイクルの化学的解析が行われ、反応の中間体を逐次単離、構造解析する等、精密な反応解明が行われ、評価の高い研究となっている。溶液中のイオン及び反応中間体の構造解析や、超臨界状態での錯イオンの動的挙動の解明も行われつつある。中でもポルフィリン錯体を用いた反応中間体の構造解析は最近注目された研究である。

4. この分野で今後発展が期待されるもの

前述した様に、今後、増々大型測定装置の発展、高性能化、測定技術の開発、理論化学の深化、不安定および超短寿命化学種の取扱い技術の向上、情報のスピード化と広範囲化が進み、現在の境界領域の発展と新しい境界領域の発生を促す。その一方で各分野内での高度な精密化学が発展する。

- 1) 研究者の標的物質がきわめて複雑な構造をもつ分子に移行し、しかも機能をもった分子集合体、分子素子、超分子、人工酵素、人工タンパク質等の合成が行われるようになるであろう。
- 2) 固体物性の観点から、 $p\pi$, $d\pi$ および $f\pi$ 電子系、そして M-M 等の σ , π , δ 結合を利用し、しかも弱い分子間力を取り込んだ複合金属共役系の構築がなされるであろう。
- 3) 理論化学と測定法の進歩のもとで、より複雑でしかも化合物として興味ある有機および錯体分子の励起状態、超短寿命の化学種、あるいは遷移状態の化学が発展する。
- 4) 不安定化合物の取扱技術の向上、不安定化合物安定化の手法開発が進み、ラジカルや電子欠損化合物、異常原子価化合物、超ひずみ化合物等、異常状態にある化合物の合成分野が発展する。
- 5) 機能性材料たとえば光学材料、分子磁性体などを指向した金属錯体や有機分子集合体の開発が有望となる。

5. 分子研の運営方法、研究体制及び設備に関して

- 他の機関に比べて分子研では、教官人事及び人事交流が非常にうまくいっており、他の機関の理想とされている。助手の年限、助教授の教授への昇格禁止など研究進展に不利な点や困難点があるろうともこの体制は継続していくべきだ。徐々であるが分子研のやり方が全国に波及しつつある。
- 如何に分子科学が吸引力を持ち続けるか真剣に考えるべきだ。大学においても質の高い良い学生ほど化学バナレが進んでいる。化学の魅力を一般の学生などにもっと知らせる必要がある。物質を前面に出さない限り物理や生物との違いや化学の特異性を訴えることができない。
- 内部の人が研究に集中できる体制なり規模にする必要がある。共同研究やその他サービス業務は重点的なものは残してかなり整理する必要がある。
- 現在、相関・錯体が利用している大型・中型機器装置は国内の大学などと比べてかなり貧弱になっており、しかも研究者の増加にしたがって測定を申し込んでから実際の測定に取り掛かるまで 2 ヶ月もかかる状態になっている装置(X線結晶回折装置等)がある。そのため他大学の装置を利用せざるを得ない事態が起きつつある。このような状況は「魅力のある研究所」として問題となる。
- 九大の基礎有機化学研究センター、錯体実験施設の将来計画の動向は、相関領域研究系の将来計画と連動しており、三者の緊密な情報交換の場が必要とされる。また化学試料室はこれまでの研究の経歴から見て相関領域研究系に統合した方が良いと思われる。

錯体実験施設

- i) 国際的なラボにする。
- ii) 国内的なものを、国際レベルに底上げする。
- iii) 研究の評価を第一線の外国人にしてもらう。
- iv) 諸外国における学生の教育・研究体制の良い点を取り入れる。
- v) 流動部門を考え直す。

6. その他一分子研における研究分野

分子研の創設期において分子研で何を研究の対象としていくのかという事が問われたとき、以下の四点を赤松初代所長があげられておられる。

- 1) 分子の形成と変化に関する過程
- 2) 分子と光の相互作用
- 3) 分子を通じて行われるエネルギーの変換機構
- 4) 分子の設計および化学反応の設計に関する指導原理の研究

18年前と比べ、分子のとらえかたはかなり変化しているであろうが、現在でもなおかつ上記の四点のなかから将来の分子研の研究課題も出てくるであろう。相関・錯体では4)に力点を置き、しかも生命科学や物性科学と接点をもつ研究課題が重要になってくる。

6.3 所外の分子科学研究者による評価

6.2 に述べた将来計画ワーキンググループの個々の所外委員から各研究分野における分子研の研究の評価その他の意見が所長への親展の形で報告された。

さらに国際的な観点からの評価を得る目的で、上記の各分野について第一線で活躍中の著名な外国人研究者に評価、意見を求めた。依頼した外国人研究者は次の通りである。

理論	Prof. R. D. Levine The Fritz Haber Research Center for Molecular Dynamics, The Hebrew University of Jerusalem.
分子科学	Prof. M. A. El-Sayed Editor of J. Phys. Chem., Department of Chemistry and Biochemistry, University of California, Los Angeles. Prof. C. B. Moore Dean of Department of Chemistry, University of California, Berkeley.
物性	Prof. Dr. H. C. Wolf Physikalisches Institut der Universität Stuttgart.
極端紫外	Prof. Volker Saile Director of Center for Advanced Microstructures and Devices, Louisiana State University.
相関・錯体	Prof. H. D. Kacsz Department of Chemistry and Biochemistry, University of California, Los Angeles.

各外国人評価員は Levine 教授を除いて下に掲げた日程で来日、来所し、各研究分野の所内研究者とのインタビュー、意見交換を2～3日にわたって行った。各評価員による報告は親展の形で所長に提出された。

理論 (Levine教授)

面接日 12月6日来所の予定であったが、健康上の理由で訪日できなくなった。したがって面接予定者の研究業績資料を送付し、それに基づいて評価をしていただいた。

面接者 中村宏樹教授, 大峯 巖助教授, 青柳 睦助教授

分子科学, 電子構造関係 (Moore教授)

面接日 11月30日, 12月1日

面接者 吉原経太郎教授, 花菱一郎教授, 松本吉泰助教授, 鈴木俊法助教授, 富宅喜代一助教授

分子科学, 分子構造関係 (El-Sayed教授)

面接日 12月18, 19, 20日

面接者 北川禎三教授, 齋藤修二教授, 森田紀夫助教授, 加藤立久助教授

物性科学 (Wolf教授)

面接日 11月22, 23, 24日

面接者 丸山有成教授, 薬師久彌教授, 鹿野田一司助教授, 宮島清一助教授, 山下敬郎助教授,
森 健彦助手

極端紫外光科学 (Saile教授)

面接日 11月15, 16, 17日

面接者 宇理須恒雄教授, 小杉信博教授, 薬師久彌教授, 川副博司教授, 正畠宏祐助教授,
見附孝一郎助教授, 西尾光弘助教授, 鎌田雅夫助教授, 磯山悟朗助教授, 渡邊誠教授 (東
北大)

関連領域・錯体化学 (Kaeszt教授)

面接日 12月18, 19, 20日

面接者 中村 晃教授, 田中晃二教授, 磯邇 清助教授, 高橋 保助教授

以上の国内所外委員及び外国人評価員による評価, 意見は Confidential であり, これらすべてを公開することは適当ではない。しかし, 一般的な評価, 意見には共通するところが多くまたきわめて重要で貴重な多くの指摘がなされている。これらについては各評価員の許可を得て公表することにした。以下にそれらを掲載する。

6-3-1 理論分野

分子研理論部門の研究グループはそれぞれの研究分野で世界的に非常に高い評価を勝ち得ている。分子研における理論グループの中であえて問題点を探すとすると, 二つの問題点を挙げる事ができよう。

一つは, 実験家 (特に分子研内の) との共同作業が皆無とは言わないまでもそれほど多くないことである。理論研究グループが実験グループの便利屋になってはいけませんが, 実験グループに対して良い意味でのリーダーシップが十分発揮されてはいなかった。もう一つの問題点は, 若い人材の養成である。確かに優れた助手たちが理論グループに参加し, 果立っていった。しかし, 彼ら以外にも多くの若い人々が分子研の理論グループに滞在し, あるいは共同研究をしてきたはずである。それにもかかわらず, 十数年たってふりかえると分子研で育ったと言える研究者は期待されたほど多くはない。

(国内所外委員A)

Professor M. ITO

Director-General

Institute for Molecular Science

RE: 1993 Evaluation of the Department of Theoretical Studies

Dear Prof. Ito,

As per your request I am providing the following evaluation.

Particularly because the level of research carried out in the department of theoretical studies is so very high that I wish to address three specific issues that, I believe, require your attention. I will discuss each issue separately but, in fact they are not unrelated.

(i) The department has been and is prominent on the international scale. Yet over the last two years it has lost some key people. It is very clear that new people are to be brought in if the high profile that the department had, is to be maintained. It is now under strength in relation to the other parts of the Institute.

(ii) There is no question to my mind that an Institute of the high caliber of IMS needs to maintain an independent department of theoretical studies. A department where the practice of theory is the main activity, yet the long time success of IMS requires that its excellent experimental studies be coordinated with corresponding theoretical efforts. I am well aware that some of the other departments do carry out 'Mission Oriented' theoretical work. I do, however, wish to suggest that even better ties could be established between these 'Applied' theoretical efforts and the people of the department of theoretical studies. In particular, by making the theorists aware of the issues that the experimentalists are concerned with their own work will benefit. A very obvious example is the work on autoionization and predissociation carried out in the department of molecular structure.

(iii) In the United States, the subject of molecular assemblies, which has been long studied at IMS, is now rapidly growing under the new name of 'Nanotechnology'. Other departments at IMS are also doing work in this field. With the departure of professors Morokuma and Ohmine there is no longer a large theoretical effort at IMS in this direction. If plans are made to bring the department of theoretical studies back to its former size than this topic should perhaps be thought of.

In concluding I want to emphasize the continuing success and well-being of the department of theoretical studies and to note that the three general issues that I raised are a direct result of the high level of previous and current activities at the department and at the institute at large.

With the hope that you find my remarks to be of some use to you, and with best regards.

Yours Sincerely

R. D. Levine

上記英文の和訳

理論研究系の評価

あなたの求めに応じ次のような評価を行いました。

理論研究系で行われている研究水準が非常に高いという事から, 特に, 私は以下の3つの具体的な事項について申し述べておきたいと思います。これらは貴殿の注意を喚起するものと信じます。3つ

について個々別々に述べますが、勿論無関係ではありません。

(i) 理論系は今迄そして現在も世界の水準から見て卓越した存在です。一方、過去2年の間にキーとなる人達が系を去りました。系が今迄有してきた高い評価を維持し続ける為には、新しい理論家を招へいすべきであります。研究所の他の系に比べて理論系は現在定員に満ちておりません。

(ii) 私の考えでは、分子研の様な高い能力を有する研究所に理論の営みをその主たる活動とする独立した理論研究系の存在が不可欠である事に疑いの余地はありません。しかも、分子研の長期的視野での成功にはその優れた実験研究が相応する理論的活動とうまくつり合う事が必要です。私は、他の研究系で“具体的目的をもった”理論的仕事を実施されている事をよく知っております。しかし、私はこの様な“応用的”理論活動と理論研究系の人達との間にもっとよい連携が確立されうる筈だという事を申し上げたいと思います。特に、実験家が関与しておられる問題を理論家に知ってもらう事によって、実験家自身の研究が益を得る訳です。明白な例としては、分子構造の研究グループで行われている自動イオン化や前期解離の研究があります。

(iii) 米国においては、分子研で長年研究されてきている分子集合体の諸問題が“ナノテクノロジー”の名の下に現在急速に成長しています。分子研の他の系でもこの分野の研究が進められています。諸熊教授及び大峯助教授が分子研を去られると、この方面の理論研究が欠落する事になります。理論研究系を前と同じ規模に戻すのであれば、この様な分野に対する配慮が必要でしょう。

報告を終えるに当たって、理論系が引続き成果を上げ繁栄される様力説しておきたいと思います。と同時に、上に述べました3つの一般的事柄が理論研究系のそして分子研全体の今日迄の及び現在の高水準な研究活動の直接的帰結であるという事を特に申し上げておきたいと思います。

私の以上の意見が貴殿にとって少しでもお役に立つ様望み、筆を置きます。

敬 具

R. D. Levine

6-3-2 分子科学分野

分子研は、現在では国際的にも高い評価を受けており、創設期の教授らが各々の研究分野で挙げた研究業績がその基盤となっている事は疑い余地はない。とくに分子研を特徴づけているのは、創設期の若い助教授層が十分な研究費と完全な独立によって創造的な研究をした事であり、彼らの残した仕事は教授として確立した研究者ではなしえない新しい観点からの研究であり、真に創造的な研究だと評価できる。現在の分子研では教授層によって高い研究レベルが保持されているが、助教授層にいまひとつ以前の迫力が見られないのが残念である。人事選考委員会での“公平な”選考にも問題があるような気がする。ただ時流に従ったテーマを選び、データを出すだけで先端的研究と思ってしまう危険がある。国際的にも評価の確立した分子研は、教授層の研究だけでも、しばらくはその優位性を保持できる。助教授層のやる気のある人々を独断と偏見で選択して、十分な研究費と(技官などの)人手を与え、新しい研究に挑戦させることが、現在の分子研なら可能であり、また分子研にとって必要である。現在はいくつかの研究費源があり、教授層は比較的容易にそれらを手にする事ができるし、それができない教授は研究自体に問題があるとも解釈できる。分子研独自の研究費は、できるだけ創造的研究に注いでいくのがよいと思う。なんといっても、よい人が来れば優れた研究が可能で、そこにより環境を提供する事が鍵である。研究以外の雑用に意義を見だし、平凡な研究業績に終わった

優秀であった筈の研究者の例は、多く見られる。優れた研究者が研究に楽しさを見いだす研究環境作りを分子科学研究所に切望する。
(国内所外委員B)

分子研が過去18年にわたって果たしてきた役割を高く評価する。この時代の日本全体がそうであったように、欧米の水準に追いつき追い越せという合い言葉のもとに、集中的な投資で先端的な研究を効率良く展開するという、所期の目標がひとまず達成されたと判断するからである。次の段階は、独創的研究の目を育み、全世界をリードするような新しい研究分野を生み出すことを目標とするべきであるとする。研究の独創性は一に個人の資質によるものであり、分子研を独創的研究の場とできるかどうかは、如何に優れた個人を集め、その個人に独創的研究を行う環境を与えられるかどうかにかかっていると思う。つまり、分子研だから優れた研究ができるのではなく、ある個人がいるから優れた仕事は分子研から出るとというのが本当だと思う。この点から考えると、今の分子研の状況は心配である。助手、助教授クラスの若手の優秀な人材が必ずしも分子研にポストを求めることを希望していないように見えるからである。最大の理由は、科学の研究を楽しむという雰囲気、あまり外にもれて来ないからだと感じている。まず、所長以下分子研の現在のメンバーが、研究を楽しむ時間的、精神的余裕を作り出す努力をし、それが外部から見えてとれるようにする必要があると考える。分子研に「学問のロマン」が感じられれば、人材は自ずから集まると思う。
(国内所外委員C)

1. 分子研が今後も本当に日本における分子科学の中心として発展するためには、知的刺激に富み、はつらつとした活気のある雰囲気を持った研究所であることが第一に必要である。これだけの数の分子科学のプロの集団はどこにもなく、これからの人達が自由に交流して、お互いに切磋琢磨し、刺激しあって、良い学問的雰囲気を作れば、若い有能な研究者にとって魅力のある研究所であり続けられると思う。現状では、設立当時の熱気がなくなり、若い研究者が自分の専門に閉じこもりがちの傾向が見られる。確かに予算面その他、難しいことが山積みしていると思うが、原点に立ち戻って、若い研究者が熱気を持って研究に専心する雰囲気の研究所であることを期待する。
2. 何よりも良い人材を集める事が重要である。分子研の中心メンバーが本当の見識とリーダーシップを持って人事を行って頂きたいと思う。外部委員は責任を持てる立場にはないので、強いことは言い難いと思う。小さくまとまった秀才ばかりを集めると研究所は衰退する。個性的で野生味のある研究者が欲しい。また、人事に際して身内びいきをしないよう気を付けて頂きたい。
3. 助教授がスタートする際の初期投資だけは何よりも優先させて欲しい。若いときに自由に研究をスタートできることは若い人にとって何よりも魅力である。良い助教授人事をするためには分子研がこの魅力を持ち続けることが必要である。
4. 大学では学生に論文を書かす必要もあり、仕事の質に関して妥協せざる得ない事もある。分子研ではやはり高い質の仕事を維持して頂きたい。この点で総研大の学生のために仕事の質が落ちないように注意する必要があると思う。
(国内所外委員D)

分子科学研究所は、創設以来18年間わが国の分子科学のセンターとして重要な役割を果たしてきた。当時、欧米に比べて遅れていたレーザー等による研究も、現在では、世界のトップレベルに達しているが、これも分子研が牽引車の役割を果たしてきたことによると考えられる。しかし、現在、大学の研究室における実験設備等も当時に比べて向上し、少数の裕福な研究室を見れば分子

研との違いが小さくなってきており、分子研自体は新たな構想の下に、現時点より大幅な前進をすることが求められているように考えられる。

分子研の今後の発展の為には研究費の大幅な増額が必要であるが、昨今の状況の下では容易ではない。従って、研究体制や運営の問題に限って意見を述べることにする。

1. 分子研は、分子科学という自然科学の中でも限られた領域に属する研究者から構成されており、各研究者は共通の学問的基盤を持っている。これまでの分子研の研究スタイルは、各研究室が独立に研究を進めて来たが、その研究テーマは外国の有力研究室のそれに対応するものが多く少し幅が狭かったように思われる。今後、研究の規模と幅を大きくするためには、研究室間の交流、共同研究等を活発に行い、その中から新しいテーマを模索していく必要があるように思われる。その為には、コロキウムや位置づけ等を考え直す必要があると思われる。
2. 分子研は、若手研究者にとって、研究面での自己実現をすることが可能な場所として考えられて来た。それは、研究上の設備だけではなく、共通の学問的基盤をもつ同世代の研究者が多数いるため、大きな学問的刺激を受けることができるからである。その意味で、助手や奨励研究員クラスのスタッフを更に増やす必要があると思われる。
3. 分子研では、研究費やスタッフの配分等について、これまでは、各研究室に比較的公平に行われて来た。しかし、研究費の現状をみると創設当初より低下しているように思われる。今後の方向としては、有望な研究グループに特別推進研究相当の予算を集中的に投資することも止むを得ないと思う。その際、助教授クラスの若い研究者に目を向けて頂きたいと思う。我が国の現状では、若手研究者が大きな研究費を獲得することは稀なので、そのようなことが可能になれば、若手研究者にとっての分子研の魅力の一つになると思われる。また、それを決定する際の基準を明確にし、責任の所在をはっきりさせることが必要だと考えられる。

(国内所外委員E)

Department of Electronic Structure

This department has earned an outstanding international reputation for its work on the dynamics of molecular excited states and chemical reactions. This is evident from the invited lectures presented at major international conferences, from the many publications in the major research journals in physical chemistry, and from the large number of outstanding Japanese and international scientific collaborators and visitors. Both longestablished programs and new projects are of exceptional quality. The program is unusually broad and productive for its size. Dynamical time scales from 50 fs to minutes and molecular sizes from diatomics to photosynthetic reaction centers and large clusters are covered.

There have been many outstanding achievements across this spectrum of projects, for too many to review or even simply to list here. I find that the Annual Review of IMS presents that information as concisely as is scientifically useful. So here I will mention only a few of the highlights. The identification of ultrafast electron transfer processes controlled by the atomic motions within a molecule rather than the slower intermolecular motions of

donor and acceptor greatly advances our understanding of electron transfer processes and our potential for designing useful systems for energy storage. Results on photodissociation of molecules on surfaces and on photochemically induced reactions on surfaces are particularly novel and may lead to new schemes for photo-assisted catalysis. Real-time measurements of vibrational dephasing and the study of Raman echoes are providing information of the most fundamental nature on molecular dynamics. Light has been used to initiate and quench oscillatory chemical reactions. An insightful series of measurements on metal ions in water clusters reveals both photochemistry and fragmentation dynamics along with new understanding of ion solvation. There are many clever spectroscopies being practiced on dynamically important systems which have revealed new states and new processes and greatly enhance our understanding of molecular dynamics and reactivity. The quality and variety of work on clusters is truly remarkable.

The IMS was established and well funded to perform research at the leading edge of many areas of basic molecular science. It quickly established a reputation as a leading institution internationally. Consequently, it attracts outstanding scientists from all of Japan and around the world to participate in its research programs. To maintain this position, funding for new research programs must be provided at a level at least comparable to the leading institutions internationally. Good comparisons may be found locally in the fundamental research labs of NEC and Hitachi and internationally in Switzerland, Germany and in some places in the U.S. and U.K. Particular attention needs to be paid to the needs of new faculty professors and associate professors. The combination of lasers and molecular beam equipment necessary for work in excited state and chemical reaction dynamics can exceed \$1,000,000. for some areas, especially those involving ultrafast phenomena and clean surfaces. Currently, equipment for studying photochemical reactions on surfaces and for simultaneous state and scattering angle resolution of reaction products is incomplete.

A cornerstone of IMS success is its personnel policy. It provides the flux of new researchers and new direction typical of the best universities in the world and avoids the stagnations typical of most government research institutes of the world. This has been extremely important for the quality of the IMS program and has had a strong positive impact on the institutions at which IMS researchers take permanent positions. Key to this success has been the IMS tradition of making it possible for its researchers to do the best work in the world. As experiments in molecular science have increased in complexity and cost, the critical mass of researchers to perform a single experiment has increased just as the cost of the equipment has increased. Thus it would be valuable to increase the number of IMS postdoctoral positions to provide forespecially complex experimental programs. A more complete participation of associate professors in the outstanding international programs of IMS may help them establish their reputations more rapidly and access ideas from around the world more quickly.

As the structure and function of biological molecules begin to be understood at the

atomic level, biology is becoming a molecular science. The proximity of IMS and the Institute of Basic Biology provide a natural advantage for IMS in moving into this area. To initiate a world class program in structural biology or biological synthetic chemistry would require a major commitment. It would not be practical to accomplish by the appointment of one or two professors from each institute. The fields do represent outstanding opportunities for the future of molecular science.

C. Bradley Moore

上記英文の和訳

電子構造研究系

本研究系は分子励起状態や化学反応の動力学的研究において顕著な国際的評価を得てきた。このことは、主要な国際学会での数多くの招待講演や物理化学の主要な学術雑誌における多くの論文、ならびに、国内外の科学における傑出した共同研究者や訪問者の数の多さからも伺い知ることができる。長期にわたって確立された研究課題や新たな研究プロジェクトは両方とも例外的に優れている。研究課題は常に幅広く生産的なものである。動力学的な時間範囲は50フェムト秒から分のオーダーにまたがり、分子の大きさは二原子分子から光合成反応中心粒子やクラスターにまで及んでいる。

この広いスペクトルにまたがる多くの顕著な成果が数多く挙げられており、本状でそれぞれについて評価したり、あるいは、単にリストを挙げるだけでも困難である。これらの情報は分子科学研究所のAnnual Reviewに簡潔かつ有用な形で掲載されている。したがって、ここでは2, 3の研究のハイライトについてのみ言及しよう。超高速電子移動が電子供与体と受容体の分子間の遅い運動によるのではなく、むしろ分子内の原子の運動によって制御されているということが見出されたことは、電子移動過程の理解を著しく高めるとともにエネルギー貯蔵のための有用な系の設計に関する可能性を与える。固体表面上での分子の光解離や光化学的に誘起された表面反応に関する研究結果は特に新奇なものであり、光触媒反応における新たな研究に発展するであろう。振動運動の位相緩和の実時間測定とラマンエコーの研究は分子動力学のもっとも基本的な性質に関する情報を提供している。振動化学反応を開始させたり停止させたりするのに光が用いられてきた。水クラスター中の金属イオンについての洞察の深い一連の測定はイオンの水和についての新たな理解とともに光化学や解離ダイナミクスを明らかにしてきた。多くの巧妙な分光光学の手法を用いて、新しい状態や新しい過程の動力学的研究を行っている。これらは分子動力学や反応性の理解を大きく深めるのに役立っている。クラスターに関する仕事の質と多様性は本当に目を見張るものがある。

分子科学研究所は分子科学の多くの基礎的な分野における最先端の研究をおこたうために設立され、予算上の手当もよく配慮されてきた。そして、研究所は国際的に主導的な研究所としての評価を迅速に確立した。したがって、この研究所では日本国内からまた世界中から多くの傑出した科学者が来所し、ここでの研究課題に参加している。この地位を今後とも維持するためには、新たな研究課題への予算的措置が少なくとも国際的にトップクラスにある研究所に匹敵するものとしなければならない。国内的にはNECや日立の基礎研究所、国際的にはスイスやドイツの研究所、また、米国や英国の幾つかの研究機関を参考にすればよい。特に、新任の教授や助教授が研究費を必要としていることに注意が払われる

べきである。とりわけ、超高速現象や清浄表面に関与する分野において励起状態や化学反応動力学的研究を行うには、レーザーと分子線の組み合わせで、研究費が\$1,000,000を越えることがあり得る。現時点では、表面光化学の研究装置と反応生成物の状態と散乱角の同時測定のための装置の予算措置は不完全である。

分子科学研究所の成功の基礎はその人事政策である。それは新たな研究者の流れと世界中の最も優れた大学で行われている新たな研究の方向への流れを促している。これは世界中の大抵の国立研究所でよく見られる停滞を避けるのに役立っている。このことは分子科学研究所の研究課題の質的向上にとって極めて重要であったし、分子科学研究所の研究者がパーマネントな職を得る研究機関に強い前向きの衝撃を与えてきた。この成功の鍵となるのは分子研研究者が世界中で最も優れた仕事をすることを可能とした分子科学研究所の伝統である。分子科学の実験は複雑になり、またコストの高いものとなってきているため、一つの実験を遂行するための研究者の最小限の数は実験装置のコストとともに増加してきている。したがって、特に複雑な実験のためには分子科学研究所の博士研究員の数を増やすことが有効である。分子科学研究所の大きな国際的プログラムへもっと完全な形で助教授が参加することは彼らの評価をより迅速に確立させ、世界中からアイデアをすばやく得るのに役立つであろう。

生物学的な分子の構造と機能が原子レベルで理解されるようになり、生物学は分子科学の一分野になりつつある。分子科学研究所が基礎生物学研究所と近接していることは分子科学研究所がこの分野に参画するのに有利な条件を与えている。構造生物学あるいは生物合成化学の国際的なプログラムを開始する場合にはこれを本格的に行う必要がある。それぞれの研究所からの一人や二人の教授の採用によってこれを達成することは实际的ではないだろう。この分野は分子科学の将来に大きな機会を与える。

C. Bradley Moore

Summary Report on Review of Molecular Structure Group of IMS

Dear Dr. Ito :

The research of four groups directed by professors Kitagawa, Morita, Saito, and Kato is discussed. The laboratories of these four groups are visited. This was carried out in a two days period, Dec 18 and 19.

The research presented is of the highest quality and is published in highly respected reviewed journals. The facilities seems to have all the updated new components e.g. lasers, detectors and associated accessories needed. The interests of the members of the group varied widely (from the identification of molecules in interstellar space, to the behavior of simple molecules, atoms and new antiprotonic species all the way to the structure and function of important biomolecules). Each director has been invited to speak at international meetings and some collaborative important research was carried out with scientists abroad.

The future plans of each groups seems to be in the right direction. The building of submillimeter telescope on Mount Fuji, the detailed study of the spectroscopy of the antiprotonic He and Hydrogen, the high resolution Raman using Tandum interferometer-grating spectrometers and the detailed understanding of the molecular mechanism of O₂

activation in respiration and of quinone in the photosynthetic process are all but excellent important directions.

Proposals for future research:

A molecular science center at this time should include molecular biology studies in biophysics and biophysical chemistry. The most important type of research is structural biology, which would naturally fit in the molecular structure group. The work of professor Kitagawa with his studies on the Raman of these systems could be complemented with groups specialized in diffraction and NMR 3-d imaging techniques as applied to protein and nucleic acid structures. The molecular science of biology and medicine is, and will become, one of the most active research fields in the 21st century and IMS should not miss the opportunity to contribute to it.

Another area that is getting international emphasis recently is environment studies. IMS is rich in first rate laser spectroscopists, which is the most important ingredient for understanding the molecular mechanisms of pollution. This again an area in which IMS scientists can become leaders in a short time.

The last proposal I would like to make is more administrative. The research director is the best person to select his postdoctoral fellow. Once director has a vacancy, it should be possible for him to select his associate rather than wait a long time before JSPS makes a decision. This should lead to more productive research.

I wish to thank you and the scientists in the molecular structure group who came on the weekend to share with me the excitement of their creative science.

Yours Truly
M.A.El-Sayed

上記英文の和訳

分子構造系の評価に関する総合報告

私は北川、森田、斎藤、加藤教授によってリードされる4つのグループの研究を検討しました。これらの4つのグループの実験室を見学しました。以上は12月18日、19日の2日間に行われたものです。

説明された研究は最高レベルのもので、非常に評価の高いレフリー付き雑誌に発表されています。実験設備は全部最新式の新しい器械です。すなわち、最新のレーザー、検出器、そして必要な関連部品などが備わっています。分子構造系の4グループのリーダーの関心事はそれぞれ大きく異なっています。(星間分子の同定から簡単な分子、原子或いは新しい反陽子種のふるまい、そして重要な生体分子の構造と機能といったものまで全て)。各リーダーは国際的な会合に招待されて講演をしており、海外の科学者とも重要な共同研究を遂行しています。

各グループの今後の計画も正しい方向のように思えます。富士山頂でのサブミリ波望遠鏡の建設、反陽子ヘリウムと水素の詳しい分光学的研究、干渉計一回折格子分光器の直列結合による高分解能ラマン分光、呼吸系におけるO₂活性化と光合成反応中心におけるキノンの働きの分子機構の詳しい理解は、ほとんど優れた重要な指標となるようです。

今後の研究への提案

分子科学のセンターはこの時期におよんでは生物物理や生物物理化学の分野の分子生物学を包含すべきであります。最も重要な研究タイプは構造生物化学で、これは当然分子構造系に適合するでしょう。これらの系のラマン分光を研究する北川教授の仕事は回折法や3次元NMRイメージングテクニックを専門としてタンパク質や核酸の構造を調べるグループの研究と補いあえることでしょう。生物や医学の分子科学は現在もそうですが21世紀の最も活力あふれた研究分野の1つとなるでしょう。そして分子研はそれに寄与する機会を逃すべきでないでしょう。

最近国際的に重要視されている別の分野は環境の研究です。分子研は第一線のレーザー分光学者が豊富にいます。そのことは公害の分子機構を理解する上で最も重要な要素です。これもやはり分子研の科学者が短期間に指導的立場になることができる分野です。

私の指摘したい最後の提案は少し行政的な問題です。研究リーダーは博士研究員を選択する最良の人です。研究リーダーのグループに空席ができれば、JSPSが決定するまで長時間待つのではなく、彼がすぐに後任の共同研究者を見つけられるような制度であるべきです。こうすれば研究はもっと生産性の高いものになるでしょう。

私はあなたに、そして自分達の創造的な科学による興奮を私と分かち合うために週末出てきて下さった分子構造系のグループのリーダーの人達にお礼を申し上げます。

敬 具

M.A.El-Sayed

1993年12月20日

6-3-3 物性科学分野

物性科学の研究者が身近に接する研究所は、分子研と物性研、および関係する基礎物性研究関連の国研であり、どうしても相互の比較を念頭におくことが多くなる。結論からいえば、基礎研究に関しては、前二者の研究所は、多くの国研の硬直した研究体制に対し、はるかに柔軟に、国際的にみてもはるかに評価の高い研究がなされてきたと確実に言えると思う。ホームランが少ないという批判は当たっているかも知れないが、これは日本の基礎科学全般に言える問題点で、現実にはホームランを打つ可能性のある若く優秀な人材を沢山集めるしか手がないのではと思う。(優秀だが、決してホームランを打てそうにない人というのは、実際には人事選考の際に分かるもので、場合によっては、選考基準を意識的に変えることが可能でしょうか。)

現在、分子性物質の関係した物性科学は広範で急激な展開を示しており、現状の分子科学研究所の物性科学・物理化学を中心とする研究者集団の規模からすれば、当然のことながら、主要なすべての項目を網羅するのは無理があると思われる。従って、何を研究し何を研究しないのかの選択が重要となるが、これは研究者個人の裁量に任せるしかないと思う。しかし、大きな研究として結実しそうな萌芽があったときの、研究評価・組織運営のフレキシビリティをもたせることは充分可能であると思われる(現在の大学ではほとんど不可能であるが)。分子研の特徴の一つは、人的配置の上からも化学・物理の学際的研究の最前線でありうることであるから、ここから新しい学際的パラダイムを生むような萌芽的研究がうまれば、柔軟な administration によって、研究室間のプロジェクト研究として発展するような展開が望ましいと考える。これに近い研究の展開があった例としては、有機超伝導体の合成やプロトニクス(水素-電子連動型分子システム)の提唱など、分子研は過去に実績をもっ

ているが、人材の確保や研究プロジェクトとしての運営がフレキシブルであったとは言い難いと思う。独創的な研究を開始した研究者には、年限付きで特別の postdoc position や短期助手を割り当てるなどの研究運営があってもよいのではないかと思う。(研究評価はいつも難しい問題を含むが、案外第三者には自明なことも多い。)

分子研の物性化学・分子集団の部門の人的構成の面で敢えて願望を述べるとすれば、現在欠けている固体物性理論の専門家が必要ということである。その理由の第一は、量子化学の専門教育を受けた人を対象にただけでは、今後の分子性物質の電子物性科学の(予想される)新しい進展に対応できないこと、第二に、広義の分子科学が若い物性理論家の活躍しう舞台であるとの認識が物性科学分野の研究者にもたれることが重要なときがくと思うからである。もう一点は、分子研内の物性理論関係の所員を通じて、外部の理論家とのセミナーや研究会を通じての接触の機会が多くなる利点である。電子構造・光物性関係と磁性・量子輸送関係の理論家の所員が2人揃えば、分子研の活動に新しい芽が出るものと信じる。もちろん視野が狭窄になりがちな物性理論研究者を分子科学実験研究者の言語に適応させる必要があるが、分子研こそ、それが可能な最高の環境であり、フリクションからはむしろかなりユニークで新しい展開が生まれそうな予感がある。(国内所外委員F)

Remarks, Impressions and Suggestions after My Visit at IMS on November 23 - 24, 1993

Part 1

1. International Reputation of the Research:

IMS is a very famous institute with a high international reputation. It is unique in the world with its abilities for a concerted work of chemists and physicists on molecular physics and chemistry including possible applications. It can successfully compete with those groups in the world which are working on related problems.

In order to keep this high reputation, also in the future *top scientists as directors are needed*.

2. Originality of Research

Please see my remarks in the second part of my report in which I comment on the individual groups.

3. Proposals to maintain high research standards and to stimulate research activities

- It is extremely important to hire *first class department and division directors* whenever there is a replacement needed.

In my opinion, the Department "Molecular Assemblies" should play a central role in the future of IMS. Whereas the study of Molecular Crystals was a challenge when IMS was founded, an interesting and important future of Molecular Science is the challenge to study *Molecular Systems* or Molecular Functional Units which may have completely new properties and possible applications.

The word *Molecular Electronics* as an acronym for studies aimed to find Molecular

Systems which are able to do logical functions describe in my opinion a very exciting field for future research at IMS. It is completely open whether and when and how such systems can be useful - but *basic research* is needed, and IMS has the capabilities.

This is my suggestion as a possible future direction of research at IMS when Prof. Maruyama has to find a successor.

One should and could formulate research goals for concerted efforts in this field which includes also nanostructures, also in connection with the Si - or GaAs - based microelectronics.

- Try hard to attract good *postdocs* from abroad and send your scientists from time to time for a *sabbatical leave* abroad to top laboratories.

- Increase the *cooperation* of the leading scientists within the institute in order to stimulate the synergism which can be the result of more interaction between the different groups. If not already existing, arrange seminars once every 1 or 2 month in which all department leaders and leading scientists listen to a report of one department each, in order to strengthen interaction and cooperation.

- Try to get more *manpower* - the graduate student program is very important! There are many "colonels" or "captains", but few "sergeants" and simple "soldiers" at IMS!

- In my opinion, it would be very good to have more *technicians* especially for sample purification and preparation.

- *Service groups* for analysis, purification, sample preparation and crystal structure determination are in my opinion highly needed.

- One should try to find *research projects which cannot be done* so easily and efficiently at universities because cooperation between different fields is here more easily possible.

4. Indication of Research Fields in which more resources should be invested - together with

5. Suggestions of new directions of research

- *Molecular Electronics*: molecular systems for logical functions, molecular switches, wires and others.

One possible approach: Increase the activities on *surfaces, mono - and oligo - layers by epitaxy* (LB - films are investigated at many other places!). So one can prepare and investigate *nanostructures, heterostructures, quantum wells*.

- One should keep the activity in *Organic Metals* and *Superconductors*

- *An exciting new field is manipulation of individual molecules* by STM or AFM.

Other interesting fields with a high potential for the future are *Electroluminescence* of organic systems

Polymers: I would not suggest to go really into this field, because the Max - Planck

- Institute at Mainz takes care of this part of Molecular Systems with large

manpower.

6. *Suggestions of ways to promote IMS' internalization and international cooperation*
 - Continue the *Okazaki Conference* program in a way that more people from abroad attend (perhaps 50% Japanese, 50% others?)
 - *Invite top scientists* for short visits (one or two weeks) for a series of lectures.
 - Have a *fellowship/postdoc program* for sending Japanese scientists abroad into leading laboratories for a minimum of 6 months.
7. *Proposals for further IMS development*

My suggestions are especially valid for the Department of Molecular Assemblies, since I do not know the other departments equally well.

- There should be more cooperation with *theoreticians*:

The theory group at IMS is too small for this department.

- Try to find more *technicians* for routine work and for work which is similar for different groups.

For instance: having a common *laboratory for purification and preparation* of samples which provides samples for all groups of the department could perhaps give better samples for all groups. If this is not possible it would be as a minimum very helpful to have at least one technician in the department who is going to do this job carefully and exclusively.

- Alternatively: Try to increase the size and the cooperation of *service groups* of the IMS for doing chemical analysis, substance and sample purification, crystal growth, crystal structure for all scientific groups.

Stuttgart, December 2, 1993

Prof. Dr. H. C. Wolf

上記英文の和訳

意見、印象及び提案

(1993年11月23-24日；分子研を訪問して)

シュトゥットガルト大学教授 H. C. ウォルフ

第1部

1. 研究に対する国際的評価

分子研は非常に有名な研究所で、高い国際的評価を受けている。分子研は、応用までも含む分子物理学と化学において物理学者と化学者の協同作業が可能になっているという点で、世界的にもユニークな研究所である。同研究所は、関連した諸問題について研究している世界中のこのようなグループと優るとも劣らぬ競争をし得ている。

この高い評価を保ち得るためには、将来においても指導者（グループリーダー）として第一級の科学

者が必要とされる。

2. 研究の独創性

個々のグループについてコメントした私の報告書の第二部の覚書を参照されたい。(非公開)

3. 高い研究水準を保ちかつ研究活動を活性化するための提案

配置換えが必要となったときは、第一級の主幹、あるいはグループリーダーを任用することが極めて大切なことである。私の意見では、分子集団研究系は将来分子研の中心的役割を果たすべきであると考えられる。分子研が創設されたときは、分子性結晶の研究が一つの目標であったが、今や分子科学の興味ある重要な将来は、全く新しい性質をもち応用への可能性を持つ分子システムあるいは分子機能素子を研究するためのチャレンジにあるといえる。分子エレクトロニクスという言葉は、論理的に機能し得る分子システムを見つける事を目標とした研究と同意語であり、それは、私の意見では、分子研の将来の研究分野としての一つの非常に活気ある分野を示している。そのような分子システムが果たして可能かどうか、又、いつ、いかにして使えるようになるかは、全く未知の問題である。しかし基礎研究は必要不可欠であり、分子研はそれが可能なところである。これが、丸山教授の後継者を見つけなければならなくなったときの分子研における研究の可能な未来の方向としての私の提案である。ナノ構造研究を包含し、かつシリコン、ガリウム・ヒ素マイクロエレクトロニクスとも関連したこの分野における総合的研究作業の到達目標をきちんと定式化すべきであるし、又それは可能であろう。

- ・海外からの優秀なポスドクをひきつけるよう十分努力すること、また分子研の若い研究者に適宜有給休暇を与えて海外の第一級の研究室へ送り出すよう努力すること。

- ・研究所内のリーダー格の研究者の共同研究を増やして、異なったグループ間のより強い相互作用の結果として得られるであろう共同効果を促進すべきである。もしまだなされていなければ、1ヶ月か2ヶ月に1回全主幹とリーダー格の研究者が集まるセミナーを計画し、毎回1つの系の報告を聞き、相互作用と共同研究を強めるようにすべきである。

- ・もっとマンパワーを獲得するよう努力すべきである。—その意味でも大学院のプログラムは非常に重要である。分子研には“大佐”や“大尉”は沢山いるけれども、“軍曹”や普通の“兵隊”は殆どいない！

- ・私の意見では、もっと沢山の技官（テクニシャン）をもつことは大変よい事だとおもう。特に試料の精製や調整のために必要である。

- ・分析、精製、試料調整及び結晶構造決定のためのサービス（業務支援）グループの必要性は極めて高いと思われる。

- ・大学ではなかなか容易にはできないような研究課題を見つけるよう努力すべきである。何故なら、分子研では異なった分野間の共同作業がずっと容易であるからである。

4. より多くの予算を投資すべきと思われる研究分野及び

5. 研究の新しい方向についての提案

- ・分子エレクトロニクス：論理機能、分子スイッチ、分子電線等のための分子システム。

一つの可能なアプローチ：表面あるいはエピタキシー法による単層、数層膜についての研究活動を増

強さること（LB-膜は他の多くの場所で研究されている!）。そうすればナノ構造、ヘテロ構造あるいは量子井戸等を作り、研究することができる。

- ・有機金属や超伝導体の研究活動も維持すべきである。
- ・エキサイティングな新分野として、STMやAFMにより個々の分子に対して操作を施す（マニピュレーション）研究がある。その他の興味ある分野として将来への高いポテンシャルを持つものとして電場発光を示す有機システム、ポリマーがある：私は分子研がこの分野へ実際に進んでいくことは勧めない。それは、マインツのマックスプランク研究所がぼう大なマンパワーを注ぎこんで分子システムのこの部分に既に取り組んでいるからである。

6. 分子研の国際化と国際協力を促進するための方策の提案

- ・岡崎コンファレンスのプログラムを継続し、海外からもっと多くの人が出席できるようにすること（おそらく日本人50%，その他50%がよい？）
- ・一連の講義をしてもらうために、第一級科学者を短期間招へい（1～2週間）すべきである。
- ・日本の科学者を海外の指導的な研究室へ少なくとも6ヶ月間送り込むための奨学金／ポストドク制度を用意すべきである。

7. 分子研のさらなる発展のための提案

私の提案は特に分子集団研究系に対するものであり、それは他の系についてはこの系と同じ程度には知らないからである。

- ・理論家との共同作業をもつとすべきである：分子研の理論グループはこの系にとっては小さすぎると思われる。
- ・日常的な仕事及び異なったグループに共通な仕事のためのテクニシャンを採用するよう努めるべきである。

例えば、もし試料の精製と調製のための共通実験室があり、それが系の各グループに試料を提供するようになれば、おそらく全てのグループはより良い試料を得ることになるであろう。もしこれが難しければ、系に最低限1人のこのような仕事だけを注意深くやるテクニシャンをおくことができれば、少なくともそれは非常に役立つであろう。

- ・別の方法として：分子研の支援グループ（施設）の規模と協力業務を増強して、全ての研究グループのために化学分析、物質及び試料精製、結晶成長、結晶構造解析などをできるようにすべきである。

シュトットガルトにて 1993年12月2日

H. C. ウォルフ教授

6-3-4 極端紫外光科学分野

外部からみると、分子研は今でも、分子科学の分野の人材、とくに、若い人材を“豊富に”に集めており、それなりの成果もあがっていると思われる。しかし、これは一面では真実であるが、実際にはかつて（創設期及び初代の助手が少しづつ入れ替わりつつあった頃）のような、各分野のトップクラスの人達の集団というものではなくなっているように思われる。それはとりもなおさず、一流の

研究を目指す人たちにとって分子研の魅力がかつてほど大きいものではなくなっているということであり、何らかの方策でかつての魅力を取り戻すことが、今後分子研がこの分野の COEであり先導者であり続けるための第一要件であると思う。研究を進めるのは人であり、“研究環境”とは何よりも“研究者環境”であるからである。

魅力が薄れてきたのは、外的原因（大学や他の研究機関を含めた日本全体の研究環境が向上し分子研で研究することのメリットが相対的にあせてきたこと、全体的にハングリー精神がなくなってきたこと等）もいろいろあるだろう。内的要因も多々あったと思われる。その最大のものは人事だと思ふ。教授はどんなに若くして着任しても停年までいることができるわけだから、教授の人事はとくに重要である。研究所は、いくつかの特徴ある研究を重点的にを行いピークをだすことが重要であるが、それにはその中心となるべき分野の選定と研究者の人は高い視点と厳正な評価に基づいて行われる必要があり、またすでに進行している研究に対しては絶えざる厳しい評価が必要である。（この点に関連して、伊藤所長が外国人を含む評価委員の制度を発足させたのは大変見識のあることだと思う）。客観的評価なしに特定の分野を拡張ないし存続させる人事は結局は研究所の魅力を失わせることに繋がっていくと思う。先入観や特定の意図のない大所からの議論と判断に立って、新しい分野が自然に古い分野にとって代わっていくような人事が行われることを期待する。また、分野は新鮮でも、その分野の主導的な人または将来有望な、これはという若い人を連れてこなければ、やはり魅力は生まれない。これらの〈分野〉と〈人〉という観点からみて、これまでの人事には傍らから見て納得のいかないものもあったように思われる。〈人〉に関しては、そのような人材が来てくれなくなった（これは魅力の欠如の原因の結果ともとれるが）と言ってしまうばそれまでであるが。

助教授に内部昇格がないのは原則的にはいいことだと思う。そのために人事の流動がよくなり、分子研が活性化されていることは事実であり、それによっていくつかのユニークな研究が生まれ、それらの仕事をした人たちが転出した後の充足もまあまあうまくいっていると思う。これまで、新任者は前任者と異なった分野の人であった場合が多く、それが分子研の研究に新鮮さと幅を与えていることも事実である。しかし、上述した客観的評価制度さえしっかりしていれば、必ずしも厳格に内部昇格を禁止しなくてもいいのではないか。それによって人の流れや研究が停滞したりすることはないと思う。要はベストの人事ということであり、大所からの判断と客観的評価に基づいたベストの人材が内部にいる場合もあるからである。ベストを選択する対象としては内部・外部は関係ないことと思う。

2. UVSOR施設は、「きわめて少ないスタッフでうまく運営され、非常によくやっている」というのが国内での大方の評価である。しかし、これは国内の限られたユーザー及びその周辺の人たちによる評価であって、国際的にみると「数ある放射光施設の中でやや影が薄い」というのが偽らざる評価ではないだろうか。これは、一つにはUVSORの規模、波長範囲、強度等に起因することであろうが、もう一つの大きな原因としてやはり「限られたユーザーが限られた分野の仕事をしている」ということ、すなわち、ユーザーの層が薄いということがあると思う。これは突き詰めれば共同研究旅費の不足ということにつきと思う。旅費が十分にもらえないために、セットアップに長い時間を要する新しい仕事をUVSORへ行ってやるのが躊躇されるようになり、施設側も大々的に宣伝できず、結局既設の装置と慣れた手法で手みじかに測定できる“固定客”だけが利用するということになってしまっていると思う。今後、旅費を大幅に増やす努力がなされ、大いに宣伝をし、いろいろな研究者が必要に応じて入れ替わり立ち替わり出入りして研究が行われるようになることがだいじだと思う。

3. 施設が活発でそこでいい仕事が生まれて行くためには、研究者と技術者（技官）の連携が重要だと

思う。それは単に技術者が研究者を助けるとかいろいろのサービスをするという関係ではなく、技術者も常に研究の動向を把握し、それに対応できる新しい技術を自分の問題として絶えず開発・獲得していく態勢を確立することだと思う。それには研究者と対等な立場での密接な交流を促進することが必要であり、(そのためにも)技官にもっと希望を与える制度的な方策も真剣に考えていく必要がある。放射光科学の世界では、新しい技術が絶えずどこかの施設で生まれ、世界で使われるようになって全体が進んでいく。只乗りや物真似ではない UVSOR として放射光コミュニティに存在を主張していくためには、優れた研究を出さなければならないのと同様に技術的にも貢献することが必要である。これは日本の UVSOR で開発されたものであると言われ世界で使われる技術が一つでも生まれることを願って止まない。

(国内所外委員 G)

UVSOR からの研究の output は物性研、PF と比べても現在の状況下で遜色無いものである。しかし、本当の評価が必要なのはむしろこれからで、そこでさらに良い成果を上げるにはどうすればよいかの観点から意見を述べる。

1. 放射光にかかわる研究系と UVSOR 施設の意志疎通が必ずしも良好には見えない事。人事についても予算についても双方に不満を残さないように十分の話し合いの上で運営されるよう双方の努力が必要であると思う。その時々プロジェクトを決めて境界条件を明らかにした上で協力し合い双方全力投球できるようにする事が大切であろう。とくに人事面ではば一新されたこの時期が変革の好機であろう。
 2. 将来計画(現在進行計画も含む)について所内、所外共に hot な議論が十分には行われていないように感じる。所内の staff が忙しい事は分かるが固定した外部研究者との議論だけでは新しい芽は出にくい。もっと open に議論しその中で分子研が選択しかつ責任を持って推進できる計画を内外に明らかにすべきである。これまでのところでは分子研 UVSOR の指向する方向は外部の放射光研究者にはとても見えにくい。
- ビームラインのスクラップ&ビルドをはじめる時期にさしかかっている。安易に現状での共同利用に満足するのではなく、マンパワー等の困難さを克服して次の飛躍が必要な時期になっている。この点についても内外の広い意見を聞いていただけたらと思う。
3. 物性研 SOR, PF に加えて新たに Spring-8 が共同研究に open される 1997 年に UVSOR 周辺での研究がどうなっているか、どうすべきかの議論は避けて通れない。

(国内所外委員 H)

Evaluation of the Research Activities at UVSOR/IMS

Prof. Dr. V. Saile

UVSOR, the synchrotron radiation facility at IMS, is in operation since 10 years. UVSOR is one of the three public SR facilities in Japan, serving a large number of Japanese scientists. The other two facilities are the Photon Factory in Tsukuba, a much larger center with an emphasis on hard x-ray applications, and the INS-SOR ring in Tanashi, smaller and predominantly used for research in solid state physics.

Over the past 10 years a wide range of research has been conducted at UVSOR, from machine physics and tests of a Free Electron Laser to chemical spectroscopy, solid state and surface physics. A large number of publications in refereed journals documents very well the scientific accomplishments at UVSOR. This research is first class on a national and international scale. A comparison between the UVSOR Annual Reports with those published by other facilities of similar size, e.g., the Brookhaven VUV Source or BESSY, proves UVSOR's competitiveness. However, it is important to note, that the number of UVSOR staff is much smaller than that at most other synchrotron radiation facilities.

Without any doubt, excellent scientific results have been produced at UVSOR and all specialists in the research fields covered by UVSOR will agree on that. Living now in the U.S. and being exposed to a highly competitive environment, I became rather sensitive to the importance of public relations. Research results and other achievements need to be explained to a broader scientific and non-scientific audience in an easy-to-understand way. Therefore, I strongly encourage the UVSOR staff to produce more public relations material such as color brochures and fliers, and to prepare attractive presentations for non-scientists. Only if a larger public understands and appreciates UVSOR's accomplishments, long term support from funding agencies can be expected.

One of the strengths of the researchers at UVSOR is their willingness and ability, to test new ideas. Examples are cluster research with synchrotron radiation, IR spectroscopy, combined synchrotron-laser experiments, photon-induced surface reactions, free-electron-laser research, and many others. Several novel applications of SR originated at UVSOR. The research goals at UVSOR have always been unique, not just what everybody else did. The IMS and UVSOR scientists deserve credit for not following the main stream but test new ideas even when they were risky. This attitude has led to a program, that is unique, strongly chemistry oriented and can easily be identified with UVSOR.

More important than the past, which has been successful, is to secure the future of research at UVSOR. With the advance of third generation synchrotron light sources—the ALS in Berkeley and SRRC in Taiwan are already in operation—the competition in the VUV and soft x-ray spectral range will increase. It is expected that one or more of these new light sources will be constructed somewhere in Japan within the next 5 years. IMS would be a good site for a third generation machine, but I am not aware of serious efforts to attract such a project. Therefore, I assume that UVSOR will be IMS's sole synchrotron radiation source for several more years. The main question is then, how to plan and organize a viable research program over the next 5 to 10 years with new machines of superior quality coming on line and with an increasing number of beamlines available for researchers in Japan.

My recommendation is, to focus on the strengths of UVSOR. The unique feature of UVSOR is its affiliation with IMS; it is the only SR-facility in the world which is part of a large chemistry research center. The mission of UVSOR is, consequently, research in chemistry with synchrotron radiation. The beam chemistry includes organic, inorganic and physical chemistry. The researcher may be chemists or physicists using samples such as molecules in the gas phase, clusters, liquids, and solids. I recommend to develop a long term strategic plan to enhance chemistry research at UVSOR based on the strongest programs currently being conducted. Core programs for the future of the UVSOR facility are "Photo-assisted Chemical and Surface Processes", "Molecular Spectroscopies in the VUV and Soft x-ray range", "Infrared Applications of Synchrotron Radiation", and "Molecular Crystals and Films". These projects deserve strongest financial and technical support, including new beamlines of rearrangement of existing ones, if required.

On the technical side, the excellent machine physics team will continue with minor and major improvements of the accelerator system to achieve maximum performance of the light source. It is essential to develop a plan for beamlines after 10 years of UVSOR operation. The facility has reached its limit in capacity and a rearrangement of beamlines is highly desirable. I would also like to encourage a discussion on the maximum number of beamlines. With the small staff it seems better to operate less beamlines and to rather concentrate the efforts on the design of new ones with optimum performance. For example, a high resolution beamline for molecular spectroscopy in the soft x-ray-range is highly desirable. A sufficient number of competent staff is required to rearrange UVSOR's beamlines, in particular, with Prof. Watanabe leaving IMS. The major goal for the coming years must be to preserve quality than quantity. As pointed out above, IMS/UVSOR should focus on new applications of synchrotron radiation in chemistry. New research ideas can be found in virtually all proposals for 3rd generation light sources and the UVSOR staff is well aware of these. However, the UVSOR management might also discuss ideas, which are currently rather popular in the United States such as using the synchrotron source for providing services, where the SR source including beamlines is used and operated as an analytical instrument similar to an NMR machine in a chemistry department or at a chemical company. In an "Analytical Services" operational mode, scientists from IMS, other institutions and industrial companies would bring or send samples to UVSOR for analyses by, e.g., NEXAFS, EXAFS, photoelectron spectroscopy, IR Spectroscopy, and other methods. Such an operational mode could be beneficial for IMS researchers not involved in UVSOR and might even generate some revenues from industries.

The "Okazaki Conference" model is very successful and has attracted many well known scientists from all over the world to IMS. Many "Visiting Scientists" spend several months at UVSOR. Further internationalization of IMS/UVSOR could be achieved by sending

UVSOR/IMS scientists to other SR facilities to initiate joint research projects to be conducted at UVSOR.

UVSOR is an excellent SR-facility operated by a highly competent staff. I have no doubt that the facility has the potential for producing high quality research for many years to come.

Brief Summary and Some Recommended Actions

1. The international reputation of UVSOR is very good, many of the research results are excellent. Several novel ideas in synchrotron radiation research originated at IMS, such as SR photo-assisted chemistry and others.
2. A clear mission statement and strategic planning are required to maintain highest standards and competitiveness in the future. The recommended mission is: Synchrotron Radiation Research and Applications in Chemistry.
3. Support with highest priority is recommended for the strongest programs in chemistry research: "Photo-assisted Chemical and Surface Reactions", "Chemical Spectroscopies in the VUV and soft X-ray range", "Infrared Applications of Synchrotron Radiation", and "Molecular Crystals and Films."
4. Continuous minor and major improvements of the accelerator system are required.
5. An evaluation of number and performance of beamlines is recommended. Consider to reduce the number of beamlines and develop new highly competitive instruments, e.g., a high resolution soft x-ray monochromator.
6. Consider non-conventional ideas under discussion in the U.S. and Europe, such as to offer analytical services to IMS scientists, outside institutes, and industries.
7. UVSOR has produced leading edge research results and technical achievements. Present these to a broader scientific and non-scientific public in an attractive and easy-to-understand way.

Volker Saile, 12/14/93

UVSOR/IMSの研究活動の評価

Prof. Dr. V. Saile

分子研にあるシンクロtron放射光施設であるUVSORは10年来稼動している。UVSORは日本にある3つの公立の放射光施設の1つであり、多数の日本人科学者に利用されている。残り2つの施設は、筑波のフォトンファクトリーと田無の核研究放射光施設であり、前者は硬X線利用に力点をおいたはるかに大規模なセンターであり、後者は物性物理研究に主眼をおいたより小規模な施設である。

UVSORでは過去十年以上にわたって、装置物理、および自由電子レーザーのテストから分光化学、物性および表面物理にわたる広い範囲における研究が行われた。査読付きの雑誌に掲載された数多くの論文はUVSORにおける科学的業績を非常によく立証している。この研究は国内的にも国際的にも第一級のものである。UVSORアニュアルレポートをブルックヘブン極端紫外光源やBESSYなど、他の同規模の施設のものと比較すると、UVSORが競争力を持つことがわかる。しかしながら、UVSORのスタッフの数は他の放射光施設と比較してはるかに少ないことを銘記しておく。

疑いもなく優れた化学的成果がUVSORにおいて生み出されてきており、UVSORが受け持つ研究分野のすべての専門家はこの点に賛成するだろう。私はアメリカに住んでおり、競争の激しい環境にさらされているので、広報の重要性についてかなり敏感になっている。研究成果や他の業績は、科学に関わる関わらないを問わず広い範囲の人々に、分かりやすく伝える必要がある。したがって、UVSORのスタッフに色刷りの小冊子やチラシといった広報の出版物をもっと発行するとともに、科学と無縁の人々にも魅力的に成果を紹介することを私は強く勧める。UVSORの業績を広い範囲の人々に理解し、評価してもらって初めて財政当局による長期にわたる支援を期待できる。

UVSORにおける研究者の強みは新しいアイデアを試みる意欲と能力である。たとえば、シンクロtron放射光を用いたクラスター研究、赤外分光法、シンクロtron放射光とレーザーを組み合わせた実験、光誘起表面反応、自由電子レーザーなどである。いくつかの新しい放射光の応用がUVSORで生まれている。UVSORにおける研究の目標は誰もがやってきたものではなく、常に個性的であった。分子研とUVSORの科学者は他の誰もができることを行ったことで賞賛に値するのではない。分子研とUVSORの科学者は研究の主流を追いかけるのではなく、リスクをおそれず新しいアイデアを試みる点で賞賛に値するのである。この姿勢が個性的で強く科学を指向したUVSORらしさのあふれた研究計画へと結がったのである。

成功をおさめた過去よりも重要なことはUVSORにおける将来の研究を保証することである。第3世代シンクロtron放射光源の出現により（パークレーのALS、台湾のSRRCはすでに稼働している）、極端紫外軟X線スペクトル領域の競争は激化するだろう。向こう5年の間に日本のどこかで、もうひとつあるいはそれ以上のこれらの新しい光源が建設されると期待する。分子研は第3世代マシンの良い設置場所であろうが、そのような計画を誘致するための懸命な努力がなされているとは私は聞いていない。したがって、向こう数年にわたってUVSORは分子研における唯一のシンクロtron放射光施設であろうと考える。そうすると、主要な問題はいかにして質の優れた装置を導入しつつ、日本の

研究者の利用できるビームラインを増やししながら、向こう5年から10年にわたる実行可能な研究計画を立案し組織化するかということになる。

私はUVSORの長所に焦点を絞るよう勧める。UVSORの個性的な特質は分子研に付属しているということである。シンクロtron放射光施設が大きな化学研究センターの一部になっている例は世界的にもUVSORのみである。したがって、UVSORの使命はシンクロtron放射光を用いた化学における研究である。化学という言葉の中には、有機、無機、および物理化学が含まれる。研究者としては、ガス分子、クラスター、液体、固体の試料を扱う化学者、および物理学者である。現在行われている研究計画のうち、最も強力なものに基づいてUVSORにおける化学研究を増強する長期戦略的計画を展開することを私は勧める。UVSOR施設における将来の中心課題は「光誘起化学過程、表面過程」、「極端紫外軟X線領域における分子分光法」、「シンクロtron放射光を使った赤外分光法」、および「分子性の結晶および薄膜」である。これらの研究計画には、必要ならばビームラインの新設や再編成を含めて、最大限の財政的技術的支援を行う価値がある。

技術面では、優秀な装置物理チームが光源の最大限の性能を達成するために、小規模大規模の改良を続けるだろう。UVSOR稼働10年以降のビームラインの計画を展開することが不可欠である。施設の容量は限界に達しており、ビームラインの再編成が強く望まれる。私はビームラインの上限の数について議論することを勧めたい。スタッフが少ない状況では、より少ないビームラインで理想的性能を持った新しいビームラインを設計する努力に集中したほうがむしろ良いと思われる。たとえば、軟X線領域の分子分光法のための高分解能ビームラインが強く望まれる。UVSORのビームラインを再編成するためには、十分な数の有能なスタッフが必要とされる。渡辺助教授が分子研を去る状況にあたってはなおさらである。これからの主要な目的は量ではなく、質を維持することではない。

上に述べたように、分子研・UVSORは化学におけるシンクロtron放射光の新しい応用に集中することである。新しい研究のアイデアは第3世代光源のすべての研究提案に事実上含まれており、UVSORのスタッフもわかっている。しかし、UVSORの管理者はアメリカではかなり一般的になった、大学の化学科や化学会社におけるNMR装置に似た分析装置として放射光源とビームラインを利用し運転するといった、シンクロtron放射光源をサービスに提供するというアイデアも検討してはどうだろうか。「分析サービス」の運転モードでは、分子研内外および企業の研究者がNEXAFS, XFAS, 光電子分光、赤外分光などの分析のために試料をUVSORに持ち込むなり送るなりする。このような稼働モードはUVSORに含まれない分子研研究者にとって有用であろうし、企業からの収入をもたらすことにもなる。

「岡崎コンファレンス」方式は非常にうまく行われており、世界中の多くの著名な科学者を分子研にひきつけている。多くの「招へい科学者」がUVSORに数カ月滞在している。また、分子研UVSORの科学者を他の放射光施設に送り、UVSORで行う共同研究をはじめれば、分子研・UVSORをさらに国際化できるであろう。

UVSORは極めて有能なスタッフによって運転されている。この施設が向こう何年も極めて質の高

い研究成果を生み出す潜在能力を持っていることを私は確信している。

要 旨 と 提 案

1. UVSORの国際的な評判は極めて良く、研究成果の多くは優れたものである。分子研は、放射光誘起化学など、シンクロトン放射光研究のいくつかの新しいすぐれたアイデアを生み出している。
2. 将来において最高の水準と競争力を維持するためには、明確な使命を表明するとともに、戦略的な計画を立てることが必要である。使命としては、化学におけるシンクロトン放射光研究と応用を推奨する。
3. 科学研究における下記の最も強力な研究計画を最優先して支援することを推奨する。「光誘起化学反応、表面反応」、「極端紫外、軟X線領域における化学的見地にたった分光法」、「シンクロトン放射光の赤外への応用」、および「分子性の結晶、および薄膜」である。
4. たえず大規模、小規模な加速器系の改良を続けることを推奨する。
5. ビームラインの数と性能を評価し、再編成することを奨める。そのためには、十分な数の有能なスタッフが必要である。高分解能軟X線分光器などの新しい競争力の高い装置の開発を検討すること。
6. 分子研内外および企業の研究者にも分析サービスを提供するなど、アメリカやヨーロッパで議論されているありきたりではないアイデアを検討すること。
7. UVSORは最先端の研究成果と技術的達成を生み出してきた。これらの業績を、科学に関わる関わらないを問わず広い範囲の人々に、魅力的かつ分かりやすく伝えること。

Volker Saile, 12/14/93

6-3-5 相関領域・錯体化学分野

最近、錯体化学実験施設の研究は活力、質とも以前に比べて顕著に向上してきている。しかし錯体化学実験施設が世界の錯体化学研究のセンターとして飛躍するためには錯体化学の新分野を開拓することが強く求められる。このためには錯体化学実験施設の規模から2つ程度の研究プロジェクトに絞り、そのためのman powerを確保する。物性研究とは異なり新規な錯体合成にはman powerが不可欠であり、その確保のため、

1. 助手席および形態化しつつある流動部門（特に教授席）の博士研究員への転用と上記研究プロジェクト遂行に必要な博士研究員の世界的規模での公募
2. 他大学へのサービス機能（例えばX線構造解析）を上記プロジェクトに関連したものに限定
3. 研究環境の整備、とくに各種委員会の見直し等教授の雑用からの解放が必要である。

（国内所外委員I）

1. 分子研が研究面で挙げてきた成果については、「分子研創設当初期待されていた通りの役割を果たした」と言い切れると思う。もう一つ忘れてならないのは、若い人材の養成面で分子研が果たした役割である。分子研のような研究専門の機関が人材養成というと妙な感じがするが、最高の研究環境は若い研究者にとってそれだけで教育機関としての役割をも果たしたものである。特に、学際的で開かれた研究上の雰囲気と、斬新で流動性に富む人事方式が研究活性化の上で、いかに大切かを体験した人材が全国に散らばり、各地の大学でその理念を継承するに至ったことは「将来の日本の科学の発展に測り知れない影響を与えた」と言うことができると思う。

2. “分子科学”という言葉自体にきらめき（求心力）があった時代から、今や、分子科学は一つの大きな転換期を迎えていると思われる。

最近複雑系解析学、カオス解析学などに代表される理論科学・計算機科学が急速な発展を見せる一方、他方では、生命科学の目ざましい伸長があり、本来コアとなるべき物理、化学の実験系の分野が若い学生からみて魅力を失いつつあるのは認めざるを得ないところである。これら新興の分野は本来、分子科学（化学）と競合するようなものではなく、分子科学（化学）から派生したものであったり、将来吸収していくべき分野であり、その対応を怠ると分子科学そのものの衰退につながりかねないと痛感している。今、分子研にとって最も重要な任務は、いかに現在の研究を効率よく進めるかではなく、若い意欲ある研究者、さらには今後分子科学を自らの研究分野とするであろう学生が、のめり込めるような魅力的で求心力のあるテーマを提示することに尽きると思う。

このような方向性を探索する努力の中から欧米の模倣を脱し、真に日本で育まれた独創的な研究が生まれてくると確信する。分子研としては、そのための研究体勢を整えることが急務であると考える。

3. 分子研には、大別すると分子分光と分子物性の2つのグループがあり、世界に誇る装置を開発し、新たな物質群を開発すると共に、その顕著な物性の解明に先駆的役割を果たしてきた。しかし、これからの分子科学として最も大切なのは科学として全力をあげて取り組むに値する新現象の発見である。相関領域研究系の役割は、真にその現象を実現しうる新しい分子システムを創造し、提示していくことにあると思う。その役割を果たすための方策は、1) 物質に対する深い理解とすぐれたセンス、2) 他の研究分野への広い視野、3) さらに今後の分子科学に何が重要かを見抜く洞察力をもつ人材を確保していくことに尽きる。また分子研として、そのような人材を支援する体制を確立することも大切な課題である。

（国内所外委員J）

Open Report on the Visit to the Coordination Chemistry Laboratories
of the Institute for Molecular Science (IMS) at Okazaki

Visitor : Professor H.D. Kaesz, University of California, Los Angeles

Date : 20 December 1993

Interviews were conducted with the Director of the Coordination Chemistry Laboratories,

Prof. Akira Nakamura, and three members of the research staff, Profs. Koji Tanaka, Kiyoshi Isobe, and Tamotsu Takahashi.

International reputation and originality of research.

The international reputation of the Coordination Chemistry Laboratory at IMS is well established as evidenced by its principal organizational role in the forthcoming 30th International Conference on Coordination Chemistry (ICCC, July 24-29, 1994, Kyoto). Former Director Prof. Hitoshi Ohtaki is Chairman of this highly respected international conference and present Director is Vice-Chairman; staff member Prof. Koji Tanaka is Secretary of the ICCC.

The international reputation of Prof. Akira Nakamura, who has only recently joined IMS, is well established and needs no further elaboration here; his presence reflects highly creditably upon the Institute. The other members interviewed are at earlier points in their careers and their international reputations are correspondingly at lower levels. However, the work these individuals presented to me (upon which I will comment in detail in a confidential portion of my report) is found to be sufficiently creative, and of high quality and substance that the desired international recognition of these individuals will surely follow in due time.

Proposal to maintain high research standards and productivity

I believe a system of periodic external review would be an effective way to maintain both high research standards and levels of activity. The laboratories might be reviewed bi-annually with individual programs coming under scrutiny once every four years.

Allocation of resources and suggestion of new directions

As far as I could tell from the information provided to me, the present allocation of resources seems suitable and no significant changes are recommended. The significant new directions for coordination chemistry in general are in the areas of bio-inorganic chemistry and materials science. The programs in the Coordination Chemistry Laboratories of IMS already have components in some of these directions but could benefit from greater emphasis including collaborative efforts with suitable laboratories either in Japan or abroad. An especially important development in bio-inorganic chemistry to note in this connection is the new field of bio-conjugate chemistry.

Internationalization and international cooperation.

I find the present international activities of IMS such as the Okazaki Conferences and the programs bringing foreign scholars on both short and long terms to be commendable. I recommend that such activities be continued.

Further development for IMS.

Initially, IMS was established to provide resources for research not generally available at Japanese universities. With general improvement of the facilities at such institutions, the role of IMS and its general objectives in Japanese science needs to be redefined.

H. D. Kaesz

上記英文の和訳

分子研錯体化学実験施設についての報告

訪問者: H. D. KAESZ教授, カリフォルニア大ロサンゼルス校

日時: 1993年12月20日

施設長, 中村 晃教授, 及び研究スタッフ3人, 田中晃二, 磯邊 清, 高橋 保各教授と会見した。研究の国際的名声と研究の独創性

IMSでの錯体施設の国際的名声は来年京都で開催される第30回錯体化学国際会議(ICCCと略され, 7月24~29日行われる)での主な組織を行っている事でよく知られている。前施設長大瀧仁志教授はこの会議の委員長であり, 現施設長は副委員長, 更に田中晃二教授は総務委員長である。

最近就任した中村晃教授の国際的名声はよく知られて居り, これ以上つけ加える事もない。彼の存在はこの研究所に高い信頼をもたらすものである。他の研究者はまだ経験が少なく, 国際的には中村氏より低い名声しか持っていない。しかしながら, これらの研究者が報告した研究内容(これらについては別に書くが)は十分に創造的であり, 質的にも量的にも今後国際的な認知を受けるのは確実である。

高い研究水準と生産性を保つための提案

私は周期的な外部評価のシステムが高い研究水準を保ち, 活動をつづけるのに効率の良い方法であると思う。この施設は2年に一度評価を受け, 4年に一度くわしく点検されるのも良いと思う。

設備の現状と新しい研究方針

私の得た情報より判断して現在の設備は適当であり, 加える必要はない。錯体化学の新分野として一般的には生物無機化学と材料科学が挙げられる。IMSのこの施設はすでにこれらの方面の研究をはじめて居り, 日本国内又は海外のグループと協同すれば更に水準が上がるはずである。特に重要な生物無機化学での最近の発展は, bio-conjugate chemistryという新領域ではじまっていることをつけ加えたい。

国際力と国際協力

IMSの現在の国際的活動, 例えば Okazaki Conf. や外国人研究者の短期及び長期プログラムは評価される。これらは将来もつづけられることを望む。

IMSの将来の発展

創立当初は, IMSでは, 日本の大学に設置していない設備を持ち共同利用するために計画されて来た。設備がその後, 次第に改善されるのにつれ, IMSの役割と日本の科学の全般的な目標は再考されなければならない。

H. D. Kaesz

6-4 受賞および表彰

研究所に在職した職員の受賞、表彰歴

赤松秀雄	日本化学会賞	(昭和32年)
	日本学士院賞	(昭和40年)
長倉三郎	朝日賞文化賞部門	(昭和46年)
	日本化学会賞	(昭和41年)
	日本学士院賞	(昭和53年)
	文化功労者	(昭和60年)
	文化勲章	(平成2年)
井口洋夫	日本学士院賞	(昭和40年)
	日本化学会賞	(昭和52年)
	藤原賞	(平成元年)
諸熊奎治	アルフレッド・スローン財団奨励賞	(昭和45年)
	国際量子分子科学アカデミー賞	(昭和53年)
	日本化学会賞	(平成4年)
加藤重樹	日本IBM科学賞	(平成4年)
藤山常毅	日本化学会進歩賞	(昭和45年)
廣田榮治	日本化学会進歩賞	(昭和40年)
	仁科記念賞	(昭和53年)
	Bouke Lectureship	(昭和58年)
	Kistiakowsky Lectureship	(昭和60年)
	日本化学会賞	(昭和61年)
遠藤泰樹	学士院賞	(平成4年)
	日本化学会進歩賞	(昭和58年)
浅野泰子	分光学会論文賞	(平成3年)
坂田忠良	日本化学会学術賞	(昭和58年)
川合知二	日本化学会進歩賞	(昭和53年)
中島信昭	日本化学会進歩賞	(昭和55年)
神取秀樹	光科学技術振興財団研究表彰	
斎藤軍治	井上学術賞	(昭和63年)
	仁科記念賞	(昭和63年)
	日本表面科学論文集	(平成3年)
岩村 秀	日本化学会進歩賞	(昭和38年)
	日本化学会賞	(平成4年)
	シカゴ大学Julia and Edward Lee Lectureship	(昭和62年)
伊藤 翼	日本化学会学術賞	(平成元年)
菅原 正	分子研究科学奨励森野基金	(昭和61年度)

木村克美	日本化学会進歩賞	(昭和40年)
	日本化学会賞	(平成元年)
小谷野猪之助	日本化学会学術賞	(平成4年)

高谷秀正 日本化学会進歩賞（昭和50年）
 Fluka賞 （平成元年）

現在の職員の受賞,表彰歴

伊藤光男 日本化学会賞 （昭和63年）
（現所長） 日本分光学会賞 （平成元年）

その他の現職員分は，第3章の各部門及び施設の項に記載されているので参照されたい。

自己点検・評価の組織と実施状況

7. 自己点検・評価の組織と実施状況

本報告書は、平成5年度分として、伊藤所長を委員長とする分子科学研究所自己点検評価委員会が中心となり企画案を作成し、研究所全職員及び岡崎国立共同研究機構管理局の協力によって原稿を集め完成したものである。分子科学研究所は全国の大学共同利用機関として、又同時に独自の高水準な研究を発展させるべき任務をもった研究所として1975年に発足して以来18年間にわたってその努力を続けてきており、その間も自己点検・評価にも大きな配慮と努力がなされてきた。その例は、その運営方法の工夫や各種の報告書類の継続的な刊行にも見られる通りである。しかし、全てをまとめた点検・評価に関する報告書的なものはこれまでに作成されていなかったので、今回平成5年度版としてその第1号を発刊し、今後は毎年類似の報告書の刊行を継続していく予定である。第1号という意味で、本号には今年度分のみならず項目によってはこれまでの歴史的な部分、特に人事の流動などについてもその詳細を示すことにした。

今回の作業を基として、更により実質的な自己点検・評価につとめ、もって研究所のより一層の活性化に努めたいというのが我々一同の願いである。

分子科学研究所

自己点検評価委員会

伊 藤 光 男 (委員長)

中 村 宏 樹

北 川 禎 三

吉 原 經太郎

中 筋 一 弘

丸 山 有 成

中 村 晃

薬 師 久 彌

花 葛 一 郎

内 田 章

岡崎国立共同研究機構分子科学研究所点検評価規則

(平成5年5月21日)
分子研規則第1号

(目 的)

第1条 この規則は、岡崎国立共同研究機構分子科学研究所（以下「研究所」という。）の設置目的及び社会的使命を達成するため、研究活動等の状況について自ら点検及び評価（以下「点検評価」という。）を行い、もって研究所の活性化を図ることを目的とする。

(委員会の組織)

第2条 研究所に、前条の目的を達成するため分子科学研究所点検評価委員会（以下「委員会」という。）を置く。

2 委員会は、次に掲げる者をもって組織する。

- 一 研究所長
- 二 研究主幹
- 三 研究施設の長
- 四 技術課長
- 五 その他委員長が必要と認めた者

3 前項第5号の委員の任期は、2年とし、再任を妨げない。ただし、補欠の委員の任期は、前任者の残任期間とする。

(委員長)

第3条 委員会に委員長を置き、研究所長をもって充てる。

(招集)

第4条 委員会は、委員長が招集し、その議長となる。

(委員会の任務)

第5条 委員会は、次に掲げる事項について企画、検討及び実施する。

- 一 点検評価の基本方針に関すること。
- 二 点検評価の実施に関すること。
- 三 点検評価報告書の作成及び公表に関すること。
- 四 その他点検評価に関すること。

(点検評価事項)

第6条 委員会は、次の各号に掲げる事項について点検評価を行うものとする。

- 一 研究所の在り方、目標及び将来計画に関すること。
- 二 研究目標及び研究活動に関すること。
- 三 大学等との共同研究体制及びその活動に関すること。
- 四 大学院教育協力及び研究者の養成に関すること。
- 五 教官組織に関すること。
- 六 研究支援及び事務処理に関すること。
- 七 総合研究大学院大学との連係及び協力に関すること。

- 八 施設設備等研究環境及び安全に関すること。
- 九 国際共同研究に関すること。
- 十 社会との連携に関すること。
- 十一 学術団体との連携に関すること。
- 十二 管理運営に関すること。
- 十三 学術情報体制に関すること。
- 十四 研究成果等の公開に関すること。
- 十五 財政に関すること。
- 十六 点検評価体制に関すること。
- 十七 その他委員会が必要と認める事項。

2 前項各号に掲げる事項に係る具体的な点検項目は、委員会が別に定める。

(専門委員会)

第7条 委員会に、専門的事項について調査審議するため、専門委員会を置くことができる。

2 専門委員会に関し必要な事項は、委員会が別に定める。

(点検評価結果の対応)

第8条 研究所長は、委員会が行った点検評価の結果に基づき、改善が必要と認められるものについては、その改善に努めるものとする。

(庶務)

第9条 委員会の庶務は、総務部庶務課において処理する。

(雑則)

第10条 この規則に定めるもののほか、委員会の運営に関し必要な事項は、委員会の議を経て研究所長が定める。

附 則

- 1 この規則は、平成5年5月21日から施行する。
- 2 この規則施行後、第2条第2項第5号により選出された最初の委員の任期は、同条第3項の規定にかかわらず、平成7年3月31日までとする。

資料

8. 資 料

8-1 歴代の評議員 (S. 51～S. 56.4)

氏 名 ・ 所 属 (当 時)	S. 51.1.10 ～ S. 53.1.9	S. 53.1.10 ～ S. 55.1.9	S. 55.1.10 ～ S. 56.4.13
小谷正雄 東京理科大学長	○	○	○
長倉三郎 東大物性研教授	○	○	○
石塚直隆 名古屋大学長	○	○	○
梅棹忠夫 国立民族博物館長	○	○	○
岡村総吾 東大工教授	○	○ (東大名誉教授)	○ (日本学術振興会理事)
ハインツ・ゲリッシャー マックス・プランク財団 フリッツ・ハーバー研究所長	○	○	
柴田承二 東大名誉教授	○	○	○
関 集三 大阪大理教授	○		
田島弥太郎 国立遺伝学研究所	○	○	○
田中信行 東北大理教授	○		
福井謙一 京都大工教授	○	○	○
伏見康治 名古屋大名誉教授	○	○ (日本学術会議会長)	○
ゲルハルト・ヘルツベルグ カナダ国立研究所ヘル ツベルグ天体物理学研究所	○		
森野米三 相模中央化学研究所長	○	○ (東大名誉教授)	○
山下次郎 東大名誉教授	○		
湯川泰秀 大阪大産業科学研教授	○	○ (大阪大名誉教授)	○ (大阪女子大学長)
渡辺 格 慶應義塾大医教授	○	○	○
植村泰忠 東大理教授		○	○
メルビン・カルビン カリフォルニア大学・ケミカ ル・バイオダイナミックス研究所長		○	○
神田慶也 九州大理学部長		○	○ (九州大学長)
齋藤一夫 東北大理教授		○	○
ジョージ・ポーター 英国王立研究所教授化学部長			○

歴代の評議員 (S.56～)

氏 名	所 属	第1期 56.6.1～ 58.5.31	第2期 58.6.1～ 60.5.31	第3期 60.6.1～ 62.5.31	第4期 62.6.1～ 1.5.31	第5期 1.6.1～ 3.5.31	第6期 3.6.1～ 5.5.31	第7期 5.6.1～ 7.5.31
赤松 秀雄	分子研名誉教授	○	○	○	○63.1.8死亡			
石川 忠雄	慶應大塾長	○						
石塚 直隆	名大学長	○～56.7.22						
飯島 宗一	名大学長	○56.9.1～	○	○	○～62.7.21			
植村 泰忠	東大理教授(東京理大教授)	○	○	○				
神田 慶也	九州大学長	○						
小谷 正雄	東京理科大学長	○						
小松 登	豊田中研究員	○	○					
齋藤 一夫	東北大理教授(国際基督教大教授)	○	○～59.5.15			○	○	○
榊 米一郎	豊橋技科大学長	○	○～59.3.31					
島村 修	相模中央研理事	○	○					
田島弥太郎	遺伝研所長	○						
馬場 宏明	北大応電研所長(北大名誉教授)	○	○	○	○		○	
福井 謙一	京大工教授(京都工芸繊維大学長)(基礎化学研究所長)	○	○	○	○	○		
藤巻 正生	お茶女大家政教授(お茶女大学長)	○	○	○				
向坊 隆	東大名教授	○						
森 大吉郎	宇宙研所長	○	○58.11.25死亡					
亀谷 哲治	星薬科大学長		○	○				
角戸 正夫	姫路工大学長		○	○				
本多 波雄	豊橋技科大学長(名商大教授)		○59.4.16～	○	○	○		
田中 郁三	東工大教授(理学部長)(学長) (学位授与機構長)		○	○	○	○		
中嶋 貞雄	東大物性研所長		○					
小田 稔	宇宙研所長(理化学研究所理事)		○59.2.16～	○	○			
齋藤 喜彦	慶應大理工教授			○	○			
森田 正俊	豊田中研代表取締役			○	○	○		
伊東 徹	東北大理教授(徳島分理大薬教授)			○	○	○		
鈴木 進	東北大金材研所長			○	○	○		
豊沢 豊	東大物性研所長(中央大理工教授)			○	○	○		
平野 龍一	東大名教授			○	○			
藤田 栄一	大阪薬科大学長(京大名教授)				○	○		
西原 春夫	早稲田大学長(法教授)				○	○		
倉田 道夫	京大化学研所長(三菱瓦斯顧問)				○	○		
朽津 耕三	東大理学部長(長岡技科大教授)				○	○	○	○
田丸 謙二	東京理科大学教授				○	○	○	○
早川 幸男	名大学長				○62.7.22～	○	○4.2.5死亡	○
千原 秀昭	大阪大教授(化学情報協会専務理事)					○	○	○
米澤 貞次郎	近畿大理工学総合研教授					○	○	○
赤池 弘次	統計数理研所長					○	○	○
三ヶ月 章	東大名教授					○	○	○
伊東 昌壽	東レ研会長					○	○	○
佐々木 慎一	豊橋技科大学長					○	○	○
佐野 博敏	東京都立大学長					○	○	○
櫻井 英樹	東北大理学部長					○	○	○
松永 義夫	北大触媒センター長(熊本大教授)					○	○	○
秋本 俊一	学士院会員(東大名教授)						○	○
岩村 秀	東京大学大学院理学系研究科教授						○	○
加藤 延夫	名古屋大学総長						○	○
黒田 晴雄	東京理科大学総合研究所教授(東京大学名誉教授)						○	○
塩野 宏	成蹊大学法学部教授(東京大学名誉教授)						○	○
田中 久	前京都薬科大学長						○	○
堀 幸夫	日本学術振興会理事(東京大学名誉教授)						○	○
森本 英武	豊田中央研所長						○	○
守谷 亨	東京理科大学理工学部教授						○	○

8-2 歴代の運営に関する委員会委員・運営協議員 (S.50～S.56.3)

氏 名 ・ 所 属 (当時)	S.50.7.15～ S.52.3.31	S.52.4.1～ S.53.3.31	S.53.4.1～ S.54.3.31	S.54.4.1～ S.55.3.31	S.55.4.1～ S.56.3.31
浅原 照三 芝浦工大工教授	○	○			
伊藤 光男 東北大理教授	○				
井口 洋夫 分子研教授	○	○	○	○	○
大野 公男 北大理教授	○	○	○	○	○
角戸 正夫 大阪大蛋白研教授	○	○	○		
神田 慶也 九州大理教授	○	○ (理学部長)	○		
朽津 耕三 東大理教授	○			○	
田中 郁三 東工大教授	○			○	
坪村 宏 大阪大基礎工教授	○				
豊沢 豊 東大物性研教授	○	○			
長倉 三郎 東大物性研教授	○	○	○	○	
中島 威 東北大理教授	○	○	○		
細矢 治夫 お茶の水大理助教授	○			○	○
又賀 昇 大阪大基礎工教授	○				
村田 好正 学習院大理教授	○	○ (東大物性研)	○	○	
山寺 秀雄 名大理教授	○				
吉田 善一 京大工教授	○				
和田 昭允 東大理教授	○	○			
廣田 榮治 分子研教授		○ (委員長)	○ (委員長)	○ (委員長)	○ (委員長)
伊東 徹 東北大理教授		○	○		
大木 道則 東大理教授		○	○		
大滝 仁志 東工大総合工研教授		○	○		
馬場 宏明 北大応用電研教授		○	○		
福井 謙一 京大工教授		○	○	○	
齋藤 喜彦 東大物性研教授		○	○	○	○
諸熊 奎治 分子研教授		○	○	○	
吉原経太郎 分子研教授		○			
霜田 光一 東大理教授			○	○	
武内 次夫 豊橋技大教授			○	○	
山本 常信 京大理教授			○	○	
岩村 秀 分子研教授			○		
木下 実 東大物性研助教授				○	
黒田 晴雄 東大理教授				○	○
山下 雄也 名大理教授				○	○
高谷 秀正 分子研助教授				○	
花崎 一郎 分子研教授				○	○
安積 徹 東北大理助教授					○
坂田 忠良 京大理助教授					○
志田 忠正 京大理助教授					○
鈴木 洋 上智大理工教授					○
伊達 宗行 大阪大理教授					○

氏 名 ・ 所 属 (当 時)	S.50.7.16~ S.52.3.31	S.52.4.1~ S.53.3.31	S.53.4.1~ S.54.3.31	S.54.4.1~ S.55.3.31	S.55.4.1~ S.56.3.31
田 仲 二 郎 名大理教授					○
千 原 秀 昭 大阪大理教授					○
土 屋 莊 次 東大理助教授					○
永 沢 満 名大工教授					○
務 台 潔 東大教養助教授					○
藤 田 純 之 佑 名大理教授					○
塚 田 捷 分子研助教授					○

歴代の運営協議員 (S.56.5 ~)

◎ 会 長 (議 長) 人－人事選考部に属する運営協議員 (会長指名)
○ 副会長 (副議長) 共－共同研究専門委員会 (会長指名)

氏 名	所 属	第 1 期 56.5.1~ 58.4.30	第 2 期 58.5.1~ 60.4.30	第 3 期 60.5.1~ 62.4.30	第 4 期 62.5.1~ 1.4.30	第 5 期 1.5.1~ 3.4.30	第 6 期 3.5.1~ 5.4.30	第 7 期 5.5.1~ 7.4.30
伊 藤 憲 昭	名大工教授	○ 共						
大 野 公 男	北大理教授	○ 人	○					
角 戸 正 夫	阪大蛋白研所長 (姫路工業大学段)	○○						
朽 津 耕 三	東大理教授	○ 人	○ 人					
鈴 木 洋	上智大理工教授	○						
千 原 秀 昭	阪大理教授	○ 人	○					
土 屋 莊 次	東大教養学教授	○ 共		○				
豊 沢 豊	東大物性研教授	○ 人						
廣 田 要	京大理教授	○ 人	~57.3.31	○ 人	○○ 人			
米 澤 貞 次 郎	京大工教授	○						
井 口 洋 夫	分子研教授	◎○ 人	◎○ 人	◎○				
岩 村 秀	〃	○ 人・共	○ 人	○ 人	○~62.5.3			
木 村 克 美	〃	○ 共	○ 共	○ 人・共 1		◎○ 2.1.29~	◎○~4.3.31	
花 崎 一 郎	〃	○	○	○	○ 人・共	○ 共	○ 人・共	○ 人・共
廣 田 榮 治	〃	○ 人	○ 人	○ 人	○	◎○~2.1.16		
藤 山 常 毅	〃	○					◎○ 2.1.29~	
諸 熊 奎 治	〃	○ 人・共	○ 人	○ 人	○ 共	○ 人	○	
吉 原 經 太 郎	〃	○ 人・共	○ 人・共	○ 人・共	○ 人	○ 人		○ 人
田 中 郁 三	〃 (客員) (東工大理教授)	○						
笛 野 高 之	〃 (客員) (阪大基礎工教授)	○	○ 人					
山 寺 秀 雄	〃 (客員) (名大理教授)	○						
田 仲 二 郎	名大理教授	○	○ 人					
伊 藤 光 男	東北大理教授		○	○○ 人				
木 村 雅 男	北大理教授		○○ 共					
黒 田 晴 雄	東大理教授		○ 共					
高 柳 和 夫	宇宙研教授		○	○				
中 島 威	東北大理教授		○ 人					
中 村 宏 樹	分子研教授		○ 共	○	○ 人	○ 人	○ 共	○
丸 山 有 成	〃		○	○	○	○ 人	○ 人	◎○ 人
山 本 明 夫	東工大名誉教授		○		○	○		
茅 幸 二	慶應大理工教授			○ 共	○ 共	○ 共		
菅 野 暁	東大物性研教授			○	○			
坪 村 宏	阪大基礎工教授			○ 人				
細 矢 治 夫	お茶女子理教授			○ 人	○ 人			
又 賀 昇	阪大基礎工教授 (客員)			○ 共	○~63.3.31			
松 永 義 夫	北大理教授			○ 人	○ 人			
北 川 禎 三	分子研教授			○ 共	○ 人・共	○ 人・共	○	○
齋 藤 一 夫	〃			○				
青 野 茂 行	金沢大理教授				○	○		
安 積 徹	東北大理教授				○ 人	○ 人		

氏 名		第 1 期 56.5.1～ 58.4.30	第 2 期 58.5.1～ 60.4.30	第 3 期 60.5.1～ 62.4.30	第 4 期 62.5.1～ 1.4.30	第 5 期 1.5.1～ 3.4.30	第 6 期 3.5.1～ 5.4.30	第 7 期 5.5.1～ 7.4.30
原 田 義 也	東大教養学教授				○人	○○人		
松 尾 拓	九大工教授				○共			
丸 山 和 博	分子研教授 (客員) (京大理教授)			○				
大 瀧 仁 志	分子研教授				○63.4.1～	○	○共	
薬 師 久 彌	〃				○63.9.1～	○共	○人	○人
木 田 茂 夫	〃				○～63.3.3			
岩 田 末 広	慶應大理工教授				1	○人	○人	
志 田 忠 正	京大理教授					○人	○人	
田 隅 三 生	東大理教授					○人	○	
仁 科 雄 一 郎	東北大金材研教授					○共	○	
村 田 好 正	東大物性研教授					○	○○	
中 筋 一 弘	分子研教授					○	○人	○人
飯 島 孝 夫	学習院大理学部長					○	○人	○○
伊 藤 公 一	大阪市立大理教授					○	○人	○人
小 川 禎 一 郎	九大総合理工教授						○共	○共
小 尾 欣 一	東工大理学部長						○共	○
京 極 好 正	阪大蛋白研教授						○人	○人
田 中 晃 二	分子研教授						○	○共
齋 藤 修 二	分子研教授						○	○共
川 崎 昌 博	北大電子科学研教授							○人
近 藤 保	東大理教授							○人
斎 藤 軍 治	京大理教授							○
塚 田 捷	東大理教授							○共
山 口 兆	大阪大理教授							○人
宇 理 須 恒 雄	分子研教授							○
中 村 晃	分子研教授							○

8-3 教官の在任期間一覧

[illegible]

分子構造研究系

		1975(S.50)	1976 (S. 51)	1977 (S. 52)	1978 (S. 53)	1979 (S. 54)	1980 (S. 55)	1981 (S. 56)	1982 (S. 57)	1983 (S. 58)	1984 (S. 59)	1985 (S. 60)	1986 (S. 61)	1987 (S. 62)	1988 (S. 63)	1989 (H. 1)	1990 (H. 2)	1991 (H. 3)	1992 (H. 4)	1993 (H. 5)																					
		4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1																				
分子構造学	50.4																																								
第一研究部門																																									
教 授		廣田 榮治															齋藤 修二																								
		50.12.1															2.1.15					3.4.1																			
助教授		齋藤 修二															森田 紀夫																								
		51.2.1															60.2.28					61.5.16																			
助 手		遠藤 泰樹															金森 英人					水嶋 生智					高野 秀路														
		51.7.1															62.7.31					63.4.1~63.6.30					3.1.1~3.3.31					3.11.16									
		山田 千樫																																							
		51.4.1																				鈴木 敏史					2.5.1					藤井 朱鳥									
																						62.10.16					63.12.31					1.9.1					5.8.31				

* 分子構造学															50.4
第二研究部門															
教 授	朽津耕三 (東大理)	田仲二郎 (名大理)	朽津耕三 (東大理)	坪井 正道 (東大薬)	田中 郁三 (東工大理)	土屋 莊次 (東大教養)	齋藤 修二 (名大理)	上野 晃史 (豊橋技科大)	櫛田 孝司 (大阪大理)	松浦 博厚 (広島大理)	三谷 忠興 (北陸先端院大)				
	50.12.16	51.3.31	51.4.16~	52.4.1~	54.4.1	56.4.1~	58.4.1~	60.4.1~	62.4.1~	1.4.1~	3.4.1~	5.4.1~			
(客員)	花崎 一郎 (大阪大理)	清水富士夫 (東大工)	高見 道生 (理研)	近藤 保 (東大理)	野村 浩康 (名大工)	浜口 宏夫 (東大理)	小林 孝嘉 (東大理)	遠藤泰樹 (東大教養)	藪崎 努 (京大理)	川口健太郎 (国立天文台)					
助教授	50.12.16	51.3.31	51.4.16	53.4.1	55.4.1~	57.4.1~	59.4.1~	61.4.1~	63.4.1~	2.4.1~	4.4.1~				
(客員)															
助 手						川口建太郎				鈴木 俊法		尾関 博之			
						57.11.1			64.1.1	1.4.1	2.9.30	51.1.1			
								小倉 尚志							
							61.8.1								

分子動力学	54.4																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																										
-------	------	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

電子構造研究系

		1975(S.50)	1976 (S. 51)	1977 (S. 52)	1978 (S. 53)	1979 (S. 54)	1980 (S. 55)	1981 (S. 56)	1982 (S. 57)	1983 (S. 58)	1984 (S. 59)	1985 (S. 60)	1986 (S. 61)	1987 (S. 62)	1988 (S. 63)	1989 (H. 1)	1990 (H. 2)	1991 (H. 3)	1992 (H. 4)	1993 (H. 5)		
		4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	
基礎電子化学 研 究 部 門		50.4																				
	吉原經太郎																					
教 授	50.10.1																					
助教授	坂田 忠良																松本 吉泰					
	51.2.1																1.5.15	2.3.16				
助 手	中島 信昭													PETEK HRVOJE								
	51.4.1													62.6.30	62.12.1				5.1.31			
																		富永圭介				
	川合 知二											橋本 和仁					沢邊 恭一					4.7.1
	51.7.1											58.3.31	59.3.1					1.8.31	2.12.1			

電子状態動力学 研 究 部 門		53.4	
教 授	花崎 一郎		
	53.12.1		
助教授	西 信之	鈴木 俊法	
	54.6.16	3.4.30	4.6.16
助 手	西山 岩男	高柳 正夫	
	54.4.1	61.3.31	61.10.1
	篠原 典久	大橋 和彦	戸野倉賢一
	54.10.1	63.8.31	1.3.1 3.8.31 5.1.1.
		山本 和典	
		1.12.1~2.1.31	

* 電子構造 研究部門		53.4									
教 授 (客員)		伊藤光男 (東北大理)	坪村 宏 (阪大基礎)	廣田 襲 (京大理)	林 久治 (理研)	又賀 昇 (阪大基礎)	伊藤 公一 (阪市大理)	伊藤 道也 (金沢大薬)	安積 徹 (東北大理)		
助教授 (客員)		53.6.1~	55.4.1~	57.4.1~	59.4.1~	61.4.1~	63.4.1~	2.4.1~	4.4.1~	中垣 良一	
		松岡 正浩 (京大理)	加藤 肇 (神戸大理)	谷本 能文 (金沢大薬)	櫻木宏親 (筑波大化)	阿部 晴雄 (理研)	岡崎正治 (名工試)	住谷 實 (静岡理工大)	(金沢大薬)		
助 手		53.6.1~	56.4.1~	58.4.1~	60.4.1~	62.4.1~	1.4.1~	3.4.1~	5.4.1~		
				中垣 良一				鈴木 薫			
				57.11.1				2.3.31	2.8.1	5.3.31	
							住谷 実			森 義仁	
							62.10.1	2.9.30		3.10.1	
						岡本 裕己					小林 敬道
						60.10.1		2.9.30			5.8.16

分子集団研究系

		1975(S.50)	1976 (S. 51)	1977 (S. 52)	1978 (S. 53)	1979 (S. 54)	1980 (S. 55)	1981 (S. 56)	1982 (S. 57)	1983 (S. 58)	1984 (S. 59)	1985 (S. 60)	1986 (S. 61)	1987 (S. 62)	1988 (S. 63)	1989 (H. 1)	1990 (H. 2)	1991 (H. 3)	1992 (H. 4)	1993 (H. 5)	
		4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1
物 性 化 学 研 究 部 門		50.4																			
	教 授	井口 洋夫										薬師 久彌									
		50.4.22										62.3.31									
	助教授	小谷野猪之助										鹿野田一司									
		51.2.1										2.3.31									
助 手		石井菊次郎					関 一彦					鶴川 彰人									
		51.4.1					53.3.31					53.10.1					61.7.31				
		田中健一郎										今村 隆史					中澤 康浩				
		51.7.1										60.9.30					61.7.1				
																	3.3.31				
																4.4.1					

基礎光化学
研 究 部 門

53.4

教 授	木村 克美			} H. 3. 4 極端紫外光 科学研究系へ
	54.3.16			
助教授	正畠 宏祐			
	54.8.1			
助 手	阿知波洋次		奥山 克彦	
	54.4.1	61.3.31	61.8.16	
	田林 清彦			
	54.10.1			

H. 3. 4
極端紫外光
科学研究系へ

分子集団動力学
研 究 部 門

58.4

教 授	丸山 有成									
	59.2.1									
助教授	佐藤 正俊									
	60.2.16 2.3.31									
助 手	小野田雅重									
	60.7.1 2.3.31									
	世良 正文									
	62.8.1 2.3.31									
	稲辺 保									
	59.8.1 4.3.31									

宮島 清一	4.8.1									
	鈴木 敏泰									
緒方 啓典	4.10.1									
	5.4.1									

宮島 清一
4.8.1
鈴木 敏泰
4.10.1
緒方 啓典
5.4.1

分子集团研究系

[illegible]

界面分子科學
研究部門
(流動)

助教授

助教授

助手

松島 龍夫 (北大触媒セ)

1.5.29 3.3.31

佐藤 真理 (北大触媒セ)

1.5.29

大森 唯義 (北大触媒セ)

1.5.29 3.3.31

大野 佑一 (北大触媒セ)

1.5.29

H. 3. 4
極端紫外光科学研究系へ

相關領域研究系

		1975(S.50)	1976 (S. 51)	1977 (S. 52)	1978 (S. 53)	1979 (S. 54)	1980 (S. 55)	1981 (S. 56)	1982 (S. 57)	1983 (S. 58)	1984 (S. 59)	1985 (S. 60)	1986 (S. 61)	1987 (S. 62)	1988 (S. 63)	1989 (H. 1)	1990 (H. 2)	1991 (H. 3)	1992 (H. 4)	1993 (H. 5)																																	
		4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1																
相 関 学 分 子 科 学 部 一 門		52.4																																																			
	教 授	岩村 秀																		中筋 一弘																																	
		52.12.1																		62.5.31																		63.9.1										5.9.30					
	助教授	伊藤 翼																		磯邊 清																																	
		53.4.1																		60.9.30										62.1.1																							
助 手		菅原 正																		村田 滋																		森田 靖															
		53.3.1																		61.5.15										61.11.1~62.4.30										2.6.1										5.9.30			
		鳥海幸四郎																																				田所 誠															
		53.6.1																																				3.3.31										4.5.1					
																				小澤 芳樹																		阿部 正明															
																				62.12.1																		4.3.31										5.4.1					

相 関 学 分 子 研 究 部 門	52.4																			
	齋藤 喜彦 (東大物性研)		藤田純之佑 (名大理)		山寺 秀雄 (名大理)		山本 明夫 (東工大資源研)		三角 莊一 (阪大産研)		丸山和博 (京大理)		櫻井英樹 (東北大理)		矢野由美彦 (群馬大理)		青山 安宏 (長岡技科大)			
	51.10.1		54.4.1		56.4.1		58.4.1		60.4.1		62.4.1		1.4.1		3.4.1		5.4.1			
	岩村 秀 (東大理)		坂田祥光 (阪大産研)		原田宣之 (東北大非水研)		務台 潔 (東大産)		岡崎 廉治 (東大理)		宮仕 勉 (東北大理)		鈴木寛治 (東工大資源研)		中村栄一 (東工大理)		小槻日吉三 (高知大理)		植村 元一 (阪市大理)	
	51.10.1 52.11.30		53.4.1		55.4.1		57.4.1		59.4.1		64.4.1		62.7.1		1.4.1		3.4.1		5.4.1~	
	古賀 登															豊田 二郎				
	57.11.1															62.9.30		3.12.1		
大塩 寛紀															鈴木 孝義					
60.8.16															4.2.29		4.7.1			

有機研究部門 (流 動)	1.5	(助教授) 新名主輝男 (九大理)	(助教授) 成田 吉徳 (京大理)
教 授	1.5.29 都野雄甫 (九大理)	3.10.1	5.4.1
助教授	1.9.1 稲永 純二 (九大理)		根本尚夫 (東北大理)
助 手	1.5.29 三島 正章 (九大理)		5.4.1 臼井 聡 (熊本大工)
	2.1.1 花本 猛士 (九大理)		5.4.1 浅尾 直樹 (東北大理)

極端紫外光研究系

1984 (S. 59)	1985 (S. 60)	1986 (S. 61)	1987 (S. 62)	1988 (S. 63)	1989 (H. 1)	1990 (H. 2)	1991 (H. 3)	1992 (H. 4)	1993 (H. 5)														
4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1

基礎光化学
研究部門

分子集団研究系から

教授

助教授

助手

	木村 克美	小杉 信博
54.3.16	4.3.31	5.1.1
	正畠 宏裕	
54.8.1		5.12.15
	奥山 克彦	
61.8.16		
	田林 清彦	高田恭孝
54.10.1	5.3.31	5.11.16
	高橋 正彦	
	4.1.16~4.3.31	

反応動力学
研究部門

教授

助教授

助手

	宇理須恆雄
	4.5.1
	見附孝一郎
3.4.1	
	間瀬 一彦
4.4.1	
	吉田 啓晃
4.4.1	

界面分子科学
研究部門
(流動)

教授

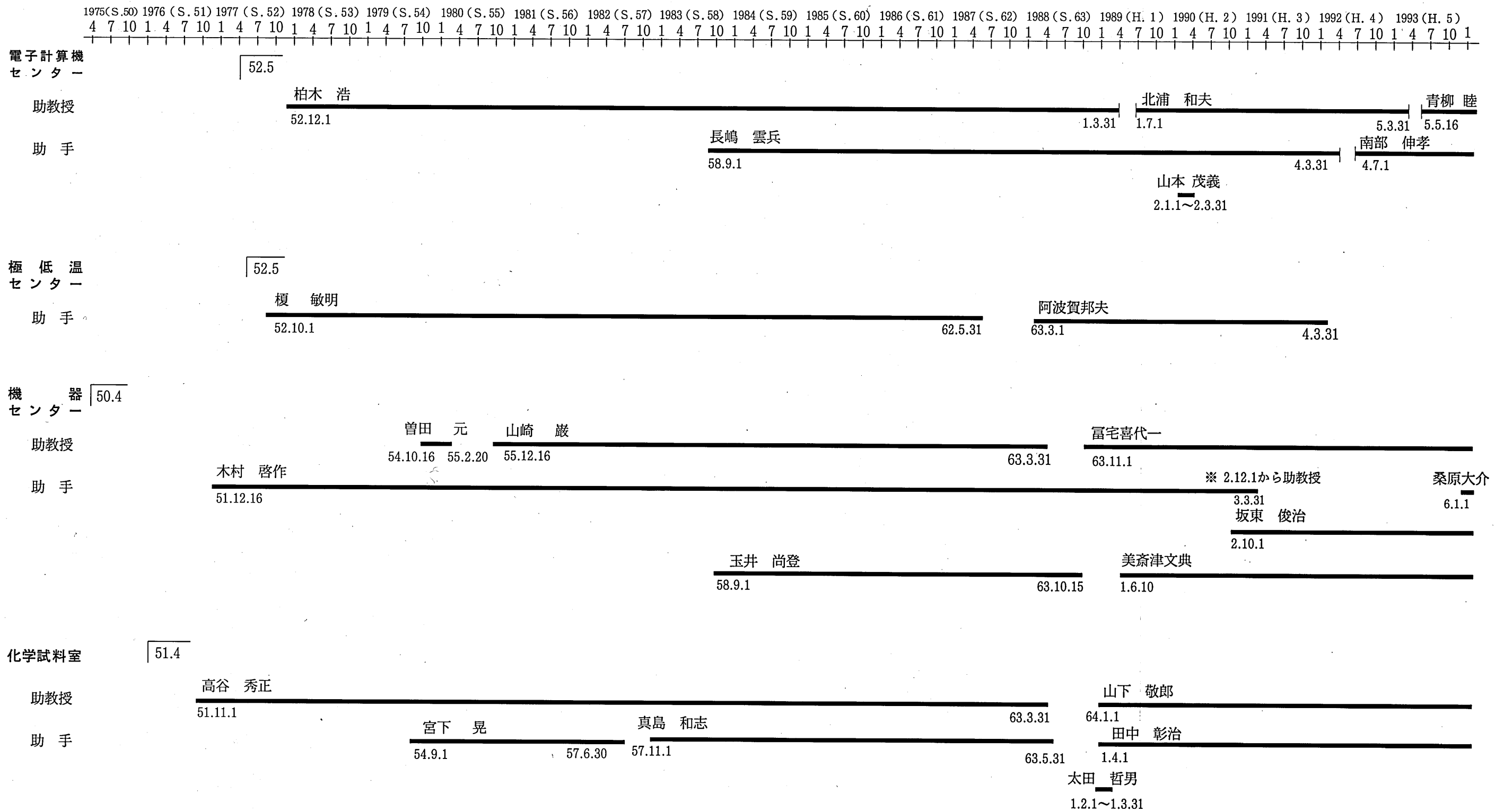
助教授

助手

分子集団研究系から

	吉田 明 (豊橋技科大)	川副 博司 (東工大)
3.4.1	佐藤 真理 (北大)	5.4.1
		西尾 光弘 (佐賀大理)
1.5.29	水野 清義 (北大)	5.4.1 橋本拓也 (東工大)
		植田尚之
3.4.12		5.4.1 5.10.1
	大野 佑一 (北大)	林 浩司 (岐阜大工)
1.5.29		5.4.1

研究施設



錯体化学実験施設

		1984(S.59)		1985 (S.60)		1986 (S.61)		1987 (S.62)		1988 (S.63)		1989 (H.1)		1990 (H.2)		1991 (H.3)		1992 (H.4)		1993 (H.5)	
		4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1
錯体合成研究 部門（流動）		59.4																			
教 授	武居文彦（東北大金材研）	木田茂夫（九大理）				木村栄一（広島大医）				久司佳彦（阪大養）				福田 豊（お茶大理）							
	59.4.1～	61.4.1				63.4.1				2.4.1				4.4.1							
助教授	手老省三（〃非水研）	石黒慎一（東工大）				池田龍一（名大理）				川泉文彦（名大工）				沢田 清（新潟大理）							
	59.4.1～	61.4.1				63.4.1				2.4.1				4.4.1							
助 手	恒川 信（〃金材研）	小堤和彦（筑波大）				塩谷光彦（広島大）				川本達也（阪大養）				市田 光（東京大理）							
	59.4.1～	61.4.1				63.4.1				2.4.1				4.4.1							
	細谷正一（〃金材研）	小寺正人（九大理）				増田英樹（名大理）				野々山松男（名大理）				佐藤敬一（新潟大理）							
	59.4.1～	61.4.1				63.4.1				3.4.1				4.4.1							
		御厨正博																			
		61.4.1				62.3.31															

錯体触媒研 究 部 門		59.4									
教 授	齋藤 一夫			大瀧仁志						中村 晃	
	59.6.1	62.3.31		63.4.1		5.3.31				5.4.1	
教 授	中村晃（阪大理）		齋藤太郎（阪大基礎）		吉田寿勝（大阪府大）		木村栄一（広大理）		生越久靖（京大工）		
(客 員)	59.5.1	61.4.1		63.4.1		2.4.1		4.4.1			
助教授	柏原和夫（名大理）		舟橋重信（名大理）		黒田玲子（東大養）		池田龍一（名大理）		小坂田耕太郎（東工大資源研）		川泉文彦（名大工）
(客 員)	59.5.1	61.4.1		63.4.1		2.4.1		3.4.1		4.4.1	
助 手	中島清彦						DANIEL THOMAS				
	61.12.1		4.3.31				5.6.8				

錯体物性 研 究 部 門		H. 1.5																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																					
-----------------	--	--------	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

		1984(S.59)				1985 (S. 60)				1986 (S. 61)				1987 (S. 62)				1988 (S. 63)				1989 (H. 1)				1990 (H. 2)				1991 (H. 3)				1992 (H. 4)				1993 (H. 5)			
		4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1	4	7	10	1
* 配位結合研究 部 門		61.4																																							
	教 授 (客員)	武居文彦 (東北大金材研)				上原 章 (金沢大理)				干鯛眞信 (東大工)				伊藤 翼 (東北大理)				松本和子 (早稲田大理工)																							
		61.4.5				63.4.1				1.4.1				3.4.1				5.4.1																							
助教授 (客員)		手老省三 (東北大排水研)				大川尚士 (九州大理)				山口敏男 (福岡大理)				鈴木正樹 (金沢大理)				永沢 明 (埼玉大理)																							
		61.4.5				63.4.1				1.4.1				3.4.1				5.4.1																							

8-4 転出職員の現状

現 在 の 職		転 出 時 の 職					備 考
		教 授	助 教 授	助 手	技 官	非常勤の講師	
国立大学 (大学共同 利用機関 を含む)	機関の長	2					副学長を含む
	教 授	3	14	8	2		
	助 教 授			22	12	3	
	講 師			2	3	1	
	助 手			14	22	10	
公立大学	教 授		4	1	1		
	助 教 授			3		1	
	助 手			2	2	2	
私立大学	教 授	(1) 2		1			
	助 教 授			3	2	1	
	講 師			1	3		
	助 手			1	1	1	
	技 術 職				1		
国 立 の 研 究 機 関				2	2	1	
そ の 他 の 研 究 機 関				4	2	1	
民 間 企 業				4	8	3	
そ の 他		1	1	4	5	7	死去・不明を含む

* () 書きは外国の大学・研究機関等で外数
** 創設から平成6年9月30日までに転出した者の現職について調査
*** 流動研究部門の教官、客員の教官(外国人を含む)は除外

8-5 研究会開催一覧表

年 度	研 究 会 名	提 案 代 表 者	旅費支給者
51 (13件)	相関分子科学と基礎有機化学	桜井英樹（東北大理）	
	TCNQ錯体の構造と物性	田仲二郎（名大理）	
	金属錯体の立体化学	山寺秀雄（名大理）	
	極端紫外光源	井口洋夫（分子研）	
	化学における研究動向について	井口洋夫（分子研）	
	ピコ秒パルスについて	吉原經太郎（分子研）	
	有機分子性結晶における電荷移動機構	丸山有成（お茶大理）	
	電子励起状態における分子の動的過程	広田榮治（分子研）	
	光合成の初発反応に関する研究	森田茂広（東大理）	
	レーザー誘起化学反応	土屋莊次（東大教養）	
	高励起原子分子の生成と反応	朽津耕三（東大理）	
	化学研究将来計画と分子科学	井口洋夫（分子研）	
	研究機関における技術者の研究推進に対する役割	井口洋夫（分子研）	
52 (9件) 128名	光エネルギーの化学的利用	徳丸克己（筑波大化学）	16名
	物質探索	井口洋夫（分子研）	15名
	イオン結晶および錯体におけるd電子状態	丸茂文幸（東工大工材研）	17名
	フリーラジカルおよび分子イオンの高分解能分光	廣田榮治（分子研）	15名
	極端紫外連続光源を利用した観測システム	井口洋夫（分子研）	14名
	相関分子科学と動的有機化学	加治有恒（京大理）	14名
	レーザーを中心とした大型設備について	吉原經太郎（分子研）	7名
	分子の電子状態の大型計算について	諸熊奎治（分子研）	17名
	グラファイト層間化合物…その物理と化学	井口洋夫（分子研）	13名
53	光エネルギー利用による水素の生成	八木達彦（静岡大教育）	6名
	固体界面反応の分子論的アプローチ	田丸謙二（東大理）	16名
	金属ポルフィリンの理論と実験の現状と将来	小林 宏（東工大理）	10名
	新しい π 電子系の合成とその構造特異性に関する研究	吉野 持（九大理）	14名

年 度	研 究 会 名	提 案 代 表 者	旅費支給者
53 (14件) 170名	光電子スペクトル強度	木村克美（北大応電研）	14名
	半導性高分子及び分子性結晶の物性と電子的過程における相関	井口洋夫（分子研）	13名
	気相イオン反応研究（機器を用いた反応研究）	田村孝章（東工大）	12名
	分子イオンの生成、反応と高分解能分光	廣田榮治（分子研）	9名
	多原子価化合物の構造と物性	井口洋夫（分子研）	20名
	Molecular Processes on solid Surfaces	塚田 捷（分子研）	17名
	太陽エネルギーに関する基礎研究の国際交流について	井口洋夫（分子研）	7名
	溶液反応の熱力学と反応機構	大瀧仁志（東工大総合）	14名
	遷移状態構造への理論と実験からのアプローチ	岩村 秀（分子研）	12名
	高分解能遠赤外分光システム	廣田榮治（分子研）	6名
	Theoretical Aspects of Chemical Reactions and Molecular Interactions	諸熊奎治（分子研）	16名
54 (16件) 210名	分子衝突の動力学	朽津耕三（東大理）	12名
	レーザーの化学反応への応用	吉原經太郎（分子研）	15名
	溶液内における分子間相互作用	大瀧仁志（東工大総合）	15名
	分子科学のための大型プログラムと言語の開発	柏木 浩（分子研）	14名
	太陽エネルギーの貯蔵と転換	井口洋夫（分子研）	2名
	層状化合物の物理と化学	佐野瑞香（電通大）	18名
	ミセル系の構造と機能	北原文雄（東京理大工）	14名
	分子科学研究将来計画	赤松秀雄（分子研）	12名
	高性能大型レーザーの開発と応用	廣田榮治（分子研）	7名
	UVSOR研究会	木村克美（分子研）	27名
	化学反応性把握への理論と実験からのアプローチ	速水醇一（京大教養）	9名
	光化学への分子線の応用	木村克美（分子研）	17名
	ベンゼンおよびアザベンゼン類の光化学初期過程	吉原經太郎（分子研）	10名
	非ポルフィリン系マクロサイクリック錯体の構造と機能	伊藤 翼（分子研）	12名
	Purification and Crystal Growth for Molecular Crystals (分子性結晶の精製と結晶成長)	佐野瑞香（電通大）	10名

年 度	研 究 会 名	提 案 代 表 者	旅費支給者
55 (11件) 139名	無機化学と電子状態理論との接点	米澤貞次郎（京大工）	12名
	高感度マイクロ波分光器の開発とその応用	齋藤修二（分子研）	9名
	液体及び溶液における動的構造	山本常信（京大理）	14名
	均一および不均一溶液系における化学的光エネルギー変換	吉原經太郎（分子研）	13名
	生物における電子の挙動－クロロフィルを中心として	広田文彦（静岡大教育）	13名
	素反応過程：実験と理論の接点	楠 勲（東北大科研）	14名
	化学における理論の役割と可能性について	中辻 博（京大工）	11名
	UVSOR計画－シンクロトロン及び観測システムの設計	木村克美（分子研）	11名
	Molecular Systems for Electronic Devices	黒田晴雄（東大理）	10名
	有機物および生体系にみられる弱い分子間相互作用	廣田 穰（横浜国大工）	13名
	励起電子状態理論の最近の進歩	諸熊奎治（分子研）	19名
56 (11件) 147名	光エネルギーの化学的変換における高効率光電荷分離を 探る研究会	藤嶋 昭（東工大）	18名
	化学反応への衝突論的アプローチ	大野公男（北大理）	10名
	溶体及び溶液における動的構造	土井正男（都立大理）	12名
	高機能性遷移金属錯体の合成と反応	高谷秀正（分子研）	19名
	金属錯体における分子内および分子間相互作用	佐々木陽一（東北大理）	14名
	UVSOR－ストレージリングと観測システムの設計	木村克美（分子研）	13名
	分子科学の理論における化学と物理の接点	中村宏樹（分子研）	11名
	ハイブロニック系における緩和および共鳴二次光放出過程	安積 徹（東北大理）	13名
	ヘテロ原子と有機金属錯体の反応の接点の探究	秋葉欣哉（広大理）	13名
57	スーパーコンピューターとその分子科学への応用	柏木 浩（分子研）	20名
	有機強磁性体の分子設計		4名
	光学活性と分子の非対称性に関する最近の進歩	原田宣之（東北大非水研）	15名
	溶媒－溶質・溶質－溶質相互作用に関する理論と実験	山寺秀雄（名大理）	19名
	生体系をモデルにしたエネルギー変換と分子制御	右衛門佐重雄（名大理）	17名
	分子性導体の合成と電子物性	城谷一民（東大物性研）	17名
	Symposium on Reaction Dynamics	正畠宏祐（分子研）	16名

年 度	研 究 会 名	提 案 代 表 者	旅費支給者
57 (12件) 171名	概念的に新しい有機化合物の設計・開発－構造・物性有機 化学の現状と将来の展望－	村田一郎（阪大理）	20名
	ピコ秒分光による超高速現象	塩谷繁雄（東大物性研）	16名
	特殊な機能を有する金属錯体	吉川雄三（名大理）	19名
	励起状態における電子移動・プロトン移動	吉原經太郎（分子研）	11名
	第IV族原子間多重結合	廣田榮治（分子研）	11名
	一次元絶縁体の電子物性－ポリエチレン及び一次元金属錯 体を中心にして－	三谷洋興（分子研）	7名
	錯体分子科学における新しい実験法	山寺秀雄（名大理）	3名
58 (8件) 144名	分子・分子クラスターの光イオン化分光	木村克美（分子研）	19名
	色素を用いた光エネルギー変換	吉原經太郎（分子研）	16名
	錯体化学における分子科学的研究法の適用と展望	大瀧仁志（東工大総合）	16名
	EXAFS-実験と物性研究の現状	宇田川康夫（分子研）	18名
	脂質二重膜の物性	伊豆山健夫（東大教養）	17名
	化学反応速度の実験と理論－とくに遷移状態について－	土屋莊次（東大教養）	11名
	光励起の振動緩和と無輻射遷移	那須奎一郎（分子研）	10名
59 (8件) 157名	分子科学における計算機実験の役割と可能性	中西浩一郎（京大工）	37名
	ラマン分光法のフロンティア	北川禎三（分子研）	14名
	化学反応と生体に対する磁場効果研究の現状と展望	林 久治（理化研）	21名
	分子クラスターの生成・構造と動的挙動	茅 幸二（慶應大理工）	31名
	超微粒子の生成とキャラクタリゼーション	和田伸彦（名大理）	22名
	均一系触媒作用の基礎過程とその制御	伊藤健児（豊橋技科大）	14名
	赤外光パルス技術の開発と物性研究への応用	三谷忠興（分子研）	8名
	スーパーコンピューターの効果的・創造的利用のために	柏木 浩（分子研）	7名
	UVSOR研究会		40名
60	水素吸着グラファイト－アルカリ金属層間化合物の合成と 物性	榎 敏明（分子研）	10名
	レーザー化学における動的諸過程	西 信之（分子研）	19名
	有機薄膜の分子設計と機能	岡田正和（広大生物生産）	15名
	分子集合体における構造と光エネルギー緩和	丸山有成（分子研）	14名

年 度	研 究 会 名	提 案 代 表 者	旅費支給者
60 (10件) 143名	有機カゴ型化合物のつくる分子場と特異機能の研究	三角 荘一 (阪大生産研)	20名
	金属多核錯体触媒とクラスター触媒の接点に関する諸問題	中村 晃 (阪大理)	14名
	分子過程動力学の理論	中村宏樹 (分子研)	30名
	単一物質より成る導電性有機化合物 (分子ファスナー)	井口洋夫 (分子研)	6名
	準安定励起原子分子の生成とその動的挙動	朽津耕三 (東大理)	9名
	新しい電子分光	木村克美 (分子研)	6名
61 (9件) 155名	化学反応動力学研究の最近の進歩	正畠宏祐 (分子研)	25名
	炭酸ガス・窒素固定の電気化学および触媒プロセス	伊藤 要 (名工大)	16名
	分子の動的挙動と化学反応に対する磁場効果	林 久治 (理化研)	22名
	短寿命分子の高分解能スペクトル	廣田榮治 (分子研)	24名
	金属錯体による酸素ならびに低分子の活性化機構	森島 績 (京大工)	19名
	非断熱遷移をともなう原子・分子衝突と化学反応	金子洋三郎 (都立大理)	21名
	電子状態の理論研究	諸熊奎治 (分子研)	5名
	新機能物質としての無機／有機中間化合物の探索	井口洋夫 (分子研)	8名
	孤立分子集合体の光励起緩和過程	正畠宏祐 (分子研)	15名
62 (9件) 143名	酸化物高温超伝導体の合成と物性	武居文彦 (東大物性研)	25名
	レーザー誘起固体表面過程の分子論的アプローチ	増原 宏 (京工繊大繊)	18名
	有機分子集合体の設計と物性の制御	三谷忠興 (分子研)	24名
	光化学反応の動的挙動	小尾欣一 (東工大理)	21名
	電子状態理論の基礎と応用	諸熊奎治 (分子研)	7名
	MPI分光	木村克美 (分子研)	12名
	J.N.Murrell教授をかこむmini-symposium	諸熊奎治 (分子研)	3名
	特異な機能をもつ遷移金属錯体	高谷秀正 (分子研)	17名
	異常な電子状態にある金属ポルフィリンの構造, 反応, 物性	北川禎三 (分子研)	16名
63	配位環境の制御と協同効果の発現	山村剛士 (東京理大)	19名
	レーザーラマン分光の最新技術と効果	小林雅道 (阪大理)	24名
	電極・触媒系における電子移動過程	坂田忠良 (分子研)	27名

年 度	研 究 会 名	提 案 代 表 者	旅費支給者
63 (9件) 187名	第3回日韓分子科学シンポジウム	花崎一郎 (分子研)	25名
	スピン化学の新展開	廣田 穰 (京大理)	18名
	生体機能に対する分子科学的アプローチ	今村 詮 (広大理)	16名
	錯体の高分子および知能化による複合機能の発現	戸嶋直樹 (東大工)	22名
	水素・電子結合系における諸問題	三谷忠興 (分子研)	20名
	固体化学と錯体化学の接点	磯邊 清 (分子研)	16名
元 (9件) 116名	若手分子科学研究者のための理論化学研究会	梶本興亜 (東大教養)	6名
	固体内の分子状励起状態の緩和機構	松井敦男 (甲南大理)	20名
	非線形非平衡条件下における分子過程	吉川研一 (名大教養)	20名
	金属錯体分子集合体の合成と物性	城谷一民 (室蘭工大)	15名
	新共役電子系の構築と新物質, 物性探索	中筋一弘 (分子研)	20名
	原子・分子の高電子励起状態－電子相関効果と動的挙動－	松澤通生 (電通大)	17名
	ミニシンポジウム(TTCnTTF)	丸山有成 (分子研)	4名
	基礎物質科学における有機構成分子の設計と構築	中筋一弘 (分子研)	6名
	一次元系の電子相関と電子格子相互作用	三谷忠興 (分子研)	8名
2 (10件) 109名	若手分子科学研究者のための理論化学研究会	加藤立久 (京大理)	8名
	化学研究推進のための研究態勢	井口洋夫 (分子研)	16名
	新しい金属錯体とその固体物性	薬師久彌 (分子研)	6名
	超分子的多次元多機能型化合物の合成は金属錯体を用いて可能か	磯邊 清 (分子研)	8名
	有機分子の機能発現プロセスの解析とデザイン	中村栄一 (東工大理)	18名
	超微粒子と光の相互作用	木村啓作 (分子研)	7名
	分子システムの設計と構築	小谷正博 (学習院大理)	28名
	シトクロムの構造と物性	井口洋夫 (分子研)	6名
	フタロシアニンの化学と物理	丸山有成 (分子研)	6名
	チトクロム酸化酵素の分子科学	小倉尚志 (分子研)	6名
3	若手分子科学研究者のための理論化学研究会	馬場正昭 (京大教養)	8名
	非線系型光学材料の分子科学	薬師久彌 (分子研)	6名

年 度	研 究 会 名	提 案 代 表 者	旅費支給者
3 (10件) 91名	ラマン分光法の励起状態研究への応用	北川禎三 (分子研)	6名
	IMSマシン開発に向けて－技術革新と分子科学－	浅香修治 (分子研)	5名
	反陽子を含む新粒子による分子科学新展開の可能性	中村宏樹 (分子研)	4名
	電子, スピン, イオン, 分子の移動及び配列における金属錯体配位圏の特異性	大瀧仁志 (分子研)	7名
	分子線を利用した化学反応ダイナミックス研究会	楠 勲 (東北大科研)	17名
	原子・分子・原子核における動力学の理論的解析手法とその周辺	渡辺真一 (電通大)	17名
	分子クラスターの反応とダイナミックス	伊藤道也 (金沢大薬)	17名
	分子性結晶の高圧特性の動的展開	井口洋夫 (分子研)	4名
4 (8件) 113名	有機無機複合系の導電性と磁性	薬師久彌 (分子研)	6名
	液体及び混合液体中の分子配列	大瀧仁志 (分子研)	7名
	若手分子科学研究者のための物理化学研究会	野々村真司 (東大理)	9名
	構造制御された多中心金属イオンによる複合反応場の設計	市川 勝 (北大触媒研)	20名
	振動分光法による物質の時間・空間変化の追跡	中島信一 (阪大工)	20名
	分子動力学と化学反応性に関する研究会	大峯 巖 (分子研)	7名
	Dynamical Processes in Molecules and Molecular Assemblies (分子及び分子集合体における動的過程)	花崎一郎 (分子研)	28名
	サブミリ波望遠鏡建設による星間化学と星間物理の新展開	山本 智 (名大理)	16名

8-6 分子科学研究所定期刊行物一覧

誌 名	発 行	連 絡 先
ANNUAL REVIEW	年 1 回	国際研究協力課 研究協力第一係 0564-55-7134
ANNUAL REVIEW (抜刷) (各研究室の紹介 (英文))	年 1 回	国際研究協力課 研究協力第一係 0564-55-7135
電子計算機センターレポート	年 1 回	電子計算機センター 0564-55-7462
UVSOR ACTIVITY REPORT	年 1 回	極端紫外光実験施設 0564-55-7402
分子科学研究所要覧	年 1 回	庶務課企画調査係 0564-55-7114
分子研レターズ	年 2 回	庶務課企画調査係 0564-55-7114
技術研究会報告	3 年に 1 回	技術課 0564-55-7243

分子研レポート '93

－現状・評価・課題－

平成6年3月発行

岡崎国立共同研究機構

分子科学研究所長 伊藤 光男

管理局総務部庶務課

岡崎市明大寺町字西郷中38

電話 0564-55-7000

印刷 〒433 静岡県浜松市泉3丁目26-14

製本 (有) ティ・ケープリント