分子研リポート'94

現状・評価・将来計画



分子科学研究所

表紙の絵は、伊藤光男分子科学研究所長による「正門から見た分子科学研究所」

「分子研リポート'94」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 4
2-4 研究所の運営 5
2-4-1 評議員会 5
2-4-2 運営協議員会 6
2-4-3 人事選考部会 6
2-4-4 共同研究専門委員会 7
2-4-5 学会等連絡会議 8
2-4-6 教授会議 8
2-4-7 主幹会議 8
2-4-8 大学院委員会 8
2-4-9 特別研究学生受入れ審査委員会 8
2-4-10 各種の委員会 8
2-4-11 岡崎共同研究機構の委員会 10
2-5 構 成 員 11
2-5-1 現在の構成員 11
2-5-2 人事異動状況（平成７年１月１日現在） 16
2-6 各研究系の概要 17
2-6-1 研究系および研究施設 17
2-7 特別研究と岡崎コンファレンス 22
2-7-1 特別研究 22
2-7-2 岡崎コンファレンス 30
2-8 共 同 研 究 38
2-9 国際交流と国際協同研究 41
2-9-1 国際交流 41
2-9-2 国際共同研究 43
2-10 大 学 院 教 育 47
2-10-1 総合研究大学院大学 47
2-10-2 特別研究学生 50
2-11 定員と予算 51
2-11-1 定　員 51
2-11-2 予算の推移 52
2-12 共 通 設 備 53
2-12-1 図書館 53

2-12-2 宿泊施設 53
2-12-3 職員会館 53
2-13 地域社会との交流 54
2-13-1 国研セミナー 54
2-13-2 一般公開 55
2-13-3 見学受入状況（団体） 55

3. 研究系及び研究施設の現状 59
3-1 理論研究系 59
3-2 分子構造研究系 69
3-3 電子構造研究系 79
3-4 分子集団研究系 93
3-5 相関領域研究系 105
3-6 極端紫外光科学研究系 114
3-7 錯体化学実験施設現状と将来 126
3-8 研究施設 144

4. 研究施設の点検・評価 165
4-1 施設の点検・評価 165
4-2 電子計算機センター 167
4-3 極低温センター 185
4-4 機器センター 188
4-5 化学試料室 189
4-6 装置開発室 190
4-7 極端紫外光実験施設 191

5. 将来計画 199
5-1 将来計画委員会、専門委員会の設置と活動 199
5-2 将来計画研究分野検討小委員会報告書 201
5-3 研究組織検討小委員会報告書 217
5-4 共同研究・教育検討委員会報告書 220
5-5 UVSOR検討小委員会報告書 222

6. 資　料 227
6-1 歴代の評議員（S.51～S.56.4） 227
6-2 歴代の運営に関する委員会委員・運営協議員（S.50～S.56.3） 230
6-3 歴代の運営協議員（S.56.5～） 232
6-4 研究会開催一覧表 234
6-5 分子科学研究所定期刊行物一覧 240
6-6 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所点検評価規則 241

6-7　分子科学研究所将来計画委員会規則 244
6-8　分子科学研究所将来計画委員会専門委員会 245
6-9　分子研将来計画に関するアンケート 246
6-10　研究所運営に関するアンケート 247

1. 序　言

1．序　　言

“分子研リポート’94”をお届けする。これは昨年の“分子研リポート’93”に続くものであり、この一年間の分子研の種々の活動状況をまとめたものである。

昨年はこの種の報告書としては初めてという事もあり、研究所の沿革、組織、運営、各種事業等についてかなり詳しい説明を行った。また、個々の研究者の研究活動を資料を付して紹介した。しかし、同時に、著名な国内・国外の分子科学研究者による徹底した研究評価を実施し、その結果を報告したことが最大の特徴であった。昨年の点検評価は研究所の研究部門（研究系）に限られ、研究所のもう1つの重要な構成要素である研究施設については時間の関係で実施することができなかった。したがって、本年度前半に研究施設の点検・評価を行った。6つの研究施設（電子計算機センター、極低温センター、機器センター、化学試料室、装置開発室、極端紫外光実験施設）のそれぞれについて所内・所外研究者による点検・評価のワークショップを設け、各研究施設の現状分析、評価、今後の課題等について議論を行った。各ワークショップによる点検・評価は報告書にまとめられ所長に提出された。これらの報告書はそのまま本リポートに掲載することにした。これにより、昨年以来実施してきた分子研全体（研究系＋研究施設）の点検・評価の作業が一応終了したことになる。

以上の点検・評価の結果、分子研がかかえる多くの課題が明確になり、また望ましい姿が浮き彫りにされた。次のステップはこれらの課題について議論、討論を行い対応策を練ると同時に、分子研の将来像を明らかにしてその実現を計ることである。本年度後半は全所をあげてこの問題に精力的に取り組んだ。まず、将来計画委員会のなかに4つの専門部会――研究分野検討小委員会、研究組織検討小委員会、共同研究・教育検討小委員会、UVSOR検討小委員会――を設けそれぞれの事項について検討を重ね、その結果をもちよって教授・助教授全員参加の全体会議に諮るというプロセスを数回にわたり繰り返した。その結果、全所的にコンセンサスが得られたものが報告書としてまとめられ所長に提出された。これらの報告書もそのまま本リポートに掲載した。

本リポートに載せた将来計画の報告書にはそれぞれの事項について多くの重要な提案がなされている。それらの中で中心となるものは現在の研究施設の3つを再編、統合し、研究系とのより緊密な連携をはかる2つの研究センターを創設するという提案である。21世紀に向けた分子科学研究の発展において分子研が主導的役割を果たすためには、この提案がさらに真剣に検討され、関係方面の理解を得ながら早期に実現するよう努力しなければならないと考えている。その他の提案のなかには所内措置で実現可能なものも多い。これらについては早期に実行に移すことが合意されている。一方、なお将来像が不明確な事項も多く残されている。これらについては今後引き続き検討を重ねることになっている。

以上に加えて、昨年同様、個々の研究者のこの1年の活動状況を掲載した。本リポートは、今分子研が何を考え何をしようとしているかを一般の方々にお知らせするのが本来の目的であるが、本リポートの内容は、委員会での議論等を含め分子研構成員全員にとって、分子研の現状を一層認識し、その使命をさらに自覚する上で計り知れない効果を有していると信じる。

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た。点検・評価委員会及び将来計画委員会の委員長、委員の方々にはそれぞれの報告書の作成にあたり大変なご苦労をおかけした。また管理局の方々には資料収集、編集、印刷に大変ご尽力をいただいた。これらの方々に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．分子科学研究所の概要

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，広く所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求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。

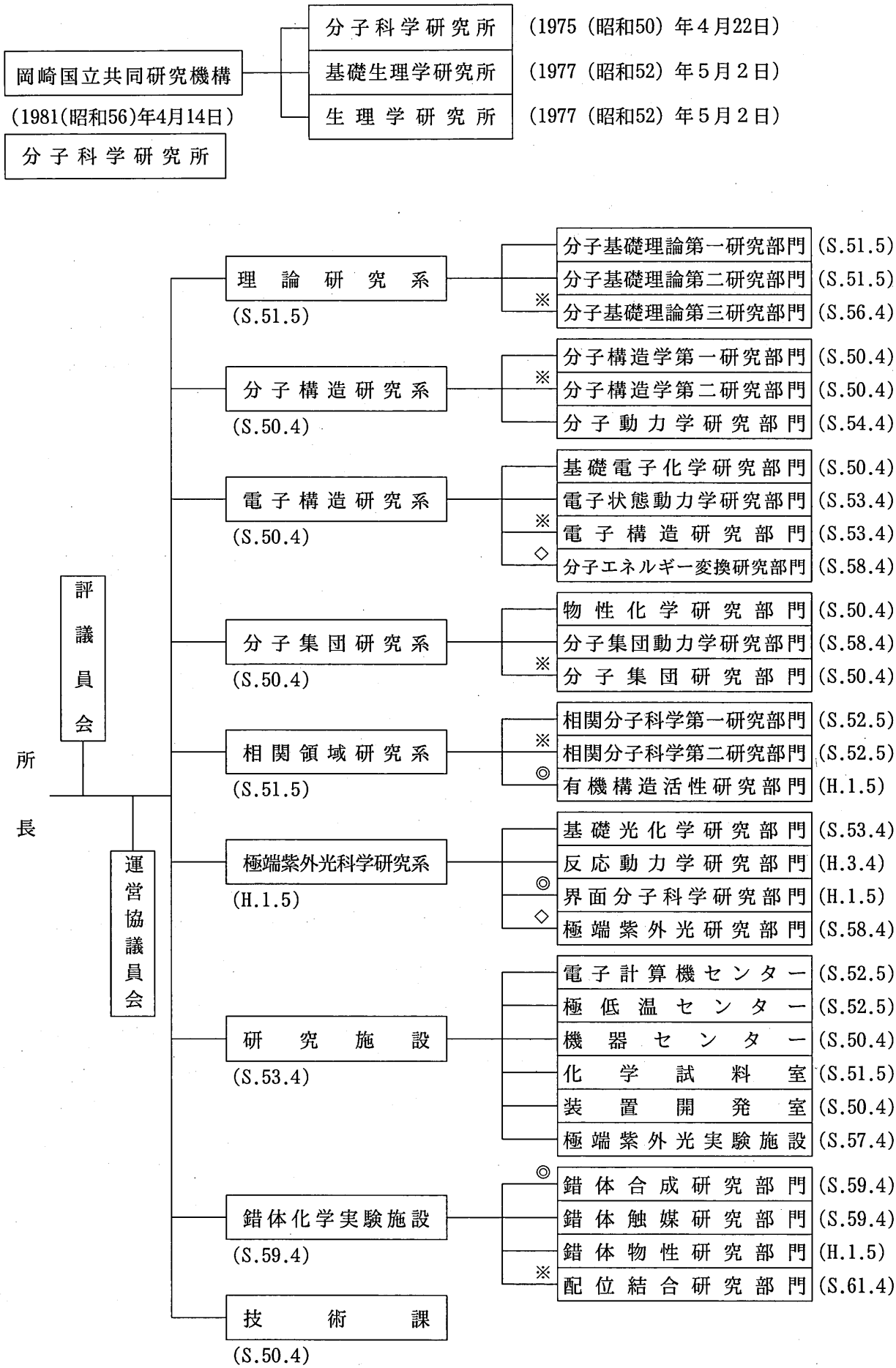
これと並行して，研究者の間に研究会が組織され，科学研究費補助金（特定研究「分子科学」）の交付を受け．昭和46年度と47年度の２年間にわたり，分子科学に関する研究を行い，分子科学全般の基礎となる研究方法を開発するとともに，研究所発足に際して施設・設備の円滑な整備を図ることが検討された。

昭和48年10月，学術審議会会長から文部大臣に対し，分子科学研究を緊急に設立することが適当であるとの報告がなされた。

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。

2−3　現在の組織とその発足



2−4　研究所の運営

分子科学究所は，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６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6−1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教授と英国王立研究所長のP. Day教授、及び平成６年６月よりジョージア工科大学のM. A. EL-Sayed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も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・名誉教授
秋　本　俊　一	東京大学名誉教授・学士員会員
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　慎　一	豊橋技術科学大学長
齋　藤　一　夫	東北大学名誉教授
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　英　昭	大阪大学名誉教授・(社)化学情報協会専務理事
堀　　幸　夫	金沢工業大学教授
松　永　義　夫	神奈川大学理学部教授
森　本　英　武	(株)豊田中央研究所長顧問
守　谷　　亨	東京理科大学理工学部教授
米　澤　貞次郎	(財)基礎化学研究所・学術顧問
John C.Polanyi	トロント大学教授（～平成６年５月）
Peter Day	英国王立研究所長
M.A.El-Sayed	ジョージア工科大学教授（平成６年６月～）

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所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，特に重要な教官の通考を行う「人事選考部会」と，全国の大学等との共同所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６年度）を以下に，又創設以来の委員を6−2，6−3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	東京大学大学院理学系研究科教授
斎　藤　軍　治	京都大学理学部教授
塚　田　　捷	東京大学大学院理学系研究科教授
山　口　　兆	大阪大学理学部教授
岩　田　末　廣	理論研究系教授
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　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
藥　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６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）	藥師久彌	（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６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）	渡辺芳人	（分子研教授）
塚田捷	（東大教授）	谷村吉隆	（分子研助教授）
宇理須恆雄	（分子研教授）	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６年度）の委員を以下に示す。

学会等連絡会議構成員

江口昇次	（名大工教授）	奈良坂紘一	（東大理教授）
榎　敏明	（東工大理教授）	藤村勇一	（東北大理教授）
大橋裕二	（東工大理教授）	三上直彦	（東北大理教授）
加藤重樹	（京大理教授）	山口　兆	（大阪大理教授）
佐藤直樹	（京大化研教授）	渡辺芳人	（分子研教授）
篠原久典	（名大理教授）	齋藤修二	（分子研教授）
関　一彦	（名大理教授）	谷村吉隆	（分子研助教授）
寺倉清之	（通産省工業技術院産業技術融合領域研究所主任研究員）	丸山有成	（分子研教授）
十倉好紀	（東大理教授）	吉原經太郎	（分子研教授）
富永　健	（東大理教授）		

2−4−6　教授会議

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学生（特別研究学生，＝従来大学院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重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
＊極端紫外線実験施設運営委員会	実験施設の運営に関する重要事項 共同所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	実検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		
＊装置関発室運営委員会	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		（原則） 各研究系から各１ 施設から必要数	
＊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阪		
分子研レターズ編集委員会	分子研レターズの出阪		
＊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。記載なきは規定文なし。

○　表以外に，分子研コロキュウム係，自衛消防隊組織がある。

2−4−11　岡崎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・宿舎委員会	宿泊施設（ロッジ）の運営方針・運営費に関すること。（公務員）宿舎の入居者（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	岡崎南ローク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

馬 場 宏 明　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

岩 田 末 廣　教 授
首 藤　啓　助 手
池 上　努　助 手

分子基礎理論第二研究部門

中 村 宏 樹　教 授
谷 村 吉 隆　助教授
朱　超 原　助 手
奥 村　剛　助 手
森 林 健 吾　学振特別研究員
富 田 憲 一　非常勤の講師

分子基礎理論第三研究部門　(客員研究部門)

市 川 行 和　教 授（宇宙研・共通基礎系）
藪 下　聡　助教授（千葉大理）
染 田 清 彦　助 手
天 能 精一郎　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

齋 藤 修 二　教 授
森 田 紀 夫　助教授
森 脇 喜 紀　助 手
高 野 秀 路　助 手
A. H. Saleck　学振外国人特別研究員 6.6.2～
尾 関 博 之　助 手

分子構造学第二研究部門（客員研究部門）

三 谷 忠 興　教 授（北陸先端科学技術大学院大学）
北 野 正 雄　助教授（京都大工）
小 倉 尚 志　助 手

分子動力学研究部門

北 川 禎 三　教 授
加 藤 立 久　助教授
松 下 道 雄　助 手
水 谷 泰 久　助 手
向 井 政 博　助 手
S. Bell　文部省外国人研究員 ～6.9.20
I. Paeng　文部省外国人研究員 6.6.23～6.8.20, 6.12.12～

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　泰	助教授
沢　邊　恭　一	助　手
富　永　圭　介	助　手
内　藤　幸　人	学振特別研究員
Y. A. Gruzdkov	学振外国人特別研究員 6.3.5～
H. Pal	学振外国人特別研究員 6.3.28～
V. F. Kamalov	学振外国人招へい研究員 6.3.22～
B. Kim	特別協力研究員
G. P. Keogh	特別協力研究員
M. Joseph	特別協力研究員

電子状態動力学研究部門

花　崎　一　郎	教　授
鈴　木　俊　法	助教授
高　柳　正　夫	助　手
戸野倉　賢　一	助　手
米　蔵　誠　哲	協力研究員
米　蔵　誠　哲	協力研究員
岡　崎　紀　明	学振特別研究員
L. S. Bontuyan	学振外国人特別研究員 6.4.1～
S. R. Gandhi	学振外国人招へい研究員 6.7.25～
Y. Mo	特別協力研究員

電子構造研究部門（客員研究部門）

佐　藤　博　保	教　授（三重大工）
中　垣　良　一	助教授（金沢大薬）
森　　義　仁	助　手
小　林　敬　道	助　手

分子エネルギー変換研究部門(外国人客員研究部門)

P. P. Fernando	教　授（スペイン　ベラドリド大学　教　授） 6.3.10～
G. Rabai	助教授（ハンガリー　コッシュスラジョス大学　助教授） 6.9.30～
M. C. Lin	教　授（アメリカ　エモリー大学　教授） 7.1.5～
H. R. W. Fischer	助教授（ドイツ　フリードリッヒミラー大学　研究員） 6.12.16～

分子集団研究系

研究主幹(併)　丸　山　有　成

物性化学研究部門

藥　師　久　彌	教　授
鹿野田　一　司	助教授
鵜　川　彰　人	助　手
中　澤　康　治	助　手
佐　藤　博　彦	協力研究員
A. A. Zakhidov	文部省外国人研究員 6.10.1～
宮　崎　隆　文	学振特別研究員
L. S. Grigoryan	特別協力研究員
M. Kozlov	特別協力研究員
Y. A. Berlin	特別協力研究員

分子集団動力学研究部門

丸　山　有　成	教　授
宮　島　清　一	助教授
緒　方　啓　典	助　手
宮　島　直　美	文部省内地研究員
中　井　利　仁	非常勤の講師
J. Kröber	学振外国人特別研究員 6.9.13～
荒　井　　毅	学振特別研究員
中　野　千賀子	特別協力研究員
E. L. Frankevich	特別協力研究員
王　　萍	特別協力研究員
張　　文　武	特別協力研究員
V. A. Ivanov	特別協力研究員

分子集団研究部門（客員研究部門）

正　畠　宏　祐	教　授（名大工）
大　内　幸　雄	助教授（名大理）
長谷川　真　史	助　手
持　田　智　行	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

渡 辺 芳 人	教 授
阿 部 正 明	助 手
金 子 雄 一	文部省内地研究員
C. K. Hee	文部省外国人研究員 6.6.21～6.8.20 6.12.13～

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）
細 川 隆 弘	助教授（大阪大基礎工）
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	教 授（併）
浅 尾 直 樹	助 手
臼 井 聡	助 手
蔡 建 平	特別協力研究員
B. Singaram	文部省外国人研究員 6.12.14～

極端紫外光科学研究系

研究主幹(併) 宇理須 恆 雄

基礎光化学研究部門

小 杉 信 博	教 授
田 原 太 平	助教授
高 田 恭 孝	助 手
中 村 元 彦	非常勤の講師

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
津 坂 佳 幸	助 手

界面分子科学研究部門

川 副 博 司	教 授
西 尾 光 弘	助教授
植 田 尚 之	助 手
林 浩 司	助 手

極端紫外光研究部門（外国人客員研究部門）

F. O. Goodman	教 授（カナダ ウォータール大学 教授） 6.12.1～
S. Krouglik	助教授（ベラルーシ物理学研究所 上級研究員） 7.2.15～
V. A. Ivanov	教 授（トルコ ビルケント大学客員教授） ～6.11.30
Y. A. Berlin	助教授（ロシア セミョーノフ研究所室長） ～6.8.31

研 究 施 設

電子計算機センター

センター長(併)	岩 田 末 廣
青 柳 睦	助教授
南 部 伸 孝	助 手
高 見 利 也	助 手

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
冨 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
實 方 真 臣	特別協力研究員

化学試料室

室 長(併)	花 崎 一 郎
山 下 敬 郎	助教授
田 中 彰 治	助 手

装置開発室

室 長(併)	北 川 禎 三
渡 邉 三千雄	助教授
浅 香 修 治	助 手

極端紫外光実験施設

施設長(併)	小杉信博	
磯山悟朗(併)	教授 ~6.9.30	
鎌田雅夫	助教授	
木下豊彦	助教授	
濱広幸	助教授	
中川和道	助教授(客員)	神戸大発達科学部
田中慎一郎	助手	
平谷篤也	助手	
木村真一	助手	
広瀬サエミ	特別協力研究員	
K. P. Lee	文部省外国人研究員 6.6.20~6.8.19, 7.1.4~	
Y-Q, Cai	学振外国人特別研究員 7.1.11~	

錯体化学実験施設　　施設長(併) 中村晃

錯体合成研究部門(流動研究部門)

吉川雄三	教授
中沢浩	助教授
黒田泰重	助手
水田勉	助手

錯体触媒研究部門

中村晃	教授
福田豊	教授(お茶の水女子大理)(客員)
瀬恒潤一郎	助教授(神戸大理)(客員)
D. T. Peter	助手
R. Hahn	特別協力研究員
N. Lavaud	特別協力研究員

錯体物性研究部門

田中晃二	教授
高橋保	助教授
長尾宏隆	助手
鈴木教之	助手
石田豊久	協力研究員
M. Kotora	特別協力研究員
神林秀	特別協力研究員
Akel. T	特別協力研究員
El-Sayed Khalil	特別協力研究員

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)

技術課　　課長 内田章

第1技術班　　班長 松戸修

理論研究系技術係

技官 高田彰二

分子構造研究系技術係

技官 熊倉光孝
技官 林直毅

電子構造研究系技術係

係長 木下敏夫
技官 渡邊一雄
技官 熊葛茂一
技官 片柳英樹
技官 神長暁子

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 賣市幹大
技官 宮川和也
技官 大石修

相関領域研究系技術係

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
技官 足立純一

第３技術班　　班長　加藤清則

電子計算機技術係

係長　西本史雄

技官　手島史綱

技官　南野　智

極低温技術係

係長　吉田久史

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

係長　永田正明

技官　戸村正章

技官　野村幸代

装置開発技術係

係長　堀米利夫

機械工作技術主任　鈴井光一

技官　加藤眞治

技官　水谷伸雄

技官　内山功一

技官　豊田明範

極端紫外光実験技術係

技官　蓮本正美

技官　山崎潤一郎

技官　中村永研

第５技術班　錯体化学実験技術係

技官　水川哲徳

技官　原　隆一郎

＊　整理日付は平成７年１月１日。但し，校正期間中の異動はできるだけ整理した。

＊　外国人の研究者については６年４月以降３ヶ月を越えて滞在した者及び整理日付（校正期間を含む）に滞在し３ヶ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）に滞在し３ヶ月を越えて滞在が予定される者を掲載した。

2−5−2　人事異動状況（平成７年１月１日現在）

(1) 専任研究部門等

区分＼職名	所　長	教　授	助教授	助　手	技　官	IMSフェロー
就任者数	4	22	39	123	115	43
転出者数	3	9	23	78	72	37
現　　員	1	13	16	45	43	6

(2) 流動研究部門人事異動

区分＼部門・職名	錯体合成研究部門			有機構造活性研究部門			界面分子科学研究部門		
	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	6	6	13	2	3	4	2	3	6
転出者数	5	5	11	1	2	2	1	2	4
現　　員	1	1	2	1	1	2	1	1	2

(3) 客員研究部門

区分＼職名	教　授	助教授
就任者数	65	73
現　　員	7	8

(4) 外国人客員研究部門

	教　授	助教授
分子エネルギー変換研究部門	12	10
極端紫外光研究部門	10	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．励起分子及びクラスター内反応過程の電子論及び反応動力学的研究

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．凝縮系における分子の光学過程に関する理論的研究
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．原子・分子の衝突の理論的研究
2．分子間相互作用と分子の電子状態についての理論的研究

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及び動きを知ることが重要であり，そのための実験手段として各種静的及び時間分解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物理・化学過程の解明
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
3．サブミリ波望遠鏡の開発
4．レーザー多光子励起による原子・分子の高励起電子状態の分光と動特性の研究
5．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所究

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　生体分子及びそのモデル系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

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

相関領域研究系

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所究に取り入れるなど両者の連携をはかるための相関領域に関する研究を行う

相関分子科学第一研究部門

研究目的　有機化学・有機金属錯体化学更には酸素化学を含む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．金属酸素及び合成モデル系の構造と機能の解明

2．多核遷移金属錯体の合成。構造と化学特性

相関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

研究業題　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，放射光分子科学の新分野を発展させる中核としての役割を果たす。特に放射光による気相・液相・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所究

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

3．レーザー光及び放射光を用いた液体及び溶液中の光化学反応の研究

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X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．固体フラーレンの電子物性の理論的研究
2．高分子における電気伝導機構の解明
3．半古典力学の研究とその表面散乱過程等への応用

研　究　施　設

電子計算機センター

研究目的　化学反応素過程の理論的研究

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

研究目的　低温での物性研究

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

研究目的　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．フェムト秒過渡吸収分光法の開発
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

研究目的　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

研究課題
1．新規な芳香族化合物の合成と性質
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構築

装置開発室

研究目的　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

研究課題　1．精密物性測定装置の開発

2．赤外領域での非線型分光法の研究

3．研究機器の自動制御の研究

極端紫外光実験施設

研究目的　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

研究目的　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，開発を目的とする。

錯体合成研究部門

研究目的　特色ある物性，機能を持つ金属錯体の合成

研究課題　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　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

研究課題　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　金属錯体の合成と物質変換に関する所究

研究課題　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　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

研究課題　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

2−7　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一岡崎コンフェレンスーを年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
レーザー励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
イオン一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求する時代である。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
	イオン一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（昼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っ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一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：制御に関する所究分野	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長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重合体の構造と物性	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	藥師久彌
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

平成6年度の特別研究

(1) 分子制御の化学と物質変換・エネルギー変換

エネルギー変換に関する第I～III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IV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”の技術を確率し，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。実施に当っては次の二つの小テーマを設ける。1)精密に状態制御した分子系の創出とその反応性，2)分子集積場の構築による高次機能発現と物質変換・エネルギー変換。

「分子状態の精密制御とエネルギー変換」の研究ではオクタテトラエンのシス/トランス光異性化反応における遷移状態を分光学的に見出すことに成功し，またCs原子の２原子分子の前期解離状態における量子干渉効果を調べた。「レーザー冷却及びトラッピングによる原子の運動制御」の研究ではLNA固体レーザーによって極低温（T=1.2 mK）までレーザー冷却された気体ヘリウム原子（中心速度2.7m/s，ドブロイ波長370Å）を用いて，透過型回析格子（d=5000Å）による原子波の回折現象の観測を試み，非回折波である。０次波と共に１次の回折波を空間的に分離して（分解角4.3°）検出することに成功した。「自己秩序形成化学反応に関する研究」ではBelowsov-Zhabotinsky反応系のサブシステムであるminimal bromate oscillatorについて光照射の実験を行い，新たに光による振動誘起の分岐を見出した。また光照射によって系に起る反応は$HBrO_2$の生成であることを見出した。

「交差分子線による化学反応動力学の研究」では，光分解反応画像観測装置を制作し，塩化エチレン類の紫外光解離の実験をしたところ，($\pi\pi^x$) 状態からの分解は ($n\sigma^x$) 状態への非断熱遷移による分子回転よりも速い分解と，基底電子状態への内部転換によるピコ秒より遅い分解の２種があり，($n\sigma^x$) 状態への非断熱遷移は励起波長の関数として変化することがわかった。また，反応生成分子分布の新しい断層撮影法を開発した。

「固体表面でのレーザー誘起光化学」の研究ではSi(100)半導体表面に吸着した亜酸化窒素並びに一酸化窒素の紫外光化学について調べた。持に亜酸化窒素の光解離によって脱離してくるN_2分子が特異な空間分布をもつことを明らかにした。「表面反応の動力学的研究」においては，超高真空下で分子一表面反応の追跡可能な装置を完成させ，Xe-グラファイト衝突散乱によるエネルギー移動過程を調べた。また分子線中のCl_2分子とSi(lll)表面とのエッチング反応による生成物の速度分布を測定し，$SiCl_2$，$SiCl_3$，$SiCl_4$を同定した。

「生体系のエネルギー変換」の研究では，時間分解共鳴ラマン分光法を用い，呼吸酵素であるチトクロム酸化酵素がO_2をH_2Oに変換する反応の中間体を全て検出し，反応機構を明らかにした。また植物の光情報変換素子であるフィトクロムの光反応中間体のラマンスペクトルを観測し，その光プロトン移動を見つけた。「新しい金属酸化物・硫化物クラスターの合成と構造」の研究では，単核錯体をビルディングブロックとして用い，めずらしい三核〔Cp*Rh (P(OEt)$_3$) WS_4 CuCl及び八核直線型硫化物クラスター〔Cp*Rh(P(OEt)$_3$) WS_4 (CuCl) Cu (μ −Cl)$_2$ (CuCl) WS_4 Cp* Rh(P(OEt)$_3$)〕(Cp* $=\eta^5-C_5$ Me)を組み立て，それらの固体構造と有機小分子に対する反応性を明らかにした。

「溶媒和金属クラスターの電子構造と反応性」の研究では，金属イオンの水和ダイナミックスをミクロに解明するためにMg^+，Ca^+ の水和クラスターの光解離実験を行い，水和に伴う幾何構造と電子構造の変化を明らかにした。また$Mg^+(H_2O)n$についてMg^+の光誘起酸化反応のダイナミックスを検討した。金属イオン一水クラスターのイオン対状態を解明する目的で光電子分光装置を試作し，$Cu^-(H_2O)n$クラスターの電子構造を調べた。「高感度サブミリ波・遠赤外分光の開拓」の研究では，これまで準備してきた遠赤外レーザー側帯波分光計用の高出力高安定CO_2レーザー及び光励起遠赤外レーザーの導入，整備を終了し，遠赤外レーザー光にマイクロ波を混合するGaAsショットキーミキサーの開発進めている。

(2) 分子素子研究の物質科学的展開

分子及び分子集合体の機能を集積した素子である「分子素子」を実現するために，その基礎となる新機能分子の開発及びそれらを用いた新物質系の構築を中心に新しい展開を図ってきた。すなわち，分子の新しい機能を開発し，さらにその集合体における新しい物性を探索することにより，全く新しい機能をもった素子である「分子素子」を構築しようとするもので，基礎科学と応用科学の両面に大きなインパクトを持つものと考えられる。具体的には，有機物の新しい導電性の研究を中心に，最近発見された炭素クラスター固体の物性，液晶状態の新しい物性さらには超薄膜状態（有機物，酸化物超伝導体）の構築と物性研究などが行われてきた。

1. 有機伝導体・超伝導体の研究

単一成分で高い導電性を示す物質として，NやSを含む新しい環境有機物質BTQBTをとり上げ，置換基導入その他の化学的修飾やポリマー化によって性質を変化させ，対応する物性変化を追求した。比較的高い導電性の達成（$\sim 10^{-4}Scm^{-1}$），ホール効果の測定，高配向性薄膜の作製などの成果をあげている。

$(BEDT)_2X$系の２次元性有機超伝導体について，その２次元性の意味について主として磁性，磁気抵抗特性などの観点から追求がつづけられており，超伝導性機構の解明に向けてが努力がつづけられている。

フタロシアニン類の中心金属のｄ電子と環状部分のπ電子との相互作用に基づく新しい物性の発現をめざした研究がつづけられており，同時に新しい合成法（高圧合成）を用いたフタロシアニンポリマーの合成・評価の努力も試みられている。水素結合をもつ有機物質でのプロトン一電子相互作用系の構築の努力も行われてきた。

2. 炭素クラスター固体（フラーレン）の物性研究。

C_{60}を中心とする炭素クラスターの単結晶の作成に成功し（C_{60}及びC_{70}），それを用いた物性測定を行った。まず，光伝導を利用した飛行時間測定法によりドリフト移動度の測定に成功し，その結果得られた特異な温度依存性はこの物質の電子構造を理解する鍵を与えるものと考えられている。又，アルカリ金属（K，Rb，Na，Cs）をドープした結晶について，その金属性の発現条件，及びその電子構造さらにはその超伝導特性について研究を進めている。C_{60}にTDAEをドープした固体の強磁性状態についても詳細な研究を行い，初めて自発磁化及びヒシテリシス曲線の存在を明らかにした。C_{60}を出発物質として，化学反応による新分子の開発にも取り組んできており，又，都立大との共同研究によりメタル入フラーレンの電気化学的研究も進展している。

3. 薄膜形成による新物質構築

いわゆる分子線エピタキシャル蒸着法によって，フタロシアニン（Pc）類の配向制御された薄膜（50～100A厚）をアルカリハライド単結晶上（KBr，KClなど）に成長させることに成功した。特にVOPc/KBrの系では一方向にそろった正方格子状の結晶性膜が得られることが電子顕微鏡による観察によって確認された。さらにその構造がVOPc分子の配置まで考慮して４mmの対称性をもつことが，この膜の３次非線形光学感受率の面内角度依存性を調べることにより明らかにされた。

又，このような分子配置をもつ膜においてのみ２光子共鳴波長域に３次非線形感受率のピークを示すことも明らかにされ，非線形効果が固体構造に深く係ってることを初めて示した。

La-Sr-Cu-O系の超伝導薄膜を一原子層ずつの分子線蒸着法により作製することにも成功した。

4. 液晶状態における分子動力学的研究

核磁気共鳴分光学の手法を用いて，液晶における部分秩序構造と分子ダイナミックスの解明，特に異方的拡散機構，ボンド配向秩序の本質，リエントラント相転移の微視的機構，及びユニークな分子間相互作用を持った液晶の開発などを進めている。

(3) 金属錯体による連続反応の構築

巧妙に分子設計した金属錯体を集積配列させ，連続反応場を設計し新しい反応系開発を目指す。またそれと並行して，新しい物性および機能を有する物質群の開発を行う。特に.本研究では分子認識を含む高選択的物質変換反応，

高次分子設計に基づく金属錯体による高効率多電子移動による窒素，硝酸，二酸化炭素還元反応等を目指した連続反応場の設計および開発を目的として以下の研究を行った。

「前周期有機金属錯体の重合触媒作用」の研究では，5族のニオブ.タンタルを中心金属として持つ新しい前周期有機金属化合物，シクロペンタジエニル（ブタジエン）ジメチル金属を活性化学種とするオレフィン重合のための触媒を開発した。重合反応は-20℃より+40℃にて炭化水素を溶媒として上記の金属錯体をメチルアルモキサンを過剰に加えたあとエチレンを常圧で加えて行うと，リビング重合が進行し１－６時間後30－80%の開始剤効率にてポリエチレンが生成する。本反応は均一な分子量を有するポリエチレン合成方法として注目されている。「ジルコノセン錯体による反応場の構築」の研究では，これまで開発してきたジルコナシクロペンタンの炭素一炭素結合活性化を連続して行わせることによる触媒反応へ展開を行った。アリルエーテル類存在下ではジルコナシクロペンタンからのエチレン脱離が起こり，アルコキシメチル基の結合したジルコナシクロペンタンが生成した後に，Ｃ－Ｏ開裂によりアルコキシアルキルジルコニウム錯体が形成する。さらに，エチルグリニャールとの反応によりアルコキシ基をエチル基に置換し，そのβ水素の引抜きによりエチレンが再生する。このようにジルコニウムを触媒に用いた新しいアリル化反応を触媒反応として開発した。「新規機能開発を目指した直線型混合四核錯体」の研究では，分子内で異なるd電子数と傾斜したｄ軌道レベルを持つ異種金属を金属一金属結合により結びつけた多核金属錯体の新規機能朋発を目指して，直線的に３個の金属を並べられるホスフィニルピリドナト配位子を用い，系銃的に２～４核錯体を合成し，X線構造解析により直線状に還移金属がつながっている事を確認した。本合成法では配位原子の種類によって直線に結合する金属の種類が選択され，系統的に金属一金属共役系として錯体を合成しうる特徴を持つ。また，現在までに得られている直線型混合四核錯体では，ドーピングによる導電性向上が見られる系もあり，更に附加的な改良によって電磁物性が期待される。「リン配位子の反応性を利用した反応場の構築」の研究では，ホスファイトが配位した６族還移金属錯体とBF_3との反応により金属一リン間に二重結合が形成される反応をアルキル鉄錯体に拡張した。その結果，鉄一リン間に二重結合が生成した後，鉄一炭素切断によりアルキル基が鉄からリンへ転位する新しい反応を見いだした。この反応では，リン上での反応がアルキル基の転位を促し，新たに鉄上に反応場を構築しうる点から注目に値する反応である。「立体制御による酸化還元電位の調整」の研究では，１－４個のフェニル基を有するシッフ塩基を配位子とするコバルト錯体ではＮ一Ｎキレート環に結合したフェニル基は残りのフェニル基との立体反発により軸方向へ規制されることが判明した。一連の誘導体の合成により，特に軸方向の立体反発の大きい錯体ほど酸化されにくくなり，両者の間に良好な相関があり，錯体の酸化還元電位を立体的にコントロールしうることを見いだした。「金属錯体による二酸化炭素の多電子還元」の研究では，ポリピルジル配位子を有するルテニュム金属錯体を触媒とする二酸化炭素還元反応において，外部から供給される電子をポリピルジル配位子のπ*軌道に収容することにより，二酸化炭素由来のRu-CO結合を切断することなく，カルボニル基に連続的にプロトンおよび二酸化炭素を付加させることにより，金属錯体触媒による二酸化炭素還元反応としては初めてHCH0，CH_3OHおよび$HOOCCHO$，$HOOCCH_3OH$等の４，６電子還元反応とC_2化合物の触媒的生成に成功した。本研究成果は錯体触媒による初めての炭素一炭素結合生成を伴った多電子還元反応であり，二酸化炭素の化学への大きな貢献が期待される。

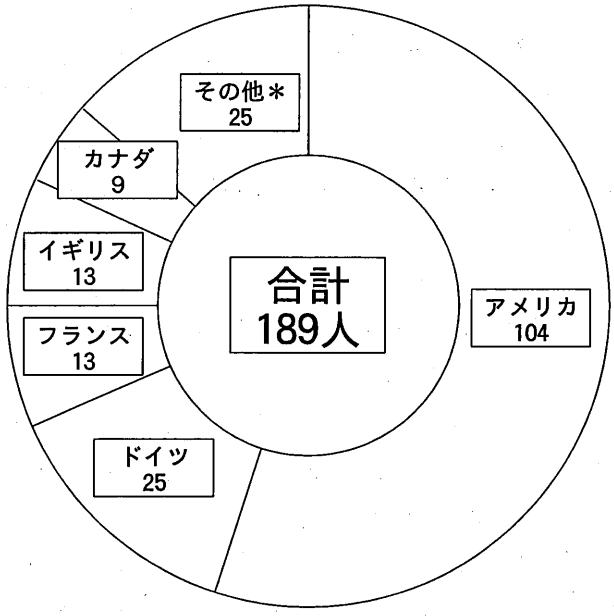
2−7−2　岡崎コンファレンス

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している。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6年10月までに51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）



＊その他の国：ベルギー，中国，チェコ，アイルランド，イスラエル，韓国，イタリア，オランダ，スイス，旧ソビエトを含む

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　二朗（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ー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（分子所）	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（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ー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ー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（シュトットガルト大学） G.J.Sloan（デュポン研究所，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	外国人招待者及び参加者
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一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）	C.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） 吉原經太郎（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） 花﨑　一郎（分子所）	J.Jortner（テルアビブ大学） R.N.Zare（スタンフォード大学） J.P.Simons（ノッチンガム大学） 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（分子所）	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.Gratze1（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（太陽エネルギー所究所） J.L.Sessler（京都大学） F.Willig（フリッツハーバー所究所）
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.Lytel（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）

回	課題，開催日，提案代表者	外国人招待者及び参加者
24	「凝一次元系に於ける新物性の展望ー電荷移動と電子ー格子相互作用」 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）
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 花﨑　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.Hjalmarson（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ロン放射研究所） 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	「イオンー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　　巌（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　二朗（名古屋大学教授） 吉原經太郎（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）

回	課題，開催日，提案代表者	外国人招待者及び参加者
31	「気相クラスクーのイオン化過程」 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・ホップキンス大学）
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（ウエルカム研究所） 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（理化研） 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	「水素ー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　二朗（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）

回	課題，開催日，提案代表者	外国人招待者及び参加者
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・ポリテクニック量子化学研究所） J.Simon（ESPI無機化学研究所）
40	「非線型化学反応と自己秩序形成」 H.3.2.23～1.25 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（名古屋大学助教授）	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（バデュー大学）
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ィブルック校） 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（オークリッヂ国立研究所）

回	課題，開催日，提案代表者	外国人招待者及び参加者
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　　清（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）
47	「緩和現象における溶媒の動力学効果」 H5.10.5～10.7 吉原經太郎（分子研） 岡田　　正（大阪大）	C.B.Harris（カリフォルニア大学） A.Nitzan（テルアビブ大学） M.R.Topp（ペンシルベニア大学） M.A.Johonson（エール大学） M.Maroncelli（ペンシルベニア州立大学） K.Duppen（クローニンゲン大学）
48	「分子設計されたフタロシアニン錯体を用いた分子素子の探求」 H6.1.26～1.28 簇野　昌弘（東北大） 藥師　久彌（分子研） 丸山　有成（分子研）	A.J.Ceulemans（ルーベンカソリック大学） M.J.Stillman（西オンタリオ大学） C.C.Leznoff（ヨーク大学） D.Braun（ルーベンカソリック大学） D.J.Wright（ケント大学） M.Hanack（チュービンゲン大学）
49	「超臨界流体中に生成するクラスターの構造とダイナミックス」 H6.3.16～3.18 梶本　興典（京都大） 冨宅喜代一（分子研） 大峯　　巖（分子研）	J.Troe（ゲッチンゲン大学） J.F.Brennecke（ノートルダム大学） K.P.Johnston（テキサス大学） F.V.Bright（ニューヨーク州立大学） S.M.Howdle（ノッチンガム大学）

回	課題，開催日，提案代表者	外国人招待者及び参加者
50	「電子欠損型遷移金属錯体の機能」 H6.8.1～8.3 巽　　和行（名古屋大） 高橋　　保（分子研）	S.Gambarotta（オタワ大学） W.J.Evans（カリフォルニア大学） E.Negishi（パデュー大学） G.Erker（ミュンスター大学） T.D.Tilley（カリフォルニア大学） R.F.Jordan（アイオア大学）
51	「表面における光誘起過程のダイナミックス」 H6.10.5～10.7 村田　好正（東京大） 松本　吉泰（分子研）	E.Hasselbrink（フリッツハーバー研究所） H.-J.Freund（ルーア大学） J.William Gadzuk（標準科学技術国立研究所） Richard R.Cavanagh（標準科学技術国立研究所） Dwight R.Jennison（サンディア国立研究所）

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，運営協議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：数名の研究者により特定の課題について行う研究で３年間にまたがることも可能。

(2) 協力研究：所内の教授又は助教授と協力して行う研究。(原則として１対１による。)

(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研究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：原則として共同利用の観測システムを便用する研究。

平成６年度

(1) 課題研究

課　題　名	提案代表者
金属酸化物クラスターの合成と触媒機能	磯　邊　　清（分子研・助教授）

(2) 有機超伝導体構成分子の振電相互作用のab initio 計算始128件

(3) 研究会

研　究　会　名	提案代表者
若手分子科学研究者のための物理化学研究会	長　野　八　久（阪大・理）
有限多電子系の運動様式の統一的理解	市　村　　淳（宇宙研）
高圧科学による分子性物質の創成	城　谷　一　民（室蘭工大）
化学物理の諸問題とその発展	谷　村　吉　隆（分子研）
酸素結合蛋白質の精密構造機能の研究の新展開をめざして	今　井　清　博（阪大・医）
分子―表面ダイナミックス	松　島　龍　夫（北大・触媒セ）
直線偏光、円偏光放射光を用いた分子科学研究とその周辺	太　田　俊　明（東大・理院）

(4) 施設利用

① 機器利用

「色素吸着LB膜の蛍光寿命測定」始め45件

② 計算機利用

「蛋白質立体構造の変化と運動」始め219件

(5) UVSOR課題研究

課　題　名	提案代表者
赤外分光用施設ビームラインBL6A1の分光装置の高性能化	難　波　孝　夫（神戸大理教授）
スピン偏極光電子分光測定装置の開発	鎌　田　雅　夫（分子研教授）

(6) ＵＶＳＯＲ協力研究及び招へい協力研究

「Ge−L、Ga−L edgeスペクトルの酸素吸着効果Ⅱ」始め37件

(7) ＵＶＳＯＲ施設利用

「アルカリハライド混晶系における内殻正孔の緩和過程」始め130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	80	5	38	5	34	6	55	6	50	3	33	3	27	3	28	人数:登録人数
協力研究	20	20	35	35	80	80	142	142	152	152	164	164	158	158	156	156	163	163	
招へい協力研究	0	0	9	9	23	23	25	25	18	18	13	13	23	23	15	15	12	12	
所長招へい	0	0	12	12	25	25	16	16	31	31	49	49	35	35	48	48	44	44	
研究会	13		9	128	14	170	16	210	11	139	11	147	12	171	8	144	8	157	人数:旅費支給者
施設利用Ⅰ	25	25	37	37	40	40	60	60	68	68	58	58	56	56	49	75	57	92	件数:許可件数 人数:許可人数
施設利用Ⅱ					30	72	92	185	109	255	112	279	127	337	139	383	145	412	〃
合計	61	45	112	301	217	448	356	672	395	718	413	760	414	813	418	848	432	908	

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	43	4	23	4	28	3	23	1	8	2	18	2	20	4	33	1	8	人数: 登録人数
協力研究	158	158	144	144	137	137	141	141	136	136	112	112	113	113	127	173	127	176	
招へい協力研究	12	12	10	10	8	8	6	6	1	1	3	3	2	2	2	2	3	3	
所長招へい	57	57	56	56	88	88	95	95	77	77	161	161	175	175	141	141	105	105	
研究会	10	143	9	155	9	143	9	187	9	116	10	109	10	91	8	113	9	122	人数: 旅費支給者
施設利用Ⅰ	68	139	54	110	67	143	85	213	79	221	77	202	88	211	85	227	66	206	件数: 許可件数 人数: 許可人数
施設利用Ⅱ	153	427	157	466	172	533	154	482	187	544	210	590	213	620	215	657	180	586	〃
合計	462	979	434	964	485	1, 080	493	1, 147	490	1, 103	575	1, 195	603	1, 232	582	1, 346	491	1,206	

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	42	4	30	5	31	3	20	2	13	2	38	3	37	2	21	2	30	人数:登録人数
協力研究	14	30	15	27	12	17	15	21	19	52	28	88	27	102	39	169	36	151	
招へい協力研究	10	10	9	9	7	7	5	5	2	2	4	4	5	5	7	7	8	8	
研究会	4	39	3	35	3	25	2	31	3	29	2	33	2	39	2	29	2	34	人数:旅費支給者
施設利用	33	124	59	312	75	342	89	437	107	528	105	521	111	570	109	614	132	714	件数:許可件数 人数:許可人数
合計	64	245	90	413	102	422	114	514	133	624	141	684	148	753	159	840	180	937	

2−9　国際交流と国際協同研究

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
5	16	14	46	78	29	183
合計	170	145	308	903	821	2,347

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
5	39	16	16	3	26	17	24	0	42	183
合計	677	254	172	107	202	285	115	22	513	2,347

2−9−2　国際共同研究

(1) 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年間継続されている。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６年２月まで58回開催

研究者派遣	昭和54年～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
	平成５年度	〃	８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
	平成３年度	〃	１名
	平成４年度	〃	５名
	平成５年度	〃	４名

日米合同研究会（情報交換セミナー）　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

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酵素の分子機構」	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
平成６年３月	「環境ストレスと光合成-生理学的・分子学的アプローチ」	ハワイ

「新材料」

昭和60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、昭和61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。その後は研究者の交流を中心に情報交換を進めてきた。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１名ずつ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流を行った。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、有機原子材料について各１名ずつを米国に派遣し、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C_{60}等に関するミニワークショップを開催した。平成５年度は、７月にハワイにおいて日米合同の「フラーレンおよび関連化合物の物理と化学」と題するワークショップを開催した。又、１名の若手研究者をケンタッキー大学応用エネルギー研究センターに派遣してクラスター科学に関する調査研究を行った。

(2) 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ことの合意が得られ、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。

(i) 分子計算化学（Molecular computational chemistry）

(ii) 高分解能分光学（High resolution spectroscopy）

(iii) 電子構造動力学（Electronic structures and dynamic behaviour of excited molecules）

(iv) 放射光利用化学（Application of synchrotron radiation to molecular spectroscopy and photochemisty）

(v) 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二百名以上に及んでいる。

また、これまでに(i)分子計算化学（昭和60年９月、平成２年９月、平成５年７月）、(ii)高分解能分光学（平成元年９月、平成４年３月）、(iii)電子構造動力学（平成元年３月、平成３年９月）、(iv)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）、(v)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14回の日英シンポジウム（いわゆる５＋５ミーティング）が開催された。平成５年10月には５分野合同のシンポジウムを開催し、一層の推進を約束しあった。

なお、文部省とSERCは研究協力が順調に進展していることを評価し、平成５年上記覚書を改訂し協力事業を更に継続・推進することに合意した。

(3) 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一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、第二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。第三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。第四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日には分子および分子集合体の動的過程をテーマとする第五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５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６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。

(4) 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外国人招へい研究員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決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された。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。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月に化学研究所所長朱道本教授の来所を得て、上記覚書のさらに４年間の延長を行った。

(5) 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の支援を得て更に推進していく計画である。

(6) 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、研究室間での共同研究も進み成果を上げつつある。平成６年度には、日本あるいはスペインで共同研究の将来方針について若手研究者を中心にして討論したいと考えている。

(7) 日・ロシア協力

理論科学、低温、高圧、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、シンクロトロン放射科学、固体科学の分野で積極的な協力研究を推進している。

(8) 日本インド研究協力

平成５年度から日本学術振興会の「日本―インド学術交流事業」として共同研究テーマ「分子構造、分光及び動力学」を実施することになり、広い意味での分子構造学、分子分光学、化学反応動力学、分子物性論（新物質及び高分子を除く。）に関する理論的及び実験的研究を開始した。その共同研究の内容は、(1)短期若くは中期の研究者派遣及び受け入れ、(2)限られた人数（双方数名程度）の小規模な専門家によるセミナーの実施、(3)共同研究の可能性を検討するための、主として研究責任者（教授、助教授等）による研究現場への相互訪問及び視察等である。

平成５年度は初年度であったので、実際の研究期間は短かったが、

研究者派遣　　２名

研究者受入れ　2名（うち1名は博士研究員）を実施した。

平成6年度（平成6年12月現在）は

研究者派遣　　1名

研究者受入れ　　5名（受入先：分子研、名大、都立大、阪大、東大）

その他に、研究推進会議を10月26日バンガロール市内のインド科学大学のJ.ネールセンターにおいてアジア学術セミナー開催中に実施した。日本側の出席者は、吉原経太郎（分子研教授）、茅幸二（慶応大教授）、梶本興亜（京大教授）、インド側出席者は、C.N.R.Rao(IIS)他3名であった。将来の研究方針及び研究会の開催（日本）を決定した。

(9) ロチェスター大学との共同研究

ロチェスター大学に併設されている全米科学財団の科学技術センター「光誘起電子移動研究センター」と分子科学研究所が、研究テーマ(1)光誘起分子内及び分子間電荷移動、(2)光誘起水素原子移動、(3)分子性固体におけるプロトン移動、(4)光増感作用、(5)電荷移動理論及びこれらに関連のある研究を掲げて共同研究を行う計画を立て、平成5年12月に事前共同研究が分子科学研究所においてロチェスター大学側から11名が参加して開催された。この結果を元に平成6年度から日本学術振興会の重点研究国際協力事業としてスタートした。

事業内容は、(1)共同研究の実施、(2)研究責任者の短期又は長期訪問、(3)若手研究者の中長期滞在、(4)研究会の開催である。

2−10 大 学 院 教 育

2−10−1 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終了者を誕生させた。

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，望ましい機能を育する分子・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。

総合研究大学院大学　数物科学研究科　構造分子科学専攻・機能分子科学専攻

入学状況

専　　攻　（定員）	平成元年度	平成２年度	平成３年度	平成４年度	平成５年度	平成６年度
構造分子科学専攻（６）	3	6	5	7	１２	7
機能分子科学専攻（６）	9	7	6	6	9	4

在学者数

専　　攻　（定員）	平成２年度	平成３年度	平成４年度	平成５年度	平成６年度
構造分子科学専攻（６）	1		7	12	7
機能分子科学専攻（６）		2	5	7	4

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	6年度	元年度	2年度	3年度	4年度	5年度	6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							2
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
電気通信大学						1							1
中央大学							1						1
早稲田大学		1	1										2
学習院大学						1	1					1	3
慶應義塾大学						1			1		1		3
日本大学									1				1
明星大学					1								1
横浜国立大学		1											1
長岡技術科学大学						1							1
金沢大学						1						2	3
富山大学					1								1
信州大学				1	1								2
静岡大学						1							1
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
広島大学												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

※外国の大学等

外国人留学生数（国別）

	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	6年度	元年度	2年度	3年度	4年度	5年度	6年度	
中国	1			1	2			1	1		1		7
フランス							1						1
ロシア										1			1
バングラデシュ					1								1

学位取得状況

専攻	平成３年度	平成４年度	平成５年度	平成６年度	計
構造分子科学専攻	1	3	4	1	9
機能分子科学専攻	5	4	3（1）	3	15（1）

（ ）は論文博士で外数

2−10−2　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条算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：大学院受託学生）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６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（平成３年度までは大学院受託学生）受入状況　（年度別）

所　属	52～57	58	59	60	61	62	63	元	2	3	4	5	6（前期）
北海道大学	6				1	2	2	1					
室蘭工業大学						1	1						
東北大学	5	1	2	2				1	1			2	
群馬大学												1	
埼玉大学	2				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					2
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	1
名古屋大学	12	6	4	4	3	1	6	5	4	5	3	2	2
名古屋工業大学	3			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		7	5
京都工芸繊維大学				2	1	2	1						
大阪大学	7	5	3	2	1	1			2	2	2	1	
奈良教育大学												1	
奈良女子大学			1										1
岡山大学													7
広島大学			1		1	2	6	5		1	1	1	7
山口大学	1												
愛媛大学	2									1			
高知大学										1	1		
九州大学	3			1	2	2	1	7	8	5	4	1	
佐賀大学					1						2	4	5
熊本大学		1	1	1	1							2	
東京都立大学	14	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	2												
東海大学					1								
星薬科大学							1						
早稲田大学	2												
計	72	19	20	26	26	24	31	32	24	22	20	27	30

2−11 定員と予算

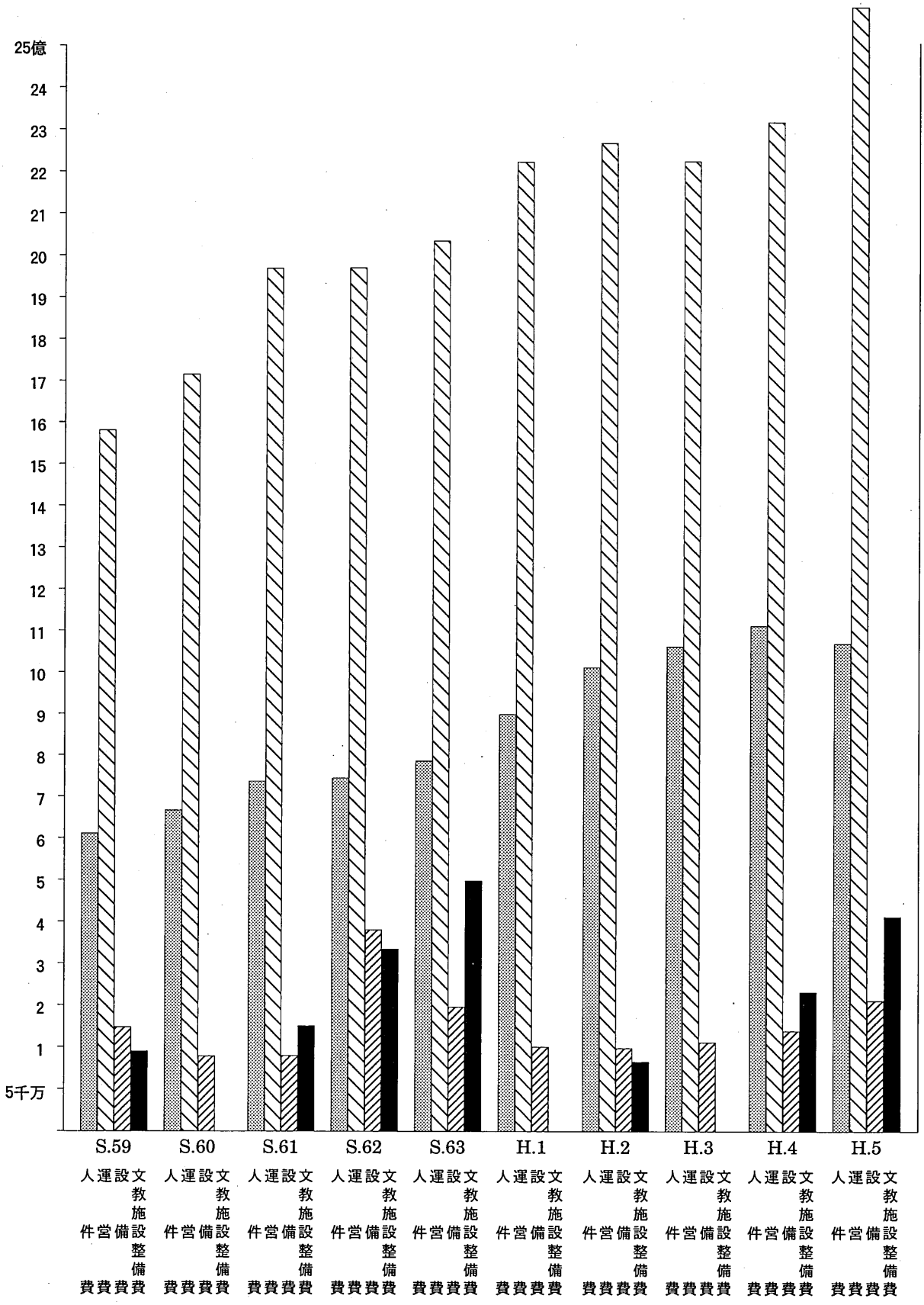
2−11−1 定 員

平成６年度

区 分	所 長	教 授	助教授	助 手	小 計	技 官	計
所長	1				1		1
理論研究系		(1) 2	(1) 2	6	(2) 10		(2) 10
分子構造研究系		(1) 2	(1) 2	6	(2) 10		(2) 10
電子構造研究系		(2) 2	(2) 2	6	(4) 10		(4) 10
分子集団研究系		(1) 2	(1) 2	6	(2) 10		(2) 10
相関領域研究系		(1) 2	(1) 2	6	(2) 10		(2) 10
極端紫外光科学研究系		(1) 3	(1) 3	6	(2) 12		(2) 12
研究施設		(2) 3	(3) 9	18	(5) 30		(5) 30
技術課						48	48
合計	1	(9) 16	(10) 22	54	(19) 93	48	(19) 141

（ ）内は客員数で、外数である。

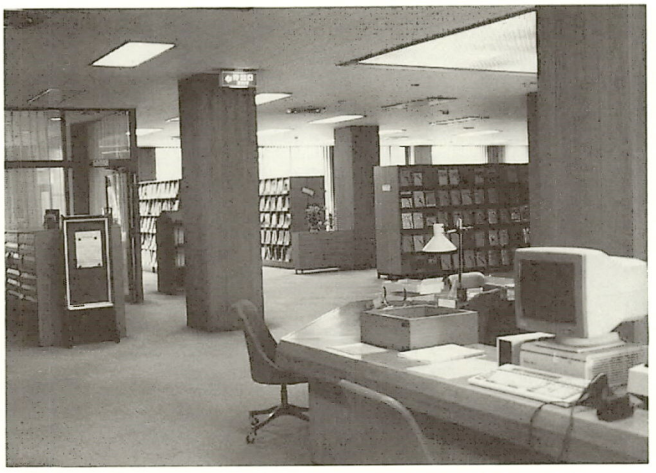
2−11−2　予算の推移


25億
24
23
22
21
20
19
18
17
16
15
14
13
12
11
10
9
8
7
6
5
4
3
2
1
5千万
S.59
S.60
S.61
S.62
S.63
H.1
H.2
H.3
H.4
H.5
人件費
運営費
施設整備費
文教施設費

2−12 共 通 設 備

2−12−1 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。このほか学術文献探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。



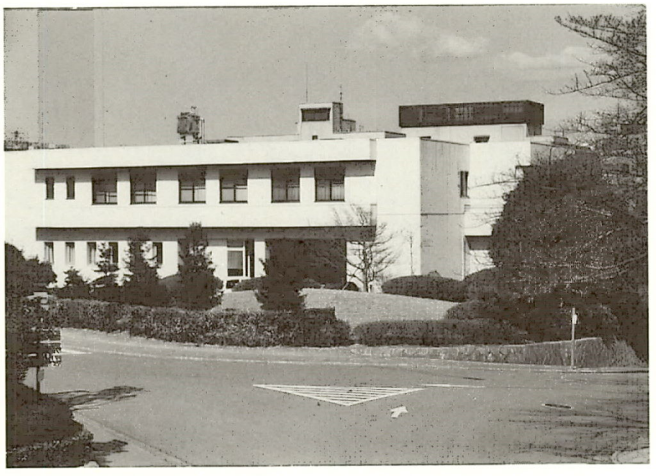
2−12−2 宿泊施設

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。



2−12−3 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。



2−13　地域社会との交流

2−13−1　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。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	吉原經太郎　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	目で見る結晶の生成と溶解 ―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	
51	H.6.6.21	分子の動き	伊藤　光男　所　長	

2−13−2　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）	
第７回	平成６年11月12日（土）	



2−13−3　見学受入状況（団体）

年度	S61年度	S62年度	S63年度	H１年度	H２年度	H３年度	H４年度	H５年度
受入件数	22	20	21	15	10	3	7	9
見学者数	639	628	480	454	250	110	162	211

3．研究系及び研究施設の活動

3−1　理論研究系

分子基礎理論第一部門

岩　田　末　廣（教授）

Ⅰ−1）専門領域　　理論化学

Ⅰ−2）研究課題

a）　1，2，3属原子と水のクラスターの構造と反応性

b）　2成分クラスターの構造と反応

c）　水やアンモニアのクラスターに閉じこめられたリドベルグラジカル（NH_4，H_3O）の電子横造

d）　アルゴンクラスターイオンAr_n+の基底状態と励起状態の構造と反応動力学

e）　簡単な分子の内殻励起状態とイオン化状態の研究

f）　二、三原子分子の励起状態のポテンシャルエネルギー曲面と動力学

g）　電子供与体・受容体錯体の電子構造の研究

h）　分子配座の相対エネルギーと内部回転や反転のポテンシャルエネルギー曲面の研究

i）　分子の電子構造理論研究のための新しい理論的手法及び数値計算法の開発

Ⅰ−3）研究活動の概略と成果

a）　富宅らは金属原子（Na，Mg，Ca，Al，Cu）とそのイオンが水クラスターと形成するクラスターの研究を進めている。これらの一連の実験データを解析するために、*ab initio*分子軌道法によってクラスターの構造を決定し、安定性・反応性を調べた。イオン化（電子親和）エネルギーや光解離スペクトルの計算も行い、実験とのよい一致を得ている。また、ボロンと水のクラスターについては、興味深いクラスター内反応を見いだしている。

b）　茅（慶応大）らは、2成分原子クラスター（Al_nS，Al_nNa_m，Si_nNa，Si_nC_mなど）の中性・陰イオンの光電子スペクトルの測定および安定性・反応性の研究を進めている。これらのデータを解析するために、*ab initio*分子軌道法によってクラスターの構造を決定し、その電子構造を調べた。多くの場合電子の相関がクラスターの安定性に重要な寄与をしていることが明らかになった。光電子スペクトルの帰属にも成功している。

c）　富宅らは安定な陽イオンであるNH_4^+とH_3O^+に電子が付着したラジカル（リドベルグ型ラジカル）を水やアンモニアのクラスター内に発生させることに成功している。その安定性と「リドベルグ電子」の局在・非局在、反応性を調べるために*ab initio*分子軌道計算を行った。

d）　Ar_4^+クラスターイオンを例として、クラスター内での中心イオン核（Ar_3^+）の組み替え反応を研究した。DIM（Diatomics-in-Molecules）法を用いてポテンシャルエネルギー曲面を計算し、ゆがんだT型と直線L型の安定構造を見いだし、異性化反応の遷移構造を決定した。イオン核の組み替え反応には二つの反応経路があり得ることを明らかにした。

e) 最近測定されたHClとN_2分子の22-32eVにわたる2次元光電子スペクトルの帰属を行うために、高い励起状態とイオン状態のポテンシャルエネルギー曲線を配置間相互作用法（CI）で計算した。HClでは観測されている光電子スペクトルと計算結果を比較することによって、中性基底状態の結合にClの3d軌道が重要な役割をしている事が明らかになった。

f) 最も簡単な2成分クラスターである2原子分子として、AlS, AlNa, SiNa, SiCの中性、陽イオン、陰イオンの基底・励起状態のポテンシャルエネルギー曲面と振電準位間の遷移確率を計算し、電子スペクトルや光電子スペクトルの帰属と予測を行った。また、OCSとCS_2については電子スペクトルと光解離過程の研究のためにポテンシャルエネルギー曲面を計算している。

g) ハロゲン（Cl_2, CLF）とアミンおよびメチル置換アミンの錯体の安定性と調和振動数変化、赤外吸収強度の変化を*ab initio*分子軌道法によって計算した。錯体形成に伴う赤外吸収スペクトルの変化について系統性を見いだし、その原因を検討した。また、アンモニアとCl_2の錯体の励起状態のポテンシャルエネルギー曲面を計算し、光解離生成物についても調べた。

e) メチルフルオロトルエンの三つの異性体の中性と陽イオンの基底状態におけるメチル基の内部回転の障壁を*ab initio*分子軌道法によって計算し、実験値とのよい相関を見いだし、内部回転障壁を決定する要因を検討した。

f) 新しい考えに基づく2電子積分の高速近似計算法の開発や、励起状態のポテンシャルエネルギー曲面の計算に適した多配置2（3）次摂動法の開発などを進めている。

Ⅱ－1) 学術論文

R. KISHI, A. NAKAJIMA, S. IWATA, and K. KAYA, "Theoretical Study of Silicon-Sodium Binary Clusters:Geometrical and Electronics Structures of Si_nNa(n=1, 7)", *Chem. Phys. Letters*, 224, 200 (1994).

A. NAKAJIMA, T. TAGUWA, K. NAKAO, K. HOSHINO, S. IWATA, and K. KAYA, "Photoelectron Spectroscopy of AlS^- Diatomic Anion", *Chem. Lett.* 1525 (1994).

S. NANBU, M, G0MYO, and S. IWATA, "Potential Energy Surfaces of Some Low-Lying States of Fluoroformyl Radical FCO", *Chem. Phys.* 184, 97 (1994).

F. MISAIZU, M. SANEKATA, K. FUKE, and S. IWATA, "Photodissociation Study on $Mg^+(H_2O)_n$, n=1−5: Electronic Structure and Photoinduced Intracluster Reaction", *J. Chem. Phys.* 100, 1161 (1994).

Y. SONODA, S, IWATA and Y. OSAMURA, "Moleculer Orbital Study of the Ion-Molecule Reactions Producing the Hydrocarbons in Interstellar Space", *Bull. Chem. Soc. Japan* 66, 3345(1993).

H. WATANABE, M. AOKI, and S. IWATA, "Theoretical Studies of the Alminum-water Clusters $Al(H_2O)_n$ and Their ions $[Al(H_2O)_n]^+$ ", *Bull. Chem. Soc. Japan* 66, 3245 (1993).

M. HIYAMA and S. IWATA, "Theoretical Assignment of the Viblonic Bands in the Photoelectron Spectra of N_2 below 30eV", *Chem. Phys. Letters*, 211, 319(1993).

K.FUKE, F. MISAIZU, M. SANEKATA, K. TSUKAMOTO, and S, IWATA, "Electronic structure and Reactivity of $Mg^+(H_2O)_n$ cluster ions" *Z.Phys.*D26S, 180 (1993).

T. IKEGAMI, T. KONDOW, and S, IWATA, "The Photodissociation Dynamics of Ar_3^+", *J. Chem.Phys.* 99, 3588 (1993).

M.HIYAMA and S, IWATA, "Assignment of the Photoelectron Spectrum of HCl above 20eV", *Chem.Phys.Letters* 210, 187 (1993).

T.IKEGAMI, T.KONDOW, and S, IWATA, "The Geometric and Electronic Structures of Ar_n^+(n=3−27)", *J.Chem.Phys.* 98, 3038 (1993).

Ⅱ－4） 招待講演

S. IWATA, "Ab Initio MO Study of Metal−Water Clusters", The US/Japan Seminar on Dynamics, "Photophysical and Photochemical Events Involving Clusters", Hawaii(U. S. A), March 1994.

S. IWATA and H. WATANABE, "Theoretical Studies of Water Clusters with Group2 and 3 Atoms", ISSPIC 7 "The International Symposium on Small Particles and Inorganic CIusters", Kobe(Japan), Sept. 1994.

K. FUKE, M. SANEKATA, F. MISAIZU and S. IWATA, "Cluster Size Effect on the Photodissociation of $Mg^+H(H_2O)_n$ and $Ca^+(H_2O)_n$", ISSPIC 7 "The 7th International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters", Kobe(Japan), Sept, 1994.

岩田末廣、「クラスター内反応と遷移状態」、94年度秋季日本化学会年会、名古屋1994年10月。

S. IWATA, "Geometrical and Electronic Structures and Reactions of Clusters", The 3rd China-Japan Symposium on Theoretical Chemistry, Amoi(china), Oct. 1994.

Ⅱ－6） 学会および社会的活動

日本化学会役員

関東支部委員：1976-1978

「化学と工業」編集委員：1979-1981

Bulltin of Chemical Society of Japan編集委員：1981-1983

学会賞等選考委員:1991-1992

Bulltin of Chemical Society of Japan編集委員：1991-1993

Bulltin of Chemical Society ofJapan副編集委員長：1994−現在

国際会議の組織委員

第三回世界理論有機化学会議プログラム委員会委員長：1993.7（豊橋）

国際学会誌編集委員

Commuter Physics Communication（Specialist editor）：1986-1993

Theoretica Chimica Acta：1994-現在

科学研究費

重点領域研究「化学反応理論」領域代表者：1993-現在

文部省、学審等の委員

学術振興会特別研究員等審査会専門委員：1994-現在

通産省産業技術部会・原子分子極限操作技術分科会委員：1992-現在

Ⅱ－7） 他大学での講義

慶応義塾大学理工学部

Ⅲ 研究活動の課題と展望

様々なクラスターの構造・反応・分光学の理論的研究を進めていくために、既存の方法を駆使すると同時に、新しい方法も開発する。実験的に研究が進められている広い範囲の大きさのクラスターを理論的にも取り扱っていく。小さい側から溶液化学の研究を進めていくという見方もできる。

簡単な分子の基底・励起状態のポテンシャルエネルギー曲面を解離極限まで精度高く描き、それらをよい近似で解析的に表し、動力学計算などの研究に利用していく。

化学的に、特に各種の分子分光学的に興味のある実験に関与する研究をスーパーコンピュータやワークステーションクラスターを駆使して進めていく。そのために、これらの計算機環境を十分利用する方法の開発を進める。

大　峰　　巌*（助教授）

Ⅰ－1）専門領域：理論化学

Ⅰ－2）研究課題

昨年に引き続き次のような研究を行った。

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）研究活動の概略と主な成果

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、それが誘電緩和、ラマン散乱、ニュートロン散乱などの観測量に如何に現われるか、また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なった。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、間欠的な水分子の集団運動により生ずる大きな揺らぎが、誘電緩和、ラマン散乱、ニュートロン散乱など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な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長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、幾つかの励起状態のポテンシャルエネルギー面上での交差の様相、振電相互作用、溶媒の効果について調べている。

Ⅱ－1）学術論文

I. OHMINE and H. TANAKA, "Fluctuation, Relaxations and Hydration in Liquid Water; Hydrogen Bond Rearrangement Dynamics" *Chemical Reviews* 93, 2545(1993).

T. KOMATSUZAKI and I. OHMINE, "Energetics of Proton Transfer in Liquid Water I; Ab-initio Study for Origin of Manybody Interaction and Potential Energy Surface", *Chemical Physics* 180, 239 (1994).

M. CHO, G. R. FLEMING, S. SAITO, I. OHMINE and R. M. STRATT, "Instantaneous Normal Mode Analysis of Liquid Water", *J. Chem. Phys.* 100, 6672 (1994).

S. SAITO and I. OHMINE, "D^{+}ynamics and Relaxation of an Intermediate Size Water Cluster $(H_2O)_{108}$"

J. Chem, Phys. 101 6063(1994).

Ⅱ－4） 招待講演

I. OHMINE, "Relaxation and Chemical Reactions in Hydrogen Bonded Liquids", American Physical Society, Pittsburg(U. S. A)March, 1994.

I. OHMINE, "Collective Motions, Fluctuation and Relaxations in Liquid Water", Harvard Univ. Chemistry Departmental Seminar, Cambridge, Mass. (U. S. a)March 1994.

Ⅱ－6） 学会および社会的活動

学会誌編集委員

Computer and Chemistry,Internationa1 Journal,Editorial Board

Ⅲ） 研究活動の成果と展望

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グイナミックスの特長を調べ、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化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長が如何に生じているかを調べている。

*） 平成６年４月１日付で名古屋大学理学部教授

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）　化学反応の量子動力学

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）　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厳密に取扱う為の超球座標系に基づいた計算コードを完成し、$O(^3P)+HCl$及び$Mu+H_2$系に応用し、動力学を解明した。

b）　多自由度系の動力学

重なり共鳴現象の解析を共鳴散乱理論を用いて解析しRRKM理論の成立条件を調べた。また、前に提唱した分離曲面解析法を用いてArクラスター中での$Cl+Cl_2$反応を解析した。

c）　非断熱遷移の理論

直線ポテンシャルモデルでのLandau-Zener型及び非断熱トンネル型非断熱遷移に対する散乱行列の最も精確なしかも一般化し易い表式を導出した。更に、この成果に基づき一般曲線ポテンシャルに対する完全な解析解を構築した。

d）　多次元トンネルの半古典論

二重井戸におけるエネルギー分裂に対する振動励起の効果を分析し分類した。又、トロポロン分子の例を解析した。

e）　超励起分子の動性と動力学

量子欠損理論を用いてCO分子の多光子励起の実験を解析している。

Ⅱ－1）　学術論文

S. TAKADA, K. TSUDA, A. OHSAKI, and H. NAKAMURA, "Effects of Potential Energy Surface Topography and Isotope Substitution in Atom-diatom Chemical Reactions: The $Cl+H_2$ and $D+H_2$ Systems", *Advances in Molecular Vibrations and Collision dynamics* Vol. 2A, p. 245 (1994).

S. TAKADA and H. NAKAMURA, "Wentzel-Kramers-Brillouin Theory of Multidimensional Tunneling:General Theory for Energy Splitting", *J. Chem. Phys.* 100, 98 (1994).

K. MORIBAYASHI, S. TAKADA, and H. NAKAMURA, "Constant Centifugal Potential Approximation for Atom−diatom Chemical Reaction Dynamics", *J. Chem. Pys.* 100, 4284 (1994).

S. TAKADA and H, NAKAMURA, "WKB Theory of Tunneling between Tori", *Progress of Theor. Physics, Supplement* No.116, p. 295(1994).

K. SOMEDA, H. NAKAMURA and F. H. MIES, "Systematics of the Average Resonance Widths in Overlapping Resonance-scattring and its Connection with the RRKM Theory", *Chem. Phys.* 186 (1994).

C. ZHU and H. NAKAMURA "Two-state Linear Curve Crossing Problems Revisited. IV. The Best Analytical Formulas for Scattering Matrix", *J. Chem. Phys.* 101 (1994).

Ⅱ－3) 総説、著書

H. NAKAMURA, "Moleculer Collisions and Chemical Reactions", *Suuri Kagaku* (in Japanese), No.360, 19 (1993).

H. SUN, K. NAKASHIMA and H. NAKAMURA, "Characterestics of Superexcited States of Molecules and MQDT Studies of NO^+ Dissociative Recombination", Dissociative Recombination: Theory, Experiment, and Applications, edited by B. R. Rowe, J. B. A. Mitchell and A. Canosa(Plenum, New York), p. 25(1994).

S, LEE, M. IWAI and H. NAKAMURA, "Characteristics and Dynamics of Doubly Excited States of Molecules", Molecules in Laser Fields, edited by A. D. Bandrauk(Marcel Dekker, New York), p. 217(1994).

Ⅱ－4) 招待講演

H. NAKAMURA, "Theoy of Nonadiabatic Transition", Korean Physical Society, Seoul (Korea), April 1993.

H. NAKAMURA, "Nonadiabatic Tunneling in One-dimensional Peoriodic System", Canadian Chemical Society Meeting, Sherbrooke (Canada), May 1993.

H.NAKAMURA, "Nonadiabatic Tunneling in One-dimensional Periodic System", Canadian Chemical Society Meeting, Sherbrooke (Canada), May 1993.

中村宏樹、朱超原、「非断熱遷移理論の新展開」、日本物理学会特別講演、岡山、1993年4月

Ⅱ－6) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

原子衝突研究協会委員（1981～）

学会の組機委員会

ICPEAC（原子衝突物理学国際会議）第9回（1979）組織委経理担当

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（1992～1994）

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。化学反応、特に軽原子移行反応の量子動力学の探究、多自由度系に対する方法論の開発、一次元多準位非断熱遷移問題の研究、多次元理論開発への挑戦を進める。また、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も行う。

谷　村　吉　隆（助教授）

Ⅰ－1）　専門領域：化学物理理論

Ⅰ－2）　研究課題：

a）　位相空間上の波束を用いた非線形光学過程の解析

b）　凝縮相中分子の光物性における非コンドン効果の影響

c）　非共鳴高次光学過程による溶液の均一・不均一効果の解析

d）　強いレーザーパルスで励起された凝縮相中分子の吸収スペクトル

e）　量子フォッカープランク方程式による分子の非断熱的遷移過程の研究

Ⅰ－3）　研究活動の概略と主な成果

a）　位相空間上の波束を用いた非線形光学過程の解析

電子状態の波束を用いて、凝縮相中の分子の非線形光学現象を記述する場合の問題点について研究した。凝縮相の影響を熱浴として取り入れ、第一原理より非線形光学過程の時間発展演算子を計算した結果、熱浴と電子状態の相関のため、波束による記述方法は凝縮相では強い制約を受ける事が明らかになった。

b）　凝縮相中分子の光物性における非コンドン効果の影響

現実的な系では、分子と光の双極子相互作用は、座標の関数である場合が多いが（非コンドン双極子相互作用）、このような問題を経路積分を用い、熱浴の効果を考慮したまま厳密に解く事に成功した。この結果を用い、非コンドン効果によりスペクトルがどの様に変化するかを、散逸の強さや温度にどの様に依存するか、始めて明らかにする事が出来た。

c）　非共鳴高次光学過程による溶液の均一・不均一効果の解析

凝縮相中の分子の基底状態の振動モードにおける均一・不均一効果を調べるモデルとして、量子調和振動子モデルを提唱し、経路積分を実行する事により、その光学応答の性質を調べた。その結果フェムト秒パルスを用いて非共鳴高次光学過程の実験を行えばこの様な二つの効果の区別が可能である事を明らかにした。この理論に基づく実験は、現在、世界各地で始まっている。

d）　強いレーザーパルスで励起された凝縮相中分子の吸収スペクトル

凝縮相中の分子を、強いフェムト秒レーザーパルスで励起すると、シュタルク効果など特異な効果が観測されるが、理論的に解析する場合、パルスの短さゆえに、よく知られている光学的ブロッホ方程式は適用出来ない。そこで、熱浴との相関を考慮可能な新しいタイプの運動方程式を導出し、これを解く事により、強いレーザーパルス下での吸収スペクトルが、熱浴との相互作用により、どのように変化するかを解析した。

e）　量子フォッカープランク方程式による分子の非断熱的遷移過程の研究

量子力学的フォッカープランク方程式を、複数ポテンシャル面とその間をつなぐ非断熱遷移結合から機成される系に適用出来る様に拡張し、それを数値的に解く事により、非断熱的遷移過程の動力学的振る舞いを解析した。この方法は任意の形のポテンシャル面や時間依存のある非断熱結合による系などにも適用でき、オプテカル・コントロールの研究などもにも用いる事が出来る。

Ⅱ－1）　学術論文

Y. TANIMURA and S. MUKAMEL, "Description of Nnlinear Optical Response using Phase Space Wave Packets ", *J. Phys. Chem.* 97, 12596 (1993).

Y. TANIMURA and S. MUKAMEL, "Temperature Dependence and Non-Condon Effects inPump-Probe Spectroscopy in the Condensed Phase", *J. Opt. Soc. Am.* B10, 2263 (1993).

Y. TANIMURA and S. MUKAMEL, "Two-Dimensional Femtosecond Vibrational Spectroscopy of Liquids", *J. Chem. Pys.* 99, 9496 (1993).

Y. TANIMURA and S. MUKAMEL, "Optical Stark Spectroscopy of Browninan Osci11atior in Intense Fields", *J. Phys. Soc.* Jpn, 63, 66(1994).

Y. TANIMURA and S. MUKAMEL, "Multistate Quantum Fokker-Planck Approach to Nonadiabatic Wave Packet Dynamics Pump-Probe Spectroscopy", *J. Chem. Phys.* 101、3049(1994).

Ⅱ－2) 国際会議のプロシーディングス

Y. TANIMURA and S. MUKAMEL, "Nuclear Dynamics of Liquids Probed by 2D Femtosecond Off-Resonance Spectroscopy", proceedings of the colloquium "Femtosecond Reaction Dynamics"ed. by D. A. Wiersma (North-Holland, 1994) p. 157.

Y. TANIMURA and S. MUKAMEL, "Electronic Dephasing in Femtosecond Curve Crossing Spectroscopy", Proceedings of the Fourteeth International Conference on Raman Spectroscopy, Ed. by N.－T. Yu and X.－Y. Li, (John Wiley, 1994) p. 23.

Ⅱ－3) 総説、著書

Y. TANIMURA and S. MUKAMEL, "Quantum Brownian Oscillator Analysis of Pump-Probe Spectroscopy in the Condensed Phase", J. D. Simon(ed.) "Ultra Fast Dynamics of Chemical Systems" (Kluwer, 1994) p. 327.

Ⅱ－4) 招待講演

Y. TANIMURA, "Path Integral Approach to Raman Echo Spectroscopy", Cornell University (米国) 1993年8月.

Y. TANIMURA, "Multi-State Quantum Fokker-Planck Equation Approach to Nonadiabatic Dynamics", CECAM workshop on "Computation of Rate Constants for Quantum Processes in Condensed Phases", Lyon (フランス)1994年7月.

谷村吉隆、慶応大学1994年５月、物質研1994年６月

Ⅲ 研究活動の課題と展望

光学過程を研究するにあたり、調和振動子モデルがよく用いられるが、実際的な系を解析するにあたっては非調和振動子性を考慮する必要がある。経路積分法を屈指すればこの様な系の解析が可能で、現在その開題に挑んでいる所である。この研究は化学反応過程における量子効果と散逸の影響を研究する上でも大変有用であると恩われる。

有機物導体の諸物性についても、今後は研究する予定で、特に有機物超伝導の機構を解明する事は大きな目標の一つである。

3−2 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） 研究活動の概略と主な成果

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・サブミリ波分光器の測定可能な周波数範囲を620GHzまで拡張した。これを用いて星間関連の新しいラジカルA1H(D)，CH_2，CD_2のサブミリ波スペクトルを測定し、詳細な分子定数を決定した。また星間分子NSラジカルのスペクトルの再測定を行い、星間NSのスペクトル線から得られた暗黒星雲の相対速度の矛盾を解決した。直線炭素鎖分子C_3S，HCCSの変角振動励起状態のスペクトルを詳細に測定した。前者については高次の振動回転相互作用定数を初めて決定し、後者については２個の変角振動を持つ分子のRenner-Teller効果の解析を進めている。

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た。分光システムの試験としてC_3Sのν_1モードを測定し、総合的な感度を検討した。

c） サブミリ波・遠赤外高感度分光法の開拓

高安定高出力CO_2レーザー、CO_2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、波長可変な遠赤外側波帯を発生させ利用する高分解能分光器を開発しつつある。遠赤外光とマイクロ波を混合するためのGaAsショットキー・ダイオード用マウントおよび発生する側帯波と入力レーザー光を分離するためのダイプレクサーを設計・製作した。

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45m電波望遠鏡を用いて暗黒星雲でのNH_2Dの観測を行った。観測したいくつかの天体について非常に高い確率でNH_2Dのスペクトルを検出した。いずれの天体においても重水素の化学濃縮度は非常に高く、以前干渉計観測により明かにしたOri-KLの場合と同様に、時黒星雲においても大部分のNH_3が星間塵より生成したと判断できる。この結果は暗黒星雲における雲の進化やその内部での星形成過程の解明に与える影響が大きいと考える。

e） サブミリ波望遠鏡の開拓

星間化学の総合的な解明を目的に、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。平成５年度には110GHzおよび230GHzのラジオメーター

を用いて富士山頂での大気透過度を測定した。その結果、測定時の気象状況から判断して、冬期の富士山頂はサブミリ波望遠鏡のサイトとして世界的に見ても最も良い場所の一つであることが判明した。平成6年夏には望遠鏡建設予定地でボーリングによる地盤調査を行った。

Ⅱ－1) 学術論文

M. Izuha, S. Yamamoto, and S. Saito, "Rotational Spectrum of SiC_2 in the ν_3 Excited State", *Spectrochimica Acta*, 50A, 1371(1994).

S. K. Lee, H. Ozeki, S. Saito, and S. Yamamoto, "Submillimeter-Wave Spectrum of the SiH_3^+ Ion. J=2−1, K=0 and 1 Transitions", *Chem. Phys. Letters*, 224, 21(1994)・

Ⅱ－2) 国際会議プロシーディングス

S. Saito, H. Mikami, S. Yamamoto, Y. Murata, and R. Kawabe, "Aperture Synthesis Maps of NH_2D and CH_3OD Lines toward Orion-KL: The Origin of NH_3 and CH_3OH", in "Astronomy with Millimeter and Submillimeter-Wave Interferometery, IAU Colloq. 140". ed. by M. Ishiguro and W. J. Welch; Astron. Soc. Pacific. Conf. Series, 59, 241(1994).

Ⅱ－3) 総説，著書

齋藤修二、「星間物質の化学」、化学と教育，41，451（1993）．

Ⅱ－4) 招待講演

齋藤修二、「星間分子のマイクロ波分光」、ESR討論会、名古屋、93.10

齋藤修二、「宇宙の進化一星間分子から星間塵へ」、茅コンファレンス、羽咋、94.8

Ⅱ－5) 受賞、表彰

分子科学研究奨励森野基金　齋藤修二（1985）

仁科記念賞　齋藤修二（1991）

東レ科学技術賞　齋藤修二（1993）

Ⅱ－6) 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

東京大学大学院理学研究科、分子構造論Ⅱ、1993.12.

筑波大学大学院化学系研究科、化学特別講義Ⅲ、1993.12.

岡山県高等学校理科実験研修講座、化学、1994.8

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） 中性原子のレーザー冷却・トラップの研究

b） エキゾチック原子（分子）のレーザー分光

Ⅰ－3） 研究活動の概略と成果

a） 中性原子のレーザー冷却・トラップの研究

レーザートラップ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ている。本年度はボゾンである^{4}Heとの違いを調べるためフェルミオンである^{3}Heのトラップを試み、それに成功した。また、トラップの原子数を飛躍的に増加させることにも成功し、10^7個というヘリウム原子としては非常に多数の原子を約200μKの並進温度でトラップすることが出来た。これにより今後の応用が期待できるようになった。

b） 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媒質中に注入したときに生成されることが推定されていた反陽子ヘリウム原子（$\bar{p}$−He^+：分子であるとも言える）の内部状態間の遷移をレーザー誘起消滅法によって観測することに成功した。実験で求められた共鳴波長や蛍光寿命の値と理論的に予測されていたそれらの値との間の非常に良い一致から、ハドロンを構成要素とする初めての長寿命エキゾチック原子である反陽子ヘリウム原子が明かに生成していることを立証した。

Ⅱ－1） 学術論文

N. Morita, M. Kumakura, T. Yamazaki, E. Widmann, H. Masuda, I. Sugai, R. S. Hayano, F. E. Maas, H. A. Torii, F. J. Hartmann, H. Daniel, T. Von Egidy, B. Ketzer, W. Muller, M. Schmid, D. Horvath, and J. Eades *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1180(1994).

"First observation of laser-induced resonant annihilation in metastable antiprotonic helium atoms"

A. Fujii and N. Morita *Laser Chem.* **13**, 259(1994).

"Laser spectroscopic investigation of high Rydberg states of NO:Decay dynamics near the first ionization threshold"

Ⅱ－3） 総説・著書

早野龍五、森田紀夫「反陽子ヘリウム原子」科学（岩波書店刊），64巻５号，283（1994），

Ⅱ－4） 招待講演

森田紀夫、「反陽子ヘリウム原子のレーザー分光実験」、日本物理学会年会、特別講演、1994年３月。

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

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飛躍的な増加が実現できたので、今後はボーズ凝縮など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。反陽子エキゾチック原子に関しては、さらに多くの遷移を観測して内部エネルギー状態のダイナミクスを調べるとともに、このエキゾチック原子の生成過程を研究することに主眼を置きたい。

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/プロトン輸送のカップリング機構

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質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。$O_2 \rightarrow H_2O$を触媒するチトクロム酸化酵素、$O_2 \rightarrow H_2O+SO$を触媒するチトクロムP-450、$H_2O_2 \rightarrow H_2O+1/2O_2$を触媒する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200nm付近のレーザー光でラマン散乱を測定できる実験系を製作し、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分光で追跡した。多数の人工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（dd）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を用いたスキャニング・マルチチャンネルラマン分光器の試作。

Ⅰ－1）　学術論文

Y. Mizutani, S. Tokutomi, and T. Kitagawa, "Resonance Raman spectra of the photointermediates in phytochrome phototransformation: Deprotonation of the chromophore in the bleached intermediate", *Biochemistry* 33, 153(1994).

S. Sato and T. Kitagawa, "Vibrationally hot(dd) excited states of Ni^{II}-porphyrin probed by picosecond time-resolved resonance Raman spectroscopy", *Springer Proc. Phys.* 74, 104(1994).

Y. Mizutani, Y. Watanabe, and T. Kitagawa, "Resonance Raman characterization of iron(III)porphyrin N-oxide:Evidence for an Fe-O-N bridged structure", *J. Chem. Soc.* 116, 3439(1994).

S. Kaminaka, Y-X. Zhou, A. Tsuneshige, T. Yonetani, and T. Kitagawa, "Sequential changes of the Fe-histidine bond upon ligand binding to hemoglobins:Resonance Raman study of aa-crosslinked Co-Fe hybrid Hbs", *J. Am. Chem. Soc.* 116, 1683(1994).

N. Sone, T. Ogura, S. Noguchi, and T. Kitagawa, "Proton pumping activity and visible absorption and resonance Raman spectra of a cao-type cytochrome c oxidase isolated from thermophilic bacterium Bacillus PS3", *Bioccemistry* 33, 849(1994).

S. Ozawa, Y. Watanabe, S. Nakashima, T. Kitagawa, and I. Morishima, "Preparation and characterization of oxoiron(IV) chlorin complexes as the first models for a reaction intermediate in the catalytic cycle of cytochrome d", *J. Am. Chem. Soc.* 116, 634(1994).

K. Kamogawa, M. Takamura, H. Matsuura, and T. Kitagawa, "A Multi-reflection Raman ce11 for studying dilute aqueous solutions", *Spectrochim. Acta* 50A, 1513(1994).

S. Hirota, T. Ogura, K. Shinzawa-Itoh, S. Yoshikawa, M. Nagai, and T. Kitagawa, "Vibrational assignments of the FeCO unit of CO-bound heme proteins revisited:Observation of a new CO-isotope-sensitive Raman band assignable to the FeCO bending fundamenta1", *J. Phys. Chem.* 98, 6652(1994).

II－2) 国際会議プロシーディングス

T. Ogura, S. Hirota, S. Takahashi, D. A. Proshlyakov, K. Shinzawa-Itoh, S. Yoshikawa, E. H. Appelman, and T. Kitagawa, "The Mechanism of Dioxygen Reduction Catalyzed by Cytochrome *c* Oxidase as Studied with Time-resolved Resonance Raman Spectroscopy", *XIVth Intnl. Conf. Raman Spectrosc.* (N. T. Yu & X.-Y. Li, Eds)pp. 102－103, Wiley & Sons, Chichester(1994).

H. Matsuura, M. Takamura, S. Masatoki, K. Kamogawa, and T. Kitagawa, "Conformation Behavior of Poly(Oxyethylene) Chains in Aqueous Solution as Studied by High-Sensitive Raman Spectroscopy", *XIVth Intnl. Conf. Raman Spectrosc.* (N. T. Yu & X.-Y. Li, Eds)pp. 942－943, Wiley & Sons, Chichester(1994).

S. Kaminaka and T. Kitagawa, "A Novel Idea For Practical UV Resonance RamanMeasurement with A Double Monochromator and Its Application to Protein Structural Study of Inhibitor-Bound Lysozymes", *XIVth Intnl. Conf. Raman Spectrosc.* (N. T. Yu & X.-Y. Li, Eds)pp. 164－165, Wiley & Sons, Chichester(1994).

S. Nakashima, T. Kitagawa, and J. Olson, "Detection of Recombination Intermediates for Photodissociated CO Myoglobin by Time-resolved Resonance Raman Spectroscopy", *XIVth Intnl. Conf. Raman Spectrosc.* (N. T. Yu & X.-Y. Li, Eds)pp. 478－479, Wiley & Sons, Chichester(1994).

T. Kitagawa, S. Hirota, T. Ogura, M. Nagai, K. Shinzawa-Itoh, S. Yoshikawa, and E. H. Appelman, "Reassignment of the FeCO Bending Raman Band of Carbonmonoxy－Heme Proteins", *XIVth Intnl. Conf. Raman Spectrosc.* (N. T. Yu & X.-Y. Li, Eds)Extra Booklet E17－18 14－15, Wiley & Sons, Chichester(1994).

II－4) 招待講演

T. Kitagawa and S. Sato, "Vibrationaly Hot(dd)Excited State of Ni^{II}-Porphyrins Probed by Picosecond Time-Resolved Resonance Raman Spectroscopy", VIth Intn1. Conf. on Time-Resolved Vibrational Spectroscopy, Berlin, 23－28 May 1993

T. Kitagawa, S. Kamainaka, Y. Sakan, T. Ogura, and M. Ikeda-Saito, "Fast Dynamics of Protein Structures Revealed by Time-Resolved Resonance Raman Spectrosopy", XIth Intn1. Biophys. Congress, Budapest(Hungary), 25−30 July 1993

T. Kitagawa and T. Ogura, "Activation Mechanism of Dioxygen by aa_3-Type Cytochrome *c* Oxidase", IUPAB Satellite Meeting on Electron Transfer Complexes, Gmunden(Austria), 2−5 August 1993

T. Kitagawa, "Time-Resolved Resonance Raman Study on Recombination Dynamics of Photodissociated Carbonmonoxide of Myoglobin and Its Mutans", Intnl. Conf. Bioinorganic Chem. VI, Univ. Ca1if. San Diego, 22−27 August 1993

T. Kitagawa, "Time-Resolved Vibrational Spectroscopy", SERC School of India, Univ. of Pune(India), 2−15 January 1994

T. Kitagawa, "Time-Resolved Resonance Raman Study on aa_3-Type Cytochrome *c* Oxidase", Intn1. Workshop on Terminal Oxidase, Rieti(Italy), 30 May−3 June 1994

T. Kitagawa, "Time-Resolved Resonance Raman Study of Recombination Intermediates of Photodissociated CO−Myoglobin" Vth Intnl. Conf. Laser Application in Life Sciences, Minsk, Belarus, 28 June−2 July 1994

T. Ogura, "The Mechanism of Dioxygen Reduction Catalyzed by Cytochrome *c* Oxidase as Studied with Time-Resolved Resonance Raman Spectroscopy", XIV Intnl. Conf. Raman Spectroscopy, Hong Kong, 22−26 August 1994

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	小倉高志	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
	東海支部	幹事、1988～1990
	化学展92	企画委員会 副委員長 1991
		賞推薦委員 1994

学会の組織委員

Internatinal Conference on Raman Spectroscopy, International Steering Commitee 1988～1994

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

11th International Conferens on Photobiology, Symposium organizer 1992

Vth Intr1. Conf. on Time-resolved Vibrational Spectroscopy(Tokyo), Loca1 Organizing Committee 1991

文部省・学提等の委員

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
科学技術庁	研究開発局評価委員	1994

学会誌編集委員

Jornal of Molecular Liquids	(Editorial Board)	1993～
Asian Journal of Physics	(Advisory Board)	1991～
Journal of Physical Chemistry	(Advisory Board)	1993～
Chemical Physics	(Advisory Board)	1993～
Biospectroscopy	(Editional Board)	1993～

科研費の班長研究代表者等

重点研究「生物無機」、班長　1991～1993

総合研究（B）班長　1994

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
静岡大学、	1993	12月
名古屋大学、	1994	12月

Ⅲ　研究活動の課題と展望

1.チ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の合成及び反応機解：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.タンパク質の早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法の手法をシャープに生かした研究を進めて行きたい。

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）　疑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）　研究活動の概略と主な成果

a）　凝集系における分子運動のコヒーレンスの検出

動的な外部関数の変動に対する系の応答を、ラマン分光法を用いて観測している。液晶系について、外部電場に対する液晶分子の応答を検出して、ラマンスペクトルの２次元表示に成功した。今後溶液系、高分子系の分子運動の詳しい測定へ発展させていく。

b）　フラーレン頬のラジカルの分子分光学的研究

多光子共鳴電子脱離過程の測定を行い、気体状態でC60のアニオンラジカルの吸収スペクトルを報告した。また、金属内包フラーレンについて、ESR測定から磁気的分子定数の大きさを決め、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

T. KATO, “Absorption and Emission Spectra for C60 Anion.”, *Laser Chemistry* 14, 155(1993)

T. SUZUKI, Y. MARUYAMA, T. KATO, K. KIKUCHI, AND Y. ACHIBA, “Electrochemical Properties of La@C82” *J. Am. Chem. Soc.* 115, 11006(1993).

T. KATO, S. SUZUKI, K. KIKUCHI, AND Y. ACHIBA, “ESR Study of the Electronic Structure of Metallofullerenes:aComparison between La@C82 and Sc@C82.”, *J. Phys. Chem.* 97, 13425(1993).

Ⅱ－4）　招待講演

T. KATO, “Charge Transfer Complex of M@C82 with C60”, San Francisco(U. S. A.), April 12－16, 1993.

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、研究している。実時間変化を直接追跡する方法との整合性と、対照的な点をより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。

3−3　電子構造研究系

基礎電子化学研究部門

吉　原　經太郎（教授）

Ⅰ−1）専門領域：光化学、レーザー化学、溶液化学

Ⅰ−2）研究課題

a）分子間電子移動の動力学的機構の研究

b）フェムト秒高次非統形分光法の開発とその液体ダイナミックスへの応用

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）アルカリ金属ニ量体光解離ダイナミックスの遷移状態領域の分光学的研究

f）直線ポリエンの分光と反応遷移状態の観測

g）紫外フェムトが秒分光法による簡単な分子の溶液内反応初期過程の研究

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（ピコ～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）高次（５次及び７次）非線形分光法を開発した。フェトム秒パルス系列の制御によって、２次元分光法を実現し、分子の低振動に関しては５次の分光で、高振動に関しては７次の分光で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た。これを分子の溶液のダイナミックスの研究に応用しつつある。

c）本来の電子受容体であるフィロキノンを除去した高等植物の反応中心と、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。それぞれの電子移動速度を観測した。

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極低温において観測し、２励起子状態を見いだした。また、ピコ秒過渡分光法によって会合体内の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、セシウムニ量体のいくつかの新しい準位を見い出した。特に、Cs_2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、discrete stateと連続帯の相互作用の分光学的特徴を明らかにした。

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）分光を行った。特に反応のしきいエネルギー近傍の詳細な分光情報から、反応の遷移過程において、振動状態が量子化されていることを初めて見いだした。

g）紫外フェムト秒分光法によって、簡単な分子の光化学反応初期過程を調べ反応の溶媒効果の分子論について研究を開始した。

Ⅰ－1) 学術論文

P. B. BISHT, H. PETEK, and K. YOSHIHARA, "Exciplex Formation in van der Waals Compelxes of Naphthalene-Triethylamine in a Supersonic Jet", *Chem. Phys. Lett.* 213, 75(1993).

V. KAMALOV, I. A. STRUGANOVA, and K. YOSHIHARA, "Time-Resolved Emission Spectra of the BIC J-aggregate at Low Temperature", *Chem. Phys. Lett.* 213, 559(1993)・

H. SEKIYA, M. HABU, H. UJITA, T. TSUJI, A. MORI, H. TAKESHITA, Y. NISHIMURA, H. PETEK, and K. YOSHIHARA, "Dual Fluorescence and Excited-State Intermolecular Proton Transfer in Jet-Cooled 3, 4-Benzotropolone", *Chem. Phys. Lett.* 215, 641(1993).

H. KANDORI, R. F. BORKMAN, and K. YOSHIHARA, "Picosecond Transient Absorption of Aqueous Tryptophan", *J. Phys. Chem.* 97, 9664(1993).

A. AGNESI, G. C. REALI, V. KUBECEK, S. KUMAZAKI, Y. TAKAGI, and K. YOSHIHARA, "β -Barium Borate and Lithium Triborate Picosecond Parametric Oscillators Pumped by a Frequency-Tripled Passive Negative-Feedback Mode-Locked Nd: YAG Laser", *J. Opt. Soc. Am.* B10, 2211(1993).

K. KEMNITZ, K. YOSHIHARA, T. SUZUMOTO, T. TANI, M. LINDRUM, J. MOLL, and D. DAEHNE, "Primary Photophysical Processes in J-Aggregates of Spectral Sensitisers", *Proc. Indian Acad. Sci.* 105, 783(1993).

A. DOUHAL, F. AMAT-GUERRI, A. U. ACUNA and K. YOSHIHARA, "Picosecond Vibrational Relaxation in the Excited-State Proton-Transfer of 2-(3'-Hydroxy-2'-Naphthyl)Benzimidazole", *Chem. Phys. Lett.* 217, 619(1994).

V. KUBECEK, K. HAMAL, Y. TAKAGI, and K. YOSHIHARA, "Ti: Sapphire Laser Pumped by a Long Train of Pulses from Mode-Locked Nd: YAG Laser with Negative Feedback", *Czeck. J. Phys.* 44, 115(1994).

V. KAMALOV, I. A. STRUGANOVA, T. TANI, and K. YOSHIHARA, "Temperature Dependence of Superradiant Emission of BIC J-aggregates", *Chem. Phys. Lett.* 220, 257(1994).

B. KIM and K. YOSHIHARA, "Resonance Enhanced Two Photon Ionization Spectroscopy of RbCs in a Very Cold Molecular Beam", *J. Chem. Phys.* 100, 1849(1994).

Y. S. CHOI, T. S. KIM, H. PETEK, K. YOSHIHARA, and R. L. CHRISTENSEN, "Evidence for Quantization of the Transition State for cis－trans Isomerization", *J. Chem. Phys.* 100, 9269(1994).

K. YOSHIHARA, Y. NAGASAWA, A. YARTSEV, S. KUMAZAKI, H. KANDORI, A. E. JOHNSON, and K. TOMINAGA, "Femtosecond Intermolecular Electron Transfer in Condensed Systems", *J. Photochem. Photobiol. A:Chem.* 80, 169(1994).

B. KIM, K. YOSHIHARA, and S. LEE, "Complex Resonances in the Predissociation of Cs_2", *Phys. Rev. Lett.* 73, 418(1994).

Ⅱ－3) 総説、著書

K. YOSIHARA, R. INABA, H. OKAMOTO, M. TASUMI, K. TOMINAGA, and K. A. NELSON, "Vibrational and Rotational Dynamics of Molecules in Solution Studied by Femtosecond CARS and Raman Echo", in *Femtosecond Reaction Dynamics*, Ed. D. A. Wiersma, North Holland, Amsterdam, p229－310(1994).

Ⅱ－4）招待講演

K. YOSHIHARA, K. INABA, H. OKAMOTO, M. TASUMI, K. TOMINAGA, K. A. NELSON, "Vibrational and Rotational Dynamics of Molecules in Solution Studied by Femtosecond CARS and Raman Echo," Royal Netherlands Academy of Arts and Sciences Colloquium on "Femtosecond Reaction Dynamics," Amsterdam, May 1993.

K. YOSHIHARA, "Ultrafast Dynamics of Excited States of J-Aggregates," 6th Symposium on Unconventional Photoactive Solids, Leuven, August 1993.

吉原經太郎、「分子の超高速過程」、日本電子工業振興協会、超高速量子デバイス研究会、東京、1993年９月

H. PETEK, A. J. BELL, R. L. CHRISTENSEN and K. YOSHIHARA, "Structure and Dynamics of Linear Polyenes," The International Laser Science Conference, Albuqerque(USA), September 1993.

K. YOSHIHARA, "Ultrafast Intermolecular Electron Transfer and Solvation Dynamics," 47th Okazaki Conference, Okazaki, October 1993.

K. YOSHIHARA, "Solvent and Nuclear Dynamics in Ultra fast Molecular Processes," Anglo-Japanese N+N Meeting on Molecular Science, Abingdon, October 1993.

K. YOSHIHARA, "Femtosecond Intermolecular Electron Transfer," Department of chemistry, Heriot-Watt University, Edinburgh, October 1993.

吉原經太郎、「電子移動反応の動的側面」、量子反応制御研究会、筑波、1993年11月

K. YOSHIHARA, "Solvent and Nuclear Dynamics in Photoinduced Ultrafast Intermolecular Electron Transfer," US-Japan Cooperative Research Project on "Photoinduced Charge Transfer and Related Phenomena," Okazaki, December 1993.

K. YOSHIHARA, "Solvent and Nuclear Dynamics in Intermolecular Electron Transfer," Department of Chemistry, Inha university, Inchon, March 1994.

K. YOSHIHARA, "Solvent and Nuclear Dynamics in Intermolecular Electron Transfer," Korea Advanced Institute of Science and Technology, Taejon, March 1994.

K. YOSHIHARA, "Solvent and Nuclear Dynamics in Intermolecular Electron Transfer," Department of Chemistry, Chungbuk National University, Cheongju, March 1994.

K. YOSHIHARA, "Solvent and Nuclear Dynamics in Intermolecular Electron Transfer," Department of Chemistry, Seoul National University, Seoul, March 1994.

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、吉原經太郎、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

レーザー学会功労表彰、吉原經太郎、1993年

DAIWA賞、吉原經太郎、富永圭介、熊崎茂一、G.Frey, S.R.Meech, A.J.Bell, 1994年

Ⅱ－6）学会及び社会的活動

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

光科学技術研究振興財団　審査委員　1991-現在

学会の組織委員

第5-9回超高速現象国際会議　プログラム委員　1986, 1988, 1990, 1992, 1994

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　1974-1975

第7回微粒子及び無機クラスクー国際会議　組織委員　1993-1994

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-現在

日韓基礎科学合同委員会専門委員会委員　1993-現在

日印科学協力事業コーディネーター　1993-現在

学術雑誌編集委員

「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

Journal of Physical Chemistry, Editorial Board Member　1993-現在

Trends in Chemical Physics, Editorial Advisory Board Member　1994-現在

科研費の班長、研究代表者等

特定研究「高効率光化学プロセス」班長　1986-1988

新ブログラム「人工制御機能性分子システムの研究」班長　1991-現在

Ⅱ－7）　他大学での講義

広島大学大学院（理学部化学科）　1993年５月

京都大学理学部化学科　1993年11月

東北大学理学部化学科　1994年２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った。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。高次非線形分光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ろものと期待され、５次及び７次の非線形分光法を開発している。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行きたい。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。ポリエンの反応遷移状態の量子化を実験的に観測したので、さらにこの詳細を調べて行きたい。紫外フェムト秒分光法を開発し、コヒーレントに励起された簡単な分子の溶液内反応初期過程を研究する。

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クス

b） メタンの活性化

c） 金属表面上での酸素の反応性

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。しかし、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。本年度は特に、半導体表面としてSi（100）の清浄表面を用い、吸着種としてはN_2Oに注目して研究を行った。昇温脱離やX線光電子分光の測定により、この表面上ではN_2Oの２つの吸着状態があることを明らかにした。また、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、光解離のダイナミクスが吸着状態や吸着種の配向に大きく依存することを明らかにした。

b） メタンの活性化

メタンは豊富に存在する天然資源であるが極めて反応性に乏しい。従って、これを活性化し、より有用な物質に変換することが望まれている。本研究では金属表面上での表面光化学によりメタンを活性化することを試みた。その結果、Pt（111）面上に吸着したメタンに193nmの紫外光を照射することによって、メタンが光解離し、表面上にメチルラジカルと水素原子が生成されることを確認した。これは、よく規定された固体表面上でメタンが本来吸収帯の無い紫外域で分解することを初めて示した研究と考えられる。気相中のメタンの光解離には真空紫外光を用いなければならないのに比べて、本研究では既に商業的に利用できるエキシマーレーザーによって効率よくメタンが解離することを示すことができ、その意義は大きいと考えられる。

c） 金属表面上での酸素の反応性

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の反応機構についての研究を行った。特に、本年度は高分解反射赤外吸収分光によってその反応機構に関する知見を得た。その結果、交換反応には分子状、ならびに、原子状酸素が関与する異なる反応機構が存在することを明らかにした。

Ⅱ－1） 学術論文

K. SAWABE and Y. MATSUMOTO, "Oxygen-Exchange Reacition between O_2 and NO Coadsorbed on a Pt(111) Surface: Reactivity of Molecularly Adsorbed Oxygen", *Surf. Sci.* 303, L385(1994).

Y. A. GRUZDKOV, K. WATANABE, K. SAWABE, and Y. MATSUMOTO, "Photochemical C-H Bond Activation of Methane on a Pt(111) Surface", *Chem. Phys. Lett,* 227, 243(1994).

Y. OHSHIMA, Y. MATSUMOTO, M. TAKAMI, and K. KUCHITSU, "Free-Jet Infrared Absorption Spectroscopy of the C_2H_2-Ar Complex in the Doubly Degenerate Monomer C-H bending Region", *J. Chem. Phys.* 99, 8385(1993).

II－2) 国際会議のプロシーディングス

Y. MATSUMOTO, J. LEE, H. KATO, and K. SAWABE, "Dynamics of Photochemical Processes of N_2O Adsorbed on Metal and Semiconductor Surfaces", in "Laser Techniques for Surface Science", Eds, H.-L. Dai and S. J. Sibner, *Proceedings of SPIE-The International Society for Optical Engeneering*(1994).

II－3) 総説・著書

M. TAKAMI, Y. OHSHIMA, and Y. MATSUMOTO, "Free Jet Infrared Spectroscopy of Weakly Bound Complexes", in *Dynamics of Excited Molecules*, Ed. K. Kuchitsu, Chap. 3, pp. 55－95(1994).

II－4) 招待講演

Y. MATSUMOTO, J. LEE, H. KATO, and K. SAWABE, "Dynamics of Photochemical Processes of N_2O Adsorbed on Metal and Semiconductor Surfaces", SPIE Conference on "Laser Techniques for Surface Science", Los Angeles（米国）1994年1月

松本吉泰、「固体表面上でのレーザー誘起反応ダイナミクス」、日本物理学会、岡山、1993年10月

松本吉泰、「固体表面吸着分子の構造とダイナミックス」、応用物理学会関西支部拡大表面物理セミナー、神戸、1994年1月

松本吉泰、「固体表面の光化学」、日本化学会、東京、1994年3月

松本吉泰、「金属・半導体表面での吸着分子の構造と光解離ダイナミクス」、田丸コンファレンス、裾野、1994年6月

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 1993-1994

学会の組織委員

第1回日米分子科学若手ワークショップ　組織代表者　1991

第8回化学反応討論会　プログラム委員　1992

第51回岡崎コンファレンス　組織委員　1994

大阪大学50周年記念シンポジウム「固体表面動的過程」　組織委員　1994-現在

II-7) 他大学での講義

東京工業大学資源化学研究所、特別集中講義、1994年3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、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。また、白金表面上でのメタンの活性化についてはその初期励起過程が謎であり、これを明らかにすると共に、より励起波長の長波長化を試みる。

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ダイナミクス

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－π3重項励起状態からのHCOの生成過程を詳しく調べ、HCOの回転エネルギー、振動エネルギー分布を決定した。これら生成物の内部状態励起の機横について考察し、回転エネルギーについては、励起波長依存性がないことから、結合切断の際に生成物に働くトルクによって決まること、また、振動励起については、アセトアルデヒドの他にプロピオンアルデヒドについても調べた結果、反応障壁以上の余剰エネルギーの統計的分布によって決まることを明らかにした。また、生成物をモニターしつつ励起波長を掃引することによって、アセトアルデヒドとその３種のD化物について、n－π状態の振電構造を短波長にいたるまで決定し、励起状態におけるC=O伸縮振動の振動数を決定した。

b） ファンデルワールス錯体のダイナミクス

$N_2O \cdot H_2O$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LIF法により測定した。対応する２分子反応$O(^1D)+H_2O$では生成する２種のOHの振動回転分布が極端に異なるのに対し、錯体起源の反応ではほとんど差が見られないことがわかった。この結果にもとづいて、ファンデルワールス錯休の反応機構を論じた。また、アニソール・ベンゼンなどのファンデルワールス錯体に対しホール・バーニング、SEP（Stimulated-Emission-Pumping）などの手法を適用し、分子間振動モードの観測や振動励起ファンデルワールス錯体のダイナミクスについて研究した。

c） 自己秩序形成の光応答

われわれの提案した、振動化学反応系の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・スペクトルを測定することによって決定する方法をBZ（ベルーゾフ・ジャボチンスキー）系、minimal・bromate・oscillatorなどの系に適用し、光強度を外部パラメーターとして相図を決定することによって、分岐構造について詳細な検討を加えた。この結果、光照射は条件によって、化学振動の誘起と抑止の双方向の働きをしうる、という興味深い事実をみいだした。また、光応答を示す新しい振動反応系として、H_2O_2–HSO_3^-–$Fe(CN)_6^{4-}$系や、ClO_3^- – I^--マロン酸の系の光応答について調べた。また、逆ミセル系におけるBZ系の挙動を調べ、ミセル間の相互作用にもとづく新しい分岐構造を見いだした。

Ⅱ－1） 学術論文

M. TAKAYANAGI and I. HANAZAKI, "Stimulated-emission-pumping Laser-induced-fluorescence Spectroscopy of Phenol and Anisole." *Laser Chemistry,* 14, 103(1994)

J. GORECKI and I. HANAZAKI, "A Simple Phenomenological Model for Nonequilibrium Interaction Between Two Reactions in a Lorentz Gas.", *Chem. Phys.*, 181, 39(1994).

Y. MORI, Y. NAKAMICHI, T. SEKIGUCHI, N. OKAZAKI, T. MATSUMURA, and I. HANAZAKI, "Photo-induction of Chemical Oscillation in the Beluosov-Zhabotinsky Reaction under the Flow Condition.", *Chem. Phys. Letters*, 211, 421(1993).

T. KONO, M. TAKAYANAGI, and I. HANAZAKI, "Rotational Excitation of HCO Produced by the Photodissociation of Acetaldehyde.", *J. Phys. Chem.*, 97, 12793(1993).

T. GEJO, M. TAKAYANAGI, T. KONO, and I. HANAZAKI, "Hole Burning Spectrum of the Vinoxy Radical in the B(^{2}A") State in a Supersonic Free Jet.", *Chem. Letters*, 1993, 2065(1993).

G. RABAI and I. HANAZAKI, "Oscillatory Reaction in the System of Hydrogen Peroxide-Hydrogen Sulfite Ion-Hexacyanoferrate(II)Ion in a Semebatch Reactor.", *J. Phys. Chem.*, 98, 2592(1994).

I. HANAZAKI, "Fragment Rotational Excitation due to the Parent Rotational Motion in the Dissociation of Molecules.", *Chem. Phys. Letters*, 218, 151(1994).

T. GEJO, M. TAKAYANAGI, T. KONO, and I. HANAZAKI, "Photodissociation Dynamics of Acetaldehyde:Vibrational Energy Distribution in Photofragment HCO.", *Chem. Phys. Letters*, 218, 343(1994).

M. TAKAYANAGI and I. HANAZAKI, "Intermolecular Vibrations and Dynamics of the Anisole. Benzene Complex Studied by the Multi-resonance Spectroscopy." *Spectrochim. Acta*, 50A, 1435(1994).

T. SEKIGUCHI, Y. MORI, N. OKAZAKI, and I. HANAZAKI, "Photoinduction and Photoinhibition of Chemical Oscillations in the tris(2,2'−bipyridine)ruthenium(Ⅱ)−catalyzed Minimal Bromate Oscillator.", *Chem. Phys. Letters*, 219, 81(1994).

G. RABAI, "Explanation of the Long-Lived Osci11ations in the Chlorite Ion-Iodide Ion-Malonic Acid System", *J. Phys. Chem.*, 98, 5920(1994).

H. L. Kim, M. TAKAYANAGI and I. HANAZAKI, "Photochemistry of N_2O · H_2O Complexes Produced in Supersonic Jets. ", *Chem. Phys. Letters*, 222, 431(1994).

Ⅱ−2) 国際会議プロシーディングス

I. HANAZAKI, H.-L. KIM, and M. TAKAYANAGI, "Photochemistry of N_2O · H_2O Complexes Produced in Supersonic Jets.", *Laser Techniques for State-Selected and State-to-State Chemistry II, SPIE Proceedings*, 2124, 10(1994).

Ⅱ−3) 総説、著書

I. HANAZAKI, "Nonlinear Phenomena and Self-organization." *Kagaku*, June(1993)(in Japanese).

Ⅱ−4) 招待講演

I. HANAZAKI, "Photochemistry of N_2O/H_2O Complexes produced in Supersonic Jets" Laser techniques for State-Selected and State-to-State Chemistry II, SPIE Conference, Los Angels. (1994).

Ⅱ−6) 学会および社会的活動

学術審議会専門委員（1992-）

Ⅲ　研究活動の課題と展望

a)　光分解反応の機構――アセトアルデヒドなどのカルボニル化合物のn－π※励起状態からの光解離について、解離速度に対する項間交差と単分子的解離プロセスの相対的な寄与を明らかにする。

b)　ファンデルワールス錯体の光化学反応――$N_2O \cdot H_2O$錯体の光解離について、錯体の構造と反応の特異性、対応する２分子反応との違いを錯体反応におけるエネルギー分配にもとづいてあきらかにする。また、ハロゲン化水素と水あるいはN_2Oの錯体についても測定をおこなう。

c)　自己秩序形成系の光応答――前年度にひきつづき、光照射に関する系の応答を種々の振動化学反応系について調べ、どのような初期反応が重要か、また、分岐を直接決めているのがどのような化学種かを決定する。また、振動反応系同志の相互作用、および、振動化学反応系のパルス光に対する応答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） レーザー分光や画像観測を利用した新しい化学反応実験の開発

b） 光分解および分子衝突の動力学

c） 大気、星間化学の反応素過程

Ⅰ－3） 研究活動の概略と主な成果

a） 化学反応により生成する分子の量子状態分布は、反応過渡領域のダイナミクスを反映する。このため、化学反応実験の課題は、生成分子の電子、振動、回転あるいは散乱（並進）状態を完全に測定することにあった。本研究では、共鳴多光子イオン化法と二次元画像観測法を用いて、化学反応生成分子の散乱（３次元）分布を、量子状態選択的に撮像する装置を開発した。これにより、生成分子の電子、振動、回転、並進状態（速度ベクトル）が完全同時決定できるようになった。さらに、散乱分布を直接断層撮影する方法として、レーザーシートイオン化断層撮影法を開発した。

b） アセチレンA状態からの前期解離によって生成する水素原子を共鳴多光子イオン化法によって検出し、解離の閾値、解離エネルギー、振動回転状態依存性を求めた。また、NO_2の光解離によって、生成するNO分子と酸素原子の画像観測を行い、NO分子の回転ベクトルが空間に対して偏向する様子を観測した。

c） クロロエチレン、SO_2等の大気化学関連分子の紫外光分解を行い、生成する塩素、酸素原子の散乱状態を画像観測し、生成原子の反応活性度、反応生成する原子、分子の相関を求めた。エネルギー差の小さな原子のスピン軌道状態について、顕著な散乱状態の差異が観測された。

Ⅱ－1） 学術論文

K. TONOKURA and T. SUZUKI, "Slicing Photofragment Spatial Distribution by Laser Sheet Ionization", *Chem. Phys. Lett.* 224, 1(1994).

T. SUZUKI, K. TONOKURA, L.S. BONTUYAN, and N. HASHIMOTO "Photodissociation of trans-Dichloroethylene: State-Resolved Speed and Angular Distributions of Cl Atoms", *J.Phys. Chem.* 98, 13447(1994).

Ⅱ－4） 招待講演

T. SUZUKI, "Photodissociation of Chloroethylenes Studied by the Mesurement of State-Resolved Differential Cross Sections of Chlorine Atoms", Workshop on Imaging Methods in Molecular Structure and Dynamics, Neve Ilan（イスラエル）1994年６月

鈴木俊法、「状態選択微分断面積の測定による化学反応の研究」物理化学セミナー、京都、1994年６月

鈴木俊法、「画像観測法による化学反応の研究」分光学会九州支部若手セミナー、九重、1994年７月

Ⅱ－5） 受賞、麦彰

鈴木俊法、分子科学奨励森野基金、平成五年度

鈴木俊法、日本化学会進歩賞、平成六年度

Ⅲ　研究活動の課題と展望

現時点における気相反応の知識では、オゾン層破壊機構の65%程度しか説明できない。このことに象徴されるように、大気、星間化学の解明には、多原子分子を含む気相反応素過程の徹底的な研究が強く求められる。これらは反応動力学の問題としても極めて重要かつ挑戦的な研究課題であり、レーザー分光法に基づく新しい手段を導入して集中的に研究を進める。真空紫外レーザー、画像観測装置、交差分子線装置を用いた新しい反応実験を開発し、酸素や塩素原子あるいはフリーラジカルの反応について状態選択微分断面積レベルでの研究を行う。量子状態の相関を中心に、多原子系の反応ダイナミクスを研究する。

小　林　敬　道　（助手）

Ⅰ－1）　専門領域：分子分光学

Ⅰ－2）　研究課題

a）　気相分子の輻射過程におよぼす外部磁場効果

b）　気相光解離反応におよぼす外部磁場効果

Ⅰ－3）　研究活動の概略と成果

a）　2，3原子分子の発光励起スペクトルにおよぼす外部磁場効果を観測する。新たにBr_2および$IBrのB^3\Pi_0$+状態からの発光に対する磁場消光が観測された。Br_2の磁場消光には回転依存性があり寿命の回転依存性と対応している。このことから磁場消光と無輻射遷移の関わり合いについての知見が得られる。

b）　これまでに観測されている磁場消光の多くは、磁場摂動による発光レベルから隣接する解離状態への遷移として解釈されているが、実際に解離成生物を捕え、磁場消光に対応する結果が得られるかを示した例はない。これは気相外部磁場効果の機構を理解する上で重要である。また、解離成生物が2種類以上存在する場合、その分岐比に磁場効果が期待されるので、その実験も計画している。

II-1）学術論文

K. Kanda, K. Suzuki, T. Kondow, H. Ito, and K. Kuchitsu, "Production of CN($B^3\Sigma^+$)Radicals in the Dissociative Excitation of BrCN and ICN by Metastable Ar and Kr Atoms in a Flowing Afterglow", *Bull. Chem. Soc. Jpn*. 67, 93(1994).

H. Yasumatsu. T. Kondow, K. Suzuki, K. Tabayashi, and K. Shobatake, "Absorption Spectra of Alkali Cyanide Molecules in the Vacuum Ultra Violet Region: Transitions to Dissociative and Predossociative States", *J. Phys. Chem*. 98, 1407(1994).

Ⅲ　研究活動の課題と展望

気相外部磁場効果の体系的理解のためには、電子状態の比較的よくわかっている小さな分子について、その磁場効果を系統的に調べることが必要である。しかしながら2，3三原子分子では磁場効果を示す例が少なく、より多くのデータを蓄積しなければならない。また、これまで気相磁場効果の研究は発光の磁場消光を観測する方法で専ら行われてきたが、オゾンのように光解離成生物が2種類以上ある場合、その分岐比に及ぼす磁場効果が観測されれば、気相磁場効果に対する新たな情報がえられるものと期待される。

3−4 分子集団研究系

物性化学研究部門

藥師久彌 (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) 選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、遷移金屑に局在するd電子スピンが遍歴する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。またいくつかのフタロシアニンのラジカル塩において0.5 GPa−1GPa以上の高圧力下で中央の選移金属の作るd−バンドから配位子の作るπ−バンドへの電荷移動が起こること発見した。これは有機導体では困難な電流担体の濃度制御を圧力によって可能にすることを意味している。

b) 新しい導電性有機物の探索

BDNTを電子供与体とする電荷移動塩の系統的な研究を分子研山下敬郎助教設と共同で進めている。ねらいは2価の陽イオンが安定な事を利用して、分子内で電子間引力を生ずる分子性固体の探査である。BDNT−$(PF_6)_x$(x=0,<1, 1, 2)のように様々な価数を持つBDNTのラジカル塩を見出した。現在これらの物質の電子構造に関する基礎データを集積しつつ、新しい物質探索を行っている。

c) C_{60}およびその関連物質の固体物性

昨年度我々のグループで発見した$Na_4N_xC_{60}$の試料作成法の改良を行い、コヒーレンス長、磁場侵入長等の超伝導特性を明らかにした。

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、反射率測定のための装置を製作していたが本年度完成した。1 mm程度の試料を用いて20−700cm^{-1}, 5-300Kの偏光反射率を高いSN比で測定できる世界にも数少ない装置である。

Ⅱ−1) 学術論文

L. S. GRIGORYAN, K. YAKUSHI, A. V. NARLIKAR, P. K. DUTTA, and S. B. SAMANTHA, "Modification of Normal-State Superconducting Properties of High-Tc Oxides via Treatment by Metal-Phtalocyanines", *Int. J. Modern Phys. B*8, 615(1993).

L. GRIGORYAN, K. YAKUSHI, C.-J. LIU, S. TAKANO, M. WAKATA, and H. YAMAUCHI, "Evolution of Optical Absorption and Superconductivity in Bi-2212 and 2223 Oxides Intercalated by Meta1-Phthalocyanines:A Systematical Study as a Function of Intercalation Level", *Physica C*218, 153(1993).

L. S, GRIGORYAN and K. YAKUSH1, "Role of double Bi-O Layers in Flux Pinning Properties of Bi-Oxides", *Physica C*219, 74(1994).

L. GRIGORYAN, K. YAKUSHI, A. V. NARLIKAR, and S. B. SAMANTHA, "Contribution of Interblock Coupling to *Tc* in High-Tc Bi-Oxides". *Modern Physics Letters B*8, 251(1994).

H. YAMAKODO, T. IDA, A. UGAWA, K. YAKUSHI, K. AWAGA, Y. MARUYAMA, K. IMAEDA, and H. IINOKUCHI, "Structure and solid state properties of stable ring-oxidized conductor $CoPc(AsF_6)_{0.5}$: Interaction between ring π-electrons and cobalt d-electrons", *Synthetic Metals* 62, 169(1994).

I. I. KHAIRULLIN, I. SHIROTANI, and K, YAKUSHI, "X-and Q-band ESR Study of new Poly-CuPc Compounds synthesized under high Pressure: The Possibility of Two-dimensional Sheet Polymers", *Synthetic Metals* 64, 217(1994).

T. ENOKI, Y. OHTSU, K. SUZUKI, K. IMAEDA, A. A. ZAKHIDOV, K. YAKUSHI, K. KIKUCHI, S. SUZUKI, and Y. ACHIBA, "Hydrogen Uptake Effects on Structures and Solid State Properties in K_3C_{60}", *Synthetic Metals* 64, 329(1994).

S. UJI, H. AOKI, M. TOKUMOTO, A. UGAWA, and K. YAKUSHI, "Fermi Surface and Magnetoresistance in β"-$(BEDT\text{-}TTF)_2AuBr_2$", *Physica B* 194–196, 1307(1994).

Ⅱ－2) 国際会議プロシーディングス

S, UJI, H. AOKI, M. TOKUMOTO, A. UGAWA, and K. YAKUSHI, "Fermi Surface and Magnetoresistance in an Organic Metal β"$-(BEDT-TTF)_2AuBr_2$", *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 328, 337(1994).

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）

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。展望としては、(1)については磁性金属を含むフタロシアニンのラジカル塩は磁性と伝導性の共存という重い電子系や酸化物超伝導体と共通の問題もつ新しい分子性物質としての位置づけられる。さらに高圧下での分子内電荷移動は従来の分子性物質見られない新しい現象である。困難な実験をともなうが、高圧下の構造・磁性・伝導性の観点からの研究を推進したい。(2)は全く新しい構想

に基づくもので、現在はその探査の途上にある。この一年間で、様々な価数をもつこの物質の基礎データを集積することができたので、ここ数年はこの物質を追い続けたいと考えている。

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

a）　有機伝導体の電子状態:金属—非金属転移の研究

b）　π－d電子系における金属—絶縁体転移の研究

c）　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

a）　一連の有機伝導体κ－(BEDT－TTF)$_2$Xの電子状態を^{1}H－NMRと^{13}C－NMRにより調べた結果。絶縁体となるX=Cu[N(CN)$_2$]Clも超伝導体となるX=Cu(NCS)$_2$，Cu[N(CN)$_2$]Brも50K以上では同じ様な強い反強磁性スピン揺らぎを示すことが明らかになった。前者の塩では、そのスピン揺らぎがさらに成長し26Kで反強磁性転移するのに対し、後者２つの塩ではその揺らぎが50K以下で押さえられることから、このスピン揺らぎの抑制が、金属そして超伝導の出現に深く関係することが分かった。

α－(BEDT－TTF)$_2$MHg(SCN)$_4$[X=K,Rb]で問題となっている低温金属状態の異常について、状態密度がかなり減少することが比熱と^{13}C－NMRの測定により明らかになり、その機構は通常のスピン密度波転移としては考えられないことが分かった。

b）　有機金属錯体(DMe－DCNQI)$_2$Cuのメチル基重水素置換体の電子状態をシアン位置の^{13}C－NMRにより調べた結果、低温まで安定な金属相と絶縁相に隣接するリエントラント金属相に達いは認められず、絶縁相で現れる強い常磁性の前駆現象も現れなかった。この系での金属-絶縁体転移が強い一次転移であることを示すとともに、転移近傍で議論されている重い電子系の出現の可能性に否定的な結論を与えた。

c）　高い２次元性を示す物質α－(BEDT－TTF)$_2$NH$_4$Hg(SCN)$_4$の超伝導を電流-電圧特性の測定により調べた。試料依存性があるが、２次元超伝導に特有のコスタリッツ-サウレス転移の可能性を指摘した。電流-電圧特性と複素磁化率の同時測定から、この系は単純なジョセフソンモデルでは説明されないことが分かった。

II-2）　国際会議プロシーデイングス

T. NAKAMURA, T. NOBUTOKI, M. MIYAMOTO, Y. TSUBOKURA, K. TSUCHIYA, T. TAKAHASHI, K. KANODA, and G. SAITO, "Systematic Investigation of Electronic Structure in BEDT－TTF Based Organic Superconductors with T_c Above 10K; κ－(BEDT－TTF)$_2$X(X=Cu(NCS)$_2$, Cu[N(CN)$_2$]Br, and Cu(CN)[N(CN)$_2$])", *J. Supercond.* 7, 671(1994).

Y. KOBAYASHI, T. NAKAMURA, T. TAKAHASHI, K. KANODA, B. HILTI, and J. S. ZAMBOUNIS, "Nuclear Relaxation in the Superconducting State of (MDT－TTF)$_2$AuI$_2$", *J. Supercond.* 7, 663(1994).

Ⅱ－7）　他大学での講義

名古屋大学理学部、固体化学、1994年４月－９月

Ⅲ　研究活動の課題と展望

有機物質の電子状態、特に金属－絶縁体転移と超伝導状態の出現を統一的に理解するために、より多くの物質について電子状態を調べると共に、新しい手段を導入する。すなわち、BEDT－TTF系は、今までκ相とHgを

含むα相の物質に絞って調べてきたが、測定をβ相等他の物質に拡張する。DCNQI系は、^{15}N−NMRにより、π電子とd電子の混成の効果を配位位置で調べる方法を確立する。

超伝導特性については、現在問題になっている試料依存性を根気強く調べその原因を追求すると共に、磁場中での電流電圧特性と磁化率の測定により、超伝導の2次元性と層間の弱結合性を明らかにしていく。

分子集団動力学部門

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、特に特異な構造をもつ分子性固体に注目し、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、又それを用いて非線形光学定数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も成功したことなどがあげられる。

b） C_{60}を中心とするフラーレン固体の物性

C_{60}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、C_{60}単結晶中の電荷移動度を初めて測定したこと、初めて単結晶を用いて導電性からC_{60}アルカリ金属化合物の金属性、超伝導性を明らかにし、その電子構造についての重要な知見を得たこと、及び、C_{60}(TDAE)錯体の強磁性的振舞を明らかにしたことなどである。

c） 走査プローブ顕微鏡法によるミ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、薄膜や結晶のミ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伝導体の研究

サリチリデンアニリン類をモデル系としてプロトン－電子相互作用によってその伝導性が制御されるような新しい有機伝導体を開発するための基礎研究をおこなってきた。

Ⅰ－1） 学術論文

T. SUZUKI, Y. MARUYAMA, T. KATO, K. KIKUCHI, and Y. ACHIBA, "Electrochemical Properties of La@C_{82}", *J. Am. Chem. Soc.* 115, 1106(1993).

T. SUZUKI, Y. MARUYAMA, T. AKASAKA, W. ANDO, K. KOBAYASHI, and S. NAGASE, "Redox Properties of Organofullerenes", *J. Am. Chem. Soc.* 116, 1359(1994).

S. YOSHIDA, K. KOZAWA, Y. MARUYAMA, and T. UCHIDA, "Mobility of Charge Carries in Sublimed Films of Phenothiazine Derivatives", *Bull, Chem. Soc. Jpn.* 66, 3548(1993).

T. NAKAMURA, T. KOMATSU, G. SAITO, T. OSADA, S. KAGOSHIMA, N. MIURA, K. KATO, Y. MARUYAMA, and T. OSHIMA, "Physical Properties of κ－(BEDT=TTF)$_2$Cu(CN)[N(CN)$_2$]", *J. Phys. Soc. Jpn.* 62, 4373(1993).

S. L. FANG, K. KOHAMA, H. HOSHI, and Y. MARUyAMA, "Dependance of Off−Diagonal Components of $\chi^{(3)}$ on Substrate Temperature of Epitaxially Grown Vanadyl Phthalocyanine Films", *Jpn. J. Appl. Phys.* 32, L1418(1993).

S. L. FANG, K. KOHAMA, H. HOSHI, and Y. MARUYAMA, "Epitaxial Growth of Chloralminium Phthalocyanine and Vanadyl Phthalocyanine Double-Layer Structure by the Molecular Beam Epitaxy", *Synth. Met.* 64, 167(1994).

E. FRANKEVICH, Y. MARUYAMA, H. OGATA, Y. ACHIBA, and K. KIKUCHI, "Mobilities of Charge Carriers in C_{60} Orthorhombic Single Crystal", *Solid State Commun.* 88, 177(1993).

E. FRANKEVICH, Y. MARUYAMA, and H. OGATA, "Mobility of Charge Carriers in Vapor Phase Grown C_{60} Single Crystal", *Chem. Phys. Lett.* 214, 39(1993).

H. OGATA, Y. MARUYAMA, T. INABE, Y. ACHIBA, S. SUZUKI, K. KIKUCHI, and I. IKEMOTO, "Electrical Transport Properties of C_{60} Single Crysta1s Doped with Alkali Metals", *Modern Phys. Lett.* B7, 1173(1993).

H. OGATA and Y. MARUYAMA, "Tankessho(SingleCrystals)", *Ohyohbutsuri,* 62, 1036(1993).

A. SUZUKI, T. SUZUKI, R. J. WHITEHEAD, and Y. MARUYAMA, "Evidence of Spontaneous Magnetic Order in the C_{60} Complex with Tetrakis(dimethylamino)ethylene(TDAE)", *Chem. Phys. Lett.* 223, 517(1994).

T. INABE, I. LUNEAU, T. MITANI, Y. MARUYAMA and S. TAKEDA, "*N*-(2-Hydroxy=1=naphthylmethylene)-10phenylenediamine and *N*, *N*-Bis(2-hydroxy-1-naphthylmenthylene)-p-phenylenedimine Crystals", *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 67, 612(1994).

II−4) 招待講演

Y. Maruyama, "Studies of Electrical Transport in C_{60} and Alkali Metal Doped-C_{60} Single Crystals", Sinposium on Phonons and Superconductivity in Fullerenes Solids, Lexington, Kentucky(USA), June 1993.

Y. Maruyama, "Charge Carrier Transport in C_{60} and Alkali Metal Doped C_{60} Single Crystals", U. S.-Japan Seminar on Physics and Chemistry of C_{60} and Related Compounds, Waikiki, Hawaii(USA), July 1993.

Y. Maruyama, "Material Chemistry-A trend for intelligent molecular systems", Anglo-Japanese N+N Meeting Cosener's, House(UK), Oct. 1993.

丸山有成, "分子線エピタキシャル蒸着法によるフタロシアニン薄膜の構造と物性"、東大物性研短期研究会、東京、 1月 1994年

II-6) 学会および社会的活動

学協会役員

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

US−Japan Joint Seminar（ハワイ、1993）日本側責任者。

第48回岡崎コンファレンス（岡崎、1994年）世話人

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　(1991-1994年)

学会誌編集委員

日本化学会　欧文誌編集委員

日本化学会　速報誌編集委員

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ろう。

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

a） 液晶の相転移とダイナミクス

b） 固体における分子運動と電子状態

c） グラファイト等炭素化合物の電子物性

Ⅰ－3） 研究活動の概略と成果

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関して昨年は、^{1}H及び^{2}H−NMRの実験をもとに、スメクティックAd液晶において反強誘電的分子相関が実在すること、リエントラントネマティック（RN）相において分子内のセグメント秩序度が異常な増大を示すこと等を明らかにし、競合する相互作用によって生じる*frustrated disordered state*としてのRN相の実体を解明する事ができた。また一方で、ヘキサティック相、ディスコティックカラムナー相などにおける部分秩序構造とダイナミクスの解明に努めた。

b） 固体における分子運動と電子状態

固体における分子運動が電子状態を著しく変調する物質系をめざして、バンドギャップの小さな半導体（あるいは半金属）と電荷供与性有機分子との反応により、新しい金属性層間化合物を合成し、その物性を検討した。

c） グラファイト等炭素化合物の電子物性

グラファイト及びフラーレン類が他の元素とのあいだに作る新しい物質を求めて、物質開発と物性研究に取り組んだ。昨年度は特に、C_{70}－アルカリ金属化合物の輸送特性を系統的に調べた。

Ⅱ－1） 学術論文

S. MIYAJIMA, A. NAKAZATO, N. SAKODA, and T. CHIBA, "Liquid Crystals of 4−Octyloxy−*N*−(benzylidene)aniline Derivatives Bearing Trifluoromethyl or Trifluoromethoxy End Groups", *Liq. Cryst.*, 18, 557 (1995).

Ⅱ－2） 国際会議のプロシーディングズ

S. MIYAJIMA, "Melting of One-Dimensional Lattice on Lowering the Temperature in a Polar Liquid Crystal CBOBP", Magnetic Resonance and Related Phenomena Vol. 2, pp. 631, ed. K. M. Salikhov, 1994, Zavoisky Physical-Tachnical Institute of the Russian Academy of Sciences, Kazan.

Ⅱ－3） 総説、著書

H. OGATA, Y. MARUYAMA, T. INABE, Y. ACHIBA, S. SUZUKI, K. KIKUCHI, and I. IKEMOTO, "Electrical Transport Properties of C_{60} Single Crystals Doped with Alkali Metals", *Mod. Phys. Lett.* B7, 1173(1993).

緒方啓典、丸山有成、「単結晶」応用物理　第62巻　1036頁（1993）

Ⅱ－4） 招待講演

緒方啓典、宮島清一、丸山有成、稲辺保、菊池耕一、鈴木信三、池本勲、阿知波洋二「アルカリ金属をドープしたC_{60}固体の輸送特性」1993高分子討論会（1993年９月東京）

宮島清一「リエントラント液晶におけるダイナミック構造」有機結晶のダイナミック構造の解析 研究会（1993年12月 東京）

宮島清一「固体における電荷移動相互作用とNMR」日本化学会第65回春季年会（1994年３月 東京）

Ⅱ－6） 学会及び社会的活動

宮島清一　日本物理学会 分子性結晶、液晶、有機半導体分科　世話人（1987-88）

宮島清一　第20回液晶討論会実行委員（1993-94）

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運用すること、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。実験装置の面では昨年来取り組んできた、回転できる４極コイルを用いたパルス磁場勾配スピンエコーNMR装置が完成に近づいている。液晶物性としては、今後は金属錯体に起因する分子間軸性相互作用、キラルな分子間の相互作用などが演じる多様な物性を解明したいと考えている。炭素化合物の電子物性の解明、及び、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引き続き進めていく。

正 畠 宏 祐 （教授）

Ⅰ－1） 専門領域：化学反応動力学、シンクロトロン放射光化学、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） 半導体表面のシンクロトロン放射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、XeF_2の真空紫外光励起反応によって極めて効率よく生成する電子励起分解片XeF*からの発光を各種蛍光分光法を用いて研究し、その機構を明らかにした。

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XeF_2またはCI_2によるSi表面とのエッチング反応の放射光励起による促進効果の機構解明のために、その脱離生成物を電子衝撃イオン化質量分析法を検出し、飛行時間法を用いてその速度分布を測定している。

c） 分子線法による固体表面反応動力学の研究

超高真空下で、速度の規定した原子・分子ビームと固体表面との衝突による非弾性散乱及び反応散乱過程を実験的に研究するための装置、すなわち分子-固体表面衝突散乱解析装置が完成した。これを用いて、塩素分子ビームとSi表面との反応散乱によるエッチング反応生成物の散乱角及び速度分布を測定し、生成物の同定をした。また、グラファイトとXe原子との衝突散乱実験を行ない、Xe原子の並進エネルギーから固体表面の振動へのエネルギー移動について明らかにした。

Ⅱ－1） 学術論文

K. KONDO, T. FUJIMOTO, T. NI-IMI, and K. SHOBATAKE, "Molecular Beam Study of Materials for Vacuum Technology: II. Interaction of Gas Molecules with Stainless Steel Surface," *Trans. Jpn. Soc. Mech. Eng.* 59(No. 560)B, 1057(1993)

K. KONDO, T. FUJIMOTO, T. NI-IMI, and K. SHOBATAKE, "Molecular Beam Study of Materials for Vacuum Technology: II. Improvement of Surface Characteristics by Ag Ion−Plating, " *Tran. Jpn. Soc. Mech. Eng.*, 59(No. 562)B, 1946(1993)

T. FUJIMOTO, T. NI-IM1, K. SHOBATAKE, and K. KONDO, "A Scattering Experiment of Molecular Beams for Estimation of the Adsortion Probability" *Vacuum*, 44, 429(1993).

K. KANDA, S. KATSUMATA, T. NAGATA, Y. OZEKI, T, KONDOW, K. KUCHITSU, A. HIRAYA, and K. SHOBATAKE, "Photodissociation of BrCN in the Vacuum Ultraviolet Region," *Chem. Phys.* 175, 399(1993)

D.-C. CHE, T. KASAI, H. OHYAMA, K. KUWATA, K. TABAYASHI, and K. SHOBATAKE; "Fluorescence Excitation Spectra and Quantum Yield in Vacuum Ultraviolet Photodissociation of CF_3CN"*Chem. Lett.* 1994, 133. (1994).

H. YASUMATU, T. KONDOU, K. SUZUKI, K. TABAYASHI, and K. SHOBATAKE, "Absorption Spectra of Alkali Cyanide Vapor," *J. Phys. Chem.* 98, 1407(1994).

H. YOSHIKAWA and K. SHOBATAKE, "Velocity Distributions of Nascent SiCln (η =2, 3, and 4) Products Formed from the Reaction of Si(111)a with Cl_2 Beam," *Chem. Phys. Lett.* 223, 341(1994)

II－3) 総説、著書

正畠宏祐、「分子線」実験化学講座、第4版、No.8, 分光 III,
日本化学編 (丸善、東京、1993), pp.107-130.

II-6) 学会および社会活動

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	編集会員	(1991-1992)

III 研究活動の課題と展望

シンクロトロン放射光源を用いた分子間化合物・分子クラスターの真空紫外光化学の研究を完成させたい。成功裏に完成した超高真空下で作動する分子線—固体表面反応装置を用いて、表面から脱離した分子の速度及び角度分布を測定する。超熱分子の衝突による固体表面原子や吸着分子との反応の促進の研究を行う。

3−5　相関領域研究系

相関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）　プロトン一電子連動系の開発

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成功した．また，電気化学的に高度な両性的性質を示す両性多段階レドックス系も開発した．対称中心を持つDDQの電荷移動錯体の開発も行っている．

b）　興味ある磁気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の設計・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力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ン，拡張共役型キンヒドロン，ヘテロ還キンヒドロン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，研究譲題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．例えば，エチレンジアミノグリオキシム，ビイミダゾール，プテリジンなどを用いた特異な分子システムを開発中である．

Ⅱ−4）　招待講演

K. Nakasuji, "Proton-Electron Cooperative-Interacting Systems", Mini International Symposium on Solid State Organic Chemistry, Ehime, Japan, October, 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別審査委員（1990，1991年度）

有機合成化学協会東海支部代議員（1991，1992年度）

日本化学会近畿支部代議員（1994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）

有機化合物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

京都大学・理学部，化学科特別講義，1993年12月

岡山理科大学・理学部，特別講義，1994年５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物質を開発する研究を行っている.既存の設計指計の活用に留まらず，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る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術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）　有機金属カルコゲナイドクラスターの合成と反応に関する研究

c）　三級ホスフィン配位子を有する遷移金属錯体の合成と反応に関する研究

d）　ヘリカルキラリテイ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

ユニークな三重立方体型構造を持つ酸化物クラスター[$(RhCp^*)_4Mo_4O_{16}$]($Cp^*=\eta 5-C_5Me_5$)の骨格変換反応は、作用させる有機分子によって大きく影響を受ける。プロティックでしかもソフトなS原子を有するメルカプタン類を用いると金属イオンの再配列が起こり、直線型四核錯体[{$RhCp^*(\mu-SMe)_3Mo(O)_2$}$(\mu-O)$]に変換されることを見いだした。

b）　有機金属カルコゲナイドクラスターの合成と反応に関する研究

M$(\mu-XH)$M (X=S, Se)基が，特異な機能を有することが判明しつつある。今回、[$Rh_2Cp^*_2(\mu-CH_2)_2(\mu$-XH]$^+$を合成し、これを３電子酸化することによって$D_{2h}$の$X_4$ユニットをもつ珍しい四核クラスター[{$Rh_2Cp^*_2(\mu-CH_2)_2$}$_2(\mu-X_4)]^{2+}$を合成した。このうち$S_4$錯体は、$S_2O$基を持つ二核錯体[$Rh_2Cp^*_2(\mu-CH_2)_2S_2O$]に変換される。現在、これら錯体の生成機構を詳しく調べている。

c）　三級ホスフィン配位子を有する遷移金属錯体の合成と反応に関する研究

トリポッド型ホスフィン配位子である1, 1, 1,−tris(dimethylphosphinomethyl) ethane(tmpme)を用いて[$RhCl_3$(tmpme)]を合成し、これを出発物質にしてユニークな構造および結合を持つtmpme錯体を合成した。たとえば、$NaBH_4$との反応から二つの架橋ハイドライド、二つの末端ハイドライドを有する[{Rh(tmpme)H}$_2(\mu$-H)$_2$]$(BF_4)_2$を誘導し、X線結晶解析により構造を決定した。このハイドライド錯体と各種有機物との反応を展開している。

d）　ヘリカルキラリテイ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遷移金属ヘリケートを特異的に合成した。またラセミ混合物の配位子を用いた場合には、二核錯体が生成することが分かった。配位子の光学純度が、生成する化合物の固体構造を左右していることを見いだした。また現在ヘリケートの固体構造と溶液内で生成している化学種の構造との関連性を調べている。

Ⅱ－1）　学術論文

R. Xi, B. Wang, K. Isobe, T. Nishioka, K. Toriumi, and Y. Ozawa, "Isolation and X-ray Crystal Structure of a New Octamolybdate: [$RhCp^*)_2(\mu_2-SCH_3)_3]_4[Mo_8O_{26}]\cdot 2CH_3CN$ ($Cp^*=\eta^5-C_5Me_5$)", *Inorg. Chem.* 33, 833 (1994).

R. Xi, B. Wang, Y. Ozawa, M. Abe, and K. Isobe, "New Linear-Type Tetranuclear Complex, [{$RhCp^*(\mu-SCH_3)_3Mo(O)_2$}$_2(\mu-O)$] ($Cp^*=\eta^5-C_5Me_5$)", *Chem. Lett.* 323 (1994).

T. Nishioka, V. Yu. Kukushkin, K. Isobe, and A. Vazquez de Miquel, "A Tetranuclear Rhodium Complex with μ_4−S Ligand, $[\{Rh_2Cp^*_2(\mu_2-CH_2)_2\}_2(\mu_4-S)]^{2+}$ ($Cp^* = \eta^5-C_5Me_5$), Obtaind from Stepwise Abstraction of the SH^- Ligand from a Dinuclear Rhodium Dihydrosulfide Precursor by Ag^+", *Inorg. Chem.* 33, 2501 (1994).

R. Xi, B. Wang, M. Abe, Y. Ozawa, and K. Isobe, "Fragmentation of Triple Cubane-Framework in $[(Cp^*Rh)_4Mo_4O_{16}]$ ($Cp^* = \eta^5-C_5Me_5$) by CH_3SH into Tetranuclear Parts in $[\{Cp^*Rh(\mu-SCH_3)_3MoO\}_2(\mu-O)_2]$ and $[\{Cp^*Rh(\mu-SCH_3)_3MoO\}_2(\mu-O)(\mu-S)]$ Providing a Nove1 System for Studying Stereodynamics of Thiolate Complexes" *Chem. Lett.* 1177 (1994).

S. Ogo, T. Suzuki, Y. Ozawa and K. Isobe, "A Heterotrimetallic Sulfide Cluster Having a Linear $Rh^{III}...W^{VI}...Cu^I$ Framework of an Octahedral-Tetrahedral-Trigonal Planar Sequence", *Chem. Lett.* 1235 (1994).

J. T. Park, T. Nishioka, T. Suzuki, and K. Isobe, "Synthesis and Crystal Structure of $[(IrCp^*)_2(\mu-OH)_3]_2(Cr_2O_7) \cdot 8H_2O$ ($Cp^* = \eta^5-C_5Me_5$). A Novel Two-dimensional Hydrogen-bonding Network", *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 67, 1968 (1994).

Ⅱ−3) 総説、著書

磯邊　清、「錯体化学－基礎と最新の話題」第5章　錯体の反応性（pp106-131）
講談社サイエンティフィック
基礎錯体工学研究会篇

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"
May17−21, 1992, Tokyo

学会誌編集委員：

"Journal of Cluster Science" Editorial Board

Ⅲ　研究活動の課題と展望

当研究グループで合成した有機金属酸化物クラスターは、同一分子内に有機金属部分と酸化物部分を持っている。これら両方の特性を生かした反応の開発が待たれるところである。すでに特異な酸素原子交換反応、メタノールおよびオレフィンの酸化反応、有機金属基交換反応等、二、三のユニークな反応を見つけているが、今後クラスターの持つ多段階レドックス系を利用した水の酸化分解やCH_4のC−H結合活性化を目指したい。

一方、カルコゲナイドクラスクーの研究では、f長方形S_4およびSe_4ユニットを持つ極めて珍しい化合物を合成した。これらは理論化学的にも興味ある化合物で、電子状態および反応性の解明が待たれる。その他、ヘリカルキラリティーを持つ高分子錯体やトリポッド型三級ホスフィン錯体に関しては、構造化学的および有機合成化学的見地から研究を展開している。

*)　平成6年10月1日付で大阪市立大学理学部教授

有機構造活性研究部門（流動研究部門）

成　田　吉　徳*　（教授）

Ⅰ－1）　専門領域

有機化学、生物無機化学、物理有機化学

Ⅰ－2）　研究課題

a）　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

b）　光合成反応中心における水酸化分解酵素の機能モデルによる研究

c）　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

d）　チトクロームcオキシダーゼ活性中心モデルによる酵素反応機構の解明

e）　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

f）　炭素陽イオン中間体を経由するフォトソルボリシス機構の研究

g）　光誘起電子移動反応を利用した高エネルギー化合物の合成に開する研究

h）　光誘起電子移動反応を利用した不斉有機合成反応の構築に開する研究

Ⅰ－3）　研究活動の概略と成果

a）　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酵素活性化機構の研究

不斉酸化反応に適用し高度な分子認識能を有することが見いだされている両面に分子空隙をもつ‘twin-coronet’ポルフィリンをさらに修飾することにより、これまで合成の困難であったチオレート残基を一方のポケット内に有し、他方の酸素配位サイトには分極した配位酸素原子を水素結合により安定化するための水酸基を有するモデル錯体の合成に成功した。このモデル分子は現在まだ未解明の酸素分子の還元的活性化におけるプロトン供与機構の解明にも重要であると考えられる。

b）　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多種類合成し、これを触媒として陽極酸化により４電子酸化過程を経由して水からの酸素発生に成功した。各種の電気化学的手法により生成した酸素が水に由来していることを明らかとした。この反応における２個のマンガンイオン間の距離と酸化活性の間に大きな相関が見られ、触媒としての最適距離が見いだされた。

c）　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

過酸化水素の不均化による酸素発生に対して、マンガンポルフィリン二重体は極めて高活性を示すことを明らかにした。この反応活性のマンガン間距離位存性、および共存する窒素塩基の効果を明らかにし、この人工系がマンガンカタラーゼの機能モデルとして重要でありことを提唱した。

d）チトクロームc_3活性中心モデルの合成とその物理化学的特性の解明

細胞膜を通して電子伝達を行っている酵素チトクロームc_3は特異な４個のヘムの配置を有している。1,8-アントラセンなどの特定の分子間距離を有するスペーサー分子で結ばれた、鉄ポルフィリン二量体や三量体はイミダゾレート錯体を形成し、その金属間の比較的大きな反強磁性相互作用が見られることが明らかとなった。

e）　光合成系をモデルとするアニオンラジカル－金属イオン間の相互作用の研究光合成電荷分離末端に存在する鉄－キノン錯体の機能解明を目指して、カテコール鉄（Ⅲ）錯体結合キノンを合成してその還元電位の測定を

行なったところ、鉄錯体が近傍にある場合、キノンの還元電位は約150-180mV正にシフトし、生成するセミキノンラジカルのが安定化を受けていることが明かとなった。

以上のように構造が未確定の多くの天然の金属含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なっている。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なっている。

f) 炭素陽イオン中間体を生成するフォトソルボリシス機構の研究

フェニル転位、求核置換競争反応を示す2-クロロプロピオフェノンのフォトソルボリシスの反応機構をその生成物に対する置換基効果を検討し、光反応におけるフェニル転位、求核置換競争反応が、類似の熱反応とは全く逆の置換基効果を示すことを明らかにした。本結果は、フォトソルボリシスにおける炭素陽イオン生成反応過程においてベンゼン環から塩素原子への電子移動の重要性を示唆するものである。

g) 光誘起電子移動反応を利用した高エネルギー化合物の合成に開する研究

酸化還元活性の高い光誘起電子移動反応系の構築を目指した研究を行っている。ビオロゲンニ電子還元体がNd:YADレーザー3倍波（355nm）励起により光イオン化を起こし、ビオロゲン一電子還元体と溶媒和電子を与えることを初めて明かにした。さらに、ピレン存在下のフォトリシスにおいてはピレンアニオンラジカルが観測され、本光誘起電子移動反応を用いることにより-2.01eVの還元電位を有する有機化合物の還元反応が進行することを明かにした。

h) 光誘起電子移動反応を利用した不斉有機合成反応の構築に関する研究

長距離電子移動反応を利用した立体選択的不斉合成反応の構築を目指した研究を行っている。△－型の分子不斉を有するルテニウムトリスビピリジン錯体を増感剤として用いた光誘起電子移動反応により、1，1'-ビ-2-ナフトールの光配化分解を行ったところ、(S)−(−)型の軸不斉を有するビナフトールを優先的に、最高15.2%のエナンチオ選択性で酸化分解することを明かにした。本結果により、電子移動を利用した立体選択的酸化還元反応において、反応中間体である酸化還元対間の距離の制御をvanderWaals相互作用を通した分子認認により行うことで、高い立体選択性を発現可能であることが示された。

Ⅱ－1) 学術論文

Y. NARUTA, N. ISHIHARA, F. TANI, and K. MARUYAMA, "Asymmeteic Epoxidation of Simple Olefins by Chiral Bitetralin-Iinked "Twin-Corenet" Porphyrin Catalysts, *Bull. Chem. Soc, Jpn.* 66, 158(1993).

K. NAMANOUE, T. NAKAYAMA, H. NANSHOU, T. HAMADA, Y. NARUTA, T. KODO, and K.MARUYAMA, "Photoinduced Intramolecular Charge Separation in an Anthraquinone-linked all *cis*-α,α,α,α,-*meso*-tetra (2-aminophenyl)porphyrin Derivative Studied by Picosecond and Nanosecond Laser Spectroscopy", *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* 89, 3243(1993).

S. USUI, H. INOUE, H. ISHIDA, and K. OHKUBO, "Laser-Induced Photoionization of Two-Electron Viologen", *Chem. Lett.* 2089(1993)

T. HAMADA, H. ISHIDA, S. USUI, K. TUMURA, and K. OHKUBO, "Enantioselective and Photocatalytic Oxidation of 1, 1'-Bi-2-naphthol with a Chiral Ruthenium Complex which Includes Molecular Helicity" *J. Mol. Cat.* 88, L1(1994)

Ⅱ－3） 総説・著書

Y. NISHIGAICH, A. TAKUWA, Y. NARUTA, and K. MARUYAMA, "Versatile Roles of Lewis in the Reaction of Allytin Compounds", *Tetrahedron* (TetrahedronReport 337) 49, 7395－7426(1993).

成田吉徳（訳）「基礎有機化学」、R.J.Fessen,J.S.Fessenden　原著，化学同人（1993）.

Y. NARUTA, Asymmetric Oxidations with Chiral Porphyrin Catalysts, in Metalloporphyrins in Catalytic Oxidations, Ed. R. A. SHELDON, Chap. 9, Marcel Dekker, 1994, pp. 241－259.

成田吉徳、「光合成反応中心における酸素発生錯体の機能モデル」、現代錯体化学、基礎錯体工学研究会編、講談社サイエンティフイク（1994）pp.192-195.

Ⅱ－5） 受賞、表彰

倉田奨励賞、成田吉徳、昭和56年

日本化学会進歩賞、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）成田吉徳

近畿化学協会　合成部会幹事（1987－1993）成田吉徳

学会の組織委員

国際有機化学京都会議（IKCOC）実行委員（1987，1991）成田吉徳

日本化学会　年会プログラム委員（1989）成田吉徳

Ⅱ－7） 他大学での講義

京都大学理学研究科、集合有機分子機能特論、平成４年前期、成田吉徳

Ⅲ　研究活動の課題と展望

人工的な反応に見られない高度な制御と物質変換を行なっている天然の金属酵素の機能解明のためには、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、その反応を人工的に再現することが重要である。今後、モデル分子の構造を如何に設計し、柔軟に改変することにより目的とする反応の解明につなげるかが課題となる。分子動力学を用いて分子設計し、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のみならず、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。

光で誘起される化学反応においてはラジカル、イオンなどの活性中間体、特に熱反応では生成不可能な不安定中間体をも容易に生成可能であり、選択性の高い反応構築が可能である。今後は理論面からの反応予測、設計と同時に、レーザーフォトリシスなどの時間分解的手法を用いることにより、有機化学反応中間体のダイナミックスを直接観測することがより精密な展開を計る上で必要不可欠だと考えられる。

*）平成６年10月１日付で九州大学有機化学基礎研究センター教授

平成７年３月31日まで相関領域研究系有機構造活性研究部門教授を併任

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） 中性子捕捉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合窒素生理活性化合物への合成的応用

I-3） 研究活動の概略と主な成果

a） 中性子捕捉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

^{10}Bと^{1}n（熱中性子）の局所的核反応を利用して癌細胞致死を行なう原理に基づいた新しい癌治療法が，世界的にも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根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なってきている。

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を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，簡使で効果的な炭素一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なっていている。

Ⅱ－1） 学術論文

H. NEMOTO, "A New Alkenyl Ether Giving Acetal with Stereospecific Manner", *Tetrahedron Lett.* 50, 7855 (1994)

Y. YAMAMOTO, Y. KUBOTA, Y. HONDA, H. FUKUI, N. ASAO and H. NEMOTO, "Transition Metal Catalyzed Addition of Certain Nucleophiles to Imines", *J. Am. Chem. Soc.* 116, 3161(1994)

H. NEMOTO, J. CAI, and Y. YAMAMOTO, "Synthesis of a Water-soluble o-Carborane Bearing Uracil Moiety via Palladium Catalyzed Reaction under Essentially Neutral Condition", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 577(1994).

H. NEMOTO, Y. KUBOTA, and Y. YAMAMOTO, "Palladium Catalyzed Addition of Masked Formyl Cyanides ROCH(CN)$_2$ to Aldehydes", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1665(1994).

Ⅱ－3） 総説，著書

根本尚夫「中性子捕捉療法のためのホウ素キャリアーの合成と活性化イミンの研究」，有機合成化学協会誌，52巻，1044ページ，1994年

根本尚夫「高選択的単一物合成から秩序ある混合物合成へ」，化学，49巻，515ページ，1994年

Ⅱ－4） 招待講演

根本尚夫「中性子捕捉療法のためのホウ素キャリアーの合成と活性化イミンの研究」，
第12回有機合成化学夏期大学，岡山，1994年７月

Ⅱ－5） 受賞，表彰

平成４年度有機合成化学協会　研究企画賞（第一製薬），根本尚夫，1993年

平成５年度有機合成化学協会　奨励賞，根本尚夫，1994年

Ⅲ　研究活動の課題と展望

活性化イミンと$ROCH(CN)_2$の反応のさらなる最適化と光学活性体合成への応用などを行う。中性子捕捉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、単純明快で数字化できる「水溶性の度合」に深く関連している結果を得たのでその点をさらに推進する。

3−6 極端紫外光科学研究系

基礎光化学部門

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

a） 軟X線分光による内殻電子の光物性研究

b） 内殻励起分子の振動分光と解離ダイナミクスの研究

Ⅰ−3） 研究活動の概略と主な成果

a） 軟X線分光による内殻電子の光物性研究

酸化物超伝導体など銅化合物の銅2p内殻やニッケル化合物のニッケル2p内殻の光吸収スペクトルと共鳴光電子スペクトルを同時測定できる超高真空測定装置を開発した。

b） 内殻励起分子の振動分光と解離ダイナミクスの研究

内殻励起分子の振動準位まで分解できる高分解能内殻吸収スペクトルを直線3原子分子に対して測定し，Rydberg-原子価混合、Renner-Teller効果、振電相互作用による許容バンドなどを発見し，解離ダイナミクスとの関係を解明した。

Ⅱ-1） 学術論文

J. ADACHI and N. KOSUGI, "An *ab initio* molecular orbital approach to electronic structures of the F center in NaCl. Effects of basis set and cluster size", *Bull Chem. Soc. Jpn.* 66, 3314(1993).

T. MIZOKAWA, A. FUJIMORI, H. NAMATAME, K. AKEYAMA, and N. KOSUGI, "Electronic structure of the local-singlet insulator $NaCuO_2$", *Phys. Rev.* B49, 7193(1994).

A. YAGISHITA, E. SHIGEMASA, and N. KOSUGI, "Observation of Rydberg-valence mixing in high-resolution symmetry-resolved oxygen K-edge spectra of O_2", *Phys. Rev. Lett.* 72, 3961(1994)

S. YAGI, T. YOKOYAMA, Y. KITAJIMA, Y. TAKATA, T. KANAZAWA, A. IMANISHI, and T. OHTA, "Structural and electronic properties of molecularly adsorbed CS_2 on Cu(111)studied by X-ray absorption and photoelectron spectroscopies" *Surf. Sci.* 311, 172(1994).

T. YOKOYAMA, H. HAMAMATSU, Y. KITAJIMA, Y. TAKATA, S. YAGI, and T. OHTA, "Vibrational and anharmonic properties of the surface S-Ni bonds in c(2×2)S/Ni(100)and c(2×2)S/Ni(110)from the SEXAFS point of view", *Surf. Sci.* 313, 197(1994).

M. NAKAMURA, H. NAMATAME, A. FUJIMORI, M. SACCHI, J. C. FUGGLE, A. MISU, T. MAMORI, H. TAMURA, M. MATOBA, and S. ANZAI, "X-ray absorption study of the metal-nonmetal transition in NiS and $Ni_{1-x}M_xS$(M=Fe and Co)", *Jpn. J. Appl. Phys.* 32, 306(1993).

M. NAKAMURA, A. FUJIMORI, M. SACCHI, J. C. FUGGLE, A. MISU, T. MAMORI, H. TAMURA, M. MATOBA, and S. ANZAI, "X-ray absorption study of the metal-nonmetal transition in NiS induced by Fe and Co substitution", *Phys. Rev.* B 48, 16942(1993).

M. NAKAMURA, A. SEKIYAMA, H. NAMATAME, A, FUJIMORI, H. YOSHIHARA, T. OHTANI, A. MISU, and M. TAKANO, "Metal-semiconductor transition and Luttinger-liquid behavior in quasi-one-dimensional $BaVS_3$ studied by photoemission spectroscopy", *Phys. Rev.* B 49, 16191(1994).

Ⅱ－5) 受賞，表彰

分子科学研究奨励森野基金研究助成、1987年

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　評議員（1994－1995）

日本放射光学会　庶務幹事（1994）

日本分光学会、東海支部幹事（1993－）

学会の組織委員

アジア交流放射光国際フォーラム　実行委員（1994）

第７回Ｘ線吸収微細構造国際会議　プログラム委員、実行委員（1992）

シンクロトロン放射装置技術国際会議　国際諮問委員会委員（1994－）

文部省、学振等の委員会委員

新技術開発事業団創造科学技術推進事業　研究推進委員（1985－1990）

Ⅲ　研究活動の課題と展望

本研究グループでは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推進している。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本グループの特徴がある。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いくには，分光器，測定装置，データ解折，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。平成６年度は測定装置について中心になるものが準備できた。今後も未解決の課題に向けて計画を立てていきたい。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、外国も含めて各放射光施設との，情報交換や人的交流を図っていきたい。

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

a）　新しいVUV表面光反応系の探索

（1）Si表面VUV光反応系

（2）配向、配列を制御した分子凝集層でのVUV光反応系

b）　高感度FTIR技術の開拓と反応機構の解明

c）　FTIR用埋め込み金属層基板の開発と反応機構の解明

d）　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

e）　SR光反応用分光技術の開発

Ⅰ－3）　研究活動の概略と主な成果

a）　新しいVUV表面光反応系の探索

（1）Si表面VUV光反応系

放射光励起表面反応、特に内殻電子励起による表面反応を利用し、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と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。反応装置がほぼ完成した。シランなどの特定高圧ガスを使用できる環境整備を進めている。

（2）配向、配列を制御した分子凝集層でのVUV光反応

有機Al化合物の低温表面凝集層は、100Kから200K程度の温度範囲内で、温度により敏感に分子の配向や、凝集状態が変化し、この状態変化により光反応の結果が異なることを見いだした。今後、配向状態と光反応の関係を詳細に調べ反応機構、反応ダイナミックスを明らかにする。

b）　高感度FTIR技術と反応のその場観察技術の開拓

10^{-4}以下のS/Nで、エッチングやエピタキシャル反応をその場観察ができる測定系を製作する。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。測定系をほぼ完成し、S/N特性などを評価中。

c）　FTIR用埋め込み金属層基板の開発と反応機構の解明

a−Si/Al/Si(100)のBML基板を製作し、LB膜により測定感度を調べた結果、半導体表面では不可能であったIRAS測定が金属表面と同程度の高い感度で可能となることがわかった。現在、エピタキシャル単結晶SiのBML基板の製作技術の開発を進めている。

d）　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、特に内殻電子励起による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かにする。現在、装置の製作を進めている。

e) SR光反応用分光技術の開発

光反応研究を目的とした分光技術の開発に平成５年度に着手した。金属薄膜フィルター、多層膜ミラーなど広帯域分散素子による分光器の設計と、実際の反応系に適用した場合の性能評価のシュミレーションを進めている。

Ⅱ－1) 学術論文

H. AKAZAWA, Y. UTSUMI, T. URISU, and M. NAGASE, "Si Crystal Growth Mediated by Synchrotron-Radiation-Stimullated Hydrogen Desorption", *Phys. Rev,* B47, 946(1993).

Y. ZHANG, S. SATO, H. OHSHIMA, T. HATTORI, and T. URISU, "Buried Metal Layer Enhanced Infrared Reflection Absorption Spectroscopy for Photoreactions Induced by Synchroton Radiation on SiO_2 Surfaces", *Appl. Surf. Sci.* 79/80, 422(1994).

T. URISU, J. TAKAHASHI, Y. UTSUMI, T. AKUTSU, and K. KUCHITSU, "Synchrotron Radiation Assisted Si Epitaxial Growth Using Si_2H_6 and SiH_2Cl_2 Gases－Properties in the Low Temperature Region－", *J. Electrochem. Soci.* 141 1562(1994).

S. SATO, Y. UKISU, H. OGAWA, and Y. TAKASU, "Infrared Reflection Absorption Spectroscopy, X-ray Photoelectron Spectroscopy and Temperature-Programmed Desorption Study on the Adsorption and Decomposition of $Fe(CO)_5$ Over Silver Surfaces.", *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* 89, 4387(1993).

S. SATO, Y. UKISU, H. OGAWA, and Y. TAKASU, "Surface Intermediates Formed During Photolytic Decarbonilation of Iron Pentacarbonyl Adsorbed on Silver Surfaces", *Appl. Surf. Sci.* 79/80, 428(1994).

Ⅱ－2) 国際会議

Y. ZHANG, S. SATO, H. OHSHIMA, and T. URISU, "In Situ Monitoring Surface Photoreactions for VUV Synchrotron Radiation Processing of Semiconductor Materials Using Highly Sensitive Single Reflection FTIR Spectroscopy" 1st International Conference on Photo-Excited Processes and Applications, Sendai 1993.

Ⅱ－4) 招待講演

T. URISU, "In-situ Measurements on Synchrotron Radiation Induced Photo-chemical Reactions" Fourth International Symposium on Synchrotron Radiation－Frontier of Materials Science in Synchrotron Radiation－, Kobe, March 13 1994.

T. URISU, "The UVSOR Facility" Asian Forum on Synchrotron Radiation－Present Status and Future Prospects of Asian Synchrotron Radiation Facilities-Kobe, May 13 1994.

T. URISU, "SR-Excited Microprocessing of Semiconductors" Pre-Symposium to MicroProcess'94, Hsinchu, Taiwan, July 11, 1994.

T. URISU, "Buried Metal Layer Infrared Reflection Absorption Spectroscopy As an In-situ Observation Technique of the Surface Reaction", MicroProces'94, The 7th International MicroProcess Conference. Hsinchu, Taiwan, July 11－14, 1994.

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

宇理須恒雄　「固体表面光化学反応」第６回日本放射光学会年会特別企画「化学と放射光」（東京）、1993年５月

宇理須恒雄　「SORによる徴細加工プロセスの最近の展開」学振第145回委員会、
第151回委員会合同研究会（大阪・千里中央）、1993年10月
宇理須恒雄　「放射光励起表面反応プロセスと反応機構」小形放射光装置利用研究セミナー
（京都・立命館大学）、1994年２月
宇理須恒雄　「SORプロセスとレーザプロセス」第141回応用物理学関係連合講演会シンポジウム
「最先端イオン・レーザプロセスの新展開：材料創成と徴細加工」（川崎・明治大学理工学部）、1994年３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（1983～1985）

放射光学会評議員（1993～1994）

電気学会、放射光励起プロセス技術調査専門委員会幹事（1992～1994）

大型放射光施設安全性検討委員会委員（1993～1994）

学会の組織委員

第５～８回マイクロプロセス国際会議論文委員（1992～1994）

第１回光励起プロセスと応用国際会議論文委員（1993）

第１回VUV－11組織委員会、プログラム委員会委員（1993～）

学会誌編集委員　JJAP特集論文特別編集委員（1992～1993）

Ⅲ　　研究活動の課題と展望

Si表面の反応と有機Al化合物の低温凝集層の反応の２種類の反応系について研究を進めている。前者は、半導体プロセスにおいて重要な反応について反応素過程を明らかにする方針である。特に反応の基板材料依存性や、電子イオンコインシデンスなどを調べることにより基板の内殻電子励起の影響に興味がある。後者については、弱い分子間相互作用の存在する状態での光反応という、これまで、あまり調べられていない系を調べる意義があると考える。いずれの研究もBML-IRASという、当グループが開発中の新しい分光技術や、光刺激脱離種の検出技術を駆使して研究を進める。また、今年度から放射光の分光技術の開発にも着手した。これにより、光反応の励起波長依存性の実験が可能となることを期待している。

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

a）　粒子同時計測法の開発とそれを用いた原子・分子・クラスターの光イオン化過程の研究

b）　分子の真空紫外超励起状態の分光学と動力学。

c）　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。

d）　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。

Ⅰ－3）　研究活動の概略と主な成果

a）　正イオン・負イオン同時計測法を世界で初めて開発し、複数の光解離過程の識別と放出される並進エネルギーの測定を可能とした。また、光電子・イオン飛行時間同時計測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。

b）　軌道放射光施設に分子線光解離装置を製作し、２酸化炭素、２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初めて見いだした。また、同施設に２次元掃引光電子分光装置を建設した。得られた負イオン解離効率曲線や光電子スペクトル等から、超励起状態同士または超励起状態とイオン化状態の電子的結合を評価し、これに基づいて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。

c）　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ための新たな手法を関発した。

d）　分子線光電子分光・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。

Ⅱ－1）　学術論文

K. Mitsuke, H. Hattori, and H. Yoshida, "Ion-Pair Formation from Saturated Hydrocarbons through Photoexcitation of an Inner-Valence Electron", *J. Chem. Phys.* 99, 6642(1993).

H. Yoshida and K. Mitsuke, "Observation of Doubly Excited Rydberg States of N_2O by Positive Ion-Negative Ion Coincidence Spectroscopy", *J. Chem. Phys.* 100, 8817(1994).

Ⅱ－2）　国際会議のプロシーディングス

I. Arakawa, D. E. Weibel, T. Nagai, T. Hirayama, M. Kanno, K. Mitsuke, and M. Sakurai, "Angular and Kinetic Energy Distributions of the Desorption of Ne Metastable Induced by Excitons at the Surface of Solid Ne", in Desorption Induced by Electronic Transitions (DIET VI), (Springer−Verlag, Berlin, 1994).

Ⅱ－3）　総説・著書

見附孝一郎「極端紫外光励起素反応のダイナミックス」、SR科学技術情報、巻４、24頁、1994年

Ⅱ－4) 招待講演

見附孝一郎、「分子の超励起状態のダイナミックス」、
第34回分子科学夏の学校、大阪（池田市）、1994年８月
見附孝一郎、「分子超励起状態のイオン化と解離のダイナミックス」、
分子構造総合討論会、東京、1994年９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

気相化学反応の遷移状態の追跡および溶媒和状態の動力学的効果の解明を目的として、負イオン光脱離法によって中性励起状態の振動電子状態を研究したい。同様の手法を金属クラスター負イオンに適用し、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。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超励起状態の分光学的情報を集積しその動的挙動を明かにしたい。特に軌道放射とパルスレーザを組み合わせて、励起分子反応の過渡現象を追跡することが近い将来の目標である。

界面分子科学研究部門（流動部門）

川 副 博 司 （教授）

Ⅰ－1） 専門領域：無機材料科学

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10種の新透明n型伝導性物質を発見した。ドーピングにより導入された過剰電子の局在・非局在性について検討した。またこれらの電子構造をSR－UPS、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。$CuGaO_2$についてp型伝導性を確認した。

c） $Sr_{1+x}La_{1-x}FeO_4$なる結晶を合成し、Feの原子価状態の変化と物性との関連を検討した。この時Feは、高スピンのFe^{3+}状態にとどまっていること、導入された正孔はスモールポーラロン状態であることを明らかにした。

d） GeO_2をドープした合成シリカガラス中の酸素欠損≡Ge－Ge≡の生成を促進させる合成法について検討した。この結果を、高機能光ファイバー及びUV領域の光学素子の作製に対して応用することを提案した。

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

K. AWAZU. K. MUTA. and H. KAWAZOE. "Formation Mechanism of Hydrogen-Associated Defect with an 11.9mT Doublet in Electron Spin Resonance and Red Luminescence in $9SiO_2$: GeO_2 Fibers", *J. Appl. Phys.* 74, 2237(1993).

H. HOSONO, and H. KAWAZOE, "Radiation-Induced Coloring and Paramagnetic Centers in Synthetic Si_{02}:Al Glasses", *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.* B91, 395(1994).

J. NISHII, H. YAMANAKA, H. HOSONO, and H. KAWAZOE, "Characteristics of 5-eV Absorption Band in Sputter Deposited GeO_2–SiO_2 Thin Glass Films", *Appl. Phys. Lett.* 64, 282(1994).

T. HASHIMOTO, H. KAWAZOE. and S. SHIMAMURA, "Effects of Substitution of Bi with Pb in $BaBi_{1-x}Pb_xO_3$ on Crystal Structure and Conduction Behavior", *Physica* C 223, 131(1994).

T. OMATA. K. UEDA. N. UEDA, M. KATADA, S. FUJITSU, T. HASHIMOTO, and H. KAWAZOE, "Preparation of Oxygen Excess $SrLaFeO_{4+\delta}$ and Its Electrica1 and Magnetic Properties", *Solid State Commun.* 88, 807(1993).

T. OMATA, K. UEDA, R. HOSONO, M. KATADA, H. UEDA, and H. KAWAZOE, "Electrical and Magnetic Properties of Hole-Doped $Sr_{1+x}La_{1-x}FeO_4$", *Phys. Rev.* B49, 10194(1994).

T. OMATA, K. UEDA, H. HOSONO, T. MIYAZAKI, S. HASEGAWA, N. UEDA, and H. KAWAZOE, "Electronic Structure of Hole-Doped $Sr_{1+x}La_{1-x}FeO_4$ Studied by UPS and XAS", *Phys. Rev.* B 49, 10200(1994).

K. YANAGAWA, Y. OHKI, T. OMATA, H. HOSONO, N. UEDA, and H. KAWAZOE, "New Oxide Phase $Cd_{2(1-x)}Y_{2x}Sb_2O_7$ Pyrochlore with a Wide Band Gap and High Electrical Conductivity", *Jpn. J. Appl. Phys.* 33, L238(1994).

K. YANAGAWA, Y. OHKI, N. UEDA, T. OMATA, T. HASHIMOTO, and H. KAWAZOE, "New Oxide Phase $Cd_{1-x}Y_2Sb_2O_6$ with a Wide Band Gap and High Electrica1 Conductivity", *Appl. Phys. Lett.* 63, 3335(1993).

T. OMATA, N. UEDA, K. UEDA, and H. KAWAZOE, "New Ultraviolet-Transparent Electroconductive Oxide, $ZnGa_2O_4$ Spinel", *Appl. Phys. Lett.* 64, 1077(1994).

K. YANAGAWA, Y. OHKI, T. OMATA, H. HOSONO, N. UEDA, and H. KAWAZOE, "Preparation of $Cd_{1-x}Y_xSb_2O_6$ Thin Film on Glass Substrate by Radio Frequency Sputtering", *Appl. Phys. Lett.* 65, 406(1994).

Ⅱ－2) 国際会議プロシーディングス

K. AWAZU, H. HOSONO, and H. KAWAZOE, "Chemical Reaction of Ge-Related Species in SiO_2:GeO_2 Optical Fibers", Proc. SPIE 2044, 78(1993).

H. HOSONO, and H. KAWAZOE, "Radiation Induced Coloring and Paramagnetic Centers in Synthetic SiO_2:A1 Glasses", Proc. 7th lnt. conf. Rad. Effects Indulaters 395(1993).

Ⅱ－3) 総説、著書

川副　博司「新しい透明導電性セラミックス」，化学と工業　47，660（1994）

H. KAWAZOE. "Application of NMR Spect roscopy to the Science and Technology of Glasses and Ceramics", in "*Annual Reports on NMR Spectroscopy*" Vo1. 28. I. Ando and G. A. Webb Ed. , Academic Press, p. l－27 (1994)

Ⅱ－4) 招待講演

K. AWAZU, H. HOSONO and H. KAWAZOE. "Chemical Reaction of Ge-Related Species in SiO_2:GeO_2 Optical Fibers", SPIE Que'bec Canada. Auaust. 1993

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 Formatino on the Structure of Glass, 1984, Advisory and Program Committee.

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

6th lnternational Conference on Physics of Non-Crystallin Solids. 1987, Organizing Committee

5th Internationa1 Symposium on Halide Glasses, 1988, Program Committee

International Symposium on Structural lmperfections in SiO_2-Based Amorphous Materials(MRS−JAPAN), 1990, 0rganizer

Materials Research Society Symposiumon Optical Waveguide Materials(Symposium J), l991, 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

1993 PAC RIM Meeting American Ceramic Society Glass Division, Program Comittee

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５年度後期)

川副　博司，東京都立大学工学研究科，無機工業化学特論（平成５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実施している。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） Ⅱ-Ⅵ族化合物半導体の成長とドーピング

c） 有機金属化学気相成長への可視光照射効果

Ⅰ－3） 研究活動の概略と主な成果

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

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ロン放射光を利用した。室温でエピタキシャル成長できることを示すと共に成長条件と成長速度の関係を明らかにし，成長過程に関する知見を得ることができた。更に，原料交互供給法により原子層成長の達成が可能であることを示した。

b） II-Ⅵ族化合物半導体の成長とドーピング

気相エピタキシャル法で作製したZnSeについて表面形態の特徴を明らかにしている。ZnTeについては，自由励起子発光が非常に強く現れる良質な結晶が得られ，この成長条件下でA1ドーピングによる低抵抗率n形結晶が達成できることを示している。

c） 有機金属化学気相成長への可視光射効果

ZnTe成長時の可視光照射は，光触媒メカニズムにより成長を促進させる効果があることを既に明らかにしたが，成長結晶の品質への効果は不明であった。そこで，成長層の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明らかにした。成長速度の促進をもたらすバンドギャップ以上のエネルギ-を持つ光の照射は，結晶性を大きく改善させるが，原料中に含まれる塩素の取り込みを促進する効果があることを明らかにした。

Ⅱ－1） 学術論文

M. Fujii, H. Iwanaga. N. Shibata, H. Ogawa, and M. Nishio, "Morphology and rotation twin in ZnSe on GaAs (111)", *J. Materia1. Sci.* 28, 4068(1993).

H. Ogawa. S. I. Gheyas, H, Nakayama. M. Nishio, and A. Yoshida, "Growth of Low-Resistivity n-Type ZnTe by Metalorganic Vapor Phase Epitaxy", *Jpn. J. Appl. Phys.* 33, L980 (1994).

M. Ikejiri, T. Ogata, H. Ogawa, M. Nishio, and A. Yoshida, "Low temperature growth of ZnTe by synchrotron radiation using metalorganic sources" *J. Vac. Sci. & Technol.* A12, 278 (1994).

Ⅱ－7） 他大学での講義

西尾光弘，佐賀大学・理工学部，電子物性論II

平成６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）を更に進める．

a) アンジュレータ光を用いた成長実験やXPS,TPD等による測定により，本法の成長機構を検討したい。更に，原子層成長に関し，成長特性を詳細に調べ，本法の特徴を見い出したい。

b) フォトルミネッセンス特性，成長特性を詳細に調べ，不純物，欠陥の挙動を成長機構と関連させて議論し，物性制御を追求したい。

3−7　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、次第に拡大してきた。現在の研究活動としては、専住部門として、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。とくにMo(II)の７配位錯体およびMo(VI)のチオラト錯体が中心となっている。錯体物性部門では、Ru，Moの錯体による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、６配位のけい素錯体や５配位のりん錯体の研究が行われている。客員部門として機体配位結合部FWミありPt，Ru，Nb，などの機体を研究している。

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研究の世界的拠点となるべく計画を進めている。

錯体合成研究部門（流動部門）

福　田　　豊　（教授）

Ⅰ−1)　専門領域 無機化学、錯体化学

Ⅰ−2)　研究課題

a)　金属多核錯体の構造と性質

b)　金属錯体のクロモトロピズム

Ⅰ−3)　研究活動の概略と成果

a)　金属錯体の多核化は適当な架橋配位子を介在させる事によって達成できるが、ここではテトラケトンを新しく合成し、それを架橋配位子として含む様々の遷移金属イオンを含む混合配位子錯体を合成した。

b)　またこれらの錯体は、極めて多数の有機溶媒に可溶であり、溶媒の極性の違いによる様々の色変化、構造変化を示す。さらにこれらの溶液の色が温度によって変化するいわゆるサーモクロミズムも観測された。現在、希土類を含む多核錯体の合成を試みている。

Ⅱ−1)　学術論文

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).

Y. FUKUDA, T. YOSHIDA, and M. OGUNI, "Glass Transition Phenomenon due to Freeding-in of Conformational Disorder of Ethylenediamine Framework in Crystalline [Ni (acac)(tmen)$(H_2O)_2$]ClO_4", *Solid State Commun.* , 89, 809(1994).

N. SHINTANI, E. NUKUI, H. MIYAMAE, Y. FUKUDA, and K. SONE, "Studies on Mixed Chelates. XXII. Five-Coordinate Copper(II) Chelates with N, N, N', N'', N''-Pentamethyltriethylenetetramine and β-Diketonates", *Bull. Chem. Soc. Jpn.* , 67, 1834(1994).

Ⅱ－2) 国際会議のプロシーデイングス

K. OKA, U. IKEDA, A. ISHIHARA, Y. MASUDA, and Y, FUKUDA, "Equilibrium and Kinetics of Mixed Ligand Ni(II)Complexes in Solution", 30th I. C. C. C, (International Conference on Coordination Chemistry). Abstract p79, at Kyoto, 1994 July.

M. SATO, M. MOJIRI, S. YANO, M. SAKAI and Y. FUKUDA, "Enhancement of Superexchange Coupling by μ-Nitro Groups on Tetranuclear Fe(III)Complex", 30th I. C. C. C., Abstract p91, at Kyoto, 1994 July.

Y. YAMADA, Y. FUKUDA, and T. HOSHI, "Electronic Transitions of Mixed-Ligand Cu(II) Complexes:[Cu(cat)(bpy)] and [Cu(cat)(phen)]", 30th I. C. C. C. , Abstract p150, at Kyoto, 1994 July.

A. ISHIHARA, Y. MASUDA, and Y. FUKUDA, "Solvent Effect on Ultra-Fast Intra-Molecular Electron Transfer on Mixed Valence Biferrocene monocation", 30th I. C. C. C. , Abstract p332, at Kyoto, 1994 July.

T. YOSHIDA, M. OGUNI, Y. MORI, and Y. FUKUDA, "Thermal Properties of a Series of Molecular Transition Metal Complexes [M(hfac)2(tmen)]:Emergence of an Odic Phase and of the Character of "Irving-Williams order", 30th I. C. C. C. , Abstract p341, at Kyoto, 1994 July.

T. YOSHIDA, M. OGUNI, H. MIYAMAE, K. SATO, and Y. FUKUDA, "Glass Transition Phenomenon due to Freeding-in of Conformation Disorder of Ethylenediamine Framework and the Potential Energy Curve along the Conformational Change in Crystalline [Ni(acac)(tmen)(H_2O)$_2$]X", 30th I. C. C. C. , Abstract p341, at Kyoto, 1994 July.

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（依頼）講演、Abstract 2D408, 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

日本化学会学会賞等選考委員（1989－90）

学会の組織委員

第30回錯体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

千葉大学教育学部（大学院）無機化学特論　2単位, 集中講義（1994, July）（非常勤）

静岡大学理学部（大学院）錯体化学　2単位, 集中講義（1994, September）（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、希土類錯体の新規物質の創製をめざす。今後の研究としては、クロモトロピズムのさらに広い条件変化を試みる事や固体錯体の熱物性、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。

吉 川 雄 三 （教授）

Ⅰ－1） 専門領域：無機化学，錯体化学

Ⅰ－2） 研究課題

a） 金属錯体の立体化学

b） 無機固体の表面特性

c） コンピューターシミュレーション

Ⅰ－2） 研究活動の概略と成果

a） 金属錯体の立体化学

立体化学すなわち異性現象の研究を金属錯体を対象として行っている．これまで多くの研究を行ってきたコバルト（III）錯体等に加えて，最近は八面体ケイ素（IV）錯体の異性現象の研究に力を入れている．当研究室で光学分割に成功した$[Si(phen)_3]^{4+}$錯体は，水溶液中でラセミ化に対して安定な八面体型ケイ素（IV）錯体としては最初のものである．

以上の他，コバルト（III）錯体の光（照射）異性化反応、制癌性白金（II）錯体の合成も手掛けている．

b） 無機固体の表面特性

金属，金属酸化物，ゼオライト等の表面で起こる水およびその他の気体分子（N_2,COなど）との反応性を研究している．これらから，純正化学的な基礎データに加えて，金属の腐触防止や無機固体の新機能の開発につながる情報を得ている．

c） コンピューターシミュレーション

金属錯体の合成のための分子設計や反応メカニズムの解明のために，静電的相互作用や溶媒効果も考慮した経験的力場計算を行い，その結果を有効に活用している．各種スペクトル解析（curve-fittins）を行い化合物の同定や構造に関する知見を得ている．

Ⅱ－1） 学術論文

Y. Kuroda, S. Konno, H. Maeda, and Y. Yoshikawa, "Structural characterization of adsorbed dinitrogen on copper-ion-exchanged mordenite through XAFS measurements," *Jpn. J. Appl. Phys.* 32(Suppl. 32–2), 493(1993).

F. M. Akhter, M. Kojima, T. Yoshii, S. Kashino, and Y. Yoshikawa, "Photolysis of *trans*(*t*−N, S)−[Co{$S(O)_2CH_2COO$−S.O}(tren)]+(*t*−N=tertiary amine nitrogen;tren=tris(2−aminoethyl)amine). Linkage and geometrical isomerization," *Chem. Lett.* 171(1994).

M. Kojima, Y. Shimizu, K. Nakajima, and Y. Yoshikawa, "A photochemically prepared *O*-bonded sulfinato complex of cobalt(Ⅲ). Optical resolution and X-ray structure of(2−aminoethanesulfinato−*O*, *N*)[tris(2−aminoethyl)amine]cobalt(Ⅲ)," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 67, 869(1994).

M. Kojima, K. Nakajima, M. Tsuchimoto, M. Tanaka, T. Suzuta, Y. Yoshikawa, and J. Fujita, "Greeen and orange crystlline forms of[VO{*N*−salicylidene−*N'*−3−ethoxysalicylidene−(*R*,*R*)−1,2−cyclohexanediamine}], Separation of the diastereomeric pair, and isomerization between them in the solid state," *Chem. Lett.* 949(1994).

Ⅱ－2) 国際会議のプロシーディングス

Y. Kuroda, H. Hamano, M. Nagao, and Y. Yoshikawa, "Adsorption Behaviour of Water on the Y_2O_3 Surface," 8th ICSCS(International Conference on Surface and Colloid Science)Abstract p.115, Adelaide(Australia. February, 1994).

Ⅱ－3) 著書

山崎一雄，吉川雄三，池田龍一，中村大雄，「錯体化学」，裳華房（1993），

Ⅱ－4) 招待講演

吉川雄三，「八面体型ケイ素（IV）錯体-生物にとってケイ素は必須かー」，日本化学会東北支部第115回常会（講演会），山形，1993年11月.

Ⅱ－5) 受賞

東海化学工業会賞，1980年.

Ⅱ－6) 学会活動

学協会役員，委員

錯体化学研究会運営委員（1978－80、1991－93）.

日本化学会東海支部代議員（1978－79）.

日本化学会中国四国支部代議員（1992－94）.

科研費の班長

文部省科学研究費補助金総合研究（A）班長（1994－）

Ⅲ 研究活動の課題と展望

ケイ素（IV）化合物の合成および立体化学の研究は，それらの基礎的かつ系統的研究に止まるだけでなく，「クラーク数第1位の固体元素であるケイ素が地球の生体中で重要な役割を果していない筈がない」との観点へと結びつけることを最終目標としたい.

今後は，哺乳類に対する強い生理活性で知られるシラトラン（青酸カリより数倍毒性の強いものがある）の光学活性誘導体の合成も試みる.また八面体型ケイ素（IV）錯体の生体中での役割にもメスを入れる.

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）非配位性溶媒中の錯形成反応

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、錯体の溶液内構造をついて調べた。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。本年は主に２つのN原子を有する配位子の置換不活性錯体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、溶液反応と気相反応の橋渡しとなる系として重要な研究野である。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。溶液中の錯体の安定性と固体錯体の構造、熱的安定性との比較も行った。

c）ポリエーテル錯体の溶液内挙動

環状ポリエーテル及び非イオン性界面活性剤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局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。本年は主に長鎖ポリエーテルの反応を明べた。

d）炭酸塩の結晶成長と阻害機構

炭酸カルシュウムの生成機構を明らかにするため金属イオンの表面吸着平衡を調べた。

Ⅱ－1）学術論文

K. SAWADA, Y. NAGANUMA, and T. SUZUKI, "Formation and protonation of aminopolyphosphonate complexes of alkaline earth and divalent transition metal ions in aqueous solution" *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, 2557(1993)

澤田清、大掛賢、小林倫子、鈴木俊雄、"カラム法を用いたトリオクチルメチルアンモニウムクロリドによるカドミウムの抽出濃縮と黒鉛炉原子吸光法による定量" 分析化学、42, 741（1993）.

K. SAWADA, T. MIYAGAWA, T. SAKAGUCHI, and K. DOI, "Structures and thermodynamic properties of nitrilotris(methylenephosphonato) and ethylenediaminetetrakis-(methylenephosphonato)complexes of the alkaline earth metal ions." *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* 3777(1993).

Ⅱ－4) 招待講演

澤田　清「ポリエーテル錯体のイオン対生成平衡とその構造」日本分析化学会第42年会、広島（1993，10月）

K. SAWADA, "Steric Effect on the Formation of Tetrahedral Complexes of Metal Halides. " International Conference on Coordination Chemistry, July. 1994(Kyoto).

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）、
欧文誌編集委員（87，88）

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）

IUPAC(Internatinal 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)

ICCC(International Conference on Coordination Chemistry)Program Committee(1994)

Ⅱ－7) 他大学での講義

澤田　清、新潟大学理学部、「溶液化学」、1993年７月および1944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ため、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。

中　沢　　浩　（助教授）

Ⅰ－1）　専門領域：錯体化学、有機金属化学

Ⅰ－2）　研究課題

a）　異常原子価リン化合物を配位子とする遷移金属錯体の研究

b）　遷移金属とリン間に多重結合をもつ錯体の研究

c）　遷移金属とリン間に共有結合をもつ錯体の反応性

d）　二核遷移金属錯体の骨格変換反応

e）　触媒機能を有する新しい錯体の創製

Ⅰ－3）　研究活動の概略と成果

a）　異常原子価リン化合物を配位子とする遷移金属錯体の研究

ホスファイトを配位子とする陽イオン鉄錯体とアルコキサイドとの反応により５価５配位リン化合物を配位子とする鉄錯体を合成することに成功した。これは配位リン原子の原子価を配位圏内で拡張するという全く新しい反応である。

b）　遷移金属とリン間に多重結合をもつ錯体の研究

ホスファイトの配位した６族遷移金属錯体とBX_3との反応によりホスフェニウム錯体を合成した。この錯体には遷移金属とリン間に二重結合性が存在することを、錯体の異性化現象、Ｘ線構造解析、塩基との反応性などから明かにした。またアルキル基を有する鉄ホスフェニウム錯体においては、リン配位子が鉄－アルキル結合に挿入するという全く新しい反応を見出した。

c）　遷移金属とリン間に共有結合をもつ錯体の反応性

主に８族遷移金属解体のホスホネート錯体とメタラホスフィンボラン錯体の合成、および熱、光、ルイス酸、ルイス塩基との反応性を検討した。その結果、鉄－リン共有結合は比較的安定であり、リン原子のd軌道の関与が示唆された。

d）　二核遷移金属錯体の骨格変換反応

シクロペンタジエニル環を有する同核および異核の二核錯体に強力なルイス塩基を反応させることにより、遷移金属フラグメントが遷移金属からシクロペンタジエニル環へ転位することを見出した。この反応はクラスター錯体の骨格変換反応の素反応として重要である。転位の選択性についても検討を行った。

e）　触媒機能を有する新しい錯体の創製

パラジウム錯体により、炭素－リン結合が触媒的に切断する系を見出した。また、その中間体の単離を通して、炭素-リン結合の酸化的付加、脱カルボニル化、炭素-リン結合の還元的脱離という反応が組合わさって触媒サイクルが成り立っていることを明らかにした。また、シクロペンタジエニル環をもたない前周期遷移金属錯体触媒の開発も行っている。

Ⅱ－1）　学術論文

H. NAKAZAWA, K. KUBO, and K. MIYOSHI, "An Unprecedented Synthetic Route for a Metallaphosphorne Complex. Nucleophilic Attack of Lewis Base on a Trivalent Phosphorus Atom Coordinating to a Transition Metal", *J. Am. Chem. Soc.*, 115, 5863(1993).

H. NAKAZAWA, Y. YAMAGUCHI, and K. MIYOSHI, "Formation and Fac−mer Isomerization of Cationic Phosphenium Transition−metal Complexes Formurated as $[M(bpy)(CO)_3\{PN(Me)CH_2CH_2NMe\}]^+$ (M=Cr, Mo, W) and $[M(dppe)(CO)_3\{PN(Me)CH_2CH_2NMe\}]^+$(M=Mo, W)", *J. Organomet. Chem.*, 465, 193(1994).

H. NAKAZAWA, T. KASHIWAMURA, T. MIZUTA, and K. MIYOSHI, "Reaction of Acyl(phosphonato)palladium Complexes, $Pd(PMe_3)_2\{C(O)R'\}\{P(O)(OR)_2\}$, with an Alkyl Cation, Yielding Cationic Phosphite Complexes, and with Acid Chlorides, Involving Facil Pd-$P(O)(OR)_2$ Bond Cleavage", *Organometallics*, 13, 941(1994).

H. NAKAZAWA, T. FUJITA, K. KUBO, and K. MIYOSHI, "Synthesis by the Arbuzov-like dealkylation Reaction, Characterization, and Reactivity of Phosphonate and Amino-substitued Phosphonate Ruthenium Complexes, $[(\eta^5-C_5H_5)(CO)_2Ru\{P(O)(OR)_n(NC_4H_8)_{2-n}\}](n=0-2)$, and the Comparison with the Iron Analogues", *J. Organomet Chem.*, 473, 243(1994).

H. NAKAZAWA, K. KUBO, K.TANISAKI, K.KAWAMURA, and K.MIYOSHI, "Conversion of Cationic Phosphite Complexes into Phosphonate Complexes with Selective Deamination on the Coordinationg Phosphorus, Reaction of $[\eta^{50}-C_5H_5)L_2Fe\{PLN\ C_4H_8)_n(OMe)_{3-n}\}]+$(L=CO, PMe_3) with KOH to Afford $[(\eta^5-C_5H_5)L_2Fe\{P(o)(NC_4It_8)n-1(OMe)_{3-n}\}$", *lnorg. chim. Acta,* 222, 123 (1994)

Ⅱ−2) 国際会議のプロシーディングス

H. NAKAZAWA, S. ICHIMURA, Y. YAMAGUCHI, and K. MIYOSHI, "Migratory Insertion Reaction of Phosporus Ligand into an Iron-alkyl Bond", 30th ICCC(International Confrence on Coordination Chemistry)Abstract P47, Kyoto(Japan, July, 1994).

Ⅲ 研究活動の課題と展望

遷移金属とリンとの間に共有結合、多重結合、異常原子価結合をもつ錯体ついて研究を行っている。その結果、共有結合についてはホスホネート錯体について合成法、反応性がかなり分かってきたので、今後は触媒系の設計に役立てたい。多重結合については二重結合をもつ錯体の新しい合成法の開発と金属−炭素間にリンが挿入するという新しい反応を見出した。今後は三重結合をもつ錯体の合成が大きな課題となる。異常原子価結合については、８族錯体について新規合成法を開発した。今後は反応性の検討に取り組んで行きたい。

錯体触媒研究部門

中　村　　晃

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）　金属酵素モデル錯体の合成と触媒作用

Ⅰ－3）　研究活動の概略と主な成果

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い出した。

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

K. Tatsumi, Y. Inoue, H. Kawaguchi, M. Kohsaka, A. Nakamura, R. E. Cramer, W. VanDoorne, C. J. Taogoshi, and P. N. Richmann, "Structural Diversity of Sulfide Complexes Containing Half-Sandwich Cp*Ta and Cp*Nb Fragments", *Organometallics*, 12, 352(1993)

W. -Y. Sun, N. Ueyama, and A. Nakamura, "Oxidation of Benzoin to Benzil and of p-Substituted Benzyl Alcohol to the Corresponding Benzaldehyde Catalyzed by Iron(II)Thiolate Complexes. A Proposed Reaction Mechanism", *Tetrahedron*, 49, 1357(1993).

W.-Y. Sun, N. Ueyama, and A. Nakamura, "An Electronic Influence on a Distant Aromatic Ring in Reduced Rubredoxin Models. Iron(II)Complexes with Z-Cys-Pro-Leu-Cys-Gly-X(X=$NHCH_2C_6H_4$-*p*-F, $NHCH_2CH_2C_6H_4$-*p*-F, and Phe-OMe)", *Inorg. Chem.* 32, 1095(1993).

K. Tatsumi, Y. Inoue, and A. Nakamura, "Rigidity of the Unsymmetric Coordination Geometry of the Two Dithiolates in(C_5Me_5)Ta(norbonane−exo−2, 3−dithiolate)$_2$", *J. Organomet. CHem,* 444, C25(1993).

M. Kondo, N. Ueyama, K. Fukuyama, and A. Nakamura, "Synthesis, Molecular Structure, and Physical Properties of an Oxomolybdenum(IV) Complex with *p*-Chlorobenzenethiolate, $[Mo^{IV}O(p-ClC_6H_4S)_4]_{2-}$, as a Model of Active Sites of Reduced Molybdo-Oxidases", *Bulli. Chem. Soc. Jpn.*, 66, 1391(1993).

K. Tatsumi, H. Kawaguchi, I. Matsubara, and A. Nakamura, "A Seven-Coordinate Mixed-Dithiolate Complex of Niobium(V):Synthesis and Structure of $(PPh_4)[Nb(SCH_2CH_2S)_2(SCH_2CH_2SCH_2CH_2S]$", *Inorg. Chem.* 32, 2604(1993).

K. Tatsumi, H. Kawaguchi, Y. Inoue, and A. Nakamura, "[Cp*TaS_3{Rh(cod)}$_2$] und [Cp*TaS_3{RuH$(PPh_3)_2$}$_2$]-eine neue Klasse von TaM_2-Heterometallclustern", *Angew. Chem.* 105, 791(1993).

K. Mashima, Y. Yamanaka, Y. Gohro and A. Nakamura, "Synthesis and Reaction of (η^5-Pentamethylcyclopentadienyl)bis(allyl)tantalum(III)Complexes;Crystal Structure of Ta(η^5-C_5Me_5)(η^3-1-phenylallyl)$_2$", *J. Organomet. Chem.*, 455, C6(1993).

W. -Y. Sun, N. Ueyama, and A. Nakamura, "Spin-Lattice Relexation Time and Temperature Depndence of Fluorine-19 Nuclear Magnetic Resonance Spectra of Cysteine-containing Peptide Iron(II) Complexes", *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, 1993, 1871.

N. Ueyama, W. -Y. Sun, and A. Nakamura, "Novel Peptide Model Complexes of Reduced Rubredoxin", *Peptide Chemistry* 1992, 491(1993).

H. Zaima, N. Ueyama, A. Nakamura, and S. Aimoto, "Solution Structure of a Peptid Designed on Plastocyanin Metal center in Trifluoroethanol and Incorporation of Cobalt(II) into the Peptide", *Chem. Lett.* 1993,. 1885

K. Mashima, Y. Yamanaka, Y. Gohro and A. Nakamura, "Preparation, Characterization, and Reations of 16-Electron Ta(η^5-C_5Me_5)(η^3-1-phenylallyl)$_2$", *J. Organomet. Chem.*, 459, 131(1993)

K. Mashima, S. Fujikawa, and A. Nakamura, "Polymerization of Ethylene Catalyzed by the System Ta(η^5-C_5Me_5)(η^4-diene)$(CH_3)_2$/MAO:An Isoelectronic Analogue for a Group 4 Metallocene Catalyst", *J. Am. Chem. Soc.*, 115, 10990. (1993).

T. Okamura, N. Ueyama, A. Nakamura, E. W. Ainscough, A. M. Brodie, and J. M. Waters, "The Effect of Strong NH···SHydrogen Bonds in the Copper(I) Thiolate Complex, $(NEt_4)_2$[Cu(o-pabt)$_3$](o pabt= o-pivaloylaminobenzenethiolato)", *J. Chem. Soc, Chem. Commun.*, 1993, 1658,

Y. Nahayama, K. Mashima, and A. Nakamura, "Polymerization of Monosubstituted Acetylenes Catalyzed by 2, 6-Dimethylphenoxo Complexes of Group 5 and 6 Metals", *Macromolecules,* 26, 6267(1993).

K. Mashima, H. Nakano, and A. Nakamura, "New Synthetic Strategy for a Straight Linear Metal-Metal Bonded Tetranuclear Complex, the Pd-Mo-Mo-Pd System Supported by Four Tridentate 6-(Diphenylphosphino)-2-Pyridonate Ligands", *J. Am. Chem. Soc.,* 115, 11632(1993).

K. Mashima, Y. Nakayama, N. Kanehisa, Y. Kai, and A. Nakamura, "Monocyclooctatetraeny(thiolato)samarium(III) Complexes from the Reaction of Metallic Samarium with Cyclooctatetraene and Diaryldisulfide:Crystal Structures of [Sm(μ-SPh(C_8H_8)$(thf)_2]_2$ and [{Sm[μ-S(2,4,6-triisopropylphenyl)](C_8H_8)$(thf)_2$]", *J. Chem. Soc., Chem, Commun.*, 1993, 1847.

W. -Y. Sun, N. Ueyama, and A. Nakamura, "^1H, ^2H and ^{19}FNMR Spectroscopy of a Novel Iron(II) Tetradentate Cysteine-Peptide Complex Having Only One δ Isomer. Detection of Two Isomers in Coordination of Cys-X-Y-Cys Bidentate Peptide Ligands to Iron(II) Ion", *Magnetic Resonance in Chemistry,* 31, S34(1993).

II-3) 総説、著書

中村　晃　大学院とは何をするところか研究と教育、二つの役割、化学、48、234（1993）

Ⅱ－4) 招待講演

日本化学会春季年会　1994年３月

NATO Workshop, “Paramagnetic NMR of Macromolecules”,Sintra,Portuga1,June,1994

Ⅱ－5) 受賞、表彰

日本化学会賞　1994年3月

大阪科学賞（第一回）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版実験化学説座”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～), Vice Chairman, Int. Conf. Coord. Chem., July 1994, Kyoto

文部省，学振等の委員会委員

文部省学術審議会専門委員（1986～1994）

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（1989～1994）

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 Complxes”, 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）

特別推進研究、有機金属共役系、代表者（1994年～）

Ⅱ－7） 他大学での講義

東京工業大学理学部、1994年６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行い，新しい触媒作用を見い出す。特に，モノシクロペンタジエニル錯体を中心に研究する。

直線状のクラスターについてさらに金属の種類を拓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

a）　金属錯体による二酸化炭素還元反応

b）　硝酸イオン還元反応

c）　機能性金属錯体の合成

Ⅰ－3）　研究活動の概略と成果

a）　配位子上に電子貯蔵能を有する金属錯体の合成と二酸化炭素の多電子還元反応への展開

b）　金属錯体による二酸化炭素の還元的不均化反応により生成する金属－カルボニル錯体への連続したアルキル化によるケトン合成

c）　金属クラスター上での２分子の二酸化炭素のカップリング反応によるシュウ酸生成反応

d）　多段階二酸化炭素還元反応中間体Ru-CO_2，Ru-COOH，Ru-CO，Ru-CHO，Ru-CH_2OH錯体の金属－炭素結合の評価と熱率学的安定性

e）　銅錯体と亜硝酸イオン還元反応中間体としての銅－ニトロおよび－ニトリト異性体の反応性の解明。

Ⅱ－1）　発表論文

N. KOMEDA, N. NAGAO, G. ADACHI, M. SUZUKI, A. UEHARA, and K. TANAKA, "Molecular Structure of Copper Nitrito Complexes as the Reaction Intermediate of Dissimilatory Reduction of NO_2^-", *Chem. Lett.*, 1521(1933).

H. NAGAO, T. MIZUKAWA, and K. TANAKA, "Carbon-Carbon Bond Formation in the Electrochemical Reduction of Carbon Dioxide Catalyzed by a Ruthenium Complex", *Inorg. Chem.*, 33, 3415(1994).

Y. KUSHI, H. NAGAO, T. NISHIOKA, K. ISOBE, and K. TANAKA, "Oxalate Formation in Electrochemical CO_2 Reduction Catalyzed by Rhodium-Sulfer Cluster", *Chem. Lett.*, 2175(1994).

N. KOMEDA, H. NAGAO, Y. KUSHI, G. ADACHI, M. SUZUKI, A. UEHARA, and K. TANAKA, "Molecular Structure of Nitro- and Nitro-Copper Complexes as Reaction Intermediates in Electrochemical Reduction Nitrite to Dinitrogen Oxide", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 68, 581(1995).

Ⅱ－2）　国際会議のプロシーデイングス

K. TANAKA, "Electrochemical Activation of CO_2 Catalyzed by Metal Complexes" in "Redox Mechanisms and Interfacial Properties of Molecules of Biological Importance" Eds. F.A. Schultz, I. Taniguchi, pp232－236.

Ⅱ－3）　総説、著書

田中晃二「錯体触媒による二酸化炭素の活性化」*OrganometallicNews*，**5**（1994）

田中晃二「錯体触媒による二酸化炭素の還元および固定反応」触媒、**35**，492（1993）

Ⅱ－4） 招待講演

K. TANAKA, "Basicity of Sulfur Ligands of Metal-sulfur Clusters", Second China-Japan Symposium on Metal Cluster Compound, Fuzou(china) November 1933.

Ⅱ－5） 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（平成２年－６年７月）

文部省学振等の委員会委員

学術審議会専門委員（科学研究費分科会）（平成４年－６年）

文部省重点領域研究「生物無機化学」班長（平成４年－６年）

Ⅱ－6） 他大学での講義

大阪大学工学部　工業物理化学　平成６年６月

Ⅱ－7） 研究活動の課題と展望

二酸化炭素は金属錯体は上では酸塩基反応あるいは還元的不均化により一酸化炭素に変換することが可能である。また、金属錯体触媒により炭素－炭素結合生成を伴った二酸化炭素の多電子還元反応も可能であることを示したが、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、錯体触媒の分子設計により触媒に結合した二酸化炭素および一酸化炭素の電子密度の調整を行なうことにより、二酸化炭素の多電子還元反応を熱力学的平衡電位に近いエネルギーで進行させることが可能になると期待される。

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

a）　新しい前周期遷移金属錯体の合成

b）　金属錯体上における新しい結合生成反応の開発

c）　金属錯体上における選択性発現に関する研究

d）　炭素炭業結合活性化と骨格変換反応の開発

e）　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

ジルコノセン錯体は近年Kaminsky触媒という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錯体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のジルコノセン－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いだし、さらに触媒反応への展開にも成功している。昨年度はこのアルケン錯体から容易に得られるジルコナサイクルを利用した新しい合成反応の開発に着手し、銅触媒を利用したジルコナシクロペンタジエンのダブルアリレーション、テトラエン類の環化による新しい８員環合成などの新しい反応を開発することが出来た。

またジルコナサイクルの炭素炭素結合活性化を利用した有機合成法の開発を行っている。

Ⅱ－1）　学術論文

T. TAKAHASHI, Z. XI, C. J. ROUSSET, and N. SUZUKI, "Pair-Selective Cross Coupling Reactions of Alkynes with Alkenes on Zirconocene" *Chem. Lett.,* 1001(1993).

N. SUZUKI, D. KONDAKOV, and T. TAKAHASHI, "Zirconium Catalyzed Highly Regioselective Carbon-Carbon Bond Formation Reactions" *J. Am. Chem. Soc.,* 115, 8485(1993)

T. TAKAHASHI, M. KAGEYAMA, V. DENISOV, R. HARA, and E. NEGISHI, "Facile Cleavage of the Cβ－Cβ'Bond of Zirconacyclopentenes. Convenient Method for Selectively Coupling Alkynes with Alkynes, Nitriles, and Aldehydes" *Tetrahedron Lett.,* 34, 687(1993).

T. TAKAHASHI, K. AOYAG1, R. HARA, and N. SUZUKI, "Highly Chemoselective Reactions of Zirconacyclopentenes for Selective Functionalization" *J. Chem. Soc. , Chem. Commun.,* 1042(1993).

T. TAKAHASHI, N. SUZUKI, M. KAGEYAMA, D. Y. KONDAKOV, and R. HARA, "Allylzirconation of Alkynes by the Reactions of Zirconocene-Alkyne Complexes with Allylic Ethers" *Tetrahedron Lett.,* 34, 4811(1993)

T. TAKAHASHI, D. Y. KONDAKOV, and N. SUZUKI, "Reactions of Alkynes with Homoallylic Halides Mediated by Zirconocene Complex", *Tetrahedron Lett.,* 34, 6571(1993)

T. TAKAHASHI, "Development of selective Reactions Using Zirconocene-Alkene Complexes" 有機合成化学協会誌, 51, 1145(1993).

T. TAKAHASHI, K. AOYAGI, V. DENISOV, N. SUZUKI, D. CHOUEIRI, and E. NEGISHI, "Zirconium Catalyzed C−C Bond Formation Reaction of Conjugated Diynes with EtMgBr" *Tetrahedron Lett.*, 34, 8301(1993).

T. TAKAHASHI, . D. Y. KONDAKOV, and N. SUZUKI "Zirconium Catalyzed or Mediated Regioselective C−C Bond Formation Reactions of Allylic Acetals" *Chem. Lett.*, 259(1994)

C. COPERET, E. NEGISHI, Z. XI, and T. TAKAHASHI, "Reaction of 3−zircona−1−cyclopentenes and zirconacyclopentanes with aldehydes. A selective and convenient synthesis of 4−penten−1−ols, (Z)−5−iodo−4−penten−1−ols, and related alkanols," *Tetrahedoron Lett.*, 35, 695(1994)

T. TAKAHASHI, K. AOYAGI, and D. Y. KONDAKOV, "A Reagent-Dependent Highly Chemoselective Halogenation Reaction of Zirconacyclopentenes" *J. Chem, Soc., Chem. Commun.*, 747(1994)

K. AOYAGI, R. HARA, D. Y. KONDAKOV, K. KASAI, N. SUZUKI, and T. TAKAHASHI, "Highly Chemoselective Functionalization of Zirconacyclopentene Compounds" *Inorg. Chim. Acta.*, 220, 319(1994).

N. SUZUKI, K. AOYAGI, M. KOTORA, M. HASEGAWA, Y. NITTO, M. SABURI, and T. TAKAHASHI, "Regioselective Corbon-Carbon Bond Formation Reaction of Zirconocene-Alkene Complexes with Aldehydes or Ketones" *J. Organomet. Chem.*, 473, 117(1994).

T. TAKAHASHI, M. KOTORA, K. KASAI, and N. SUZUKI, "Copper Catalyzed C−C bond formation reaction of allylzirconation products of alkynes" *Tetrahedron Lett.*, 35, 5685(1994)

Ⅱ−3) 総説、著書

T. TAKAHASHI, "ジルコニウム化合物を用いる有機合成" 化学総説 No.17, 99−107(1993).

E. NEGISHI and T. TAKAHASHI, "Patterns of Stoichiometric and Catalytic Reactions of Organozirconium and Related Complexes of Synthetic Interest" *Accounts of Chem. Res.*, 27, 124−130. (1994)

Ⅱ−4) 招待講演

高橋　保　"ジルコノセンアルケン錯体を用いた選択的反応の開発" 有機合成化学協会夏季大学（蔵王）平成５年８月

Ⅱ−5) 受賞、表彰

有機合成化学協会奨励賞、高橋　保、平成５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

Ⅱ−7) 他大学での講義

'Highly Selective Carbon-Carbon Bond Formation Using Zirconocene-Alkene Complexes' Iowa大学（アメリカ）（平成５年４月）

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なっており、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なっており、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。

3−8 研究施設

電子計算機センター

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）反交差の半古典的研究

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なった。ホルムアルデヒド分子の高い振動励起エネルギー領域において、固有値に対する振動パラメタの２次微分（曲率）の分布を調べることにより、振動準位構造とコリオリ摂動に対する状態の安定性を解析した。ここで求めた曲率分布の結果を他の簡単な量子カオス系（スクジアムビリヤード、スタンダードマップ）と比較した結果、ホルムアルデヒド系は高励起状態においても比転的長周期の準周期軌道が混在し小曲率を持つ準位の割合が大きい点で、スクジアムビリヤード系の分布に近いことを示した。

フォルミルラジカルHCOの電子基底及び励起は態のポテンシャルエネルギー面を多参照配置SCF軌道を基底とした配置間相互作用法（MR-CI）により求めた。特に基底電子状態では、核配置がHCOからCOHへのプロトン移動が可能なエネルギー領域について精密な理論計算を行った。得られたポテンシャルエネルギー曲面を３次元のスプライン関数にフイットし、DVR法により核の運動に関する波動関数を求め、高振動状態及び電子遷移に伴うFranck-Condon因子の解析を行っている。

b）反交差の半古典的研究

非可積分系における反交差の起源を半古典的手法を用いて研究を行っている。近可積分系の反交差は古典的な共鳴と関係があり、トーラス間のトンネル現象によるものとして説明されるが、分子の高励起状態のような非可積分系では、位相空間上の任意の二点を結ぶ実軌道が常に存在することがエルゴード性により保証されており、第ゼロ近似としては、反交差の起源を実軌道によるものであると考えるのが適当である。非可積分系の反交差と実軌道との関係を調べるために、まず、スタジアムビリヤード系に対するトレース公式を求め、フーリエ解析により量子力学的な結果との定量的な比較を行なう。次に、パラメターによる固有値変化に対して透熱変換を導入し、この結果、短い周期軌道への依存性が増大することを示す。さらに、周期軌道量子化を行ない、反交差が半古典的に再現されることを確認する。これらの解析から非可積分式における反交差の起源は、簡単な周期軌道の周囲に存在する長い周期を持つ複雑な軌道であることを示すことができる。

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新たな手法を開発し、生体関連分子、金属クラスクー等、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台の高速計算機を

用い、レチナール分子、ベリリュームクラスターの電子状態計算を行なった。複雑な数値計算を含んだ2電子積分計算を小規模なタスクに分割し、負荷の軽い計算機に動的に割り振るアルゴリズム（spooloftasks法）を導入したことにより、従来の方法に比べて格段に高い効率でCPU資源を活用できため、実計算時間が大幅に短くなることが示された。

Ⅱ－1）　学術論文

S. Nanbu, M. Gomyo, and S. Iwata, "Potential energy surfaces of some low-lying states of fluoroformyl radical FOC", *Chem. Phys.* 184, 97(1994).

T. Suga, T. Uchimaru, S. Kondo, and M. Aoyagi, "Basis Sets Effects on Infrared Intensities of Fluorinated Ethy Methyl Ethers", Suga, Mochizuk, Gotoh, Ito, Takahasi, Uchimaru, Kondo, Aoyagi, *J. Fluorine chem.* in press.

Ⅱ－4）　招待講演

青柳　睦、「高振動励起状態とその周辺」理論化学シンポジュウム、愛知県、1994年７月27－30日

Ⅲ　　研究活動の課題と展望

分子の電子状態理論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、これまでと同様に実現的な系の特徴を中心に考察してゆく。さらに簡単な量子カオス系との比較を行うなど、より基本的な物理概念とも結び付けて発展させたい。

早　坂　啓　一　（技官）

Ⅱ－5）　受賞，表彰

東京大学　永年勤続表彰（昭和56年）

日本化学会　化学研究技術有功賞，早坂啓一（昭和60年）

低温工学協会　低温工学功労賞，早坂啓一（平成３年）

Ⅱ－6）　学会および社会活動

学協会役員、委員

低温工学協会　安全委員会委員（1979.6～1981.6）

Ⅱ－7）　他大学での講義

姫路工業大学理学部　寒剤の利用と安全　平成６年５月

機器センター

冨　宅　喜代一　（助教授）

Ⅰ－1）　専門領域：物理化学

Ⅰ－2）　研究課題

a）　溶媒和アルカリ金属原子の電子構造

b）　金属イオンの溶媒和ダイナミックス

c）　リドベルクラジカルの溶媒和過程

d）　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）　研究活動の概略と主な成果

a）　磁気ボトル型の光電子分光装置を試作し、水和電子の生成過程と関連してNaおよびCu負イオンを含む水クラスターの光電子スペクトルの測定を行った。この結果より、クラスター内での電子の分布および金属原子と水分子との相互作用について新たな知見を得た。

b）　金属イオンの水和ダイナミックスの微視的情報を得るために、サイズ選別した$Mg^+(H_2O)_n$および$Ca^+(H_2O)_n$の光解離過程を調べた。この結果、段階的水和に伴う水和殻の生成過程とMg^+やCa^+イオンの電子構造の変化を明らかにした。またクラスター内で金属イオンの光酸化反応が起こることを新たに見出し、この反応のダイナミックスとサイズ依存性を明らかにした。

c）　溶液反応で重要な中間体であるNH_4ラジカルをアンモニアクラスター内に捕捉し、イオン化ポテンシャルおよび解離速度の測定を行った。この結果よりラジカルの電子構造と安定化の機構を検討した。

d）　パルスノズルを利用した新しい反応セルを開発し、励起亜鉛原子と種々のアルカンとの反応で生じるZnH、OH等の反応生成物の初期振動回転分布を測定し反応のグイナミックスを解明した。

Ⅱ－1）　学術論文

K. Fuke, K. TSUKAMOTO, M. SANEKATA, and F. MISAIZU, "Near Threshold Photoionization of Silicon Clusters in the 248−146 nm region:Ionization Potentials for Si_n", *J. Chem. Phys.* 99, 7807(1993).

F. MISAIZU, M. SANEKATA, K. FUKE, and S. IWATA, "Photodissociation Study on $Mg^+(H_2O)_n$, n=1−5:Electronic Structure and Photoinduced Intracluster Reaction", *J. Chem. Pys.* 100, 1161(1994).

F. MISAIZU, T. TSUKAMOTO, M. SANEKATA, and K. FUKE, "Photoelectron Spectroscopy of Mass-Selected Copper-Water Cluster NegativeIons", *Laser Chem.* 15, 195(1994).

H. UMEMOTO, S. TUNASHIMA, H. IKEDA, K. TAKANO, K. KUWAHARA, K. SATO, K. YOKOYAMA, F. MISAIZU, and K. FUKE, "Nascent Internal State Distributions of $ZnH(X^2\Sigma^+)$ Produced in the Reactions of $Zn(4^1P_1)$ with Some Alkane Hydrocarbons", *J. Chem. Phys.* 101, 4212(1994).

Ⅱ－4）　招待講演

K, FUKE, "Microscopic Solvation of Metal Ions in the Gas-Phase Clusters", Japan-USA Joint Workshop on Clusters, Honolulu, U. S. A.., March 1994.

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年

Ⅱ－7） 他大学での講義

New York州立大学（アメリカ）（1994年２月）“Solvation of Electrons and Metal Ions in the Gas-Phase Clusters”

Rochester大学（アメリカ）（1994年２月）“Solvation of Electrons and Metal Ions in the Gas-Phase Clusters”

Illinois大学（アメリカ）（1994年３月）“Solvation of Electrons and Metal Ions in theGas-Phase Clusters”

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を微視的に理解する上で重要な金属原子と溶媒分子間の基本的相互作用や反応過程の解明をめざしており、今後は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および分子－クラスター間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クー分子を合成した。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った。

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性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ーπー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-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0.4eV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, "2,2'-(Cyclopenten-3,5-diylidene)bis(1,3-dithiole)s: Novel Electron Donors Undergoing Deprotonation by Oxidation", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 652(1993).

T. KOBAYASHI, K. ONO, H. SUDA, Y. YAMASHITA, and H. KATO, "Syntheses and Spectral Properties of Norbornadiene-Fused Heterocycles:, 1,3-Diphenyl-4,7-dihydro-4,7-methanobenzo[c]-thiophene, pyrrole, and-furan", *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 66, 2707(1993).

S. HASEGAWA, S. TANAKA, Y. YAMASHITA, H. INOKUCHI, H. FUJIMOTO, K. KAMIYA, K. SEKI, and N. UENO, "Molecular Orientation in Thin Films of Bis(1, 2, 5-thiadiazolo)-p-quinobis(1, 3-dithiole) on Graphite Studied by Angle-Resolved Photoelectron Spectroscopy", *Phy. Rev. B*48, 2596(1993).

M. BONAMICO, V. FARES, A. FLAMINI, N. POLI, Y. YAMASHITA, and K. IMAEDA, "Interaction of Bis(1,2,6,7-tetracyano-3,5-dihydro-3,5-diiminopyrrolizinide) Metal Complexes with Phenazine and Deriva-

tives. Crystal Structures of Addition Compounds of the Nickel(II) Complex with Phenazine and 5, 10-Dimethyl-5, 10-dihydrophenazine", *J. Chem, Soc., Dalton Trans.* 3463(1993).

Y. YAMASHITA, K. ONO, S. TANAKA, K. IMAEDA, H. INOKUCHI, and M. SANO, "Dithio-derivatives of p-Quinodimethanes Fused with 1, 2, 5-Thiadiazoles: a Novel Type of π-Donor-Accepter System", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1803(1993).

M. KOZAKI, S. TANAKA, and Y. YAMASHITA, "Preparation and Properties of Novel Polythiophenes Containing 1, 3-Dithio. 1−2-ylidene Moieties", *J. Org, Chem.* 59, 442(1994).

S. TANAKA, M. TOMURA, and Y. YAMASHITA, "Synthesis and Characterization of Thieno[3, 4-c][1, 2, 5]thiadiazoles", *Heterocycles* 37, 693(1994).

Y. YAMASHITA, K. ONO, S. TANAKA, K. IMAEDA, and H. INOKUCHI, "Nonplanar Bis(1, 3-dithiole)Donors Affording Novel Cation Radical Salts", *Adv. Materials* 4, 295(1994).

T. SUZUKI, T. FUKUSHIMA, Y. YAMASHITA, and T. MIYASHI, "An Absolute Asymmetric Synthesis of the [2+2]Cycloadduct via Single Crystal-to-Single Crystal Transformation by Charge-Transfer Excitation of Solid-State Molecular Complexes Composed of Vinylbenzenes and Bis[1, 2, 5] thiadiazolotetracyanoquinodimethane", *J. Amer. Chem. Soc.* 116, 2793(1994).

M. TOMURA, S. TANAKA, and Y. YAMASHITA, "Synthesis, Structure, and Properties of the Novel Conducting Dithiolato-Metal Complexes Having Dicyanopyrazine Moieties" *Synth. Metal* 64, 197(1994).

K. ONO, S. TANAKA, K. IMAEDA, and Y. YAMASHITA, "Preparation and Properties of 7-(1, 3-Dithiol-2-ylidene)-4-methyl-4,7−dihydro[l,2,5]thiadiazolo[3,4-b]pyridines:NovelDonorMoleculesContaining a 1, 2, 5-Thiadiazole Unit", *J, Chem. Soc., Chem. Cmmun.* 899(1994).

T. SUZUKI, T. SAKIMURA, S. TANAKA, Y. YAMASHITA, H. SHIOHARA, and T. MIYASHI, "2-(Thiopyran-4'-yliden)-1,3-dithioles fused with Thiophene Units:Intramolecular S---S Interaction Affecting the Redox Properties and Molecular Geometries", *J. Chem. Soc. , Chem. Commun.* 1431(1994).

C. KITAMURA, S. TANAKA, and Y. YAMASHITA, "Synthesis of New Narrow Bandgap Polymers Based on 5, 7-Di(2-thienyl)thieno[3, 4-b]pyrazine and Its Derivatives", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1585(1994).

S. HASEGAWA, T. MORI, K. IMAEDA, S. TANAKA, Y. YAMASHITA, H. INOKUCHI, H. FUJIMOTO, K. SEKI, and N. UENO, "Intermolecular Energy-Band Dispersion in Oriented Thin Films of Bis(1, 2, 5-thiadiazolo)-p-quinobis(1, 3-dithiole) by Angle Resolved Photoemission", *J. Chem. Phys.* 100, 6969(1994).

Ⅱ−2) 国際会議のプロシーディングス

S. TANAKA and Y. YAMASHITA, "Synthesis of a Narrow Band Gap Heterocyclic Polymer: Poly-4, 6-di(2-thienyl)thieno[3, 4-c][l, 2, 5]thiadiazole", *Synthic Metal* 55–57, 1251(1993).

Ⅱ−3) 著書

"有機固体化学" **木村勝、戸田芙三夫、境野芳子、山下敬郎**共著、三共出版（1993）

Ⅱ−4) 招待講演

山下敬郎「複素環の特性を利用した新規な有機電導体の合成」有機合成協会講演会（松本市）、1993年９月

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

日本化学会東海支部代議員（1992-1993年度）

Ⅱ－8） 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」の課題を続行する。今までに金属性質を示す電導体の合成に成功しているので、今後、超電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が持たれている小さなバンドギヤップポリマーの開発も行う。

装置開発室

渡　邉　三千雄　（助教授）

Ⅰ－1）　専門領域：装置関発

Ⅰ－2）　研究課題

a）　真空技術の向上

b）　精密駆動技術の向上

c）　高圧技術の向上

Ⅰ－3）　研究活動の概略と成果

a）　新規着手

b）　新規着手

c）　新規着手

Ⅱ－1）　学術論文

野々山史男、北村憲彦、渡邉三千雄、団野　敦：“炭素鋼の温間鍛造におけるB_2O_3の潤滑性能”塑性と加工、34、NO.393、1166、(1993)

Ⅲ　　研究活動の課題と展望

平成６年４月に赴任したところなので、今後Ⅰ－2）で挙げた項目について技術向上を図り、研究支援技術を強化する。

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

b） 赤外用マルチチャンネルFT分光器およびそれを用いた時間分解光システムの開発

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非線型分光法の開発

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。その目的のための励起光源を製作している。

b） 赤外用マルチチャンネルFT分光器およびそれを用いた時間分解分光システムの開発

平成４年度のIMSマシンとして開発されたマルチチャンネルFT分光器は、可視域用として大きな成功を収めた。その発展形として、中赤外域で使用できる装置を平成５年度IMSマシン課題で開発したが、動作の原理的部分を検証するにとどまった。

本研究はこの装置を改良して、理論的限界まで分解能を向上させること、及び、この分光器の大きな特徴である、時間分解分光の可能性をUVSOR光を用いて検証し、中赤外域（波長１～５μm）における実用的な時間分解分光器として完成させることを目的とする。

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。また、この領域での時間分解分光ができる分光装置はほとんど例がない。これら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。

特許

浅香修治、鈴井光一：“低温液体移送管における可動弁開度調整装置”特願平06-072560

鈴井光一 （技官），吉田久史（技官）

特許

浅香修治、鈴井光一：“低温液体移送管における可動弁開度調整装置”特願平06-072560

熊代州三夫、藤本穣、竹田武弘、鈴井光一、吉田久史、三谷忠興：“飛行時間型質量分析計”特願平06-90012

安　　正　宣　（助手）

Ⅰ－1）　専門領域：固体分子のレーザー分光

Ⅰ－2）研究課題

a）　非晶質系にドープ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）　非晶質系にドープ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低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った。最近、色素蛋白質であるZn置換ミオグロビンを用いた研究から、この系が色素分子をドープしたポリマー系に比べ電子格子相互作用が弱いこと、色素分子のサイトのエネルギー分布に特異性が見られること、180K付近で溶液-ガラス転移を起こすこと等、蛋白質の幾つかの特異性が見出された。

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

非晶質にドープ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

J. S. AHN, Y. KANEMATSU, and T. KUSHIDA, "Site-Selective Fluorescence Spectroscopy in Dye-Doped Polymers; I. Determination of Site-Energy Distribution and Single-Site Fluorescence Spectrum", *Phys. Rev.* B48, 9058(1993).

Y. KANEMATSU, J. S. AHN, and T. KUSHIDA, "Site-Selective Fluorescence Spectroscopy in Dye-Doped Polymers; II. Detemination of the Weighted Density of States of the Vibrational Modes", *Phys. Rev.* B48, 9066(1993).

J. S. AHN, Y. KANEMATSU, M. ENOMOTO, and T. KUSHIDA "Determination of Weighted Density of States of Vibrational Modes in Zn-Substituted Myoglobin" *Chem. Phys. Lett.* 215, 336(1993).

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プした系は不均一広がりの大き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80K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材料の開発に大きく影響す

ると思われる。また、色素蛋白質に見られる特異性の解明は、蛋白質の存在理由を説明することにつながる基本問題であり、違う機能を持つ蛋白質に対し同種の測定を行いそれを解明していく予定である。

永 田 正 明、水 谷 伸 雄 （技官）

Ⅱ－1） 学術論文

Y. IWASA, S. WATANABE, T. KANEYASU, T. YASUDA, T. KODA, M. NAGATA, and N. MIZUTANI, "Change of Electronic Structures with Varying Molecular Valence in A_xC_{60}" *J. Phys. Chem. Solids* 54, 1795(1993).

極端紫外光実験施設

渡　邊　　誠*　（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）　極端紫外・軟X線領域において特定の波長で高い反射率を持つ多層膜鏡の性能評価を行い，良好な結果を得た。多層膜を回折格子の表面に成膜すると高い反射率が得られる可能性がある。また，多層膜は偏光子としても利用できる。

b）　昨年度設計・製作した斜入射回折格子分光器を設置・調整し，性能試験を行い当初の設計通りの高性能を得た。この分光器は定偏角定長分光器と呼ばれ，UVSORで独自に関発したものである。本分光器を用いて400-20Aの単色光を得ることができた。分解能は30A付近でおよそ4000である。20A付近で得られる光子数はスリット幅が30μmのとき4×10^9photons/sである。

c）　比較的重い金属原子のハロゲン化物に関し，その金属原子の浅い内殻からの吸収スペクトルを，引続き測定した。このスペクトル線（励起子線）では，LSカップリングとjjカップリングの中間カップリングの特徴をもつ原子内遷移を考えることが重要である。Pbハライドに引続き，SnハライドやT1ハライドについても研究を行った。

Ⅱ－1）　学術論文

M. Sugisaki, M. Eguchi, 0. Arimoto, K. Nakamura, and M. Watanabe, "Infrared Lattice Vibration Spectra at Low Temperature in β-ZnP_2", *J. Phys. Soc. Jpn.* 62, 4533(1993).

D. Kim, H. W. Lee, J. J. Lee, J. H. Je. M. Sakurai. and M. Watanabe, "Mo-Si Multilayer as Soft X-Ray Mirrors for the Wave lengths around 20 nm Region", *J. Vac. Sci. Tech.* A 12, 148(1994)

Ⅱ－6）　学会および社会的活動

学協会の役員

日本放射光学会：評議員（1988-1989.1991-1992, 1994-1995），行事幹事（1994）

国際会議の組織委員

Int. Conf. on Synchrotron Radiation Instrumentation：プログラム委員（1989），国際助言委員（1991）

Int. Conf. on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics：プログラム委員長（1993-1995）

科学技術庁等の委員会委員

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。本年度UVSOR独目の高分解能分光器が実現した。しかしながら高分解能分光は引続き今後の課題である。そのためにこれからも分光性能のよい回折格子（多層膜回折格子など）や分光結晶の関発と，これらの光学素子を搭載した分光器を製作していく必要がある。スペクトル測定による物質の電子状態の研究では，対象とする物質を広げいていくことが今後の課題であろう。

*）平成５年10月１日付で東北大学科学計測研究所教授
平成６年３月31日まで極端紫外光実験施設教授を併任

磯 山 悟 朗* （教授）

Ⅰ－1） 専門領域：加速器物理学

Ⅰ－2） 研究課題

a） 短いバンチの発生

b） 自由電子レーザーの基礎研究

c） 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） 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クス、コヒーレント放射発生の研究。モーメンタム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10分の1以下にすることが出来た。その際、2次のモーメンタムコンパクションファクターの効果を実験的に見い出した。短いバンチの長さをストリークカメラを用いて測定した。

b） 自由電子レーザーの基礎研究

電子貯蔵リングで、短波長自由電子レーザーの基礎研究を行っている。波長300nmの紫外領域で発振に成功した。波長500nm付近で自由電子レーザーの発振ダイナミクスの研究を行っている。電子貯蔵リングに基づく自由電子レーザーの時間構造は、CW構造は見かけ上だけで、本質的にパルス的であることを見い出した。

c） 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ている。この装置を運転するには、ビーム誘起電磁界が大きい場合の空洞のチューニング角と呼ばれる動作点の測定が重要であることが解った。これを実用化するための開発研究を引続き行っている。

Ⅱ－1） 学術論文

M, WATANABE, G. ISOYAMA, M. KAMADA, and K. KIMURA, "Status of the UVSOR Facility-1991", *Rev. Sci. Instrum.* 63, 1584(1992).

S. TAKANO, H. HAMA, G. ISOYAMA, A. LIN, and N. A. VINOKUROV, "Gain Measurement of a Free Electron Laser on the UVSOR Storage Ring", *Jpn. J. Appl. Phys.* 31, 2621(1992).

S. TAKANO, H. HAMA, and G. ISOYAMA, "Gain Measurement of a Free Electron Laser with an Optical Crystron on the UVSOR Storage Ring", *Jpn. J. App. Phys.* 32, 1285(1993).

H. HAMA, S. TAKANO, and G. ISOYAMA, "Control on the Bunch Length on an Electron Storage Ring", *Nucl. Instr. Phys. Res.* A329, 29(1993).

S. TAKANO, H. HAMA, and G. ISOYAMA, "Lasing of a Free Electron Laser in the visible on the UVSOR Storage Ring", *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.* A331, 20(1993).

N. KANAYA, H. HAMA, J. YAMAZAKI, O. MATSUDO, and G. ISOYAMA, "Control System Capable of Gracefully Degraded Operation for the 750MeV Synchrotron Radiation Source", *IEEE Trans. Nucl. Sci.* 40, 1286(1993).

K. TAMURA, T. KASUGA, M. TOBIYAMA, H. HAMA, G. ISOYAMA, and T. KINOSHITA, "Double RF System for Suppression of Longitudinal Coupled Bunch Instability on UVSOR Storage Ring", *Jpn. J. Appl. Phys.* 33, L59(1994).

H. HAMA, J. YAMAZAKI, and G. ISOYAMA, "FEL Experiment on the UVSOR Storage Ring", *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.* A341, 12(1994).

Ⅱ－3) 総説、著書

磯山悟朗、「単バンチ運転」、SR科学技術情報　4-5、2（1994）.

Ⅱ－4) 招待講演

HIROYUKI HAMA, "FEL Experiment on the UVSOR Storage Ring", The 15-th International FEL Conference, Hague(The Netherlands), August 23－27, 1993.

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　評議会員　1993年４月～1995年３月

日本放射光学会　会計幹事　1993年４月～1995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、加速器科学の基礎ならびに将来の新型光源の開発研究である。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研究を行っている。自由電子レーザーのダイナミクスを研究し、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。

*) 平成６年４月１日付で大阪大学産業科学研究所教授
平成６年９月30日まで極端紫外光実験施設教授を併任

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

バンドギャップの大きな物質においては、内殻励起状態がオージェ過程を生じないで、輻射減衰するものがあるが、その輻射減衰過程の詳細は良く分かっていない。そこで、輻射寿命に励起エネルギー依存性や角度依存性があることを見いだし、それらが表面層や電子正孔相互作用による効果である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

結晶の構成原子が光励起によって放出する過程の応答時間をシンクロトロン放射光のパルス特性を利用して、初めて測定することに成功し、放出過程がナノ秒の早いものと、サブミリ秒の遅いものの、２種類存在していることを明らかにした。

c） 半導体表面における吸着，結合状態の研究

清浄なSiやGe結晶にアルカリが吸着した場合の角度分解光電子分光測定を行ない、吸着電子状態のバンド構造を決定した。また、アルカリ原子とハロゲン原子が共吸着した場合の電荷移動の様式を内殻準位のエネルギーシフトの測定によって明らかにした。

d） スピン分解光電子分光システムの開発

角度分解光電子エネルギー分析器を完成させ、それに取付けるスピン検出器を開発中である。また、シンクロトロン放射光を分光する新型分光器の計算を終了し、現在建設中である。さらに、円偏光を発生させるアンジュレーターの検討ならびに計算を終了し、望ましい方式を決定した。

Ⅱ－1） 学術論文

S. HIROSE and M. KAMADA, "Time Responseof Photon-Stimulated Desorption of Excited-State Potasslum Atoms from Potasslum Halides", *J. Phys. Soc. Jpn.* 63, 1053(1994).

M. KAMADA and S. HIROSE, "Time Response of Sputtering of Excited-State Na Atoms from Alkali Hallides Irradiated with Synchrotron Radiation", *Nucl. Instrum. & Methods* B91, 619(1994).

I. OUCHI, I. NAKAI, M. KAMADA, and S. TANAKA, "CoreElectron Absorption Spectra of Polyester Films", *Progress Polymer Physlcs Jpn.* 36, 413(1993).

S. HIROSE and M. KAMADA, "Time Response of photon-stimulated desorption of excited-state sodium halides", *Phys. Rev.* B48, 17641(1993).

Ⅱ－2) 国際会議プロシーディングス

M. Kamada and S. Hirose, "Time response of sputtering of excited-state sodium atoms from NaCl and NaF irradiated with synchrotron radiation", *Nucl. Instrum. Methods* B91(1994)619(Proc. 7th Radiation Effects in Insulators, Nagoya, 1993).

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), 組織委員（常任幹事）

日本放射光学会合同シンポ組織委員（1994.6－ ）

日本放射光学会誌編集委員（1993.4－ ）

Synchrotron Radiation News誌 Correspondent（1993.4－ ）

Ⅱ－7) 他大学での講義

香川大学教育学部 特別講義（物理学） （1994.1）

大阪電気通信大学大学院工学研究科 特別講義」（光物性）（1994.5）

Ⅲ 研究活動の課題と展望

シンクロトロン放射光を用いて、内殻準位の電子を励起することによって生じる様々な物理、化学現象の解明と、それらの理解に基ずく物質制御への応用を研究課題として取り組んでいる。固体、表面のどちらも作業仮説が構築できる段階になったので、単純な系での深化と新材料への応用の段階に近ずきつつある。

また、研究課題の飛躍を計る上で必要とされる、新型分光器やスピン検出器などの新しい実験装置の開発研究に取り組んでいる。いずれも、設計段階が終了して、建設途上にあり、計画どうりの性能が発揮できる装置に仕上げられるかどうか、おおいに期待が持たれる所である。

4．研究施設の点検・評価

4．研究施設の点検・評価

4−1　施設の点検・評価

分子研の将来計画の策定にあたり、昨年以来、研究所全体の点検・評価の作業を行っている。昨年は国内・国外の分子科学研究者の参加を得て研究系についての徹底した評価を行い、その結果は“分子研リポート '93”に報告した。本年度は分子研の６つの研究施設について点検・評価を実施した。研究施設の現状、評価、課題について自由な議論を行う場として、平成６年７月に所長への諮問委員会を設けた。

６つの研究施設のそれぞれについて、関係する所内・所外の研究者から構成される研究施設ワークショップを設けた。各ワークショップの委員長、委員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．電子計算機センター（◎印は委員長，以下同）

開催日　　平成６年８月８日

委　員　　平尾公彦（東京大学教授　工学部）

館脇　洋（名古屋市立大学教授　計算機センター）

◎岩田末廣（分子研教授　電子計算機センター長）

小杉信博（分子研教授）

青柳　睦（分子研助教授　電子計算機センター）

２．極低温センター

開催日　　平成６年９月６日

委　員　　大嶋　孝吉（岡山大学教授　理学部）

◎丸山　有成（分子研教授　極低温センター長）

鹿野田一司（分子研助教授）

高橋　　保（分子研助教授）

木村　真一（分子研助手）

３．機器センター

開催日　　平成６年８月29日

委　員　　小谷　正博（学習院大学教授　理学部）

福田　　豊（お茶の水女子大学教授　理学部）

◎齋藤　修二（分子研教授　機器センター長）

富宅喜代一（分子研助教授）

宮島　清一（分子研助教授）

４．化学試料室

開催日　　平成６年８月29日

委　員　　中筋　一弘（大阪大学教授　理学部）

◎花崎　一郎（分子研教授　化学試料室長）

田中　晃二（分子研教授）

山下　敬郎（分子研助教授　化学試料室）

5．装置開発室

開催日　　平成６年９月６日

委　員　　村田　好正（東京大学教授　物性研究所）

◎北川　禎三（分子研教授　装置開発室長）

宇理須恆雄（分子研教授）

加藤　立久（分子研助教授）

渡邊三千雄（分子研助教授　装置開発室）

内田　　章（分子研技術課長）

6．極端紫外光実験施設

開催日　　平成６年８月18日

委　員　　木原　元央（高エネルギー物理学研究所教授）

石井武比古（東京大学教授　物性研究所）

◎小杉　信博（分子研教授　極端紫外光実験施設長）

岩田　末廣（分子研教授）

宇理須恆雄（分子研教授）

鎌田　雅夫（分子研助教授　極端紫外光実験施設）

各ワークショップでなされた議論及び検討内容は報告書としてまとめられ、所長に提出された。各ワークショップの報告を次に掲げる。

4−2　電子計算機センター

目次

1．電子計算機センター点検・評価作業の背景
2．作業の実施方法
3．点検・評価の報告

1．電子計算機センター点検・評価作業の背景

分子科学研究所では設立の当初より電子計算機が研究遂行上果たす役割が高く評価され、付属施設として計算機センターの設置が準備されていた。実際、研究所設立直後の1977年には計算機センターが発足し、諸熊教授がセンター長に着任した。「分子科学研究所電子計算機センター　センターレポートNO.1（1990年８月発行）」（以後この冊子をセンターレポートと呼ぶ）の諸熊センター長の「発刊によせて」によれば、本計算機の利用は、

1)　実験データの収集解析
2)　分子科学プログラムライブラリの開発と整備
3)　分子科学データベースの開発
4)　広域大学間ネットワークへの参加
5)　事務処理
6)　基礎生物学研究所と生理学研究所の計算処理
7)　大学の計算機センターでは出来ないような分子科学の大規模計算

である。特に最後の項目(7)に重点を置くことが表明されている。計算機をめぐる環境は当時と大きく変わっているため、たとえば、項目(5)のためには計算機センターの計算機が使われなくなってすでに久しいように、上記の項目はそのまま現在適用できるわけではないが、項目(7)が最重点であることは変わっていない。

初代の計算機HITAC M180（２台）のシステムが導入されて以来、計算機センターの計算機は所内の研究者に加え、所外の分子科学研究者にそのリソースを公開してきた。当初より、所外委員を含む計算機センター運営委員会による審査によって所外からの申請は審査され、計算機時間が配分されてきた。

初代の計算機が導入されて以来すでに15年余の歳月がたった。この間、表１にまとめたように計算機センターの保有する計算機は変遷してきたが、電子計算機のハードウエア・ソフトウエアの両面の発展・変化も著しかった。ベクトル型のスーパーコンピュータの出現、パーソナルコンピュータの出現と急速な発展、ワークステーションの出現と性能向上・急速な利用の拡大、超並列計算機の出現、移植が容易で広くソースが公開されたオペレーティングシステム(OS)としてUNIXの利用の拡大、さらには全世界を結ぶINTERNETの世界の成長とLocal Area Network の利用の日常化など数え上げると切りがない。「ワープロ」が普及し、日本語入力が日常的になったのもこの間の出来事であった。

分子研電子計算機センターはこの著しい発展・変化の中で、どのように発展してきたのか？　電子計算機センターの計算機は、1994年１月、スーパーコンピュータが従来のHITAC S820からNEC SX−3に置き換えられた。さらに1995年１月には汎用機HITAC M680が複数の計算機から構成される汎用計算ネットワークシステムに置き換わり、OSも完全にUNIX化された。本点検・評価作業は、単なる大学設置法による「点検・評価」としてだけではなく、この変化の時期に過去と現在の分子研計算機センターの活躍ぶりを点検・評価し、次の時代のための将来計画を作り上げる基礎とするための作業の一つである。

表１．分子研電算機センターにおけるCPU能力の変遷

年	機　種	スカラー性能（MFLOPS）	ピーク性能（MFLOPS）
1979	HITACHI M-180（２台）	3.0	36
1980	HITACHI M-180	1.5	18
	HITACHI M-200H	4.0	48
	合　計	5.5	66
1982	HITACHI M-200H（２台）	8.0	52
1986	HITACHI M-680H	16.0	16
	HITACHI S-810/10	6.8	315
	合　計	22.8	331
1988	HITACHI M-680H	16.0	16
	HITACHI S-820/80	18.0	2000
	合　計	34.0	2016
1991	HITACHI M-680H（+）	32.0	32
	HITACHI S-820/80	18.0	2000
	合　計	50.0	2032
1994	HITACHI M-680H（+）	32.0	32
	NEC SX-3/34R	108.0	19200
	合　計	140.0	19232
1995	IBM SP2（Wide 24台）	131.8×24台	288.0×24台
	IBM SP2（Thin 24台）	52.9×24台	118.0×24台
	NEC 高速演算	36.0	300
	NEC SX-3/34R	108.0	19200
	合　計	4576.8	29244

2.　作業の実施方法

2.1 委員会の構成

点検・評価委員会は所外委員として、

平　尾　公　彦　　教　授（東大工学部）

舘　脇　　洋　　教　授（名古屋市立大学計算機センター）

所内委員として、

小　杉　信　博　　教　授（極端紫外光科学研究系）

岩　田　末　広　　教　授（計算機センター長）

青　柳　　睦　　助教授（計算機センター）

によって構成され、８月８日に委員会を開催した。

この会議では次項のアンケートの結果に加え、次の項目も検討した。

(1) センターの開発業績

(2) センターの事業

(3) センターの利用に関連して

2.2 アンケート

この委員会に先立ち、計算機センターの前・現教職員と前・現計算機運営委員（分子研関係者のみ）にアンケートへの回答を依頼した。　設問と共に現センター関係者以外の回答の要旨を以下にまとめた。

分子科学研究所　計算機センター

過去・現在・将来についてのアンケート　1994年7月

運営委員経験者および元センター教職員による回答（38人中19人）

(1) 分子研計算機センター設立の当初目標は何だったのか

(a) 国内全体の観点

- センター設立当時、東大、京大の計算機センターには大型汎用機が導入されていたが、使用料金が高いことやファイル容量の制限があり大規模な分子科学計算を実行できる環境ではなかった。このような状況下、大容量・大CPU時間使用を可能にして分子科学計算の水準向上を目指す上で必要な施設だった。
- 分子科学計算のためのプログラムライブラリや分子科学データベースを構築し利用者に公開すること、そしてこの分野において優れたプログラムを開発できる環境をユーザに提供するなど、分子科学計算及び理論分野を飛躍的に発展させる上で必要な施設だった。
- 分子科学の研究者、中でも当時比較的研究者の多い分子軌道（MO）関係の研究者に優れた計算機環境を提供することが主な目的であったと思う。私はそれ以前から分子動力学シミュレーション（MD）を始めていたが、東大の計算機では費用と計算時間がかかり、事実上論文にできるような計算はほとんど不可能に近かった。そのような状況の下で分子研の計算機が使用できるようになり、論文をかける仕事ができるようになった。
- わが国における計算化学の育成、分子科学研究に特化した計算機利用の振興を計り、大型分子科学計算に関する研究の中核となること。この目的のため常に最高水準のハードウエアおよびソフトウエアを導入すること。
- 広域大学間計算機ネットワークへ参加し、国内の分子科学研究者が大学等から分子研の優れた計算機資源を利用できるようにすること。
- 所外の分子科学分野の実験家が実験データの収集や解析を行うために必要な、計算機資源やプログラムライブラリ・データベースを利用できる基盤施設として必要なセンターであった。

(b) 研究所内の観点

- 大学の研究室ではできない規模の研究を行う。国内の分子科学研究に対するリーダシップをとり、分子科学のCOEとしての分子研の研究水準の向上を図る。
- 理論研究系を中心とする理論化学研究において世界的ピークを出すために必要な計算機設備だった。
- 機構内の観点としては機構全体の計算機環境の整備があったと聞いています。また所内の実験研究者に対しても計算機環境を提供するという役割を担っていたと思います。
- その他、「(a)国内全体の観点」と同一内容の回答。

(c) それらはどの程度達成されたか

- 高速コンピュータの導入、大容量ファイルの導入、プログラムライブラリの充実など、計算機環境は国際的レベルに達し、当初の目的は達成したと言える。しかしながら、アルゴリズム開発、プログラム開発、プログラミング環境の充実、ソフトウエア開発と理論の連係といった基礎技術的な面での飛躍的な進展が乏しかったように見受けられる。例えば、小原積分、北浦ポテンシャル、藤永・酒井のモデルポテンシャルなどなど、優れた理論・方法論が提唱されてきたが、使いやすいソフトウエアの形で普及するまでには至っていない。

- 大学の研究室に16ビットパソコンしか無かった時代にab initio MO計算を行える唯一の施設として果たした役割は非常に大きい。またこの10余年の間で、MD/MC（モンテカルロ）計算分野の進展は分子研の計算センターなしには考えられなかった。
- 大いに達成されたと思う。歴史的に見て、分子科学、さらに化学全体へのセンターの影響は国内のみならず、世界的に大きい。他の国立研究機関に比較して多大の成果を達成したと言える。
- 分子科学における計算機の環境を世界並にした役割は大きいと思う。特に初期においては、他の大学などの計算機が、MOやMD計算を行うには余りに貧弱な環境であったから、分子研の計算機センターの相対的な役割は極めて大きかった。
- 分子研計算機センターはできてから15年程度たちましたが、分子科学計算の普及・発展、また化学・物理研究者間の人的交流などに非常に貢献してきたと思います。

(2) 分子研計算機センターの働きを点検し、評価するとき、

(a) どんな観点に立つべきか

- 我が国の理論化学研究にどんな役割を果たしたか。1研究室では出来ない計算機実験を可能にしてきたかどうか。研究所内、国内、国際的にどんな役割を果たしたかを調べるべきである。
- 計算化学として世界の頂点に立つ研究をサポートできるか。またそれをencourageできるか。
- 国際的視野の中でわが国の分子科学の計算環境のどこに不十分な点があるか、その中で分子研センターが解決を受け持つべき点はどこかを明確にし、その立脚点からの評価を行う。
- 利用者から見た使い易さの立場、センターから見た運営上の立場、両者のバランス、所内外の使用量割合の適度、審査規準、優れた研究の支援、計算機メーカの支援・対応体制。
- このセンターを利用して行われた研究による論文の量と質についてはcitation indexが参考になるであろう。
- 人材の育成に対する貢献を評価できないでしょうか。分子研から多くの人が育って外にでていますが、計算センターや理論系の人ばかりでなく実験系の人間もその業績には計算センターが一役買っているはずです。
- 分子科学分野では唯一の共同利用計算機センターであるとの観点から評価すべき。
- 現在貴センターで考えておられる線で良いと思います。強いていえば、貴センターは「分子科学に関する計算」というユニークな使命と目標を持っておられるので、他のセンターとの比較もさることながら目的を同じくする外国のセンターとの比較があってもよいと思います。また細かいことですが、全国の分子科学研究者によるセンターの利用状況を調査されるとき、特に地方の小さい研究機関（小大学等）に所属する利用者の実態をきめ細かく調べていただければありがたいです。

(b) どんな事項を調べるか

- 大型計算の規模、計算機稼働率。計算機能力の拡大状況。
- 分子科学計算の質を評価する。
- 計算サービス、ソフトウエア整備の充実度、国内の分子科学データベースのセンターとしての役割。
- ライブラリプログラム、データベースの開発状況と利用状況。
- 我が国独自の理論とその計算プログラムを開発するスタッフの充実と育成。
- 月並みではあるが、稼働時間、使用者数、発表論文数などであろう。また、備え付けのプログラム数やその使用頻度も調べることができよう。今回のようなアンケートを全使用代表者に行って定性的な評価を行

うのもひとつの方法であろう。あるいは、分子研の計算機使用者に代表してもらって、計算機を用いていかによい研究をおこなったかを分かりやすく要約して書いていただくのもよいと思う。

- 国際的に通用するプログラムライブラリがあるかどうか。国際的共同プロジェクトを組織的に維持・促進できるか。
- 歴史的な評価には、分子研センターに由来する研究成果（論文数等）、利用実績（時間数等）が適当かと思う。センターレポートから、現在までをまとめてみると相当なことがわかるはず。

(c) 国立大学共同利用計算機センターとの比較の仕方・観点

- プログラムライブラリにしても、網羅主義ではなく、特定分野に特化した強力なソフトウエアを利用可能にすること。International Centerとして、研究者の交流を国際的に促進すること。国内の個々の研究者を組織化する仲介役・調整役を果たすこと。計算機メーカなどとの共同研究も、場合に応じて積極的に行う。これらが可能かどうか。
- センター最大の利点は分子科学に特化したシステムの構築が可能であること。それに伴う最大の問題は、センタースタッフが少なすぎること。また分子科学専用システムの構築には膨大な労力を必要とするが、そうした労力を誰も評価しないこと。
- 大学内センターでは実行不可能なジョブを分子研で実行出来る点が重要。最近は、Work Stationの性能向上が著しいので、センターは Big Project Orientedであるべきであろう。
- 底辺を広げユーザ数を増やす選択をしてきたのか（大学計算センター）、ごく少数でも研究のピークを出す選択をしてきたのか（例えば、高エネ研スーパーコン）。
- 役割が違うから、比較するのはあまり意味がないように思われる。分子研は主として分子科学に関することの計算に用いられ、国立大学の計算センターは広く一般の計算を対象としている。前者は研究に用いられ、後者は教育にも用いられる。前者はユーザーに課金を課さないが後者は課す。使用人数からいえば、後者の方が多いと思われる。これらの現状から、我々は、自分の大学（国立大）の計算センターは情報伝達の中継点およびそれに関するサービス機関として利用しているのみである。もし管理者として比較することが要求されているとすれば、計算処理量（CPUタイム）や、使用者数などであろう。そこからの成果、例えば論文数などは分子研では把握できても、大学の計算センターでは不可能であろう。分子研センターの評価はできても、大学センターの評価は容易ではないので、比較は困難であろう。

(3) 分子研計算機センターは現在どんな役割を果たしているか

(a) 国内の分子科学研究において

- 相変わらず極めて重要な役割をしている。大型計算の機会を作っている。少なくとも分子科学で計算機が主要な役割を占める分野で中心的な役割を果たしている。大規模（CPU時間、メモリー、ディスク容量において）な分子科学計算（MD、量子dynamicsなど）が実行できる環境を提供。また計算化学の入門者、WSを持たないグループがWSで実行可能な程度のMO計算を行う環境を提供している。
- WSが普及し、研究室レベルでかなりの計算ができるようになった現在では、設立当初のような先導的役割は影が薄くなったように見えるが、この状況に決して甘んじているべきではない。マシーンのダウンサイジングは結構であるが、計算規模さえもダウンサイジングするようなことがあってはならない。しかしながら、昨今では、WS でできるような研究だけするというような風潮が生まれつつある。この状況を打破するため、センターは指導的役割を果たすべきである。

- 所内、所外を問わず、先進的なユーザの大部分は、自分のWSで計算をしているのではないか。今の分子研センターは自分でWSのセットアップが面倒なユーザや、WSを買えないユーザが多く利用しているのではないか。もちろんこうしたユーザを排除すべきではないが、すべてこのようなユーザだとセンターの発展は望めない。センタープロジェクトの強化が必要。
- ワークステーションの高速化、普及によって、ニーズは変化してきている。たとえば、小型ルーティン計算の大部分は、ワークステーションを自分で充分持っていれば、そこで実行できるようになっている。一方、超大型計算のニーズも増えている。センターの役割を再検討する絶好の機会である。
- 現在は大規模計算と比較的非専門家の人達のプログラムパッケージ提供による計算。
- 分子科学以外の分野の方がオリジナルな研究がなされている。量子化学ではGaussian90（とその類）の利用者を増やしている面が目立つ。計算化学・計算物理と呼ばれる分野の発展に大きく寄与している。
- 現在は殆ど利用していませんし、周囲にもユーザーはおりませんので。
- 設立当初から見ると、利用者のレベルも利用形態も所内・所外の両面で著しく変わってきたと思われます。細かい事情はよくわかりませんが、大筋でいえば研究者の期待をかなりよく満足しているように見えます。すくなくとも、不平・不満は私の耳には入ってきません。あえて言えば、「利用者に分子計算の専門家が多いために、外部の非専門家のしかも初心者が使いにくい」という声を時折聞くことがあります。最近では地方の小さい大学でもワークステーションでかなりの計算が可能になり、今後はそれをネットワークで接続して使いたいという状況になるでしょうから、初歩的な利用者にたいしてセンターの誰がどの程度に協力し指導できるのか、またもしそのような機構があるのなら、それを利用者にどのように周知されるのかが問題でしょう。

(b) 研究所内の研究において

- 大型計算についてはやはり重要な役割をしている。特に反応動力学など。
- 上記国内の分子科学研究と同じ傾向がみられる。
- 研究所内の利用は理論系を除いては、非常に少ない

(c) 研究者の要求・期待をみたしているか

- 大部分満たしている。今後、研究者の要求を集約する方法を考えるべきである。
- 一応充たしている。しかし研究環境の雰囲気という点では、以前の方がよかったようにも思える。
- 本年当初から、新しいスーパーコンピュータが導入され、いろいろ不慣れな点が管理者・使用者双方にあるので現在判断するのはあまり適当でないと思うが、総じて研究者の要求・期待を満たしていると思う。
- かなりよく満たしている。しかしSX−3については暫く時間をおかないと判定できない。
- 研究者の要求・期待が平凡になっているように思える。飛躍を促す様な何かをする必要がある。この点、突っ込んだ調査が必要。
- 計算能力の点で不満がある。以前に比べて、計算能力が落ちている点も一部にはある。例えば、10 GBを越えるような大きな作業用ファイルをもっと容易に使えることが望まれる。また、スーパーコンピュータについては、スカラー演算性能の向上が期待されている。大規模並列コンピュータの導入も検討すべき課題である。
- 少なくとも所内実験研究者は満足していない。
- 最近は、分子研計算機センターに大きな期待をしていない。

(4) 分子研計算機センターの今後の役割は

(a) 国内全体、

- 研究者個人、研究室レベルの発見・進歩を分子研が仲介役となって、国際的レベルに発展させることができれば理想的である。
- Gaussianを流すだけのセンターであってはいけない。新しいプログラムを作ることが、自分の考えを実証することになると思うのだが、その労力は大変なものである。いくら計算機が速くなってもプログラムを作る方法自体大きく変わってはいない。新しいアイデアを実証するためのプログラムを作ることを助けるような、環境を提供できるセンターであって欲しい。
- 大型計算を中心に、計算技術、手法の交流もできるセンターに。普通の研究室では実施できない大型計算専用を指向すべき。
- 今後も益々重要であり、今は空気のようにそこに存在するから意識しないのであって、これがなくなれば大変なことになる。
- 依然大きな役割をもつ。真に大型高速演算可能なセンターとなるべき。計算内容による資源の使い分けが大事。
- 特色ある役割を果たすことが存在意義を主張できる最大のポイントになるでしょう。
- 互いに矛盾するかもしれないが、超大規模計算が可能な場として及び入門的計算の受入れ先として機能してほしい。
- 計算の素人としては今後は計算機時間の供給者としてよりソフトの開発・供給者あるいは教育者としての役割を期待します。
- 初心に帰って、何を今後10年間、分子科学計算、理論化学計算としてやるべきか考え、それに沿ってハードウェア・ソフトウェアの環境を整備する。特定の分野でよいから分子研の計算化学の世界的なピークを出す。
- 当初の目的のように、大規模な分子科学計算のための最高水準の計算機環境を用意すること。ソフトウエア研究開発の先導を果たすこと。分子科学分野のデータベースセンターをかねること。情報化学の先導を果たすこと。分子科学に適合した高速計算機環境の開発。これらの目的のために、在任中に計算化学部門、情報化学部門、電脳開発部門をセンターに設ける拡張案を提案しました。
- WSではできないような大規模の計算に対応していく役割は益々重要になってくる。MDでは特に計算機の並列計算能力が必要になってくる。超並列計算機への対応が立ち後れているのではないかと思うが、これはMDを行うものにとっては将来心配である。また、ソフトの整備、特に国産のソフトの開発に一層力をいれていただきたい。
- 今後は“計算機”センターとしては、役割は2つに分かれると思う。最重要は、超大型計算のサポートで、ワークステーションやそのクラスターでは事実上不可能ないわゆる“Grand Challenge”的計算の推進である。一般の利用申請の他に、“超大型プロジェクト”の申請があってもいいかもしれない。一方、ワークステーションの普及はまだ充分ではないので、ルーティン的計算のCPU時間供給の役割も見逃せない。ネットワークの普及により、この需要もますます増えると思われる。さらに、“計算機”センターから“計算”センターまたは、“計算化学”センターとしての役割、すなわち、新しいプログラムやソフトウェアの開発、パラレル化プログラムの開発、数値計算法の開発など、“ソフト”面でのリーダーシップが要求される。これは現スタッフだけでは無理なので、センターに新しい教授、助教授などの拡充が必要となろう。
- 計算センターでなく、計算化学センターとしての地位と役割を確立するべき。

- 分子科学の立場で考えると、「電子計算機センター」と同時に、あるいはそれから脱皮して、「分子科学情報センター」の側面を強めていくことが考えられるでしょう。すなわち、分子科学で今後期待される方法論と、それを実践するための有力なソフトを結集し、全国あるいは世界の研究者への発進基地となり、また指導と協力を行うことも考えられましょう。たとえば、ネットワーク、ソフトウェア利用法のノウハウを含めた計算機利用に関する情報の交換と蓄積、ソフト開発など、あるいは分子科学関係のデータベース作成なども含まれるかも知れません。その目的には、パソコン通信のフォーラムのような形式が向いているでしょう。しかし、貴センターにこのような役割を求めるのは、もちろん人的・物的な基盤なしにはありえないことです。特に、センターのスタッフがどれだけ充実し、どれだけの余裕を持てるか、そのような仕事に意義と興味と生きがいを感じる人があるか、もし存在したとしても、その活動の意義が十分に評価され、人材として育てられるか、など多くの難問がありそうです。

  今日、計算機事情は、確かに大きく変化しています。一研究室でもワークステーションをかかえ、大きな計算もできるようになりました。計算機はCPUスピードの高速化だけでなく、クラスター化、並列処理など新しい技術がどんどん取り入れられています。しかし、新しい理論の構築、新しい計算方法の開発が理論計算において一番重要なこととはいつの時代になっても変わらないと思います。その新しい理論の考え方や計算方法が計算機の進歩に依存したものになることは、今後ますます増えると考えます。ワークステーションの進歩の激しさで、研究室で購入してもすぐまわりと比べると1年あまりで遅い計算機と化してしまう。だからといって、次から次に新しいワークステーションを購入するには、資源の無駄でもあるし、また買い揃えられる研究室も少ないでしょう。したがって、どこかに最高速機種のワークステーションを揃え、外部利用者に使えるようなシステムを常に作っておくことも重要です。この意味において、分子計算機センターの必要性は今後も全く変わらないであろうと思います。逆に、利用のための管理技術がますます大変になることが予想されますが....。
- 計算機利用目的はいくつかに分けることができると思います。思いつきで分けますと1. 既存のプログラムを用いて、他ではできない大きな計算（予算あるいは主記憶容量などのため）をし、新しい物理化学現象を明らかにするもの。この目的が計算機センターの利用申請として、一番多いと思われる。新しい物理・化学が明らかになれば、これだけでも十分に意味があると思います。300時間、400時間と申請しても、おそらく時間はたりないであろうと思える計算がますます増えています。こうした計算時間の申請として他とは違う対応が必要と思われます。2. 既存のプログラムと、それにオリジナルな考え方、方法をすこし加味したもの。3. 独自の理論を基に、新たなプログラムを作成し計算をするもの。4. 実験結果の解釈の助けとして、既成のプログラムを利用し、計算結果がほしいためのもの。のようになるかと思います。やはり、計算機センターとしての役割のひとつは大きな計算を無料でできることでしょう。今後も、それに対応していけるシステムが計算機センターに必要と思います。その意味で、常に最先端の計算機システムを導入し、利用者の便、そしてよい研究環境を整えることです。

(b) 研究所内、

- センターが所内の計算機関連の業務を何でも引き受けるのはよくない。もちろん所内へのサービスのために作られたものであるが、何も考えず質問する人と、その対応に追われるスタッフという図式も、このあたりで終りにした方がよいのかもしれない。もしできるのなら分子研より独立も1つの選択である。
- 所内外の時間配分率及び料金の見直し。大型プロジェクトの奨励を進めるべき。
- 先導的研究のための環境をつくるべきである。計算化学のnew fieldを開拓すること。
- 所内でお決めになること。理論系と協力し、新しい方法論の展開を。

- 理論系以外では、機構のネットワーク環境の整備を行う。実験データのコンピュータ処理などのアドバイスをする。

(c) 国際的。

- もっと多くの外国人研究者が利用するようになることが望ましい。東欧圏、旧ソ連には優秀な頭脳を持ちながら、国家経済事情により活躍の場が限られている研究者が多い。そういう人々を積極的に招致し、快適な研究環境を与え、共同研究を促進できれば、相互の利益にもなる。
- これまで同様、大学等との共同研究の形をとって海外からの研究者を受け入れてほしい。
- Computer Chemistryの国際的なコンファレンスを毎年開くとよい。
- アジア諸国にも条件付きで開放することを考えても良い。
- 外国から、PhD 研究者を招いてソフトの開発にも力をいれる。国際会議を開いたり、援助したりする。
- 分子研センターは国際的な役割も果たすべきだと思う。特に、アジア各国においてスーパーコンピューティングのための設備は充分出はないし、ワークステーションの普及も充分ではない。"国際施設利用"のわく等を作って、積極的に申請を受付てはどうか。また、"国際共同研究"なども推進していいと思う。実験的研究に比べ、ネットワークを使って計算できる計算化学は、この点有利であり、成功すると思われる。
- 国際的にopenすべきでない。今は日本の計算のレベルを上げることである。
- 上記(a)が達成できれば国際的な課題はなし。
- 徐々にオープンしていくべきであると思うが、慎重に。すぐにパンクしてしまう。アジア支援の視点を持ちたい。

(d) 計算機時間を配るNational Centerとしての分子研計算機センターの役割は終わったか

- 終わっていない。今後、計算の規模が拡大して行き、研究室内のワークステーションの限界も見えてくるように思う。
- 今後益々重要となる。EWSでやれる仕事は限定されている。今後は小さいJOBを制限して（EWSでやらせ）巨大JOBを中心にすれば良い。外部に配分することも重要。
- 計算機資源を多くのユーザに細かく分配するのではなく、グループにまとめて、集中投資すべき時期に来ているのではないか。研究者を10程度のプロジェクトグループにまとめた上で、大量の計算機資源を利用させるようにしてはどうか。センターが指導的役割を果たすべき点はまだまだ多い。
- 終わったとは思わない。計算内容による資源の上手な使い分けを進めるべき。一方、ブレークスルー的研究プロジェクトの奨励とそれを可能にするセンターに。ユーザー、センター、メーカの3者の連係による新発展を目指すこと。
- WSではできない計算ができる環境を提供すべきで、そういった観点では終わっていない。
- そうは思わない。例えばMD計算への関心は化学工学や機械工学などなどへも拡がっている。
- 国内には常に潜在力を持ちながら計算機環境に恵まれない部分があるので、この役割は当分なくならない
- 全体の依存度は減少しているかもしれないが、決して終わっていない。例えば、大規模の計算を行うのにあたって、我々にとって分子研の計算機以外に考えられないし、これから益々大規模計算が必要になってくると思う。例えばMDの分野ではCar-Parrinello法や生体分子系への適用などより大規模な計算（計算時間と記憶容量）が益々盛んになってくることは確実である。
- 難しい質問。従来の様なやり方には再検討が必要。

- 計算機時間を配るだけならば、役割は終わったと思う。

(5) 情報処理研究・サービスへの関与の仕方。

(a) 研究所内のネットワーク管理・情報処理サービスへの関与の仕方。

- 必ずしも計算センターが直接関与しなくてもよいのではないか。
- 別組織でやり、センターは研究中心でやるべき。
- センターのスタッフは、限られた人数の下でセンター業務をこなし、研究業績もあげていかなければならない。ユーザの増加に伴って、事務処理も増加して来ている。事務処理の簡略化が必要である。利用申請・更新の受理・審査のプロセスを抜本的変更を検討してはどうか。
- 研究所内のネットワークの管理、運営に責任をもち、情報処理サービスの中心としての役割が望ましい。
- 全面的に関与すべきである。

(b) 国内のネットワーク管理・情報処理サービスへの関与の仕方。

- 現在のままで良い。ネットワークに関しては、分子研の問題ではなく、各大学の問題であることが多い。
- 今まで良くサービスして戴いたと感じている。我々の場合、ネットワークに問題があったがそれは我々の側の責任で分子研の責任ではない。ユーザーの側のネットワークのグレードがいろいろあると思うがグレードの低いものにも対応する態勢はいましばらく続けてほしい。
- 化学研究ネットワーク構想の進展・その他機構内諸事情、人員要求等との総合的関連において、判断すべき事と思う。
- 学情ネットワークとの関連を強くしてネットワーク利用による大型計算サービスを充実させる。
- データベース（MO計算とかMD計算関連）は必要性が高いと思われる。
- 3年前大学に移った時点では学内および大学間のネットワークや検索システムが驚きというか、大学が分子研より優れていると感じた唯一の点でした。現在は事情が違っているかもしれませんが、こうした点でもイニシアティブを発揮してくれることを望みます。
- 情報処理サービスには可能な限り、関与をして欲しい。限られたスタッフで困難ではあるが、期待している。
- 計算機センターの情報化サービス、所内の情報化サービスはもちろん、種々のサービスが望まれますが、そのためにはセンターの専任スタッフを増加しなければ、無理でしょう。
- 現在、情報ネットワークの運営・管理は計算機センターと別組織で行われているが、今後ネットワークと計算機の相互依存がますます大きくなることも考え、また、スタッフの重複をさけるためにも、計算機センターが直接ネットワーク管理・情報処理サービスに関与するのが好ましいと思う。これにも、スタッフの問題がからまってくるが、技官等の拡充ができれば、積極的に取り組みたい。
- 所内と所外（国内）で区別する必要なく、全面的に関与すべきである。

3. 点検評価の報告

委員会の議論とアンケートに基づき点検評価の結果を報告する。

3.1 計算機センターの設立目標とその達成度

本計算機センターの主要な目的は分子科学関連の大規模計算の実行環境を作りあげることであった。柏木元センター助教授（現九州工大教授）が「センターレポートNo.10」で述べているように、「分子研の当初の計画では、計算機システムは所内向けで中型規模という構想」の時期もあったようであるが、土方（当時電通大）教授や諸

熊教授の努力によって、設立の当初より日本全体の分子科学研究のための計算を実行するためのセンターとして出発した。外部評価委員やアンケート回答者の多くはこの設立目標の設定の歴史的な意味を高く評価しており、この目標もかなり高い水準で達成されたと認めている。実際、コストの面でも、また使えるメモリーやディスク容量の面でも国立大学共同利用計算機センターでは、ほとんどの分子科学関連の大規模計算を実行し成果をあげることは不可能であった。本センターの設立と利用の所外への公開によって初めて、分子科学の分野の計算科学が可能になった。

表2はセンター設立直後の1980年度と、最近の1991年度と1992年度において、計算機利用実績点数と件数を研究分野別に集計したものである。設立当初はほとんどが分子軌道法関係（原子・分子の電子構造理論計算）であったが、分子動力学と反応動力学関係はセンターの発展とともに著しく伸長した。分子動力学分野の二人の所外委員経験者は、わが国におけるこの分野の発展は分子研計算機センターなしには考えられないと答えている。反応動力学の利用実績は最近の数年間特に拡大した。分子軌道法（量子化学）計算の分野では、計算機センターの利用者の論文は世界的に見ても大きな割合を占めている。量子化学計算の論文の文献データーベースQuantum Chemistry Literature Database（QCLDB、これについては後述する）の1993年版には2747件の論文が採録されているが、一方、「センターレポート1992-1993 No.14」において報告されている利用者の論文（282報）のうちQCLDBに採録される分野の論文は89報におよんでいる。表3はQCLDB論文採録数とセンターレポートに報告されている論文数の経年変化である。図1は、1987年までであるが、QCLDBに直接あたって同様の調査をした結果である。量的な観点だけではあるが、分子研計算機センターの世界的な位置を見る一つの見方を提供する数字である。

無人運転を当初から実現したこともあって、センターの計算機の稼働率は設立時から現在に至るまで非常に高く、通電時間ではなく実際にjobが走っている時間を見てもほとんど24時間x運転日数で近似できるほどであった。

結論的には、分子科学研究所の計算機センターがその計算資源を所内の利用者にとどまらず所外に広く利用を公開したことは、国立大学共同利用計算機センターでは実現できない計算を可能にして、わが国の分子科学関連分野の計算科学の発展に大きく寄与した。

計算機センターの目的の中のもう一つの大切な項目は、分子科学計算のためのプログラムライブラリーの構築とプログラム開発への支援、データベース開発であった。3.4.3で述べるように、センターは継続的にこれらの事業を進めてきたが、分子研センター発の世界に広まったソフトウエアの開発は多くはない。もっともこれは計算機センターの責任というより、この分野の研究者の問題ではあるが。そのなかでも、大野公男（当時北大）教授を中心としたQCDB（Quantum Chemistry Database）研究会にはセンターのスタッフも積極的に参加すると共に、予算的にも支援する体制をとり続け、現在ではこの会の制作するQCLDBは、世界の量子化学者のみならず広く化学・物理学研究者の必需品に成長している。

表２．計算機利用実績点数と研究分野

	No.2 1980.4 - 1981.3		No.13 1991.4 - 1992.3		No.14 1992.4 - 1993.3	
	CPU	件数	CPU	件数	CPU	件数
合計	1,719,915	179	5,345,945	268	5,526,498	263
分子軌道法	1,268, 890 (73.8%)	103 (57.5%)	3,225,185 (60.3%)	129 (48.1%)	3,334,006 (60.3%)	131 (49.8%)
分子動力学	138.471 (8.0%)	13 (7.3%)	875,185 (16.4%)	34 (12.7%)	886,016 (16.0%)	32 (12.2%)
反応動力学	43,533 (2.5%)	13 (7.3%)	389,286 (7.3%)	22 (8.2%)	566,849 (10.3%)	28 (10.6%)
固体・表面	186,981 (10.9%)	22 (12.3%)	739,794 (13.8%)	40 (14.9%)	674.304 (12.2%)	36 (13.7%)
結晶構造	42,388 (2.5%)	11 (6.1%)	74.029 (1.4%)	23 (8.6%)	42,515 (0.8%)	23 (8.8%)
その他	39,652 (2.3%)	17 (9.5%)	42,466 (0.8%)	20 (7.5%)	22,808 (0.4%)	13 (4.9%)

表３．QCLDB採録論文数とセンター報告論文数

年度	QCLDB	センターレポート
83	1134（件数）	118（件数）
84	1265	190
85	1616	185
86	1721	202
87	1637	206
88	1819	237
89	1866	223
90	1741	211
91	1952	218
92	2100	248
93	2571	229
94	2747	282

アンケートでは特に触れている人がいなかったが、分子科学の大規模計算を可能にするセンターとして時代の先端を進む計算機環境を実現してきたかという検討事項がある。新規のレンタル契約は、1976年、1986年、1994年（スーパーコンピュータのみ）、1995年１月（汎用コンピュータのみ）から開始されているが、各契約内においても適宜性能の向上が図られてきた。始めの２回の契約では当時の最高速の計算機の導入に成功している。

ベクトル型のスーパーコンピュータのセンターへの導入は、特に分子動力学計算と反応動力学計算に刺激を与えた。量子化学計算では、小原積分法の開発をもたらしこの分野の世界に貢献した。

1986年と1994年の間には、計算機をめぐる状況が大きく変化した。一つはUNIXをOSとするワークステーションの高性能・安価化による普及である。この変化に対応するセンターの動きは必ずしも迅速ではなかった。もう一つ特筆しなけらばならないことは、新スーパーコンピュータ導入に絡む「規制」である。この二つの原因の結果、新スーパーコンピュータと汎用システムの取り替えの準備期の最近の２、３年はセンターのCPU能力は相対的に低くなっていた。アンケートに指摘されているように、SX−3の導入によって使えるディスク容量の減少すら生じてしまった。特

にスカラー性能は相対的にレベルダウンしたとも言えた。幸いにも、スーパーコンピュータの契約時期と汎用計算システムの契約時期を分離したことの結果、表1に見られるように、1995年1月からは飛躍的に総合的なCPU能力の向上を図ることができた。

しかしながら、ワークステーションや最近にはパーソナルコンピュータの高性能化と研究室への普及によって、1980年代に見られたような分子研計算機センターのCPUにだけに依存した研究室はほとんどなくなっている。アンケートでは、一人の方が「計算機時間を配るnational center」の役割は終わったかという問いに肯定的にこたえられているが、他の何人かの方も従来とは異なって行くだろう答えられている。　大規模計算に重点を移すべきという意見も多く見られる。

原子・分子・固体・表面の電子構造理論、分子動力学理論、反応動力学理論及びそれらを組み合わせた理論計算はこの20年ほどの間に著しく進歩し、分子科学研究の様々な分野で多くの成功例を持っている。実験家からの要請もより具体的・詳細になり、従って計算規模もますます大きくなっている。この巨大計算の需要は、現実に増大している。計算機センターが設立されたときとは違った意味で、「大規模計算」を可能にするセンターとならなければならない。特に大切なことは、計算機センターの計算機も、ネットワーク上の計算機の一つであるということの確認であろう。metacomputingとか　network computingとか言われているように、ネットワーク上のいろいろな計算機を使いこなし、各計算機に得意な仕事を実行させて、一つの計算機を使っていたのでは、不可能とは言えないまでも時間がかかりすぎる研究を可能にする環境を提供していく必要があろう。国内ではまだnetwork回線が細く困難を伴うが、計算機センター内の計算機の中だけでも、効率が良く使いやすいnetwork computingの環境を提供し、その技術をセンター利用者に普及していかなければいけないだろう。

電子計算機をめぐるハードウエアとOSを含む計算機利用環境やソフトウエアの進歩は非常に早いので、常に最新の情報を収集すると同時に、適切な判断を下していかなければならない。

3.2 計算機センターの利用に関連して

分子研計算機センターの計算時間は、当初から所外に公開されてきた。1980年代の始め頃から所外と所内の利用比率はおおよそ6:4程度の割合になっている。計算機利用申請は、計算機運営委員による採点によって配点される制度がセンター設立当初から確立されている。所外利用者には課金をしていないが、所内利用者に対しては、1986年来課金をするようになった。分子研計算機センターが当初の目的である、全国の分子科学研究者に大規模計算の実行環境を提供し、その需要に応えることが出来たのは、一にこの制度に負っている。計算センターで実行される計算はますます大規模計算になっていくので、今後もこの方式を維持することが肝要であろう。所内利用者に対する課金も大規模計算に対応した検討が必要であろう。

分子研所内の研究者に対する計算機センターのサービスは、ほとんど計算時間の配分と計算環境の提供に限られてきた。その他のサービスとしては、所内研究者の要望により1990年3月にワークステーション（SONY NEWS）とパーソナルコンピュータ（マッキントッシュ）、1991年3月にワークステーション（SUN）を導入し、所内の利用者に公開している。アンケートの中には、ワークステーションや高性能パーソナルコンピュータの普及に伴い、それらの利用を支援する業務を行うべきであるという意見もある。

特に問題となっているのは、研究所内および岡崎国立共同研究機構内の情報ネットワークとの関わり合いである。平成5年度補正予算によって実現された新ORIONの構築・立案には、計算機センターは関与しない選択を選んだ。3.4.4に整理してあるように、センターは特に計算機利用を目的とした所内外のネットワークの接続・整備には努めてきた。しかしながら、計算機時間の利用のためではなくて、情報の交換・収集、電子メールの利用を

目的とするネットワークを計算機センターの業務の中でどのように位置づけるか議論が分かれるところであった。平成5年度にはセンターはこれらの業務に関与しないという選択を選んだが、平成６年12月から技官・助手・助教授が運営の一部に関与することになった。分子研計算機センターの所内のネットワークとの関わり合いと機構内のネットワークとの関わり合いは、別の問題を含んでいるが、ともにそれぞれ組織的な問題も含めて広く検討していかなければならない。所外と高速ネットワークで接続されていることは、計算機利用の面からも重要であるし、国内外との情報交換は分子科学研究にますます不可欠になるので、安定したネットワークサービスを確保するのにセンターは無関心でいることができない。

3.3 岡崎国立共同研究機構内の他2研究所との関係

計算機センターの目的の中には、分子科学研究所に加えて国立岡崎共同研究機構の２研究所（基礎生物学研究所と生理学研究所）の研究に関する計算を処理することも入っている。実際、そのため計算機センター運営委員会には両研究所から各１名の教授（または助教授）が加わっている。利用申請書にも申請者の研究分野として分子科学、基礎生物学、生理学の３分野があげられている。しかしながら、２研究所およびその関連の研究者による計算機の利用は当初より非常に低かった。申請点数では１%程度、実績点数では0.1%程度を終始している。最近では2研究所内からの申請はほとんどなく、関連する研究分野の所外研究者からの申請がわずかにあるだけである。その内のかなりは申請があっても実際には計算機を使っていない。また、所外研究者の課題は、多かれ少なかれ分子科学関連であり、たとえば、平成４年度において使用実績のある生理学分野の施設利用3件は生理活性分子の電子状態と動的構造の研究や分子力場法を用いた生体関連分子の振動エネルギーを計算する課題である。

すでに繰り返し述べてきたように、ワークステーションやパーソナルコンピュータの性能向上により、通常規模の計算は身近にあるそれらの計算機を使った方が能率も効率もよくなっている。このような背景と過去の実績を踏まえて、分子科学外の2研究分野の研究者と計算機センターとの関係について現実的な処置をとる時期になっていると言えよう。

3.4. 計算機センターの研究と業務

3.4.1 センターの開発業務

センターの教官の研究業績についてはここでは特に触れないが、それぞれの研究分野の理論的研究、プログラムシステムの開発と応用計算によって成果をあげ、研究系や他の施設と同様に国立大学・私立大学に助教授・教授として転出している。

専門的研究に加えて、計算機センターが大規模計算等の業務を支援するために、センターの教職員は計算機の納入業者のSEなどの協力を得て、多くの開発業務を進めてきた。

ハードウエア関連では、そもそもの始めから、計算機の自動運転（省電力のための自動停止）を実現することを条件として１号機の導入計画が立てられ、メーカーに新しい技術を開発させて実現することが出来たことは、特筆出来ることである。この技術は、単に人手のたりない分子研の計算機センターにとって必要不可欠であっただけでなく、他の機関でも広く採用されるきっかけを作ったものと自負できる。

分子科学計算の多くは、大量の中間データを生成し、それを記憶装置に蓄え再利用することを要求している。特にベクトル型スーパーコンピュータの導入に際して、高速の読み書き可能な大量な中間記憶装置が必要となった。このために、複数のdisksに同時に読み書きすることが可能なパラレルI/O方式が提案され、メーカーに実現させた。同様な理由で、スーパーコンピュータには大容量の拡張記憶装置（RAM Diskのようなもの）が不可欠であることを提案し、実装させた。これらの技術は今では当然なものとして多くの計算機に実装されてい

る。分子科学研究所の計算機センターは我が国のベクトル型スーパーコンピュータの発展の中で、ある寄与を果たしたと言えよう。

また、パーソナルコンピュータの普及にともない早期にポートセレクターを導入し、パーソナルコンピュータを端末として利用するソフトを開発し、研究所内の利用者の便宜を図ってきた。さらに、メーカー側のユーテリテイソフトの開発の遅れを補う形ではあるが、磁気テープ取り扱いのユーテリテイ（MTM）や出力ファイル編集ユーテリテイ（SOM）なども設計し、開発させている。

グラフィックプログラム（KORIN）、動画プログラム（MOL-MOVIE）などもセンターの教職員を中心とした開発であった。

センターは、データーベースの作成を協力・支援してきた。世界中の量子化学関連の研究者には不可欠となっているQuantum Chemistry Literature Database（QCLDB）はその設計段階からセンターの教職員が関与し、その後予算の面からも支援している。現在では、他にQuantum Chemistry Basisset Database（QCBDB），Force Constant Database（FCDB）の作成も支援している。

3.4.2 センターの出版物と研究会開催

センターは定期刊行物として「速報」を年に数回、「計算機センターレポート」を年に1回出版してきた。「速報」は1979年から1988年までは年に6回定期的に発行され、システムのupdate情報や新しいライブラリープログラムの報告を利用者に広報してきたが、その後少し不定期になり、1993年には2回しか発行されないまでに至ってしまった。教職員の激しい移動とシステムの導入準備に追われていたとしても、今後このようなことがないように注意をしなければならない。現在はネットワークを通じて最新のニューズを読むことができるようになっているが、出版物としての「速報」は今後とも必要度は変わらないであろう。

「計算機センターレポート」はセンター自身の年間報告に加えて、計算機利用者の前年度の利用実績と利用研究報告、論文リストを掲載している。この「レポート」は次年度の利用申請の審査の際にも、運営委員によって適宜利用されている。

センターは、計算機のシステムの更新時などに「利用の手引き」を発行してきた。これは、分子研計算機センターに特有な環境を説明することが主要な目的の「手引き」であり、一般的な初心者向けのマニュアルではなかった。HITAC時代においても、各種マニュアルのon-line化には早い時期から取り組んできた。OSのUNIX化に伴い、on-lineマニュアルは一層完備されるが、センター独自のものもon-line化されるのが好ましい。UNIX化によって、計算機の利用の仕方や使い勝手がかなり統一されはするが、計算機システムによって運用の仕方が微妙に異なり、その設定も比較的頻繁に最適化されなければならないので、「利用の手引き」のupdateの必要性は今後も下がらない。

センターでは、現在まで、外国人向けの英文マニュアルを特別には準備をしていない。一部は計算機納入会社の英文マニュアルだけを準備するだけであった。利用者の発表論文の中で分子研計算機センターの利用が触れられていることによって、計算機センターの活動は世界的に広く知られているが、計算機センターの成果の報告も、これまで特別に英文で国際的には行っていない。

センターでは、1993年まで毎年9月に、計算機センター利用者（外部）の成果報告会を開催してきた。これは、特に長期にわたる大規模利用者の研究成果を運営委員を中心に討論をする場であった。長年この機会に、他の利用者も計算機利用を兼ねて来所し、討論に参加してきたが、最近はほとんどの利用者がネットワークを通じて計算機利用しているので、参加者が激減し、討論会の形をなさなくなってきたので、1994年より中止している。利用実績を点検する方法は、これで「センターレポート」への報告と論文リストだけになった。今後、特に大規模利用者の利用成果をどのように点検・評価するかを検討する必要があろう。

センターはワークショップを定期的に主催してきた。特に、スーパーコンピュータの導入に伴いその効率よい利用を促進するために、1983年から1989年にかけて毎年ワークショップを開催し、その報告集を発行してきた。このワークショップには分子科学研究者外の計算機科学研究者やメーカー側の研究者・開発者も招き、実用的にもまた互いに情報の交換などに有用であった。しかしながら、最近の数回のワークショップの報告集は発行されていない。技術的な交流を定着させるために報告集を発行し、利用者の便にしなければならない。

3.4.3 プログラム開発、プログラム収集とプログラム相談など

計算機センターはプログラムの開発を促進するための支援も行ってきた。GAUSSIAN serires, HONDO, MOPACなど世界的に広く使われているプログラムの移植だけでなく、JAMOL4, KOTO, IMSPAC, IMSPAK、SACCIなど日本の研究者によるプログラムの開発にも関与してきた。1994年までに分子科学関連の158のプログラムがセンターに登録され利用可能な状態あったが、M680の撤去と新しい計算機システムの導入によって、利用者のなくなったプログラムを廃棄し、新しいライブラリープログラムの整備をはじめなければならない。

また、プログラムライブラリーの充実と共に、それらのプログラムの検索・管理するシステムも必要となり、FLIB, SLIMなどが作成され、一般利用に供された。システムのUNIX化に伴い、これらのコマンドに対応する処理は、簡単なスクリプトコマンドで実行することができるようになる。

利用者の便宜を図るために分子科学分野や数値解析のプログラムの収集も行ってきた。特に、名古屋大学の二宮教授らによって開発されたNUMPACは広く利用された。

しかしながら、最近の傾向としてこれらのプログラムを一般利用者に公開するには有料契約を結ぶことが要求されるようになってきている。NUMPACは富士通の管理下に移行したし、QCPEも計算機センターを通じてのプログラムの配布を禁ずる政策になった。公開できて、かつ役に立つプログラム群の情報の収集や実際にセンターに登録する事も大切であるが、利用者が必要なライブラリープログラムは公開できる形で購入していく必要があろう。

プログラム相談は、主に、分子軌道法計算の応用プログラムの利用方法を中心に利用され、プログラム開発の相談・経験交流は個人的レベルやスーパーコンピュータワークショップでおこなわれていた。

3.4.4 計算機センターとネットワーク

分子研の計算機を外部の研究者が利用する形態は、当初の数年間は岡崎に来て端末に向かわなければならなかった。しかしながら、直通電話回線を通じての利用から始まり、順次、東大・京大などの大型計算機センターを通じてのネットワーク利用に移行していった。所内においては上述のようにポートセレクターを研究室に配布してパーソナルコンピュータを端末とする計算機利用は1981年には整備された。分子研計算機センターの主要な目的が、すでに述べてきたように 所内外の研究者のCPUサーバーであったので、この意味ではCPU利用のためのネットワーク利用を促進する努力は、早い時期から進められてきた。

電子メール機能やその他ネットワークを通じての情報交換は基礎生物学研究所のVAXを通じてのBITNET利用が1987年頃から開始され、さらに1991年からは計算機センターに課題を持っている利用者のBITNETを可能にしている。しかしながら、世界的な流れであったTCP/IPによるINTERNET系との直接接続はかなり遅れている。

次の表は86年以降のネットワーク関係の整備の流れをまとめたものである。もちろんこれらすべてに計算機センターが直接に関与したわけではない。

86	昭和61年10月	32Mbpsの光ループネット導入
		イーサーネット導入（独自プロトコル）
		実験データの蓄積のため24時間運用のファイル
		サーバーを導入（M-680Hとの接続はTSSとIFITファイル転送）
90	平成２年３月	学情ノード名大への接続48Kに変更（N1）
90	平成２年６月	100MbpsのFDDIに基幹光ループを入替え
		TCP/IPベースに移行
		M-680HにK2000/KNET
		基生研、生理研に光ループを延長。旧ORION完成
91	平成３年１月	学情ノードを設置
91	平成３年８月	TISN（学情網利用）接続、サービス開始
91	平成３年９月	M-680HでBITNET開始
92	平成４年２月	M-680HをFDDI直結（K2000）
92	平成４年９月	端末を3020に入替え（ネットワーク接続）
93	平成５年１月	TISN（64Kbps専用線利用）接続替え
93	平成５年４月	SINET（学情網利用）接続
94	平成６年３月	岡崎国立共同研究機構全体に、
		情報ネットワーク完成（新ORION）

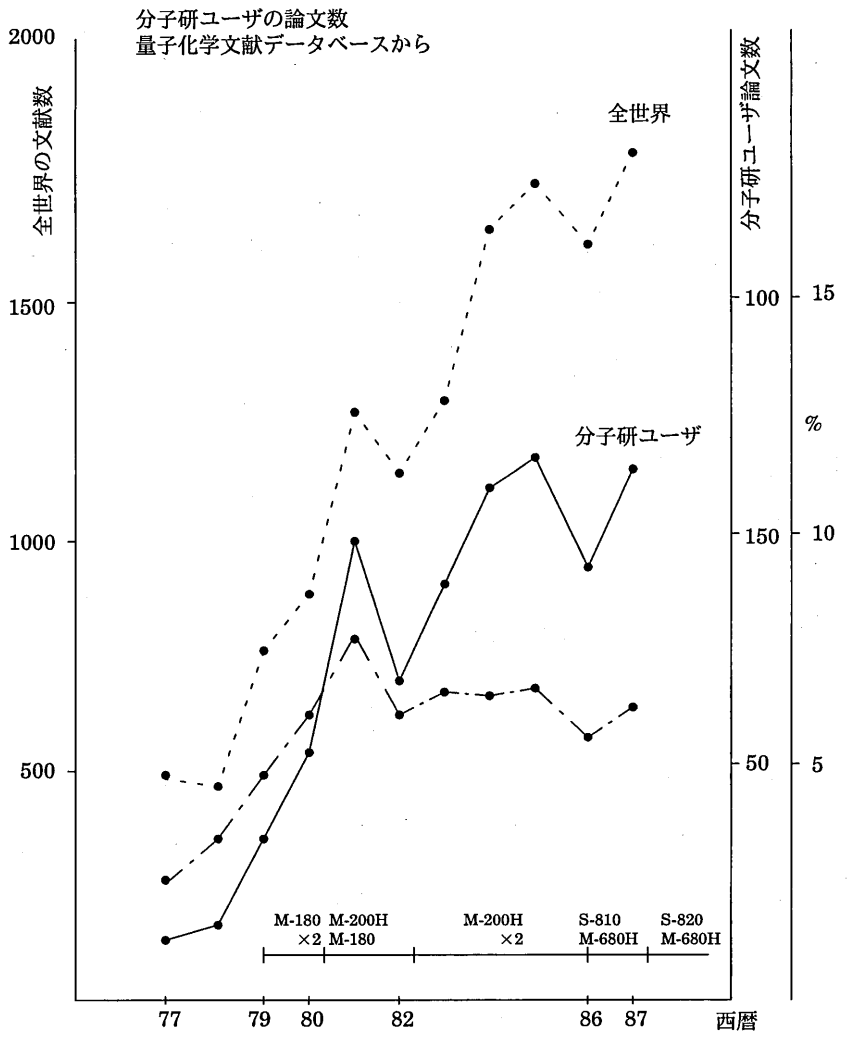


図 1　ab initio MO 法についての論文数の増加。実線は分子研ユーザとして登録されたことのある人の論文数。破線は全世界の論文数。一点鎖線は分子研ユーザーの論文数の全世界の論文数に占める割合。

4−3　極低温センター

［日　時］ 平成６年９月６日　14:00～16:15　（極低温センター会議室）

［出席者］ 委員：大嶋　孝吉（岡山大理）、鹿野田一司、高橋　　保、木村　真一、丸山　有成

オブザーバー：伊藤　光男、早坂　啓一、加藤　清則、高山　敬史

本ワークショップにおいては、極低温センターの　1.業務について、2.研究について、3.将来構想について、のそれぞれに対して、現状の説明、課題及び将来計画について検討を行った。以下に、主要な問題点を示す。

1.　業務について

本センターの主要な業務は寒剤の製造、供給、保管に関するものであり、特に重要なのは液体ヘリウムの製造、供給である。現在のヘリウムの液化機（KOBELCO LHE150）は昭和63年度に設置されたもので、順調に稼働しており、現状では今後５年間位は大きな問題はなさそうである。

液化は、つい最近まで週１回で対応できていたが、最近の需要の急増（平成５年度　38,000ℓ）に対応するため週2回の液化を行っている。さらに、供給汲み出しポートの増設、汲み出し時間の短縮もはかって対応を強化している。それでも、大口ユーザーや定期的ユーザーの需要に対応できない事態もあり、そのための対策としては液体ヘリウム貯槽の増設、液体ヘリウムコンテナー（容器）の台数を増やす事などが考えられる。

現在の日本一安価な液体ヘリウムの供給価格（平成６年度：170円/ℓ）は十分な回収システムに支えられており、今後もこの体制を維持することは勿論大切であるが、一方では運営費や容器代の増加も見込まれるので、ある程度受益者負担の原則を導入して価格の上乗せを考えることも必要であろう。

また、供給方式は現在はユーザーのセルフサービスで行われているが、一方では小口ユーザーなどは出前方式を希望している。そのためには、人員の確保も必要である。現在の技官3名は最低限必要であり、今後の運営によってはもう一名の増員も必要となる。また、操作の自動化、省力化についても今後も努力を続ける必要がある。

液体窒素に関しては、現在大変安価（45円/ℓ）に供給しており、今後もこの体制を維持すると同時に、２階ホールウエイの供給装置の大型化も考える必要がある。

2.　研究について

現在の極低温センターには助手がいないのでセンター独自の分子科学の研究は行われていない。従前は、１名の助手がいて分子科学に関する研究を行っていたがいろいろな事情で現在は欠員となっている。

極低温センター内には共同利用あるいは共同研究用の実験装置類もいくつか設置されており、それらを用いての共同研究も十分可能である。特に、液体ヘリウムが潤沢に使用できる日本では数少ない環境を生かしての実験も十分有効と考えられる。

このような観点からも、本来は極低温センターに助教授、助手の態勢が必要とされる。しかし、その際どのような分野の研究を推進すべきかという点や、研究と業務をどのように分担するかといった問題もあり、今後のセンター構想のなかで十分検討されるべき問題と考えられる。

研究装置としては、大型の共同利用装置の導入・運転の要望が強い。特に、外部ユーザーからは、分子科学分野以外の人も利用できるようにして欲しいこと、通常の大学では維持の困難な装置を設置して欲しいこと、ユーザー負担はなるべく軽くして欲しいこと、現有装置の外部ユーザーへの宣伝をもっと積極的に行うべきである等の要望があった。

3.　将来構想について

ヘリウム液化に関しては、液化機本体は今後5年間位は使用に耐えると思われるので、本体に関しては数年後の更新をめざして準備すべきであろう。

さしあたっては周辺設備（例えば、液体ヘリウム貯槽等）の増設・拡大・改造あるいは運営方式の改善を図ることによって供給増に対処できると考えられる。センターの組織や研究については、物質開発研究センター（仮称）の新設などの施設の再編構想のもとで、十分検討することが必要である。極低温センターとしては、将来的に新しいセンター（物質開発、機器センター、化学試料室などを統合した）の1セクションとして分子科学に、より有機的に寄与していくことが望ましいと考えている。

以上は、センター側としての全体的なまとめであり、以下にワークショップ当日の各出席者の生の意見を議事録の形で掲載しておく。

［議事録］

(1) 丸山センター長挨拶

(2) 伊藤所長挨拶・主旨説明

施設の問題とその対処を考える。この会での意見をもとに将来計画を練る。

(3) 丸山センター長の現状報告

(4) 現状報告のあと概ね各議題ごとに、委員・オブザーバーの別なく自由に質疑、討論を行った。――の後にその場で出されたセンター側の意見を記した。本議事録はそれらを列記した。

1-1.業務について。

① UVSORのマシンタイムにあわせ、月または金曜日に汲み出しているが、汲み出しの時間帯が確保できない時がある。

――汲み出しポートを1箇所増設し2箇所に増やした。回収ラインを太くして汲み出し所要時間をほぼ50%短縮したので、これからは十分な汲み出しの予約ができると思う。

② NMRの液体ヘリウムは2カ月に1回の割合で汲み出している。ピーク時は1カ月前でも容器の予約ができないことがある。容器を増やせないか？

――センターでは毎年1－2台増やしている。壊れてしまう容器もあるのでもう少し増やしたいと考えている。

③ NMRの液体窒素の補充が3週間に1回の割合で行う必要がある。業者に液体窒素の補充だけでなく購入までまかせて問題ないか？

――問題ない。

④ 使用量の極端に少ないユーザー、例えば2月に1回とか1月に一回程度しか使わない場合、汲み出しまで行ってはどうか？

――容器の余裕がないので困難である。

1-2.製造設備について、その将来構想も含めて。

⑤ 設備更新について

――装置の劣化だけでなく、運営方法も考慮して行うべきだ。例えば現液化機でも、液体ヘリウム貯槽・回収ガス貯蔵庫・回収コンプレッサーを増設するだけで数倍の供給が可能だ。今のところ液化機本体の劣化はみられない。また、ユーザーサービスのためにもホールウエイの液体窒素貯槽の大型化は必要と思う。

⑥ 液体ヘリウムは今の何倍供給できるか？

――ピーク週1,500ℓ供給と見込んでその3倍だろう。ただし、周辺設備を強化したとして。

⑦ 液体ヘリウム移算価格に例えば30円上乗せして、200円にしてその差額をプールして設備更新の準備金にしてはどうか？

⑧ その後、業務の人員、セルフサービスの是非について議論が行われた。

——業務人員は、今後研究者、学生が増え、業務量が増加することが見込まれることもあり、またユーザーに対するサービスの質を高めるためにも３名は必要だ。そして、セルフサービスシステムは今後も続けたい。

2. 研究について

① はじめに、極低温センターに教官がいないことについて丸山センター長から説明があった。助教授のポストがない上に、前任助手が転勤した後施設再編の話が議題になったため、採用を見合わせてきた。

② 共同利用の研究所でなければできないような大型の測定設備・それに付随する測定機器を導入して頂けたらありがたい。

③ 極低温センターの潤沢な液体ヘリウム事情を基礎にした共同利用設備を強化させるのが好い。

④ 液体ヘリウムの利用は物性が主な分野だ。物質開発研究センター（仮称）構想のように極低温センター、機器センター、化学試料室が統合するのは自然な方向なことだと思う。

⑤ 機器のレベルアップで液体ヘリウムの消費も増えるだろう。

⑥ 低温と物質合成を含むような研究体制の充実がこれからの方向となろう。

⑦ その際の人員構成について、物性研究の基本となるヘリウムの液化要員と研究要員は別にしなければ液化業務が維持できないであろう。

⑧ 東大の低温センターの人員は、助教授1名、助手１名、技官５名である。

⑨ 東大物性研液化室では研究や研究上のサービスは行っていない。

⑩ 技官について、業務と研究で活性化させるという方向はどうか?

⑪ その件で。低温工学的には優れている。低温工学の分野か分子科学の分野か、方向をどうするか?

⑫ 極低温センターは業務上教官との接触が少ないところだ。将来的にみてこのままの形でよいか?

⑬ 全くないということではないと思う。他の施設のように、常駐している教官との接触がない、だけだと思う。話は変わるが、自動供給装置などを開発できたのも、（セルフサービス化で）空いた時間をサービス向上へ有効利用したからだ。悪いことではない。

⑭ 極低温センターに助教授、助手を配置しても、具体的にどのような分野を目指すのかは非常に難しい問題だ。

⑮ 外部から共同利用で受け付ける場合、分子科学を広範囲に捉えて、広い分野の研究者にも門戸を開放できないものか？例えばある大学でSQUIDを購入したが、液体ヘリウムがなく使用できないでいるところもある。共同利用の場合、ユーザー負担が少なく、ユーザーサポートが充実していれば最高だ。

⑯ 電荷移動錯体の研究には高磁場が必要だ。分子研にこそ設置すべきと思う。

⑰ 所内に共同利用機器のPRなど行っていますか？

——操作が難しく、名人芸を要するものがおおい。一般に開放するのは難しいのでは。

⑱ 機器の操作の難易の程度で開放の程度を区別することはできる。

各自自由に意見を述べて、16:15分に“極低温センター：将来計画ワークショップ”を閉会した。

4−4　機器センター

平成６年８月29日に機器センターの点検・評価委員会が下記の委員により行われた。

伊藤光男（分子研所長）、宮島清一（分子集団研究系助教授）、小谷正博（学習院大教授）

福田　豊（お茶の水女子大教授）、齋藤修二（機器センター長）、冨宅喜代一（機器センター助教授）。

報告事項

(1) 機器センターの役割について

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すると共に常時高性能を維持し、研究所内外の研究者の利用に供してきた。特に所外利用者には、一部であるが旅費や寒剤の支給も含め、優遇措置が採られてきた。また、所内利用者には、維持費の一部を賄う意味合で受益者負担の形態が採られてきた。このような体制で機器を利用できる機関は他に存在せず、その意味で貴重な役割を果してきた。また各種の測定機器が備わっており、一回の来所で種々の高品質のデータが得られることも、同センターを利用する際の大きな特色でもある。所外利用者にとって機器センターに導入された最新の機器を利用することにより、それを評価して各自で導入する際の参考資料とにすることができた。また不慣れな機器を利用して習熟するといった教育的な利用も行われたきた。このようにして機器センターが所内外の分子科学の研究のレベル向上と活性化維持に大きな役割を果たしてきた半面、特に所外の利用者層の偏りが目立つようになってきている。一つは従来からあった問題で、定期的な利用者以外にはセンターの機器の状況の把握が困難で、利用の際に敷居が高く感じられる点である。この点を改善するために、昨年度より、機器の利用状況の把握や予約についてオンライン化が試行され、全国の大学の端末からINTERNETを通して直接行えるようになってきている。このシステムが有効に機能するために、利用者の協力が必要と思われる。また機器センターの創設期は新しい機器を導入することによって全国の研究者を引きつけていたが、最近では分子研よりも優れた装置を持っている大学の研究室もあり、その意味では機器センターの存在意義が変化してきていることによる。

(2) 運営上の問題点

機器センターは、歴代の所長の特別な配慮で拡充され、現在では中型機器33台と小型機器129台を所蔵するに至っている。センター職員はこれらの機器の維持・管理と所内外の利用者へのサービス業務を行うと共に機器を利用した独自の研究を進めている。機器センターの運営上、最近特に問題となってきているのは、使用年数が10年を越える機器が増加してきている点である。機器センターの機能を維持する上で、これらの機器の更新が重要課題となっている。また、これらの機器の維持管理を行うスタッフの数が限られており、サポート態勢が問題となってきている。この点を補うために、従来より利用者が多くかつ最高性能が要求される機器については、所内で運営委員会を設け装置の維持を委託している。

(3) 機器センターの将来の在り方

機器センターが全国共同利用施設として機能を果たすためには、引続き水準の高い機器の導入・更新を計ると共に、特にレーザー類の多様化等に伴い、複数機器の複合的な利用の促進を計ることが今後益々重要となる。また所外の利用者層を拡げるために、センターの広報活動を従来以上に進める必要がある。センター運営については、センターの機能を維持し運営をさらに円滑に行うために、特定の機器の所内利用者のグループが機器のレベルの維持に努め、またサービス業務に協力する方向が望ましい。特に所内に対してはセンター職員と研究者の協力によってセンターの装置を研究者が自分の機器という意識で使用して行く方向に進めるべきである。また所外利用者においても、単に施設利用として業務を依頼するのではなく、協力研究の形での利用を計ることも望まれる。また、センター職員の業務と研究との両立については、業務とのバランスを考慮した上で各自の研究に重点をおくことが必要

と考えられる。このことにより、職員の機器への習熟度がさらに増し、機器の管理がより行き届くことも期待される。またこのことはセンター職員の人事の流動を計る上でも重要である。

4−5　化学試料室

平成６年８月29日に化学試料室の点検・評価委員会が下記の委員により行われた。

中筋一弘（大阪大学教授）、田中晃二（分子研錯体化学実験施設教授）、

花崎一郎（化学試料室長）、山下敬郎（化学試料室助教授）。

化学試料室では所内研究者が行う化学物質の合成や精製をサポートするとともに、分子科学的に興味深い化合物の合成研究を行っている。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、ならびに質量分析と元素分析の依頼測定のサービスをしている。研究所の実験廃棄物の処理、管理も化学試料室の業務の一つである。これらの項目について議論した概略を報告する。

(1) 物質合成

既知物質の合成では、従来は原則として依頼合成は行わず、所内研究者が行う実験のサポートをしたり、実験手法のアドバイスをしてきた。例えば、分子構造部門の要請により、毒性、悪臭があり爆発性のメチルイソシアニドおよびエチルイソシアニドの合成実験のサポートをしている。減圧蒸留法などによる物質精製も行っている。合成実験に不慣れな研究者が実験する場合には実験器具も含めて化学試料室で全面的にサポートすることが必要である。既知物質の依頼合成は研究者の受けるメリットは大きいと考えられるが、このためには高度な実験技術をもつ専門技官が必要であることから、現状では困難と思われる。将来的には、研究所のプロジェクト研究で化学試料室が合成研究を分担することは可能と考えられる。なお、化学試料室で独自に開発された新規な有機分子は分子集団研究系に提供され、物性研究に役立っている。

(2) 機器分析および元素分析

元素分析および質量分析の依頼分析は現在一人の技官が行っているが、年々依頼数が増加しており、平成５年度の依頼件数は元素分析が810件、質量分析が360件であった（平成元年の元素分析は169件）。今後も依頼数の増加が予想されるが、研究者の要望に答えるべく出来るだけ迅速な測定が望まれる。また、測定に際してはルーチン測定に加えて、特殊技術を要求される場合もあるので技術の向上に努めることも必要である。また、元素分析、質量分析は物質の構造決定に必要不可欠な手段であるので、このサービスが中断することのないよう後継者の育成を考えておくべきである。その他の依頼測定として、X線構造解析、高分解能NMR測定が考えられるが、それぞれに担当する人員が必要となる。こうしたサービスを充実して分析センターの役割を果たすことが化学試料室の将来構想の一つとして考えられる。

NMR、IR、UVといった合成研究に不可欠な分析機器は化学試料室に設置する必要がある。同種の機器は機器センターにあるが、化学試料室では通常、ルーチン測定のみが行われるので簡便型の機種がよい。化学試料室にあるこうした分析機器や液体クロマトグラフ、ガスクロマトグラフといったクロマト関係の機器の一部は老朽化が著しく、設備更新の必要がある。

(3) 廃棄物、薬品類の管理

研究所から出される実験廃棄物の量は年々増えており、平成５年度は廃液が20 ℓ ポリタンク約500個分に達している。これら廃棄物は所内研究者により化学試料室で配布されるポリタンクに分別貯留され、化学試料棟の貯蔵室に持ち込まれる。貯蔵室が一杯になった段階で外にある貯蔵庫に移される。これらを年に２回業者に委託して処理している。化学試料室職員は廃棄物の分別貯留を管理しており、ポリタンクの移送、業者への引渡しの作業を行っている。また、シアン廃液などの毒物の安全処理をアドバイスしている。今まで廃棄物で特別な問題は生じていない

が、一旦事故が起これば研究所全体の機能をストップさせる事態になりかねない。従って、廃棄物の処理、管理は充分に経費をかけて、徹底して行う必要がある。

試薬は総数約1000がストックルームに置かれている。試薬数を増やすようにとの要望もあるが、現在のストックルームのスペースでは現在量が限界である。在庫チェックはしっかりする必要がある。蒸留水も一定量を常にストックしておくことが望まれる。

(4) その他

グローブボックス、旋光計、蒸留水製造器などの老朽化した機器の更新が望まれる。ドラフトを整備して環境安全に心がける。所内外の研究者の化学試料室利用の便宜をできる限り図る。

4−6 装置開発室

日 時 平成6年9月6日 9:00～11:30

場 所 研究棟 311号室

出席者 伊藤所長、村田好正〔東大物性研〕、宇理須恆雄、加藤立久、
渡邉三千雄、内田 章、北川禎三

1. 装置開発室の過去の活動につきサービス部門について堀米係長が、またIMSマシンについては浅香助手が、それぞれ資料にもとづき説明し、両人は説明終了後退席した。
2. 装置開発室の業務について

東大物性研との比較において、メカトロニクス部門に設計の比率がかなり高いこと、エレクトロニクス部門でパルス回路の比率が高いこと、ニューマテリアル部門にセラミック加工の少ないこと、が分子研らしい特徴として指摘された。その特色が良いか悪いかについて自由に意見が交換された。

- 設計は可能な限り研究者がやるべきで、設計されたものを一日も早く装置開発室で製作し、研究者が早く失敗できるようにすること、すなわち時間のファクターが大切である。過去にはゆっくりいい物を作ればよいという考えがあったが、それはとらない方がよい。研究者が設計に入り込み、失敗してフィードバックするところにノウハウができる。
- 学生を教育する側に早く成果を求める考え方が強くなっていて、学生のポテンシャルを高めるために時間をかけることをしなくなったことが最近の特色である。このことが研究者に「装置を作ることの大切さ」の意識を低下させたのでないか。
- 業者にはいい機械があって、分子研の技官は技術革新に追随できないことはないか。
- 業者はメリットのあるものしかやらない。特に大会社はうわべの技術が多く奥深くない。大量生産につながらない大切な技術を大事にしないといけないが、公務員制度がそれを妨げている面がある。新しいチャレンジをして新技術を身につけた人に報いる方策があって欲しい。

3. 技官の待遇について

- 能力のある人を厚遇することが大切である。分子研装置開発室の技官の年齢が比較的集中しているので、部長、課長という制度だけで全員に報いることができない。優秀な人を残し、他大学にもいい装置を供給するためには外郭団体を作るべきである。
- 現在町工場はなくなりつつある。その理由は土地が高くなってのれん分けができなくなり、若者が将来への魅力を感じなくなって後継者がいなくなったことが主因であるが、一方で、マシニングセンターなどが発達し、職人的技術なしで機械加工ができる時代になっているので、工作の経験はないが工作機械を買える人が、町工場に替わるようになってきたためである。

- 人事交流を盛んにしたいが技官は土地に密着している。同一地域内で流動を考えるべきだが、なかなかうまくいかない。

4. 研究支援組織の在り方について
   - 学生や若い助手は装置開発室の技官との接触の仕方が下手だ。おおよそ研究支援をしてもらう人には個人的な信頼関係がベースになっていることを認識し、個人的に親しむ努力をすべきである。
   - 学生や助手など短期間いる人はどうしても利用するだけになる。研究支援組織を育てるのは教授、助教授の責任である。
   - 本年度初めて「安全講習会」という名のもとに装置開発室の機械の使い方の講習会をしたところ、予想の3〜4倍の受講者があった。これは研究者と技官の信頼関係を高める働きをするであろう。
5. IMSマシンについて
   - IMSマシンこそ装置開発室本来のあるべき姿だからもっとウエイトを上げるべきだという意見に対し、工作室的な役割が重要で、研究者が早く作りたいと思う点を助ける役割の方が重要だという意見が出され、全体として後者の意見が強かった。
   - 日々の工作があって初めて研究者と技官の間に信頼関係が生まれる。これが基礎で、IMSマシンが一人歩きしては困る。毎年一件選ぶ必要はなく良い提案がある時だけ実施するという具合にしてはいかがか。
6. おわりに

   装置開発室の評価の会が分子研の教官の態度の評価会になった。研究者側の研究装置に対する考え方、製作の気持ちなどが一番大切で、それによって装置開発室が変わっていくものであることを分子研の研究者に訴える必要がある。

4−7　極端紫外光実験施設

1. 目的

   極端紫外光実験施設の点検評価については、昨年度の極端紫外光科学分野の点検評価の中でかなりの部分について議論されている。そのため、以下の三つのことを今年度の点検評価の目的とした。
   - 昨年度受けた評価に対して広く意見を伺う。
   - 昨年度の評価で漏れた部分について新たな評価を受ける。
   - 昨年度受けた評価に対する我々の対応の仕方について評価を受ける。
2. 実施要領

   具体的な実施要領は以下の通りであった。
   - 平成6年7月20日第24回極端紫外光実験施設運営委員会において所外運営委員から昨年度の評価と新たな視点からの意見を伺った。
   - 平成6年8月18日評価委員会で昨年度の評価と所外運営委員の意見を参考に今年度の評価を行った。
   - 以上をまとめたものを点検評価委員と所外運営委員に報告し、さらに補足意見を求めた。

   UVSOR評価委員は以下の通りである。

   木原　元央　（高エネルギー物理学研究所教授、放射光実験施設施設長）
   石井武比古　（東京大学物性研究所教授、軌道放射物性研究施設施設長）
   岩田　末廣　（分子研教授、分子研将来計画委員会UVSOR検討部会長）
   宇理須恆雄　（分子研教授、極端紫外光科学研究系主幹）
   小杉　信博　（分子研教授、UVSOR施設長）

鎌田　雅夫　　（分子研助教授、UVSOR）

UVSOR所外運営委員の内、意見をいただいた方は以下の通りである。

柿崎　明人　　（東京大学大物性研究所助教授）

春日　俊夫　　（高エネルギー物理学研究所教授）

伊吹　紀男　　（京都教育大教授）

太田　俊明　　（東京大学大学院理学系研究科教授）

小谷野猪之助　（姫路工業大学理学部教授）

3．評価結果

3.1 所外運営委員からの意見

運営委員A

一般的にUVSOR程度の規模の放射光施設に加速器の研究者を置く意味としては以下のようにいくつか考えられる。

(1) マシンフィジクスとして興味を持って研究面に結びつける人材がいること

(2) 放射光を作る側（加速器）と使う側（観測システム）の研究者が協力してやるような研究（例えば、レーザー発振との同期実験）が提案されていること

(3) 新しいリングを建設するという目的があること

以上のいずれも考えられない場合には、業務委託でUVSORの加速器を維持運転する方向で将来を考えるしかないであろう。

ストレージリングばかりではなく入射器として用いているシンクロトロンも加速器の研究に使えるので、そのような研究も行ったら、加速器分野の人を引きつけるのに役立つと思われる。

加速器の分野で人事流動が起きないのは、その分野の人材が高エネ研に一極集中していることが大きな原因である。この分野で人事流動を活発にするには、例えば、名古屋地区で加速器センターを作って、加速器の人材をある程度集めなければならないであろう。その場合、UVSORのリングは分子研とは独立の加速器センターに属するひとつのリングという位置づけになる。

分子研の人事のやり方と加速器分野の人事のやり方は整合しない。UVSOR光源の安定運転を将来的にも維持していくためには、UVSORの光源系では特例として、(1)助手から助教授への内部昇格も認めるか、(2)教授のポジションを置くか、しなければならないであろう。

少人数で努力してUVSORの光源と観測システムの運転を行い成果を挙げているという実態は日本人的美徳のように理解されるかも知れないが、本来、適正な人数で運転を行うのが道理であろう。

運営委員B

高エネ研、物性研、分子研の放射光施設の実験課題の審査方法を比較した場合、それぞれ一長一短があるが、UVSORではその研究グループが今まで行ってきた研究の成果を審査基準に加えるべきである。

外国人評価委員のV.Saile 教授が分子研リポート'93ではっきり言っているように、分子研の放射光施設で重視すべきテーマは分子科学である。しかし、そのことに意識過剰にならないでよい。例えば、物性研の放射光施設では原子・分子の分光なども行われているが、大半は物性研究のための実験が中心になっている。

運営委員C

化学ではレーザーの分野が花形で人材が多く、放射光の分野はメジャーではなく人材も少ない。そのためか、UVSORでは二足のわらじを履いた研究者が多く、高エネ研の放射光施設のように研究者生命を賭けて放射光に専念している研究者が少ない。これは放射光の分野では技術開発的要素が重要であるにも関わらず、化学ではそのあたりが軽視されているためと考えられる。化学でも技術開発的な研究を評価する土壌があれば放射光化学の研究者も増えることが期待される。また、UVSORでは予算などのバラマキはやめて分子科学にウェイトを置くべきである。

分子研の殻に閉じこもらず、世界の放射光施設の仲間入りをすべきである。例えば、分子研の共同利用規則では不可能であっても、世界的な放射光施設では可能になっている国外からの共同利用申請を可能にすべきである。また、UVSORはアクティビティを宣伝する努力が足りないように思われる。放射光関係の国内の会議や国際会議に積極的に参加し、情報交換をもっと活発にすべきである。

運営委員D

UVSOR施設の主張がどこにも公表されていない。UVSOR施設としての課題や方針などがユーザに伝わらないので、特別に施設を盛り上げていこうという意識がユーザ側に起きない。UVSORは分子研では一施設として位置づけられているかも知れないが、放射光の分野では独立した放射光施設として位置づけられているので、世界のひとつの放射光施設としての自己主張は当然なされるべきである。また、ユーザの組織化を行うとともに、ユーザ組織との協力・協同による研究の発展も重要な課題である。

運営委員E

分子研リポート'93では共同利用研究者のための旅費不足の問題が大きく取り上げられているので、ここではそれ以外の共同利用研究のための研究費や人的サポートの面でコメントしたい。まず、ユーザにとって最も重要なのは各ビームラインが常に最高性能の状態に保たれていることである。そのため、光学素子や検出器関係部品のスペアの常備、絶えざる性能向上のための新製品の購入ということを研究費配分の第一優先に考え、また、補修や改造の迅速性ということを人的サポートの割り振りの第一優先に考えて欲しい。その上で、なお個々の研究を費用的あるいは人的にサポートしていただけるのであればそんなにありがたいことはないが、それは二の次であってよいのではないか。その際、サポートすべき研究の選択は、希望が出されたものの中から、研究組織として力があるかどうか、つまり、自助努力できるかどうかよりは、純粋に研究の中身で評価して行うべきであると思う。

3.2 昨年度評価に対する我々の取り組みと今年度の評価

UVSORの使命と位置付けについて

UVSORの使命を内外に明確にすることは昨年度の評価委員からも、今年度の所外運営委員からも複数指摘を受けているところである。また、施設の成果公表の仕方にも問題点が指摘されている。今年度のUVSOR評価委員からも昨年度のSaile教授のアドバイスに従うべきであることが強調された。すなわち、

- 将来に向けて明確な使命「化学における放射光研究と応用」を表明し、
  化学研究センターとして長期戦略的な計画を立てること

UVSORは世界で唯一の「化学専用施設」として建設されたが、建設時から継続的にこの使命を広く表明する努力をしてこなかった点や、建設時に関わったメンバーは分子研の活発な人事流動のため、技官を除いては一人もい

なくなった点などが指摘されたものと判断される。現在、所内外の関係者にUVSORの使命を表明するため、学会誌や分子研の出版物等でUVSORの成果の広報活動を推進しようとして動き出している。今年度の所外評価委員からこのような広報活動について支持を得た。

昨年度の評価委員Hから指摘のあった西播磨に建設中のSPring 8との関係については、SPring 8がX線を主目的としているので、UVSORとして意識する必要は特になく、共同利用研究所としてのUVSORの役割は今後も変わらないであろうという指摘がなされた。

諸外国に比べて日本では放射光を利用する化学者が非常に少ないのが目立つが、それは運営委員Cの指摘の他に、原子・分子の物理・化学の研究者が日本に少ないことがそもそもの問題であるとの指摘があった。そういう意味でもUVSORの存在は重要であり、また、UVSOR施設のスタッフがPhoton Factoryで共同利用実験を行うことは決してUVSORの存在意義を失わせるものではなく、「化学における放射光研究と応用」というUVSORの使命を補うために重要なことであるという指摘が所外評価委員からなされた。

なお、関連した問題点として、日本からのアウトプットと諸外国のアウトプットの違いは実験データの解析方法にあり、同じ実験を行っていても見劣りがするという欠点があるので、データをとることばかりでなく、データ解析にも充分注意を払ってアピール度を高める工夫が必要があるとの補足意見があった。

UVSORの教官組織について

UVSORの使命を実現するための長期計画は、昨年度の評価結果でも明らかなように今まで必ずしも明確ではなかった。特に、昨年度のSaile教授の指摘の中に「UVSORでは非常に個性的な優れたアイディアが生み出されてはいるが、長期的な意味では取り組み方が不十分である」との意味が含まれているとの指摘が今年度の所外評価委員からあった。それは分子研の研究スタイルに大きく起因している点が評価委員会で話し合われた。すなわち、分子研では、教授または助教授が組織する研究グループを単位としており、人事も厳密に内部昇格を禁じて人事の流動を推進してきたため、UVSORのような大きな施設を組織として長期的展望を持って推進する施設スタッフが育たたないシステムになっている。教官組織についての所外評価委員の具体的な意見は以下のようにまとめられる。

施設長とは別に施設の専任として、教授１、助教授１、助手２のポジションを確保し、そのメンバー（加速器分野の専門家である必要はない）により施設の基幹部（光源全体）の長期的計画を立てて、絶えず、開発研究し続ける態勢がUVSORの５年、10年先を考えると是非とも必要である。施設専任の教授は副施設長クラスの存在感のある人でなければならない。また、施設の長期計画を揺るぎないものにするのなら内部昇格の禁止事項は外すべきである。(所外評価委員A)

教授のポジションはUVSORの光源の将来を考えるのなら必須である。ビームラインや観測システムに関しては施設と研究系にかなりのメンバーがいるのに対して、光源関係にコアになる人を置かないのは片手落ちである。奮闘はしているが研究グループとしては今のままでは非常に弱い。運営委員Aの指摘にもあるように、精神主義だけではこれからの時代は生きていけない。適正な分業と人数が必要である。可能ならば研究系のポジションを借りてでもUVSORの光源に人材を確保すべきである。また、人事選考を行う場合にも固定メンバーではなく、その分野の専門家を初めとする人事選考委員をその都度、決めることも必要である。(所外評価委員B)

UVSORの技官組織について

技官組織については各研究所で方針がそれぞれ違い、なかなか共通の議論はできないが、物性研や高エネ研で成功を収めている点を所外評価委員から伺うことができた。

施設系の技官の流動の方が物性研では活発であり、分子研では研究系の技官の流動の方が活発なことと好対照である。物性研の場合、施設系の技官は、適度に年齢がばらついており、報告書や学会発表のチャンスを与えたり、高卒や短大で技官に採用された者には夜間大学で専門知識を勉強するように奨励したりしており、UVSORでもそのような努力が必要であるとの指摘がなされた。

また、高エネ研の加速器分野は経験がものを言う分野なので、技官の方が若手の教官よりも専門的には優れていることが多い。技術部を作って待遇面でよくし、助手で長年やるよりも技官としてやっていった方が給与面でもよくなるようなシステムを作り上げている。技官が一定の技術レベルに達するまで教官が責任を持って指導している。セールスポイントのない技官（専門技術・特殊技術を持たない技官）にはならないように特に注意して教育している。一定の技術レベルに達すればあとは自分で仕事を見つけてどんどんやってくれるようになる。教官の責任は重要で、どの教官に技官をつけるかが重要なファクターである。分子研においても教官が責任を持って専門職としての初期教育をしっかり行うこと、また、待遇面でよくしていく努力を怠らないことが必要であるとの指摘がなされた。

これまでも物性研や高エネ研と人事交流、研究交流が行われてきたが、放射光研究分野の発展のために、今後、一層、互いに協力する必要があり、技官同士の交流、技術交流も重要であるとの指摘があった。

UVSORのユーザについて

今年度の点検評価では詳しくは議論されなかったが、運営委員Dの指摘にあるUVSOR施設からの主張をユーザにオープンにする姿勢はこれまで不足していたので、機会を見つけて公表する努力を始めている。具体的には、これまで毎年行ってきたUVSOR研究会を改めてワークショップ形式で将来計画を議論する場にする、放射光学会でUVSORの会合を持つ、物性研や高エネ研のようにユーザ組織を結成する方向で検討が始まっている、などを検討しており、これらの新しい動きについて点検評価の場でも支持を得た。

昨年度の評価委員Gから指摘のあった固定客（ユーザ層に流動がなく固定化する現象）からの脱皮については世界の放射光施設ではどこでも問題になっていることであり、UVSORあるいは日本の放射光施設だけの問題ではないとの補足説明があった。ただ、ユーザは環境のよいところに集まっていく傾向があるので、共同研究の環境整備に努力を怠らないようにとの意見があった。他施設ではビームタイムをユーザに日本的公平さで配分していては成果が挙がりにくい点が問題になっているので、UVSORでもその点に注意すべきであるという意見もあった。

運営委員Cの意見にあるように世界的な放射光施設では可能になっている国外からの共同利用申請をUVSORでも可能にするためには分子研の共同利用規則を変える必要があり、直接的な応募を許すのか、国内対応者を介して応募するようにするのか、など検討の余地がある点が議論された。

UVSORの将来計画について

施設の将来計画なしには人材（特に分子科学分野ではない加速器分野の人材）は集まらないし、先細りになるので、将来計画は施設として当然、持たねばならないものである点が強調された。その一方、新しいリングを作るばかりが能ではなく、Saile教授の指摘にある「化学における放射光研究と応用」という使命を持って、現在あるものを如何に改良して使うかという観点も忘れてはならないとの指摘もあった。

加速器の業務委託は絶対にあり得ないし、絶えず性能をよくしていこうとする集団がいなければならない、性能向上を行うことで人が育つ面も忘れてはならない（そのための教官組織案については既述）、将来に向けての考えを持たない状態での加速器の老朽化対策や改良は無意味であるとの強い意見が出された。

現在の文部省下では新しい放射光施設の建設計画が次々認められるような状況ではないので互いに足を引っ張らないような調整も必要である、物性研で現在計画している高輝度新リング計画にUVSORの関係者が関わりを持ち、分子科学研究専用のビームラインを建設して利用することも歓迎すべき考えであるとの意見があった。

ビームラインについてはスクラップアンドビルドが絶対に不可欠であり、これを止めるとUVSORの将来はない、Saile教授の指摘にあるように世界的に競争力のある高性能なビームラインを適正な数だけ建設していくための予算措置を得るよう努力すべきであるとの強い意見があった。

Saile教授の指摘の中で分子科学分野の強化は当然として、赤外・遠赤外領域での放射光の利用はUVSORの特徴であるので、是非、データの信頼性を向上させて成果が挙がるように努力して欲しいとの要望が出された。分子科学でもこの領域の研究を推進すべきではないかとの意見もあった。

5. 将来計画

5. 将 来 計 画

5−1 将来計画委員会、専門委員会の設置と活動

分子科学研究所将来計画委員会は平成５年度に実施された点検・評価に基づいて、将来計画の大綱を策定するため設置された。本委員会には分子研の専任教授・助教授の全員が参加し（資料4−3を参考）、またアンケート等を通じて客員部門教官等の意見を導入した。

将来計画の策定は、将来計画委員会の全体会議、４つの小委員会、アンケートの実施によって行った。最初に全体会議を４回開催し、問題点等を洗い出した。次に４つの小委員会に別れて、それぞれの問題について検討を繰り返し、報告書を作成した。さらに４回の全体会議を開催して、将来計画報告書を取りまとめた。具体的な審議経過と主な討議内容を示す。

第１回将来計画委員会（H6.4.12）

平成５年度点検評価報告書の検討等

第２回将来計画委員会（H6.5.10）

各研究系・研究施設の問題点の検討等

第３回将来計画委員会（H6.6.7）

研究所の人的構成、研究支援体制等の検討、所内アンケート実施の決定

将来研究分野に関するアンケート実施（H6.6.9）

第４回将来計画委員会（H6.7.7）

アンケート結果の分析、４つの小委員会設置

研究所運営に関するアンケート実施（H6.7.22）

第５回将来計画委員会（H6.11.16）

小委員会報告書の検討（研究分野検討小委員会）

第６回将来計画委員会（H6.12.6）

小委員会報告書の検討（研究組織検討小委員会、共同研究・教育検討小委員会、UVSOR検討小委員会）

第７回将来計画委員会（H6.12.19）

将来計画報告書とりまとめ（増員計画等）

第８回将来計画委員会（H6.12.24）

将来計画報告書最終とりまとめ

この他に、7月から11月にかけて小委員会の会議を開催した。

以上の検討結果を

1、研究分野検討小委員会報告書

2、研究組織検討小委員会報告書

3、共同研究・教育検討小委員会報告書

4、UVSOR検討小委員会報告書

の４つの報告書にまとめた。

また、最後に資料として第６章に

1. 将来計画委員会規則
2. 専門委員会組織とメンバー表
3. 将来計画に関するアンケート
   (1) 研究分野に関するアンケート (H6.6.9)
   (2) 小委員会アンケート (H6.7.22)

を掲載した。

5−2　将来計画研究分野検討小委員会報告書

報　告

小委員会委員（12名）：吉原、岩田、齋藤、森田、鈴木、丸山、鹿野田、磯邊、
小杉、吉川、中村（晃）、中村（宏）（部会長）

委員会開催日

平成６年８月４日　全員：但し中村（晃）、丸山　欠席
８月10日　研究分野関係の検討（磯邊、小杉、鈴木、中村（宏））
８月30日　施設関係の検討（鹿野田、丸山、森田）
９月９日　全員：但し森田、吉川欠席（所長出席）
12月19日　物質開発研究センターに関する検討（丸山、藥師、鹿野田、宮島、山下、中村（宏））

目　次

1．序
2．人事公募分野の決定方法について
3．国際研究協力について
4．将来の研究分野及び研究体制について
5．研究施設の将来計画について
付録A．研究分野検討小部会アンケート（７月22日実施）の集計結果
付録B．今後分子研に取り入れていく必要のある分野
（６月９日付実施アンケートの項目４）の集計結果
付録C．新規計画に伴う人員構成の参考資料

1．序

分子研教授・助教授に対する６月９日付「分子研将来計画に関するアンケート」の結果（１部のみ付録Bに収録）及び本委員会委員に対する７月22日付アンケートの集計結果（付録A）に基づき、研究分野関係及び施設関係について本委員会において突っ込んだ討議が行われた。10月にまとめられた本委員会案は12月の３回に亘る将来計画検討全体会議において更に多方面に亘って検討が加えられた。本報告はこれら一連の討議・検討の結果を踏まえて最終的にまとめ上げられたものである。

2．人事公募分野の決定方法について（付録Aの１参照）

新任または後任教官を公募するにあたり、その公募分野を教授・助教授懇談会を開催（通常２回）して決定し、教授会議に提案している。従来、この具体案の作成を該当する研究系の責任で行って来た。しかし、広く意見を求める事の重要性に鑑み、第一回目の分野検討懇談会の代わりに、当該研究系外の研究者を含めた委員会を構成（数人程度）して、そこで検討する事を提言する。この委員会は必要に応じて各方面（外国も含む）の意見を聞くものとする。その後、従来の形式での教授会議懇談会を開催する。

3．国際研究協力について

現在の国際研究協力事業が二国間毎の個別運用で、しかも多岐に亘りすぎる嫌いがある事から、(1)事務局の強化、(2)渉外係（国際協力係）の設置、及び(3)予算の一括化による包括的で柔軟な運用を行える様にする必要がある。

4．将来の研究分野及び研究体制について

4-1　序で述べた通り、近い将来発展及び挑戦すべきと考えられる研究分野は現在の所内スタッフ（教授・助教授）の考え方ではあるが、６月９日付アンケートの結果に見られる。将来の人事においては、スクラップ・アンド・ビルドの原則を堅持し、これら研究分野を参考としていくべきであろう。

4-2 将来計画の提言

将来に亘る広い意味でのレーザー化学と極紫外光化学及び物質化学の重要性に鑑み、又錯体研究施設の速やかな独立を望みつつ、下記の様な将来計画を提言する。なお、以下の提言に当たっては、以前実施された将来計画検討結果（平成元年の通称広田委員会の）をも十分に参考にした。結論的には以下の５点にまとめられる。なお、新計画に伴う技官の増員については今後更に検討を加える必要がある。

(i) 研究系の再編は錯体と相関を除いて特に必要としない。

現在及び将来に亘っても異なる系の間で研究分野を近しくする研究部門が存在しうると思われるが、研究上の交流は常に自由活達に行われており、系の運営も滑らかであると判断され、現在の形態で十分であると思われる。

(ii) レーザー開発研究センター（仮称）を創設し関連研究部門及び極端紫外光施設との連携を密にする。

(iii) 物質開発研究センター（仮称）を創設し関連研究部門との連携を密にする。

(iv) 将来の研究動向を踏まえて相関領域研究系と錯体化学実験施設の再編を行う。

(v) 客員部門及び流動部門の再編を行う。

客員部門については広田委員会の通り、２部門を新計画に伴う新専任部門に振り替える（極端紫外光施設の客員助教授についても振り替えの対象とする（5-(2)参照））。客員助手は博士研究員（Post Doc.）に１：３の割合で振り替える可能性を検討する。流動部門については、３部門とも分子科学分野における共同研究型部門として運用する。

（注1）振り替え部門数及び助手の数については今後更に検討を加える必要があろう。

（注2）レーザー開発研究センター及び物質開発研究センターについてはレーザー化学研究センター、分子エレクトロニクス研究開発センターという名称の方が良いという意見がある。

以下、上記の(ii)～(iv)について詳しく説明する。先ず、(ii)と(iii)についての基本的哲学を説明しておく。

分子科学の将来の発展にとって、レーザー性能の向上と新物質の開発は大変重要な位置を占める。これは、分子科学の広範囲な研究分野に亘って、「化学反応の自由な制御と設計」及び「好ましい物性を持つ新しい物質（化合物）の開発」が共通した大きな課題であり、レーザー性能の進歩と新しい化合物の合成がこれらの研究を推進していく上で最も重要な要となる、という事からも明らかであろう。市販のレーザーや化合物を購入し改良・改変を加えていくだけでは、真の意味での突破口を切り開いていく事は出来ない。研究目的に叶った真に新しい機能をもつレーザーや新物質を開発していく事が必要である。これは現代の先端的科学研究の課題とそれを支える技術が複雑化・総合化しているからである。これを実現に導くためには、複数の研究室が共同研究を行うという従来の形態を越えた全く新しい体制を構築していかなくてはならない。

例えば「化学反応」の場合には、レーザー化学者がレーザーの専門家と密接に協力しあって新しいレーザーを開発するとともに、極端紫外光施設との３者協力によってレーザーと極紫光の併用を可能ならしめ、新しい分子科学分野を開拓していかねばならない。「物質開発」においても、物性化学あるいは物理学者と合成化学者の緊密な連携協力によって新しい化合物を他に先駆けて合成し多岐に亘る物性測定を最先端の機器を用いて迅速に実行しうる体制を作っていかなくてはならない。

分子科学研究所は優れた研究者集団と最先端の施設を有しており、このいずれの分野においても上述した新体制を実現していく為に最も適した研究機関である。この為に、従来の研究施設や研究室の概念を越えた新しい研究センター（レーザー開発研究センターと物質開発研究センター）構想を提言する。この１つの大きな特長は研究系の研究者が拠点を研究センターに移して上述した様に新しいレーザーや物質の開発に携わる点である。その為に所内併任制度を設ける。この様に、レーザー開発研究センターと物質開発研究センター構想は単なる研究施設の拡充計画ではなく、新しい研究分野を開拓していく為の新規な施策である。

(1) レーザー開発研究センター（仮称）の創設

現在の機器センターの分光部分を吸収・拡大する形で創設する。創設の必要性、組織とその特徴及び研究分野は以下の通りである。

A. 背景、設立の必要性など

(i) 分子科学研究所の過去20年の研究実績、および世界的な科学研究の歴史が示すように、レーザー技術は分子科学研究の強力な駆動力である。一方、レーザー技術の高度化に伴い、次世代の先端的分子科学研究には、レーザー研究者と分子科学研究者が協力する体制が不可欠になってきている。レーザー開発研究センターは、新しい分子科学研究を切り開く、高性能なレーザーシステムの開発を行うとともに、レーザーを利用した新しい粒子線技術などの関連分野の開発研究を行う。

(ii) 本センターは、分子科学研究を行うためのレーザー関連技術の開発を行う。したがって、強力な分子科学の研究体制を背景としなければその存在意義を持たない。本研究所は分子科学研究の拠点であり、このような研究センターの設立に最適の研究機関である。分子科学研究所は、「化学反応の量子ステアリング」という特別研究プロジェクトを推進する計画である。レーザーは、このプロジェクト研究の中核となる実験技術である。

(iii) 分子科学の発展に重要な役割を果たしてきた放射光とレーザーという２つの光源を組み合わせた実験によって、それぞれの光源だけでは得られない全く新しい情報が得られることから、世界中の放射光実験施設が放射光とレーザーを組み合わせた実験に興味を持ち、具体化を進めてきている。しかし、放射光と組み合わせて分子特有の多様性、複雑さを解明するために必要とされる高度なレーザー技術が確立されていないために、成果が挙がっていない。放射光とレーザーを組み合わせた実験により分子科学の新たな研究分野を開拓するためには、放射光、レーザー、そして分子科学の３分野の研究者の緊密な協力が不可欠である。分子科学研究所の極端紫外光実験施設（UVSOR）は世界で唯一の分子科学研究専用の放射光実験施設であり、放射光分子科学の分野で大きな成果を挙げてきた。分子科学研究所は、このようなレーザーと放射光を組み合わせた新しい研究の可能性を探索できる唯一の研究機関であると言える。既に分子研では、1988年に軌道放射・レーザー２重共鳴の蛍光動力学測定装置を開発している。本センターは、UVSORの放射光と同期する高繰り返しレーザーの建設に強力な支援を行い、新たな研究に取り組む。

(iv) 放射光実験施設で用いられている蓄積リングによる自由電子レーザー（FEL）は短波長レーザーとして非常に有力な候補である。しかし、現在のところFELは研究開発段階にあり実用的ではない。今までの分子研のUVSORにおけるFELの世界に先駆けた研究成果（1992年に460nmの発振及び1993年に292～305nmの発振に成功）に基づき、新たに専用リングを建設する。また、FELは通常のレーザー光に比べ質的に必ずしも優っているとは言い難いが、放射光との同期性は無視できない大きな利点であり、将来の展望を開くFELの一つの方向として、放射光と自由電子レーザーを組み合わせた実験にも取り組む。世界的にはいくつか試みがあるが、既設の放射光実験施設では限界があり、まだ、成功した例を聞かない。

B. 研究体制、組織

専任２部門（４グループ）＋研究系からの併任（３グループ）。

特定の研究系が専任を持つのではなく、各研究系から研究グループが本センターに研究室を移し、分子科学用の装置を建設することにより、最新のレーザー技術に基づいた分子科学実験を専任部門と共同で行う。研究系、本センター、極端紫外光実験施設が、本センターを中心として横断的な組織を形成する。

教授を設けるかどうかについての議論

通常のレーザー（自由電子レーザーを除く）の場合、放射光実験施設のような大型設備とは異なり、継続が重要視されることはないと考える。従って、専任2部門を要求するが、教授職を設ける必要は特にない。

（注） 自由電子レーザーを発生させる実験施設は大型設備になり、レーザーと放射光を併用した実験も長期的展望に立って実施するため、教授職を含む専任1部門を要求する。但し、この部門は極端紫外光施設に置くものとする（詳しくは5-(2)参照）。

C. 研究分野

(i) 超短パルスレーザーの開発。

固体を発振媒体とした、信頼性、安定性の高い超短パルスレーザーの開発。特に非線形過程による発振周波数の広帯域化（真空紫外—中赤外域）を重視。紫外、真空紫外光を用いた気体、液体、固体の励起状態に関する実時間分光。光電子分光を含む。実時間での赤外振動分光の開拓。高次非線形分光法の開拓。波形整形などによる分子過程のコヒーレント制御。STMとのカップリングによる時間、空間情報の同時利用。

(ii) レーザーを利用した、X線や電子線の超短パルス回折光源の開発。

回折法による化学反応の実時間観測。実時間光電子分光。

(iii) 1000cm^{-1}以下までの赤外領域をカバーする高分解能赤外光源の開発。

分子、フリーラジカル、イオン等の高分解能分光。振動励起による化学反応制御、分子配向選択による反応の立体効果の研究。

(iv) レーザーを用いた原子、分子のクーリング、マニピュレーション。

レーザー光による原子および分子の冷却・トラッピング・速度制御・空間移動操作の手法の開発研究、ならびに、原子・分子衝突反応過程、表面反応過程、高分解分光などへの応用研究。

(v) UVSOR光源と組み合わせるためのレーザー開発。

UVSORからの極端紫外光と組み合わせて用いるレーザーには、1)放射光と同期した高繰返し、2)広い波長領域、3)高強度という条件が必要である。市販のレーザーではすべての条件を満たすことができない。そのため、本センターでは放射光とレーザーの同期および遅延同期システムの確立、高調波発生結晶や差周波結晶を用いた紫外領域や赤外領域への拡張などを目指す。代表的な研究課題としては、赤外、可視、紫外レーザーで励起された振動、価電子励起分子の内殻吸収測定、放射光で生成した中性解離分子のレーザーによる検出、放射光で選択的に生成した多価イオン、内殻励起分子のレーザー分光、放射光による内殻励起分子のレーザーによる反応制御などがある。

(vi) 自由電子レーザーの開発研究

今までの分子研のUVSORにおけるFELの研究成果に基づき、新たにレーストラック型のリングを建設し、短波長FELの開発を行うとともに、同じリングを用いて高輝度放射光の開発も行う。放射光とFELは自ずから同期していることから、紫外から可視領域（220～600nm）の自由電子レーザー光を発生させるとともに、アンジュレータ放射光も発生させて、両者を組み合わせた新しいプローブとする実験にも挑戦する。

（註） 以上では新規計画としてのレーザーの開発と新分野の開拓に重点を置いて説明したが、一方で本センターは当然ながら機器センター的業務をも担わなければならない。

(2) 物質開発研究センター（仮称）の創設

現在の機器センターの物性関連部分、化学試料室及び低温センターを合併・拡大する形で創設する。設立の必要性、組織とその特徴、及び研究分野は以下の通りである。

A. 必要性

分子科学研究所における研究のバックボーンは“分子と反応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、“分子の集合体としての物質を創造し、その物理的化学的性質を分子のレベルにおいて系統的に理解する”ところにある。後者の研究すなわち物質科学は、物質の開発と物性解析そして理論研究が一体となって、発展してきた。新たな物性との遭遇そしてその理解が常に我々の物質観の前線を押し広げてきたことを考えると、この分野の研究を強力に推進する原動力の一つが、物性のフロンティアを産み出す物質の開発であることに疑いはない。新物質の開拓は、今、最も力を注ぐべき分野の一つである。

これは研究を推進しているグループだけでは解決出来ない問題で、将来分子研がより独創性の高い研究を生み出していくためには、新しい分子や物質を物質合成グループと物性研究グループが協同で設計・開発し、その反応性、物性を評価できる組織をつくっていく必要がある。

現在概算要求で申請中の「機能分子システム研究センター」も上記の役割を担う組織のひとつと考えられる。そのためには現在の化学試料室、低温および機器センターの再編を行う必要がある。本提言では、この再編の枠を更に越えて、新しい分子や物質の開発と物性評価を研究系の研究者とセンターの研究者とが協同で「センター内」で行う体制を提案する。そのためのスペースをセンター内に確保する。

B. 体制

センターの人員

専任２部門（４グループ）＋研究系からの併任（３グループ）。

専任部門には物質合成関連３グループ及び物性解析関連１グループを置き、物質開発、合成及び物性解析に関する業務を行なうと共に研究系との強い連携のもとに物質開発研究を推進する。各研究系から研究グループが所内併任制度によって本センターに研究拠点を移し本センターの専任グループとの開拓的共同研究によって新しい突破口をもたらさんとするのはレーザー開発研究センターと同じである。なお、物質合成関連３グループはそれぞれ有機合成、無機合成及び特殊合成（高圧下等特殊条件下での合成）の分野を担当するものとする。また、本センターには教授は置かない。

C. 研究分野

物質開発は、物性科学のすべての分野でその必要性が叫ばれており、現時点で分野を限定することはできないが、以下のようなものが考えられる。

(i) 有機半導体、有機導体、有機超伝導体、フラーレン

過去20年にわたる分子研の物性関連の研究で最も実績のあった分野の一つである。現象として極めてインパクトが大きくその成果が誰にでも分かり易い超伝導体の開発は、化学、物理、材料等多方面への波及効果がある。

(ii) 有機強磁性体

1982年に、世界に先駆けて分子研で開始され優れた成果を上げてきた有機強磁性体開発の研究はこれから益々加速される。今後の課題は、転移温度（従来は１K程度）の飛躍的向上を図ることと、分子性という特徴を生かした新しいタイプの磁気秩序機構の探究であろう。

(iii)導伝性高分子

(i)や(ii)と違ったルートで、伝導体、磁性体、超伝導体開発にアプローチする。強誘電性、電界発光、光非線形性等をも対象とする。

(iv)有機及び無機金属錯体

磁性体、伝導体、超伝導体として物性物理に登場しているものは、この系では現在ごく限られているが、将来発展が予想される極めて高いポテンシャルを持つ物質群である。新物質の合成とともに、未だ舞台に上がっていない既存の物質の物性評価を組織的に行うことも重要であろう。

(v) 光機能性有機固体

(vi)メゾスコピック物質

LB膜やMBE技術等の物理的な手段により、分子の配列や凝縮相の空間的広がりをメゾスコピックスケールで制御し、新しい物性や機能性を開拓する。

(vii)液晶

分子集合体の一つの凝縮相として重要である。液晶の素単位としての分子の開発とともに、集合形態とそれに関連する誘電特性をしらべる。

(注) レーザー開発研究センターの場合と同様、本センターは従来の機器センター、低温センター及び化学試料室的業務を遂行しなくてはならない。物性測定を効率よく実施出来る体制を作る事も重要である。

(3) 錯体化学実験施設及び相関領域研究系の再編

錯体化学実験施設が速やかに独立研究所として発展する事を切望するものであるが、それが実現した場合と実現出来なかった場合とでは将来計画が大きく影響を受ける。それぞれの場合について、付録Bにある将来導入すべき分野を勘案して、次の様な再編を提言する。

A. 錯体が独立した場合：相関を専任２部門としその中の1部門を生体分子科学関連とする。もう1部門は有機化学関連及び宇宙・環境分子科学関連を念頭において柔軟に運用する。

B. 錯体施設が独立出来なかった場合：１部門を相関領域研究系に合流させ、同研究系を２部門とする。１部門はA.と同様生体分子科学とする。錯体施設の残り0.5部門は物質開発研究センターに振り替える。客員及び流動部門は前記4-2(v)で述べた通り分子研全体で運用する。

5. 研究施設の将来計画について

研究分野の将来計画の検討及び以前行われた施設将来構想（昭和63年の通称木村委員会の）を踏まえて、以下の様な提言をまとめた。結論的には以下の4点にまとめられる。なお、新計画に伴う技官の増員については更に検討を加える必要がある。

(i) 機器センター、化学試料室及び低温センターを再編・拡大し、4.で述べた通り、レーザー開発研究センター及び物質開発研究センターとする。

(ii) 装置開発室は現状のまま独立した施設とする。

(iii)電子計算機センターも当然独立施設として将来計画の実現を目指す。但し、化学研究ネットワークとの関係については今後更に検討を要する。

(iv)極端紫外光実験施設は第三世代の新施設の設立を目指す。

分子研技術部の設置

分子研では研究系技官（21名）と技術系の技官（22名）が多様な職務を行っている。これらを統括するために現在の課長１名でははなはだ不十分であるので、既に概算要求を行っている通り、技術部（部長１、課長２）の設立を目指していくべきである。

以下、各施設についての検討内容を述べる。

(1) 装置開発室、低温センター、化学試料室及び機器センター

A. 研究施設の現状と課題

装置開発室

(i) 渡辺助教授のもと、装置開発室の新しい体制がスタートした。技術を前面に押し出した新体制が研究系との関係で十分な力を発揮するために、以下の問題を考えておく必要がある。

a) 今後任用される助手の位置付け。助教授の分野に沿った技術系にするか、あるいは、従来のような研究者か。どちらの場合でも、その位置付けは、装置開発室にとって重要な問題である（完全な技術組織にするか否か。研究者の場合、その責任部署をどうするか）。

b) 装置開発室は研究系を通常業務とIMSマシンを通しての技術推進という２本の柱で支援してきた。渡辺新体制は技術支援を前面に押し出す以上、これをどのように発展させていくのか、あるいは新しい支援体制を作っていくのかを、装置開発室、研究系の双方が考えなければならない。

(ii) 新体制のもとで、今までくり返し議論されてきた技官問題に対し、当面どのような新しい突破口が見出されるか、継続して検討していく必要がある。

(iii) ガラス細工に関する業務をもっと強化して欲しいとの意見がある。装置開発室は、２年前、メカトロニクスセクションとマテリアルセクションを組織し、技官の活性化を図った。これに伴い、それまでのガラス工作技官は、マテリアルセクションで新たな業務も行なっている。このような流れのなかで、ガラス工作業務をどう位置付けどれほど強化する必要があるかを、まず、研究者側からのガラス工作に対するニーズを調べ、慎重に検討する必要がある。

低温センター

(i) 低温センターは、液体ヘリウムと液体窒素の供給を主な業務としているが、この数年、研究所内外の要求により、低温物性測定装置をいくつか備えつつある。一研究グループでは購入が不可能な規模で共用が可能な低温物性測定機器を本センターに集中的に配置することは、予算の効率的運用と共同利用の促進から好ましいと考えられる。機器のよりいっそうの充実が望まれる。

(ii) 上記の体制を維持、強化する組織にしなければならない。低温物性測定機器を運用、管理する研究者が必要である。

(iii) ヘリウム液化機は、導入後６年経過した。今後３～４年の内に機器更新についての計画を練っておく必要がある。

化学試料室

(i) 分析機器をもっと充実すべきである。

(ii) 分析等のサービス体制を強化するために技官の増員が望まれる。

(iii) 化合物ライブラリーを備える。

機器センター

(i) 一助教授のもとで分光関係と物性関係の機器を一手に管理するのは、今後の機器の増加とその負担を予想すれば、無理があると考えられる。この２分野を別組織に再編すべき時にきている。

(ii) 機器が全般に古くなっている。共同利用を維持するためにも新しくすべきである。

施設一般

(i) 今までは、施設の助教授についても、ほとんどの場合、分子科学の研究者を前提としてきた。施設助教授は各分野の専門家のほうがよいという意見がある。(以下の(C)で述べる再編案のレーザー開発研究センターにこの意見を取入れた。)

(ii) 各施設はそれぞれ固有の問題を抱えているが、それらの問題に対し長期的に責任を持って取り組む体制（組織）づくりが必要である。この点に関して以下のような意見がある。施設専任の助教授は、内部昇格がないゆえ、在任期間は限られてしまう。このため、大型装置に密着している研究者が、10年～20年のスケールで装置の長期的展望を考えていく体制になっていない。さらに、研究系と異なり、助手や技官が必ずしも助教授と直結していないゆえ、彼らの研究あるいは業務の世話や人事的な処遇等の問題が、助教授転出後に顕在化している。これらの問題は、特に極端紫外光実験施設と電子計算機センターでは深刻である。従来は、兼任の施設長がこのような問題に対処するという形をとってきた。しかし、施設に密着し責任をもって長期的にこれらの問題に対処できる組織にすべきではなかろうか。その案として、上記２施設に専任の教授を置くこと、あるいは、研究系部門が併任として施設組織に加わることが考えられる。

B. 昭和63年研究施設将来構想委員会報告について

今回の問題については、既に昭和62年から63年にわたって当時の委員会が議論し、提言を報告書にまとめている。まず以下にその要点をまとめる。

研究施設の組織についての方針

施設には部門を置かないことを基本方針とする。研究に主力を注ぐ教官がどうしても必要な場合は、研究系の中に部門の新設を要求していく。

低温センターと機器センターの再編成の可能性

分光、レーザー関連と物性関連の２つに分ける。機器センターは分光機器センター（仮称）に、低温センターは低温物性解析センター（仮称）に改める。それに伴い、低温物性解析センターに助教授を置く。

この案の利点として以下の点が挙げられている。

(i) 機器センターの負担の軽減と物性関係機器のサービス、技術開発の充実。

(ii) 低温物性関連に新たに助教授を置くことは、技官層へのよい刺激になる。

(iii)機器センターの建物は飽和状態であるのに対し、低温センターに空きスペースがある。

新設の提案

十年先を見越した新しい技術や手法の開発に取り組むための新しい研究施設を置く。助教授１、助手１、技官２の陣容で、数年ごとに新たな開発に取り組める時限的組織と体制を工夫する。

技官の処遇

技官の処遇について次のことが提言されている。

(i) 所外との人事交流の促進。技官の併任制度を活用し、他大学や研究所との交流を活発化させる。そのため、分子研も技官の空きポストを１乃至２設けておく。

(ii) 比較的長期の国内外の技術調査に参加できるようにする。

(iii)各種資格試験を積極的に受験させる。

(iv)研修会等にも積極的に参加させる。

(v) 特許の申請をより活発に行なえるようにする。

この他、人員要求案を議論しているが、ここでは触れない。

〈以上の提言を現時点で見直してみると〉

上記報告を一言で言えば、分光と物性を分け、さらに技術開発の施設を1つ作り、それぞれには部門を置かず助教授1名づつを置く、ということになる。この数年、「IMS2000計画」等で、将来計画を議論してきているが、その経過を見ても分光関連の施設と物性関連の施設に分けて再編成することは妥当であると考えられる。しかし、63年案は現時点から見ると小規模な再編成にみえる。この数年そして今後も、機器センター及び低温センターの共同利用機器は増えていくであろうし、それに伴うサービス業務も増加することが予想される。さらに、最近特にその重要性が認識されている物質開発分野やレーザー開発分野を取り込むこと、あるいは、研究系との連携、協力を強化するための研究系教官の併任等を考慮するならば、もっと拡大したセンター組織にすべきではなかろうか。その意味で、部門あるいはそれに準ずるセクションを置くことも考える必要がある。63年案では、低温センターの空きスペースに機器センターの物性測定機器を移動することが考えられている。しかし、この数年で低温センターは共同利用のための中型機器を3台有し、今年度さらに固体NMR装置が設置されることから、空きスペースはほとんどない。建物の増築も検討する必要がある。

技術開発のための新たな施設を置く案については、単なる研究者の定員増をもくろむのではなく施設ならではの役割を正面から見据えたものである点、重要な指摘である。取り上げる技術の分野は分子科学に直結したものであることが望まれる。63年案では、その技術分野の指摘にまで至っていない。レーザーの技術開発は、この点で最も適した分野ではなかろうか。時限的組織というのではなく、以下に示すレーザー開発研究センターとして、現在の機器センターの分光関係を拡充する形で組織してはどうか。

技官の処遇についての問題はこの小報告でまとめられるようなものではないが、上記提言との関連では、この数年の間に、提言(ii)を実現させ、提言(v)はIMSマシンをきっかけに実行されている。今後提言(i)をより強力に推進するため、研究所間の技官の時限的交換等を適時行なう体制づくりが望まれる。技術部の設立とそれに伴う技官の人事体系の改革に、継続して努力を払う必要がある。

以上のA.とB.を考慮して、以下のような再編を提言する。

C. 研究施設の再編と研究センターの創設

既に4.で述べた通り、機器センター、低温センター、化学試料室を、分光・レーザー関連と物性関連に分け、しかも研究系と一体となって開発・研究を推進するレーザー開発研究センターと物質開発研究センターを創設する。それぞれの研究センターの特徴を改めて要約すると次の様になる。

レーザー開発研究センター（仮称）

(i) レーザーのユーザーではなく、“道具としてのレーザーの最前線”を研究開発する研究者を置く。例えば、超短パルスや赤外領域等違う方向の専門家2名を専任の助教授として配置する。

(ii) 上のような組織を想定するならば、分子科学研究におけるこのセンターの意義は、レーザー開発とそれを使う研究との相互の連携、協力がどれほど緊密になされるかにかかっている。その意味で、研究系の研究室が併任の形でこのセンターの組織に加わる。

(iii)各種レーザーを充実させ、維持管理を行なう。

物質開発研究センター（仮称）

(i) 新物質の開発とその物性解析を行うことを目的とする。

(ii) 物質開発に関しては、レーザー開発の場合と同様、研究系との緊密な相互連携・協力体制を作る事が非常に重要となる。この為に、研究系の研究室が併任の形で参加出来る体制を作る。

(iii)現在機器センターで保有している物性測定装置に加え、一研究室では購入が不可能な物性測定機器を充実させ、所内外の共同利用のために集中管理する。これに関連して専任の助教授1名を配置する。この助教授は機器管理を行う研究者で、低温物性などの専門家を想定している。

(iv)液体ヘリウムの供給は、本センターの重要な業務の一つであるから、共同利用の機器管理のためにこれに支障が出ないよう、技官定員を確保する。

(2) 極端紫外光実験施設

A. 将来計画としての検討事項

(i) 観測系

世界で唯一の分子科学専用施設として10年ほど前から極端紫外光実験施設（UVSOR）の極端紫外光を利用した研究が行われてきており、放射光分子科学の研究分野を６つの大きなカテゴリーに分けてそれぞれの分野で大きな成果を挙げてきた。６つの研究分野とは(1)分光実験、(2)光電子分光実験、(3)光化学実験、(4)化学反応素過程実験、(5)固体・表面光化学実験、(6)光励起新物質合成実験である。各研究分野毎に２つのテーマをそれぞれ3年計画で進めているが、現在、年間９テーマまで認められている。ビームラインはテーマに合わせて整備してきており、現在、建設中の最後の１本を含めて20本ある。今後、新しい研究テーマに合わせてビームラインを建設するには、既設のビームラインのスクラップアンドビルドをおこなう必要があり、現在、新たな研究テーマの探索とスクラップアンドビルドの対象になるビームラインを検討しているところである。いずれにしてもテーマ数の倍以上のビームラインがあるので、当初から計画している研究分野を今後も進めて行くには12テーマまでフルに認めてもらう必要がある。

さらに、新しい研究分野として(7)レーザー・放射光多光子実験をスタートすべきである。これは分子科学の発展に重要な役割を果たしてきた放射光とレーザーという２つの光源を組み合わせた実験によって、それぞれの光源だけでは得られないまったく新しい情報を得ようとするものである。これまで、世界中の放射光実験施設が放射光とレーザーを組み合わせた実験に興味を持ち、具体化を進めてきているが、放射光と組み合わせて分子特有の多様性、複雑さを解明するために必要とされる高度なレーザー技術が確立されていないために、成果が挙がっていない。放射光とレーザーを組み合せた実験により分子科学の新たな研究分野を開拓するためには、放射光、レーザー、そして分子科学の３分野の研究者の緊密な協力が不可欠である。世界で唯一の分子科学専用放射光実験施設を有し、レーザー開発研究センターを計画している分子科学研究所は、このような新しい研究分野で成果の挙げられる世界で唯一の研究機関である。極端紫外光科学研究系を新設したとき、その研究内容としてレーザー光と放射光を併用する研究計画があり、以来、いくつかの試行的研究は行っているが、目に見える形の成果が挙がっていない。これは主にUVSORからの放射光に同期する高繰り返しのレーザーが未開発であったためとUVSOR施設側に放射光の同期制御を担当する研究者を欠いていたためである。将来、レーザー開発研究センターにおいて3分野の研究者の緊密な協力によって、UVSORの放射光と同期する高繰り返しレーザーの開発を行なうのが良い。

(ii) 光源系

UVSORの光源装置は2.5世代とも呼べるリング状加速器（蓄積リング）であり、偏向部以外に直線部の挿入光源も利用できるものである。挿入光源に使える直線部は３カ所あり、これまで、アンジュレータ（直線偏光）、自

由電子レーザー（FEL）、ウィグラーを導入し、実験をおこなってきた。特にFELでは世界に誇る著しい成果を挙げてきた。しかし、UVSORのリングは放射光専用に設計されており、FEL研究には制約があるため、UVSORでのFEL研究はあと１年で基礎的研究を完了することとなった。現在、すでにFELに使っていた直線部に円偏向アンジュレータを挿入する計画が始まっている。

蓄積リングによる自由電子レーザー（FEL）は短波長レーザーとして非常に有力な候補であり、広いエネルギー範囲のチューナビリティにも特徴があるが、現在のところFELは研究開発段階にあり実用的ではない。しかし、これまでのUVSORにおけるFELの研究成果に基づけば、実用的なFELを発生させることが可能である。将来、新たにレーストラック型のリングを建設し、紫外から可視領域（220～600nm）の実用FELの開発を行ない分子科学研究に利用するとともに、同じリングを用いてアンジュレータによる超高輝度放射光の基礎的研究も行える事が望ましい。また、FELは通常のレーザー光に比べ質的に必ずしも優っているとは言い難いが、放射光との同期性は無視できない大きな利点であり、将来の展望を開くFELの一つの方向として、放射光とFELを組み合わせた実験にも取り組むべきである。

B．研究体制、組織

（i）観測系

専任２部門（既設助教授２、客員助教授１、助手３のうち、
客員助教授の専任化、および、新規研究分野(7)を行う助教授１、助手１の増員を要求）
研究系からの併任（２グループ）
レーザー開発研究センターからの併任（１グループ）

研究系からの併任には施設長のグループを含むため、専任部門には教授は置かない。また、研究系から１研究グループ、レーザー開発研究センターから１研究グループが所内併任し、施設側で新設する研究チームと協力して、新規分野(7)の研究を推進する。

（ii）光源系

専任１部門（既設助教授１、助手１に新たに 教授１、助手１を追加）

この専任部門はUVSORの光源の改良に加え、FEL専用リングの建設、高輝度アンジュレータの基礎研究、さらには分子科学専用超高輝度リングの建設を10年以上にわたる長期的ビジョンに基づいて実行していく専任部門である。

（注）「原則として内部昇任を行わない」という哲学を分子研が堅持する事は大事であるが、極紫光施設（光源系）の特殊性から、弾力的運用で特殊事情を認める事があってもよいとする意見があった。

付録A. 将来計画委員会研究分野検討委

アンケート（7月22日実施）集計結果

アンケート送付先・・・・所内委員12名

回　　収・・・・・・・・　　11名

1. 人事公募分野の決定方法について

(1) 系外の人を含む委員会を作る（数人程度？）

(2) 前任者の影響を避け、系の構成に応じて検討開始時期を決定

(3) 外部意見の取り入れを

(4) 系の意見・説明を重視すること

(5) 各グループがあってほしい分野を提案して必要性を議論

(6) 今のままでよい

(7) 国際的視野での意見も集めること（但し一般論として）

2. 国際研究協力について

(1) 負担の軽い形での支援を

(2) 外国人ポスドク制度の導入

(3) 事務局の強化

(4) 本当に意義のあるもののみに

(5) リーダーの見識にまかせる

(6) 包括的・柔軟な運用

(7) 多すぎる。一部を大学にゆずり整理

(8) 無理をしないこと

(9) 研究会だけでなく実質的研究協力を

3. 現存施設のあり方について

(1) 施設助教授は技術の専門家の方が良い

(2) 各施設の責任部署を明確に

(3) 施設に教授がない（内部昇格もない）長期的運営方針がない

(4) 助手・技官の世話は誰が？

(5) よく考えて大胆な再編の可能性も

(6) 人員不足

(7) 施設自体の研究技術目標も必要、スタッフの自主性

(8) 相関と化学試料室の将来計画を一緒に

4. 施設の将来像について

(1) 設計・制作・計算・ソフト開発・受注を行う施設

(2) 物性分野で新しい施設の必要あるか

(3) レーザー関係のサポート体制の強化

(4) 電算センターは将来計画の様に。但し、化学研究ネットワークとの関係？

(5) ガラス細工施設の拡充

(6) 化合物ライブラリー

(7) 生命科学指向の為同位体を扱う施設

5. 現行の系のあり方及び各系の活動の将来像について

一般論	(1) 「動力学」の用法整理
	(2) 客員、流動部門の系間バランス
	(3) 学問的交流に好都合な構成を
	(4) 研究系の肥大化避ける、支援体制の強化、新分野はスクラップアンドビルドで
	(5) 何らかの見直しは必要
	(6) 特に問題を感じない
	(7) 重点領域変化しているので考え直す必要あり
	(8) 研究分野の消長に対応出来ているか？
	専任２部門を柔軟運用にしては
理　論	(1) 量子化学の強化、計算環境を利用したテーマ開拓
	(2) 理論第四の実現で拡充したい
分子構造	(1) 特に問題なし
	(2) 電波から赤外に亘る高分解、天文学との境界等必要
電子構造	(1) レーザー化学を軸として化学反応観を涵養しつつある
	(2) 分子構造との間で再編成してもよい
分子集団	(1) 物質開発組織を系外に
	(2) 物質理論の２～３のグループをどこかに
極紫外光	(1) 新しく、各グループが将来を考えるので特に問題なし
	(1) 錯体研究施設の速やかな独立を望む
	(2) 分子研の体力に応じて支援は慎重に
相　関 及び 錯　体	(3) 「有機金属分子科学系」「無機・・・・」及び「生物・・・・」に再編しては
	(4) 相関を強化し、化学試料室及び機能分子システム研究センターを責任部署にする
	(5) 錯体独立しないなら相関と合体して改組
	(6) 慎重に
	(7) 生物系を相関に含めていく
	(8) 錯体施設としての重点を合成及び反応に
	(9) 他の系との相互作用が大きければよい
	(10)相関の斬新な組み替え必要か
	(11)相関：タイムリーな分野を当てる系として
	(12)分子研の一部として考えていく
	(13)生命科学と物質科学の指向が強くなる

6. 分子研全体としての将来の新しい研究分野について

(1) 生体関連分子を扱う系を作る

(2) 各研究分野の未来を予測する事を研究テーマとする研究機関を作る

(3) 20数年前の重要分野のいくつかはほぼ解決された。伝統的分野を維持・高揚すると同時に分子科学全体を拡げる

(4) 環境科学の分子科学的基礎研究

(5) 生物系。相関を一部そちらにシフトしていく

(6) 生体関連金属錯体及び有機金属錯体

(7) クラスターの構造化学、低温固体表面反応

(8) 宇宙科学、生命科学、海洋科学的指向の分野

(9) 生命関連分野

7. 特別研究、COE、新プロジェクト等

特別研究

(1) 分子の機能を更にユニークな方法で取り出すこと。
　　鋭いピークと拡がりを持つテーマ
(2) 遷移金属を主鎖に持つ共役系の基礎研究
(3) クラスターの構造と反応
(4) 生物分子科学（生物分子分光）
(5) 生体物質の動的挙動

COE

(1) 計算機環境を背景としたテーマ
(2) SOR及び計算センターを中心に大型で
(3) もっとはっきりした国際共同研究が必要?
(4) 分子研として申請していくべき
(5) 「複合系制御」をキーとする
(6) 極紫外とレーザーを結びつける構想

新プロジェクト

(1) 自由電子レーザー開発施設
(2) UVSOR新リングの建設
(3) 金づるの為だけで新施設を作るべきでない
(4) 分子機能センターをレベルの高いものに
(5) レーザー開発センターの様なもの
(6) 多次元金属－金属多重結合系
(7) 星間化学研究センター
(8) 物質－水を中心課題にしたもの
　　反応－光合成反応、N_2固定反応、水の酸化分解
(9) 物質開発研究センター

付録B.　6月9日付実施のアンケートの「4.現在の分子科学研究所に含まれていないが、今後取り入れる必要のある研究分野」の集計（教授・助教授全員を対象するアンケート）。

（番号）	分　　野	分野を掲げた人の数
1.	生体関連分子の分子科学	9
2.	高分子科学	4
3.	環境分子科学	3
4.	宇宙化学	3
5.	分子科学計算専用コンピュータの電子工学・情報	2
6.	クラスター科学	1
7.	高圧科学	1
8.	物質探索シミュレーション	1
9.	組織化された場での有機化学反応	1
10.	エネルギー関連	1
11.	非分子性結晶内の強相関現象	1
12.	液体の構造と動力学	1
13.	レーザーとSORの組合せによるポンプ・プローブ	1
14.	化学反応制御の系統的研究	1
15.	超分子化学	1
16.	分子の光機能	1
17.	粒子線ビームを利用した化学	1
18.	常温核融合	1
19.	一段と進展した錯体関連化学	1
20.	分子エレクトロニクス	1
21.	無機材料の機能	1
22.	優秀な人を招き入れ自由にやらせる	2

付録C.　新規計画に伴う人員構成（助手以上のみ）の参考資料

新計画による変更部分

a）専任

	教授	助教授	助手
レーザー開発研究センター	0	4	4
物質開発研究センター	0	4	4
UVSOR			
観測系	0	4	4
光源系	1	1	2
相関研究系	2	2	4
計	3	15	18

b）所内併任

レーザー開発研究センター　：3研究室

物質開発研究センター　：3研究室

UVSOR観測系　：3研究室

現在の関連施設及び研究系部分

	教授	助教授	助手
機器センター	0	1	3
化学試料室	0	1	1
低温センター	0	0	1
UVSOR	0	3	4
相関研究系 （専任部門）	1	1	2
錯体研究施設 （専任部門）	2	1	3
計	3	7	14

現在の客員で振り替え対象部分

	教授	助教授	助手
研究系客員２部門	2	2	4
UVSOR客員	0	1	0
錯体研究施設客員	2	2	0
計	4	5	4

5−3　研究組織検討小委員会報告書

メンバー：谷村、花崎、松本、薬師、丸山、磯邊、宇理須、田中、中沢、高橋、北川（部会長）

オブザーバー：吉原委員長、伊藤所長

会合日程　　8月9日　　13:00～16:00

8月30日　　9:00～12:30

10月12日　　9:00～12:50

1．分子研各種制度

- 所長推薦：教授会議での投票と運協での協議を交互に何回か繰り返しながら、最終的に運営協議委員会議（運協）が決めるという現行の方法が最良である。“運協が決める”という基本原則は創設のときの精神でありここでは議論しない。
- 運営協議員の選び方：学会等連絡委員会において決定する現行の方法は適当である。また、本委員会の構成〔分子科学研究会推薦7名、日本学術会議化研連推薦2名、物研連推薦2名、結晶研連推薦1名、および分子研教授・助教授5名〕は適当である。分子科学研究会への分子科学者の関心を高めることが大事であり、そのための努力をさらに行う。
- 人事公募：(a)公募分野検討会のための教授・助教授懇談会:これまで行っていた前任教授の講演を聞くことはやめる。b)新公募分野の原案の提案:当該研究系に任せる今迄のやり方では新しい分野が入ってきにくい。しかし専門家の意見を聞けるメリットがある。所長任命による ad hoc委員会を作ることにしてはどうか。

2．所内委員会

- 委員会が多すぎるので減らす方向で検討した。現在の委員会は実務的には全部必要であるという結論に達した。次に、委員会の統合または吸収・合併を検討した。極低温センター、機器センター、装置開発各運営委員会の統合、特別研究学生受入委員会と大学院委員会の統合を種々検討したが、設置目的がかなり異なるために困難であるので現状のまま継続することとした。設備安全委員会と実験廃棄物委員会を統合することは可能。放射線安全委員会は岡崎国立共同研究機構の規定で設置を定められている（規定集p.861）ので、他の委員会と統合することはできない。
- 出版のための委員会：分子研レターズ、要覧、分子研リポート等の出版関係の用務の大部分は庶務課が担当している。Annu. Rev.と大学院用オープンハウスの仕事をマニュアル化し、可能な部分を所長秘書室に担当してもらうようにしてはどうか。
- 渉外担当者の特別ポスト（副所長）をつくる、或いは所長のもとに運営担当の教官を置き、それを当番制にすることにしてはどうかという意見があった。

3．教授・助教授の研修制度および助手の留学期間

- 研究者が集中して研究することができるようにするため、研修制度、即ち一定期間人事部会と運協以外の全ての委員会から解放される期間を設けることを提案する。

  期間：1年間

  対象：教授、助教授：若干名。分子研着任後6年目から申請する権利を有する。但し、研究主幹を除く。申請者の中から所長が決定する。
- 助手の海外留学期間の制限を、これまで「6カ月以内」としていたものを「1年以内」にする。時期については各グループに任せる。

4．寄付講座：企業の寄付金で運営する講座で、一般には2～5年の契約、費用は約1,000万円/年。これを分子研に採用することの是非について検討した。外国人客員講座として適当かもしれないが、当面はこの方向の努力はしないことにした。

5. 国際協力

外国人研究者の増加に対処するため外国人担当の事務官の採用を望む声が研究者に強い。当面、日常的に起こる問題に対しては、非常勤職員（勤務時間、30時間/週）（秘書）で対処することを検討する。採用できる場合には、担当教官を一人決め責任を持って運営にあたる。外国人担当の秘書を設置する場合には、教官側と秘書側の仕事の分担の原則を明確にしておくことが必要である。

6. 予算

- 次年度特別研究経費申請およびヒアリングを１月に行うことについては早すぎるという意見もあるが、日程を考えると大勢は現行のままでやらざるを得ないという意見である。長期計画（２～３年）で実施したい者は添付資料をつけて、所長に申請する。

7. 流動部門

- 流動部門は分子研で始めた新しい制度であり、これまで多くの研究成果と制度上の成果を挙げてきた、しかしながら本制度は研究者の特別な努力と分子研および流動部門派遣大学に多くの犠牲を強いている面があり、制度的により整備されることが望ましい。これまでの分子研での経験に照らして、流動部門に関わる経費、流動研究者の身分などに　関していくつかの問題が指摘された。
- 流動部門の教官旅費を他の部門に比べて格段に優遇することを文部省に要求することにするが、当面は、分子研の他の研究部門の犠牲のもとに実行することにしてはどうか。
- 大学が人を出しやすいように配慮するため、親大学へ配分する非常勤講師の枠を文部省に要求する。
- 新規流動部門「分子クラスター」（平成８年度要求）には人と予算を集中し、研究にピークを出すという考え方で選ぶ。公募にしてはどうかという意見もあるが、実際には多くの困難がある。何らかの方法で本制度を一般に衆知させるように努力する必要はある（例えば『化学と工業』の掲示板に記事を書く）。就任予定の研究者と協力関係を形成する分子研の当該研究者が主体的にやるべきという意見が強い。

8. 博士研究員制度について

- 状況変化に臨機応変に対応できる機動的な研究体制をとって研究のactivityを高めるために、博士研究員を15人程度研究所が自由に採用できるようにしたい。そのために助手定員の一部を、１：３の割合でポスドク定員に振替えて、研究所独自に運用する制度を作ってはどうかという提案があった。これが文部省で受け入れられるならばそれを支持する意見が強かった。
- そこに採用する人を外国人に限るか、外国人も日本人も区別しないか、について意見が分かれた。

a) 外国人に限る方がよいという立場

Ⅰ）２年程度の契約期間の後の就職が外国人の場合すっきりする（契約の概念がはっきりしているため）。

Ⅱ）この制度が学術審議会の建議である「国際化」に沿っていてタイムリーな提案である。特にポスドク期間中に十分観察できるので、外国人を職員として採用するときのリスクが避けられる。

Ⅲ）現在分子研から毎年学振に申請している外国人特別研究員の数は相当数に上がるので、優れた外国人を採用できる可能性が高い。

Ⅳ）日本人若手研究者育成を目的とする、現行の「IMSフェロー」の制度と相補的な制度として両立し易い。

Ⅴ）日本人と外国人とを制度的および予算的に同一に扱えない場合があり得るので、日本人と外国人共用の制度は難しい。

Ⅵ）今後日本人の人口が減る傾向にあり、若手研究者の供給源を外国に向けて拡げておく必要がある。

b) 日本人も含めた制度にする方がよいという立場

Ⅰ）各大学の助手定員が減少しつつある現状で、優秀な大学院修了者を受け入れる制度をつくることが重要であること。

Ⅱ）日本人助手の定員を外国人博士研究員の定員に変えることには大学の反発が予想されること。

Ⅲ）博士研究員制度の良さを国内に知らせ、ポスドクへの認識を変えさせるには日本人ポスドクでないとインパクトが小さい。

どちらを採用するかは文部省との交渉過程で所長に判断していただくことにする。但し、この制度は「日本人の若手研究者を養成するためのスカラーシップ」として要求するのでなく現場研究者の切実な声を反映した「研究推進のためのフェローシップ」として要求するという基本精神を確認した。

5−4　共同研究・教育検討委員会報告書

平成６年12月24日

平成６年９月12日に将来計画共同研究・教育検討部会が伊藤光男（分子研所長）、小川禎一郎（九州大学教授）、関　一彦（名古屋大学教授）、田中晃二（欠席：書面にて参加）、花崎一郎、中村宏樹、薬師久彌、見附孝一郎、齋藤修二（部会長）の各委員の出席で行われた。

Ⅰ　共同利用・共同研究の検討

分子科学研究所は創設以来、協力研究、課題研究、招へい協力研究、所長招へい、研究会、施設利用などの共同研究を行ってきた。また、UVSOR施設の完成後昭和60年以来、同様な形でUVSOR共同利用研究も実施している。

最初に、共同研究と客員部門の研究活動の内容や対応についての質問がだされたが、客員の研究活動については所内の対応者の積極的な対応によっていること、また、客員は外部の意見を教授会議に反映させる役割もあること、一方、協力研究は外部からの希望に応じて行われていることが確認された。客員部門の研究活動をより実質的なものにするためには、客員助教授部門は共同研究により重きを置くようにし、これに応じて予算も配分する案、課題研究は客員部門の研究活動と協力研究の中間に位置づける考え方、また、客員と課題研究をセットにする案も出された。

協力研究については、所外から応募する場合の問題点、所内対応者の負担の問題などの議論があったが、現行の所内対応者一人当たりの来所人数・来所日数19人日は妥当であり、形態としても妥当であるとの意見が多かった。

共同研究によって開発されたハードウエアーの取扱いについては、自動的に所内対応者の備品設備になるのではなく、共同研究者間で話し合い、柔軟に対処するのが望ましいとの意見がだされた。これと関連して、共同研究により開発された装置の内、オリジナルでレベルの高いものについては公開する方が良いとの意見が出された。

研究会については、科学研究費その他の費用よる類似の研究会が年度末に集中する傾向があるが、前期後期の件数の配分や実施時期の調整で分子研の研究会の独自性が出るようにすべきであるとの意見が出された。

共同研究全体としては、妥当な活動状況にあるとの認識であるが、今後客員部門の研究活動をより実質的に改革する場合には、課題研究の改革や再検討が必要との意見が多かった。また、将来的には分子研を高等研究共同利用機関にするための共同利用・共同研究の方策の検討の必要性の指摘もあった。

Ⅱ　国際共同研究事業の検討

分子科学研究所が行っている国際共同研究事業としては、二国間研究協力の日米、日英、日韓、日中、日本イスラエル、日本スペイン、日本インドがあり、他に外国人客員部門、文部省外国人研究員、学振外国人特別研究員などで多くの外国人研究員を受け入れるとともに、年２～３回、岡崎コンファレンスを開催している。

国際研究協力については、将来計画研究分野検討小委員会においても検討を進めていて、“現在の国際研究協力事業が二国間毎の個別運用で、しかも多岐に亘りすぎる嫌いがある事から、1.事務局の強化、2.渉外係の設置、3.予算の一括化による包括的で柔軟な運用を行える様にする必要がある”との結論を得ているので、当部会はこれをたたき台として検討を行った。

分子科学研究所が担当する二国間研究協力については、多くの場合所外の研究者の交流をお世話する場合が多いが、外からの印象は、活動が必ずしも周知されておらず、世話機関としての立場がはっきりしないとの指摘があり、これにたいしては、今後協力事業の情報をできるだけ公開にする必要があるとの認識に到った。また、日中、日韓などの二国間研究協力事業にたいしては、予算の裏付けがなく、将来、研究所が近隣アジア諸国に開かれた研究所として活動して行くためには、相互交流制度の整備、若手招へい制度の整備、専任スタッフの国際化も視野においた実質的な対応方法の整備が必要であるとの議論があった。これと関連して、研究協力事業対応者の負担軽減の観点から、協力事業の適正規模および先進国と途上国のバランスを考慮する必要性の指摘もあった。

一般に外国人博士研究員を受け入れて行く場合、受け入れの決定まで一年以上の時間が必要なことが多く、多くの良い人材を受け入れるためには、予算の柔軟な執行体制の整備が望まれる。

分子研の職員が外国へ出る場合、教授、助教授にたいしてのサバテイカル制度の設定や、助手の留学期間の上限の緩和が望ましいとの意見もあった。

Ⅲ　大学院教育の検討

分子科学研究所は平成元年度より総合研究大学院大学の構造分子科学専攻及び機能分子科学専攻を受け持ち、これまでに81名の学生を受け入れ、平成５年度までに24名の学位取得者を送り出している。また、全国の大学の大学院教育への協力として、昭和52年度以来17年間で323名の学生を受け入れてきた。

大学院生をうけいれることにより、優れた研究者の育成、常に若い人たちが研究に参加することによる研究への刺激、所内若手スタッフの大学院教育への参加など多くのメリットがある一方、事務手続きの増加などデメリットも大きい。

現状での一番の問題点は、如何にして優秀な学生を集めることができるかにある。このためには、入学試験時期、学生募集方法などについて議論されたが、多くの大学での大学院の定員増の問題、学生の流動性の問題なども絡み、解決は難しいとの意見が多かった。この点に関しては、分子研としての課題であるのみならず、総研大全体の問題として提起、検討されるべきであるとの認識に到った。また、修士課程設置の問題とも関連して、５年間一貫教育の考えかたが提案されたが、設置に伴うデメリットの指摘も多かった。学生の立場を考えた場合、研究を主とする限られた環境、寮や奨学金の不備など改善されるべき問題も多い。分子研での若手研究員の有り方の一つとして、博士研究員制度を拡充する考え方も提案された。

総研大の特殊性から生ずる東京における会議による時間的負担の問題については、今後、マルチメデイア化によるTV会議の導入、会議の持ち回りによりある程度解消されるだろうとの議論があった。

5−5　UVSOR検討小委員会報告書

1．実施方法

部会委員　　岩田（部会長）、小杉（補佐）、鎌田、木下、宇理須、見附
　　川副、西尾、薬師、吉原、松本

オブザーバー　中川和道、浜、平谷、田中慎一郎、木村真一、伊藤所長

開催日　　平成６年10月４日、10月20日

昨年度の極端紫外光の研究分野についての点検評価結果、今年度のUVSOR施設の点検評価結果、将来計画研究分野検討小委員会報告を資料として議論した。特に将来計画研究分野検討小委員会報告に書かれている内容について議論を進めた。その後、３回にわたる将来計画委員会においてさらに検討を進めた。

2．概要

(1) 現在のUVSORの加速器をどうするか

建設から10年以上を経て、加速器の部分で老朽化対策を講じる必要が出てきているので、これからの10年は予算的に次第に苦しくなってくる実態が示された。また、UVSOR光源関係者から、加速器の性能は初期のデザインに縛られるので、現在のリングの改良で高輝度化などの最新の放射光加速器技術を導入することは根本的に不可能である点が指摘された。一般的に、加速器はそれを設計して立ち上げた研究者たちが時間をかけて継続的に性能向上を図っていくものであり、活発な人事流動がUVSORの加速器の維持や性能向上を困難にしている面がある実態も説明された。今年度のUVSOR施設の点検評価結果に強調されているように加速器分野を含む光源関係の組織の補強（教授１、助教授１、助手２）の緊急度が高いことに概ね同意を得た。施設側から、加速器分野では内部昇格に対する制限を他分野とは別に考えて欲しいという強い要望が出された。なお、10年以上先の将来を考えるのは現時点では非常に難しいが、10年以上先に加速器の安定運転が可能であっても、UVSORを利用した分子科学研究のレベルが世界的に見て陳腐化する危険性もある。しかしながら一方、UVSORのリングは挿入光源を持つ第2.5世代のリングであるので、新たな挿入光源の導入や、すでにある挿入光源の高性能なものへの置き換えなどは生き残り作戦として重要であるとの指摘があった。

(2) 現在のUVSORの分光器や測定装置をどうするか

現在、老朽化したものや研究の趨勢から見て陳腐化したものが出てきているので、単なる老朽化対策を講じるのではなく、計画的にスクラップアンドビルドを進める必要が指摘された。この際、現在設立準備が進んでいるUVSORユーザー会において意見の汲み上げと調整が必要である.すでに、いくつかのビームラインで、性能向上に向けてUVSOR課題研究を通じ、所外の利用者を含めたスクラップアンドビルド計画が進行中であるが、全体的な計画を作り上げるにはしばらく時間がかかる旨報告があった。

(3) UVSORでどういうサイエンスを進めるべきか

これについては昨年度と今年度の点検評価結果に概ね従うべきことが確認された。すなわち、UVSORの６本の柱（分光実験、光電子分光実験、光化学実験、化学反応素過程実験、固体・表面光化学実験、光励起新物質合成実験）の一層の推進であり、具体的研究課題としては、光誘起化学反応・表面反応の研究、極端紫外・軟X線を利用した化学的見地に立った分光法、赤外光を利用した研究、分子固体・薄膜の研究などである。

また、レーザーと放射光を併用し同期をとった研究については５年ほど前にUVSORで挙げた成果が世界的に有名であるので、早急に新たな成果を挙げるべく組織を作る必要性が指摘された。レーザーと放射光との同期実験の例は世界的にもまだ少なく、技術的困難を伴うが今後の発展が大きく期待できる。レーザーと放射光の組み合わせによる分子科学実験の中には必ずしも厳しい同期が必要でない実験も考えられるので、そのような研究の検討も必要である。

さらに、自由電子レーザーと放射光を併用した研究もフランスなどではすでに開始されているので、自由電子レーザーを開発した経験をすでに持つUVSORも、同期の困難が原理的にないこの組み合わせの研究方向を探るべきであるとの意見もあった。

(4) 第3世代リングからの高輝度放射光を利用した分子科学研究をどのように進めるべきか

まず、分子研としては硬X線を利用した新たな研究を展開することは考えないことが確認された。さらに、現在、文部省下ではなかなか大型の放射光施設の建設が認められにくい状況であり、分子研独自で極端紫外光・軟X線の領域の新施設計画を、今の時点で立案するのは非常に難しいとの説明があった。世界的には第3世代の優れた極端紫外光・軟X線の領域の放射光施設が各地（韓国、台湾、アメリカ、ドイツ、スウェーデン、イタリア等）で建設されており、日本でも建設が必須であるが、今のところ、東大物性研の計画があるだけである。東大物性研の高輝度放射光光源計画が文部省に認められた段階で、分子研独自のビームラインを建設できるように働きかけることも放射光分子科学の新たな展開のためのひとつの選択肢ではないかとの議論があった。一方、その際分子研の独自性や分子研にある現有設備との関連などについての問題点も指摘された。高輝度光源は高分解能分光を行うのに非常に適しており、内殻励起の分子分光（振動分光、解離ダイナミクス）の研究に不可欠になることや放射光が広がっていないのでレーザーを併用する場合でも適している点が指摘された。

(5) UVSORの次に来るものは何か

将来計画研究分野検討小委員会報告ではレーザー開発研究センター（仮称）の創設に関係して、レーザーと放射光を併用した研究を推進すべき研究組織の提案、自由電子レーザー（FEL）と放射光を併用した研究を進めるための小型FELリングの建設と研究組織の提案が述べられている。そこで提案されていたFEL専用小型リングの是非については本部会ではさまざまな観点から議論が行われた。ここで考えられているFEL専用リングの形状は長い直線部（20m以上）を2本持つ、いわゆるレーストラック型であり、挿入光源を二つ挿入できて、その一つをFEL専用、もう一つには特徴ある挿入光源を設置することの出来る蓄積リングである。さらに、直線部だけでなく偏向部からの光の利用も可能であるという指摘もあった。また、将来計画研究分野検討小委員会報告にあるFELの発振波長については現在、実用化が保証されているものを記しているだけなので、通常のレーザーと比べて特徴がないものになっている。また、リング状加速器の特徴を生かせるのは、赤外FELではなく、短波長FELなので、開発研究を進めれば通常のレーザーではカバーできない波長領域の光がFELで得られる可能性があるとの説明もあった。いずれにしても、レーストラック型リングの建設計画は技術的な可能性も含めて、またより長期的な観点とも関連づけながら、充分検討する必要があるとの結論になった。上記のリングを含めて新リング計画をどうするかということは、UVSORの10年後、20年後を考える上で極めて重要な問題である。加速器系のUVSORスタッフ（加速器分野の助教授は半年以上の空席の後最近決定された。この間助手1名だけであった）の増強を進めるとともに、岡崎の土地で、分子科学研究のための放射光光源をどう発展させ・建設していくかを検討し続けるために本検討部会の存続が必要がある。

6. 資　料

6−1　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・ゲリンシャー　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	豊田中研所長	○	○					
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	東大名誉教授	○						
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	東工大理教授，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，理化学研究所理事長		○59.2.16～	○	○			
斎藤　喜彦	慶應大理工教授			○	○			
森田　正俊	豊田中研代表取締役			○	○	○		
伊東　橅	東北大理教授，徳島文理大薬教授			○	○	○		
鈴木　進	東北大金材研所長			○				
豊沢　登	東大物性研所長，中央大理工教授			○	○	○	○	
平野　龍一	東大名誉教授			○	○			
藤田　栄一	大阪薬科大学長(京大名誉教授)				○	○	○	
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(株)顧問				○	○		
朽津　耕三	東大理学部長(長岡技科大教授)				○	○	○	○
田丸　謙二	東京理科大理教授				○	○	○	○
早川　幸男	名大学長				○62.7.22～	○	○4.2.3死亡	
千原　秀昭	大阪大理教授，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	統計数理研究所長					○	○	○
三ヶ月　章	東大名誉教授					○	○	
伊藤　昌壽	東レ(株)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	北大触媒研センター長，熊本大理教授						○	○
秋本　俊一	学士院会員(東大名誉教授)							○
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	豊田中央研究所長							○
守谷　亨	東京理科大学理工学部教授							○

外国人評議員

Heinz Gerischer（マックスプランク財団フリッツハーバー研究所長）'76.1～'80.1

Gerhart Herzberg（カナダ国立研究所研究員）'76.1～'78.1

Gerog Porter（英国王立研究所教授　化学部長）'80.1～'83.5

Melvin Calvin（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）'78.1～'82.1

Per-Olov Löwdin（フロリダ大学教授）'83.6～'86.5

Michael Kasha（フロリダ州立大学教授）'82.1～'85.5

George Clau De Pimentel（カリフォルニア大学教授）'85.6～'86.5

Robert Ghormley Parr（ノースカロライナ大学教授）'86.8～'89.5

Manfred Eigen（マックスプランク物理化学研究所主任研究員・ゲッチンゲン工科大学教授）'86.8～'87.12

John Charles Polanyi（トロント大学教授）'89.6～'94.5

Heinz A. Staab（マックスプランク財団会長・ハイデルベルグ工科大学教授）'88.1～'91.5

El-Sayed Mostafa Amr（ジョージア工科大学教授）'94.6～

Peter Day（オックスフォード大学教授・英国王立研究所長）'91.6～

6−2　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　東工大理教授	○			○	
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　　檄　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		○	○	○	
斎藤　喜彦　東大物性研教授		○		○	○
諸熊　奎治　分子研教授		○	○	○	
吉原經太郎　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.50.7.15～ 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
田仲　二郎　名大理教授					○
千原　秀昭　大阪大理教授					○
土屋　荘次　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					○

6−3　歴代の運営協議員（S.56.5〜）

◎　会　長（議　長）　人−人事選考部会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（姫路工業大学長）	○○						
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　荘次	東大教養学教授	○共		○				
豊沢　豊	東大物性研教授	○人						
廣田　襄	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	〃	○					◎○人（会長交替 4.2.14）	
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　二朗	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	○人
丸山　有成	〃		○	○	○	○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	○	○人
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		
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

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
木田　茂夫	〃				○～63.3.31			
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	○
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
宇理須恆雄	分子研教授							○共
中村　　晃	分子研教授							○

6−4　研究会開催一覧表

年度	研究会名	提案代表者	旅費支給者
S51 (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	田仲二朗（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	廣田榮治（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	土屋荘次（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）	
S52 (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
S53 (14件) 170名	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
	光電子スペクトル強度	木村克美（北大応電所）	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

年度	研究会名	提案代表者	旅費支給者
S54 (16件) 210名	Theoretical Aspects of Chemical Reactions and Molecular Interactions	諸熊奎治（分子研）	16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関発と応用	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
S55 (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　穣（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
S56 (11件) 147名	光エネルギーの化学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及び分子間相互作用	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
	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

年度	研究会名	提案代表者	旅費支給者
S57 (12件) 171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
	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
S58 (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運用と展望	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—	土屋荘次（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
	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
S59 (8件) 157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（慶応大理工）	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
S60 (10件) 143名	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
	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

年度	研究会名	提案代表者	旅費支給者
S61 (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
S62 (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
S63 (9件) 187名	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
	第3回日韓分子科学シンポジウム	花﨑一郎（分子研）	25名
	スピン化学の新展開	廣田　穣（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
H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

年度	研究会名	提案代表者	旅費支給者
H2 (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	藥師久彌（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（分子所）	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
H3 (10件) 91名	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	藥師久彌（分子研）	6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
H4 (8件) 113名	有機無機複合系の導電性と磁性	藥師久彌（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
H5 (9件)	若手分子科学研究者のための物理化学研究会	高橋央宣（筑波大）	
	金属錯体のメゾスコピック相における化学	海崎純男（大阪大・理）	
	電子励起による非平衡ダイナミックス	篠塚雄三（山口大・工）	
	ピコ秒フェムト秒超高速分光学の研究	吉原經太郎（分子研）	
	新分子性物質創出への非局在電子系の設計・制御	中筋一弘（分子研）	
	放射光を利用した分子分光・解離ダイナミックス研究の新展開	小杉信博（分子研）	
	光誘起電荷移動過程とその関連分野における最近の進歩と将来	正畠宏祐（分子研）	
	配位化合物の光工学の現状と将来	福田　豊（分子研）	
	フラーレンの固体化学	藥師久彌（分子研）	

年度	研究会名	提案代表者	旅費支給者
H6 （7件）	若手分子科学研究者のための物理化学研究会	長野八久（阪大・理）	
	有限多電子系の運動様式の統一的理解	市村　淳（宇宙研）	
	高圧科学による分子性物質の創成	城谷一民（室蘭工大）	
	化学物理の諸問題とその発展	谷村吉隆（分子研）	
	酸素結合蛋白質の精密構造機能の研究の新展開をめざして	今井清博（阪大・医）	
	分子―表面ダイナミックス	松島龍夫（北大・触媒セ）	
	直線偏光、円偏光放射光を用いた分子科学研究とその周辺	太田俊明（東大・理院）	

6−5　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 0564-55-7135
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

6−6　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

岡崎国立共同研究機構分子科学研究所点検評価規則

（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，もつ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，研究所長をもつて充てる。

（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掲げ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。

分子科学研究所点検評価のワークショップ

◎印は委員長

研究施設名	所内外の別	氏　名	所　属・職　名	備考
電子計算機センター	所　内	◎岩田　末廣	電子計算機センター長	
		小杉　信博	極端紫外光科学研究系　教授	
		青柳　睦	電子計算機センター　助教授	
	所　外	平尾　公彦	東京大学工学部　教授	
		館脇　洋	名古屋市立大学計算センター教授	
極低温センター	所　内	◎丸山　有成	極低温センター長	
		鹿野田一司	分子集団研究系　助教授	
		高橋　保	錯体化学実験施設　助教授	
		木村　真一	極端紫外光実験施設　助手	
	所　外	大嶋　孝吉	岡山大学理学部　教授	
機器センター	所　内	◎齋藤　修二	機器センター長	
		宮島　清一	分子集団研究系　助教授	
		冨宅喜代一	機器センター　助教授	
	所　外	福田　豊	お茶の水女子大学理学部　教授	
		小谷　正博	学習院大学理学部　教授	
化学試料室	所　内	◎花﨑　一郎	化学試料室長	
		山下　敬郎	化学試料室　助教授	
		田中　晃二	錯体化学実験施設　教授	
	所　外	中筋　一弘	大阪大学理学部　教授	
装置開発室	所　内	◎北川　禎三	装置開発室長	
		宇理須恆雄	極端紫外光科学研究系　教授	
		加藤　立久	分子構造研究系　助教授	
		渡邉三千雄	装置開発室　助教授	
		内田　章	技術課長	
	所　外	村田　好正	東京大学物性研究所　教授	
極端紫外光実験施設	所　内	◎小杉　信博	極端紫外光実験施設長	
		岩田　末廣	理論研究系　教授	
		宇理須恆雄	極端紫外光科学研究系　教授	
		鎌田　雅夫	極端紫外光実験施設　助教授	
	所　外	木原　元央	高エネ研　放射光実験施設長	
		石井武比古	東大物性研軌道放射物性研究施設長	

6−7　分子科学研究所将来計画委員会規則

平成５年７月19日
分子研規則第２号

岡崎国立共同研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則

（設置）

第１条　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。）に，研究所の将来計画について検討するため，将来計画委員会（以下「委員会」という。）を置く。

（組織）

第２条　委員会は，次の各号に掲げる委員をもって組織する。

一　研究所長

二　研究所の教授数名

三　研究所の助教授数名

２　前項第２号及び第３号の委員は，各年度ごとに研究所長が委嘱する。

（委員長）

第３条　委員会は，研究所長が招集し，その委員長となる。

（専門委員会）

第４条　委員会に，専門的な事項等を調査検討させるため，専門委員会を置くことができる。

（委員以外の者の出席）

第５条　委員長は，必要に応じて，委員以外の者を委員会に出席させ，意見を聴取することができる。

（庶務）

第６条　委員会の庶務は，総務部庶務課において処理する。

附則

この規則は，平成５年７月19日から施行する。

6-8　分子科学研究所将来計画委員会専門委員会

平成６年度

委員会名	委員長等	氏名	所属・職名	備考
専門委員会	委　員　長	吉原經太郎	電子構造研究系　教授	
研究分野検討小委員会	委　員　長	中村　宏樹	理論研究系　教授	
	委　　員	岩田　末廣	理論研究系　教授	
		齋藤　修二	分子構造研究系　教授	
		森田　紀夫	分子構造研究系　助教授	
		鈴木　俊法	電子構造研究系　助教授	
		丸山　有成	分子集団研究系　教授	
		鹿野田一司	分子集団研究系　助教授	
		渡辺　芳人	相関領域研究系　教授	
		根本　尚夫	相関領域研究系　助教授	
		成田　吉徳	相関領域研究系　助教授	
		小杉　信博	極端紫外光科学研究系　教授	
		吉川　雄三	錯体化学実験施設　教授	
		中村　　晃	錯体化学実験施設　教授	
研究組織検討小委員会	委　員　長	北川　禎三	分子構造研究系　教授	
	委　　員	谷村　吉隆	理論研究系　助教授	
		花﨑　一郎	電子構造研究系　教授	
		松本　吉泰	電子構造研究系　助教授	
		藥師　久禰	分子集団研究系　教授	
		丸山　有成	分子集団研究系　教授	
		渡辺　芳人	相関領域研究系　教授	
		宇理須恆雄	極端紫外光科学研究系　教授	
		田中　晃二	錯体化学実験施設　教授	
		高橋　　保	錯体化学実験施設　助教授	
		中沢　　浩	錯体化学実験施設　助教授	
共同研究・教育検討小委員会	委　員　長	齋藤　修二	分子構造研究系　教授	
	委員長補佐	花﨑　一郎	電子構造研究系　教授	
	委　　員	中村　宏樹	理論研究系　教授	
		藥師　久禰	分子集団研究系　教授	
		田中　晃二	錯体化学実験施設　教授	
		見附孝一郎	極端紫外光科学研究系　助教授	
UVSOR検討小委員会	委　員　長	岩田　末廣	理論研究系　教授	
	委員長補佐	小杉　信博	極端紫外光科学研究系　教授	
	委　　員	吉原經太郎	電子構造研究系　教授	
		松本　吉泰	電子構造研究系　助教授	
		藥師　久禰	分子集団研究系　教授	
		宇理須恆雄	極端紫外光科学研究系　教授	
		川副　博司	極端紫外光科学研究系　教授	
		見附孝一郎	極端紫外光科学研究系　助教授	
		西尾　光弘	極端紫外光科学研究系　助教授	
		鎌田　雅夫	極端紫外光実験施設　助教授	
		木下　豊彦	極端紫外光実験施設　助教授	

6−9　分子研将来計画に関するアンケート

教授・助教授各位殿

分子研将来計画に関するアンケート

分子科学研究所将来計画委員会の活動の一環として、将来研究動向を調査することとなりました。アンケートに御協力下さるようお願い申し上げます。

1、貴殿の研究分野でここ２～３年の発展すると考えられる研究テーマ。

2、分子科学で、今後10～20年に亘って発展すると考えられる研究分野。

3、分子科学で未開拓の研究分野。

4、現在の分子科学研究所に含まれていないが、今後取り入れる必要のある研究分野。

必要に応じて理由を付してください。紙が不足の場合適当に足して下さい。

提出期：６月30日

提出先：秘書室

1994年６月９日

吉原　經太郎

6−10　研究所運営に関するアンケート

平成６年７月22日

＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿先生

将来計画委員会　研究分野検討小委員会アンケート

検討会の効率を上げる為下記のアンケートにご回答下さい。７月29日午後５時迄に理論研究系秘書室までお届け下さい。吉原教授による前回のアンケートと若干重複する面がありますが、改めてお願い致します。

(1) 現行の系及び部門組織に関する問題点

(2) (1)に関連して、特に相関研究系及び錯体研究施設のあり方について

(3) 今後新しく取り入れていくべき研究分野とその規模
　(複数ある場合は順位をつけて)
　　------何年位先からか？系の再編は必要か？必要ならどの様に。
　下記の(a)、(b)に分けて回答下さい。
　(a) 現行の貴系の活動の将来像について
　(b) 分子研全体として考えるべき新分野

(4) 特別研究の課題として将来有望なもの

(5) 研究テーマ上の大プロジェクトは考えられるか？新しいセンター構想も含めて

(6) 近い将来分子研をCOEとして申請していくとした時の構想
　[(4)、(5)も係る]。

(7) 新しい人事公募を行う時の分野決定の手続きについて

(8) 国際研究協力について(何かご意見があれば)

(9) 研究支援体制に対する新しい提言
　(a) 現存施設のあり方(一般論でも結構です)
　(b) 新しい施設の必要性・その他

(10)その他何なりとお気づきの事ありましたらお書き下さい。

以上　中村　宏樹

分子研レポート '94
－現状・評価・将来計画－

平成7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　〒173 東京都板橋区中丸町 10-10
製本　株式会社　デンショク