

分子研リポート'95

現状・評価・将来計画



分子科学研究所

「表紙画（油絵，F8）分子研－夏の昼下がり－ 伊藤光男画」

「分子研リポート'95」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	5
2-4 研究所の運営	6
2-4-1 評議員会	6
2-4-2 運営協議員会	6
2-4-3 人事選考部会	7
2-4-4 共同研究専門委員会	8
2-4-5 学会等連絡会議	8
2-4-6 教授会議	9
2-4-7 主幹・施設長会議	9
2-4-8 大学院委員会	9
2-4-9 特別研究学生受入れ審査委員会	9
2-4-10 各種の委員会	10
2-5 構 成 員	12
2-5-1 現在の構成員	12
2-5-2 創立以来の人事異動状況 (1996 年 1 月 1 日現在)	19
2-6 各研究系の概要	20
2-6-1 研究系及び研究施設	20
2-7 技 術 課	26
2-7-1 技術課の活動	26
2-7-2 技術研修制度	26
2-8 特別研究と岡崎コンファレンス	28
2-8-1 特別研究の経緯	28
2-8-2 第 5 期特別研究	28
2-8-3 岡崎コンファレンス	31
2-9 共同研究	37
2-9-1 共同研究の概要	37
2-9-2 1995 年度の実施状況	37
2-9-3 共同研究実施件数一覧	39
2-9-4 共同研究の研究形態の変更について	40
2-10 国際交流と国際協同研究	41
2-10-1 国際交流	41
2-10-2 国際共同研究	42
2-10-3 多国間の国際共同研究について	44
2-11 大学院教育	45
2-11-1 特別研究学生	45
2-11-2 総合研究大学院大学	47
2-12 定員と財政	50
2-12-1 定員	50
2-12-2 財政	50
2-13 共通設備	51

2-13-1	図書館	51
2-13-2	共同利用研究者宿泊施設	51
2-13-3	職員会館	51
2-14	地域社会との交流	52
2-14-1	国研セミナー	52
2-14-2	一般公開	53
2-14-3	見学受け入れ状況	53
3.	研究系及び研究施設の現状	55
3-1	理論研究系	55
3-2	分子構造研究系	72
3-3	電子構造研究系	82
3-4	分子集団研究系	93
3-5	関連領域研究系	109
3-6	極端紫外光科学研究系	121
3-7	錯体化学実験施設	137
3-8	研究施設	154
	電子計算センター	154
	機器センター	156
	化学試料室	158
	装置開発室	160
	極端紫外光実験施設	162
4.	将来計画	173
4-1	「分子制御レーザー開発研究センター」及び「分子物質開発研究センター」の創設	174
4-1-1	創設の基本哲学及び必要事項の要約	174
4-1-2	分子制御レーザー開発研究センター	175
4-1-3	分子物質開発研究センター	180
4-2	極端紫外光実験施設の将来計画（中間報告）	185
4-2-1	将来計画に関わる委員会等の概要	185
4-2-2	将来計画の中間報告	186
4-2-3	第1回 UVSOR 将来構想委員会報告	187
4-2-4	第1回 UVSOR II 検討会報告	189
4-3	電子計算機センター将来計画（中間報告）	192
4-3-1	現有計算機の構成と利用状況	192
4-3-2	将来の計算機システム	193
4-3-3	分子研における計算分子科学分野の重要性とセンターの役割	195
4-3-4	国際分子科学計算センターとして	196
4-3-5	センターライブラリ開発の研究プロジェクト化	196
4-3-6	世界に情報を発信する	197
4-3-7	情報ネットワークと計算機センター	197
5.	資 料	199
5-1	歴代の評議員（1976～1981）	199
5-2	歴代の運営に関する委員会委員（1975～1981）	204
5-3	歴代の運営協議員（1981～）	206
5-4	岡崎国立共同研究機構分子科学研究所点検評価規則	209
5-5	分子科学研究所将来計画委員会規則	211

1. 序 言

1. 序 言

分子研レポートも回を重ね3年目となり、ここに分子研レポート'95を作成した。本年、1995年は分子研創立20周年の節目にあたり過去を振り返り将来を展望する絶好の機会であり、本報告書の意義もとくに深いと思う。

分子研は分子科学の基礎研究の重要拠点として国際的に認められるようになって既にかしい。この間、研究者のたゆまざる努力とサポーティングスタッフの献身的な尽力によって分子科学研究の発展に多大な貢献をしたと同時に、最も活力に溢れ流動性に満ちた研究所に成長したと自負している。いまや世界をリードする研究が分子研の多くの研究グループによって展開されており、その成果は質、量ともに高い評価を得ている。しかし、これから重要なことは研究水準の底上げでなく、突出したピークを作り出してゆくことである。ものまねではない原理的に全く新しいものを創出することが強く求められており、これが分子研の最大の課題である。そのためには研究者個人の自由な発想を育み、型破りの考えを容認する寛大さが必要であり、冒険もあえて行うことが求められると思う。そのような野生味あふれた分子研への脱皮にむけ真剣な努力を行っているところである。

新しい分子研の将来像を求めて過去3年間全所的に真剣な議論を重ね、その結果にもとづいて昨年、分子研レポート'94に現在の研究施設を再編、統合し、研究系とのより緊密な連携を図る二つの研究開発センターの創設を提案した。この提案は新しい分子研への脱皮の鍵となるものであり、現在、概算要求を通じてその実現に全力を挙げているところである。ワーキンググループによってまとめられた開発研究センターの具体的内容を報告する。(4-1)

分子研の6つの研究施設のうち電子計算機センターと極端紫外光実験施設は全国の分子科学者の共同利用の観点から特に重要な施設であり、その将来計画は広く関心の的となっている。この数年間、計算機の性能向上は著しく、一方ワークステーションの急速な普及により電子計算機センターをめぐる環境はその設立当時とは大きく変化している。同様なことは極端紫外光実験施設にもいえる。国内外で大規模のシンクロトロン施設が建設され、また計画されている一方、小型のシンクロトロン光源が大学等でも整備されるようになった。このような状況の大きな変化に対応し、分子研の施設としての特徴を維持し発展させるにはどうすればよいかが大きな問題である。本年度は所内外の関係者の参加を得てそれぞれの将来構想委員会でこの問題に集中的に取り組んだ。審議はなお継続中であり、最終案をうるにはもう少しの時間を要すると思われるが、現在までの審議状況を中間報告としてこのレポートに掲載した。

分子研は共同利用研として全国の分子科学者の共同利用に供するとともに種々のタイプの共同研究を行い、日本における分子科学研究の水準向上に重要な役割を果たしてきた。従来、共同研究は分子研の優れた装置、設備を利用する形態のものが多く、大学等の設備が充分でなかった時にはそれなりに大きな成果をあげることができた。しかし最近では、大学等の研究設備も著しく改善され、もはや従来の装置、設備を中心とする共同研究の意義は薄れてきたといえる。このような状況のもとで共同研究の在り方について共同研究専門委員会、運営協議委員会で検討が行われた結果、装置、設備でなく人を中心とする共同研究の形態に変えることが提案され、この提案も本レポートに盛り込んだ。(2-9-4)

大学や研究所にとって、研究施設、設備を支えている技官の存在は不可欠であり、研究の質はこれら技官の技術に依存していると言っても過言ではない。しかし、一般的に技官の流動性は悪く、人物交流を通じた新しい技術の修得、向上が困難な状況にあり、これが技官の勤労意欲にも影響を及ぼしている。このような状況の改善にすこしでも役立つかもしいないという考えから、本年、試験的に大学に所属する技官を一定期間、分子研の研究施設に受け入れて研修の機会を与えることをおこなった。本年度におこなった技官研修の実績を本レポートに報告する。このような技官

研修による人物交流の促進も全国共同利用研の重要な役目の一つであると考えており、この制度の定着を望んでいる。

(2-7)

以上のほか、例年のように研究所の概要、個々の研究グループのこの一年の活動状況を掲載した。各研究グループの研究内容の詳細については毎年出版している Annual Review (英文) をご覧いただきたい。

本報告書の作成にあたり、花崎一郎教授に全体のまとめをお願いした。電子計算機センター、極端紫外光実験施設の将来計画の中間報告についてはそれぞれの委員会の委員長である岩田末広教授、小杉信博教授をはじめ多くの委員の方々にご苦勞をおかけした。また、宇理須恒雄教授には研究活動のとりまとめに、大変ご尽力いただいた。これらの方々をはじめご協力いただいた関係各位に心からお礼を申し上げる。

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、広く研究者の共同利用に供することを目的として設立された大学共同利用機関である。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。

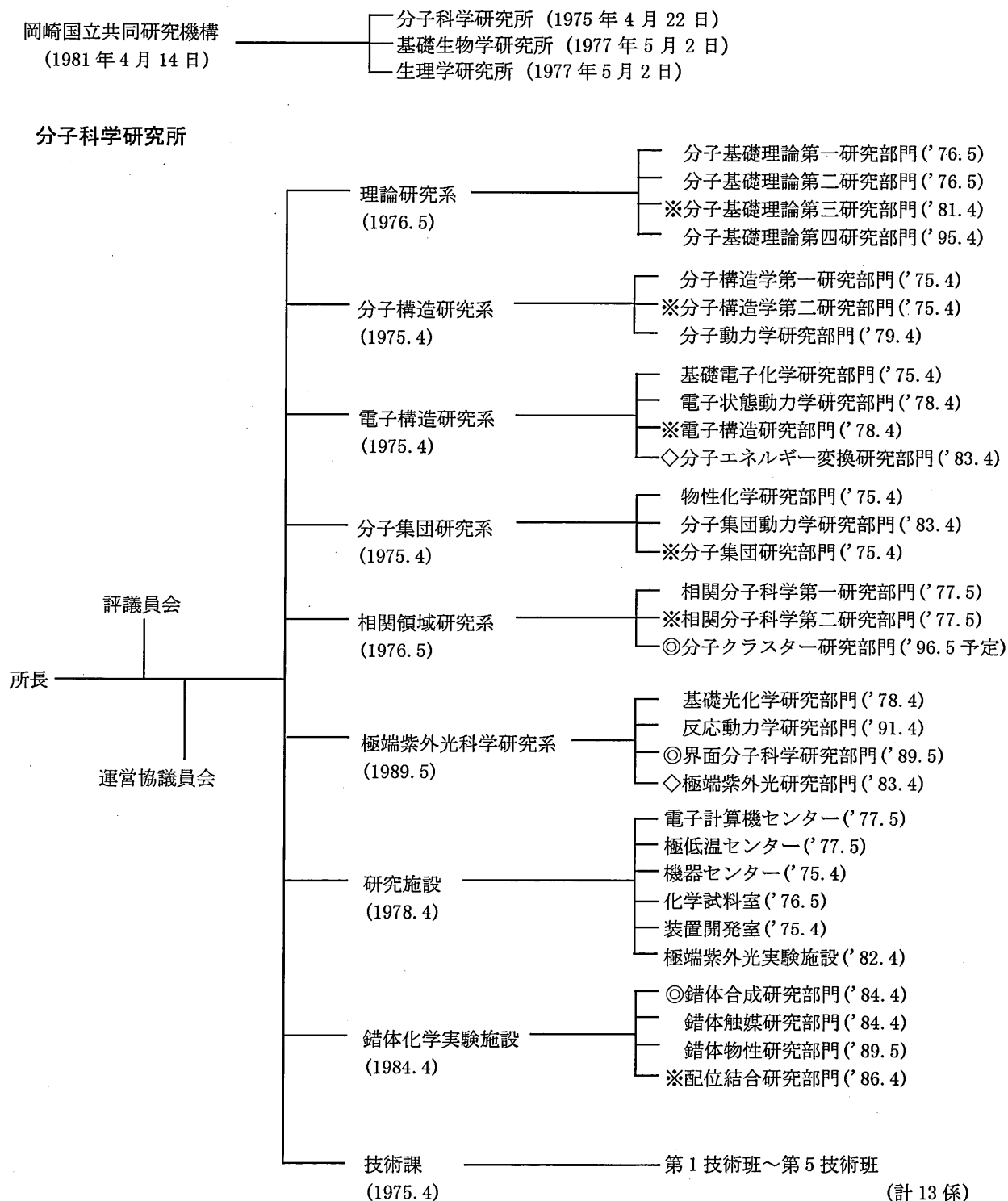
2-2 沿革

1960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、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。

1965. 12. 13 日本学術会議は、「分子科学研究所」（仮称）の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
1973. 10. 31 学術審議会は、「分子科学研究所（仮称）」を緊急に設立することが適当である旨、文部大臣に報告した。
1974. 4. 11 文部大臣裁定により、東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室（室長：井口洋夫前東京大学物性研究所教授、定員3名）及び分子科学研究所創設準備会議（座長：山下次郎前東京大学物性研究所長、学識経験者35人により構成）が設置された。
1974. 7. 6 分子科学研究所創設準備会議において、研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
1975. 4. 22 国立学校設置法の一部を改正する法律（昭50年法律第27号）により「分子科学研究所」が創設され、初代所長に赤松秀雄前横浜国立大学工学部長が任命された。
- 同時に、分子構造研究系（分子構造学第一研究部門、同第二研究部門）、電子構造研究系（基礎電子化学研究部門）、分子集団研究系（物性化学研究部門、分子集団研究部門）、機器センター、装置開発室、管理部（庶務課、会計課、施設課、技術課）が設置された。
1975. 12. 22 外国人評議員の設置が制度化された。
1976. 5. 10 理論研究系（分子基礎理論第一研究部門、同第二研究部門）、相関領域研究系（相関分子科学研究部門）、化学試料室が設置された。
1976. 11. 30 実験棟第1期工事（5,115m²）が竣工した。
1977. 4. 18 相関領域研究系相関分子科学研究部門が廃止され、相関領域研究系（相関分子科学第一研究部門、同第二研究部門）、電子計算機センター、極低温センターが設置された。
1977. 4 大学院特別研究学生の受入れが始まる。
1977. 5. 2 国立学校設置法の一部を改正する法律により生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所、生理学研究所）が設置されたことに伴い、管理部を改組して分子科学研究所管理局とし、生物科学総合研究機構の事務を併せ処理することとなった。管理局に庶務課、人事課、主計課、経理課、建築課、設備課、技術課が置かれた。
1978. 3. 7 分子科学研究所研究棟（2,752m²）が竣工した。
1978. 3. 11 装置開発棟（1,260m²）、機器センター棟（1,053m²）、化学試料棟（1,063m²）が竣工した。
1978. 4. 1 電子構造研究系に電子状態動力学研究部門、電子構造研究部門が、分子集団研究系に基礎光化学研究部門が設置された。
1979. 3. 1 電子計算機センター棟（1,429m²）が竣工した。

1979. 3. 24 実験棟第2期工事 (3,742m²) , 極低温センター棟 (1,444m²) が竣工した。
1979. 4. 1 分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され, 管理局が総務部 (庶務課, 人事課, 国際研究協力課) , 経理部 (主計課, 経理課, 建築課, 設備課) , 技術課に改組された。
1979. 11. 8 分子科学研究所創設披露式が挙行された。
1981. 4. 1 第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4. 14 国立学校設置法の一部を改正する法律により, 分子科学研究所と生物科学総合研究機構 (基礎生物学研究所, 生理学研究所) は総合化され, 岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。
- 理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され, 管理局が岡崎国立共同研究機構管理局となり, 技術課が研究所所属となった。
1982. 4. 1 研究施設として極端紫外光実験施設 (UVSOR) が設置された。
1982. 6. 30 極端紫外光実験棟第1期工事 (1,281m²) が竣工した。
1983. 3. 30 極端紫外光実験棟第2期工事 (1,463m²) が竣工した。
1983. 4. 1 電子構造研究系に分子エネルギー変換研究部門が, 分子集団研究系に分子集団動力学研究部門, 極端紫外光研究部門が設置された。
1983. 11. 10 極端紫外光実験施設ストレージリング装置に電子貯蔵が成功した。
1984. 2. 28 極端紫外光実験施設の披露が行われた。
1984. 4. 11 研究施設として, 錯体化学実験施設 (錯体合成研究部門, 錯体触媒研究部門) が設置された。流動研究部門制度が発足し錯体化学実験施設に錯体合成研究部門が設置された。
1985. 5. 10 分子科学研究所創設10周年記念式典を挙行した。
1987. 4. 1 第三代研究所長に井口洋夫分子科学研究所教授が任命された。
1989. 2. 28 分子科学研究所南実験棟 (3,935m²) が竣工した。
1989. 5. 28 分子集団研究系に界面分子科学研究部門が, 相関領域研究系に有機構造活性研究部門 (共に流動研究部門) が設置された。
1991. 3. 27 極端紫外光実験棟 (増築) (283m²) が竣工した。
1991. 4. 11 極端紫外光科学研究系 (反応動力学研究部門) が設置された。
- 基礎光科学, 界面分子科学, 極端紫外光の各研究部門は分子集団研究系から極端紫外光科学研究系へ振替された。
1993. 4. 1 第四代研究所長に伊藤光男前東北大学教授が任命された。
1994. 1. 31 電子計算機センター棟 (増築) (951m²) が竣工した。
1995. 3. 31 相関領域研究系有機構造活性研究部門 (流動) が廃止された。
1995. 4. 1 理論研究系に分子基礎理論第四研究部門が設置された。
1995. 5. 12 分子科学研究所設立20周年記念式典を挙行した。
1996. 4 相関領域研究系に分子クラスター研究部門 (流動) が設置される予定。

2-3 現在の組織とその発足



※は客員研究部門 ◇は外国人客員研究部門

◎は流動研究部門 ()書きは設置年月

2-4 研究所の運営

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

2-4-1 評議員会

分子科学研究所の運営は、基本的には研究所長の責任において行われているが、この所長候補者を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（1995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5-1に示してある。評議員会の大きな特長は2名の外国人評議員が存在することである。現在は、ジョージア工科大学のM. A. El-Sayed教授とミュンヘン工科大学のE. W. Schlag教授にお願いしている。外国人評議員は評議員会に出席し、所長等から研究所の現状の説明を受け提言を述べるようになっており、研究所の点検・評価という見地から大変重要かつ有効である。

評議員

秋本俊一	東京大学名誉教授・学士院会員
伊藤昌寿	東レ(株)会長・元日本化学会会長
岩村秀	九州大学有機化学基礎研究センター教授
大瀧仁志	立命館大学理工学部教授・東京工業大学名誉教授
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
佐々木慎一	豊橋技術科学大学長
塩野宏	成蹊大学法学部教授・東京大学名誉教授
清水良一	統計数理研究所長
田隅三生	東京大学大学院理学系研究科教授
田中久	前京都薬科大学長
土屋莊次	日本女子大学教授・東京大学名誉教授
堀幸夫	金沢工業大学副学長・東京大学名誉教授
又賀昇	レーザー技術総合研究所部長・大阪大学名誉教授
松永義夫	神奈川大学理学部教授・北海道大学名誉教授
丸山和博	京都工芸繊維大学長・京都大学名誉教授
森本英武	(株)豊田中央研究所顧問
守谷亨	東京理科大学理工学部教授・東京大学名誉教授
E. W. Schlag	ミュンヘン工科大学物理化学研究所長
M. A. El-Sayed	ジョージア工科大学教授

2-4-2 運営協議委員会

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

所長選考に際しては、運営協議員会は評議員会から意見を求められることになっており、所長候補者を評議員会に推薦することとされている。現委員（1995 年度）を以下に、また、創設以来の委員を 5-2, 5-3 に示す。外部委員の任期は 2 年である。

運営協議員

大 澤 映 二	豊橋技術科学大学工学部教授
生 越 久 靖	京都大学工学部教授
川 崎 昌 博	北海道大学電子科学研究所教授
小 谷 正 博	学習院大学理学部教授
近 藤 保	東京大学大学院理学系研究科教授
斎 藤 軍 治	京都大学大学院理学研究科教授
塚 田 捷	東京大学大学院理学系研究科教授
西 信 之	九州大学理学部教授
三 上 直 彦	東北大学大学院理学研究科教授
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 恒 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
小 杉 信 博	極端紫外光科学研究系教授
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 宏 樹	理論研究系教授
花 崎 一 郎	電子構造研究系教授
薬 師 久 彌	分子集団研究系教授
吉 原 經太郎	電子構造研究系教授
渡 辺 芳 人	相關領域研究系教授

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、委員の任期は 2 年である。教授、助教授及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。所長はオブザーバーとして会議に参加する。なお、助手候補者の選考においては、部会の下に専門委員を含む 5 名の助手選考小委員会を設置する。小委員会での選考の結果、その主査は最終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、了解を得る。

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教授会議、人事選考部会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。また、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。研究系の助手には 6 年の任期が定められており、任期を越えて在職する場合は 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。教官の停年は 60 才である。

人事選考部会委員（1995 年度）

川 崎 昌 博	（北大教授）	岩 田 末 廣	（分子研教授）
小 谷 正 博	（学習院大教授）	北 川 禎 三	（分子研教授）

近 藤 保 (東大教授)	小 杉 信 博 (分子研教授)
西 信 之 (九大教授)	田 中 晃 二 (分子研教授)
山 口 兆 (阪大教授)	中 村 宏 樹 (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。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。また、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。

共同研究専門委員会委員（1995 年度）

梶 本 興 亜 (京大教授)	齋 藤 修 二 (分子研教授)
小谷野 猪之助 (姫路工大教授)	葉 師 久 彌 (分子研教授)
菅 原 正 (東大教授)	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)
三 上 直 彦 (東北大教授)	宮 島 清 一 (分子研助教授)
宇理須 恆 雄 (分子研教授)	

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について、検討し、意見を述べる。

学会等連絡会議構成員（1995 年度）

江 口 昇 次 (名大教授)	奈良坂 紘 一 (東大教授)
榎 敏 明 (東工大教授)	藤 村 勇 一 (東北大教授)
大 橋 裕 二 (東工大教授)	三 上 直 彦 (東北大教授)
加 藤 重 樹 (京大教授)	山 口 兆 (大阪大教授)
佐 藤 直 樹 (京大教授)	渡 辺 芳 人 (分子研教授)
篠 原 久 典 (名大教授)	北 川 禎 三 (分子研教授)
関 一 彦 (名大教授)	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 融合領域研究所首席研究員)	葉 師 久 彌 (分子研教授)
十 倉 好 紀 (東大教授)	吉 原 經太郎 (分子研教授)
富 永 健 (東大教授)	

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置くことが定められている。同会議は分子研の専任・客員の教授・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、運営協議委員会に提案しその審議に委ねる。また、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・施設長会議

主幹・施設長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・施設長会議の構成員は各研究系の主幹及び研究施設の施設長で、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。

(1) 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
将来計画委員会	研究所の将来計画について検討する。	所長，教授数名，助教授数名	委員会規則
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 技術課長	放射線障害防止規定
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 基生研・生理研の教授又は助教授各 1 機構職員以外の学識経験者 4	センター規則 委員会規則
極端紫外光実験施設運営委員会	実験施設の運営に関する重要事項 共同研究の採択に関する調査	実験施設長 実験施設の助教授 教授又は助教授 4 職員以外の研究者 7	実験施設規則 委員会規則
錯体化学実験施設運営委員会	実験施設の運営に関する重要事項	実験施設長 施設の教授又は助教授 2 施設以外の教授又は助教授 2 職員以外の研究者 4	実験施設規則 委員会規則
日米科学技術協力における「光合成による太陽エネルギーの転換」に関する計画委員会	協力事業の企画，立案及び実施に関すること。他	関係研究者のうちから 13	委員会要項 (所長裁定)
実験廃棄物処理委員会	実験廃棄物の処理に関する指導及び監督。処理方法の選定。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) 各研究室から各 1 当該施設から若干 他の施設から若干	
機器センター運営委員会	機器センターの運営に関する重要事項。		
装置開発室運営委員会	装置開発室の運営に関する重要事項。		
設備・安全・節約委員会		(原則) 各研究室から各 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版		
分子研レターズ編集委員会	分子研レターズの出版		
情報ネットワーク委員会	情報ネットワークの維持，管理運営		

設立根拠の欄 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，分子研コロキウム係，自衛消防隊組織がある。

(2) 岡崎国立共同研究機構の委員会

会議の名称	設置の目的・審議事項	分子研からの委員	設置根拠
連絡会議	機構の円滑な運営を図る	所長, 研究主幹 2 技術課長	連絡会議規程
岡崎研究所長会議	研究所相互に関連のある管理運営上の重要事項について審議するとともに円滑な協力関係を図る。	所長	岡崎所長会議に関する申合せ
点検評価連絡調整委員会	3 研究所共通の事項に関し点検及び評価を行う。	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 2	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
衛星通信大学間ネットワーク整備推薦ワーキンググループ	SCS の初期の整備, 基本的な運用方針等について検討する	職員 2 (うち 1 名は教授)	同設置要項
「国際交流セミナー会館 (仮称)」構想調査検討委員会	国際交流セミナー会館 (仮称) を構想するための調査検討を行う	教授又は助教授 2	設置要項
宿泊施設・宿舍委員会	宿泊施設 (ロッジ) の運営方針・運営費に関すること。(公務員) 宿舍の入居者 (入替えを含む) を選考すること。他	研究主幹 1	委員会規程
発明等委員会	発明に係る権利, 民間等との共同研究・受託研究により作成したデータベース等の帰属等に関する事項。これらの権利の帰属について必要な事項。	研究主幹 2 電算機センター長 研究施設の長 1 技術課長	発明規程 データベース 取扱規程 委員会規程
放射線障害防止委員会	放射線施設の設置, 変更, 廃止に関する事項。放射線障害の防止に関する重要事項・研究所間の連絡調整。他	教授又は助教授 2 放射線取扱主任者 技術課長	障害防止規程
情報図書館運営委員会	情報図書館の運営に関する重要事項	教授 1 助教授 1	情報図書館規程 委員会規程
防火対策委員会	防火管理に関する内部規定の制定改廃, 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
文部省共済組合岡崎国立共同研究機構支部食堂運営委員会	営業種目, 営業時間。他	研究主幹 1 技術課長	委員会規程
岡崎ロータリークラブとの交流委員会	岡崎南ロータリークラブが行う交流事業等に関する協議及び事業への協力	教官 1	

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。記載なきは規程文無し。

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
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
井 口 洋 夫	研究顧問, 名誉教授
廣 田 榮 治	名誉教授
木 村 克 美	名誉教授
諸 熊 奎 治	名誉教授
丸 山 有 成	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
岡 本 祐 幸	助教授
池 上 努	助 手
U. H. E. Hansmann	助 手
麻 田 俊 雄	非常勤研究員
升 屋 正 人	非常勤研究員
D. Lee	文部省外国人研究員 '95. 6. 20~'95. 8. 19, '95. 12. 20~'96. 2. 19
Y. Li	学振外国人特別研究員 '95. 5. 25~'96. 4. 30
J. K. Park	特別協力研究員
S. Mathieu	特別協力研究員
W. Wang	特別協力研究員

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

分子基礎理論第三研究部門 (客員研究部門)

三 好 永 作	教 授 (九大工)
笹 井 理 生	助教授 (名大人間情報)
天 能 精一郎	助 手
信 定 克 幸	助 手

分子基礎理論第四研究部門

平 田 文 男	教 授
米 満 賢 治	助教授

分子構造研究系 研究主幹(併) 齋 藤 修 二

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
藤 原 英 夫	非常勤研究員
A. H. Saleck	学振外国人特別研究員 '94.6.2~'95.6.1

分子構造学第二研究部門 (客員研究部門)

森 島 績	教 授 (京大工)
北 野 正 雄	助教授 (京大工)
小 倉 尚 志	助 手
尾 関 博 之	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
廣 田 俊	学振特別研究員
R. Czarnuszewicz	文部省外国人研究員 '95.9.19~'95.12.27
J. Matysik	学振外国人特別研究員 '95.4.1~
D. A. Proshiyaku	特別協力研究員

電子構造研究系 研究主幹(併) 花 崎 一 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
富 永 圭 介	助 手
H. Pal	学振外国人特別研究員 '94.3.28~
J. Ma	特別協力研究員
木 下 郁 雄	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
戸野倉 賢 一	助 手
S. R. Gandhi	助 手
岡 崎 紀 明	非常勤研究員

電子構造研究部門 (客員研究部門)

佐 藤 博 保	教 授 (三重大工)
手 木 芳 男	助教授 (大阪市大理)
田 中 伸 明	助 手
内 藤 幸 人	助 手

分子エネルギー変換研究部門(外国人客員研究部門)

M. C. Lin	教 授 (アメリカ エモリー大学 教授)	'95.1.5~'95.8.26
H. R. W. Fischer	助教授 (ドイツ フリードリッヒシラー大学 イエナ校研究員)	'94.12.16~'95.9.30
A. Luštsik	助教授 (エストニア タルトゥ大学 準教授)	'95.10.4~'96.9.30

分子集団研究系 研究主幹(併) 葉 師 久 彌

物性化学研究部門

葉 師 久 彌	教 授
鹿野田 一 司	助教授
鵜 川 彰 人	助 手
中 澤 康 浩	助 手
井 口 眞	学振特別研究員
宮 崎 隆 文	特別協力研究員
J. Qin	文部省外国人研究員 '95.7.3~'95.10.2
V. A. Ivanov	文部省外国人研究員 '95.12.1~'96.11.1
P. Wang	特別協力研究員
J. Krober	特別協力研究員

分子集団動力学研究部門

小 林 速 男	教 授
宮 島 清 一	助教授
緒 方 啓 典	助 手
藤 原 秀 紘	助 手
中 井 利 仁	非常勤研究員
J. J. Kim	文部省外国人研究員 '95.8.1~'95.9.15, '95.12.16~'96.2.29

分子集団研究部門 (客員研究部門)

正 畠 宏 祐	教 授 (名大工)
山 下 正 廣	助教授 (名大情報文化)
長谷川 真 史	助 手
持 田 智 行	助 手

相關領域研究系 研究主幹(併) 吉 原 經太郎

相關分子科学第一研究部門

渡 辺 芳 人	教 授
井 上 克 也	助教授
小 崎 紳 一	助 手
和 田 仙 二	非常勤研究員

相關分子科学第二研究部門 (客員研究部門)

福 山 秀 敏	教 授 (東大理)
鳥 海 幸四郎	助教授 (姫路工大理)

分子クラスター研究部門 (流動部門, '96.5 発足予定)

西 信 之	教 授
永 田 敬	助教授
大 橋 和 彦	助 手
L. Zhu	助 手

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

竹 内 佐 年	助 手
松 尾 繁 樹	非常勤研究員
下 島 淳 彦	非常勤研究員

反応動力学研究部門

宇理須 恒 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
水 谷 雅 一	非常勤研究員
宮 前 孝 行	特別協力研究員

界面分子科学研究部門 (流動研究部門)

伊 吹 紀 男	教 授
細 野 秀 雄	助教授
植 田 尚 之	助 手
石 井 久 夫	助 手
岡 田 和 正	非常勤研究員

極端紫外光研究部門 (外国人客員研究部門)

E. J. Szichman	教 授 (イスラエル ソルク原子力研究所 物理・応用数学部門研究員) '95. 10. 1～'96. 9. 30
F. O. Goodman	教 授 (カナダ ウォータール大学 教授) '94. 12. 1～'95. 9. 30
F. R. Ornellas	助教授 (ブラジル サンパウロ大学化学研究所 教授) '95. 9. 1～'96. 6. 30
S. Krouglik	助教授 (ベラルーシ学士院物理学研究所 上級研究員) '95. 2. 15～'95. 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
茂 木 孝 一	非常勤研究員

極低温センター	センター長(併) 葉 師 久 彌
---------	------------------

機器センター	センター長(併) 齋 藤 修 二
猿 倉 信 彦	助教授
坂 東 俊 治	助 手
桑 原 大 介	助 手
大 竹 秀 幸	助 手

化学試料室	室 長(併) 渡 邊 芳 人
山 下 敬 郎	助教授
田 中 彰 治	助 手
小 野 克 彦	学振特別研究員

装置開発室	室 長(併) 北 川 禎 三
渡 邊 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

鎌 田 雅 夫	助教授
木 下 豊 彦	助教授
濱 広 幸	助教授
福 井 一 俊	助教授 (福井工大)
田 中 慎一郎	助 手
木 村 真 一	助 手
保 坂 将 人	助 手
下 條 竜 夫	助 手
渡 辺 正 満	非常勤研究員
廣 瀬 サエミ	学振特別研究員
Y. Q. Cai	学振外国人特別研究員 '95.1.11~

錯体化学実験施設 施設長(併) 田 中 晃 二

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
原 田 和 正	非常勤研究員
中 本 忠 弘	非常勤研究員
湯 藤 幸 治	特別協力研究員

錯体触媒研究部門

塩 谷 光 彦	教 授
福 田 豊	教 授 (お茶の水女子大理)
瀬 恒 潤一郎	助教授 (神戸大理)
田 中 健太郎	助 手
王子田 彰 夫	非常勤研究員

錯体物性研究部門

田 中 晃 二	教 授
鈴 木 教 之	助 手
拓 植 清 志	助 手
栗 原 正 人	非常勤研究員
Y. K. Park	文部省外国人研究員 '95.6.25~'95.8.24, '95.12.26~'96.2.24
D. P. A. Landre	学振外国人特別研究員 '95.3.23~'95.9.30

配位結合研究部門 (客員研究部門)

宗 像 恵	教 授 (近畿大理工)
松 本 尚 英	助教授 (九大理)

技 術 課 課 長 酒 井 楠 雄

第1技術班 班 長 松 戸 修

理論研究系技術係

技 官	鶴 澤 武 士
技 官	鈴 木 陽 子

分子構造研究系技術係

技 官	熊 倉 光 孝
-----	---------

技 官	林	直 毅
技 官	小 林	かおり
技 官	長 友	重 紀

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 崎	茂 一
技 官	片 柳	英 樹
技 官	神 長	曉 子

第2技術班

班 長 加 藤 清 則

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

相關領域研究系技術係

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 西 本 史 雄

電子計算機技術係

技 官	手 島	史 綱
技 官	南 野	智
技 官	水 谷	文 保
技 官	内 藤	茂 樹

極低温技術係

係 長	吉 田	久 史
技 官	高 山	敬 史

第4技術班

研究機器技術係

係 長	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
技 官	水 谷	伸 雄
技 官	内 山	功 一

技 官	豊 田 朋 範
技 官	矢 野 隆 行
技 官	鳥 居 龍 晴

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
-----	---------

- * 整理日付は1996年2月1日。なお、予定人事も含めた。
- * 職名の後に（ ）書きがある者は客員教官で、本務校を記載している。
- * 外国人の研究者については1995年4月以降3か月を超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か月を超えて滞在が予定される者を掲載した。また1996年1月1日以降の日付については予定年月日。
- * 特別協力研究員は整理日付（校正期間を含む）現在で掲載した。ただし、滞在期間3か月以内の者は除いた。

2-5-2 創立以来の人事異動状況（1996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	非常勤研究員*
就任者数	4	27	45	135	123	60
転出者数	3	11	25	88	77	42
現 員	1	16	20	47	46	18

*非常勤研究員=IMSフェロー

(2) 流動研究部門

部門名	錯体合成研究部門			界面分子科学研究部門		
区分 \ 職名	教 授	助教授	助 手	教 授	助教授	助 手
就任者数	6	6	13	3	4	7
転出者数	5	5	11	2	4	5
現 員	1	1	2	1	1	2

部門名	有機構造活性研究部門*		
区分 \ 職名	教 授	助教授	助 手
就任者数	2	2	4
転出者数	2	2	4
現 員	0	0	0

*1989年4月～1995年3月まで

(3) 客員研究部門等

区分 \ 職名	教 授	助教授
就任者数	69	79
現 員	7	8

(4) 外国人客員研究部門等

区 分 \ 職 名	教 授	助教授
分子エネルギー変換機構	13	11
極端紫外光研究部門	11	9

2-6 各研究系の概要

2-6-1 研究系及び研究施設

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た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
 - 3, 新モンテカルロ法によるタンパク質の立体構造予測に関する研究
 - 4, 大エルミート行列の対角化法の開発

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（客員）

研究目的 分子、クラスター、表面の電子状態と反応機構及び大自由度分子系の構造、運動、進化の理論的研究

- 研究課題
- 1, モデルポテンシャルや環境ポテンシャルの開発と改良
 - 2, 表面上の吸着反応機構の理論的解明
 - 3, 水素結合ネットワークの組み替え運動の理論的研究
 - 4, 蛋白質フォールディングの統計力学とシミュレーション

分子基礎理論第四研究部門

研究目的 分子性液体・固体の構造、物性及び非平衡過程に関する理論的研究

- 研究課題
- 1, 溶液中の平衡・非平衡過程に関する統計力学的研究
 - 2, 溶液内分子の電子状態と化学反応に関する理論的研究
 - 3, 生体高分子の溶液構造の安定性に関する統計力学的研究
 - 4, 凝縮系における秩序形成、集団励起と電子相関に関する理論的研究
 - 5, 凝縮系における磁性、光物性、構造の複合物性に関する理論的研究

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の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・遠赤外実験室分光及び宇宙電波分光による星間短寿命分子の研究
2, 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
3, サブミリ波望遠鏡の開発
4, 中性原子のレーザー冷却・トラッピングの研究とその応用

分子構造学第二研究部門（客員）

研究目的 金属酵素タンパク質の機能発現に関する分子工学的研究

研究課題 1, ヘムタンパク質の機能制御過程の解明とそれに基づいた人工タンパク質の設計
2, 半導体レーザーを用いた Rb 原子のレーザー冷却

分子動力学研究部門

研究目的 1, 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
2, 凝集性物質中の分子の動的構造と機能性との関連についての研究

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の構造の研究

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、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及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動力学の実験的研究

電子構造研究部門（客員）

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

分子エネルギー変換研究部門（外国人客員）

研究目的 光エネルギー（太陽光）を電気エネルギー又は化学エネルギー（燃料）に変換する方法の基礎についての研究

研究課題 金属的フタロシアニンをもつ分子とする層間化合物

分子集団研究系

研究目的 新しい物性をもつ物質の構築並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 凝縮系の動的物性の研究

研究課題 凝縮系における原子・分子の動的過程と結びついた物性の研究に取り組む。

分子集団研究部門（客員）

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図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・有機金属錯体化学さらには酵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, 金属酵素及び合成モデル系の構造と機能の解明
2, 新規分子性強磁性体の構築とその磁気構造の解明

相関分子科学第二研究部門（客員）

- 研究目的 1, 新規な化学種の有機化学・有機金属化学・無機化学的視点による分子設計
2, 有機導体の理論的研究
- 研究課題 1, 特異な構造を有する金属クラスターの構造解析
2, 新規な有機磁性体の開発
3, 有機導体における様々な相転移の機構に関する理論的研究

分子クラスター研究部門（流動, '96. 5 発足予定）

- 研究目的 1, 分子クラスターの構造, 性質の基礎的解明
2, 新しい分子クラスターの探索と分子クラスターを用いた新材料の開発

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, レーザー光及び放射光を用いた光化学反応の研究

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（流動）

- 研究目的 界面関連分子の反応論的及び分光学的研究
- 研究課題 1, 基礎的・機能性分子の高励起状態に関する研究
2, 新しい酸化物半導体の探索とそのエネルギーバンド構造
3, シンクロトロン放射光を用いた機能性有機薄膜・界面の電子構造に関する研究

極端紫外光研究部門（外国人客員）

- 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, 金属ポルフィリンの時間分解共鳴ラマンスペクトルの研究
2, イオン・表面衝突による中性化過程のレーザーによる促進に関する研究

- 3, 一次元周期非断熱トンネル系の解析—完全反射, 連続状態中の束縛状態, 及び分子スイッチの可能性の研究

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, 分子科学大規模電子状態計算の手法の開発とその応用

極低温センター

研究目的 極低温実験技術の開発, 研究

機器センター

研究目的 新しいレーザーシステムの開発研究及び分子凝集体の物性研究

研究課題 1, 超短パルスレーザーシステムの研究

2, 遠赤外領域での超高速分光の研究

3, 放射光との同期による過渡分光

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（流動）

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 1，八面体ケイ素及びマンガン錯体の合成と立体化学
2，遷移金属とリン間に新しいタイプの結合をもつ錯体の研究

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，金属錯体による核酸分子の認識・変換
2，金属酵素モデル錯体の合成と触媒作用

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（客員）

研究目的 3次元金属錯体超分子の合成，機能と結晶構造制御

2-7 技術課

2-7-1 技術課の活動

技術課はその形態上一つの孤立したグループではなく、7 研究施設及び6 研究系に配属された技官によって構成されている。しかし、この形態は技官をそれぞれの研究施設や研究系に“はりつける”ことを意味しているのではなく、その間の積極的な交流の促進に対する期待感から採用されたものである。技術課は、このようないわば開かれたシステムをもつことにより、研究系、研究施設と縦系、横系の関係を保ちつつ分子科学という布の作成に寄与している。特に1993 年度補正予算で分子研においても多数のネットワーク機器が導入され、分子研内、機構内の情報網が整備されたので、技術課にネットワーク担当の専任を新しく配置し、その運用管理の対応を技術課が中心となって行っている。また、技術レベル向上と全国理工系技術者の相互の技術交流を図ることを目的として、毎年「技術研究会」を開催し、その報告書として「技術研究会報告」を出版していたが、現在は高エネルギー物理学研究所、核融合科学研究所及び分子科学研究所の間で持ち回りで開催し、全国の大学、研究所等より多数の技術者が参加している。

2-7-2 技術研修制度

分子科学研究所は、人事の流動性を非常に大切な事の一つと考えて運営されている。そして教官に関しては、全国的にもトップレベルの流動性を保っている。しかし、技官の人事異動は、とくに研究施設技官に関して、教官のそれに比べて相当低い。同じ職場に長くいて腕を磨いているので、ある特定の技術について群を抜くレベルに達することは望ましいことであるが、人事の停滞は一方で大きなマイナス効果をもつ。新規で創造的な実験の推進のためには、実験装置の制作を含む諸々の技術が必須であり、それを支える技官の意欲を高く保つ雰囲気を作ることが重要である。

新しい技術に挑戦し、自分しかできない技術を身につけ、他の研究所や大学の技官にそれを伝授する機会を作れば技官の意欲向上につながるであろう。また一方で、日本の分子科学全体の技術レベルの向上にも寄与するであろう。更にそれがきっかけとなり、技官の人事異動につながるかもしれない。また一定期間ニューフェイスが職場に入り込むことで職場の雰囲気を変えることも有り得る。

このような期待のもとに本年度から新しく技術研修制度をスタートさせ、技官の人事交流を図ることにした。これには2つのカテゴリーが含まれる。第一は、他の研究所や大学の技官が2週間から3か月の間の適当な期間分子研に来て、特別の技術を習得し合うものであり、交通費と宿泊費等を支給するものである。第二は、全国の技官が分子研に2、3日集まり、各人の高度の技術を他に披露する「技術研究会」を開催するときの旅費を支給するものである。第二のカテゴリーは、実質的にはこれまでも実行してきたが、第一のカテゴリーは本年度、装置開発室で初めて実施し、他研究施設にもそれを拡大して行った。

本年度の実績は次のとおりである。

○カテゴリー 1

	氏 名	所 属	目 的	期 間
1	岡田 則夫	国立天文台 技官	高真空用光学窓接着技術の指導のため (装置開発室)	1995. 9. 18~9. 19
2	渡辺 千香	東北大学 科学計測研究所 技官	電子回路技術習得のため (装置開発室)	1995. 6. 15~7. 31
3	福田 武夫	国立天文台 技官	機械製作技術習得のため (装置開発室)	1996. 2. 19~3. 19
4	内山 隆司	東京大学 低温センター 技官	極低温技術向上のため (極低温センター)	1996. 1. 22~1. 31
5	佐藤 健	東北大学理学部 技官	電子分光ビームラインの計測系の技術 研修(UVSOR)	1996. 1. 22~2. 2
6	千葉 裕輝	東北大学科学計測研究所 技官	遠赤外ビームラインの計測系の技術研 修(UVSOR)	1996. 3. 11~3. 23
7	石飛 義明	広島大学理学部 技官 特殊加工技術開発室	電子分光ビームラインの計測系の技術 研修(UVSOR)	1996. 3. 11~3. 22
8	渡辺 千香	東北大学 科学計測研究所 技官	電子回路技術習得のため(装置開発室)	1996. 3. 18~3. 31

○カテゴリー 2

目 的 : 「技術研究会」 期 間 : 1996. 3. 18~3. 19

	氏 名	所 属
1	高松 軍三	名古屋大学理学部 技術部
2	増田 忠志	名古屋大学理学部 技術部
3	石川 秀蔵	名古屋大学理学部 技術部
4	鈴木 和司	名古屋大学理学部 技術部
5	鈴井 光一	名古屋大学理学部 技術部
6	三輪治代美	名古屋大学理学部 技術部
7	野田 敏昭	名古屋大学理学部 技術部
8	香月 真澄	名古屋大学理学部 技術部
9	河合 利秀	名古屋大学理学部 技術部
10	伊藤 有男	名古屋大学理学部 技術部
11	松岡 博	名古屋大学理学部 技術部
12	中村 洋子	名古屋大学理学部 技術部
13	小林 和宏	名古屋大学理学部 技術部
14	水野 晴夫	名古屋大学理学部 技術部
15	五藤 俊明	名古屋大学理学部 技術部
16	井上 晶次	名古屋大学理学部 技術部
17	涌井 義一	名古屋大学工学部 技術部
18	熊沢 克芳	名古屋大学工学部 技術部
19	鷺見 高雄	名古屋大学工学部 技術部
20	小塚 基樹	名古屋大学工学部 技術部
21	千田 進幸	名古屋大学工学部 技術部
22	横田 力男	宇宙科学研究所 技術部 飛翔体開発課
23	相馬 出	東北大学科学計測研究所 技術室 企画情報班
24	高見 清	京都大学 原子炉実験所

	氏 名	所 属
25	小田嶋 豊	東京大学教養学部 低温サブセンター
26	桜 勝巳	北海道大学理学部 極低温液化センター
27	河野 賢悟	熊本大学理学部
28	和田多佳志	大阪大学 微生物病研究所
29	久保 正雄	埼玉大学 分析センター
30	市川 貴之	三重大学工学部
31	安田 賢生	富山高専 物質工学科
32	浦井 久栄	富山高専 物質工学科
33	中田 尚男	愛知教育大学教育学部

2-8 特別研究と岡崎コンファレンス

特別研究は、研究系各研究部門及び研究施設で行われている研究を基盤とし、研究所内外の研究者が協力して行う独創的かつ開発的な研究であり、特に研究系及び研究施設の枠を超えて、研究者が協力集中して行っている。その発展に資するため、国際的規模での研究集会－岡崎コンフェレンス－を年2、3回開催している。

2-8-1 特別研究の経緯

研究所創設以来、4期に亘って下記の特別研究を実施し、現在5期の特別研究を実施中である。

第一期特別研究

- (1) 興味ある物性をもつ分子設計の研究 (1975～1979)
- (2) 分子との相互作用に基づくエネルギー変換の研究 (1975～1979)

第二期特別研究

- (1) 分子機能の開発並びに制御に関する研究 (1980～1984)
- (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 (1980～1984)
- (3) 物質進化の分子科学に関する研究 (1982～1986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 (1985～1989)
- (2) 分子素子の基礎研究 (1985～1989)
- (3) 物質進化と自己秩序形成の分子科学 (1987～1991)

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 (1990～1994)
- (2) 分子素子研究の物質科学的展開 (1990～1994)

第五期特別研究

- (1) 機能性反応場の創成と量子ステアリング (1995～5ヶ年計画)
- (2) 分子エレクトロニクス：分子性固体場における電子物性 (1995～5ヶ年計画)
- (3) 金属錯体による連続反応場の構築 (1993～5ヶ年計画)

2-8-2 第5期特別研究

現在、第5期目の特別研究として次の3件が推進されている。

- (1) 機能性反応場の創成と量子ステアリング
- (2) 分子エレクトロニクス：分子性固体場における電子物性
- (3) 金属錯体による連続反応場の構築

これらの特別研究の内容と実施状況を以下に説明する。

(1) 機能性反応場の創成と量子ステアリング

物質変換・エネルギー変換に関しては第四期までの特別研究によって多くの新しい知見を得ることができた。そこで、第五期においてはより積極的に多様な分子環境を積極的に創出し、その反応場の機能を明らかにすると共に、反応素過程を支配する主要因子を見い出し、これを制御することにより反応の道筋を選択・決定（ステアリング）する

ことを目的としている。実施にあたっては特に次の1つの小テーマを設ける。(1)多次元分子系の構築と物質及びエネルギー変換, (2)量子制御による新しい反応経路の開拓。

「表面反応場におけるレーザー光化学」の研究ではメタンを白金表面に物理吸着させるだけで気相では吸収の無い200nm 付近の紫外光によって簡単に分解できることを初めて明らかにした。自然界に豊富に存在するメタンを他の有用な化合物へ転換する新たな方法への展開が期待される。

「光電子分光法による固体表面の研究」では UVSOR からの放射光を利用する光電子顕微分光装置の建設, 立ち上げをスタートさせた。また UVSOR 偏向部からの放射光の円偏光を用いて Ni 単結晶光電子スペクトルの磁気円二色性の観測を行い, 表面に特有なスペクトルも観測することができた。

「量子エネルギー変換による化学反応の光ステアリング」の研究ではレーザーと軌道放射のマルチバンチとを同期させて, 多原子分子のポンプ・プローブ分光を行うため UVSOR のアンジュレータ光に, 市販のモードロックチタンサファイアレーザーを同期発振させる装置を開発した。

「化学反応における量子対生成の研究」では化学反応によって生成する原子, 分子の速度角度分布を, その空間的配向と共に検出する光イオン化画像観測法を開発した。この方法により, OCS , N_2O , NO_2 , エチレン誘導体の光分解経路が励起波長によって変化する様子を明らかにした。

「スピン副準位による状態の選択」の研究ではラマンビート検出磁気共鳴法に成功した。また, 凝集系を特徴づける分子間力を知るために, 極低温下の単結晶試料と液晶試料について分子分光を行い, C_{60} のアニオン塩単結晶については分子内の Jahn-Teller 効果と結晶場の釣り合いを明らかにした。

「レーザー光による原子・分子の並進運動制御とその反応制御への応用」の研究ではレーザートラップされた準安定ヘリウム4及びヘリウム3原子の極低温衝突(約 500 μK)におけるペニングイオン化を実験的に研究し, ヘリウム3原子同士の衝突イオン化がヘリウム4同士の衝突イオン化よりも2倍速いこと, 準安定状態と励起状態との衝突イオン化が準安定状態同士の衝突イオン化よりも100倍以上速いことを見出した。また, レーザー光による衝突イオン化断面積のコントロールを試み, 断面積を数倍程度変化させることが出来た。

「量子力学的 Fokker-Planck 方程式による反応場コントロールの研究」では溶媒中の分子の化学反応等のオプティカルコントロールの解析等を可能とする, 多準位量子フォッカー・プランク方程式について研究を行い, この定式化に基づく数値プログラムを開発し, 波束の運動に及ぼす溶媒の効果についての研究を開始した。

(2) 分子エレクトロニクス: 分子性固体場における電子物性

究極の機能単位である分子をもちいて新しい電子機能を発現する分子の集合体を構築するのが分子エレクトロニクスの研究であるが, この特別研究ではもっと基礎的な立場から, 新しい分子の開発とその分子配列から生ずる集合体としての機能と物性に関する基礎研究を行っている。電気伝導性, 磁性, 誘電性, 光機能性, 液晶性など主に電子物性の立場から興味ある以下のような分子性物質の研究を行っている。

「 π -d 電子系の研究」では, π 電子共役系と遷移金属の共存する π -d 電子系である金属フタロシアニン一次元導体の高圧力下の電子状態を分光学的方法で調べた。高圧下では分子内電荷移動が誘起され, π バンドの正孔が d バンドへ徐々に移動するという新しい現象を見出した。またこの電荷の移動が起こるとほぼ同時に金属から非金属への転移が起こることも明らかにし, 電荷移動とこの金属・非金属転移の機構について研究を行った。

「 $U < 0$ 物質の探索」では, 負のオンサイトクーロンエネルギーをもつ電荷移動塩を探索するために一段階二電子酸化というユニークな電気化学的性質をもつ BDNT の電荷移動塩についておもに分光学的手法による研究を行い, この分子のオンサイトクーロンエネルギー, 移動積分, 分子の柔らかさの目安を与える分子内振動との結合定数などこの

物質の基本的な物性データを実験的に決定した。

「有機超伝導体の研究」では、BEDT-TTF 系伝導体に見られる超伝導体から絶縁体にいたる多様な電子相を包括的に理解する目的で、数種類の代表的な BEDT-TTF 錯体の電子状態を ^{13}C NMR と比熱測定で調べた結果、BEDT-TTF 分子のダイマー性が強いほど、電子相関の効果が強く現れ、それとともに超伝導転移温度が上昇、ついにはモット絶縁体になることが分かった。またモット転移近傍の超伝導相では、通常とは異なってギャップが極めて異方的な電子対を形成していることを見出した。

「新規ドナー・アクセプター分子の合成研究」では、チアジアゾールなどのヘテロ環を有する新規なドナー及びアクセプター分子を合成し、これらを成分とする高伝導性の電荷移動錯体及びイオンラジカル塩を開発した。また、電子受容性のヘテロ環と電子供与性のヘテロ環をユニットに持つ小さな HOMO-LUMO 差を有する分子を開発し、これらの分子の電解酸化により世界最小のバンドギャップ約 0.5 eV のポリマーに導くことに成功した。

「グラファイト層間化合物の研究」では、最外殻に 1 個の s 電子を持つ金属原子と水素はグラファイト層間に挿入された時、多彩な電子構造をとることが期待される。ナトリウム-水素-グラファイト 3 元化合物について、 ^{13}C 、 ^1H 及び ^{23}Na の NMR 実験を行い、その電子及び格子構造を解明した。挿入原子から母体の炭素への電荷移動量を定量的に明らかにするとともに、Na 層の電場勾配テンソルが偏平型であること等を明らかにした。

「液晶相転移の分子動力学的研究」では、液晶における反強誘電秩序の微視的起源を明らかにするために ^{13}C NMR による実験研究を行った。その結果、極性分子間の双極子相互作用による安定化を実現するうえで、有利に作用する分子構造（いわゆる屈曲鎖モデル）が液晶状態で実現していることを立証した。また、凝縮系における分子の並進運動を、振動や回転の自由度から切り離して選択的に測定する手法としてのパルス磁場勾配 NMR 法を、スピン間が強く双極子結合した系の、しかも異方的な拡散係数 (D) テンソルの測定へと拡張する手法を開発し、新たな分光器を製作した。また回転 4 極コイルによって生じる 2 次元磁場勾配によって液晶の異方的な D テンソルを決定した。

「内殻励起によるエネルギー緩和」ではフッ化フラーレン $\text{C}_{60}\text{F}_{48}$ 結晶について、真空紫外光励起に伴う発光スペクトルの測定を行ない、大きなストークスシフト、温度に依存しない発光効率など、フレンケル型の C_{60} 結晶との顕著な違いを見出した。そしてこのような光学的性質の違いが、C-F 結合に由来することを光脱離実験から明らかにした。また、 BaFCl 、 BaFBr 、 CsTaF_6 などの無機シンチレーターの発光効率や寿命測定を 100 eV 付近で行い、内殻励起効率と価電子帯光電子スペクトルとの関係を明らかにした。

「内殻電子をプローブとした分子固体中の励起子の研究」では、一価の場を感じた励起子と二価の場を感じた励起子の挙動の違いから、分子性励起子の性質を解明する事を目的としている。たとえば内殻吸収スペクトルに現れる内殻励起子は一価の場を感じた励起子であり、共鳴オーグメント過程で一価イオンコアが脱励起した後の内殻励起子は、二価の場を感じた励起子となる。このように内殻電子をプローブとして分子固体の励起子について研究を進めている。

(3) 金属錯体による連続反応場の構築

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、新しい物性及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及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°C より $+40^\circ\text{C}$ 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シランを過剰に加

えたあとエチレンを常圧で加えて行くと、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-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-金属結合により結びつけた多核金属錯体の新規機能開発を目指して、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、系統的に2～4核錯体を合成し、X線構造解析により直線状に遷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-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族遷移金属錯体とBF₃との反応により金属-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-リン間に二重結合が生成した後、鉄-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出した。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-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出した。

「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ウ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及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HCHO、CH₃OH及びHOOCCHO、HOOCCH₂OH等の4, 6電子還元反応とC₂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-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。

2-8-3 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1976年に始められ、以来50回を超えている。コンファレンスの性格はこの会の提案者であった赤松秀雄初代所長の次の言葉につきる。

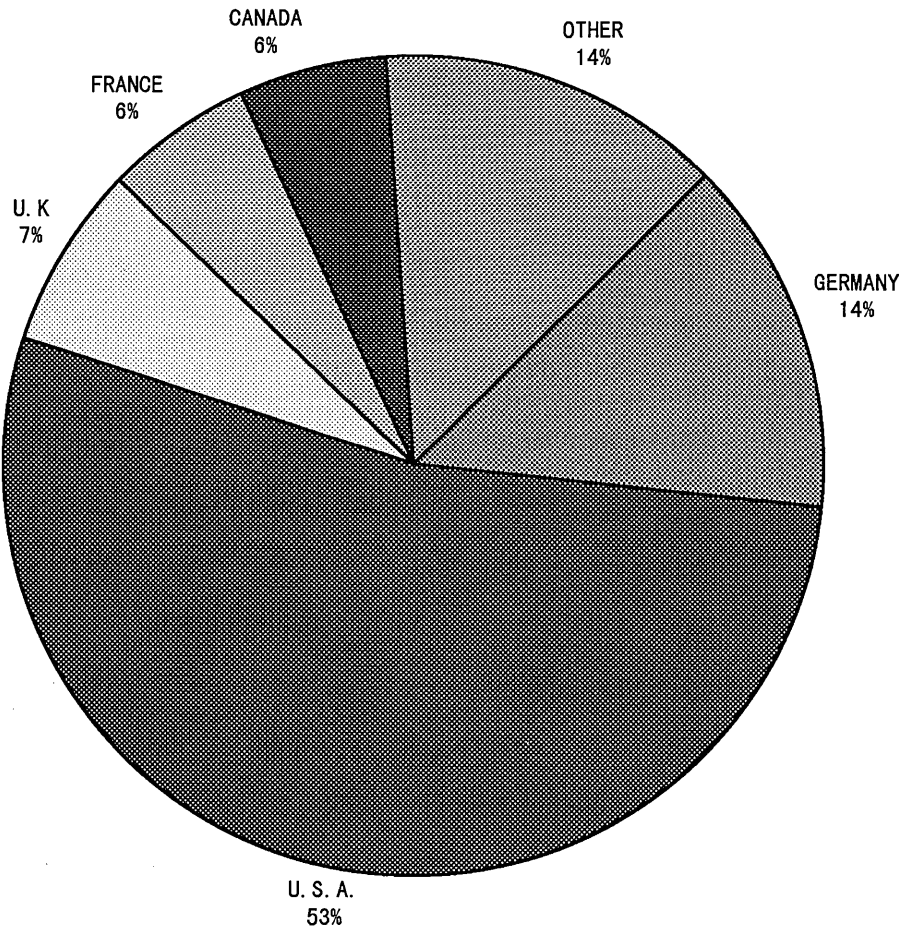
“会議は研究発表を主旨とするものではなく、共通の興味と問題に関して、いわば思索の過程において相互に経験や意見を交換することを主旨とする非公式の会合である。そのためには、参加者相互の信頼と尊敬が基調となるものであって、会議は非公開であり、また参加者の意見は当人の許可なくして公表してはならない。(赤松秀雄, 分子研レターズ, 1号より)”

この方針は今日まで貫かれており、討論の場であることが明記されている。コンファレンスの主題は全国の研究者

の提案を受けて選考し、採択された主題の提案者を中心とした世話人に、外国人招待者を含めたすべての運営を一任することになっている。その分野で活発に研究を行っている第一線の外国人研究者と国内の研究者がひざをまじえて非公式に論議を交わすことによって、問題に対する意識を深め展望を拓く契機となっている。またそこで形成された人間関係は研究面のみならずあらゆる面で大きな影響を及ぼしている。若い研究者を刺激し彼らの研究意欲をかきたてていることも重要である。1995年までに53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（1996年1月現在）

1976年1月に行われた第1回岡崎コンファレンスから第53回までの参加研究者総数は2,500名、その内外国人研究者は約220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1 (回 課題, 開催日, 提案代表者)

- 1 「光電極過程」 1976. 1. 14～1. 16
坪村 宏 (大阪大学教授)
- 2 「分子設計の基礎としての理論化学」 1976. 2. 15～2. 18
土方 克法 (電通大学教授)
- 3 「分子固体における運動自由度」 1976. 2. 15～2. 18
千原 秀昭 (大阪大学教授)
- 4 「共鳴及び非線型ラマン散乱」 1977. 1. 18～1. 20
坪井 正道 (東京大学教授) 田隅 三生 (東京大学教授)
- 5 「分子・分子結晶の高エネルギー励起状態」 1977. 12. 4～12. 7
田仲 二郎 (名古屋大学教授)
- 6 「興味ある物性をもつ有機半導体—その電子構造の解明を求めて」 1978. 2. 13～2. 15
佐野 瑞香 (電通大学助教授) 井口洋夫 (分子研教授)
- 7 「高分解能分子分光の現状と将来」 1978. 9. 4～9. 5
廣田 榮治 (分子研教授)
- 8 「原子・分子・固体表面間の相互作用」 1979. 2. 19～2. 21
諸熊 奎治 (分子研教授)
- 9 「反応性中間体の分子設計—カルベン種を中心として」 1980. 1. 7～1. 9
岩村 秀 (分子研教授)
- 10 「分子性結晶の励起子—輸送過程の見地から」 1980. 2. 4～2. 6
井口 洋夫 (分子研教授)
- 11 「分子内ポテンシャル研究の展望」 1980. 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 (東京大学教授)
- 12 「化学及び生化学過程における遷移金属錯体の役割」 1980. 12. 11～12. 13
高谷 秀正 (分子研助教授)
- 13 「短寿命分子とイオン—星間過程におけるその役割」 1981. 9. 8～9. 10
齋藤 修二 (分子研助教授)
- 14 「光化学反応初期過程」 1981. 10. 20～10. 22
又賀 昇 (大阪大学教授) 吉原經太郎 (分子研教授)
- 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」 1982. 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 (分子研教授)
花崎 一郎 (分子研教授)
- 16 「分子の動的挙動に対する磁場効果」 1983. 1. 17～1. 19
林 久治 (理化学研究所主任研究員)

- 17「芳香族性と芳香族化合物」1983. 9. 26～9. 28
村田 一郎 (大阪大学教授) 井口 洋夫 (分子研教授)
- 18「化学反応機構の理論の現状と将来」1984. 1. 19～1. 21
西本吉助 (大阪市立大教授)
- 19「宇宙空間における分子の形成と進化」1984. 3. 19～3. 21
花崎 一郎 (分子研教授)
- 20「機能化界面を用いた光化学的電子移動」1984. 8. 18～8. 20
田伏 岩夫 (京都大学教授)
- 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」1985. 1. 29～1. 31
小林 宏 (東京工業大教授) 北川 禎三 (分子研教授)
- 22「EXAFSとその物性への応用」1985. 3. 18～3. 20
黒田 晴雄 (東京大学教授)
- 23「分子科学10年, 進歩と将来動向」1985. 5. 7～5. 8
井口 洋夫 (分子研教授) 廣田 榮治 (分子研教授)
- 24「凝一次元系に於ける新物性の展望—電荷移動と電子—格子相互作用」1985. 12. 12～12. 14
辻川 郁二 (京都大学教授) 丸山 有成 (分子研教授)
三谷 忠興 (分子研助教授) 那須奎一郎 (分子研助教授)
- 25「光異性反応の動的過程」1986. 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)
- 26「星間空間及び彗星における分子過程」1986. 6. 26～6. 28
花崎 一郎 (分子研教授) 小谷野猪之助 (分子研助教授)
齋藤 修二 (分子研助教授) 西 信之 (分子研助教授)
- 27「高スピン分子とスピン整列」1986. 9. 8～9. 10
伊藤 公一 (大阪市立大教授) 岩村 秀 (分子研教授)
- 28「極端紫外光による物性化学」1987. 2. 5～2. 7
井口 洋夫 (分子研教授) 渡邊 誠 (分子研助教授)
- 29「イオン—イオン並びにイオン—溶媒相互作用に関する分子論的考察」1987. 5. 26～5. 28
大瀧 仁志 (東京工業大学教授) 齋藤 一夫 (国際基督教大学教授)
大峯 巖 (分子研助教授)
- 30「化学過程における電子のダイナミックス」1987. 10. 28～10. 30
田仲 二郎 (名古屋大学教授) 吉原経太郎 (分子研教授)
- 31「気相クラスターのイオン化過程」1988. 2. 10～2. 12
朽津 耕三 (東京大学教授)
- 32「励起分子の化学挙動についての理論化学」1988. 9. 27～9. 29
笛野 高之 (大阪大学教授)

- 33「生化学分子の前生物的合成とキラリティの起源」1988. 12. 1～12. 3
原田 馨 (筑波大学教授)
- 34「燃料における化学反応」1988. 12. 20～12. 22
神野 博 (京都大学教授) 幸田清一郎 (東京大学助教授)
林 光一 (名古屋大学講師)
- 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」1989. 5. 23～5. 25
齋藤 太郎 (大阪大学教授) 山崎 博史 (理化学研究所主任研究員)
伊藤 翼 (東北大学教授) 磯邊 清 (分子研助教授)
- 36「水素一電子結合系での物性の創造」1989. 11. 13～11. 15
三谷 忠興 (分子研助教授) 榎 敏明 (東京工業大学助教授)
中筋 一弘 (分子研教授)
- 37「酸性物高温超伝導体—その物質と超伝導機構—」1990. 2. 13～2. 15
田仲 二郎 (名古屋大学教授) 武居 文彦 (東京大学教授)
北沢 宏一 (東京大学教授)
- 38「生体系金属錯体の構造と動的側面」1990. 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 (分子研教授)
- 39「分子素子を目指した機能分子の開発とその組織化」1990. 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 (分子研教授)
- 40「非線型化学反応と自己秩序形成」1991. 2. 23～1. 25
北原 一夫 (東京工業大学教授) 中村 宏樹 (分子研教授)
吉川 研一 (名古屋大学助教授) 花崎 一郎 (分子研教授)
- 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」1991. 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)
- 42「分子科学：現状と将来」1992. 1. 7～1. 9
井口 洋夫 (分子研所長) 正畠 宏祐 (分子研助教授)
中村 宏樹 (分子研教授)
- 43「レーザー光電子分光の新展開」1992. 3. 10～3. 12
木村 克美 (分子研教授)
- 44「化学反応理論の新しい展開」1992. 11. 4～11. 6
諸熊 奎治 (分子研教授) 中村 宏樹 (分子研教授)
中辻 清 (京都大学教授) 岩田 末廣 (慶應大学教授)
- 45「金属錯体における分子内及び分子間電荷移動の化学」1992. 12. 8～12. 10
中村 晃 (大阪大学教授) 大瀧 仁志 (分子研教授)

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」1992. 12. 16～12. 18

正 嶋 宏祐 (分子研助教授) 渡 邊 誠 (分子研助教授)

鎌 田 雅夫 (分子研助教授) 磯 山 悟朗 (分子研助教授)

47 「緩和現象における溶媒の動力学効果」1993. 10. 5～10. 7

吉原経太郎 (分子研教授) 岡 田 正 (大阪大教授)

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」1994. 1. 26～1. 28

旗野 昌弘 (東北大教授) 葉 師 久彌 (分子研教授) 丸 山 有成 (分子研教授)

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」1994. 3. 16～3. 18

梶 本 興典 (京都大教授) 富 宅 喜代一 (分子研助教授)

大 峯 巖 (分子研助教授)

50 「電子欠損型遷移金属錯体の機能」1994. 8. 1～8. 3

異 和行 (名古屋大教授) 高 橋 保 (分子研助教授)

51 「表面における光誘起過程のダイナミックス」1994. 10. 5～10. 7

村 田 好正 (東京大教授) 松 本 吉泰 (分子研助教授)

開催一覧 2

回	課題, 開催日, 提案代表者	外国人招待研究者
52	「実験室及び天分サブミリ波分光」1995. 3. 14～3. 16 斎藤修二 (分子研) 山本智 (東大理)	T. G. Phillips (カルフォルニア工科大学 教授) (アメリカ) K. M. Evenson (標準科学技術国立研究所 研究員) (アメリカ) G. J. White (ロンドン大学 教授) (イギリス) M. Guélin (電波天文学研究所 研究員) (フランス) P. T. P. Ho (天体物理学ハーバード スミソニアンセンター 教授) (アメリカ)
53	「スピン化学の新展開」 1995. 10. 19～10. 21 林 久治 (理研) 広 田 壤 (京大理) 佐藤博保 (分子研)	I. Moline (ロシア科学アカデミー 教授) (ロシア) C. K. Ottinger (マックスプランク研究所 教授) (独) G. J. Ferraudi (ノートルダム大学 教授) (アメリカ) K. A. McLauchlan (オックスフォード大学 教授) (イギリス) J. B. Pedersen (オデッセ大学 教授) (デンマーク)
54	「水素原子移動反応の動力学的研究」 1996. 1. 23～1. 25 関 春夫 (群馬大)	Timothy S. Zwier (パデュー大学 助教授) (アメリカ) Michael T. H. Liu (プリンスエドワードアイランド大学 教授) (カナダ) Jack A. Syage (マイロススペースコーポレーション研究員) (アメリカ) Sabastiao J. Formosinho (ユイングラ大学 教授) (ポルトガル) J. C. Scaiano (オタワ大学 教授) (カナダ)
55	「生体機能発現における金属蛋白質の作用機構」 1996. 2. 5～2. 7 干鯛真行 (東大) 渡辺芳人 (分子研)	Regina Stevens Truss (ミンガン大学 教授) (アメリカ) Dieter Sellmann (ニュルンベルグ大学 教授) (ドイツ) Anna Marie Pyle (コロンビア大学 教授) (アメリカ) Thomas L. Poulos (カルフォルニア大学 教授) (アメリカ) Lawrence Que Jr. (ミソネタ大学 教授) (アメリカ) Peter F. Kowles (リーズ大学 教授) (イギリス)

—第 51 回までの参加外国人研究者 (招待) は「分子研リポート'94」を参照—

2-9 共同研究

2-9-1 共同研究の概要

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使用する研究。

2-9-2 1995 年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名	提案代表者
炭素原子クラスター科学の新展開	丸山有成（法政大教授）
金属酸化物クラスターの合成と触媒機能	田中晃二（分子研教授）

(2) 協力研究

「TTF 二量体を含む電荷移動錯体の構造と赤外吸収強度の理論的研究」を始め 95 件

(3) 研究会

研 究 会 名	提案代表者
π -d 複合電子系分子性固体の設計と新規物性	山下 正廣（名古屋大教授）
極紫外光プロセスの基礎	英 貢（豊橋技科大教授）
若手分子科学研究者のための物理化学研究会	青木百合子（広島大講師）
実験家のための理論分子科学と理論家のための実験分子科学	谷村 吉隆（分子研助教授）
光電子分光法の現状と将来—SOR と分子科学を中心に	関 一彦（名古屋大教授）
液晶の分子科学	宮島 清一（分子研教授）
ウェルナー型錯体と有機金属化合物との接点	吉川 雄三（分子研教授）
液体中における非線形分光法の新しい展開	吉原経太郎（分子研教授）
精密加工と精密駆動技術	渡辺三千雄（分子研助教授）
プロトンポンプ機能をもつ蛋白質の構造化学	北川 禎三（分子研教授）
Workshop on Photoelectron and Photoionization Spectroscopy	鈴木 俊法（分子研助教授）

(4) 施設利用

① 機器利用

「遷移金属クラスター錯体の磁気化学」 始め 56 件

② 計算機利用

「蛋白質立体構造の変化と運動」 始め 181 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 (神戸大教授)
放射光励起光化学反応用効率分光器の開発	宇理須恒雄 (分子研教授)
BL2B2 用斜入射分光器の開発	見附孝一郎 (分子研助教授)
スピン偏極光電子分光測定装置の開発	鎌田 雅夫 (分子研助教授)

(6) UVSOR 協力研究及び招へい協力研究

「In-situ 合成された DCNQI-金属化合物の光電子分光」を始め 27 件

(7) UVSOR 施設利用

「アルキルアンモニウム金属ハライドにおける励起子緩和機構」を始め 136 件

2-9-3 共同研究実施件数一覧

分子科学研究所共同研究実施一覧

年度 項目	'76～'88		'89		'90		'91		'92		'93		'94		'95		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	
課題研究	3	462	1	8	2	18	2	20	4	33	1	8	1	6	2	16	人数： 登録人数
協力研究	1,650	1,650	136	136	112	112	113	113	127	173	127	176	128	182	95	131	
招へい 協力研究	174	174	1	1	3	3	2	2	2	2	3	3	0	0	1	1	
所長招へい	556	556	77	77	161	161	175	175	141	141	105	105	129	129	148	148	
研 究 会	135	1,830	11	203	10	109	10	93	8	113	9	122	9	143	11	163	人数： 旅費支給者
施設利用Ⅰ	724	1,116	79	221	77	202	88	211	85	227	66	206	45	129	56	173	件数： 許可件数 人数： 許可人数
施設利用Ⅱ	1,390	3,831	187	544	210	590	213	620	215	657	180	586	187	602	181	583	
合 計	4,688	9,619	492	1,190	575	1,195	603	1,234	582	1,346	491	1,206	499	1,191	494	1,215	
経 費	176,638		16,370		19,774		20,386		20,879		19,709		21,492		20,054		千円

分子科学研究所 UVSOR 共同研究実施一覧

年度 項目	’85～’88		’89		’90		’91		’92		’93		’94		’95		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	
課題研究	15	123	2	13	2	38	3	37	2	21	2	30	2	28	4	49	人数： 登録人数
協力研究	56	95	19	52	28	88	27	102	39	169	36	151	28	123	23	91	
招へい 協力研究	31	31	2	2	4	4	5	5	7	7	8	8	9	9	4	4	
研 究 会	12	130	3	29	2	33	2	39	2	29	2	34	2	51	2	41	人数： 旅費支給者
施設利用	256	1,215	107	528	105	521	111	570	109	614	132	714	130	655	136	632	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合 計	370	1,594	133	624	141	684	148	753	159	840	180	937	171	866	169	817	
経 費	37,642		10,572		14,410		12,783		12,670		12,729		12,729		13,120		千円

2-9-4 共同研究の研究形態の変更について

分子科学研究所は創設以来、課題研究、協力研究、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 施設の完成の後、1985 年から同様な形で UVSOR 共同利用も行っている。これらの共同研究は日本における分子科学研究の水準向上に重要な役割を果たしてきた。従来、共同研究は分子研の優れた装置、施設を利用する形態のものが多く、大学等の設備等が充分でなかった時にはそれなりの大きな成果をあげることができた。しかし、最近では大学等の研究設備も著しく改善され、もはや従来の装置、設備を中心とする共同研究の意義は薄れてきたと言える。このような状況のもとで、共同研究の在り方について、共同研究専門委員会、運営協議員会での検討が行われた結果、改善の第一歩として、まず課題研究を次の様に変更し、1996 年度から実施することとなった。

1. 課題研究内容：分子研で行われる研究としての特色を出せる研究、分子科学の新しい萌芽を生み出しさらにそれを発展させる研究を目的とする。このため規模の大きい装置、研究設備の開発や新設よりは、分子科学の諸分野での新しい考え方、新しい手法、あるいは、境界領域にまたがる新分野での展開などを目的とする検討会、ワークショップの開催、さらに検討内容の試験的具体化などを支援する。
 2. 研究形態：複数の研究者（4～5 人まで）が行うグループ研究の形態
 3. 研究校費：従来の校費申請限度額 1,000 万円（～3 年）まで 1～2 件を、限度額 100 万円数件（年間 4～5 件まで、最長継続期間 3 年）に変更する。
 4. 旅費としては年間の総額 120～150 万円程度を予定している。
 5. 備考：UVSOR 課題研究は従来通り。
- なお、課題研究の新しい実施方法は数年間試行の後、再検討するものとする。

2-10 国際交流と国際協同研究

2-10-1 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か月以上滞在），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か月滞在）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である。

以下に今迄の来訪者の過去10年間のデータを種類別及び国別に示す。表中「文部省外国人招へい研究者」とは文部省関係の招へい外国人，すなわち(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重に数えられている）。

表1 外国人研究者数の推移（過去10年間）

年度	長期滞在者			短期滞在者		合 計
	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	特別協力研究者	研究会	訪問者	
86	12	3	16	69	78	178
87	14	6	19	57	66	162
88	14	5	28	60	80	187
89	13	9	23	67	93	205
90	17	16	18	73	50	174
91	16	13	22	52	50	153
92	17	21	49	159	82	328
93	16	17	56	112	47	248
94	16	14	46	78	29	183
95	15	12	47	86	17	177
合計	150	116	324	813	592	1,995

表2 外国人研究者数の国別内訳の推移（過去10年間）

年度	アメリカ	イギリス	ドイツ	フランス	韓 国	中 国	ロシア	その他	合 計
86	54	22	21	9	8	29	9	26	178
87	48	13	10	6	7	34	5	39	162
88	47	27	15	7	18	27	3	43	187
89	46	21	16	21	20	31	4	46	205
90	38	36	12	15	9	13	4	47	174
91	41	14	8	10	8	13	8	51	153
92	108	24	23	7	34	29	36	67	328
93	48	28	6	5	49	45	20	47	248
94	39	16	16	3	26	17	24	42	183
95	40	16	15	5	24	20	23	34	177
合計	509	217	142	88	203	258	136	442	1,995

2-10-2 国際共同研究

1995 年現在実施している国際共同研究事業を以下に説明する。

(1) 日米科学技術協力事業

分子科学研究所は、1979 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（1988 年再締結）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**」に係る事業計画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。1995 年 2 月に 1979 年に締結された協定の 5 年間単純延長が合意され継続して実施している。なお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、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おり、1996 年 3 月にワシントン D. C. で 7 回目が開催された。

これまでに実施した事業の概要は次のとおりである。

ステアリングコミッティー		7 回開催
研究計画委員会及び幹事会	1979. 6~1995. 3	60 回開催
研究者派遣	1979~1994 年度 中・長期派遣	100 名
	1995 年度 //	8 名
研究者受入	1983~1994 年度 調査・研究のための研究者受入	215 名
日米情報交換セミナー	1981~85 年度	各年 1 回
	1986 年度	2 回
	1987 年度	1 回
	1988 年度	2 回
	1989, 90 年度	各年 1 回
	1991, 92 年度	各年 2 回
	1993 年度	1 回
	1994 年度	3 回
	1995 年 1 月 「光合成反応中心のバイオダイナミックス」	東京
	1995 年 1 月 「太陽エネルギー転換における今後の展望」	ハワイ
	1995 年 3 月 「半導体界面における光誘起電子移動 -基礎と応用-	カリフォルニア

(2) 日英共同研究

1980 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）及びダースペ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 1981 年 9 月に文部省と SERC との「日英学術協力に関する会議」において、分子科学での研究協力の推進が合意され、次の 5 つの分野において研究協力が進められている。(1) 分子計算法学、(2) 高分解能分光学、(3) 電子構造動力学、(4) 放射光利用化学、(5) 物質化学。1993 年 6 月にはそれまでの成果が評価されて、文部省と SERC の間で覚書が改訂され本事業は更に継続・推進されている。

活動内容は情報交換を行う「5 + 5 ミーティング」と具体的共同研究を行うための研究者交流からなっており、これまでに 18 回のミーティングと、両国から総計 200 人以上の研究者派遣が行われている。

1995 年度は、1995 年 9 月に放射光利用化学分野の、1996 年 3 月に物質化学分野の日英シンポジウム（5 + 5 ミーティング）が行われた。また若手研究者 2 名を派遣し共同研究を実施している。

(3) 日韓共同研究

分子科学研究所と韓国高等科学技術院の協力で、1984年以来、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。

合同研究会は、1984年5月に分子科学研究所において第1回合同シンポジウムを行い以後1～2年おきに日韓交互に開催しており、1995年2月には第6回シンポジウム[Molecular Science on Solid and Solid Surface]を韓国、テジョンにおいて開催し日本から15名が参加した。

また、1991年度から毎年3名の韓国側研究者を4か月ずつ招へいしており、1996年度も3名の招へいを予定している。

(4) 日中共同研究

日中共同研究は、1973年以来の相互の研究交流を経て、1977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。両研究所間の協議に基づき、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、を取り上げ、合同シンポジウム及び研究者交流を実施している。1995年度には、有機固体化学分野の2名の中国人研究者がそれぞれ3か月間と5か月間分子研に滞在し、共同研究を実施した。1995年10月に第5回日中合同シンポジウムが浙江大学で開催され、日本から20名が参加した。

(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。1990年度第1回の合同シンポジウムをイスラエルで開催して以来、若手研究者の派遣、実験研究における交流等を実施している。1994年度には、1名の派遣と1名の受け入れを行い共同研究を進めるとともに、エルサレムにおいて第3回合同シンポジウムを開催した。1995年度には、日本人研究者2名を派遣し、またイスラエル研究者2名を受け入れ共同研究を実施している。

(6) 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、1993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。この結果をもとに1994年度は2名の研究者を派遣した。1995年度からは日本学術振興会の重点研究国際協力事業として正式にスタートした。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。なお、1996年2月に研究会がロチェスターにおいて分子研側から7名が参加して開催された。

(7) 日本・チェコ共同研究

1995年度から新たに開始されたプログラムで、チェコ科学アカデミー物理化学研究所（ヘイロフスキー研究所）、同高分子科学研究所、プラハ工科大学、カレル大学などとの分子科学共同研究を促進させるものである。初年度は所長はじめ6名の研究者がプラハを訪問し、共同研究の推進等について討論を行った。また、チェコの若手研究者1名を約3か月間招へいする予定である。

(8) 日本学術振興会「日本・インド自然科学共同研究事業」

1993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。1993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、研究者受け入れ2名（うち1名は博士研究員）を実施した。1994年度はアジア学術セミナー（バンガロールで開催）の機会を利用して、研究促進のための会議を開催した。また、日本から1名の研究者を派遣し、インドから5名の研究者を全国各地の大学・研究機関において受け入れた。1995年度は人物交流の他に10月に情報交換と共同研究促進のためのセミナーを日本で開催した。

2-10-3 多国間の国際共同研究について

2-10-2において分子科学研究所で実施している国際共同研究について述べたが、それらはすべて2国間の共同研究である。個々の2国間共同研究はそれぞれ多大な成果を収めてきたが、これらの国際共同研究事業を一括して総合的・包括的に運営することができるならば、単に能率向上を計るにとどまらず、新しい形態での国際協力を推進することも可能になる。例えば、3か国以上の多国間にまたがる機関、研究者間の交流・協力を柔軟に遂行できる研究環境をつくり出すことができ、新たな形態による国際共同研究を推進すれば画期的な成果を生み出すことができると考えられる。

このような考えは昨年、将来計画研究分野検討小委員会で議論され、“分子研リポート’94”に報告されたが、この考えの具体化に向けて現在検討が行われている。分子研を中心とした国際的共同研究で飛躍的成果が期待されるいくつかのテーマ（たとえば、光反応の分子科学、物性分子科学、理論分子科学等）のそれぞれについて多国間にまたがる共同研究態勢を構築することができれば、分子研が分子科学研究における国際的なセンターとして一層発展するための大変有効な事業になるものと確信しており、本構想の実現に向けて努力している。

2-11 大学院教育

2-11-1 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）この制度に基づいた特別研究学生（旧称：大学院受託学生）の受入状況は下の表で示すとおりであり、研究所のもつ独自の大学院制度（総合研究大学院大学）と調和のとれたものとなっている。

特別研究学生（1991年までは受託大学院生）受入状況

(年度別)

所 属	1977~82	83~87	88	89	90	91	92	93	94	95
北海道大学	4	3	2	1						
室蘭工業大学		1	1							
東北大学	2	5		1	1			2		
群馬大学								1		
埼玉大学	1	1								
東京大学	1	12	5	3	2	2	2	1		
東京工業大学	4	9	1	1					2	3
お茶の水女子大学	1	3					1	1		
横浜国立大学	1									
金沢大学		3								
新潟大学		2					1	1		
福井大学	2									1
信州大学							1	1		
岐阜大学								1	1	
名古屋大学	12	18	6	5	4	5	3	2	2	1
名古屋工業大学	2	3	1							
豊橋技術科学大学	1	11	4	6	3	3	2			
京都大学	2	3		1	2	2		7	5	4
京都工芸繊維大学		5	1							
大阪大学	5	12			2	2	2	1		
奈良教育大学								1		
奈良女子大学		1							1	1
岡山大学									7	2
広島大学		4	6	5		1	1	1	7	6
山口大学	1									
愛媛大学	2					1				
高知大学						1	1			
九州大学	2	5	1	7	8	5	4	1		
佐賀大学		1					2	4	5	1
熊本大学		4						2		
東京都立大学	9	5	1	1	1					
大阪市立大学	1	2								
慶應義塾大学		1	1	1	1					
上智大学	1									
東海大学		1								
星薬科大学			1							
早稲田大学	1									
計	55	115	31	32	24	22	20	27	30	19

2-11-2 総合研究大学院大学

総合研究大学院大学は1988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1990年1月廣田栄治教授が同大学副学長に就任した。分子科学研究所は、同大学院大学に参加し、構造分子科学専攻及び機能分子科学専攻を受持ち、1991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とおりである。

構造分子科学専攻

分子・分子集合体の構造の解析を通じて分子の実態を明らかにするとともに、静的及び動的物質像を確立することを目的とする教育研究を行う。従来の分光学的方法をはじめ種々の構造解析法や理論的方法による静的な構造研究に係る分野のほか、新しい動的構造研究方法等を駆使する最新の研究分野をも積極的に対象とする。

機能分子科学専攻

分子・分子集合体の持つ多種多様な機能を対象とし、主として原子・分子のレベルからその発現原理等の本質を明らかにすることを目的とする教育研究を行う。特に、分子・分子集合体の新しい機能を探求し、望ましい機能を有する分子・分子集合体の設計、創成に必要な基盤の開拓に関する分野をも積極的に対象とする。

大学開設以来の分子科学2専攻の入学人数、学位取得状況等及び各年度における入学者の出身大学の分布等を以下に示す。

担当教官 (1995 年度)

単位：人

専 攻	教 授	助教授	助 手
構造分子科学専攻	7	10	12
機能分子科学専攻	7	6	9
計	14	16	21

在籍学生数 (1996 年 1 月現在)

単位：人

入学年度専攻	1991 年度	92 年度	93 年度	94 年度	95 年度	計	定 員
構造分子科学専攻	1	4	11	7	4	27	6
機能分子科学専攻			7	4(1)	6	17(1)	6

() は研究生で外数

学位取得状況

単位：人

専 攻	1991 年度	92 年度	93 年度	94 年度	95 年度	計
構造分子科学専攻	1	3	5	3	15	27
機能分子科学専攻	5	5	4(1)	8(1)	4	26(2)

() は論文博士で外数

入学状況 (定員各専攻共 6)

単位：人

専 攻	1989 年度	90 年度	91 年度	92 年度	93 年度	94 年度
構造分子科学専攻	3	6	5	7	12	7
機能分子科学専攻	9	7	6	6(1)	9	4(1)

() 内は研究生で外数

外国人留学生数 (国別, 在籍者数)

単位：人

	構造分子科学専攻			機能分子科学専攻		
	1989-93 年度	94 年度	95 年度	1989-93 年度	94 年度	95 年度
中 国	3	3	2	4	1(1)	1(1)
フランス				1		
ロシア				1(1)	1	
バンラデイツェ	1	1	1			

() 内は研究生で外数

大学別入学者数

大 学 名 等	構 造 分 子 科 学 専 攻			機 能 分 子 科 学 専 攻			計 計
	'91	'92～'94	'95 年度	'91	'92～'94	'95 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	2		2	1	2	1	8
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	2					1	3
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		2					2
静岡大学		1					1
名古屋大学				2			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	3	2	1	9
京都工芸繊維大学					1		1
立命館大学				1			1
大阪大学	2	3			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	1	3
熊本大学		1					1
*その他	1	3	2	3	2	1	12

* 外国の大学等

2-12 定員と財政

2-12-1 定員

1995 年度

区 分	所 長	教 授	助教授	助 手	小 計	技 官	合 計
所長	1				1		1
理論研究系		3 (1)	3 (1)	6	12 (2)		12 (2)
分子構造研究系		2 (1)	2 (1)	6	10 (2)		10 (2)
電子構造研究系		2 (2)	2 (2)	6	10 (4)		10 (4)
分子集団研究系		2 (1)	2 (1)	6	10 (2)		10 (2)
相関領域研究系		1 (1)	1 (1)	4	6 (2)		6 (2)
極端紫外光科学研究系		3 (1)	3 (1)	6	12 (2)		12 (2)
研究施設		3 (2)	9 (3)	18	30 (5)		30 (5)
技術課						47	47
合計	1	16 (9)	22 (10)	52	91 (19)	47	138 (19)

() 内は客員数で外数である。

2-12-2 財政

(単位：千円)

年度		1991 年度	1992 年度	1993 年度	1994 年度	1995 年度
科目等						
人件費		1,061,131	1,111,105	1,068,408	1,291,019	1,167,810
運営費, 設備費		2,332,729	2,451,962	2,796,887	2,475,703	2,911,010
施設整備費		0	231,026	412,091	31,078	610,667
科学研究費 補 助 金	研究 (1) 関係	(8) 109,100	(8) 133,200	(5) 115,400	(7) 167,000	(5) 28,900
	研究 (2) 関係	(44) 82,520	(54) 67,500	(37) 64,960	(56) 85,630	(59) 95,177
受託研究		0	0	0	(1) 150	0
奨学寄付金		(21) 19,951	(20) 21,357	(27) 31,553	(10) 33,520	(16) 20,685
民間との共同研究		(3) 1,236	(3) 1,241	(2) 842	0	0
合計		(76) 3,606,667	(85) 4,017,391	(71) 4,490,141	(74) 4,084,100	(80) 4,834,249

* 国立学校, 研究所経費については岡崎共通経費が按分として含まれている。

* 科研費, 受託研究, 奨学寄付金, 民間との共同研究は受け入れの件数 () と金額。

* 1995 年度は見込み額

2-13 共通設備

2-13-1 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。

2-13-2 共同利用研究者宿泊施設

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，夫婦室10，家族室20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。

2-13-3 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。

2-14 地域社会との交流

2-14-1 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行われている。分子研担当分を以下に示す。

開催日	テーマ	講 師
1986. 1. 18	分子研の紹介	諸熊 奎治 教 授
1986. 6. 7	シンクロトン放射とは	渡邊 誠 助教授 春日 俊夫 助教授
1986. 10. 4	人類は元素をいかに利用してきたか	齋藤 一夫 教 授
1987. 6. 13	レーザーの応用について	吉原経太郎 教 授
1987. 9. 26	コンピュータで探る分子の世界	柏木 浩 助教授
1988. 7. 2	目で見える低温実験発光現象と光酸化現象	木村 克美 教 授
1988. 10. 29	人工光合成とは何か	坂田 忠良 助教授
1989. 6. 24	星間分子と水－生命を育む分子環境－	西 信之 助教授
1989. 10. 21	常温での超伝導は実現できるか	那須奎一郎 助教授
1990. 6. 23	目で見え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
1990. 10. 20	電気と化学	井口 洋夫 所 長
1991. 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
1991. 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
1992. 7. 7	サッカーボール分子の世界	加藤 立久 助教授
1992. 11. 13	炭酸ガスの化学的な利用法	田中 晃二 教 授
1993. 6. 22	化学反応はどのように進むか？	正畠 宏祐 助教授
1993. 10. 1	宇宙にひろがる分子の世界	齋藤 修二 教 授
1994. 6. 21	分子の動き	伊藤 光男 所 長
1995. 6. 20	生体内で活躍する鉄イオン－国境なき科学の世界－	渡辺 芳人 教 授

2-14-2 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	1979.11. 9 (Fri)	創設記念一般公開
第2回	1980.11.15 (Sat)	
第3回	1981.11.14 (Sat)	3研究所同時公開
第4回	1985. 5.11 (Sat)	10周年記念一般公開
第5回	1988.11. 5 (Sat)	
第6回	1991.10.26 (Sat)	
第7回	1994.11.12 (Sat)	

2-14-3 見学受け入れ状況

年 度	受入件数	見学者数
1990年度	10	250
1991年度	3	110
1992年度	7	162
1993年度	9	211
1994年度	7	145

3. 研究系及び研究施設の現状

3. 研究系及び研究施設の現状

3-1 理論研究系

分子基礎理論第一研究部門

岩 田 末 廣 (教授)

A-1) 専門領域理論化学

A-2) 研究課題：

- a) 分子の電子構造理論における新しい方法と数値解析法の開発
- b) 水クラスターおよびその金属原子（イオン）や有機分子との錯体の構造，反応，分光学
- c) アンモニアクラスターとアンモニウムラジカルの励起状態と反応の理論研究
- d) 2成分元素クラスターの幾何構造と電子構造および反応性
- e) アルゴンクラスターイオンの分子分光と光解離動力学の理論
- f) 3原子分子の励起状態のポテンシャルエネルギー曲面の計算とその曲面を用いた分光学および反応動力学の研究
- g) NO_x と HNO_x の異性体の分子軌道計算
- h) 電子供与受容錯体の電子構造
- i) 分子内大振幅運動のポテンシャルエネルギー曲面とその置換基依存性の理論研究

A-3) 研究活動の概略と成果

- a) SCF および MCSCF 計算に必要な 4 中心 2 電子積分を高精度でかつ高速で計算する近似方法を開発した。1 電子密度を原子上においた基底関数の積の線形結合で近似することによって 4 中心積分の計算が不要になる。基底関数の積には、軌道角運動からくる本質的な 1 次従属性と、基底関数の非直交性に由来する数値的な 1 次従属性が存在することを明らかにして、その克服方法を導入することによって効率の良いプログラムを開発することに成功した。

また、配置間相互作用法に基づいた周波数依存モーメント法によりラマン散乱強度やその他の非線形光学定数の波長依存性を計算する方法を開発した。

- b) $\text{M}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ ($\text{M} = \text{B}, \text{Al}, \text{Mg}, \text{Ca}$) のクラスターの構造を分子軌道法によって求めた。多くの異性体やクラスター内反応生成物間のエネルギー，ギブスの自由エネルギーを計算し，平衡定数を求めた。 $\text{M}=\text{Mg}$ と Ca については，富宅（分子研，神戸大）グループがある n の範囲で水分子の水素原子の一つが脱離する反応を見出している。計算した平衡定数はこの反応が $n=4$ から始まるという実験事実と一致する結果を得ている。

フェノールと水のクラスターについては，東北大の三上グループが観測した OH 伸縮振動の帰属に成功し，クラスターの構造も同定することができた。OH 伸縮振動のシフトを利用して水クラスター内の水の構造決定の研究も進めている。

- c) アンモニア分子の 2 量体 $(\text{NH}_3)_2$ の励起状態と陽イオン $(\text{NH}_3)_2^+$ のクラスター内反応のポテンシャルエネルギー曲面

を計算した。 $\text{NH}_4^+ \cdots \text{NH}_2$ ($\text{NH}_4^+ \cdots \text{NH}_2$)型の安定な錯体を経て NH_2 を生成する反応が進行することを明らかにすることができた。基底状態の2量体はこのような反応をしない。

- d) Al_nNa , Al_nS , Si_nC_m , Si_nNa , C_nN の中性, 陽イオン, 陰イオンのクラスターの幾何構造を分子軌道法によって計算し, イオン化エネルギー, 電子親和力を求め, 中性と陰イオンの光電子分光スペクトルの解析を行った。これらの解析によってクラスターの構造について情報を得ることができた。
- e) Ar_n^+ クラスターの光吸収スペクトルを理論的に計算し, クラスターの大きさ(n)と内部温度に対する依存性を調べた。このクラスターでは多くの極小構造があり, かつその間の障壁が小さく, しかも励起電子状態への摂動が構造に依存している。多くの初期構造を仮定した分子動力学計算によって実験結果を解析する事の出来る吸収スペクトルの特徴を見いだすことが出来た。
- f) CS_2 分子の近紫外電子スペクトルは高精度・高分解能分光によって詳細に研究されている。1重項間, 1重項と3重項間の相互作用によって観測される振動・回転準位は複雑に入り組んでいる。これらの相互作用を明らかにするために, この領域の励起状態のポテンシャルエネルギー曲面を詳細に計算し, 光学的に直接に見えない状態も含めて振動回転準位を理論的に計算した。また, MH_2 ($\text{M} = \text{Ca}, \text{Sc}, \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}$)の基底および励起状態のポテンシャルエネルギー曲面をほとんど同じ精度で計算し, その結果, MH 結合の化学的性質を明らかにすることが出来た。
- g) NO_x ($x=1, 6$)と HNO_y ($y=1, 5$)の可能な異性体を分子軌道法によって探求した。多くの環状構造の極小構造を見いだした。これらの異性体はエネルギー過剰分子の一つとしても考えられるし, また, 反応中間体や表面などでの過酸化物のモデルとしても重要である可能性を持っている。
- h) 超伝導相をもつ $\kappa\text{-ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Br}$ の電子構造を調べるために, ET , $\text{ET}^{+1/2}$, ET^+ を非経験的分子軌道法によって分子構造を決定し, X線回折の構造と比較した。この結果を用い, ET_2^+ と $\text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Br}$ の電子構造も計算し, スピンの局在性を調べた。
- i) トルエンの置換体や o -, m -, p -キシレンの基底状態, S_1 励起状態, 陽イオンの基底状態におけるメチル基の内部回転のポテンシャルエネルギー曲面を計算し, 最近得られた実験の結果と比較した。二つのメチル基の同時回転運動のシュレディンガー方程式を正確に解くプログラムを開発している。

B-1) 学術論文

Y. SONODA and S. IWATA, "Theoretical studies of the internal rotation of the methyl group in o -, m - and p -fluorotoluenes and their cations", *Chem. Phys. Letters*, **243** 176 (1995).

R. KISI, A. NAKAJIMA, S. IWATA and K. KAYA, "Electronic and geometric structures of silicon-M binary clusters ($\text{M} = \text{C}$ and Na)", *Proceeding of Yamada Conf.* (1995).

S. IWATA and H. WATANEBE, "Theoretical studies of molecular spectroscopies of some small clusters", *Proceeding of Yamada Conf.* (1995).

A. NAKAJIMA, T. TAGUWA, K. NAKAO, M. GOMEI, R. KISHI, S. IWATA and D. K. KAYA, "Photoelectron spectroscopy of silicon-carbon cluster anions (Si_nC_m^-)", *J. Chem. Phys.* **103** 2050 (1995).

A. NAKAJIMA, K. NAKAO, M. GOMEI, R. KISHI, S. IWATA and K. KAYA, "Electronic properties of silicon - M binary clusters ($\text{M} = \text{C}$ and Na)", *Mat. Res. Soc. Sym. Proc.* **358** 61-66 (1995).

S. TEN-NO and S. IWATA, "Three-center expansion of electronic repulsion integrals with linear combination of atomic electron distributions", *Chem. Phys. Letters*, **240** 578 (1995).

H. WATANABE, S. IWATA, K. HASHIMOTO, F. MISAIZU and K. FUKE, "Molecular orbital studies of the structures and reactions of singly charged magnesium ion with water clusters, $Mg^+(H_2O)_n$ ", *J. Am. Chem. Soc.* **117** 755-763 (1995).

M. SANEKATA, F. MISAIZU, K. FUKE, S. IWATA and K. HASHIMOTO, "Reactions of Singly Charged Alkaline-Earth Metal Ions with Water Clusters: Characteristic Size Distribution of Product Ions.", *J. Am. Chem. Soc.* **117** 747-754 (1995).

A. NAKAJIMA, T. TAGUWA, K. NAKAO, K. HOSHINO, S. IWATA and K. KAYA, "Photoelectron spectroscopy of Al_nS^- clusters ($n=1-9$)", *J. Chem. Phys.* **102** 660-665 (1995).

C. G. ZHAN and S. IWATA, "Ab Initio Studies on the Structures and Vertical electron Detachment Energies of Copper-Water Negative Ion Clusters $Cu-(H_2O)_n$ and $CuOH^-(H_2O)_{n-1}$ ", *Chem. Phys. Letts.* **232** 72-78 (1995).

A. NAKAJIMA, K. HOSHINO, K. WATANABE, Y. KONISHI, S. IWATA and K. KAYA, "Photoionization electronic spectroscopy of $AlNa$ ", *Chem. Phys. Letters*, **222** 333-357 (1994).

T. IKEGAMI and S. IWATA, "Theoretical Studies on the Non-Adiabatic Photodissociation Process of Argon Cluster Ions Ar_7^+ ", *Int. J. Quantum. Chem. Symp.* **28** 529-539 (1994).

T. KOBAYASHI, H. MATSUZAWA and S. IWATA, "Theoretical studies of ammonia-halogen and methylamine-halogen complexes: Geometries, harmonic vibrational frequencies and their infra-red intensities and excited states of ammonia-chlorine monofluoride complex", *Bull. Chem. Soc. Jpn*, **67** 3172-3178 (1994).

B-4) 招待講演

S. IWATA, T. ASADA and H. WATANABE, "Theoretical studies of the harmonic vibrations of water clusters $(H_2O)_n$ and hydrated phenol clusters $PhOH(H_2O)_n$ ", Recent progress and future prospects of molecular electronic spectroscopy, Hayama, Kanagawa, Japan Oct. 1995.

S. IWATA and H. WATANABE, "Theoretical studies of molecular spectroscopies of some small clusters, Yamada Conference XLIII on Structures and Dynamics of Clusters", Shimoda, Sizuoka May 10-13, 1995.

S. IWATA, "Geometric and Electronic Structures of Some Small Clusters and the Chemical Reactions within the Clusters", The 1995 Japan-Israel Symposium in Molecular Science, Jerusalem, Israel Jan. 24-25, 1995.

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員・委員

学会の組織委員

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)

Symposium "Computational Quantum Chemistry" in PacfiChem'95 : 1995.12 (Hawaii)

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

慶応義塾大学大型研究助成審査委員：1994-現在

東京工業大学総合情報処理センター外部評価委員：1995-現在

学術雑誌編集委員

日本化学会関東支部委員：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 of Japan 副編集委員長：1994-現在

Computer Physics Communication (Specialist editor)：1986-1993

Theoretica Chimica Acta：1994-現在

科研費の班長・編集代表者

重点領域研究「化学反応理論」領域代表者：1993-現在

B-7) 他大学での講義

東京工業大学大学院理学系 1995年7月5日-7日

京都大学大学院理学系 1995年6月28日-30日

C) 研究活動の課題と展望

様々なクラスターの構造・反応・分光学的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ある。

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。

岡 本 祐 幸 (助教授)

A-1) 専門領域：生物化学物理, 計算物理学

A-2) 研究課題

- a) 第一原理からの蛋白質の立体構造予測
- b) 大行列の対角化法の開発
- c) 複素半古典論を用いたカオス系のトンネル現象に関する研究
- d) 擬可積分系の量子力学に関する研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 第一原理からの蛋白質の立体構造予測：蛋白質は自然界に存在する最も複雑な分子である。よって、その立体構造を予測することは（その生化学的機能との関係上、極めて重要であるにもかかわらず）至難の業である。特に、理論的に第一原理から（エネルギー関数を最小化することにより）立体構造を予測することは不可能と広く信じられている。それは、この系にエネルギー関数の極小状態が無数に存在するため、シミュレーションがそれらに留まってしまっており、世界最速のスーパーコンピュータをもってしても、最小エネルギー状態に到達するのが絶望的であるからである。本研究で、我々は数学的に同じ難度に属する他の分野の問題で開発された強力な計算手法を、蛋白質の立体構造予測問題に適用することを提唱してきた。具体的には、徐冷モンテカルロ法及びマルチカノニカル法を導入し、これらの手法が小ペプチド系において従来の方法よりはるかに有効であることを示してきた。
- b) 大行列の対角化法の開発：行列の固有値及び固有ベクトルを求めることは、分子科学に限らず、多くの自然科学や工学の分野で要求されることである。しかし、行列の次元が大きいつま、それは極めて難しい問題となる。本研究で、我々は大エルミート行列の新しい対角化法を開発した。具体的には、 N 行 N 列の行列を対角化するのに、 N 個の調和振動子の力学系のニュートン方程式を数値的に解けばよいことを示した。そして、1次元反強磁性ハイゼンベルグ模型のハミルトニアン行列においてその有効性を確かめた。我々は更にシュレーディンガー方程式に基づいた対角化法も新たに開発した。
- c) 複素半古典論を用いたカオス系のトンネル現象に関する研究：典型的な波動現象である量子トンネル効果に、対応する古典カオスの存在が如何に顕在化するか、という問題を研究する。特に、複素古典力学を用いた半古典論を詳しく調べることにより、非可積分性由来の新しいクラスのトンネル現象“カオス的トンネリング”の機構を明らかにする。
- d) 擬可積分系の量子力学に関する研究：完全可積分系とカオス系との境界に位置する擬可積分系の量子力学的性質を考察することにより、カオス系の量子論が示すと信じられているレベル統計の普遍則の必要十分性を探る。また、非可積分系での回折現象の特性を調べると共に半古典論自身の有効性と限界を検討する。

B-1) 学術論文

U. H. E. HANSMANN and Y. OKAMOTO, "Sampling Ground-State Configurations of a Peptide by Multicanonical Annealing", *J. Phys. Soc. Jpn.* **63**, 3945 (1994).

U. H. E. HANSMANN and Y. OKAMOTO, "Comparative Study of Multicanonical and Simulated Annealing Algorithms in the Protein Folding Problem", *Physica A* **212**, 415 (1994).

B. A. BERG, U.H.E. HANSMANN and Y. OKAMOTO, "Comment on 'Monte Carlo Simulation of a First-Order Transition for Protein Folding'", *J. Phys. Chem.* **99**, 2236 (1995).

Y. OKAMOTO, U. H. E. HANSMANN and T. NAKAZAWA, " α -Helix Propensities of Amino Acids Studied by Multicanonical Algorithm", *Chem. Lett.* **1995**, 391.

Y. OKAMOTO and U.H.E. HANSMANN, "Thermodynamics of Helix-Coil Transitions Studied by Multicanonical Algorithms", *J. Phys. Chem.* **99**, 11276 (1995).

A. SHUDO, Y. SHIMIZU, J. STEIN, H.-J. STOCKMANN, P. SEBA and K. ZYCZKOWSKI, "Statistical properties of spectra of pseudo-integrable systems", *Phys. Rev. E* **49**, 3748 (1994).

A. SHUDO and K. IKEDA, "Toward the classical understanding of quantum chaological phenomena: Dynamical localization and chaotic tunneling", *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **116**, 283 (1994).

Y. SHIMIZU and A. SHUDO, "Statistical properties of eigenfunctions for quantum billiard systems with and without positive Lyapunov exponent", *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **116**, 267 (1994).

T. HARAYAMA, A. SHUDO and Y. SHIMIZU, "Semiclassical quantization and periodic orbits of dispersing billiards", *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **116**, 259 (1994).

Y. SHIMIZU and A. SHUDO, "Polygonal billiards: Correspondence between classical trajectories and quantum eigenstates", *Chaos, Solitons and Fractals* **5**, 1337 (1995).

A. SHUDO and K. IKEDA, "Complex classical trajectories and chaotic tunneling", *Phys. Rev. Lett.* **74**, 682 (1995).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

U. H. E. HANSMANN and Y. OKAMOTO, "A Multicanonical Study of Nonpolar Amino Acids", *Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics VII*, eds. D. P. Landau, K. K. Mon and H.-B. Schuttler (Springer-Verlag, 1994), 183.

U. H. E. HANSMANN and Y. OKAMOTO, "Multicanonical Approach in Statistical Mechanics of Peptides", *Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.)* **42**, 914 (1995).

B-3) 総説, 著書

岡本祐幸, 「スーパーコンピュータによる物理学: 素粒子論から蛋白工学まで」物性研究, **62**, 231 (1994).

首藤啓, 「擬可積分系とレベル統計」『数理科学』1994年10月号P36.

首藤啓, 「多角形ビリヤード系の量子準位統計と半古典論」『数理解析研究所講究録』863(1994)p.67.

B-4) 招待講演

Y. OKAMOTO, "Protein Structure Predictions by Monte Carlo Simulated Annealing and Multicanonical Algorithms", Minnesota Supercomputer Institute Seminars, April 27, 1994.

岡本祐幸, 「マルチカノニカル・モンテカルロ法によるフラストレーションを持った系の研究」, 日本物理学会年会, 横浜, 1995年3月。

首藤啓, 「擬可積分系の量子古典対応」, 『力学系と微分幾何』小研究会, 蒲郡, 1994年12月。

C) 研究活動の課題と展望

蛋白質の立体構造予測問題において、我々が第一原理からの構造予測に成功した最大の系は34個のアミノ酸からなる副甲状腺ホルモンのフラグメントである。本研究で我々が提唱している手法の有効性をより確定的に示すには、更に大きな系の構造予測に挑戦する必要がある。また、より正確な溶媒の効果をエネルギー関数に取り入れていくことも大切である。

大行列の対角化法において、我々が開発した手法は現在広く使われているランチョス法と同程度の有効性を持つ。後者を凌駕することをめざしたい。

半古典論を通して、力学的に非可積分な系の純量子論的現象（トンネル、回折、局在、…）の本質を抽出すると共に、それらがより現実の原子分子のダイナミクスに顕在化する可能性を探る。溶液のダイナミクスに見られる遅い緩和過程の起源を、多自由度ハミルトン系の観点から考察する。特に、内部自由度をもつ溶液の、異なる内部自由度間のエネルギー交換に注目し、位相空間の不変構造を基にした力学系の摂動論的議論（ネコロシヨフの評価）により、溶液の遅い緩和過程に対する統一的な理解を試みる。

分子基礎理論第二研究部門

中 村 宏 樹 (教授)

A-1) 専門領域：化学物理理論

A-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) 超励起分子の特性と動力学
- e) 表面散乱
- f) 分子スイッチ機構の提唱

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 化学反応の量子動力学：3原子系の量子動力学を精確に扱う方法を完成し、 $O(^3P)+HCl$, $Mu+H_2$, $H+MuH$ 等の反応系の解析を終了した。ポテンシャルエネルギー曲面の効果、回転による反応促進の可能性、同位体効果等々興味ある機構を見出した。他の3原子系、特に水素原子移行反応及び4原子系への挑戦を進めている。
- b) 多自由度系の動力学：単分子分解反応における RRKM 理論の成立条件を明確にするとともに、乱雑モデルを用いて自己一及び相互一相関関数を解析して分解と IVR の関係を調べた。RRKM 条件下でも、十分に IVR が起る前に分解するという興味ある結果を得た。
また、振動励起によって多次元トンネルが抑制されたり振動したりするという面白い現象を見出しこれを解析した。
- c) 非断熱遷移の理論：Landau-Zener-Stückelberg 型の一次元非断熱遷移理論を実用に便利な形で最終的に完成した。
60 有余年に亘っての初めての大きな成果である。これを用いて二次元の円錐型交差問題、及び一次元多準位に問題の解析を進めている。
- d) 超励起分子の特性と動力学：2原子分子の超励起状態の電子状態評価から始まって各種動力学過程を統一的に扱う手法を開発している。多光子励起・イオン化の実験が存在する CO 分子を例に解析している。
- e) 表面散乱：表面散乱によるイオンの中性化過程がレーザー場によって促進されるという問題を非断熱遷移理論を用いて解明した。
- f) 分子スイッチ機構の提唱：非断熱トンネル系における完全反射現象を用いて周期ポテンシャル系で透過をスイッチする新しい機構を提唱し解析している。

B-1) 学術論文

K. SOMEDA, H. NAKAMURA and F. H. MIES, "Overlapping-Resonance Scattering and Statistical Theory of Unimolecular Decomposition", *Prog. Theor. Phys.* No116, 443 (1994).

K. SOMEDA, H. NAKAMURA and F. H. MIES, "Systematics of the Average Resonance Widths in Overlapping Resonance-scattering and its Connection with the RRKM Theory", *Chem. Phys.* 187(1,2), 195 (1994).

C. ZHU and H. NAKAMURA, "The Two-state Linear Curve Crossing Problems Revisited: IV. The Best Analytical Formulas for Scattering Matrices", *J. Chem. Phys.* **101**(6), 4855 (1994).

K. SOMEDA and H. NAKAMURA, "Decoupling Surface Analysis of Cl+Cl₂ Reaction Embedded in Ar₅₂ Cluster", *Bull. Chem. Soc. Japan* **67**(10), 2659-2664 (1994).

C. ZHU and H. NAKAMURA, "Theory of Nonadiabatic Transition for General Two-State Curve Crossing Problems. I. Nonadiabatic Tunneling Case", *J. Chem. Phys.* **101**(12), 10630 (1994).

K. TSUDA, K. MORIBAYASHI and H. NAKAMURA, "Quantum Dynamics of the Mu+H₂ and Mu+D₂ Reactions, *Chem. Phys. Lett.* **231**(4-6), 439 (1994).

K. SOMEDA, H. NAKAMURA and F. H. MIES, "Competition between Intermolecular Vibrational Energy Redistribution and Unimolecular Dissociation: A Scattering Theoretical Point of View", *Laser Chemistry* **15**, 145 (1995).

S. TAKADA and H. NAKAMURA, "Effects of Vibrational Excitation on Multidimensional Tunneling: General Study and Proton Tunneling in Tropolone". *J. Chem. Phys.* **102**(10), 3977 (1995).

C. ZHU and H. NAKAMURA, "Theory of Nonadiabatic Transition for General Two-State Curve Crossing Problems. I. Nonadiabatic Tunneling Case", *J. Chem. Phys.* **102**(19), 7448 (1995).

B-3) 総説, 著書

H. NAKAMURA, "Characteristics and Dynamics of Superexcited States of Molecules", *J. Chinese. Chem. Soc.* (Special issue of 10th anniversary of IAMS) **42**, p359 (1995).

H. NAKAMURA, "Nonadiabatic transitions : Beyond Born-Oppenheimer", In "Dynamics of Molecules and Chemical Reactions", edited by R. E. Wyatt and J. Z. H. Zhang (Marcel Dekker Inc.), (1995).

B-4) 招待講演

C. ZHU and H. NAKAMURA, "Semiclassical theory with Stokes phenomenon and its application to curve crossing problem", Chinese Physical Society Meeting, Hefei (China), June 1994.

H. NAKAMURA, "Constant centrifugal potential approximation for atom-diatom chemical reaction dynamics", Workshop on "Quantum Mechanical Treatment of Atom Exchange Processes in Molecular Collisions", Cambridge (U.S.A.), June 1994.

H. NAKAMURA, "New developments in the theory of curve crossing problems", Gordon Conference on Atomic and Molecular Interactions, New London (U.S.A.), July 1994.

中村宏樹, 「化学反応動力学の基礎」, 日本理論化学シンポジウム, 愛知, 1994年7月.

H. NAKAMURA, "Theory of nonadiabatic transition", American Chemical Society Symposium, Washington (U.S.A), August 1994.

中村宏樹, 「化学反応動力学の基礎的諸問題」, 分子構造総合討論会, 東京, 1994年9月.

中村宏樹, 「ポテンシャル曲面のトポグラフィーと化学反応動力学」, 日本化学会シンポジウム, 名古屋, 1994年10月.

H. NAKAMURA, "Some fundamentals of chemical reaction dynamics", The Second Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics, Beijing (China), October 1994.

B-6) 学会および社会活動

学協会役員, 委員

原子衝突研究協会委員 (1981~1994)

学会の組織委員会

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

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

ICPEAC (第21回) 準備委員会委員

文部省, 学振等の委員会委員

学術審議会専門委員 (1991~1995)

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 (1992~1995)

C) 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解明, 一次元多準位非断熱遷移問題の研究, 多次元トンネル及び多次元非断熱遷移理論開発への挑戦を進める。また, 超励起分子の研究を進めると同時に, 新しい分子スイッチ機構に基づく分子素子の可能性追求をも行う。

谷 村 吉 隆（助教授）

A-1) 専門領域：化学物理理論

A-2) 研究課題

- a) ダイマー分子の非線形光学応答の研究
- b) 非線形光学過程における非調和振動子性の影響の研究
- c) 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と光学過程の研究
- d) 共鳴ハートリーフォック法による分子の *ab initio* 計算の研究
- e) 有機物超伝導体の電子状態と超伝導機構の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ダイマー分子の非線形光学応答の研究：J-会合体の最も原始的なモデルとして、二つの二準位分子からなる系を考え、その非線形光学過程が、溶媒等の散逸場との相互作用で、どのように変化するかを考察した。経路積分を用いれば、三次の光学応答の応答関数は解析的に求まり、温度の効果や散逸の強さ等も簡単に調べる事が出来る。得られた式を用いフェムト秒分光のパンプ・プローブ・スペクトルを計算し、配位した三つの調和振動子系からなる分子の光学過程とのアナロジーで解析を行った。
- b) 非線形光学過程における非調和振動子性の影響の研究：遠赤外レーザーや非共鳴高次光学過程を用いれば、分子の基底状態のポテンシャル面を直接調べる事が可能である。基底状態のポテンシャル面が非調和振動子的な場合の高次光学過程のスペクトルの表式を、経路積分法を用いて解析的に導出した。スペクトルの温度依存性も、溶媒等の散逸場を通して考慮しているのであるが、非調和振動子性を考慮すると、温度依存性も独特なものとなる。この結果より、スペクトルの温度依存性から、ポテンシャルの非調和振動子性を調べる事が可能である事を議論した。
- c) 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構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可能である。
- d) 共鳴ハートリーフォック法による分子の *ab initio* 計算の研究：物性や原子核物理で用いられていた共鳴ハートリーフォック法を、*ab initio* 計算に適用して、モデル計算を行った。共鳴ハートリーフォック法は、波動関数を非直交なスレーター行列式の重ね合わせで表現する方法で、CI係数のみならず、全てのスレーター行列中の軌道も独立に最適化する点が特徴である。この手法は電子相関が重要となる有限多体系を記述するのに適しており、今回、初めて *ab initio* 計算に適用し、COについてモデル計算を行った。2あるいは3配置でも、非常によい結果をもたらしており、量子化学においても、共鳴ハートリーフォック法は有効な手法である事を示した。
- e) 有機物超伝導体の電子状態と超伝導機構の研究： κ 型の BEDT-TTF の超伝導状態を研究するために、BEDT-TTF の二量子体の電子状態を計算した。ダイマー間の相互作用を変化させる事により、電子のフィーリング状態がどのように変化するかを考察した。

B-1) 学術論文

S. PALESE, J. T. BUONTEMPO, L. SCHILLING, W. T. LOTSHAW, Y. TANIMURA, S. MUKAMEL and R. J. D. MILLER, "Femtosecond Two-dimensional Raman Spectroscopy of Liquid Water", *J. Phys. Chem.* **98**, 12466 (1994).

Y. TANIMURA and S. MUKAMEL, "Femtosecond pump-probe spectroscopy of intermolecular vibrations in molecular dimers", *J. Chem. Phys. (communications)* **103**, 1981 (1995).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

S. PALESE, J. T. BUONTEMPO, Y. TANIMURA, S. MUKAMEL, R. J. D. MILLER and W. T. LOTSHAW, "Femtosecond Two-Dimensional Raman Spectroscopy of Liquid Water, Ultrafast Phenomena IX," *proceedings of the 9th international conference*, ed. by P. F. Barbara, W. H. Knox, G. A. Mourou and A. H. Zewil, 107 (Springer-Verlag, Berlin 1994).

B-4) 招待講演

谷村吉隆, 非平衡統計力学シンポジウム 1995年 3月8日 筑波

谷村吉隆, 溶液シンポジウム 1995年 11月5日 京都

B-6) 学会及び社会的活動

学術雑誌編集委員

Association of Asia Pacific Physical Societies Bulletin 編集委員 1994-

C) 研究活動の課題と展望

量子フォッカー・プランク方程式の数値計算プログラムを改良して、分子の光解離過程におけるレーザーの強さや形の効果や温度の影響について調べる。径路積分法を用いて、蛋白質のポテンシャルの面の様に局所ミニマムが沢山ある系の光学過程とその温度効果について調べる。ランダウ・ゼナー型の非断熱遷移問題における温度効果についても、考察を試みる予定である。

共鳴ハートリーフォック法による *ab initio* 計算については、プログラムの収束性を改善する事と、共鳴ハートリーフォック波動関数を出発点とする摂動論等の開発を行い、この手法を広い物質に適用していく事を目標とする。

有機物超伝導体については、量子化学計算を4量体まで行い、トランスファーやフィーリング変数が、配置にどの様に依存するかを調べ、それを参考にモデルを立てて、超伝導等の物性が再現できるか調べる。

分子基礎理論第四研究部門

平 田 文 男 (教授)

A-1) 専門領域：理論化学，溶液化学

A-2) 研究課題

- a) 溶液内分子の電子状態に対する溶媒効果の理論
- b) 溶媒和ダイナミックスの分子論
- c) 生体高分子の溶媒和構造の安定性に関する理論
- d) 溶液内電子移動反応における非平衡自由エネルギー曲面の分子論

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 溶液内分子の電子状態に対する溶媒効果の理論：溶液中に存在する分子の電子状態は溶媒からの反作用場を受けて気相中とは大きく異なり，従って，分子の反応性も違ってくる。この反作用場を液体の積分方程式理論によって決定する方法（RISM-SCF 法）を提案した。この方法は連続体モデルに基づく従来の方法と異なり，二体密度相関関数のレベルで溶媒の微視的構造を記述できる点に特徴がある。この方法の一つの応用例として，メチルアミンや酢酸のプロトン親和力に対する置換基効果に対する溶媒の影響を評価し，実験事実を定性的に再現することができた。
- b) 溶媒和ダイナミックスの分子論：極性溶媒中において分子の電子状態が瞬時に変化した時，周りの溶媒はこの電子状態に対応した新しい平衡状態に緩和しようとする。この緩和過程はダイナミックス・ストークスシフトなどによって実験的に観測される。一般化ランジェヴィアン方程式と RISM 理論を結合することによりこの緩和過程を記述する新しい統計力学理論を提案した。この理論は単純な双極子液体だけでなく，水やアルコールなど水素結合性の液体をも取り扱える点にその特徴がある。
- c) 生体高分子の溶媒和構造の安定性に関する理論：蛋白質の構造安定性にとって溶媒は決定的役割を果たす。しかしながら，蛋白質は自由度が大きいためその溶媒和自由エネルギーを求めることはいかなる方法によっても極めて困難な問題である。この問題を解決するため，現在，二つの可能性を追及している。ひとつは液体の積分方程式（RISM）の数値解法アルゴリズムの高速化であり，他は剛体球系液体の統計力学でよく知られた Scaled Particle Theory (SPT) の多原子分子系への一般化である。昨年までの研究においてこの一般化を行ない，一連の脂肪族炭化水素の水和自由エネルギーの評価に成功した。本年はこの方法と静電相互作用を評価するための Poisson-Boltzmann 方程式とを結合し，部分電荷をもつ溶質の自由エネルギーの計算を行なう方法を構築した。この方法で求めた一連のアルコールの水和自由エネルギーは対応する実験結果をよく再現している。
- d) 溶液内電子移動反応における非平衡自由エネルギー曲面の分子論：溶液内電子移動反応の速度を決定する要因のひとつは溶媒の熱的揺らぎであり，この溶媒の揺らぎを規程する非平衡自由エネルギー曲面を求める問題は，Marcus の論文以来，理論化学物理の重要課題のひとつである。この非平衡自由エネルギー曲面を求める新しい方法を提案した。この方法は液体の積分方程式理論（RISM）に基づくもので，Marcus の方法と異なり液体の微視的構造を取り扱うことができる。従って，溶質や溶媒の分子的個性を取り入れることができる点で，今後，化学への展開が期待される。

B-1) 学術論文

- S. TEN-NO, F. HIRATA and S. KATO**, "Reference interaction site model self-consistent field study for solvation effect on carbonyl compounds in aqueous solution", *J. Chem. Phys.*, **100**, No.10, 7443 (1994).
- G. BASU, A. KITAO, F. HIRATA and N. GO**, "A Collective Motion Description of the 310/-a-Helix Transition: Implications for a Natural Reaction Coordinate", *J. Am. Chem. Soc.*, **116**, No.14, 6307 (1994).
- S. MIURA and F. HIRATA**, "Temperature dependence of the stability of a hydrated electron: An integral equation study", *J. Phys. Chem.*, **98**, No. 38, 9649 (1994).
- H. FRIEDMAN, F. RAINERI, F. HIRATA and B. PERNG**, "Surrogate hamiltonian description of solvation dynamics. site-number density and polarization charge density formulation", *J. Stat. Mech.*, **78**, No 1/2, 239 (1995).
- M. KAWATA, S. TENNO, S. KATO and F. HIRATA**, "Irregular order in basicities of methylamines in aqueous solutions: A RISM-SCF study", *J. Am. Chem. Soc.*, **117**, 1638 (1995).
- S. CHONG, S. MIURA, G. BASU and F. HIRATA**, "A molecular theory for the non-equilibrium free energy surface in electron transfer reaction", *J. Phys. Chem.*, **99**, No. 26 10526 (1995).
- M. KAWATA, S. TENNO, S. KATO and F. HIRATA**, "The solvation effect on the acidities of haloacetic acids in aqueous solutions: A RISM-SCF study", *Chem. Phys. Letter*, **240** 199 (1995).
- M. IRISA, T. TAKAHASHI, K. NAGAYAMA and F. HIRATA**, "Solvation Free Energies of Non-polar and Polar Solutes Reproduced by the Combination of the Extended Scaled Particle Theory and the Poisson-Boltzmann Equation", *Mol. Phys.*, **85**, 1227 (1995).

B-3) 総説, 著書

- 平田文男**, 生体系と水に関する最近の話題－異分野交流国際フォーラム「水の科学」から 生物物理, 第34巻, 第4号 (1994) 35-39
- 平田文男**, 液体・溶液の理論－相互作用点モデルに基づく溶媒和の取り扱い－日本化学会編季刊化学総説「溶液の分子論的描像」(1995) 147-165

B-4) 招待講演

- 平田文男**, 「生体高分子の揺らぎと溶媒和ダイナミクス」, 高分子ダイナミクス研究会・高分子溶液研究会合同研究会, 東京, 1994年10月20日
- 平田文男**, 「生体高分子の安定性を支配する要因としての水」, 機能水シンポジウム'94, (財)機能水研究振興財団主催, 東京, 1994年11月17日～11月18日
- F. HIRATA**, "Chemical Reaction and Solvation Dynamics in Solution", International Symposium on Molecular Simulation, Fukui, November, 1994.
- 平田文男**, 「化学物理の諸問題とその発展」, 岡崎市, 1994年12月8日～12月10日
- F. Hirata**, "An Interaction-Site Representation of the Dynamic Structure Factor of Liquid and the Solvation Dynamics", Yamada Conference "Structure, Fluctuation and Relaxation in Solutions", Nagoya, November, 1994.
- 平田文男**, 「液体中の化学と化学における液体論」, 物理化学セミナー, 京都, 1994年5月

F. HIRATA, "Solvent Effect on the Acidity and Basicity: A Hybrid Approach Based on the RISM and Hartree-Fock Equations", Harold L. Friedman Symposium, "Structure, Energetics and Dynamics in the Liquid Phase", Stony Brook, New York, March, 1995.

B-6) 学会及び社会活動

学協会役員, 委員

日本化学会近畿支部幹事 (1993-1994)

溶液化学研究会運営委員 (1994-)

学会等組織委員

第5回蛋白工学会年会 (1993年5月, 京都) 組織委員

異分野交流国際フォーラム "Water-Structure and Properties" (1994年3月, 京都) 組織委員

異分野研究者交流ワークショップ「生体系と水」 (1994年11月, 大津) 組織委員長

山田コンファレンス "Structure, Fluctuation and Relaxation in Solutions" (1994年12月, 名古屋), 組織委員

Pacificchem '95 symposium, "Solvation Dynamics: From Ions to Protein" (1995年12月, ハワイ) 組織委員長

第8会理論科学シンポジウム, 組織委員

文部省, 学振等の委員会

新技術事業団領域探索プログラム「生体系と水」コーディネーター

B-7) 他大学での講義

立命館大学理工学部, 「量子化学 I」 (1995年4月-7月)

総合研究大学院大学, 「湘南学校」 (1995年8月)

C) 研究活動の課題と展望

溶液中の化学過程では溶媒が重要な役割を演じる。中でも、化学反応と生体高分子の安定性に対する溶媒の影響は本質的な意義をもっており、これを微視的レベルから解明することが基本的な課題である。具体的には、次の三つの課題を中心に研究を遂行する。(1) 液体の積分方程式理論と非経験的量子化学計算を結合した RISM-SCF 法に基づく溶媒和分子の電子状態理論の構築, (2) 蛋白質の溶媒和構造の安定性の解明, (3) 溶媒和のダイナミクス。これらの研究の核となる分子性液体の理論に関しては概ね準備が完了している。

米 満 賢 治 (助教授) *)

A-1) 専門領域物性理論

A-2) 研究課題：

- a) 多電子系のトンネルの半古典論
- b) 電子相関による幾何学的位相と非 s 波ペアリング
- c) 1 次元弱相関電子格子系のスピングャップ相

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 多電子系のトンネルの半古典論：多電子格子系で自己束縛したソリトンまたはポーラロンの量子トンネルによるブロッホ状態を記述するために、スレーター行列表示による経路積分法を格子自由度を含む積分に拡張した。強結合の極限では解析的な結果と比較でき、断熱極限から非断熱極限までのトンネル振幅を正確に与えることがわかる。古典経路からのずれによる因子について、連続極限のとり方により異なる結果が得られるが、正しい処方を示した。
- b) 電子相関による幾何学的位相と非 s 波ペアリング：銅酸化物などの反強磁性相関が強い 2 次元電子系において、ハーフ・フィリング近傍で弱い電子格子相互作用により自己束縛したポーラロンとポーラロンペアのダイナミクスを調べた。すべての半古典的なポーラロンのトンネル経路について厳密な多電子波動関数を使って幾何学的位相を計算し、その規則と起源を明らかにした。ポーラロン系に還元したときの統計性、量子数を導出し、ポーラロン束縛対が dx^2-y^2 を含む非 s 波であることを示した。
- c) 1 次元弱相関電子格子系のスピングャップ相：ボゾン化による漸近的相関関数の解析が可能な 1 次元電子系を拡張して電子格子相互作用を含め、フィリング依存性が明確な繰込み群方程式を導出して解いた。電子間と電子格子間の相互作用が共存するとき、スピングャップを持つが超伝導にならない新しい電子状態がハーフ・フィリング近傍に存在することを示した。電子格子相互作用の形状因子によってその安定性は大きく変わる。

B-1) 学術論文

K. YONEMITSU, "Continuum Limit of the Fluctuation Factor in Coherent-State Functional Integrals for Transition Amplitudes", *Phys. Rev. A* **50**, 5324 (1994).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. YONEMITSU, "Formation of Soliton Band in One-Dimensional Peierls-Hubbard Model", in "Nonlinear Coherent Structures in Physics and Biology", ed. by K. H. Spatschek and F. G. Mertens (Plenum, 1994) p.225.

B-4) 招待講演

K. YONEMITSU, J. ZHONG and H.-B. SCHÜTTLER, "Berry Phase and Symmetry of Hole Pairs in the Holstein-TJ Model", Workshop in the "Correlated Electron Theory Program", Los Alamos National Laboratory (米国) 1994 年 9 月.

B-7) 他大学での講義

東京大学 1994 年 12 月

C) 研究活動の課題と展望

電子間と電子格子間の相互作用が絡んで起こす物性の研究は歴史が長いですが、銅酸化物で明らかにされた本質的な相関効果やトンネル効果に現れる格子の量子性などが、有機伝導体の顕著な低次元性と多バンド電子構造で起こす物性には未開拓の問題が多い。新たな数値的手法で、伝導性、光物性、磁性、構造を含めた複合物性を明らかにする。

コヒーレンス長の短い第2種超伝導体の混合状態の磁束のダイナミクスに今まで議論されなかった電子状態の性質が反映されている可能性があり、多電子系の非線型状態と集団励起という観点から理論を整理する。

*) 1996年2月1日付，着任

3-2 分子構造研究系

分子構造学第一研究部門

齋 藤 修 二 (教授)

A-1) 専門領域：高分解能分子分光，宇宙電波分光

A-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) サブミリ波・遠赤外高感度分光法の開拓
- c) 分子雲における星間化学の解明
- d) サブミリ波望遠鏡の開拓

A-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：620 GHz まで分光可能なミリ波サブミリ波分光器の感度試験を行った結果，検出可能な吸収係数の最小値として $1.5 \times 10^{-9} \text{ cm}^{-1} (\text{S/N}=2)$ が得られた。この値は世界的な水準で高いレベルにあると考えられる。この高感度分光器を用い，星間現象関連の短寿命分子としては NiO, TiN, TiO, FeCl, H_2PO ラジカルのスペクトルを，また，化学反応中間体とし意味の大きい CHF_2 , FS_2 ラジカルのスペクトルを初めて明らかにした。前回報告した HCCS ラジカルの変角振動励起状態スペクトルの解析については，二つの変角振動を持つ直線分子の Renner-Teller 効果を理論的に考察した。
- b) サブミリ波・遠赤外高感度分光法の開拓： CO_2 レーザー励起遠赤外レーザーと GaAs ショットキーダイオードを組み合わせた波長可変遠赤外レーザー光源の開発をほぼ終了した。2522+26 GHz で得られた小出力の側帯波を利用し，CO の $J=22-21$ 遷移による吸収を確認した。さらに，短寿命分子観測用の吸収セルを設置し，スペクトル線の周波数を高精度で決定するための遠赤外周波数標準の開発を進めている。
- c) 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 電波望遠鏡の共同利用観測として，前年度に引き続き暗黒星雲における NH_2D の観測を行った。特に今回は，IRAS 源（赤外線星）を持たない暗黒星雲 (L63, L134N) で NH_2D の強いスペクトルを検出した。L134N についてマッピング観測を行った結果，これまで確認されていない局所的熱源により NH_2D が塵表面より放出されていること，また，これと行動を共にする NH_3 の大部分も星間塵表面から放出されたものであると考えられるとの結論に到達した。この結果は暗黒星雲自体の進化やその内部で進む星形成過程の解明に与える影響が大きいと考える。
- d) 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。東京管区気象台富士山測候所構内に 230GHz のラジオメーターを設置し，1994 年 11 月より富士山頂での大気透過度を連続自動測定している。その結果，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。このほか我々の研究グループとしては，サブミリ波望遠鏡バックエンドとしての高分解能分光計を開発を進めている。

B-1) 学術論文

- M. GOTO, S. TAKANO, S. YAMAMOTO, H. ITO and S. SAITO, "Microwave Spectra of the $\text{AlO}(X^2\Sigma^+)$ Radical in the $v=1$ and 2 States", *Chem. Phys. Letters*, **227**, 287 (1994).
- M. IZUHA, S. YAMAMOTO and S. SAITO, "Microwave Spectrum and Molecular Structure of Silacyclopropenylidene $\text{c-C}_2\text{H}_2\text{Si}$ ", *Can. J. Phys.*, **72**, 1206 (1994).
- S. K. LEE, H. OZEKI and S. SAITO, "Microwave Spectra of the NS Radical in the $^2\Pi_r$ Ground Electronic State", *Astrophys. J.*, **98**, 351 (1995).
- J. TANG and S. SAITO, "Microwave Spectrum of the C_3S Molecule in the Vibrationally Excited States of Bending Modes, v_4 and v_5 ", *J. Mol. Spectrosc.*, **169**, 92 (1995).
- J. TANG and S. SAITO, "Microwave Spectra of the Isotopomers of HCS^+ and its Substitution Structure", *Astrophys. J.*, **451**, L93 (1995).
- H. OZEKI and S. SAITO, "Laboratory Submillimeter-Wave Spectroscopy of the $\text{CH}_2(^2B_1)$ Radical", *Astrophys. J.*, **451**, L97 (1995).
- A. H. SALECK, H. OZEKI and S. SAITO, "Isotopic NS Rotational Spectra: $^{14}\text{N}^{33}\text{N}$ and $^{15}\text{N}^{32}\text{S}$ ", *Chem. Phys. Letters*, **244**, 199 (1995).
- M. GOTO and S. SAITO, "Laboratory Measurement of the $J=1-0$ Transition of AlH near 387 GHz", *Astrophys. J.*, **452**, L147 (1995).

B-2) 国際会議プロシーディングス

- S. SAITO, H. OZEKI and S. YAMAMOTO, "Submillimeter-Wave Spectroscopy of Transient Interstellar Molecules", in *The 19th International Conference on Infrared and Millimeter Waves*, ed. by K. Sakai and T. Yoneyama, 183 (1995).

B-3) 総説, 著書

- 斎藤修二, 「宇宙には炭素鎖分子が本当に存在しているか」, 化学, **49**, 685(1994).
- 斎藤修二, 「宇宙にひろがる分子の世界」, 第44回東レ科学振興会科学講演会記録, 1 (1994).
- 斎藤修二, 「分子で宇宙を考える」, 可視化情報, **15**, 246 (1995).

B-4) 招待講演

- S. SAITO, "Millimeter- and Submillimeter-Wave Spectroscopy of Transient Molecules: Laboratory to Interstellar Space", Physical Chemistry Laboratory, Oxford University, Oxford (1994).
- 斎藤修二, 「富士山頂サブミリ波望遠鏡計画」, 宇宙電波懇談会シンポジウム, 相模原, (1994).
- 斎藤修二, 「宇宙にひろがる分子の世界」, 第44回科学講演会, 東京 (1994).
- S. SAITO, "Laboratory and Astronomical Spectroscopy of Transient Interstellar Molecules", Department of Chemistry, The University of Edinburgh, Edinburgh (1994).
- S. SAITO, "Laboratory and Astronomical Spectroscopy of Transient Interstellar Molecules", Institute of Atomic and Molecular Sciences, Taipei (1994).
- 斎藤修二, 「高感度実験室分光による星間分子の同定」, 特別シンポジウム, 筑波 (1995).

B-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).

B-6) 学会及び社会的活動

学会の組織委員

第 14 回フリーラジカル国際会議組織委員, 三田, (1989).

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

第 20 回フリーラジカル国際会議組織委員, 裾野, (1989).

第 19 回赤外・ミリ波国際会議組織委員, 仙台, (1994).

文部省, 学振等の委員会

文部省学術審議会専門委員 (1990-1994).

国立天文台電波専門委員会プログラム小委員会委員 (1991-1994).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (1991,1992).

日本分光学会東海支部 幹事 (1995-).

科研費の班長, 研究代表者等

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

B-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, 1995.12

C) 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) サブミリ波・遠赤外高感度分光法の開拓

c) 分子雲における星間化学の解明

d) 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 b) および d) に力を入れる。

森 田 紀 夫 (助教授)

A-1) 専門領域：レーザー分光学，量子エレクトロニクス

A-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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- 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なっている。レーザー冷却により超低速となった原子同士の衝突現象は，極めて微弱な摂動にも敏感であること，衝突中に光を吸収放出できること，などの特徴を持ち，常温の衝突とは全く異なった振る舞いが予想されて興味深い。そこで本年度は，トラップ中の超低速励起ヘリウム原子同士の衝突によるペニングイオン化レートの測定を中心に研究を行なった。その結果，ペニングイオン化レートはこれまで予想されていたよりもはるかに遅いこと， ^3He 原子同士の衝突によるレートは ^4He 原子のそれよりも約 2 倍速いこと，トラップレーザーとは別のレーザーを短波長側あるいは長波長側に離調して照射するとイオン化レートを制御することができ，したがってトラップ中の原子数を増減できること，などの結果を得た。
- b) エキゾチック原子（分子）のレーザー分光：昨年度の本研究によって，初めての長寿命反陽子エキゾチック原子である反陽子ヘリウム原子 ($\bar{p}\text{-He}^{2+}\text{-e}^-$ ：分子であるとも言える) の存在が立証されたが，本年度は，昨年度に確立したレーザー誘起消滅法による反陽子ヘリウム原子の内部状態間の遷移のレーザー分光をさらに進めた。その結果，新たにもう一本の共鳴線 ($(n=37, l=34) \rightarrow (36, 33)$ ： n, l はそれぞれ反陽子軌道の主量子数と角運動量子数) を発見することができ，その共鳴波長が理論予測と極めてよく一致することを見いだした。さらに，時間分解測定によってこの遷移に関するいくつかの準位の減衰時間も求めることができ，それらの値も理論予測によく一致することが判った。これらの結果は，反陽子ヘリウム原子生成の更なる確証を与えるものであると同時に，内部状態の動的過程を解明するために重要な情報である。

B-1) 学術論文

R. S. HAYANO, F. E. Maas, H. A. TORII, N. MORITA, M. KUMAKURA, T. YAMAZAKI, H. MASUDA, I. SUGAI, F. J. HARTMANN, H. DANIEL, T. VON EGIDY, B. KETZER, W. MULLER, W. SCHMID, D. HORVATH, J. EADES and E. WIDMANN, "Laser studies of the decay chain of metastable antiprotonic helium atoms", *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1485(1994); *Erratum: Phys. Rev. Lett.* **73**, 3181(1994).

E. WIDMANN, I. SUGAI, T. YAMAZAKI, R. S. HAYANO, M. IWASAKI, S. N. NAKAMURA, H. TAMURA, T. M. ITO, A. KAWACHI, N. NISHIDA, W. HIGEMOTO, Y. ITO, N. MORITA, F. J. HARTMANN, H. DANIEL, T. VON EGIDY, W. SCHMID, J. HOFFMANN and J. EADES, "Phase and density dependence of the delayed annihilation of metastable antiprotonic helium atoms in gas, liquid and solid helium", *Phys. Rev. A* **51**, 2870(1995).

B-3) 総説，著書

森田紀夫、早野龍五、山崎敏光「反陽子ヘリウム原子のレーザー分光」日本物理学会誌，49 巻,10 号,827(1994).
森田紀夫、早野龍五「反陽子ヘリウム原子のレーザー誘起消滅分光」固体物理，30 巻,2 号,118(1995).

B-4) 招待講演

N. MORITA, “Observation of Laser-Induced Resonant Annihilation of Antiproton-He⁺ Atomcules”, *The US-Japan Seminar on Quantum Electronic Devices and States of Matter*, Napa, California (USA), August 1994.

B-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).

C) 研究活動の課題と展望

ヘリウム原子のレーザー冷却・トラップについては, トラップ原子数の増加に対して妨げとなるペニングイオン化についての重要な知見が得られたので, それを基にして, トラップ原子数の飛躍的な増加を図りたい。それと同時に, 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)

A-1) 専門領域：振動分光学，生物物理化学

A-2) 研究課題

- a) 生体系における酸素活性化機構
- b) 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
- c) タンパク質高次構造及びそのダイナミックス
- d) ポルフィリン励起状態の構造及びそのダイナミックス
- e) 振動分光学の新テクニックの開発
- f) 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

A-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。

- a) 生体系における酸素活性化機構。O₂→H₂O を触媒するチトクロム酸化酵素，O₂→H₂O+SO を触媒するチトクロム P-450，H₂O₂→H₂O 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。小倉助手のチトクロム酸化酵素による O₂ 還元機構の研究は 1993 年の化学会進歩賞受賞の荣誉に輝いた。
- b) 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。1 分子が約 300 残基からなるタンパク分子中の 1 個のチロシンやトリプトファンのラマンスペクトルの抽出に成功した。
- c) 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。
- d) 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。数ピコ秒で起こる振動エネルギー再分布にモード選択性があることをみつけた。
- e) 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，紫外共鳴ラマン用回転セル，酵素反応中間体測定用フローラマン装置の製作。
- f) キノン，及びその還元体の紫外共鳴ラマン分光とその光合成反応中心タンパクへの応用。

B-1) 学術論文

N. KITAJIMA, N. TAMURA, H. AMAGAI, H. FUKUI, Y. MORO-OKA, Y. MIZUTANI, T. KITAGAWA, R.

- METHUR, K. HEERWEGH, C. A. REED, C. R. RANDALL, J. L. QUE and K. TATSUMI**, "Monomeric carboxylate ferrous complexes as models for the dioxygen binding sites in non-heme iron proteins. The reversible formation and characterization of μ -peroxo diferric complexes.", *J. Am. Chem. Soc.* **116**, 9071 (1994).
- S. NAKASHIMA and T. KITAGAWA**, "Recombination intermediates of photodissociated CO myoglobin at ambient temperatures detected by time-resolved resonance Raman spectroscopy.", *J. Am. Chem. Soc.* **116**, 10318 (1994).
- D. A. PROSHLYAKOV, T. OGURA, K. SHINZAWA-ITOH, S. YOSHIKAWA, E. H. APPELMAN and T. KITAGAWA**, "Selective resonance Raman observation of the "607 nm" form generated in the reaction of oxidized cytochrome *c* oxidase with hydrogen peroxide.", *J. Biol. Chem.* **269**, 29385 (1994).
- S. HIROTA, T. OGURA, E. H. APPELMAN, K. SHINZAWA-ITOH, S. YOSHIKAWA and T. KITAGAWA**, "Observation of a new oxygen-isotope-sensitive Raman band for oxyhemoproteins and its implications in heme pocket structures.", *J. Am. Chem. Soc.* **116**, 10564 (1994).
- P. JEWSBURY and T. KITAGAWA**, "The distal residue-CO interaction in carbonmonoxy myoglobins: a molecular dynamics study of two distal histidine tautomers.", *Biophys. J.* **67**, 2236 (1994).
- M. SATO-WATANABE, T. MOGI, T. OGURA, T. KITAGAWA, H. MIYOSHI, H. IWAMURA and Y. ANRAKU**, "Identification of novel quinone-binding site in the cytochrome *bo* complex from *Escherichia coli*.", *J. Biol. Chem.* **269**, 28908 (1994).
- K. ISOBE, Y. OZAWA, A. VAZQUEZ DE MIGUEL, T.-W. ZHU, K.-M. ZHAO, T. NISHIOKA, T. OGURA and T. KITAGAWA**, "[$\{RhCp^*(\mu-CH_2)_2\}_2(m-S_4)\}^{2+}$: A novel tetranuclear cationic complex with a rectangular S₄ unit.", *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **33**, 1882 (1994).
- M. TSUBAKI, T. MOGI, H. HORI, S. HIROTA, T. OGURA, T. KITAGAWA and Y. ANRAKU**, "Molecular structure of redox metal centers of the cytochrome *bo* complex from *Escherichia coli* : Spectroscopic characterizations of the subunit I histidine mutant oxidases.", *J. Biol. Chem.* **269**, 30861 (1994).
- P. JEWSBURY, S. YAMAMOTO, T. MINATO, M. SAITO and T. KITAGAWA**, "The proximal residue largely determines the CO orientation in carbonmonoxy globin proteins. An ab initio study of a haem prosthetic unit.", *J. Am. Chem. Soc.* **116**, 11586 (1994).
- Y. SHIRO, T. IIZUKA, K. MARUBAYASHI, T. OGURA, T. KITAGAWA, S. BALASUBRAMANIAN and S. G. BOXER**, "Spectroscopic study of Ser92 mutants of human myoglobin: Hydrogen bonding effect of Ser92 to proximal His93 on structure and property of myoglobin.", *Biochemistry* **33**, 14986 (1994).
- S. HIROTA, T. OGURA and T. KITAGAWA**, "Observation of nonfundamental Fe=O₂ and Fe-CO vibrations and potential anharmonicities for oxy- and carbonmonoxy-hemoglobin; Evidence supporting a new assignment of the Fe-C-O bending fundamental.", *J. Am. Chem. Soc.* **117**, 821 (1995).
- M. NAGAI, S. KAMINAKA, Y. OHBA, Y. NAGAI, Y. MIZUTANI and T. KITAGAWA**, "Ultraviolet resonance Raman studies of quaternary structure of hemoglobin using a tryptophan β 37 mutant.", *J. Biol. Chem.* **270**, 1636 (1995).
- S. KAMINAKA and T. KITAGAWA**, "A novel spinning cell system for UVRr measurements of powder- and small volume solution samples in back-scattering geometry: Application to solid tryptophan and mutant hemoglobin solution.", *Appl. Spectrosc.* **49**, 685 (1995).
- S. SATO, K. AOYAGI, T. HAYA and T. KITAGAWA**, "Time-resolved resonance Raman study of free-base octaethyl porphyrins in the S₀, S₁ and T₁ states.", *J. Phys. Chem.* **99**, 7766 (1995).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

S. SATO and T. KITAGAWA, "Vibrationally hot (dd) excited states of Ni^{II} -porphyrin probed by picosecond time-resolved resonance Raman spectroscopy", Time-resolved Vibrational Spectroscopy VI (A. Lau, F. Siebert and W. Werncke, Eds.) *Springer Proc. Phys.* **74**, 104-108 (1994).

T. KITAGAWA, T. OGURA, S. HIROTA, D. A. PROSHAYAKOV, K. SHINZAWA - ITOH, S. YOSHIKAWA and E. H. APPELMAN, "Mechanism of dioxygen reduction at the iron-copper binuclear center of cytochrome c oxidase; Time-resolved resonance Raman study", *VIIth Intern. Conf. Bioinorg. Chem.* (J. Inorg. Chem.) **59**, 284 (1995).

M. NAGAI, K. IMAI, S. KAMINAKA, Y. MIZUTANI and T. KITAGAWA, "UV resonance Raman studies of quaternary structure changes of human hemoglobin using a tyrosine $\alpha 42$ mutant", *VIIth Intern. Conf. Bioinorg. Chem.* (J. Inorg. Chem.) **59**, 347 (1995).

B-3) 総説, 著書

T. KITAGAWA and Y. MIZUTANI, "Resonance Raman spectra of highly oxidized metalloporphyrins and heme proteins" *Coord. Chem. Rev.* **135/136**, 685 (1994).

S. SATO and T. KITAGAWA, "Time resolved resonance Raman study of porphyrins and metalloporphyrins in the electronic excited states" *Appl. Phys.* **B59**, 415 (1994).

B-4) 招待講演

T. KITAGAWA, T. OGURA, S. HIROTA, D. A. PROSHLYAKOV, K. SHINZAWA-ITOH, S. YOSHIKAWA and E. H. APPELMAN, "Time-resolved resonance Raman study on mechanism of dioxygen reduction by cytochrome c oxidase", *VIIth Intern. Conf. Time-Resolved Vib. Spectrosc.* (W. H. Woodruff, Ed.) M2-2, Santa Fe (1995).

B-5) 受賞, 表彰

日本化学会学術賞, 北川禎三, 1988 年

日本化学会進歩賞, 小倉尚志, 1993 年

井上研究奨励賞, 水谷泰久, 1995 年

井上研究奨励賞, 廣田 俊, 1996 年

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

IUPAC Associate Members of Commission on Biophysical Chemistry 1996. 1~

日本分光学会 東海支部幹事 1986.4-1991.3

評議員 1987-現在

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

International Conference on Raman Spectroscopy, International Steering Committee 1988-1994

International Conference on Time Resolved Vibrational Spectroscopy, International Organizing Committees 1989-現在

11th International Conference on Photobiology, Symposium organizer 1992

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

Symposium on "Recent Developments in Vibrational Spectroscopy", International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (one of organizers).

文部省・学振等の委員会

文部省学術審議会専門委員会科研費審査委員 1991-1993, 1995-

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 1992-1993, 1994-1995

科学技術庁研究開発局評価委員 1994

学術雑誌編集委員

Journal of Physical Chemistry (Advisory Board) 1993-現在

Chemical Physics (Advisory Board) 1993-現在

Journal of Molecular Liquids (Editorial Board) 1993-現在

Asian Journal of Physics (Advisory Board) 1991-現在

Biospectroscopy (Editorial Board) 1993-現在

Journal of Raman Spectroscopy (Advisory Board) 1995-現在

Journal of Biological Inorganic Chemistry (Advisory Board) 1995-現在

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

総合研究(B)班長 1995

B-7) 他大学での講義

大阪大学 1996年1月

C) 研究活動の課題と展望

- a) 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
- b) 生体NOの合成及び反応機構：時間分解赤外分光
- c) 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
- d) 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
- e) タンパク質の速いダイナミ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
- f) 生体における酸素活性化機構
- g) 金属ポルフィリン電子励起状態における振動緩和：ピコ秒時間分解共鳴ラマン分光

以上のテーマを中心に時間分解振動分光の手法をシャープに生かした研究を進めて行きたい。

加 藤 立 久 (助教授)

A-1) 専門領域：凝集系の分子分光学

A-2) 研究課題

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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 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行う。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。LaF₃中にドーブされたPr³⁺イオンの核四重極サブレベル間の光ラマンビート検出法による磁気共鳴測定に成功した。
- b) 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・レーリー散乱観測を通して調べている。液晶系について，外部電場や温度変化による相転移を振動ラマンスペクトルで追跡し，スペクトルの二次元表示を行っている。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。
- c) フラーレン類のラジカル分子分光学的研究：テトラフェニルフォスフェイトとの塩を形成したC₆₀のアニオンラジカル単結晶について，ESR・吸収・発光スペクトルを系統的に調べた。結晶構造とESRスペクトルから決定されたgテンソルとの関係を明らかに出来た。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。

B-1) 学術論文

T. KODAMA, T. KATO, T. MORIWAKI, H. SHIROMARU and Y. ACHIBA, "Laser Study on the Resonance-Enhanced Multiphoton Electron Detachment (REMPED) Processes for C₆₀⁻ and C₇₀⁻", *J. Phys. Chem.*, **98**, 10671(1994).

T. KATO, S. BANDOW, M. INAKUMA and H. SHINOHARA, "ESR Study on Structures and Dynamics of Sc₃@C₈₂", *J. Phys. Chem.*, **99**, 856(1995).

T. AKASAKA, T. KATO, K. KOBAYASHI, S. NAGASE, K. YAMAMOTO, H. FUNASAKA and T. TAKAHASHI, "Exohedral derivatives of La@C₈₂", *Nature*, **374**, 600(1995).

B-4) 招待講演

T. KATO, "ESR Study of the Electronic Structure of Metallofullerenes", Electro Chemical Society Meeting, San Francisco (U. S. A.), May 22-27, 1994.

C) 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)

A-1) 専門領域：光化学，レーザー化学，溶液化学

A-2) 研究課題

- a) 分子間電子移動の動力学的機構の研究
- b) フェムト秒高次非線形分光法の開発とその液体ダイナミクスへの応用
- c) 高等植物光合成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) 人工光合成系における電子移動の研究
- e) フェムト秒 Cr:Forsterite レーザーの製作とそれを利用した色素 J-会合体の励起状態ダイナミクスの研究
- f) 紫外フェムト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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 電子供与性溶媒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，分子振動の電子移動に与える影響について調べている。
- b) 高次（5次及び7次）非線形分光法を開発した。フェムト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。
- c) 光合成光化学系 II 反応中心においてクロロフィルやフェオフィチンの励起状態の寿命を測定した。684nm のサブピコ秒励起パルスを用いることで，ピコ秒オーダーの遅いエネルギー移動に律速されない初期電荷分離の測定に成功し，電子移動に係わる複数の減衰成分を見いだした。
- d) 水素結合によって結び付けられた，ポルフィリンとキノンの間で，電荷の分離と再結合を時間分解測定で観測した。それらの電子移動速度とポルフィリン-キノ中間距離の間の相関を評価した。
- e) 50fs のパルス幅を持った Cr:Forsterite レーザーを製作し，これを励起源として色素 J-会合体からの時間分解蛍光スペクトルをスペクトル積算型ストリークカメラを用いて 5ps 程度の時間分解能で観測した。
- f) 純 CH_3I に対して紫外フェムト秒パルスを励起光として照射し，光解離片 I^* と CH_3I の反応により I_2 が生成する過程を過渡吸収法によって調べた。この系では反応物同士が会合するまでの並進拡散の影響を省略できるため，液相化学反応における遷移状態近傍の観測が可能になる。

B-1) 学術論文

V. F. KAMALOV, I. A. STRUGANOVA, Y. KOYAMA and K. YOSHIHARA, "Two-Exciton Emission of BIC J-Aggregates", *Chem. Phys. Lett.* **226**, 132 (1994).

R. HOWELL, D. PHILLIPS, H. PETEK and K. YOSHIHARA, "Fluorescence of Jet-Cooled Dimethylamino Benzonitrile, Its Aggregates and Solvated Complexes", *Chem. Phys.* **188**, 303 (1994).

- Y. NAGASAWA, A.P. YARTSEV, K. TOMINAGA, A.E. JOHNSON and K. YOSHIHARA**, "Temperature Dependence of Ultrafast Intermolecular Electron Transfer Faster Than Solvation Process", *J. Chem. Phys.* **101**, 5717 (1994).
- S. KUMAZAKI, H. KANDORI, H. PETEK, K. YOSHIHARA and I. IKEGAMI**, "Primary Photochemical Processes in P700-Enriched Photosystem I Particles: Trap-Limited Excitation Decay and Primary Charge Separation", *J. Phys. Chem.* **98**, 10335 (1994).
- S. KUMAZAKI, M. IWAKI, I. IKEGAMI, H. KANDORI, K. YOSHIHARA and S. ITOH**, "Rates of Primary Electron Transfer Reactions in the Photosystem I Reaction Reconstructed with Different Quinones as the Secondary Acceptor", *J. Phys. Chem.* **98**, 11220 (1994).
- Y. NAGASAWA, A. P. YARTSEV, K. TOMINAGA, P. B. BISHT, A. E. JOHNSON and K. YOSHIHARA**, "Dynamical Aspects of Ultrafast Intermolecular Electron Transfer Faster Than Solvation Process: Substituent Effects and Energy Gap Law", *J. Phys. Chem.* **99**, 653 (1995).
- K. TOMINAGA and K. YOSHIHARA**, "Fifth Order Optical Response of Liquid CS₂ Observed by Ultrafast Non-Resonant Six-Wave Mixing", *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3061 (1995).
- H. PETEK, A.J. BELL, Y.S. CHOI, K. YOSHIHARA, B. A. TOUNGE and R.L. CHRISTENSEN**, "One- and Two-Photon Fluorescence Excitation Spectra of the 2¹Ag States of Linear Tetraene in Free Jet Expansions", *J. Chem. Phys.* **102**, 4726 (1995).
- H. PAL, Y. NAGASAWA, K. TOMINAGA, S. KUMAZAKI and K. YOSHIHARA**, "Deuterium Isotope Effect on the Solvation Dynamics", *J. Chem. Phys.* **102**, 7758 (1995).
- B. KIM and K. YOSHIHARA**, "Molecular Resonances Observed in the Predissociation of CS₂", *Laser Chem.* **16**, 19 (1995).
- K. TOMINAGA, G.P. KEOGH, Y. NAITOH and K. YOSHIHARA**, "Temporally Two-Dimensional Raman Spectroscopy of Liquids by Six-Wave Mixing with Ultrashort Pulses", *J. Raman Spect.* **26**, 495 (1995).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- Y. NAGASAWA, A.P. YARTSEV, K. TOMINAGA and K. YOSHIHARA**, "Chemical Substitution and Deuterium Isotope Effects on Ultrafast Intermolecular Electron Transfer: Possible Role of Molecular Vibrations", in *Ultrafast Phenomena IX*, P.F. Barbara, W. H. Knox, G. A. Mourou and A. H. Zewail Eds., Springer, p. 84-85 (1994).
- K. TOMINAGA, Y. NAITOH, T.J. KANG and K. YOSHIHARA**, "Observation of Fifth-Order Optical Response of Liquid CS₂ by Non-Resonant Six-Wave Mixing", in *Ultrafast Phenomena IX*, P.F. Barbara, W. H. Knox, G. A. Mourou and A. H. Zewail Eds., Springer, p.143-144 (1994).
- S. KUMAZAKI, M. IWAKI, I. IKEGAMI, H. KANDORI, S. ITO and K. YOSHIHARA**, "Primary Electron-Transfer Steps in Photosystem I Reaction Center with Reduced Number of Antenna Chlorophylls (12-30 Chls/P700)", in *Ultrafast Phenomena IX*, P.F. Barbara, W. H. Knox, G. A. Mourou and A. H. Zewail Eds., Springer, p.466-467 (1994).
- K. TOMINAGA, R. INABA, T.J. KANG, Y. NAITOH, K.A. NELSON, M. TASUMI and K. YOSHIHARA**, "Liquid Dynamics Studied by Ultrafast Raman Echo Technique", in *XIV International Conference on Raman Spectroscopy*, N.-T. Yu and X.-Y. Li Eds., John Wiley & Sons, p.444-445 (1994).

B-3) 総説, 著書

K. YOSHIHARA, "Solvent and Nuclear Dynamics of Ultrafast Intermolecular Electron Transfer", in *Ultrafast Processes in Chemistry and Biology, International Union of Pure and Applied Chemistry Monograph Series on Chemistry for the 21st Century*, M.A. El-Sayed, I. Tanaka and Yu Molin Eds., Chapter 4, Blackwell Science Publisher, p.105 (1995).

K. YOSHIHARA, K. TOMINAGA and Y. NAGASAWA, "Effects of the Solvent Dynamics and Vibrational Motions in Electron Transfer" (Accounts), *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **68**, 696 (1995).

B-4) 招待講演

K. YOSHIHARA, "Spectroscopy and Dynamics of Simple Polyenes", Japan-U.K. 5+5 Meeting on Molecular Science/Dynamic Behaviour of Excited States, Okazaki, September 1994

K. YOSHIHARA, "Dynamical Aspects of Intermolecular Electron Transfer", 光化学討論会-日中光化学合同会議 /Japan-Chino Photochemistry Joint Symposium, Osaka, October 1994.

K. YOSHIHARA, "Vibrational and Rotational Relaxation Studied by Femtosecond CARS and Raman Echo", Asian Academy Seminar on Molecular Science and Molecular Materials, Bangalore, India, November 1994.

K. YOSHIHARA, "Solvent and Nuclear Dynamic Effects on Intermolecular Electron Transfer", Yamada Conference XXXXII, Nagoya, December 1994.

B-5) 受賞, 表彰

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

レーザー学会功労表彰, 吉原経太郎, 1993 年

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

B-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 常任理事, 理事 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 組織委員, プログラム委員 1986, 1988, 1990, 1992, 1994

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ター国際会議 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

東京大学物性研究所協議会委員 1994-現在

日本学術会議 専門委員 1974-1975

化学研究連絡委員会物理化学専門委員会委員 1994-現在

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

新プログラム「人工制御機能性分子システムの研究」班長 1991-現在

B-7) 他大学での講義

東京大学工学研究科 1994年6月

C) 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, 非平衡反応を研究する新しい手段となった。五次及び七次の高次非線形分光法は液体の微視的な挙動を調べる新しい手法となるものと期待され, 実験法の開発及び種々の溶液系への応用を行っている。光合成系の研究はエネルギー移動や電子移動の励起波長依存性や温度依存性についても調べて行きたい。紫外フェムト秒分光法を用いてコヒーレントに励起された簡単な分子の溶液内光誘起諸過程(光解離, 化学反応, 異性化, イオン化等)を引き続き研究する。

松 本 吉 泰 (助教授)

A-1) 専門領域：表面科学

A-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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- 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。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、ならびに、熱反応機構について明らかにした。また、光励起のメカニズムを明らかにするため、光反応収率の波長依存性を中心に測定をした。
- 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。特に、本年度は脱離するメタンの速度分布や角度分布を測定し、脱離のダイナミクスも明らかにした。
- 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、原子状酸素が開与する異なる反応機構が存在することを明らかにした。

B-1) 学術論文

J.LEE, H.KATO, K.SAWABE and Y. MATSUMOTO, "Angular Distributions of N_2 in the photodissociation of N_2O adsorbed on a Partially Oxidized Si(100) Surface at 95 K", *Chem. Phys. Lett.* **240**, 417(1995).

K. SAWABE, Y. MATSUMOTO, J.YOSHINOBU and M.KAWAI, "The Reactivity of Molecular and Atomic Oxygen in Oxygen-Exchange Reaction between NO and O_2 Coadsorbed on a Pt(111) Surface", *J. Chem. Phys.* **103**, 4757(1995).

R.-D.URBAN,L.G.JORISSEN, Y. MATSUMOTO and M. TAKAMI, “Free-Jet Infrared Spectroscopy of the SiF₄-Rare Gas Complexes”, *J. Chem. Phys.* **103**, 3960(1995).

B-3) 総説・著書

松本吉泰, 「光誘起脱離・解離反応のダイナミクス」, 表面科学, **16**, 557 (1995).

B-4) 招待講演

Y. MATSUMOTO, “Surface Photochemistry and Photodissociation Dynamics”, The 6th Korea-Japan Joint Symposium on Surface Science and Solid State Chemistry, Taejon (韓国) 1995 年 2 月

Y. MATSUMOTO, “Photochemical Activation of Methane on Metal Surfaces”, Taipei International Symposium on Surfaces and Thin Films, Taipei (台湾) 1995 年 3 月

松本吉泰, 「固体表面吸着種の光化学とダイナミクス」, 第 5 回北海道大学触媒化学研究センター研究討論会, 札幌, 1995 年 1 月

松本吉泰, 「Pt(111)面上でのメタンの熱および光脱離」, 分子研研究会「分子-表面ダイナミクス」, 岡崎, 1995 年 2 月

B-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 化学反応討議会 プログラム委員 1992

第 5 1 回 岡崎コンファレンス 組織委員 1994

分子研研究会「分子-表面ダイナミクス」 組織委員 1995

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 1995

C) 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。特に、多光子電子分光などを用い、吸着種の電子状態と光化学との関係について明らかにすることを試みる。

電子状態動力学研究部門

花 崎 一 郎 (教授)

A-1) 専門領域：物理化学，化学反応論

A-2) 研究課題

- a) ファンデルワールス錯体のダイナミクス
- b) 自己秩序形成系の光応答

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ファンデルワールス錯体のダイナミクス：ファンデルワールス分子 $\text{N}_2\text{O} \cdot \text{H}_2\text{O}$ の光分解過程を議論するためには、対応する2分子反応， $\text{N}_2\text{O} + h\nu \rightarrow \text{O}(^1\text{D}) + \text{N}_2$ ， $\text{O}(^1\text{D}) + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{OH}$ における生成物 OH の振動・回転分布を詳細に調べ、これと比較する必要がある。本研究では、 ^{18}O を含む水の同位体を用いて、生成する2種類の OH, ^{18}OH と ^{16}OH を区別し、それぞれの振動・回転分布を詳細に決定した。この結果、水分子から水素原子が引き抜かれてできる ^{16}OH は後に残される ^{18}OH に比べて振動・回転温度がかなり高く、錯体起源の反応と反応機構が全く異なることが明らかになった。また、*m*-トルニトリルと希ガスのつくるファンデルワールス錯体に対し、LIF分光法やホール・バーニングの手法を適用し、メチル基の内部回転による振電バンドを帰属し、内部回転ポテンシャルを決定した。また、ポテンシャルのファンデルワールス結合による変化について詳細な研究を行い、*m*-トルニトリル分子の分極に起因する誘起静電力がポテンシャルを決めていることを明らかにした。
- b) 自己秩序形成系の光応答
pH 振動系 $\text{SO}_3^{2-}/\text{BrO}_3^-/\text{ferrocyanide}$ について、光照射によって起こる分岐構造を調べ、状態図を決定した。また、この系のサブシステムである、 $\text{SO}_3^{2-}/\text{BrO}_3^-/\text{H}^+$ 系について、従来考えられていたものとは異なる新しい反応機構を提案し、これが実験事実をよく説明することを示した。さらに、もう一つのサブシステムである $\text{BrO}_3^-/\text{ferrocyanide}/\text{H}^+$ について調べ、フルシステムの光感受性はもっぱらこのサブシステムによるものであることを示した。また、逆ミセル系における BZ 反応の性質について昨年度にひきつづき研究をすすめ、自己触媒反応過程の速度が酸強度や BrO_3^- の濃度に対して、均一水溶液系とは異なる依存性を示すことを見いだした。このような観測結果はミセル中での酸解離定数が均一系水溶液に比べて2桁程度小さいこと、および、ミセルがサイズ分布をもつ結果、一部のプロトンが反応系から分離してしまうことによって理解できることを示した。

B-1) 学術論文

M. TAKAYANAGI and I. HANAZAKI, "Geometry and Torsional Potential of 2,2'-Bithiophene in a Supersonic Jet", *J. Phys. Chem.*, **98**, 12893-12898 (1994).

G. RÁBAI and I. HANAZAKI, "Light-Induced State Transitions in the Oscillatory $\text{ClO}_2^-/\text{Cl}^-$ -Iodomalonic Acid System in a Semibatch Reactor", *J. Phys. Chem.*, **98**, 10550-10553 (1994).

V. K. VANAG, Y. MORI and I. HANAZAKI, "Photoinduced pH Oscillations in the Hydrogen peroxide-Sulfite-Ferrocyanide System in the presence of Bromocresol Purple in a Continuous-Flow Stirred Tank Reactor", *J. Phys. Chem.*, **98**, 8392-8395 (1994).

- J. GORECKI, K. KITAHARA, K. YOSHIKAWA and I. HANAZAKI, "Molecular Dynamics Simulations of Nonequilibrium Spatial Correlations in a Reaction Diffusion System", *Physica A*, **211**, 327-343 (1994).
- I. HANAZAKI, H. L. KIM and M. TAKAYANAGI, "Photochemistry of $\text{N}_2\text{O} \cdot \text{H}_2\text{O}$ Complexes Produced in Supersonic Jets", *Laser Techniques for State-Selected and State-to-State Chemistry II, SPIE Proceedings 2124*, 10-15 (1994).
- Y. MORI, G. RÁBAI and I. HANAZAKI, "Photoinduced Bifurcation between Steady and Oscillatory States in the $\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-} - \text{H}_2\text{O}_2$ Reaction in a Flow Reactor", *J. Phys. Chem.*, **98**, 12968-12972 (1994).
- G. RÁBAI and I. HANAZAKI, "Photo-induced Disproportionation of Iodomalonic Acid", *Intern. J. Chem. Kinetics*, **27**, 431-441 (1995).
- I. HANAZAKI, Y. MORI, T. SEKIGUCHI and G. RÁBAI, "Photo-response of Chemical Oscillators", *Physica D*, **84**, 228-237 (1995).
- T. KONO, M. TAKAYANAGI and I. HANAZAKI, "The C=O Stretching Frequency in the S_1 ($\pi^* - n$) State of Acetaldehyde and Its Deuterated Derivatives Determined with the Photofragment Excitation Spectroscopy", *Laser Chem.*, **15**, 249-259 (1995).
- G. RÁBAI and I. HANAZAKI, "Oxidation of Thiocyanate by Bromate is not an Oscillatory Reaction in a Batch Reactor", *J. Phys. Chem.*, **99**, 10061-10062 (1995).
- V. K. VANAG and I. HANAZAKI, "Frequency Multiplying Bifurcations in the Oscillatory Belousov-Zhabotinskii Reaction in Interacting Water Droplets of Reverse Microemulsions of Aerosol OT in Octane", *J. Phys. Chem.*, **99**, 6944-6950 (1995).
- G. RÁBAI, A. KAMINAGA and I. HANAZAKI, "The role of the Dushman Reaction and the Ferricyanide Ion in the Oscillatory $\text{IO}_3^- - \text{SO}_3^{2-} - \text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$ Reaction", *J. Phys. Chem.*, **99**, 9795-9800 (1995).

C) 研究活動の課題と展望

- a) ファンデルワールス錯体の光化学反応- $\text{N}_2\text{O} \cdot \text{H}_2\text{O}$ 錯体の光解離について、低圧フロー条件下での2分子反応については、生成するOHラジカルの振動・回転分布に関して、詳細な解析を行ったので、超音速ジェット気流中でのファンデルワールス錯体起源の反応について、さらに測定を追加を行い、両者の比較にもとづいて錯体の構造と反応の特異性をあきらかにする。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。
- b) 自己秩序形成系の光応答-前年度にひきつづき、 $\text{SO}_3^{2-}/\text{BrO}_3^-/\text{ferrocyanide}$ 系の化学振動反応およびその光応答性について理論的見地から検討を加える。また、逆ミセル系におけるBZ反応の性質について昨年度にひきつづき研究をすすめる。本年度はこのような系の光応答について明らかにする。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）

A-1) 専門領域：レーザー分光学，化学反応動力学

A-2) 研究課題:

- a) 光解離反応における立体動力学
- b) 光励起分子の分子内エネルギー移動および前期解離動力学
- c) 大気，星間化学に関わる反応素過程の解明
- d) 新しい交差分子線反応装置の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 共鳴多光子イオン化—二次元画像観測法を用いて，化学反応生成原子，分子の散乱（3次元）分布を，内部量子状態（電子，振動，回転，状態）を選択的にしながら撮像する装置を開発した。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。3原子分子の光分解によって生成する2原子分子がフリスビー型に回転する様子，また散乱原子の電子軌道が空間的に配向する様子を観測し，これらの量子力学的な解析理論を導いた。
- 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。励起状態からの反応には，前期解離と準安定状態の形成の二つがあること。これらが特定の分子回転によって加速されること，また，解離の出口付近に 1.5 kcal/mol のエネルギー障壁が存在することなどを初めて見いだした。
- c) 塩化エチレン，臭化エチレン，SO₂ 等の大気化学関連分子の紫外光分解過程を明らかにするため，分解生成する塩素，臭素，酸素原子の散乱状態を画像観測し，反応におけるエネルギー分配，反応の時間スケール，ポテンシャル面の形状などについて研究した。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。
- d) 現時点における最も詳細な化学反応実験を実現する手段として，交差分子線法と二次元画像観測法を組み合わせる新しい装置の開発を行った。新しい反応装置，活性酸素原子線源の設計と性能評価を行った。

B-1) 学術論文

T. SUZUKI, H. 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)

B-4) 招待講演

鈴木俊法，「素反応実験における二次元画像観測」第11回化学反応討論会，札幌，1995年6月

B-5) 受賞，表彰

鈴木俊法，分子科学奨励森野基金，1993年度

鈴木俊法，日本化学会進歩賞，1994年度

C) 研究活動の課題と展望

現在知られている気相反応の知識では、成層圏オゾン層破壊機構の65%程度しか説明できない。この事実に象徴されるように、大気、星間化学の理解には、多原子分子を含む反応素過程のより広範囲で徹底的な研究が強く求められている。また、これらは近年、長足の進歩を遂げた化学反応動力学の最も重要かつ最も挑戦的な研究課題である。我々は、新しい手段（真空紫外レーザー、画像観測装置、交差分子線装置）を導入し、状態選択微分断面積レベルでの新しい研究を行い、最先端の量子化学計算や反応理論の厳密な検証を行うとともに、多原子系の化学反応ダイナミクスを解明する突破口を模索する。また、これらの気相に関する詳細な知見を溶液反応に結ぶ接点として、分子クラスター内の化学反応を研究する。

小林 敬 道 (助手) *)

A-1) 専門領域：分子分光学

A-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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- 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 $\text{B}^3\Pi_0^+$ 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寿命(無磁場)と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。

B-1) 学術論文

K.KANDA, K. SUZUKI, T. KONDOW, H. ITO and K. KUCHITSU, "Production of $\text{CN}(\text{B}^3\Sigma^+)$ 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 of Dissociative and Predissociative States", *J. Phys. Chem.* **98**, 1407(1994).

C) 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、電子状態の比較的良好に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、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。

*) 1995 年 3 月 1 日付転出

3-4 分子集団研究系

物性化学研究部門

薬 師 久 彌 (教授)

A-1) 専門領域：物性化学

A-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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 遷移金属を含む導電性物質における π 電子・d 電子相互作用の研究：フタロシアニン導体 ($NiPc(AsF_6)_{0.5}$ と $CoPc(AsF_6)_{0.5}$) に高圧力をかける事によりフタロシアニン中心金属の d 電子が配位子の π 軌道へ電荷移動を起こす事を見出し、それを実験的に証明した。また電荷移動の起こる初期の段階で金属・絶縁体転移が起こる事を見出し、それを電気的な実験で確認すると同時に電子構造モデルを提案した。
- b) 新しい導電性有機物の探索：負のオンサイトクーロンエネルギーをもつ物質を求めて 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授と共同で進めている。今年度は、0 価、一価、二価の分子の電子遷移の帰属、m-BDNT- PF_6 のオンサイトクーロンエネルギーならびに移動積分の決定、電子格子相互作用定数の見積りなど基本的な物性定数を実験的に求めた。
- c) C_{60} およびその関連物質の固体物性： C_{60} の三元系物質としてポリ (3-アルキルチオフェン) に C_{60} をドーブした後、さらにアルカリ金属をドーブした C_{60} 三元化合物の超伝導を発現し、さらにこの物質の超伝導性が顆粒状超伝導の部類に属する事を低磁場マイクロ波吸収と磁化測定から明らかにした。
- d) 導電性物質の遠赤外領域の分光学： β'' -(BEDT-TTF) $_2$ AuBr $_2$ 単結晶の反射スペクトルを低温下で測定し、 130cm^{-1} のバンドギャップと伝導電子が 5K において共存する事を示した。これは、ネスティング相転移を起こして大部分のフェルミ面が消失した後もまだフェルミ面が生き残っている事を意味している。

B-1) 学術論文

I. I. KHAIRULLIN, K. IMAEDA, K. YAKUSHI and H. INOKUCHI, "Superconducting properties of Na-doped C_{60} prepared from sodium azide", *Physica C* **231**, 26(1994).

T. ENOKI, K. TSUJIKAWA, K. SUZUKI, A. UCHIDA, Y. OHASHI, H. YAMAKADO, K. YAKUSHI and G. SAITO, "Metal-Semiconductor Transition and Structural Change in (BEDT-TTF) $_3$ (ClO $_4$) $_2$ ", *Phys. Rev. B* **50**, 16287(1994-II).

T. ISHII, Y. KOMATSU, K. SUZUKI, T. ENOKI, A. UGAWA, K. YAKUSHI and S. BANDOW, "Electronic Structure and Transport Properties of AuCl $_3$ -GIC", *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **245**, 1(1994).

J. G. LIN, C. Y. HUANG, Y. Y. XUE, C. W. CHU, J. GRIGORYAN and K. YAKUSHI, "High Pressure Study on High-Tc (ZuPc)Bi-2223 Oxides", *Physica C* **231**, 177(1994).

T. HIEJIMA and K. YAKUSHI, "Pressure-induced Charge-Transfer in One-dimensional Phthalocyanine conductor, NiPc(AsF₆)_{0.5}", *Solid State Commun.* **95**, 661(1995).

L. GRIGORYAN, K. YAKUSHI and N. CHAKRAVATY, "The 130 K Transition in Bi-Oxides Heavily Doped by Iron Phthalocyanine: Superconductivity vs Magnetism", *Phys. Stat. Sol. (b)* **187**, 205(1995).

Z. J. HUAN, J. G. Lin, J. J. Lin, C. Y. HUANG, L. GRIGORYAN and K. YAKUSHI, "Thermoelectric Power Study on High-Tc Bi-2212 and 2223 Oxides Intercalated with Organic Molecules Zincphthalocyanine", *Physica C* **244**, 305(1995).

M. E. KOZLOV and K. YAKUSHI, "Optical Properties of High-Pressure Phases of C₆₀ Fullerene", *J. Phys.: Condens. Matter* **7**, L209(1995).

K. IMAEDA, K. YAKUSHI and H. INOKUCHI, "Preparation and Properties of Lithium-Doped C₆₀ by Lithium Azide", *Fullerene Science and Technology* **3**, 545(1995).

H. ARAKI, A. A. ZAKHIDOV, J. SAIKI, N. YAMAZAKI, K. YAKUSHI and K. YOSHINO, "Superconductivity in Conducting Polymer-Fullerene Composite Doped by Alkali Metal", *J. J. Appl. Phy.* **34**, L1041(1995).

A. A. ZAKHIDOV, H. ARAKI, K. TADA, K. YAKUSHI and K. YOSHINO, "Granular Superconductivity in Conducting Polymer-Fullerene-Alkali Metal Composite", *Physics Lett. A*, **205** 317(1995).

T. HIEJIMA and K. YAKUSHI, "Pressure-induced Charge-Transfer in One-dimensional Phthalocyanine Conductor, NiPc(AsF₆)_{0.5}", *Solid State Commun.* **95**, 661(1995).

T. HIEJIMA and K. YAKUSHI, "Pressure-induced d- π Charge Transfer in One-dimensional Phthalocyanine Conductors, NiPc(AsF₆)_{0.5} and CoPc(AsF₆)_{0.5}", *J. Chem. Phys.* **103**, 3950(1995).

B-2) 国際会議プロシーディングス

K. YAKUSHI, I. SHIROTANI, I. I. KHAIRULLIN, Y. NAKAZAWA, K. KANODA, N. KOSUGI and S. TAKEDA, "Characterization of Poly-CuPc Sheet Polymers Synthesized under High pressure", *Synthetic Metals* **71**, 2289(1995).

T. HIEJIMA and K. YAKUSHI, "Pressure Dependence of the Infrared and Visible Spectra of Metallophthalocyanine Salts", *Synthetic Metals* **71**, 2305(1995).

A. UGAWA, D. B. TANNER and K. YAKUSHI, "Far-infrared reflectance of β -(BEDT-TTF)₂AuBr₂: co-existence of free carriers and a single-particle gap at $2\Delta=130\text{ cm}^{-1}$ ", *Synthetic Metals* **70**, 979(1995).

K. IMAEDA, I. I. KHAIRULLIN, K. YAKUSHI and H. INOKUCHI, "Magnetic and structure characterization of superconducting sodium-doped C₆₀ prepared with the thermal decomposition of sodium azide" *Synthetic Metals* **70**, 1375(1995).

I. I. KHAIRULLIN, K. IMAEDA, K. YAKUSHI and H. INOKUCHI, "Superconducting properties of Na-doped C₆₀ prepared from sodium azide", *Synthetic Metals* **70**, 1369(1995).

B-3) 総説, 著書

葉師久弥 「電気を流す高分子」 「かご型炭素分子フラーレン」 新分子の世界, 156-161 (1995)

B-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 (1993-1994)

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)

学会の組織委員

第3, 4, 5 回日中共同セミナー組織委員 (第5回は日本側代表) (1989, 1992, 1995)

第5, 6 回日韓共同シンポジウム組織委員 (第6回は日本側代表) (1993, 1995)

C) 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では見られない新しい現象である。困難な実験をとまなうが、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)

A-1) 専門領域：物性物理学 (実験)

A-2) 研究課題

- a) BEDT-TTF 系伝導体における電子相関と金属-絶縁体転移
- b) 層状有機伝導体における超伝導の発現機構とボルテックス集団の特性
- c) DCNQI 金属錯体の電子状態の制御

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) BEDT-TTF(以下では ET と略す) 系の金属相から絶縁相にわたる多様な電子相を包括的に理解する目的で, 代表的な ET 錯体 $\alpha\text{-ET}_2\text{MHg(SCN)}_4$ [$M=\text{K, Rb, NH}_4$], $\beta\text{-ET}_2\text{I}_3$, $\kappa\text{-ET}_2\text{X}$ [$\text{X}=\text{Cu(NCS)}_2$, $\text{Cu[N(CN)}_2\text{]Br}$, $\text{Cu[N(CN)}_2\text{]Cl}$], (ET)(TCNQ)の電子状態を $^{13}\text{C-NMR}$ と比熱測定で調べ, 次のことが分かった。
 - 1) この順序で電子相関の効果が次第に強くなっており, κ 型塩が金属から絶縁体への境界にあるが, この転移が Mott 転移の性格をもつ。
 - 2) 重水素置換した $\kappa\text{-ET}_2\text{Cu[N(CN)}_2\text{]Br}$ がまさに Mott 転移境界上にある。
 - 3) 最も電子の局在性が強い(ET)(TCNQ)においても高温側で金属的な $T_1T=$ 一定則が成り立つ。これは, ハバードギャップが室温程度のエネルギーである事を示している。
- b) ET 系における超伝導の発現機構の解明に向けての実験と, 層状構造からくる超伝導の異方性とボルテックス状態の特異性を明らかにするための研究を行った。
 - 1) $\kappa\text{-ET}_2\text{Cu[N(CN)}_2\text{]Br}$ の超伝導状態における $^{13}\text{C-NMR}$ 緩和率にコヒーレンスピークが現れないこと, さらに低温で温度の 3 乗則に従うことから, この物質の超伝導は, フェルミ面上の線でギャップがゼロになる非 S 波的なもの, あるいは極めて異方的なものであることが示された。
 - 2) $\alpha\text{-ET}_2\text{NH}_4\text{Hg(SCN)}_4$ の伝導度, 磁場侵入長の測定からこの物質がこれまで測定されている有機超伝導体の中で最も異方性が強いということが分かった。さらに磁場中のボルテックス集団の相図の一部を伝導度と ac 磁化率の測定から明らかにした。
- c) (DMe-DCNQI) $_2$ M において, $M=\text{Li, Ag}$ のとき π 電子系絶縁体となるのに対し $M=\text{Cu}$ のとき π -d 混成系金属となることに着目し, これらの混晶を作成することにより, 部分的 d 電子混成とキャリアドーピングによる電子状態の制御と新しい電子相の可能性を追求した。
 - 1) (DI-DCNQI) $_2$ Ag を新たに合成し, これが絶縁体となることを明らかにした。しかも, (DMe-DCNQI) $_2$ Ag と異なり, 磁化率は Bonner-Fischer 的な常磁性から低温で反強磁性体へと転移することを見出した。これは, DCNQI の π 電子による反強磁性秩序の初めての例であり, π 電子系のみでも電子相関の効果が強いことを実証している。(DI-DCNQI) $_2$ Li は磁化率, NMR からみて試料の質に問題があり, 低温相を決定するに至っていない。
 - 2) (DMe-DCNQI) $_2$ Li $_{1-x}$ Cu $_x$ 合金系を作成し, 伝導度測定による絶縁体から金属への転移と, 磁化率の連続的な変化を観測した。

B-1) 学術論文

A. KAWAMOTO, K. MIYAGAWA, Y. NAKAZAWA and K. KANODA, “ ^{13}C -NMR Study of Layered Organic Superconductors Based on BEDT-TTF Molecules”, *Phys. Rev. Lett.* 74, 3455 (1995).

K. MIYAGAWA, A. KAWAMOTO, Y. NAKAZAWA and K. KANODA, “Antiferromagnetic Ordering and Spin Structure in the Organic Conductor, κ -(BEDT-TTF) $_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Cl}$ ”, *Phys. Rev. Lett.* 75, 1174 (1995).

I. SHIOTANI, K. TACHI, K. TAKEDA, S. TODO, T. YAGI and K. KANODA, “Superconductivity of ZrRuSi Prepared at High Pressure”, *Phys. Rev. B* 52, 6197 (1995)

B-2) 国際会議プロシーディングス

K. KANODA, A. KAWAMOTO, K. MIYAGAWA and Y. NAKAZAWA, “ ^{13}C -NMR Study on α -(BEDT-TTF) $_2\text{MHg}(\text{SCN})_4$ ”, *Synth. Met.*, 70, 973 (1995).

K. MIYAGAWA, A. KAWAMOTO, Y. NAKAZAWA and K. KANODA, “ ^{13}C -NMR Study on κ -(BEDT-TTF) $_2\text{X}$ ”, *Synth. Met.*, 70, 969 (1995).

A. KAWAMOTO, K. MIYAGAWA, Y. NAKAZAWA and K. KANODA, “Systematic Study of DCNQI-Cu Salts by NMR at Selective Nuclear Sites”, *Synth. Met.*, 70, 1079 (1995).

K. MIYAGAWA, H. SATO, A. KAWAMOTO, K. KANODA and T. MORI, “Electronic State of κ -(BMDT-TTF) $_2\text{Au}(\text{CN})_2$ Studied by NMR and Thermoelectric Power Measurements”, *Synth. Met.*, 70, 879 (1995).

H. SATO, H. TANIGUCHI, Y. NAKAZAWA, A. KAWAMOTO, K. KATO and K. KANODA, “Resistive Transition in an Extremely Two-Dimensional Superconductor, α -(BEDT-TTF) $_2\text{NH}_4\text{Hg}(\text{SCN})_4$ ”, *Synth. Met.*, 70, 915 (1995).

Y. NAKAZAWA, H. SATO, A. KAWAMOTO, K. KATO and K. KANODA, “Complex Susceptibility and Penetration Depth of BEDT-TTF Based Layered Superconductors”, *Synth. Met.*, 70, 919 (1995).

Y. NAKAZAWA, H. SATO, A. KAWAMOTO and K. KANODA, “Specific Heat Study of α -(BEDT-TTF) $_2\text{MHg}(\text{SCN})_4$ ”, *Synth. Met.*, 70, 43 (1995).

K. YAKUSHI, I. SHIOTANI, I. I. KHAIRULLIN, Y. NAKAZAWA, K. KANODA, N. KOSUGI and S. TAKEDA, “Characterization of Poly-CuPc Sheet Polymers Synthesized under High Pressure”, *Synth. Met.* 71, 2287 (1995).

Y. KOBAYASHI, T. NAKAMURA, T. TAKAHASHI, K. KANODA, B. HILTI and J. S. Zambounis, “Observation of the Coherence Peak of ^1H -NMR Relaxation Rate in the Superconducting State of (MDT-TTF) $_2\text{AuI}_2$ ”, *Synth. Met.* 70, 871 (1995).

B-3) 総説, 著書

鹿野田一司, 「BEDT-TTF 系の金属-絶縁体転移, 強相関の物性」, 固体物理, 30, 240 (1995).

B-4) 招待講演

K. KANODA, “Metal-Insulator Transition in BEDT-TTF salts”, The 6th Korea-Japan Joint Symposium on Surface Science & Solid State Chemistry, Taejon, Korea, Feb.13-15, 1995.

B-6) 学会及び社会的活動

日本物理学会 分子性固体液晶有機導体分科 世話人 (1993-1994)

B-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

東京工業大学工業材料研究所, 「有機固体の電子状態; 遍歴か局在か?」, 1994 年 11 月

C) 研究活動の課題と展望

- a) κ - $\text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Br}$ の水素体と重水素体との合金系を利用して金属-絶縁体転移近傍の臨界特性を明らかにし, ET_2X 系の電子状態の統一像を探る。さらに, ET_2X 系のホールドープ系と見なせそうな物質の電解合成と, 物性測定に着手する。
- b) 磁場循環法によるゼロ磁場 ^{13}C -NMR 緩和率の測定から, 超伝導の対称性をさらに調べる。磁場中での電子輸送測定, 比熱測定, ^1H -NMR, ^{13}C -NMR を併用することで, ET_2X のボルテックス系の相図を完成させるとともに, 固相-液相転移の有無について結論を与える。
- c) 磁氣的絶縁体 $(\text{DI-DCNQI})_2\text{Ag}$ と非磁氣的パイエルス絶縁体 $(\text{DMe-DCNQI})_2\text{Li}$ の金属サイトを Cu あるいは Zn で部分置換し, 部分的 d 電子混成及び電荷, スピンのドーピングという立場から新しい電子相の可能性を探る。

分子集団動力学研究部門

丸 山 有 成 (教授) *)

A-1) 専門領域：固体物理化学

A-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

A-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) C60 を中心とするフラーレン固体の物性：C60 類結晶及びその各種電荷移動錯体の電子物性、特に導電性、磁性について、分子構造との相関に注目しつつ研究を進めている。成果としては、C60 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 C60 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、C60(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マイクロ構造と物性の研究：トンネル顕微鏡や原子間力顕微鏡を用いて、薄膜や結晶のマイクロ構造と物性の研究を行っている。成果としては、極低温トンネル顕微鏡の試作に成功したこと、有機導体の電子構造の2次元性を明らかにしたことなどがあげられる。
- d) プロトン-電子相互作用をキーとする新しい有機伝導体の研究：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。

B-1) 学術論文

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

A. SUZUKI, T. SUZUKI, R. J. WHITEHEAD and Y. MARUYAMA, "Evidence of Spontaneous Magnetic Order in the C60 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-naphthylmethylene)-p-phenylenedimine Crystals", *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **67**, 612 (1994).

- S. L. FANG, K. KOHAMA, H. HOSHI and Y. MARUYAMA, "Spectral Dependence of the Anisotropy of $X^{(3)}$ of Epitaxially Grown Vanadyl phthalocyanine Film". *Chem. Phys. Lett.* **234**, 343 (1995).
- Y. MARUYAMA, H. HOSHI, S. L. FANG and K. KOHAMA, "Nonlinear Optical Characteristics of MBE-Grown Phthalocyanine Thin Films", *Synth. Met.* **71**, 1653 (1995).
- Y. OCHIAI, K. YAMAMOTO, H. YAMASAKI, Y. SHIONOIRI, H. OGATA and Y. MARUYAMA "Transport Properties of C_{60} and C_{70} Single Crystals", *Fullerene Sci & Tech.* **3**, 79 (1995).
- A. SUZUKI, T. SUZUKI and Y. MARUYAMA, "Magnetic and Electrical Behaviors of C_{60} (TDAE) Single Crystal", *Solid State Commun.* **96**, 253 (1995).
- K. AWAGA, T. OKUNO, A. YAMAGUCHI, M. HASEGAWA, T. INABE, Y. MARUYAMA and N. WADA, "Crystal Structures and Magnetic Properties of (m-pyridinium nitronyl nitroxide) $^+X^-$: Possible Spin-1 Kagome Antiferromagnet", *Synth. Met.* **71**, 1807 (1995).
- H. MORI, I. HIRABAYASHI, S. TANAKA, T. MORI and Y. MARUYAMA, "Organic Conductors with Three-Component System Containing Co, Zn, and Cd Based Upon BEDT-TTF", *Synth. Met.* **70**, 789 (1995).
- H. MORI, I. HIRABAYASHI, S. TANAKA, T. MORI and Y. MARUYAMA, "Physical and Chemical Properties of MDSe-TTF and EDSe-TTF Salts", *Synth. Met.* **70**, 877 (1995)
- H. MORI, I. HIRABAYASHI, S. TANAKA, T. MORI and Y. MARUYAMA, "Preparation, Properties, and Structures of Planar Anion Complexes", *Synth. Met.* **70**, 1177 (1995).
- H. MORI, S. TANAKA, T. MORI and Y. MARUYAMA, "Crystal Structures and Electrical Resistivities of Three-Component Organic Conductors: (BEDT-TTF) $_2$ MM(SCN) $_4$ [M=K, Rb, Cs; M'=Co, Zn, Cd] ", *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **68**, 1136 (1995).
- H. HOSHI, K. HAMAMOTO, T. YAMADA, K. ISHIKAWA, H. TAKEZOE, A. FUKUDA, S. L. FANG, K. KOHAMA and Y. MARUYAMA, "Thickness Dependence of the Epitaxial Structure of Vanadyl Phthalocyanine Film", *Jpn. J. Appl. Phys.* **33**, L1555 (1994).

B-4) 招待講演

- Y. MARUYAMA, "Nonlinear optical characteristics of MBE-grown phthalocyanine thin films". International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals, Seoul (Korea), July 1994.
- 丸山有成, "MBE 法による有機超薄膜の作製", 日本化学会第 68 秋季年会, 分子性固体の機能と物性シンポジウム招待講演, 名古屋, 10 月 1994.
- Y. MARUYAMA, "Functionality Molecular Materials-Fullerenes, Organic Conductors and Molecular Magnets", Japan-India Seminar on New Materials, Tokyo, October 1994.
- Y. MARUYAMA, "Some Exotic Properties of Molecular Materials-Solid State Fullerenes", Asian Academy Seminar on Molecular Science and Molecular Materials, Bangalore (India) November 1994.
- Y. MARUYAMA, "Observation of Spontaneous Magnetic Ordering in C_{60} Complex with TDAE", MRS Fall Meeting, Boston (USA), November-December 1994.
- Y. MARUYAMA, "Magnetic and Electric Properties of C_{60} (TDAE) Complex", the 6th Korea-Japan Joint Symposium on Surface Science and Solid State Chemistry, Taedok (Korea), February 1995.

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員・委員

日本化学会東海支部学会賞等推薦委員 (1990-1991 年)

学会の組織委員

第 2, 4 回日中共同セミナー組織委員 (1986, 1992 年)

EMRS 1992 Spring Meeting:Symposium E 組織委員

第 4 回 NEC シンポジウム組織委員

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, 学振等の委員会委員

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)

学術雑誌編集委員

日本化学会欧文誌編集委員

日本化学会速報誌編集委員

*) 1995 年 3 月 31 日付で退官

小林 速 男 (教授)

A-1) 専門領域：固体化学

A-2) 研究課題

- a) 新規分子性金属・超伝導体の開発
- b) 分子性磁性金属の開拓
- c) 構造相転移と低温 X 線結晶構造解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 分子性金属結晶の物性研究の発展速度は極めて急速である。現在では分子性超伝導体の数も 60 を超えた。しかし、転移温度をコントロールするための分子設計は殆ど皆無である。現在可能なことは実例を増やし、 T_c の決定要因を探る事である。今年度は昨年度に続き λ -型構造を持つ新有機超伝導体を報告した。我々のグループとしては 11 例目である。今後、一連の λ -型超伝導体を比較検討し、転移機構を探る。また、最近 C_{60} の金属性化合物を初めて溶液法で成長させている。
- b) 新しいタイプの π 分子性金属として磁性イオンを内包する伝導体が、興味を集めるようになった。しかし、局在磁気モーメントと金属電子が低温まで共存出来る系は従来極めて少なく、二つのグループが得ているだけである。我々の系は BETS 分子と MX_4 ($M=Fe, Co, Cu; X=Cl, Br$) の形成する系である。伝導電子と磁気モーメントの相互作用、基底状態の吟味、磁気秩序をもつ π 分子性金属の設計等が今後の課題である。
- c) 近年、超伝導、強磁性など分子性結晶の低温物性が盛んとなった。結晶構造解析は物性研究を支える上で重要であるが、極く最近まで構造化学者の低温構造実験は液体窒素吹き付け法に限られ、温度も 90K 程度が限界であった。一昨年私たちはイメージングプレート X 線検出器と循環式ヘリウム低温装置を組み合わせた装置を立ち上げ、10K 程度の低温での構造研究を可能とした。最初の適応例として二次元安定金属 $[(CH_3)_2(C_2H_5)_2N][Ni(dmit)_2]_2$ の構造を決め、低温磁気抵抗の振動周期から予想されるバンド構造との対応を調べた。

B-1) 学術論文

H. KOBAYASHI, H. TOMITA, H. MORIYAMA, A. KOBAYASHI and T. WATANABE, "New Metallic C_{60} Compound: $Na_xC_{60}(THF)_y$ ", *J. Am. Chem Soc.*, **116**, 3153 (1994).

S. HOTTA and H. KOBAYASHI, "Crystal and Molecular Structure of a Charge-Transfer Complex Between α , α' -Dimethylquaterthiophene and 2,3,5,6-Tetrafluoro-7,7,8,8-Tetracyanoquinodimethane", *Syn. Met.*, **66**, 117 (1994).

A. TATENO, T. UDAGAWA, T. NAITO, H. KOBAYASHI, A. KOBAYASHI and T. NOGAMI, "Crystal Structures and Electronic Properties of the Radical Salts of Unsymmetrical Donor EOTT [4,5-Ethylenedithio-4', 5'-(2-oxatrimethylenedithio) tetrathiafulvalene]", *J. Mater. Chem.*, **4**, 1559 (1994).

F. GOZE, V. N. LAUKHIN, L. BROSSARD, A. AUDOUARD, J. P. ULMET, S. ASKENAZY, T. NAITO, H. KOBAYASHI, A. KOBAYASHI, M. TOKUMOTO and P. CASSOUX, "Magnetotransport Measurements on the λ -Phase of the Organic Conductors $(BETS)_2MCl_4$ ($M=Ga, Fe$). Magnetic Field Restored Highly Conducting State in λ -($BETS$) $_2FeCl_4$ ", *Europhysics Lett.*, **28**, 427 (1994).

K. AWAGA, T. OKUNO, Y. MARUYAMA, A. KOBAYASHI, H. KOBAYASHI, S. SCHENK and A. E. UNDERHILL, "Possible "re-entrant" behaviour in Magnetic Properties of $TBA[Fe(tdas)_2]$ ", *Inorg. Chem.*, **33**, 5598 (1994).

- A. KOBAYASHI, T. NAITO and H. KOBAYASHI, "Crystal and Electronic Structures of Two-Dimensional Molecular Metal Based on Transition Metal Complex Molecules, α - $[(CH_3)_2(C_2H_5)_2N][Ni(dmit)_2]_2$ ", *Phys. Rev.* **B51**, 3198 (1995).
- T. NAITO, A. SATO, K. KAWANO, A. TATENO, H. KOBAYASHI and A. KOBAYASHI, "The New Synthetic Metals of $M(dmise)_2$: $[(CH_3)_3HN][Ni(dmise)_2]_2$ and EDT-TTF $[Ni(dmise)_2]$ ", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, **351** (1995).
- M. INOKUCHI, H. TAJIMA, A. KOBAYASHI, T. OHTA, H. KURODA, R. KATO and H. KOBAYASHI, "Electrical and Optical Properties of α -(BETS) $_2I_3$ and α -(BEDT-STF) $_2I_3$ ", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **68**, 547 (1995).
- T. NAITO, H. TOMITA, A. TATENO, T. UDAGAWA, H. KOBAYASHI and A. KOBAYASHI, "Charge-transfer Salts of Some Unsymmetrical Donors Derived from BETS (BETS= Bis(ethylenedithio)tetraselenafulvalene)", *Syn. Met.*, **70**, 1157 (1995).
- K. OSHIMA, T. TAKAMASU, N. MIURA, R. KATO and A. KOBAYASHI and H. KOBAYASHI, "Field Induced State and Hysteresis Effect in (DMET-TSeF) $_2AuI_2$ ", *Syn. Met.*, **70**, 863 (1995).
- K. SEYA, Y. KOBAYASHI, T. NAKAMURA, T. TAKAHASHI, Y. OSAKO, H. KOBAYASHI, R. KATO, A. KOBAYASHI and H. IMOTO, "Magnetic Properties of the Insulating State of the Organic Superconductor, β - $[(CH_3)_4N][Pd(dmit)_2]_2$ ", *Syn. Met.*, **70**, 1043 (1995).
- A. KOBAYASHI, T. NAITO and H. KOBAYASHI, "Low-temperature Crystal and Band Electronic Structures of Metallic $M(dmit)_2$ ($M=Ni, Pd$) Compounds", *Syn. Met.*, **70**, 1047 (1995).
- H. TAJIMA, M. INOKUCHI, S. IKEDA, M. MARIFUKU, T. NAITO, M. TAMURA, T. OHTA, A. KOBAYASHI, R. KATO, H. KOBAYASHI and H. KURODA, "Coexistence of Superconductivity with CDW(or SDW) ambient-pressure superconductor based on $Ni(dmit)_2$, α -EDT-TTF $[Ni(dmit)_2]_2$ ", *Syn. Met.*, **70**, 1035 (1995).
- K. OSHIMA, H. OKUNO, K. KATO, R. MARUYAMA, R. KATO, A. KOBAYASHI and H. KOBAYASHI, "Superconductivity and Field Induced States in DMET-TSeF Family", *Syn. Met.*, **70**, 861 (1995).
- H. TAJIMA, M. INOKUCHI, T. OHTA, A. KOBAYASHI, T. SASAKI, N. TOYOTA, R. KATO and H. KOBAYASHI, "Magnetotransport Study of α -Et $_2$ Me $_2N[Ni(dmit)_2]_2$ and Related Materials", *Syn. Met.*, **70**, 1051 (1995).
- T. NAKAMURA, A. E. UNDERHILL, A. T. COOMBER, R. H. FRIEND, H. TAJIMA, A. KOBAYASHI and H. KOBAYASHI, "Unusual Crystal and Electrical Properties of Tetraphenylphosphonium- $Ni(dmit)_2$ ", *Syn. Met.*, **70**, 1061 (1995).
- K. ISHIDA, Y. KITAOKA, H. MASUDA, K. ASAYAMA, T. TAKAHASHI, K. KANODA, A. KOBAYASHI, R. KATO and H. KOBAYASHI, "Cu NMR Study of Organic Conductor DCNQI-Cu System", *Syn. Met.*, **71**, 1915 (1995).
- A. KOBAYASHI, T. NAITO and H. KOBAYASHI, "Low-temperature Crystal and Band Electronic Structures of Organic Metals, α -(BETS) $_2I_3$ and (MeBr-DCNQI) $_2Cu$ ", *Syn. Met.*, **70**, 1087 (1995).
- A. E. UNDERHILL, A. CHARLTON, S. B. WILKES, I. R. BUTLER, A. KOBAYASHI and H. KOBAYASHI, "Developments in the Chemistry of Sulphur-Donor Ligands", *Syn. Met.*, **70**, 1101 (1995).
- Y. NISHIO, T. TEGA, K. KAJITA, H. KOBAYASHI, S. AONUMA, H. SAWA and R. KATO, "Giant Peak in the Specific Heat of Selectively Deuterated (DMe-DCNQI) $_2Cu$ ", *Syn. Met.*, **71**, 1947 (1995).
- K. HIRAKI, Y. KOBAYASHI, T. NAKAMURA, T. TAKAHASHI, S. AONUMA, H. SAWA, R. KATO and H. KOBAYASHI, "Magnetic Structure of the Antiferromagnetic State of DCNQI-Cu Salts", *Syn. Met.*, **70**, 1091 (1995).

M. TAMURA, H. SAWA, Y. KASHIMURA, S. AONUMA, M. KINOSHITA and H. KOBAYASHI, "Magnetic Properties of DCNQI-Cu Systems", *Syn. Met.*, **70**, 1081 (1995).

T. TEGA, Y. NISHIO, K. KAJITA, R. KATI and H. KOBAYASHI, "Magnetic Properties of (DMe-DCNQI)₂Cu Under Uniaxial Stress", *Syn. Met.*, **71**, 1953 (1995).

H. KOBAYASHI, H. MORIYAMA, A. KOBAYASHI and T. WATANABE, "Synthesis and Characterization of Some Fulleride Compounds by Electrocrystallization of C₆₀", *Syn. Met.*, **70**, 1451(1995).

P. CASSOUX, L. BROSSARD, M. TOKUMOTO, H. KOBAYASHI, A. MORADPOUR, D. ZHU, M. MIZUNO and E. YAGUBSKII, "New Results on Molecular Inorganic and Organic Conductors", *Syn. Met.*, **70**, 1845 (1995).

F. GOZE, V. N. LAUKHIN, L. BROSSARD, A. AUDOUARD, J. P. ULMET, S. ASKENAZY, T. NAITO, H. KOBAYASHI, A. KOBAYASHI, M. TOKUMOTO and P. CASSOUX, "Suppression of Insulating State in (BETS)₂FeCl₄ by Magnetic Field", *Syn. Met.*, **71**, 1901 (1995).

H. KOBAYASHI, H. TOMITA, T. UDAGAWA, T. NAITO and A. KOBAYASHI, "New Organic Superconductor, λ -(BEDT-TTF)₂GaCl₄ and Metal-Insulator Transition of BETS Conductor with Magnetic Anions (BETS= bis(ethylenedithio)tetraselenafulvalene)", *Syn. Met.*, **70**, 867 (1995).

S. KAGOSHIMA, Y. SAITO, T. HASEGAWA, N. WADA, H. YANO, R. KATO, N. MIURA and H. KOBAYASHI, "Magnetic-field Effects on the Reentrance Transition on the Alloy of Pristine and Fully Deuterated (DMe-DCNQI)₂Cu", *Syn. Met.*, **70**, 1065 (1995).

T. NAKAMURA, A. E. UNDERHILL, A. T. COOMBER, R. H. FRIEND, H. TAJIMA, A. KOBAYASHI and H. KOBAYASHI, "Crystal Structure and Electrical Properties of Tetraphenylphosphonium-Ni(dmit)₂", *Inorg. Chem.*, **34**, 870 (1995).

K. HIRAKI, Y. KOBAYASHI, T. NAKAMURA, T. TAKAHASHI, S. AONUMA, H. SAWA, R. KATO and H. KOBAYASHI, "Magnetic Structure in the Antiferromagnetic State of the Organic Conductor, (DMe-DCNQI[3,3:1]d₇)₂Cu:1H-NMR Analysis", *J. Phys. Soc. Jpn.*, **64**, 2203 (1995).

H. KOBAYASHI, H. TOMITA, T. NAITO, H. TANAKA, A. KOBAYASHI and T. SAITO, "A New Organic Superconductor, λ -(BEDT-TSF)₂GaBrCl₃ [BETS= bis(ethylenedithio)tetraselenafulvalene]", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 1225(1995).

H. MORIYAMA, H. KOBAYASHI, A. KOBAYASHI and T. WATANABE, "ESR Spectra on Single Crystals of Alkali Metal Fulleride Complexes by Means of Wet-Chemical Synthesis", *Chem. Phys. Lett.*, **238**, 116 (1995).

F. GOZE, V. N. LAUKHIN, L. BROSSARD, A. AUDOUARD, J. P. ULMET, S. ASKENAZY, T. NAITO, H. KOBAYASHI, A. KOBAYASHI, M. TOKUMOTO and P. CASSOUX, "Angular and magnetic field dependences of the magnetoresistance of λ -(BEDT-TSF)₂FeCl₄ in the field-induced high conductivity state", *Physica B* **211**, 290 (1995).

K. ISHIDA, Y. KITAOKA, H. MASUDA, K. ASAYAMA, T. TAKAHASHI, A. KOBAYASHI, R. KATO and H. KOBAYASHI, "Cu NMR Study in DCNQI-Cu System", *J. Phys. Soc. Jpn.*, **64**, 2970 (1995).

B-4) 招待講演

H. KOBAYASHI, "Molecular metals with π -d interactions- DCNQI-Cu Systems and BETS Compounds" Taejon, February 1995.

B-6) 学会及び社会活動

会誌編集委員

日本化学会トピックス委員(1970-1972)

日本化学雑誌編集委員(1981-83)

日本結晶学会誌編集委員(1984-86)

C) 研究活動の課題と展望

(1)近年、分子性結晶を舞台とし、 π 電子による金属状態、超伝導状態が実現し、意外にも異方性の大きな平面 π 分子から比較的容易に理想的な二次元金属状態を作り得ることが判明した。今後この π 電子金属の舞台に新たな役者を登場させる方策が検討され、分子性結晶の電子物性は多彩さを増して行くものと思われる。

(2)最近、低温 X 線結晶構造解析装置を立ち上げた。引き続き、高圧下の単結晶構造研究を行い、物性研究・物質開発の発展に資する道を探索する。

宮 島 清 一 (助教授)

A-1) 専門領域：凝縮系の磁気共鳴分光学

A-2) 研究課題

- a) パルス磁場勾配 NMR 法の開発
- b) 液晶の相転移とダイナミクス
- c) グラファイト等低次元電子系の物性

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 凝縮系における分子の並進運動を、振動や回転の自由度から切り離して選択的に測定する手法としてパルス磁場勾配 NMR 法がある。この手法をスピン間が強く双極子結合した系の、しかも異方的な拡散係数 (D) テンソルの測定へと拡張するために、新たな分光器を開発、製作した。回転 4 極コイルによって生じる 7.8Tm^{-1} の 2 次元磁場勾配によって液晶の異方的な D テンソルを決定した。
- b) 液晶における反強誘電秩序の微視的起源を明らかにするために ^{13}C NMR による実験研究を行った。その結果、極性分子間の双極子相互作用による安定化を実現するうえで有利に作用する分子構造 (いわゆる屈曲鎖モデル) が液晶状態で実現していることを立証した。
- c) 最外殻に 1 個の s 電子を持つアルカリ金属原子と水素は、グラファイト層間に挿入された時、多彩な電子構造をとることが期待される。ナトリウム-水素-グラファイト 3 元化合物について、 ^{13}C , ^1H , 及び ^{23}Na の NMR 実験を行い、その電子及び格子構造を研究した。挿入原子から母体の炭素への電荷移動量を定量的に明らかにすると共に、Na 層の電場勾配テンソルが扁平型であること等を明らかにした。有機電荷移動錯体において伝導帯の電子数を制御するために、ハロゲン置換によって電子受容体の電子親和力を調節した新しい BEDT-TTF 錯体を合成し、その構造と物性を検討した。

B-1) 学術論文

S. MIYAJIMA, T. CHIBA, G. SAITO and H. INOKUCHI, "Solid-State High-Resolution ^{13}C NMR Study of the Intermolecular Interaction in Organic Semiconductors TTCn-TTF", *J. Phys. Chem.*, **99**, 1582-1586 (1995).

S. MIYAJIMA and T. HOSOKAWA, " ^1H and ^2H NMR Studies of Dynamic Orientational, Translational and Dipolar Orders in the Doubly Reentrant Liquid Crystal 4-Cyanobenzoyloxy-[4-Octylbenzoyloxy]-*p*-Phenylene and Its Deuterated Analogue", *Phys. Rev.*, **B52**, 4060 (1995).

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**, 651 (1995)

H. GOTO, H. ASAH, T. INABE, H. OGATA, S. MIYAJIMA and Y. MARUYAMA, "High-Resistance Phase and Low-Resistance Phase in 1,6- Diaminopyrene-*p*-Chloranil (DAP-CHL)", *Synth. Metals*, **70**, 1237 (1995).

Y. OCHIAI, K. YAMAMOTO, H. YAMASAKI, Y. SHIONOIRI, H. OGATA, Y. MARUYAMA, "Transport Property of C_{60} and C_{70} Single Crystals", *Fullerene Sci. & Technology*, **3**, 79 (1995).

T. MOCHIDA, A. IZUOKA, T. SUGAWARA, Y. MORITOMO and Y. TOKURA, "Dielectric Relaxation Derived from Collective Molecular Reorientation of 9-Hydroxyphenalenone in the Solid-State", *J. Chem. Phys.*, **100**, 6046 (1994).

T. MOCHIDA, A. IZUOKA, T. SUGAWARA, Y. MORITOMO and Y. TOKURA, "Organic Hydrogen-Bonded Dielectrics : Quantum Paraelectricity Based on Tautomerization of 9-Hydroxyphenalenone Derivatives", *J. Chem. Phys.*, **101**, 7971 (1994).

Y. MORITOMO, Y. TOKURA, T. MOCHIDA, T. SUGAWARA, T. OOHASHI, T. KOJIMA and A. ITSUBO, "Anomalous Pressure-Effects on the Raman Spectra in Hydrogen-Bonded Molecular Chain Systems", *J. Chem. Phys.*, **101**, 1813 (1994).

Y. NODA, I. TAMURA, Y. KUROIWA, T. MOCHIDA and T. SUGAWARA, "Incommensurate-Commensurate Phase Transition of Intramolecular Hydrogen-Bonded System : 5-Bromo-Deuteroxyphenalenone (d-BrHPLN)", *J. Phys. Soc. Jpn*, **63**, 4286 (1994).

Y. MORITOMO, Y. TOKURA, T. MOCHIDA, A. IZUOKA and T. SUGAWARA, "Isotope Effect on the Incommensurate Phase Transition of 5-Bromo-Hydroxyphenalenone", *J. Phys. Soc. Jpn*, **64**, 1892 (1995).

T. NAKAI and C. A. MCDOWELL, "Product Operator Theory for ABX Spin Systems and its Application to H-C-C INEPT NMR Experiments", *Mol. Phys.*, **81**, 337 (1994).

T. NAKAI and C. A. MCDOWELL, "Residual Chemical-Shift Effects in Spin-Echo NMR Powder Patterns of Homonuclear Dipolar-Coupled Spins", *Chem. Phys. Lett.*, **217**, 234 (1994).

T. NAKAI and C. A. MCDOWELL, "Characterization of Homonuclear Spin Pairs from Two-Dimensional Spin-Echo NMR Powder Patterns", *J. Am. Chem. Soc.*, **116**, 6373 (1994).

T. NAKAI and C. A. MCDOWELL, "Spinning-Frequency Dependent Linewidths in ^1H -Decoupled ^{13}C Magic-Angle Spinning NMR Spectra", *J. Magn. Reson.*, **A112**, 199 (1995).

T. NAKAI and C. A. MCDOWELL, "Selective Detection of Homonuclear Spin-Pair Signal in Rotating Solids Using Rotor/RF-Driven Spin Exchange", *J. Magn. Reson.*, **A112**, 199 (1995).

T. NAKAI and C. A. MCDOWELL, "Determination of Spin Parameters Reflected in NMR Powder Patterns for Two Equivalent ^{31}P Nuclei in Lawesson's Reagent", *Solid State Nucl. Magn. Reson.*, **4**, 163 (1995).

B-3) 総説, 著書

宮島清一, 緒方啓典「NMR で見る分子のダイナミクス— C_{60} を例として—」日本結晶学会誌, **37** 巻 1 号, 10-17 (1995)

首原正, 持田智行「プロトンダイナミクスを利用した低次元有機誘電体の設計」固体物理, **30** 巻 3 号, 293-302 (1995)

B-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常任幹事 (1995)

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)

学会の組織委員

第 20 回液晶討論会実行委員 (1993-94)

C) 研究活動の課題と展望

NMR 分光学の手法を凝縮系の物性研究に創造的に適用すること，及びそれを基礎に新しい物質系を開拓することが一貫した課題である。実験装置の面では2年間取り組んできた，回転できる4極コイルを用いた2次元パルス磁場勾配スピンエコーNMR 装置が完成したので，これを用いた物性研究を展開すると共に，2重共鳴への展開を図る。液晶物性としては，競合する相互作用，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。

3-5 相關領域研究系

相關分子科学第一研究部門

渡 辺 芳 人 (教授)

A-1) 専門領域：生物有機化学，生物無機化学

A-2) 研究課題

- a) 高原子価状態にある鉄ポルフィリン錯体の構造，電子状態，および反応性に関する研究
- b) 亜硝酸還元酵素の作用機構及び活性中心の特異な構造に関する研究
- c) ヘム酸化酵素によるポルフィリン環酸化反応の作用機構のモデル研究
- d) ペルオキシ-Fe(III)ポルフィリン錯体の合成及び反応性に関する研究
- e) 人工シトクローム P-450 の分子設計
- f) ペルオキシダーゼによる過酸化水素の活性化過程に果たす周辺アミノ酸の役割解明
- g) 有機溶媒に可溶なハイブリッドヘム酵素の合成と，不安定中間体のキャラクタリゼーション

A-3) 研究活動の概要と主な成果

- a) 多様な酸化反応を触媒するヘム酵素は，休止状態では Fe(III)で安定に存在している。しかしながら，酸化剤の供給を受けると，休止状態から2電子酸化された O=Fe(IV)ポルフィリン π カチオンラジカルを酸化活性種として生成していると考えられている。本研究では，合成鉄ポルフィリン錯体を用いて，O=Fe(IV)ポルフィリン π カチオンラジカルや同じ電子状態にある O=Fe(V)ポルフィリン，さらには，それらの前駆体である過酸-Fe(III)付加体を合成し，電子状態や酸化反応活性などを詳しく検討している。特に，O=Fe(V)ポルフィリンは今回はじめて合成に成功した錯体であり，これによって，ポルフィリン π カチオンラジカルが果たす役割解明が可能となるものと期待される。
- b) 赤パンカビのカタラーゼなどから得られる異化型亜硝酸還元酵素は，その活性中心が *heme d* と呼ばれる異常なヘム骨格を有し，NO₂⁻を NO へと還元する反応を触媒している。そこで，*heme d* のモデル錯体として dioxoisobacteriochlorin-Fe(III)錯体を合成し，NO₂⁻の還元過程の詳細について検討を加えた。さらに，同様な還元反応をポルフィリン錯体を用いて行い，本酵素が特異なヘム骨格を有している理由を明らかとした。即ち，特異なヘム骨格が中心の鉄原子の酸化還元電位を選択的に制御する事により，高い触媒活性を示す点を初めて明らかとした。
- c) 生体内でのヘムの代謝は，ヘム酸化酵素(heme oxygenase)によって行われている。本反応はヘムのメソ位が水酸化され，それに続く多くの反応過程を経てヘムの酸化的分解を行っているが，もっとも重要なメソ位の水酸化機構が全く不明なままとなっている。そこで，種々の合成鉄ポルフィリン錯体と過酸の反応を極低温下で行い，複数の中間体を通してメソ位の水酸化が進行していることを明らかとした。現在，中間体のキャラクタリゼーションと反応機構の詳細の検討を行っている。
- d) シトクローム P-450 が触媒する反応の中に，ペルオキシ-Fe(III)ポルフィリン錯体が活性種と考えられる反応が幾つか存在する。特に，アンドロゲンを経口エストロゲンに変換する女性ホルモン合成系は生化学的にも重要であり，

その詳細の解明が期待されている。しかしながら、酵素を用いた反応系では、ペルオキシ中間体を観測することすら出来ないで、その合成モデル系を用いて、ペルオキシ中間体の反応性に関する研究を行っている。ペルオキシ錯体が高い求核性を有し、アルデヒドやカルボニル炭素と反応することを最近明らかとしているが、当面の目標を、酵素が行っている変換反応のモデル系での再現と、反応機構の解明においている。

- e) シトクローム P-450 一酸素原子添加酵素であり、種々のステロイドホルモンの合成や、外来性物質の酸化的代謝過程に関わる重要なヘム酵素である。他のヘム酵素と大きく異なる構造的な特徴として、軸配位子がシステイン由来のチオレートである点が挙げられる。酵素活性の発現にチオレートが果たす役割の解明を目指し、本来酸化酵素としての活性を持たないミオグロビンに対し部位特異的なアミノ酸置換を行い、軸配位子をシステインへと変換した。同時に、遠位側にあるヒスチジン残基をアラニンやバリンへと置き換えたダブルミュータントの合成も行い、酸化活性種生成過程におけるチオレートの役割を実験的に初めて明らかとすることに成功した。
- f) ペルオキシダーゼとミオグロビンの活性部位の構造を比較すると、非常に類似していることに気がつく。ところが、過酸化水素との反応を比較すると、前者は非常に高い酸化活性を有する compound I と呼ばれる化学種を選択的に与えるのに対し、後者は、反応性の低い compound II を主生成物として与える。これは、それぞれが異なる反応機構により過酸化水素と反応するためと考えられているが、その理由は明らかとなっていない。本研究課題では、遠位側ヒスチジンの水素結合の有無によってその塩基性が変化し、過酸化水素の活性化過程に違いが見られると考え、西洋わさびペルオキシダーゼの遠位ヒスチジンと水素結合を形成しているアスパラギンをバリンへと変換し、過酸化水素との反応を検討した。その結果、compound I の生成速度が約 1/30 へと減少し、さらに、compound I の反応性も大きく減少することを見いだした。現在、ミオグロビンの遠位ヒスチジンの空間的配置をペルオキシダーゼに近い位置に移動したミュータントを作成し、ペルオキシダーゼ活性の賦与について検討を行っている。
- g) ヘム酵素による酸化活性種のキャラクタリゼーションと生成機構解明を行う際の最大の障害は、中間体の直接観測の困難さにある。緩衝溶液の反応は温度を下げる事が出来ず、不安定化学種は瞬時に分解してしまい、分光器の時間スケールでは反応過程を追跡できないことが多い。そこで、ヘム酵素をポリエチレングリコールなどで化学修飾した有機溶媒可溶なハイブリッド酵素を合成し、有機溶媒中、極低温下で反応を行うことで、不安定化学種の寿命を長くし、その直接観測を行うことを検討している。

B-1) 学術論文

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).

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. Am. Chem. Soc.* **116**, 3439 (1994).

S. NAGANO, M. TANAKA, Y. WATANABE and I. MORISHIMA, "Putative Hydrogen Bond Network in Distal Site of Horseradish Peroxidase", *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **207**, 417 (1995)

K. MACHII, Y. WATANABE and I. MORISHIMA, "Acylperoxo-Iron(III) Porphyrin Complexes: A New Entry of Potent Oxidants for the Alkene Epoxidation", *J. Am. Chem. Soc.* **116**, 6691 (1995).

B-3) 総説, 著書

渡辺芳人, 石森浩一郎, 森島績, 「生物無機化学の新展開」第7章 ヘム酵素の機能発現と構造因子, 季刊化学総説, No 24, 61-86 (1995)

B-6) 学会及び社会活動

学協会役員, 委員

日本化学会近畿支部常任幹事 (1994)

触媒学会生体関連触媒研究会幹事 (1988 -)

基礎生物工学会幹事 (1994 -)

B-7) 他大学での講義

京都大学工学部 (1994 年 10 月 - 1995 年 3 月)

岡山理科大学基礎理学科 (1994 年 11 月)

富山大学工学部 (1995 年 2 月)

C) 研究活動の課題と展望

これまで私どもの研究グループでは, 酵素の活性部位の構造及び反応性を再現する合成モデル系を開発してきた。しかしながら, チトクローム P-450 やクロロペルオキシダーゼなどの反応活性種については, 未だに不明のままであり, こうした酵素の活性種の可能なモデル錯体の合成が第一の研究課題である。更に, ミュータントやハイブリッド体を含む酵素系を用いて, 同様な化学種の直接観測が第二の課題である。最終的には酵素の活性発現の作用機構に関する研究成果を基に, 人工ヘム酵素の分子設計を行う。

井 上 克 也 (助教授) *)

A-1) 専門領域：固体物性化学

A-2) 研究課題

- a) 高スピン π -共役ポリニトロキシドラジカルを配位子とする遷移金属錯体の合成と物性に関する研究
- b) 新規高スピン有機ラジカル合成の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 高スピン π -共役ポリニトロキシドラジカルを配位子とする遷移金属錯体の合成と物性に関する研究：高次元の磁気構造を持つ分子磁石の新しい構築手法として、高スピン有機ラジカルを遷移金属錯体を介して自己組織化するという方法を提案した。この手法に従い一次元、二次元、さらには三次元の磁気構造を持つ分子磁石の構築および構造解析に成功した。三次元の磁気構造を持つ分子磁石では磁気相転移温度の記録を更新したほか、一次元、二次元の分子磁石ではその次元に特徴的な磁性を発現させることができた。さらに高温の転移温度を持つ分子磁石の構築、および付加機能を持つ分子磁石の構築を進めている。
- b) 新規高スピン有機ラジカル合成の研究：安定ラジカル置換基としてよく知られているニトロキシド基、およびニトロニトロキシド基を持つピラジカルを合成し、その構造から予想されるスピン間強磁性的相互作用をはるかに上回る強い強磁性的相互作用を観測した。この相互作用はX線結晶構造解析から得られた分子構造をもとに説明することができた。

B-1) 学術論文

H. HIGUCHI, S. KIYOTO, C. SAKON, N. HIRAIWA, K. ASANO, J. OJIMA, K. INOUE and G. YAMAMOTO, "Synthesis and Properties of a Bismethano-bridged Bisdehydro[21]annulenone. Conformation in Solution and in the Crystalline State", *Chem. Lett.*, 2291 (1994).

H. HIGUCHI, C. SAKON, K. ASANO, J. OJIMA, M. IYODA, K. INOUE and G. YAMAMOTO, "Unusual Formation of Tricyclic Annulenediones: Diatropic Cationic 10π -Electron Species in D_2SO_4 ", *J. Chem. Soc., Perkin Transactions 1*, 2915 (1994).

K. INOUE and H. IWAMURA, "One-Dimensional Ferro- and Ferrimagnetic Chains Made of an Alternating Array of 1,3-Bis(*N*-*tert*-butyl-*N*-oxyamino)benzene and $Mn(II)(hfac)_2$ ", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 2274 (1994).

Y. ISHIMARU, K. INOUE, N. KOGA and H. IWAMURA, "Structures and Magnetic Properties of Bis(hexafluoroacetylacetonate) manganese(II) Ligated with *N*-[3- and 4-(*N*-*tert*-Butyl-*N*-oxyaminophenyl)]imidazole", *Chem. Lett.*, 1693 (1994).

M. KITANO, Y. ISHIMARU, K. INOUE, N. KOGA and H. IWAMURA, "Exchange Interaction in Metal-Radical Systems: Chloro(*meso*-tetraphenylporphyrinato)chromium(III)'s and (Hexafluoroacetylacetonate) manganese(II) Ligated with 3- and 4-(*N*-Oxy-*N*-*tert*-butylamino)pyridines", *Inorg. Chem.*, **33**, 6012 (1994).

K. MATSUDA, K. INOUE, N. KOGA, N. NAKAMURA and H. IWAMURA, "Photochemical Production of Highly Ordered Spins in Organic Solids", *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **253**, 33 (1994).

K. INOUE and H. IWAMURA, "One or Two-Dimensional Ferro- and Ferrimagnetic Ordering Formed by Manganese(II) Complexes with *p*-Conjugated Polynitroxide Radicals", *Synthetic Metals*, **71**, 1793 (1995).

K. INOUE and H. IWAMURA, “2-[*p*-(*N*-*tert*-Butyl-*N*-oxyamino)phenyl]-4,4,5,5-tetramethylimidazolin-1-oxyl-3-oxide, a Stable Diradical with a Triplet Ground State”, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **34**, 927 (1995); *Angew. Chem.*, **107**, 973 (1995).

T. MITSUMORI, K. INOUE, N. KOGA and H. IWAMURA, “Exchange Interactions between Two Nitronyl Nitroxide or Iminyl Nitroxide Radicals Attached to Thophene and 2,2'-Bithienyl Rings”, *J. Am. Chem. Soc.*, **117**, 2467 (1995).

K. MATSUDA, N. NAKAMURA, K. TAKAHASHI, K. INOUE, N. KOGA and H. IWAMURA, “Design, Synthesis and Characterization of Three kinds of π -Cross-Conjugated Hexacarbenes with Super-High-Spin ($S = 6$) Groud States”, *J. Am. Chem. Soc.*, **117**, 5550 (1995).

G. YAMAMOTO, K. KUWAHARA and K. INOUE, “Structure and Stereodynamics of N-9-Triptycyl -O-phenylhydroxyamine, an Unusual Product by the Reaction of 9-Nitrosotriptycene and Phenyllithium”, *Chem. lett.*, **351** (1995).

K. INOUE, T. HAYAMIZU and H. IWAMURA, “One-Dimensional Ferrimagnetic Chains with Weak Ferromagnetic Interchain Interaction in a 1 : 1 Manganese(II) Hexafluoroacetylacetonate Complex with Bis[3-*tert*-butyl-5-(*N*-oxy-*tert*-butylamino)phenyl] Nitroxide”, *Chem. lett.*, **745** (1995).

B-4) 招待講演

井上克也, 「分子性強磁性体の分子設計, 合成および磁性」日本化学会第6秋季年会 (若い世代の特別講演会) (名古屋), 1994年10月

B-5) 受賞, 表彰

井上研究奨励賞 井上克也, 1995年

C) 研究活動の課題と展望

高スピン有機ラジカルを遷移金属錯体を介して自己組織化するという新しい方法は高温分子磁石の構築に極めて有効であることがわかったので, 今後はさらに高温で磁気相転移を起こす分子磁石の構築と共に分子磁石で初めて可能となる付加機能 (光応答性, 光透過性) を持つ高温分子磁石の構築を行う。

*) 1996年1月1日着任

磯 辺 清 (助教授) *)

A-1) 専門領域：錯体化学

A-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) ヘリカルキラリティーを持つ高分子錯体の合成的研究

A-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

$[\eta\text{-Bu}_4\text{N}]_2[(\eta^4\text{-C}_8\text{H}_{14})_2\text{Rh}]_2(\text{V}_4\text{O}_{12})$ においてバナジウム酸化物イオンに配位した Rh(diene)基が、その酸化物イオンの表面をピボット運動していることを見いだした。この反応の反応動力学的解析を試み、interchange I 機構で進行してい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

$\text{M}(\mu\text{-XH})\text{M}$ (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、 $[(\text{RhCp}^*)(\mu\text{-CH}_2)_2(\mu\text{-SH})]^+$ とアセチレン誘導体との反応より、珍しい炭素-炭素結合生成が起こり、 $[(\text{Cp}^*\text{Rh})_2(\mu\text{-SC}(\text{COOEt})\text{CH}(\text{COOEt}))\eta^2:\eta^2\text{-}\mu\text{-CH}_2\text{C}(\text{COOEt})\text{C}(\text{COOEt})\text{CH}_2]^+$ が生成することが分かった。また三核錯体 $[\text{Cp}^*\text{RhP}(\text{OEt})_3(\mu\text{-WS}_4)(\text{CuCl})\text{Cu}]$ が珍しい枝分かれ構造を持つ八核錯体 $[\{\text{Cp}^*\text{RhP}(\text{OEt})_3(\mu\text{-WS}_4)(\text{CuCl})\text{Cu}\}_2(\mu\text{-Cl})_2]$ そして不完全立方体構造を持つ八核錯体 $[\{\text{Cp}^*\text{RhP}(\text{OEt})_3(\mu\text{-WOS}_3)(\text{CuCl})\text{Cu}\}_2(\mu\text{-Cl})_2]$ へもとに戻る反応を見いだした。

- 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 $[\text{RhCl}_3(\text{tmpme})]$ 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 $[\{\text{Rh}(\text{tmpme})\text{H}\}_2(\mu\text{-H})_2](\text{BF}_4)_2$ 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) ヘリカルキラリティーを持つ高分子錯体の合成的研究

新奇光学活性ピリジン誘導体配位子(4R,5R)-と(4S,5S)-4,5bis(2-(2-pyridyl)ethyl)-1,3-dioxolane を合成し、 Ag^+ と錯形成させたところ、それぞれユニークな左巻きと右巻き螺旋構造を持つポリマーが生成し、1:1 混合配位子を用いた場合の二核銀錯体が生成することを見いだした。いずれも X-線構造解析によって構造を明らかにした。

B-1) 学術論文

T. NISHIOKA and K. ISOBE, "Syntheses and Crystal Structures of Triangular Rhodium and Iridium Complexes with Triply Bridging Sulfido Ligands", *Chem. Lett.*, 1661(1994).

K. ISOBE, Y. OZAWA, A. VÁZQUEZ DE MIGUEL, T. -W. ZHU, K. -M. ZHAO, T. NISHIOKA, T. OGURA and T. KITAGAWA, " $[\{\text{Rh}_2\text{Cp}^*_2(\mu\text{-CH}_2)_2(\mu\text{-S}_4)\}]^{2+}$: A Novel Tetranuclear Cationic Complex with a Rectangular S_4 Unit", *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **33**, 1882 (1994).

M. EBIHARA, T. KAWAMURA, K. ISOBE and K. SAITO, "Influence of a Neutral Terminal Ligand on the Structure and Redox Potential of Hexamolybdenum(12+) Cluster Ion with Mixed Capping Ligand", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **67**, 3119 (1994).

Y. KUSHI, H. NAGAO, T. NISHIOKA, K. ISOBE and K. TANAKA, "Oxalate Formation in Electrochemical CO₂ Reduction Catalyzed by Rhodium-Sulfur Cluster", *Chem. Lett.*, 2175 (1994).

H. OSHIO, A. OHTO, J. FUJISAWA, T. WATANABE, T. ITO and K. ISOBE, "Organo-Rhodium Complex with Tridentate Biradical Ligand, [Rh(Cp*)(bisnitpy)](PF₆)₂", *Chem. Lett.*, 2353 (1994).

M. ABE, K. ISOBE, K. KIDA, A. NAGASAWA and A. YAGASAKI, "Intramolecular Rearrangements of Cyclooctadienylrhodium(I) Fragments Supported on a Vanadium Oxide Cluster as Evidenced by Dynamic ¹⁷O NMR Spectroscopy", *J. Cluster Sci.*, **5**, 565 (1994).

T. SUZUKI, H. KOTSUKI, K. ISOBE, N. MORIYA, Y. NAKAGAWA and M. OCHI, "Drastic Structural Change in Silver(I) Complexes with Alteration of the Optical Activity of a Pyridine Derivative Ligand: Helical Arrays with Extended Structure and an Optically Inactive Dinuclear Complex", *Inorg. Chem.*, **34**, 530 (1995).

A. M. MEBEL, K. MOROKUMA and K. ISOBE, "A Theoretical Study of Rectangular Tetrasulfur in a Gas Phase and in the Tetranuclear [{Rh₂(η⁵-C₅Me₅)₂(μ-CH₂)₂ }₂(μ-S₄)]²⁺ Complex", *Inorg. Chem.*, **34**, 1208 (1995).

S. OGO, T. SUZUKI and K. ISOBE, "A Unique Three-Step Cyclic Reaction Sequence of Heterotrimetallic Sulfide Clusters. Structures and Properties of [{Cp*RhP(OEt)₃(μ-WS₄)(CuCl)Cu }₂(μ-Cl)₂] (Cp* = η⁵-C₅Me₅) with a Branched Structure and [{Cp*RhP(OEt)₃(μ-WOS₃)(CuCl)Cu }₂(μ-Cl)₂] with a Linked Incomplete Cubane-Type Structure", *Inorg. Chem.*, **34**, 1304 (1995).

S. OKEYA, H. KAMEDA, H. KAWASHIMA, H. SHIMOMURA, T. NISHIOKA and K. ISOBE, "C=S Bond Fission in Coordinated Thioureas and Formation of a Sulfide-bridged Dinuclear Pd(II) Complex", *Chem. Lett.*, 501 (1995).

H. KOTSUKI, Y. NAKAGAWA, N. MORIYA, H. TATEISHI, M. OCHI, T. SUZUKI and K. ISOBE, "A Novel Synthesis of Optically Active C₂-Symmetric Pyridine Derivatives. Efficient Reaction of Chiral Triflates with 2-Picolylolithium Reagents", *Tetrahedron: Asymmetry*, **6**, 1165 (1995).

S. OGO, T. SUZUKI, S. NOMURA, K. ASAKURA and K. ISOBE, "Synthesis of a Linear-Type Pentanuclear (Rh^{III}-W^{VI}-Cu^I-W^{VI}-Rh^{III}) Sulfide Cluster Predicted by Fast Atom Bombardment Mass Spectrometry", *J. Cluster Sci.*, **6**, 421 (1995).

B-3) 総説, 著書

磯辺清, 「立方体積層型酸化物クラスター及び類縁体の合成と性質」 *Organometallic News* 1995 年 No. 1(pp 6 - 8)

B-4) 招待講演

K. ISOBE, "Cubane-Type Oxide Clusters as Potential Models for Inorganic Solid Surfaces", Taejeon, Korea February 13-15, 1995.

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

日本化学会 東海支部 幹事 1987 年 4 月-1988 年 3 月

学会の組織委員: "Seventh International Symposium on Relation Between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis" May 17-21, 1992, Tokyo

B-7) 他大学での講義

岐阜大学工学部応用化学科「錯体化学特論」1994年9月20日～1994年9月22日

C) 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ターでは長方形 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。さらに $\text{M}(\mu\text{-XH})\text{M}$ ($\text{X} = \text{S}, \text{Se}$) 基を持つ $[(\text{RhCp}^*)_2(\mu\text{-CH}_2)_2(\mu\text{-SH})]^+$ と不飽和炭化水素との間の特異な炭素-炭素結合生成反応の解明を行う予定である。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。

*) 1994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）^{*)}

A-1) 専門領域：有機化学，生物無機化学，物理有機化学

A-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の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經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関する研究
- 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関する研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- 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：不斉酸化反応に適応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 電子酸化過程を經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にした。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依存性，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 c3 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 c3 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関する研究：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。ピ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，ピオロゲンニ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 van der Waals 相互作用を通じた分子認識により行うことで，高い立体選択性を発現可能であることが示された。

B-3) 総説・著書

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ィク (1994) pp.192-195.

B-5) 受賞，表彰

倉田奨励賞，成田吉徳，1981 年

日本化学会進歩賞，成田吉徳，1981 年

B-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

C) 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創出への展開が期待される。

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。

* 1994 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

1995 年 3 月 31 日まで関連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) ^{*}

A-1) 専門領域：有機合成化学，有機金属化学

A-2) 研究課題

a) 中性子捕捉療法のための癌治療薬の設計と合成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 中性子捕捉療法という新しい癌治療法を目指したホウ素キャリアーの設計・合成，それらの細胞活性試験を主たる目的におき，癌集中性を生み出すのに重要な窒素含有有機構造の設計支援のための合成研究を進めてきた。反応性に富んだ生体内化合物の化学構造を設計するのに有効な遷移金属錯体を触媒量用いる中性条件下での新しい炭素－炭素結合生成反応をいくつか新開発することに成功した。また，従来から臨床応用されているホウ素キャリアー，BPAを上回る活性を有するホウ素キャリアーを新しく設計・合成することに成功した。

B-1) 学術論文

H. NEMOTO, "Synthesis of Boron Carriers for Neutron Capture Therapy and the Studies of Activated Imines", *J. Syn. Org. Chem., Jpn.*, **52**, 1044 (1994).

H. NEMOTO, J. CAI, N. ASAO, S. IWAMOTO, and Y. YAMAMOTO, "Synthesis and Biological Properties of Water-soluble p-Boronophenylalanine Derivatives. Relationship between Water Solubility, Cytotoxicity and Cellular Uptake", *J. Med. Chem.*, **38**, 1673 (1995).

Y. YAMAMOTO, J. CAI, H. NAKAMURA, N. SADAYORI, N. ASAO and H. NEMOTO, "Synthesis of Netropsin and Destamycin Analogues Bearing ortho-Carborane and Their DNA Recognition", *J. Org. Chem.*, **60**, 3352 (1995).

B-5) 受賞，表彰

有機合成化学協会，研究企画賞，1993年2月

有機合成化学協会，奨励賞受賞，1994年2月

C) 研究活動の課題と展望

中性子捕捉療法での実際の臨床応用となると，我々の合成した新規化合物がそこまで到達するには，まだまだ研究の煮詰めや医療に関する制度的な問題があり，かなり時間がかかるであろうが，希望のある化合物である限り，合成法を駆使してバラエティーある構造を合成できる準備を整備しておき，細かい構造最適化に寄与していくようにするのが我々有機合成化学者のつとめであろう。この点ではその名の通りの「核弾頭」に相当するホウ素部分ばかりでなく，有機構造部分の有する，癌／正常細胞の識別能向上のために如何なる論理的あるいは経験的蓄積がなされるかが大切である。

^{*} 1995年4月1日付で徳島大学薬学部助教授

3-6 極端紫外光科学研究系

基礎光化学研究部門

小 杉 信 博 (教授)

A-1) 専門領域：軟X線光物性，光化学

A-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

A-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：軟X線吸収スペクトルと光電子スペクトルが同時測定できる超高真空測定装置を開発し，固体試料に対して共鳴吸収が起きる光エネルギーでの共鳴光電子放出過程を詳細に研究している。共鳴吸収帯が励起的な性格が強い電子状態から構成されている系において光のエネルギーが増えるにつれ共鳴光電子の運動エネルギーが減少するという興味深い現象を初めて観測した。同じような共鳴吸収を示すものでもバンド幅が大きな系ではそのような現象は起きない。
- 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な直線偏光軟X線を利用して，気相分子の吸収スペクトル中に 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てきた。また，分子振動と解離イオンダイナミクスとの関係も解明してきた。現在，炭素，窒素，酸素の内殻に加えて硫黄の 1s 内殻にも測定を拡大し，さらに，直線分子に加えて平面多原子分子も研究対象とし，内殻励起状態が示す新しい現象の研究を進めている。

B-1) 学術論文

J.T.FRANCIS, N.KOSUGI and A.P.HITCHCOCK, "Experimental and Theoretical Studies of the ($C\ 1s^{-1}, \pi^*$) $^3\Pi$ State of CO: Momentum Transfer Dependence and Vibrational Structure", *J. Chem. Phys.* **101**, 10429 (1994).

K.UEDA, M.OKUNISHI, H.CHIBA, Y.SHIMIZU, K.OHMORI, Y.SATO, E.SHIGEMASA and N.KOSUGI, "Rydberg-Valence Mixing in the C 1s Excited States of CH_4 Probed by Electron Spectroscopy", *Chem. Phys. Lett.* **236**, 311 (1995).

M.SIMON, P.MORIN, P.LABLANQUIE, M.LAVOLLEE, K.UEDA and N.KOSUGI, "Dissociation Dynamics of Core-Excited BF_3 Probed by the Photoelectron-Photoion-Photoion Coincidence", *Chem. Phys. Lett.* **238**, 42 (1995).

J. ADACHI, N. KOSUGI, E. SHIGEMASA and A. YAGISHITA, "Renner-Teller Effect and Rydberg-Valence Mixing in the N and O K-edge Photoabsorption Spectra of N_2O ", *J. Chem. Phys.* **102**, 7369 (1995).

E. SHIGEMASA, J. ADACHI, M. OURA and A. YAGISHITA, "Angular Distribution of $1s\sigma$ Photoelectrons from Fixed-in-Space N_2 Molecules", *Phys. Rev. Lett.* **74**, 359 (1995).

P. A. HATHERLY, J. ADACHI, E. SHIGEMASA and A. YAGISHITA, "The Angular Distributions of $1s$ Photoelectrons from Spatially Aligned CO using Angle-resolved PEPICO", *J. Phys. B* **28**, 2643 (1995).

B-2) 国際会議プロシーディングス

K. YAKUSHI, I. SHIROTANI, I. I. KHAIRULLIN, Y. NAKAZAWA, K. KANODA, N. KOSUGI and S. TAKEDA,
“Characterization of Poly-CuPc Sheet Polymers Synthesized under High Pressure”, *Synthetic Metals* **71**, 2289 (1995).

B-4) 招待講演

小杉信博, 「高分解能軟X線を用いた内殻励起分子の振動分光」放射光シンポジウム '94, 東京, 1994.12.

N. KOSUGI, “Renner-Teller Effect, Rydberg-Valence Mixing, and Vibronic Coupling in Molecular Inner-Shell Spectroscopy”, *International Workshop on Photoionization (IWP94)*, San Francisco, U.S.A., 1994.10.

B-5) 受賞, 表彰

分子科学研究奨励森野基金研究助成, 1987 年

B-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-現在

学会の組織委員

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

王子セミナー 国際プログラム委員 1995

アジア交流放射光国際フォーラム 実行委員 1994, 1995

第4回放射光光源国際会議 実行委員 1995

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-現在

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

C) 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, データ解析, 理論などの面で新たに越えなければならないハードルが多くある。1995年度には分子研で新たに開発した固体用測定装置を使った研究をスタートしたところである。また, 加速器である放射光リングの新しい展開が国内外で始まっているので, 各放射光施設との人的交流や研究交流を図っていきたい。

田 原 太 平 (助教授)

A-1) 専門領域 : 分子分光, 光化学

A-2) 研究課題

- a) 時間分解分光法による光化学反応の研究
- b) レーザーおよび放射光を用いた新しい実験手法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 光化学反応中間体電子励起状態の研究 : 時間分解振動分光法を用い, 代表的な光化学反応の中間体であるいくつかの電子励起状態を研究した。これにより, 芳香族カルボニル化合物最低励起三重項状態での電子状態-反応性-構造の連関, 励起三重項錯体における電荷移動相互作用が構造に与える影響, 等を明らかにした。また, シス→トランス光異性化反応の途中にあらわれる“ねじれ型”励起一重項状態の振動スペクトルをモデル分子についてはじめて測定した。
- b) 時間分解二次元分光法の開発と応用 : フェムトあるいはピコ秒レーザー, ナノ秒レーザー, ストリークカメラを組み合わせることで, 異なる遅延時間に対応する時間分解振動スペクトルを一度に測定する2次元時間分解分光法 (2D-CARS) を開発した。これをレチナールの光異性化の研究に応用し, 最低励起三重項状態でのシス→トランス異性化過程の直接観測に成功した。

B-1) 学術論文

T. TAHARA, B. N. TOLEUTAIEV and H. HAMAGUCHI, “Picosecond time-resolved multiplex CARS spectroscopy by using a streak camera: isomerization dynamics of all-trans and 9-cis retinal in the lowest excited triplet state”, *J. Chem. Phys.*, **100**, 786 (1994).

B. N. TOLEUTAIEV, T. TAHARA and H. HAMAGUCHI, “Versatile broadband CARS spectrometer based on diode pumped Nd:YLF laser: polarization sensitive and time-resolved measurements”, *Appl. Phys. B*, **B59**, 369 (1994).

T. TAHARA and H. HAMAGUCHI, “Transient Raman spectra and structure of the twisted excited singlet state of tetraphenylethylene”, *Chem. Phys. Lett.*, **217**, 369 (1994).

T. TAHARA and H. HAMAGUCHI, “Construction of time-resolved two-dimensional multiplex CARS spectrometer having 15 ps time-resolution”, *Rev. Sci. Instrum.*, **65**, 3332 (1994).

S. TAKEUCHI and T. KOBAYASHI, “Broadband near-infrared pulse generation in KTiOPO_4 ”, *J. Appl. Phys.*, **75**, 2757 (1994).

S. TAKEUCHI and T. KOBAYASHI, “Highly efficient Ti:sapphire regenerative amplifier”, *Opt. Comm.*, **109**, 518 (1994).

T. TAHARA and H. HAMAGUCHI, “Picosecond time-resolved fluorescence study of all-trans retinal: the existence of two fluorescent singlet excited states”, *Chem. Phys. Lett.*, **234**, 275 (1995).

S. MATSUO, H. YUGAMI, M. ISHIGAME and S. SHIN, “Hole burning in proton conducting oxides $\text{SrZrO}_3\text{:Pr}^{3+}$ ”, *J. Lumin.*, **64**, 267 (1995).

H. YUGAMI, S. MATSUO and M. ISHIGAME, “Persistent spectral hole-burning of Eu^{3+} and Pr^{3+} in $\text{SrZr}_{1-x}\text{Y}_x\text{O}_3$ crystals”, *Solid State Ionics* **77**, 195 (1995).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. TAHARA and H. HAMAGUCHI, "Picosecond Time-Resolved Two-Dimensional Multiplex CARS Spectroscopy by Using a Streak Camera", *Proceedings of 14th International Conference on Raman Spectroscopy*, 492 (1994), John Wiley & Sons.

B-4) 招待講演

T. TAHARA and H. HAMAGUCHI, "Picosecond Time-Resolved Two-Dimensional Multiplex CARS Spectroscopy by Using a Streak Camera", 14th International Conference on Raman Spectroscopy, Hong-Kong, August 1994.

田原 太平, 「ピコ秒時間分解二次元マルチプレックス CARS 分光法」, 日本分光学会装置部会シンポジウム「凝縮相のダイナミクスを探る超高速分光の新しいテクニック」, 埼玉, 1995 年 1 月

C) 研究活動の課題と展望

本研究グループでは超高速レーザー分光および放射光分光を駆使して（主として溶液系での）光化学反応を研究する。溶液化学反応においては溶質-溶媒相互作用が本質的に重要な働きをしている。これを念頭におき、溶質に対する分光のみならず、溶媒に対する分光をも行い、溶質・溶媒の両面から溶液反応に対する新しい知見を得るべくピコ秒・フェムト秒時間分解分光、放射光遠赤外分光等の実験を行う。これら研究を行いながら、新しい実験手法（例えばレーザーと放射光を組み合わせた分光実験など）の開発をめざしたい。

反応動力学研究部門

宇 理 須 恒 雄 (教授)

A-1) 専門領域：電子シンクロトロン放射光光化学反応

A-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 光反应用分光技術の開発
- f) STM による放射光光反応のその場観察

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 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。1995 年度はジシランによる Si 単結晶成長を行い成長中の Si(100)表面の水素化シリコン(SiHn)の振動分光に世界で初めて成功した。放射光の照射により SiH₂, SiH₃ は分解するが SiH は分解しないこと，また，このことが低温領域で結晶性が劣化する原因であることを明らかにした。
- b) 配向, 配列を制御した分子凝集層での VUV 光反応：ジメチルアルミニウムハイドライド(DMAH)低温凝集層への放射光照射特性を調べた。120K での堆積時はダイマーとトリマーの混合であるが放射光の照射により安定なトリマーのみの構造になることを見い出した。さらに凝集層のカーボンとアルミニウムの比率を XPS で調べたところ放射光照射によってこれが大幅に減少し，1254eV の X 線照射ではこれがほとんど減少しないことを見い出した。前者では AlC 結合が後者では CH 結合が切れるとするサイトスペシフィック効果を，分子間相互作用の強い凝集系の反応生成物において世界で初めて見い出した可能性が強く，今後励起エネルギー依存性を詳細に調べる予定である。
- c) 高感度 FTIR 技術と反応のその場観察技術の開拓：10⁻⁴ 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完成した。S/N は主として検出器のノイズで決まっている。現在試料面積が 10×10mm² 程度であるが，今後単色放射光での反応を観察するためには微小面積の測定をできるように新技術開発を進める。
- d) FTIR 用埋め込み金属層基板の開発と反応機構の解明：ガスソース MBE により Si(100)/CoSi₂/Si(100)の構造を有する BML 基板の製法を確立した。各種反応系に適用し，この基板を用いた IRAS 法がきわめて有用であることを確認した。今後は表面が Ge である基板を製作する予定である。
- e) 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らかにする。装置を完成し，H₂O の低温凝集層において電子-イオンコ

インシデンスの測定に成功した。また、励起に単色放射光を用いることにより、大幅にS/Nが改善された。今後、共有結合性分子のオーージ刺激脱離やサイトスベシフィック分解反応に適用する予定である。

- f) 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 1994 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ミュレーションを進め、Al や Si の内殻電子のエネルギー領域で実用的な単色光源を実現できる見通しを得た。多層膜ミラーの製作と分光器の製作を進めている。
- g) STM による放射光光反応のその場観察：上記 b)により半導体表面上の分子種とその反応を赤外分光で調べられるようになったので、STM と組み合わせて表面での分子の分解過程を、従来と比べ格段に詳細に調べられる可能性ができた。そこで 1995 年度よりこの計画をスタートした。装置の設計をほぼ完了した。

B-1) 学術論文

T. URISU, Y. ZHANG, M. NAGASONO, A. YOSHIGOE, Y. IMAIZUMI, H. OHSHIMA, T. HATTORI and S. SATO, "Molecular Orientation and Photochemical Reaction of Organoaluminum Compounds Investigated by Buried Metal Layer Infrared Reflection Absorption Spectroscopy", *Jpn. J. Appl. Phys.* **33**, 7123-7129(1994).

Y. IMAIZUMI, Y. ZHANG, Y. TSUSAKA, T. URISU and S. SATO, "Structure of the Organoaluminum Compounds Condensed Layer Investigated by Buried Metal Layer Reflection Absorption Spectroscopy", *J. Mole. Structure*, **352/353**, 447-453(1995).

Y. YAMADA, T. HATTORI, T. URISU and H. OHSHIMA, "Measurement of Adsorbed Fatoms on a HF Treated Si Surface Using Infrared Reflection Absorption Spectroscopy", *Appl. Phys. Lett.* **66**, 496-498 (1995).

A. YOSHIGOE, M. NAGASONO, K. MASE, T. URISU, S. SEKI and Y. NAKAGAWA, "In Situ Detection of Surface SiHn in Synchrotron-Radiation-Induced Chemical Vapor Deposition of a-Si on an SiO₂ Substrate" *J. Synchrotron Rad.* **2**, 196-200(1995).

Y. -B. PARK, S. W. RHEE, Y. IMAIZUMI and T. URISU, "Effect of SR Irradiation on SiO₂ Thin Film", *J. Korean Vac. Soci.* **4**, 156-163 (1995).

K. MATSUSHITA, K. MAKISHIMA, H. AWAKI, C. R. CANIZARES, A. C. FABIAN, Y. FUKAZAWA, M. LOEWENSTEIN, H. MATSUMOTO, T. MIHARA, R. F. MUSHOTZKY, T. OHASHI, G. R. RICKER, P. J. SERLEMITSOS, T. TSURU, Y. TSUSAKA and T. YAMAZAKI, "Detections of Hard X-ray Emissions from Bright Early-Type Galaxies with ASCA", *Astrophys. J. Letters*, **436**, L41(1994).

P. J. SERLEMITSOS, L. JALOTA, Y. SOONG, H. KUNIEDA, Y. TAWARA, Y. TSUSAKA, H. SUZUKI, Y. SAKIMA, T. YAMAZAKI, H. YOSHIOKA, A. FURUZAWA, K. YAMASHITA, H. AWAKI, M. ITOH, Y. OGASAKA, H. HONDA and Y. UCHIBORI, "The X-Ray Telescope on board ASCA", *Publ. Astron. Soc. Japan*, **47**, L105(1995).

K. C. GENDREAU, R. MUSHOTZKY, A. C. FABIAN, S. S. HOLT, T. KII, P. J. SERLEMITSOS, Y. OGASAKA, Y. TANAKA, M. W. BAUTZ, Y. FUKAZAWA, Y. ISHISAKI, Y. KOHMURA, K. MAKISHIMA, M. TASHIRO, Y. TSUSAKA, H. KUNIEDA, G. R. RICKER and R. K. VANDERSPEK, "ASCA Observations of the Spectrum of the X-Ray Background", *Publ. Astron. Soc. Japan*, **47**, L5(1995).

Y. TSUSAKA, H. SUZUKI, K. YAMASHITA, H. KUNIEDA, Y. TAWARA, Y. OGASAKA, Y. UCHIBORI, H.

HONDA, M. ITOH, H. AWAKI, H. TSUNEMI, K. HAYASHIDA, S. NOMOTO, M. WADA, E. MIYATA, P. J. SERLEMITOS, L. JALOTA and Y. SOONG, "Characterization of the Advanced Satellite for Cosmology and Astrophysics x-ray telescope: preflight calibration and ray tracing", *Appl. Opt.*, **34**, 4848(1995).

B-3) 総説, 著書

宇理須恒雄, 西尾光弘, 小川博司, 「放射光励起プロセス -現状と今後の課題」放射光 (日本放射光学会) 8 巻 1 号, 2 (1995)

B-4) 招待講演

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", MicroProcess '94, The 7th International MicroProcess Conference, Hsinchu, Taiwan, July 11-14, (1994).

T. URISU, "Application of synchrotron radiation to semiconductor process and surface photochemical reaction", The 8th Korean Vacuum Society Meeting, Suwon Korea, Feb 16-17(1995).

T. URISU, "In situ observation of synchrotron radiation excited semiconductor process by IRAS using buried metal layer substrate", The 6th Korea-Japan Joint Symposium on Surface Science & Solid State Chemistry, Taejon Korea, Feb. 13-15(1995).

T. URISU, "Photo-assisted processing with synchrotron radiation", Science and Technology at CAMD, 1995 workshop, Baton Rouge, Louisiana, March 17-18(1995).

宇理須恒雄, 「放射光励起半導体プロセスと反応のその場観察」日本学術振興会, 結晶加工と評価技術第 145 委員会, 1994 年 10 月

宇理須恒雄, 「ハードフォトン利用技術の特徴」第 42 回応用物理学関係連合講演会 シンポジウム"ハードフォトン技術の展望", 1995 年 3 月

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

レーザー学会評議員 (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)

電気学会, 放射光による材料加工技術調査専門委員会委員長 (1994~)

大型放射光施設安全性検討委員会委員 (1993~)

東北大学電気通信研究所運営協議会委員 (1994~)

東北大学電気通信研究所研究評価委員(1995)

新機能素子研究開発協会, 新世紀素子等製造評価技術の予測委員会/ハードフォトン技術研究部会委員 (1995)

学会の組織委員

第 5～9 回マイクロプロセス国際会議論文委員 (1992～)

第 1 回光励起プロセスと応用国際会議論文委員 (1993)

VUV-11 組織委員会, プログラム委員会委員 (1993～1995)

1995 年 X 線および極端紫外光リソグラフィ国際ワークショップ顧問委員 (1995)

SRI97 組織委員会プログラム委員会委員 (1995～)

学会誌編集委員

JJAP 特集論文特別編集委員 (1992～1993)

電気学会, 電子情報システム部門誌特集号編集委員 (1995～1996)

B-7) 他大学での講義

静岡大学理学部化学科 1994 年 7 月

東京工業大学理学部化学科 1994 年 11 月

C) 研究活動の課題と展望

分子間あるいは分子と固体表面との相互作用のある凝集層や吸着系での内殻電子励起反応, 特に重要な中性種反応生成物の site specificity に注目して研究をすすめる。このような観点での研究は世界的にも全くなされておらず光化学の新領域を開拓できる。実験技術の開発をあわせて進める必要がある。表面の赤外分光法 BML-IRAS の電子-イオンコインシデンス技術の開発は, ほぼ初期の目的を達成したので, 今後は高フラックス単色軟 X 線を得るための多層膜分光器の開発, 微小領域の BML-RAS 技術, 放射光照射中の STM 観察技術の開発, 電子-イオンコインシデンス技術の高感度化などを進める。

見 附 孝 一 郎 (助教授)

A-1) 専門領域：化学反応素過程

A-2) 研究課題

- a) 分子の真空紫外超励起状態の分光学と動力学。
- b) 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
- c) レーザーと軌道放射のポンプ・プローブ実験。
- d) 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。

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 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2次元光電子スペクトル等から、超励起状態のポテンシャルエネルギー曲面を計算しイオン化状態との電子的結合を評価した。これら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。
- b) 正イオン・負イオン同時計測法を初めて開発し、複数の光解離過程の識別と放出されるイオンの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。
- c) 紫外レーザーとアンジュレータ光を組み合わせ、電子振動励起分子の光イオン化や光解離のダイナミックスを研究している。とくに、特定の化学結合を選択的に切断したり、特異的な化学反応を誘起するような光励起過程を実現するための方法論の開発を目標とする。
- d) 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開発した。

B-1) 学術論文

K. MITSUKE and H. HATTORI, "Autoionizing Resonance in Photoionization from the $1\pi_u$ Level of Acetylene", *J. Chem. Phys.* **102**, 5288(1995).

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", *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **101**, 195(1995).

B-3) 総説、著書

見附孝一郎, 「分子超励起状態からの正・負イオン対生成」, 日本放射光学会誌, **7**, 309(1994).

B-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

見附孝一郎, 「正イオン負イオン同時計測法によるイオン対生成過程の研究」第8回日本放射光学会年会, つくば, 1995年1月

B-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)

C) 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。次に, 光電子分光, 蛍光分光, 質量分析, 同時計測法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。また, 軌道放射とパルスレーザを組み合わせ, 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（流動研究部門）

伊 吹 紀 男（教授）

A-1) 専門領域：真空紫外，軟X線化学反応

A-2) 研究課題

- a) 真空紫外光領域におけるリュードベリ分子の反応ダイナミックス
- b) 軟X線による内殻励起分子の化学反応

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 分子がその第一イオン化ポテンシャル以上の真空紫外光エネルギーを吸収したとき、イオン化効率が1とはならないエネルギー領域が存在する。これは「超励起状態」と呼ばれる中性分子が生じるためである。この超励起状態の反応ダイナミックスについて、本年度はアセチレンの重水素置換化合物を用いて水素原子同位体効果を測定した。超励起状態においては水素原子の分子内遷移が容易に起こることを示した。重水素置換アセトニトリルについても同様の成果を得た。
- b) エネルギー的には価電子励起の領域に存在するが、内殻であるd電子励起の化学反応はまだ殆ど行われていない。BrCN, CF₃Br分子のBr(3d)領域, ICNのI(4d)領域の光吸収スペクトル（断面積）測定と解析および反応ダイナミックスの研究を行った。d電子励起固有の反応として、オーグメントタイプによる多価イオンが観測され、その崩壊過程を明らかにした。

B-1) 学術論文

T. IBUKI, Y. HORIE, A. KAMIUCHI, Y. MORIMOTO, M. C. K. TINONE, K. TANAKA and K. HONMA,
“Radiative Dissociation of C₂H₂, C₂HD and C₂D₂ Superexcited at 50-90 nm Region”, J. Chem. Phys. 102, 5301(1995)

B-6) 学会及び社会的活動

学術雑誌編集委員

日本放射光学会編集委員（1992-1994）

科研費の班長，研究代表者等

一般研究（C）研究代表者（1992）

重点領域研究研究代表者（1993-1995）

B-7) 他大学での講義

京都教育大学（学部） 現代科学論，化学結合論，物質科学，物理化学実験（1991-94）

同上（大学院修士課程）物質化学特論，物質化学特別演習，理科教材特別研究（1991-94）

C) 研究活動の課題と展望

シンクロトロン放射の真空紫外および軟X線領域のエネルギーを用いて、価電子励起においてはリュードベリ分子および超励起分子の反応ダイナミックスの研究を引き続いて行う。内殻励起の領域においては、「化学反応の励起位置選択性」およびフラグメントイオンの運動エネルギー分光法による「内殻励起分子の化学反応の特性」を解明したい。

西 尾 光 弘 (助教授) *)

A-1) 専門領域：電子材料

A-2) 研究課題

- a) シンクロトロン放射光を光源とした II-VI 族化合物半導体の成長
- b) シンクロトロン放射光を利用した原子層成長
- c) ZnTe 化合物半導体の高品質化とドーピング

A-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 II-VI 族化合物半導体の成長:有機金属を原料とした II-VI 族化合物半導体専用のシンクロトロン放射光励起薄膜形成装置を製作し, GaAs 基板を用いて室温で良好なエピタキシャル膜が得られることを既に実証したが, 成長過程について不明であった。そこで, 成長速度の成長条件依存性を詳細に明らかにし, VI 族原料の表面励起過程が重要であることを示した。更に, 主に XPS 測定により用いた原料の分解状況を調べ, 分解や生成物の脱離に放射光が大きな効果があることを明らかにした。
- b) シンクロトロン放射光を利用した原子層成長:通常のシンクロトロン放射光励起成長では, 光に大きな強度分布があるため, 不均一な膜が形成されてしまう。そこで, 交互に原料を供給しシンクロトロン放射光を照射することにより, Zn 層, Te 層を交互に形成するよう成長を試みた。原子レベルで平坦な膜が形成されること, 単原子層単位で成長が制御できることを RHEED や成長速度の振る舞いから明らかにした。
- c) ZnTe 化合物半導体の高品質化とドーピング:有機金属化学気相成長法により高品質結晶を得るための条件は不明であった。そこで, エピタキシャル層の成長速度の振る舞いとフォトルミネッセンスの関係を明らかにし, 原料供給律速領域に保ちつつ低温にすることにより非常に高品質な結晶が得られることを示し, 以前の光照射成長の結果と良い一致をみた。Al をドーピングすると n 型 ZnTe 結晶が得られることを既に明らかにしたが, ドーピング機構に関する知見を得るため, VI/II 供給量比や基板温度による影響を明らかにした。

B-1) 学術論文

S. I.GHEYAS, M.IKEJIRI, T.OGATA, H.OGAWA and M.NISHIO, "Photoluminescence properties of ZnTe layers grown by photo-assisted metalorganic vaporphase epitaxy", *J. Cryst. Growth* **145**, 576 (1994).

T. OGATA, S.I. GHEYAS, M.IKEJIRI, H.OGAWA and M.NISHIO, "Synchrotron radiation excited growth of ZnTe using metalorganic sources", *J. Cryst. Growth* **146**, 587 (1995).

T. OGATA, M.IKEJIRI, S.I.GHEYAS, H. OGAWA and M.NISHIO, "Construction of a system for novel low-temperature growth of II-VI compound semiconductors using synchrotron radiation", *Rev. Sci. Instrum.* **66**, 1086 (1995).

T. OGATA, S.I.GHEYAS, H.OGAWA and M.NISHIO, "Synchrotron-Radiation- Excited Growth of ZnTe by Alternating Gas Supply Using Metalorganic Sources.", *Jpn. J. Appl. Phys.* **34**, L841 (1995).

C) 研究活動の課題と展望

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

a), b) 基板は成長機構のみならず膜の品質に大きな影響を及ぼすので、これに関する研究を進めたい。ZnTe 基板を用い a), b) の各手法によりホモエピタキシャル成長を試み、成長機構、膜の品質と基板との関係について GaAs 基板の場合と比較し議論したい。

c) 各種のドーピング条件下で ZnTe 成長を実施し、フォトルミネッセンス, SIMS, 電気的性質等のデータを収集し、ドーピング機構を議論すると共に、光デバイスの試作したい。

*) 1995 年 4 月 1 日佐賀大理工学部へ転出

細 野 秀 雄 (助教授)

A-1) 専門領域：無機材料科学

A-2) 研究課題

- a) イオンビームによる新電子・光材料
- b) アモルファス SiO_2 中の点欠陥
- c) アモルファス透明伝導体
- d) ワイドギャップ酸化物のバンド構造

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) イオン注入したアモルファス SiO_2 の点欠陥の生成とイオンと基板構造の化学的相互作用, およびナノサイズコロイドの生成の関係を解明した。
- b) ワイドギャップ酸化物 MgIn_2O_4 のイオン注入による伝導性制御に成功した。
- c) $\text{SiO}_2 : \text{GeO}_2$ ガラスに Bragg Gratings を形成する方法として Pre-existing な点欠陥を用いるのではなく, 2光子過程によるベント間励起から生じる点欠陥とその構造緩和を利用する方法を提案し, その有効性を実証した。
- d) 大きな3次の非線形光学効果が予測されている2重構造をもつナノサイズコロイド ($\text{Cu}+\text{Cu}_2\text{O}$) の生成に成功した。
- e) 透明伝導性酸化物がアモルファス状態でも得られることを AgSb_2O_7 , Cd_2GeO_4 において初めて実証した。

B-1) 学術論文

H. HOSONO, "Importance of Implantation Sequence in the Formation of Nanometu Size Colloid Particles. Embedded in Amorphous SiO_2 : Formation of Composite Colloids with Cu Core and a Cu_2O Shell by Coimplantation of Cu and F", *Phys. Rev. Lett.* **74**, 110 (1995)

H. HOSONO, **N. Matsunami** and **A. Kudo**, "Novel Approach for Synthesizing Ge fine particles embedded in glass by ion implantation", *App. Phys. Lett.* **65** 1632 (1994)

H. IMAGAWA, **H. HOSONO**, **H. IMAI** and **K. ARAI**, "Reaction Kinetics of Oxygen-deficient Centers with Diffusing Oxygen Noletules in SiO_2 Glass", *J. Non-Cryst. Sol.* **179**, 70 (1994)

H. HOSONO, **H. KAWAZOE**, **K. OYOSHI** and **S. TANAKA**, "Paramagnetic Resonance of E'-type Centers in ^{29}Si -implanted Amorphous SiO_2 ", *J. Non-Cryst. Sol.* **179**, 39 (1994)

H. HOSONO and **R. A. ZUHR**, "Structural Factor Controlling Nanosize Copper Formation in Doped Amorphous Silica by Ion Implantation", *J. Non. Cryst. Sol.* **178**, 160 (1994)

H. HOSONO and **Y. ABE**, "Silver Ion Selective Porous Lithium Titanium Phosphate Glass-Ceramics Cation Exchanger and Its Application to Bacteriostatic Materials", *Mater. Res. Bull.* **29**, 1157 (1994)

H. NASU, **H. OKAMOTO**, **J. MATSUOKA**, **K. KAMIYA** and **H. HOSONO**, "Second-harmonic Generation from Electrically Poled SiO_2 Glass", *J. Opt. Soc. Am.*, **B12**, 644 (1995)

H. KAWAZOE, **N. UEDA**, **H. UN'NO**, **T. OMATA** and **H. HOSONO**, "Generation of Electron Carriers in Insulating Thin Film of MgIn_2O_4 Spinel by Li^+ -implantation", *J. Appl. Phys.*, **76**, 7935 (1994)

- H. HOSONO, N. UEDA, H. KAWAZOE and N. MATSUNAMI**, "Optical and Electrical Properties of Proton-implanted Amorphous SiO₂, MgO-P₂O₅ and Nanocrystalline MgIn₂O₄", *J. Non-Cryst. Sol.*, **182**, 109 (1995)
- M. YASUKAWA, H. HOSONO, N. UEDA and H. KAWAZOE**, "Photoemission Studies on Valence Band Structure of AgSbO₃", *Solid State Commun.*, **95**, 399 (1995)
- J. NISHII, H. YAMASHITA, H. HOSONO and H. KAWAZOE**, "Ultraviolet-radiation-induced Chemical Reactions through One-and two-photon absorption processes in GeO₂-SiO₂ glasses", *Opt. Lett.* **29**, 1184 (1994)
- H. HOSONO, K. KAWAMURA, N. UEDA, H. KAWAZOE, S. FUJITSU and N. MATSUNAMI**, "Formation and Photo bleaching of 5eV bands in ion-implanted SiO₂:Ge and SiO₂ glasses for photosensitive materials", *J. Phys. Cond. Matter*, **7**, L343 (1995)
- M. YASUKAWA, H. HOSONO, N. UEDA and H. KAWAZOE**, "Novel Transparent and Electroconductive Amorphous Semiconductor : Amorphous AgSbO₃ Film", *Jpn. J. Appl. Phys.*, **34**, L281 (1995)
- M. YASUKAWA, H. HOSONO, N. UEDA and H. KAWAZOE**, "Preparation of Electroconductive and Transparent Thin Films of AgSbO₃", *J. Ceram. Soc. Jpn.*, **103**, 455 (1995)
- H. HOSONO**, "Chemical Interaction in Ion-implanted Amorphous SiO₂ and Application to Formation and Modification of Nanosize Colloid Particles", *J. Non-Cryst. Sol.*, **187**, 457 (1995)
- J. NISHII, K. FUKUMI, H. YAMANAKA, H. HOSONO and H. KAWAZOE**, "Photo chemical Reactions in GeO₂-SiO₂ glasses induced by Ultraviolet irradiation ; Comparison between Hg lamp and Excimer laser", *Phys. Rev.* **B52**, 1661 (1995)
- H. MIZOGUCHI, H. HOSONO, N. UEDA AND H. KAWAZOE**, "Reparation and Electrical Properties of Bi₂S₃ Whiskers", *J. Appl. Phys.* **78**, 1376 (1995)

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- H. HOSONO**, "Formation and Optical Properties of Nanosized Amorphous Phosphorus Colloids Embedded in SiO₂ Glass by ion implantation ", *Glass Science and Technology*, **67C**, 80 (1994).
- H. HOSONO**, "Porous Li_{1+x}Ti_{2-x}Al_x(PO₄)₃ Glass-Ceramics Cation Exchanger and its Application to Bacteriostatic materials", *Glass Science and Technology*, **67c**, 123 (1994)
- H. HOSONO, J. NISHII AND H. KAWAZOE**, "Photo chemical Reaction, in SiO₂ : Ge glasses and ion-implanted SiO₂ Glasses", *Technical Digest Series*, **22**, Sa-D5 (1995)

B-3) 総説, 著書

- 細野秀雄**, 「アモルファスシリカ中の注入イオンの化学的相互作用とナノサイズコロイドの生成」 *アイオニクス*, **20**, 3 (1994)
- D. L. Griscom and H. Hosono (Ed.)**, "Science and Technology of Amorphous SiO₂ and Related Materials", Elsevier (1994).
- 細野秀雄, 川副博司**, 「透明導電性アモルファス-酸化物アモルファス半導体のルネッサンスを目指して」 *ニューガラス*, **10** (3) 46 (1995)

B-4) 招待講演

HLHOSONO, “Chemical Interaction of implanted ions with substrate structure of Amorphous SiO₂ and application to formation and modification of Nanosized colloid particles”, Annual Meeting of European Materials Research Society, Strausburg, France, May, 1994

HLHOSONO, “Novel Materials by Ion Implantation into glass”, International Symposium on Amorphous Insulations, Denver, U.S.A., August 1994.

細野秀雄, 「ガラスの基礎科学—イオンビームとガラスの相互作用—」 第26回ガラス若手セミナー, 京都, 1994, 8月.

B-5) 受賞, 表彰

日本セラミックス協会賞進歩賞 1986

東海化学工業会賞 1990

若い世代の特別講演証 (日本化学会) 1991

Otto-Schott 賞 (ドイツ) 1991

W. H. Zachariasen 賞 1995

B-6) 学会および社会的活動

Journal of Non-Crystalline Solids. Advisory Editorial Board (1995~)

International Committee of Radiation Effects in Insulators (1995~)

Organiser of 1993 Pac Rim Meeting on Science and Technology of Amorphous SiO₂, American Ceramic Society

日本セラミックス協会論文誌編集委員 (1986~88)

C) 研究活動の課題と展望

酸化物は透明な絶縁体であるという見方は広く普及している。特に“窓ガラス”に代表されるアモルファスでは常識になっている。我々の研究グループはここ数年前, 透明の良電導体の探索をおこない MgIn₂O₄, AgSb₂O₇ など多くの新物質を見出してきた。1994~1995年には初めてアモルファスの透明伝導体を得ることができた。従来のアモルファス半導体は a-Si に代表されるテトラヘドラル系とカルコゲン系に大別されているが, 両者ともに透明性と良電導性の両方は満足できない。

よって新しいアモルファス半導体の領域が拓ける可能性があり, 一層の精進が必要な時期になっている。今後は今までに見出してきた物質の電導帯の底部の状態密度を逆光電子分光で明らかにし, 探索指針の定量化を図る予定である。

3-7 錯体化学実験施設

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、専任部門として、錯体触媒部門では、主として有機金属錯体触媒の基礎化学を、電子状態や、反応性の面から研究している。とくにMo(II)の7配位錯体およびMo(VI)のチオラト錯体を中心となっている。錯体物性部門では、Ru, Moの錯体による炭酸ガスの反応を調べているほか、Zrの有機金属錯体を用いた合成反応を研究している。

流動部門では、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があり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（流動研究部門）

吉 川 雄 三（教授）

A-1) 専門領域：無機化学，錯体化学

A-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

A-3) 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おり、現在は高配位ケイ素(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 $[\text{Si}(\text{phen})_3]^{4+}$ 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。最近、光学活性な $[\text{Si}(\text{bpy})_3]^{4+}$ 錯体およびシラトラン誘導体の単離にも成功した。

以上のほか、コバルト(III)錯体の光(照射)異性化反応、制癌性白金(II)錯体および触媒能を有するマンガン錯体の合成も手掛けている。

- b) 無機固体の表面特性：触媒表面における水の影響を明らかにすることおよび新しい機能材料の開発につながる情報を得ることを目的として、イオン結晶、金属酸化物、ゼオライト表面での水およびその他の気体分子との相互作用の研究を行っている。現在は、主として我々が見い出した無機固体表面における水の二次元凝縮の現象を、誘電率や中性子非弾性散乱の測定により研究している。また、ゼオライトと窒素分子が室温で強く相互作用する現象も見いだしており、その吸着サイトの解析も行っている。

- 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。これらの力場計算のパラメーターの一部は、必要に応じて、分子軌道計算により求めている。各種スペクトル解析(curve-fitting)も行い化合物の同定や構造に関する知見を得ている。

B-1) 学術論文

K. NAKAJIMA, M. KOJIMA, M. TSUCHIMOTO, Y. YOSHIKAWA and J. FUJITA, "Isomerization of a Diastereomeric Oxovanadium(IV) Complex Containing an Unsymmetrical Tetradentate Schiff Base Ligand Catalyzed by Oxovanadium(V) Species", *Chem. Lett.* 1593 (1994).

M. KOJIMA, I. SUGIMOTO, Y. SHIMIZU and Y. YOSHIKAWA, "Photochemistry of Tris(L-cysteinesulfinato-*N,S*)cobaltate(III). Linkage Isomerization from Sulfinato-*S* to Sulfinato-*O*", *Proc. Japan Acad.*, **70B**, 101 (1994).

M. HIROTSU, M. KOJIMA, K. NAKAJIMA, S. KASHINO and Y. YOSHIKAWA, "Steric Control of Redox Potentials of Cobalt(II) Schiff Base Complexes with Phenyl Substituents", *Chem. Lett.*, 2183 (1994).

F. MD. AKHTER, M. KOJIMA, K. NAKAJIMA, S. KASHINO and Y. YOSHIKAWA, "Photochemical Reaction of (L-cysteinesulfinato-*N,S*){tris(2-minoethyl)amine}cobalt(III). Formation of a Cobalt(III) Complex with an Uncoordinated Sulfinato Group", *Chem. Lett.* 2393 (1994).

Y. KURODA, Y. YOSHIKAWA, T. MORIMOTO and M. NAGAO, "Dielectric Behavior in the $\text{SrF}_2\text{-H}_2\text{O}$ System. 1. Measurement at Room Temperature", *Langmuir*, **11**, 259 (1995).

Y. KURODA, Y. YOSHIKAWA, T. MORIMOTO and M. NAGAO, "Dielectric Behavior in the $\text{SrF}_2\text{-H}_2\text{O}$ System. 2. Measurement at Low Temperatures", *Langmuir*, **11**, 2173 (1995).

M. KOJIMA, K. NAKAJIMA, M. TSUCHIMOTO, P. M. TREICHEL, S. KASHINO and Y. YOSHIKAWA, "Characterization of Monomeric Green and Polymeric Orange Forms of a Schiff Base-Oxovanadium(IV) Complex and Interconversion Between These Species", *Proc. Japan Acad.*, **71B**, 175 (1995).

Y. KURODA, Y. YOSHIKAWA, S. KONNO, H. HAMANO, H. MAEDA, R. KUMASHIRO and M. NAGAO, "Specific Feature of Copper Ion-Exchanged Mordenite for Dinitrogen Adsorption at Room Temperature", *J. Phys. Chem.*, **99**, 10621 (1995).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

S. TOTSUKA, M. TANIGUCHI, Y. YOSHIKAWA and S. UTSUNO, "Induced CD Spectra Observed for a Series of Propeller-Type Complexes of Cobalt, Chromium and Rhodium with the Formula, *trans*-dihalogenotetrakis(substituted pyridine)metal(III) Ion", Proceedings of the 30th International Conference on Coordination Chemistry, 35 (1994).

Y. OHMORI, M. KOJIMA and Y. YOSHIKAWA, "Stereochemistry of Six-coordinated Silicon Complexes. Optical Resolution and Resolution Mechanism of $[\text{Si}(\alpha\text{-diimine})_3]^{4+}$ ($\alpha\text{-diimine}=\text{bpy, phen}$)", Proceedings of the 30th International Conference on Coordination Chemistry, 201 (1994).

F. MD. AKHTER, M. KOJIMA, T. YOSHII, S. KASHINO and Y. YOSHIKAWA, "Photochemical Reaction of *trans*-(*t-N,S*)-[Co{S(O)₂CH₂COO-*S,O*}(tren)]⁺ (*t-N*=tertiary amine nitrogen). Geometrical and Linkage Isomerization", Proceedings of the 30th International Conference on Coordination Chemistry, 202 (1994).

M. KOJIMA, K. NAKAJIMA, M. TSUCHIMOTO, Y. YOSHIKAWA and J. FUJITA, "Solid-State Isomerization of an Unsymmetrical Tetradentate Schiff Base-Oxovanadium(IV) Complex", Proceedings of the 30th International Conference on Coordination Chemistry, 202 (1994).

M. HIROTSU, K. NAKAJIMA, M. KOJIMA and Y. YOSHIKAWA, "Steric Effect of Phenyl Substituents in Cobalt(II) Schiff Base", Proceedings of the 30th International Conference on Coordination Chemistry, 203 (1994).

K. NAKAJIMA, M. KOJIMA, M. TSUCHIMOTO, S. KASHINO, S. OHBA and Y. YOSHIKAWA, "Crystal Structures of Green and Orange Complexes of [VO{sal-(RR)-stien}] (sal-(RR)-stien; *N,N'*-disalicylidene-(RR)-diphenyl-1,2-ethanediamine)", Proceedings of the 30th International Conference on Coordination Chemistry, 206 (1994).

B-5) 受賞

東海化学工業会賞, 1980 年

B-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 年)

日本化学会東海支部代議員 (1978-79 年)

日本化学会中国四国支部代議員 (1992-94 年)

日本化学会役員等選考委員 (1992-94 年)

科研費の班長, 研究代表者等

文部省科学研究費補助金総合研究 (A) 班長 (1994-96 年)

文部省科学研究費補助金一般研究 (A) 代表者 (1993-96 年)

B-7) 他大学での講義

静岡大学理学部 1994 年 9 月

大阪大学大学院理学研究科 1994 年 9 月

岡山大学理学部 1994 年 12 月

岡山大学大学院自然科学研究科 1994 年 12 月

C) 研究活動の課題と展望

高配位ケイ素 (IV) 錯体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) の光学活性誘導体も含めた高配位ケイ素 (IV) 錯体の生体中での役割にもメスを入れる。無機固体の表面特性の研究は, 触媒表面における種々のガスの吸着状態解析の基礎となり, 触媒表面の反応サイト解析や新材料開発にもつながるものと期待している。

中 沢 浩 (助教授)

A-1) 専門領域：錯体化学，有機金属化学

A-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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- 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：5価5配位の異常原子価リン化合物を配位子とする鉄錯体の反応性を検討している。酸と反応では、配位したままリンの原子価を変えることが可能であり、またアルコールとの反応においてはメタラホスホランを保持したまま、リン上の置換基交換反応が可能であることを見出した。
- b) 遷移金属とリン間に多重結合をもつ錯体の研究：14族典型元素とホスフェニウムを配位子とする鉄錯体が非常に興味深い反応性を示すことを明らかにした。14族配位子がアルキル基の場合は鉄-炭素間にホスフェニウムが挿入反応を起こし、シリル基の場合はホスフェニウム錯体が安定に存在し、スタニル基の場合はスズ上の置換基がリンに転位してスタニレン錯体が生成することを明らかにした。
- c) 遷移金属とリン間に共有結合をもつ錯体の反応性：ホスファイトを配位子とする鉄錯体とリンイリドとの反応により、鉄-リン間に共有結合を有するホスホネート錯体が生成することを明らかにした。この反応は鉄上の配位子により大きく左右される。
- d) 二核遷移金属錯体の骨格変換反応：クラスター錯体の骨格変換反応の素反応として重要な、遷移金属間結合の切断を伴う遷移金属フラグメントのシクロペンタジエニル環への転位反応の反応機構および転位の選択性について検討を行い、その原因を明らかにした。
- e) 触媒機能を有する新しい錯体の創製：シクロペンタジエニル環の変わりに、ピラゾリルボレートあるいはトリピラゾリルメタンを配位子とする前周期遷移金属錯体の合成を行っている。また合成した錯体については、そのオレフィン重合触媒能の検討を行っており、いくつかの興味ある結果を得ている。

B-1) 学術論文

H. NAKAZAWA, Y. YAMAGUCHI, T. MIZUTA and K. MIYOSHI, "Cationic Phosphenium Complexes of Group 6 Transition Metals. The Reactivity, Isomerization and the X-ray Structures", *Organometallics*, **14**, 4173 (1995).

H. NAKAZAWA, Y. TAMAGUCHI, T. MIZUTA and K. MIYOSHI, "Migratory Insertion of a Phosphorus Ligand into a Transition Metal-Alkyl Bond", *Organometallics*, **14**, 4635 (1995).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

H. NAKAZAWA, Y. YAMAGUCHI and K. MIYOSHI, "Reactivity of Cationic Transition-metal Phosphenium Complexes", XIIIth ICPC (International Conference on Phosphorus Chemistry) Abstract P3, Jerusalem (Israel, July, 1995).

B-3) 総説, 著書

H. NAKAZAWA and K. MIYOSHI, "Formation of Iron Phosphonate Complexes Containing a Covalent Bond between Iron and Phosphorus and Their Reactivity", *Trends in Organometallic Chemistry*, **1**, 295 (1994).

B-6) 学会及び社会的活動

学協会役員, 委員

IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) National Representative (II2) (1995-)

B-7) 他大学での講義

広島大学理学部 1994 年 10 月

東京工業大学資源化学研究所 1994 年 11 月

"Chemistry of Cationic Phosphenium Transition-Metal Complexes" Southern Methodist University (アメリカ) 1995 年 3 月

C) 研究活動の課題と展望

遷移金属とリンとの間の結合性に注目して研究を行っている。特によく知られている配位結合以外の結合性, 即ち共有結合, 多重結合, 異常原子価結合をもつ錯体をターゲットにしている。本年度は二重結合が非常に高いホスフェニウム錯体の性質や反応性で, 大変興味深い結果を得ることができたので, 今後も遷移金属とリン間の多重結合を意識した研究を行っていく予定である。また, これとは逆のリンの配位数が高い異常原子価リン化合物の錯体の研究も相補的に進めていき, 結合性の本質を理解していく予定である。

錯体触媒研究部門

中 村 晃 (教授) *)

A-1) 専門領域：錯体触媒

A-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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 一次元金属クラスター：直線状に4つの遷移金属をつなぐ能力を持つ3座キレート配位子によってM-M'-M'-M型
の混合金属一次元クラスター錯体を各種合成し、更にこの両末端にアセチレンの様な三重結合系を結合させて直
線8原子の有機金属共役系をはじめて合成した。これらのなかには伝導性および磁性を示すものも見い出されて
いる他、NLOのような光物性も期待されている。
- b) ニオブおよびタンタル錯体：シクロペンタジエニル基と1, 3-ジエンを配位子として持つニオブおよびタンタル
錯体はカルベン、ベンザインまたはカチオン性アルキルを強く結合して選択的な反応を行うほか、重合触媒とし
ても働くことがわかった。なかでも、メチルアルミノキサンを加えて活性化した均一系錯体触媒はエチレンのリ
ビング高重合を初めて実現した。
- c) 生体関連反応性錯体：金属酵素の活性部位にはシステインの硫黄配位子が存在することがよく見られ、この硫黄
原子に蛋白質のアミノ基より水素結合がかかっている。このような状況を各種のモデル配位子によって単純化し、
鉄やニッケル、コバルトを結合させて水素結合の効果を調べている。最も重要な結果は金属中心の酸化還元電位
を正側シフトするものであり、生体中での穏やかな反応のために極めて重要な効果であることがわかった。

B-1) 学術論文

H. OKU, N. UYAMA, M. KONDO and A. NAKAMURA, "Oxygen Atom Transfer Systems in which the (μ -Oxo)
dimolybdenum (V) Complex Formation Does Not Occur : Syntheses, Structures, and Reactivities of Monooxomolybdenum
(IV) Benzenedithiolato Complexes as Models of Molybdenum Oxidoreductases", *Inorg. Chem.* **33**, 209 (1994).

H. OKU, N. UYAMA, A. NAKAMURA, Y. KAI and N. KANEHISA "The Stabilization of Dioxomolybdenum (VI)
Dithiolene Complex by the Electron Withdrawing Substituent on the Dithiolene Ligand: Comparison of Reactivities of
Monooxomolybdenum (IV) Complex with $R_2S_2C_2$ ($R = -CN$ and $-COOMe$) Ligands as Models of Molybdenum
Oxidoreductases", *Chem. Lett.* **607**, (1994).

K. TATSUMI, A. TAHARA and A. NAKAMURA, "Linear vs. bent M-O-R bonds in dometal alkoxides: X-ray crystal
structure of $(C_5Me_5)Ta(StBu)_3(OnBu)$ and EHMO analysis", *J. Organomet. Chem.*, **471**, 111 (1994).

K. MASHIMA, Y. NAKAYAMA, K. TAKEI, A. NAKAMURA, Y. KAI and N. KANEHISA, "A New Convenient
Preparation of Monocyclooctatetraenyl-lanthanide Complexes from Metallic Lanthanides and Oxidants", *J. Organomet.
Chem.* **473**, 85 (1994).

- H. YASUDA, Y. NAKAYAMA, K. TAKEI, A. NAKAMURA, Y. KAI and N. KANEHISA, "Reaction Courses for Formation of Early Transition Metal Phenoxides", *J. Organomet. Chem.* **473**, 105 (1994).
- K. MASHIMA, H. SUGIYAMA and A. NAKAMURA, "Diene Complex of Lanthanum: The Crystal Structure of a Diene-bridged Dilanthanum Complex, $[\text{LaI}_2(\text{thf})_3(\mu\text{-}\eta^4\text{:}\eta^4\text{-PhCH=CHCH=CHPh})\text{LaI}_2(\text{thf})_3]$ ", *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* 1581 (1994).
- N. UEYAMA, M. KONDO, H. OKU and A. NAKAMURA, "Structure and Properties of $(\text{NEt}_4)_2[\text{Mo}^{\text{IV}}\text{O}(\alpha,2\text{-toluenedithiolato})_2]$ ", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **67**, 1840 (1994).
- K. MASHIMA, S. FUJIKAWA, H. URATA, E. TANAKA and A. NAKAMURA, "Polyethylene with Extremely Narrow Polydispersity Obtained from the New Catalyst Systems $\text{Nb}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)(\eta^4\text{-diene})\text{Cl}_2\text{-MAO}$ and $\text{Nb}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)(\eta^4\text{-diene})_2\text{-MAO}$ ", *J. Chem. Soc. Chem. Commun.*, 1623, (1994).
- K. MASHIMA, H. SUGIYAMA, N. KANEHISA, Y. KAI, H. YASUDA and A. NAKAMURA, "Diene Complexes of Calcium and Strontium: First Crystal Structures of Calcium- and Strontium-Diene Complexes, $\text{M}(2,3\text{-dimethyl-1,4-diphenyl-1,3-butadiene})(\text{THF})_4$ ($\text{M}=\text{Ca}$ and Sr)", *J. Am. Chem. Soc.*, **116**, 6977 (1994).
- K. MASHIMA, Y. NAKAYAMA, H. FUKUMOTO, N. KANEHISA, Y. KAI and A. NAKAMURA, "Formation of Lanthanoid(II) and Lanthanoid(III) Thiolate Complexes Derived from Metals and Organic Disulfides: Crystal structures of $[\{\text{Ln}(\text{SAr})(\mu\text{-SAr})(\text{thf})_3\}_2]$ ($\text{Ln}=\text{Sm}, \text{Eu}$), $[\text{Sm}(\text{SAr})_3(\text{py})_2(\text{thf})]$ and $[\text{Yb}(\text{SAr})_3(\text{py})_3]$ ($\text{Ar}=\text{2, 4, 6-Triisopropylphenyl}$; $\text{py}=\text{Pyridine}$)", *J. Chem. Soc. Chem. Commun.*, 2523 (1994).
- N. UEYAMA, H. OKU, T. OKAMURA, A. NAKAMURA, A. KAJIWARA and M. KAMACHI, "ESR Study of $(\text{Mo}^{\text{VO}}\text{O})^{3+}$ and $(\text{W}^{\text{VO}}\text{O})^{3+}$ Thiolate or Selenolate Complexes", *Magnetic Resonance in Medicine*, **6**, 216 (1995).
- H. KAWAGUCHI, K. TATSUMI and A. NAKAMURA, "A Zigzag chain Structure of a 3-Thiapentane-1,5-dithiolato Vanadium Complex linked by Lithium Ions", *J. Chem. Soc. Chem. Commun.*, 111 (1995).
- W. SUN, T. UENO, N. UEYAMA and A. NAKAMURA, " ^{19}F NMR Investigations of Cobalt(II) Complexes with Cysteine-Containing Peptide Ligands", *J. Chem. Soc. Chem. Commun.*, **33**, 174 (1995).
- A. NAKAMURA and N. UEYAMA, "Chemical Functions of Single and Double NH---S Hydrogen Bond in Iron-Sulfur Metalloproteins: Model Ligands with Cys-containing Peptide and Simple Acylaminobenzenethiolate", *Nuclear Magnetic Resonance of Paramagnetic Macromolecules*, 265 (1995).
- H. ZAIMA, N. UEYAMA, H. ADACHI and A. NAKAMURA, " ^1H -, ^{13}C -, and ^{113}Cd -NMR Study of the $\text{Cd}(\text{II})$ Complex of a Blocked Peptide, Z-Cys-Ala-Pro-His-OMe, in Organic Solvents", *Biopolymers*, **35**, 319 (1995).
- A. NAKAMURA, "Organometallic π -Conjugated Systems", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **68**, 1515 (1995).
- H. OKU, N. UEYAMA and A. NAKAMURA, "Thiolato-Activated Oxo-Metal Bond Features in Molybdenum and Tungsten Oxidoreductase Models As Revealed by Raman Spectroscopy", *Inorg. Chem.*, **34**, 3667 (1995).
- K. MASHIMA, S. FUJIKAWA, Y. TANAKA, H. URATA, T. OSHIKI, E. TANAKA and A. NAKAMURA, "Living Polymerization of Ethylene Catalyzed by Diene Complexes of Niobium and Tantalum, $\text{M}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)(\eta^4\text{-diene})\text{X}_2$ and $\text{M}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)(\eta^4\text{-diene})_2$ ($\text{M}=\text{Nb}$ and Ta), in the Presence of Methylaluminoxane", *Organometallics*, **14**, 2633 (1995).
- A. NAKAMURA, "Bis(α -camphorquinone dioximate)cobalt", *Encyclopedia of Reagents for Org. Syn. J. Wiley*, (1995).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. MASHIMA, Y. NAKAYAMA, H. FUKUMOTO, N. KANEHISA, S. MOURI, Y. KAI and A. NAKAMURA, "Direct Approach to Prepare Thiolate Complexes of Sm(II), Eu(II) and Yb(II)", 30th Int. Conf. Coordination Chemistry, Kyoto, Japan, July 1994.

H. NAKANO, K. MASHIMA and A. NAKAMURA, "Synthesis of Straight Linear M-Mo-Mo-M(M=Pd,Pt) Complexes", 30th Int. Conf. Coordination Chemistry, Kyoto, Japan, July 1994.

N. UYEYAMA, H. ZAIMA and A. NAKAMURA, "Observation of Direct Fermi Contact Interaction Through NH...S Hydrogen Bonds in Termolecular Association between Rubredoxin Model Complexes", 30th Int. Conf. Coordination Chemistry, Kyoto, Japan, July 1994.

H. OKU, N. UYEYAMA and A. NAKAMURA, "Structure and Properties of Dioxomolybdenum(VI) and Monooxomolybdenum(IV) Dithiolene Complexes as Models of Molybdenum Oxidoreductases" 30th Int. Conf. Coordination Chemistry, Kyoto, Japan, July 1994.

B-3) 総説, 著者

真島和志, 中村晃, 「有機金属錯体触媒を用いるリビング重合」触媒, **36**, 572 (1994).

A. NAKAMURA, "Interview of Kazuo Saito (International Christian University)", *Coord. Chem. Rev.*, **133**, 25 (1994).

A. NAKAMURA and N. UYEYAMA, "Iron-Sulfur Models of Protein Active Sites", *Encyclopedia of Inorganic Chemistry*, John Wiley & Son, Vol.14, Chapter 25, pp.1883-1896 (1994).

B-4) 招待講演

A. NAKAMURA, "Hydrogen Bonding to the Iron Sulfur Center", NATO Advanced Research Workshop on NMR of Paramagnetic Macromolecules, Sintra, Portugal, June 1994.

A. NAKAMURA, "New Reactive Organometallics of Nb and Ta", 30th Int. Conf. on Coordination Chemistry, Kyoto, July 1994.

A. NAKAMURA, "Novel Aspects of Organometallic Chemistry of Nb and Ta", European-Japanese Symposium on Selective Processes and Catalysis, Rennes, France, Sept. 1994.

A. NAKAMURA, "Catalytic Aspects of Organometallics of Nb and Ta", 4th Eurasia Conf. on Chemical Science, Kuala Lumpur, Malaysia, Dec. 1994.

B-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

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

日本化学会近畿支部長 (1990~92)

日本化学会国際交流専門委員 (1992~)

日本化学会命名法委員 (1986~1992)

日本化学会化学普及委員 (1990～91)
日本化学会編 “第4版実験化学講座” 編集理事 (1988～1994)
近畿化学協会理事 (1980～85)
近畿化学協会有機金属部会長 (1993～1995)
日本化学会化学展 1977 年, そごう百貨店, 実行委員

学会の組織委員

第 63 回日本化学会春季年会実行委員長(1992).
7th Int. Symp. on Homogeneous Catalysis, Chairman, Kobe, Japan (Sept. 1986).
Int. Symp. Homogeneous Catalysis, Organizing Committee (1984～).
Int. Symp. on the Relation between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis, Organizing Committee (1988～)
Treasurer, for the 7th Symp. in Tokyo (1992).
Int. Conf. Organometallic Chemistry, Organizing Committee (1993～).

文部省, 学振等の委員会

文部省学術審議会専門委員 (1986～1995)
日本学術会議化学研究連絡委員 (1988～90, 1994～)
井上科学振興財団選考委員 (1989～1994)
山田科学振興財団選考委員 (1995～)

学術雑誌編集委員

J. Organomet. Chem, Regional Editor (1990～)
J. Organomet. Chem, Editorial Board (1984～)
Organometallics, Editorial Board (1986-88)
Catalysis Letters, Editorial Board (1990～)
Polymer International, Editorial Board (1992～)
Textbook Series-Inorganic Chemistry, Editorial Board, J. Wiley (1991～)
Book series, “Catalysis by Metal Complexes”, Editorial Board, Kluwer Scientific Press (1990～)

科研費の班長, 研究代表者等

重点研究班長 (1990～93)
特定研究班長 (1985～1989)
特別推進研究代表者 (1994 年～)

B-7) 他大学での講義

大阪大学理学部, 有機金属化学 (学部 4 回生) 1994 年 4～9 月
大阪大学大学院, 理学研究科, 基礎高分子学 1994 年 10 月～1995 年 2 月
名古屋大学工学部, 高分子合成化学 (学部 3 回生) 1995 年 2 月

C) 研究活動の課題と展望

遷移金属間に多重結合をもつ直線状4核錯体（一次元金属クラスター）については，さらに共役系を延ばした有機金属錯体として磁性や光学特性を系統的に研究し，新しい物質系として確立しその特徴を明確にする。

5族のニオブ，タンタルの新しいジエン錯体を合成し選択的な反応を調べる。こうしてジエン配位子の反応制御特性が初めて明らかになる。

生体内電子移動での金属中心と配位子の協同作用の本質を金属－配位子結合の多重性より理解し体系化する。

*) 1995年4月1日付で大阪大学理学部教授

塩谷光彦(教授)

A-1) 専門領域: 錯体化学, 有機化学

A-2) 研究課題

- a) 金属錯体による核酸分子の認識・変換
- b) 金属酵素モデル錯体の合成と触媒作用
- c) 金属錯体による生体分子センサー
- d) 金属錯体による炭酸ガス固定
- e) 抗 HIV 活性金属錯体の合成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 金属錯体による核酸分子の認識・変換: 遺伝情報伝達に関与する核酸の特定部位を認識・変換する化合物は、遺伝子発現を制御できる可能性を秘めている。大環状テトラアミン亜鉛錯体は、生理 pH の水中でチミン塩基と可逆的に 1:1 結合し、他の核酸塩基とは有効な相互作用を示さない。またこの亜鉛錯体は、核酸のハイブリッド形成を阻害したり、二本鎖核酸を融解する機能をもつ。これらの認識・変換機構を基に、特定の核酸高次構造を認識・変換する新しい金属錯体の分子設計を行っている。
- b) 金属酵素モデル錯体の合成と触媒作用: 大環状トリアミン亜鉛錯体は、生体内に多く存在する亜鉛酵素の活性中心と類似した構造・機能を有し、アルコールデヒドロゲナーゼに見られる水素移動反応（例えばアルデヒドからアルコールへの還元反応）を触媒することを見い出した。
- c) 金属錯体による生体分子センサー: 核酸の特定の構造や構造変化を認識する遺伝子プローブの開発は、遺伝子疾患の検出や治療を行う上で非常に有用である。三つのアミドペンダントを有する大環状ポリアミンテルビウム錯体は、グアニン塩基を多く含む核酸と選択的に相互作用し強い蛍光を発する。グアニン塩基からのエネルギー移動によりテルビウム錯体が蛍光を発することがこれまでに明らかになっている。現在、染色体の末端にあり老化現象と密接な関係があるテロメア DNA との相互作用およびその機構について検討している。
- d) 金属錯体による炭酸ガス固定: 分子内に光増感ルテニウム錯体をもつ種々の大環状ニッケル錯体を用い、光化学的炭酸ガス還元反応を行った。光増感錯体と触媒部位であるニッケル錯体の空間的配置をコントロールすることにより、長時間の光照射にも安定な優れた光触媒を構築することができた。
- e) 抗 HIV 活性金属錯体の合成: 種々の大環状ポリアミンおよび金属錯体が強い抗 HIV 活性を有することを見い出した。特に、適当な芳香環をスペーサーとする二核錯体の活性は極めて高い。これらの第一次作用点は、HIV 細胞と T 細胞の吸着あるいは、ウィルスの脱殻過程であることを見い出した。

B-1) 発表論文

Y. INOUE, T. KANAMORI, T. YOSHIDA, X. BU, M. SHIONOYA, T. KOIKE and E. KIMURA, "Inhibition of Human Immunodeficiency Virus Proliferation by Macrocyclic Polyamines and Their Metal Complexes", *Biol. Pharm. Bull.*, **17**, 243 (1994).

E. KIMURA, S. WADA, M. SHIONOYA and Y. OKAZAKI, "New Series of Multifunctionalized Nickel(II)-Cyclam (Cyclam = 1,4,8,11-Tetraazacyclotetradecane) Complexes. Application to the Photoreduction of Carbon Dioxide", *Inorg. Chem.*, **33**, 770(1994).

M. SHIONOYA, T. IKEDA, E. KIMURA and M. SHIRO, "Novel "Multipoint" Molecular Recognition of Nucleobases by a New Zinc(II) Complex of Acridine-Pendant Cyclen (Cyclen = 1,4,7,10-Tetraazacyclododecane)", *J. Am. Chem. Soc.*, **116**, 3848 (1994).

E. KIMURA, I. NAKAMURA, T. KOIKE, M. SHIONOYA, Y. KODAMA, T. IKEDA and M. SHIRO, "Carboxyester Hydrolysis Promoted by a New Zinc(II) Macrocyclic Triamine Complex with an Alkoxide Pendant: A Model Study for the Serine Alkoxide Nucleophile in Zinc Enzymes", *J. Am. Chem. Soc.*, **116**, 4764 (1994).

X. BU, Y. CHEN, M. SHIONOYA and E. KIMURA, "Synthesis and Properties of a Novel Nickel(II) Cyclam (Cyclam = 1,4,8,11-Tetraazacyclotetradecane) Complex Covalently Attached to Ru(Bpy)₃²⁺ (Bpy = 2,2'-Bipyridyl)", *Polyhedron*, **13**, 325(1994).

M. SUGIYAMA, T. KUMAGAI, M. SHIONOYA and E. KIMURA, "Inactivation of Bleomycin by an N-Acetyltransferase in the Bleomycin-producing Strain *Streptomyces Verticillius*", *FEMS Microbiol. Lett.*, **121**, 81 (1994).

M. SHIONOYA, M. SUGIYAMA and E. KIMURA, "Uracil-targeted Inhibition of Poly(A)-Poly(U) Hybridization by a Zinc(II)-cyclen Complex", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 1747 (1994).

E. KIMURA, T. IKEDA, M. SHIONOYA and M. SHIRO, "Molecular Recognition of Terephthalic Acid by Supramolecular Self-Assembly of an Acridine-Pendant Cyclen-Zn^{II} Complex", *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **34**, 663 (1995).

X. H. BU, D. L. AN, Y. T. CHEN, M. SHIONOYA and E. KIMURA, "New 1,4,7,10-Tetraazacyclotridecane-11,13-dione Ligands Appended with Additional Donor(s) 8-Methylquinoline(s): Crystal Structures and Characterization of Their Copper(II) Complexes", *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, 2289 (1995).

J. H. R. TUCKER, M. SHIONOYA, T. KOIKE and E. KIMURA, "A Zinc(II)-Cyclen Complex Attached to an Anthraquinone Moiety that Acts as a Redox-Active Nucleobase Receptor in Aqueous Solution", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **68**, 2465 (1995).

Y. INOUE, T. KANAMORI, M. SUGIYAMA, T. YOSHIDA, T. KOIKE, M. SHIONOYA, K. ENOMOTO, K. SUEHIRO and E. KIMURA, "Dimeric Macrocyclic Polyamines with Potent Inhibitory Activity against Human Immunodeficiency Virus", *Antiviral Chem. & Chemother.*, **6**, 337 (1995).

B-3) 総説, 著書

E. KIMURA and M. SHIONOYA, "Macrocyclic Polyamine Complex beyond Metalloenzyme Models", in *Transition Metal Ions in Supramolecular Chemistry*, Ed. L. Fabbrizzi, Kluwer, p245-259 (1994).

木村栄一, 塩谷光彦「亜鉛酵素モデルと核酸認識」油化学, **43**, 906 (1994).

塩谷光彦, 木村栄一「オリンピック化合物を生んだ超分子化学」化学, **50**, 60 (1995).

木村栄一, 塩谷光彦「亜鉛金属酵素とモデル系」化学総説 (生物無機化学の新展開) No. 24, 155 (1995).

塩谷光彦, 木村栄一「亜鉛錯体と核酸」ファルマシア, **31**, 598 (1995).

B-4) 招待講演

塩谷光彦, "大環状亜鉛錯体による核酸分子認識と遺伝子発現制御"

第44回錯体化学討論会若手の会シンポジウム, 慶応義塾大学, 1994年11月

B-5) 学会および社会的活動

学協会役員，委員

日本化学会生体機能関連化学部会若手の会中国四国支部幹事（1993～95）

日本化学会生体機能関連化学部会幹事（1995～）

学会誌編集委員

日本薬学会ファルマシアトピックス専門委員（1993～95）

C) 研究活動の課題と展望

金属錯体による遺伝子発現制御は生命現象の根幹に関わることから，多くの科学者の注目を浴びているが，本格的な研究は緒についたばかりである。今後は，遺伝子発現における金属錯体（生体金属イオン，人工金属錯体）の役割を，

- （1）認識場（遺伝子の標的部位への結合，反応開始のためのシグナル誘導）
- （2）反応場（遺伝子の化学変換および高次構造変換，遺伝子とのエネルギー授受）
- （3）機能発現のための構造安定化（遺伝子高次構造の維持，認識能の付与）

という観点から分子レベルで解明し，これを機能性金属錯体の創製に展開したい。

錯体物性研究部門

田 中 晃 二 (教授)

A-1) 専門領域：錯体化学

A-2) 研究課題

- a) 金属錯体による二酸化炭素の活性化
- b) 硝酸脱窒反応機構
- c) 機能性金属錯体の合成

A-3) 研究活動の概略と成果

- a) 配位子上での酸化還元反応を利用した二酸化炭素の多電子還元反応
- b) 二酸化炭素還元でのホルミル錯体を經由する新規ギ酸生成機構の確立
- c) 金属およびイオウでの2分子の二酸化炭素の活性化によるシュウ酸生成
- d) 多段階二酸化炭素還元における Ru-CO₂, Ru-COOH, Ru-CO, Ru-CHO, Ru-CH₂OH 結合の相対的安定性
- e) 亜硝酸イオン還元反応における N-N 結合生成過程。

B-1) 発表論文

K. TOYOHARA, H. NAGAO, T. MIZUKAWA and K. TANAKA, "Ruthenium Formyl complexes as the Branch point in Two- and Multi-Electron Reduction of CO₂", *Inorg.Chem.*, **34**, 5399 (1995).

Y. KUSHI, H. NAGAO, T. NISHIOKA, K. ISOBE, and K. TANAKA, "Remarkable Decrease in Overpotential of Oxalate Formation in Electrochemical CO₂ Reduction by Metal-Sulfide Cluster", *J. Chem. Soc., Chem. Comm.*, 1223 (1995).

H. NAKAJIMA, T. MIZUKAWA, H. NAGAO and K. TANAKA, "Catalytic Formation of Ketones via Double Alkylation of Carbon Monoxide Resulting from Reductive Disproportionation of Carbon Dioxide by [Ru(bpy)₂(qu)(CO)]²⁺ (bpy = 2,2'-bipyridine, qu=quinoline)", *Chem. Lett.*, 251 (1995).

Y. KUSHI, H. NAGAO, T. NISHIOKA, K. ISOBE and K. TANAKA, "Oxalate Formation in Electrochemical CO₂ Reduction Catalyzed by Rhodium-Sulfur 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 Nitrito-Copper Complexes as Reaction Intermediates in Electrochemical Reduction of Nitrite to Dinitrogen Oxide", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **68**, 581 (1995).

H. NAKAJIMA and K. TANAKA, "Novel Reversible Metallacyclization in [Ru(bpy)₂(η¹-napy)(CO)]²⁺ (bpy = 2,2'-bipyridine, napy = 1,8-naphthyridine) by Intramolecular Attack of Non-Bonded Nitrogen of napy to Carbonyl Carbon", *Chem. Lett.*, 891 (1995).

D. OOHAMA, N. NAGAO, F. S. HOWELL, M. MUKAIDA, H. NAGAO and K. TANAKA, "Successive Chemical Reactions Accompanying a One-Electron Oxidation of a {MNO}6-Type Nitrosyl Complex, Pentachloro(nitrosyl)ruthenate(2-) and a Characterization of the Product Species", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **68**, 2897 (1995).

T. DANIEL, K. TANAKA and A. NAKAMURA, "Norbornadiene(bipyridyl)molybdenum(II) Complexes: Synthesis, Structure and Reactivity of $[\text{Mo}(\text{CO})(\text{C}_7\text{H}_8)(\text{C}_{10}\text{H}_6\text{R}_2\text{N}_2)\text{X}_2](\text{X}=\text{I}, \text{Br})$ ", *Chem.Ber.*, **128**, 1007 (1995).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

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.

B-3) 総説, 著書

田中晃二, 「二酸化炭素・化学・生化学・環境」現代化学, 25, 18 (1994)

B-4) 招待講演

K. TANAKA, "Activation of Carbon Dioxide on Transition Metal Complexes", Europe-Japan Joint Symposium on the activation of Small Molecules, Renne (France) Sep. 13 1994.

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員・委員

地球環境関連研究動向の調査化学委員会委員 (1990~93)

錯体化学研究会事務局長 (1990~)

学会の組織委員

第30回錯体化学国際会議事務局長 (1990~94)

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) (1992~94)

文部省重点領域研究「生物無機化学」班長 (1992~94)

B-7) 他大学での講義

大阪大学工学部 工業物理化学 1994年6月

C) 研究活動の課題と展望

金属錯体に結合した二酸化炭素はプロトン付加あるいは還元的不均化により, 炭素一酸素結合が開裂して一酸化炭素に変換される。これらの変換反応を利用した炭素-炭素結合生成を伴った二酸化炭素の多電子還元反応系の開発を行った。さらに, 金属-イオウクラスターの金属とイオウ上での2分子の二酸化炭素の活性化により, 熱力学的平衡電位での触媒的なシュウ酸合成が可能であることを示した。その結果, イオウ上での二酸化炭素の活性化は炭素-酸素結合開裂を伴わない, 二酸化炭素固定反応系の開発に対して有効な方法論であることが明らかとなった。

高 橋 保 (助教授) ^{*)}

A-1) 専門領域：有機金属錯体化学

A-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) 炭素炭素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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

近年 Kaminsky 触媒というジルコノセン錯体を利用したアルケン類の重合触媒が 1980 年に開発され、ジルコノセン錯体上でのアルケンの挙動特にアルケンの結合生成反応における選択性の制御が産業界を中心に注目を浴びていたが、これまでこのジルコノセン錯体にアルケン類が配位した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。

また最近 3 つの異なるアセチレン類を高選択的に高収率で合成する方法の開発に初めて成功した。

B-1) 学術論文

T. TAKAHASHI, M. KOTORA and K. KASAI, "Zirconium Mediated or Catalyzed Highly Stereoselective Cyclization of 1,4,7-Trienes", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 2693 (1994).

Y. MIZOBE, Y. YOKOBAYASHI, H. OHSHITA, T. TAKAHASHI and M. HIDAI, "Preparation of Heterobimetallic Complexes with a Bridging Dinitrogen Ligand, $[WX(PMe_2Ph)_4(\mu-N_2)MCp_2Cl]$ ($M=Ti$, $X=Cl$, $M=Zr, Hf$, $X=I$) and X-ray Structure of $[W(PMe_2Ph)_3(py)(\mu-N_2)ZrCp_2Cl]$ ($py=pyridine$)", *Organometallics*, **13**, 3764 (1994).

K. KASAI, M. KOTORA, N. SUZUKI and T. TAKAHASHI, "Chemoselective C-C bond formation reaction of Zirconacyclopentenes", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 109 (1995).

T. TAKAHASHI, T. ISHIDA and Y. NISHIHARA, "Practical and Selective Method for Preparation and Reactions of Cp_2HfRCl and Cp_2HfRR' ", *Chem. Lett.*, 159 (1995).

T. TAKAHASHI, K. KASAI, Z. XI and V. DENISOV, "Reaction of Zirconocene Ethylene Complex with Diynes: Formation of Bridged Zirconacyclopentenes", *Chem. Lett.*, 347 (1995).

T. TAKAHASHI, M. KOTORA and Z. XI, "Cycloaddition of Zirconacyclopentadienes to Alkynes Using Copper Salts: Formation of Benzene Derivatives", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 361 (1995).

T. TAKAHASHI, M. KOTORA and Z. XI, "Formation of Five-membered Carbocyclic Ring by Reaction of Zirconacyclopentane with $RCOCl$ ($R = Ph, Pri, Et$)", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 1503 (1995).

T. TAKAHASHI, Z. XI, Y. OBORA and N. SUZUKI, "Intramolecular Coupling of Alkynyl Groups of Bis(Alkynyl)silane Mediated by Zirconocene Compounds: Formation of Silacyclobutene Derivatives", *J. Am. Chem. Soc.*, **117**, 2665 (1995).

Z. XI, R. HARA and T. TAKAHASHI, "Highly Selective and Practical Alkyne-Alkyne Cross-Coupling Using Cp_2ZrBu_2 and Ethylene", *J. Org. Chem.*, **60**, 4444 (1995).

N. SUZUKI, D. Y. KONDAKOV, R. HARA, M. KAGEYAMA, M. KOTORI and T. TAKAHASHI, "Novel Type of Carbozirconation Reaction of Alkynes", *Tetrahedron*, 4519 (1995).

T. TAKAHASHI, D. Y. KONDAKOV, Z. XI and N. SUZUKI, "A Vinylzirconation of Alkynes", *J. Am. Chem. Soc.*, **117**, 5871 (1995).

B-4) 招待講演

T. TAKAHASHI, "Selective transformation reaction using carbon-carbon bond cleavage reaction of zirconacycles", at the Symposium of Organometallics in Organic Synthesis. Sung Kyun Kwan University, Korea Jan. (1995)

高橋保, 「ジルコセン錯体の高選択的な反応とその応用」(依頼講演) 日本化学会第69春季年会, 立命館大学, 京都 1995年3月

B-5) 受賞, 表彰

有機合成化学協会奨励賞, 高橋保, 1993年3月

B-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

B-7) 他大学での講義

'Organozirconium Chemistry' Alcala 大学 (スペイン) (客員教授として毎週1時間, 1995年4月~7月)

'Highly Selective Reactions Using Zirconocene Complexes-Formation of Benzene Derivatives from Three Different Alkynes' Oviedo 大学 (スペイン) (1995年6月)

'Intramolecular Coupling of Alkynyl Groups of Bis(alkynyl)silane' Autonome 大学 (スペイン) (1995年7月)

'Preparation and Reactions of Zirconocene-Ethylene Complexes' Zaragoza 大学 (スペイン) (1995年7月)

C) 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いる。1つの目的としては前周期遷移金属錯体に特徴的な反応を開発することであるが、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。常に新しい概念の創造と反応の設計が中心であり、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上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組んでいる。

*) 1995年10月1日付で北海道大学触媒化学研究センター教授

3-8 研究施設

電子計算センター

青 柳 睦 (助教授)

A-1) 専門領域：理論化学

A-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

A-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で、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(スクジウムビリヤード, 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較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、スクジウ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状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ィットし、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、スタジウ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、パラメータ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系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、金属クラスター等、従来の理論では計算が困難な系に並列手法を応用した。例としてネットワークで結合された複数台の高速計算機を用い、レチナル分子、ベリリウ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 (spool of tasks 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資源を活用できたため、実計算時間が大幅に短くなることが示された。

B-1) 学術論文

S. NANBU, F. GOODMAN AND H. NAKAMURA, “Complete reflection, Bound states in the continuum and molecular switching in finite nonadiabatic tunneling systems”, *Phys. Rev. Lett.*

T. TAKAMI, “Semiclassical study of avoided crossing”, *Phys. Rev. E*, **52**, 2434 (1995).

B-4) 招待講演

青柳睦, 「分子軌道並列計算プログラムの開発と広域情報ネットワークへの応用」日本化学会春期年会, 京都府, 1995年3月27~30日

C) 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クスに関す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。

機器センター

富 宅 喜 代 一 (助教授) *)

A-1) 専門領域：物理化学

A-2) 研究課題

- a) 溶媒和アルカリ金属イオンの電子構造
- b) 金属イオンの溶媒和ダイナミクス
- c) クラスター反応の溶媒和過程

A-3) 研究活動の概略と主な成果および展望

- a) 磁気ボトル型の光電子分光装置を試作し、溶媒和電子の生成過程と関連してNaおよびLi負イオンを含むアンモニア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、クラスター内でのアルカリ金属原子の電子構造について新たな知見を得ると共に、金属原子の溶解現象を見出した。
- b) 金属イオンの水和ダイナミクスの微視的情報を得るために、サイズ選別した $\text{Ca}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n=1-9$)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 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の Ca^+ の光酸化反応のダイナミ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 ラジカルのアンモニアクラスター内での生成過程と安定性を調べるために、フェムト秒レーザーを用いたアンモニアクラスターの光解離実験を行った。この結果、 NH_4 と $\text{NH}_4(\text{NH}_3)_n$ の生成速度と寿命を明らかにした。また、新たに $\text{NH}_4\text{-NH}_2$ がクラスター内に捕捉されることを見出し、アンモニアクラスターの光イオン化過程の新しい機構を提案した。

B-1) 学術論文

K. FUKE and R. TAKASU, "Ultrafast Photochemistry of Ammonia Clusters: Formation and Decay of Hypervalent Molecular Clusters Containing the NH_4 Radical", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **68**, 12 (1995).

M. SANEKATA, F. MISAIZU, K. FUKE, S. IWATA and K. HASHIMOTO, "Reaction of Singly Charged Alkaline-earth Metal Ions with Water Clusters: Characteristic Size Distribution of Product Ions", *J. Am. Chem. Soc.* **117**, 747 (1995).

F. MISAIZU, K. TSUKAMOTO and K. FUKE, "Photoelectron Spectroscopy of Mass-Selected Copper-Water Cluster Negative Ions", *Laser Chem.* **15**, 195 (1995).

H. WATANABE, S. IWATA, K. HASHIMOTO, F. MISAIZU and K. FUKE, "Molecular Orbital Studies of the Structures and Reactions of Magnesium-water Cluster Ions $\text{Mg}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ ", *J. Am. Chem. Soc.* **117**, 755 (1995).

B-4) 招待講演

K. FUKE, "ClusterSize Effect on the Photodissociation of $\text{Mg}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ and $\text{Ca}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ ", Seventh International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (神戸) 1994年9月.

K. FUKE, "Electronic Structure and Stability of Hypervalent Molecular Clusters", Yamada Conference XLIII on Structures and Dynamics of Clusters (下田) 1995年5月.

富宅喜代一, 「クラスターを用いた溶媒和電子の研究」放射線化学研究会, 東京, 1995年1月.

B-6) 学会および社会活動

日本分光学会東海支部幹事 1990～1992 年

C) 研究活動の課題と今後の展望

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のダイナミックスをフェムト秒レーザー分光法を用いて調べる予定である。

*) 1995 年 7 月 1 日付で神戸大学理学部教授

化学試料室

山下 敬 郎 (助教授)

A-1) 専門領域：有機化学

A-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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 新しいドナーおよびアクセプター分子の合成：1, 2, 5-チアジアゾール, 1, 3-ジチオールなどのヘテロ環を有する新規なドナーおよびアクセプター分子を合成した。これらの中にはヘテロ原子の相互作用で特異な分子集合体を形成するものがあった。
- 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- π -アクセプター系分子を設計合成し、単一成分での高い電導性やホール効果等の興味ある物性を見つけた。
- d) 小さなバンドギャップ有機ポリマーの開発：縮合チアジアゾール環を利用することで約 0.4eV 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。

B-1) 学術論文

K. ONO, S. TANAKA and Y. YAMASHITA, "Benzobisthiadiazoles Containing Hypervalent Sulfur Atoms: Novel Heterocycles with High Electron Affinity and Short Interheteroatom Contacts", *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **33**, 1977 (1994).

K. SAITO, C. SUGIURA, E. TANIMOTO, K. SAITO and Y. YAMASHITA, "Synthesis and Properties of Tetrathiafulvalene Derivatives Containing Quinoid Structures: Novel Electron Donors of Organic Conductors", *Heterocycles*, **38**, 2153 (1994).

A. OHTA and Y. YAMASHITA, "Preparation and Properties of Tris (1,3-dithiole) Donors Containig Thiophene Spacer Units", *Heterocycles*, **40**, 123 (1995).

A. OHTA and Y. YAMASHITA, "Preparation and Properties of Bis[5-(6-methyl-1,4-dithiaflven-6-yl)-2-thienyl]methanes Affording Near-Infrared Absorbing Cations by Oxidation", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 557 (1995).

K. IMAEDA, Y. YAMASHITA, S. TANAKA and H. INOKUCHI, "New Low- Temperature Organic Metals of (BEDT-ATD)₂X(THF) (X=PF₆, AsF₆)", *Synth. Met.*, **73**, 107 (1995).

K. IMAEDA, Y. LI, Y. YAMASHITA, H. INOKUCHI and M. SANO, "Temperature Dependence of Hall Mobility in a Single Crystal of Organic Semiconductor BTQBT", *J. Mater. Chem.*, **5**, 861 (1995).

M. KARIKOMI, C. KITAMURA, S. TANAKA and Y. YAMASHITA, "New Narrow-Bandgap Polymer Composed of Benzobis(1,2,5-thiadiazole) and Thiophenes", *J. Am. Chem. Soc.*, **117**, 6791 (1995).

A. OHTA and Y. YAMASHITA, "Oxidative Intramolecular Cyclization of 2,2'-Bis(1,4-dithiafulven-6-yl)-3,3'-bithienyls affording Novel Bis(1,3-dithiole) Electron Donors", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 1761 (1995).

A. HOSHINO, S. ISODA, H. KURATA, T. KOBAYASHI and Y. YAMASHITA, "Prediction of the Epitaxial Orientation of Ultrathin Organic Films on Graphite", *Jpn. J. Appl. Phys.*, **34**, 3858 (1995).

M. HIRAYAMA, M. ITASAKA, T. SUZUKI, Y. YAMASHITA and T. MIYASHI, "The π -Trianion Radical of 2,3,6,7-Tetracyanobenzo[1,2-b:4,5-b']bisdithiole-4,8-dione. Observation of ESR with ^{13}C -Satellites in Natural Abundance", *Chem. Lett.*, 511 (1995).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

S. TANAKA and Y. YAMASHITA, "Syntheses of Narrow Bandgap Heterocyclic Copolymers of Aromatic-Donor and Quinonoid-Acceptor Units", *Synth. Met.*, **69**, 599 (1995).

Y. YAMASHITA, S. TANAKA and K. IMAEDA, "Organic Metals Based on Butterfly- Shaped Donor Molecules", *Synth. Met.*, **71**, 1965 (1995).

B-4) 招待講演

山下敬郎「ヘテロ環を有する新規ドナー，アクセプターの合成」日本化学会秋期年会，名古屋(1994，9月)

山下敬郎「縮合複素環を有する新しい有機電導体」有機合成化学協会講演会，宇都宮(1995年2月)

B-5) 受賞，表彰

有機合成化学奨励賞 (1988年度)

B-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 (1992-1993年度)

学術雑誌編集委員

J. Mater. Chem., Advisory Editorial Board (1994-)

C) 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。今までに金属的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を持たれている小さなバンドギャップポリマーの開発も行う。

装置開発室

渡 邊 三 千 雄（助教授）

A-1) 専門領域：装置開発

A-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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 分子科学研究装置に必要な，超高真空雰囲気下で作動させる種々のアクチュエータや構成部品等を評価，開発するための多目的超高真空試験装置の試作に着手した。現状は，設計を終了し，組立開始段階である。
- b) 文献やカタログ調査により最新のピエゾ素子駆動型アクチュエータを入手し，今後，性能評価を実施する予定。
- c) 文献調査により，一部高圧技術関係の知識を習得した。

C) 研究活動の課題と展望

A-3)で述べた項目について，今後推進し，装置開発室の技術向上を図る。

浅 香 修 治 (助手)

A-1) 専門領域：レーザー分光

A-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

A-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定常的線型分光が多く行われていた。十分強かつ短時間のパルス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。その目的のためのパルス励起光源を製作している。

B-8) 特許

岡田則夫，浅香修治，宇理須恒雄（分子研），山本喜之，田辺敬一朗，熊澤佳明（住友電工）：“光学用窓及びその製造方法” 特願平 7-178660

C) 研究活動の課題と展望

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。

極端紫外光実験施設

鎌 田 雅 夫 (助教授)

A-1) 専門領域：放射光科学，光物性

A-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

A-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 結晶にアルカリハライドが吸着した場合の光電子分光測定を行ない，表面内殻励起子状態に起因した構造を決定した。また，GaAs について，角度分解光電子分光測定を行い，バンド構造を決定した。
- 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を現在建設中である。さらに，円偏光を発生させるアンジュレーターの計算を終了し，制作中である。

B-1) 学術論文

H. ITOH, S. NAKANISHI, M. KAWASE, H. FUKUDA, H. NAKATSUKA and M. KAMADA, "Accumulated photon echoes generated by synchrotron radiation", *Phys. Rev. A*, **50**, 3312 (1994).

M. A. TEREKHIN, N. YU. SVECHNIKOV, V. G. STANKEVITCH, A. A. KOLMAKOV, A. STEPANOV, V. N. BEZMELNITSIN, M. KAMADA and K. KAN'NO, "Radiative Transitions in C60 thin Films under UV Laser and SR Excitations", *Optics and Spectroscopy*, **78**, 75 (1995)

I. OUCHI, I. NAKAI, M. KAMADA, S. TANAKA and T. HAGIWARA, "Core Electron Absorption Spectra of Polyethylene terephthalate and Polyethylene 2,6-naphthalate Films", *Polymer J*, **27** 127 (1995)

M. A. TEREKHIN, A. N. VASILEV, M. KAMADA, E. NAKAMURA and S. KUBOTA, "Effects of quenching processes on fluorescence decay curves of barium fluoride excited by VUV synchrotron radiation", *Phys. Rev. B*, **52**, 3117 (1995).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

M. Kamada and H. Hama, “Status of the UVSOR Facility -1994-”, *Rev. Scientific Instrum.* **66**, 2362 (1995).

M. KAMADA, K. SAKAI, S. TANAKA, S. OHARA, S. KIMURA, A. HIRAYA, M. HASUMOTO, K. NAKAGAWA, K. ICHIKAWA, K. SODA, K. FUKUI, Y. FUJII and E. ISHIGURO, “Monochromator for circularly polarized synchrotron radiation in the energy range of 5-250 eV”, *Rev. Scientific Instrum.* **66**, 1537(1995).

O. OWAKI, S. KOYAMA, M. TAKAHASHI, T. OKADA, R. SUZUKI and M. KAMADA, “Metallic Na Formation in NaCl Crystals by Electron and VUV Photon Irradiation”

B-4) 招待講演

M. KAMADA, “Photodesorption and some applications with SR”, Int. Symp. on Synchrotron Radiation Applications Hefei, China, 1994.

B-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 1995.4-現在

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 1994.6-1995.1

学術雑誌編集委員

日本放射光学会誌編集委員 1993.4-1995.3

Synchrotron Radiation News 誌 Correspondent 1993.4-現在

B-7) 他大学での講義

香川大学教育学部特別講義 (物理学) 1994 年 1 月

大阪電気通信大学大学院工学研究科特別講義 (光物性) 1994 年 5 月

C) 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現象の解明と、それらの理解に基づく固体、表面における物性解明に取り組んでいる。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づくつつある。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、アンジュレーター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、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。

濱 広 幸 (助教授)

A-1) 専門領域：加速器物理学，原子核物理学

A-2) 研究課題

- a) 高輝度放射の研究
- b) 電子蓄積リングによる自由電子レーザーの研究
- c) 電子蓄積リングのビーム運動学の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 高輝度放射の研究：電子ビームのバンチを極端に短くするアイソクロナス蓄積リングの基礎研究と，これに関わるビーム運動学の研究。電子蓄積リングでは正の値を持つモーメントコンパクションファクターを限りなく0に近づけた状態を作りだし，電子ビームの縦方向の長さを通常の1/10以上にまで縮める事に成功した。またこのとき高次の非線形現象を明確にとらえ解析的にこれを説明した。
- b) 電子蓄積リングによる自由電子レーザーの研究：電子蓄積リングによる可視・紫外領域の自由電子レーザーの基礎研究。二重掃引のストリークカメラを用いてレーザー発振の時間的微細構造とその巨視的な振る舞いを観測した。初めて電子ビームの自由電子レーザー相互作用による攪乱状態を測定し，レーザー出力の飽和を記述する半経験式を求めることに成功した。またレーザーの光学的性質を様々な増幅率の条件で精密に測定し，gain narrowing と呼ぶレーザーの時間巾・エネルギー巾を予見する概念を導入して半定量的に実験データを良く説明することを見出した。
- c) 電子蓄積リングのビーム運動学の研究：高調波加速空洞を用い縦方向バンチ結合型ビーム不安定性の安定化を図った。電子ビーム自身が誘起する空洞電場の振る舞いを精密に測定し，これを利用した半能動的運転を確立し，制御が困難といわれていた高調波加速空洞を蓄積リングの通常運転に無理なく導入するまでに至った。

B-1) 学術論文

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

N. KANAYA, H. HAMA, J. YAMAZAKI, O. MATSUDO and G. ISOYAMA, "Gracefully-degraded operationable control system for the UVSOR synchrotron radiation source and its operational experience", *Nucl. Inst. and Meth.*, **A352**, 166 (1994).

M. KAMADA and H. HAMA, "Status of the UVSOR facility - 1994", *Rev. Scien. Inst.*, **66**, 2362 (1995).

F. DEAK, A. HORVATH, A. KISS, Z. SERES, A. GALONSKY, C.K. GELBKE, H. HAMA, L. HEILBRONN, D. KROFCHECK, W.G. LYNCH, D.W. SACKETT, H.R. SCHELIN, M.B. TSANG, J. KASAGI and T. MURAKAMI, "Internal excitation of intermediate mass fragments from collision of $^{36}\text{Ar} + \text{Ag}$ nuclei at 35 MeV/nucleon", *Phys. Rev.*, **C52**, 219 (1995).

H. HAMA, J. YAMAZAKI, T. KINOSHITA, K. KIMURA and G. ISOYAMA, "Observation of micro-macro temporal structure and saturation mechanism on the UVSOR free electron laser", *Nucl. Inst. and Meth.*, **A358**, 365 (1995).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

H. HAMA, K. KIMURA, J. YAMAZAKI, T. KINOSHITA and G. ISOYAMA, “Feature and recent progress of the UVSOR free electron laser”, Proc. of the Symposium on Ion & Laser *Processing of Advanced Materials -SILPAM '94 -*, 175 (1994).

B-4) 招待講演

H. HAMA, “Feature and recent progress of the UVSOR free electron laser”, Symposium on Ion & Laser Processing of Advanced Materials -SILPAM '94 -, Free Electron Laser Institute, Hirakata, October 1994.

C) 研究活動の課題と展望

電子蓄積リングをベースにした新たな放射光源の基礎研究および開発を行ってゆく。これまで世界的に展開してきた高輝度シンクロトロン放射の開発とは、異なった手法を用いた次世代の放射を、自由電子レーザーあるいはアイソクロナス蓄積リングのような新たな概念によって特徴ある放射を実現するために基礎的な知見を得ることを目的とした研究活動を目指す。ここでいう放射とは一般的な概念を超えてマイクロ波から高エネルギー γ 線まで広く捉えるものである。

木 下 豊 彦 (助教授)

A-1) 専門領域：放射光物性，表面物性

A-2) 研究課題

- a) 放射光を用いた光電子分光実験
- b) 放射光を用いた光電子顕微分光実験
- c) 真空紫外光用高分解能分光器の建設
- d) 放射光を用いた分子吸着系の表面 XAFS による構造解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) Si 表面およびそれと金属初期界面の電子状態の研究：Si の表面，また，その表面に微量の金属が吸着した初期界面では，様々な超格子構造が存在することが知られている。こうした表面に対して角度分解光電子分光や，高分解能内殻光電子分光を測定することによって，表面特有の電子状態を詳細に調べた。
- b) 強磁性 Ni の，スピン分解光電子分光：高エネルギー物理学研究所，放射光実験施設において，表記の実験を行った。価電子帯および，そのサテライトのスピン偏極度を温度の関数として詳細に測定し，これまで疑問が呈されてきたストーナーモデルはやはり妥当ではなく，Local magnetic moment は，高温でも，存在することを明らかにした。また，core level に対しても，スピン分解光電子分光を行った。
- c) 直線偏光，円偏光を用いた磁気 2 色性：磁性物質に対して直線偏光や円偏光を当てると，励起される光電子の crosssection には，実験配置と，かける磁場の向きに依存した変化が現われることが知られている。これまでは，Fe, Co, Gd などに対してこうした実験を行ってきた。特に，Fe と Co の M 吸収端近傍の光電子収量スペクトルでは，これまでに観測されなかった新しい実験配置で（横磁場配置+直線偏光）2 色性が現われることを発見した。UVSOR でも，Ni に対してこうした実験を開始した。今後は，表面の吸着系に対して，こうした実験を展開していく予定である。b) の顕微鏡と組み合わせると，さらなる発展が期待される。
- b) 放射光を用いた光電子顕微分光実験：光電子顕微鏡は，位置分解能も兼ね備えた光電子分光法である。位置分解能は，STM や SEM などの電子顕微鏡にはおとるが，電子のエネルギー分析も同時に行うことによって，原子種や，電子状態を特定したイメージがえられることが特色である。さらに，放射光の光エネルギー可変性や，偏光特性を組みあわせることによって，いろいろと興味深い研究が可能となる。われわれは，この装置の建設を開始した。また，電子エネルギーを分解しない簡単なタイプの光電子顕微鏡実験を鉄表面に対して行い，最近われわれが光電子収量スペクトルで発見した新しいタイプの磁気線 2 色性と組み合わせることで，磁区ドメインの観察が可能になることを明らかにした。
- e) 真空紫外光用高分解能分光器の建設：UVSOR の BL7B に設置されている瀬谷一波岡型分光器は，300～6000 Å の領域で固体分光の実験に利用されている。しかし，近年のこの分野の測定の進歩は著しく，世界的な競争力を高めて行くためには，新しい高性能の分光器の導入が必要となってきた。われわれは，客員部門の福井一俊助教授，福井大学の中川英之教授らと協力し，直入射型の高分解能分光器の建設を計画し，現在設計作業を進めている。500～10000 Å の波長範囲をカバーする予定である。このビームラインの完成の暁には，通常の分光実験のみならず，磁場中分光，レーザーとの同期分光など，さまざまな分野で成果を上げることが期待されている。
- f) 放射光を用いた分子吸着系の表面 XAFS による構造解析：単結晶金属表面に硫黄を含む分子が，どのように吸着

するかを系統的に調べることは、脱硫触媒機構の解明につながると注目されている。表面 XAFS 法を用いることによって、吸収端近傍の微細構造からは吸着分子の配向や内殻準位から分子の π^* や σ^* への電荷移動に関する情報が得られ、広域吸収微細構造からはX線吸収原子周りの金属表面原子との配位数とその結合距離がわかる。実験は、高エネルギー物理学研究所・放射光実験施設(KEK-PF)の軟X線二結晶分光ライン (BL-2A,11B)で行った。その結果、吸着分子の吸着構造や表面から分子への電荷移動に関する情報を得ることができた。

B-1) 学術論文

K. SAKAMOTO, T. OKUDA, H. NISHIMOTO, H. DAIMON, S. SUGA, T. KINOSHITA and A. KAKIZAKI, "Photoemission study of the Si(111)3x1-K surface", *Phys. Rev.* **B50**, 1725 (1994).

T. ABUKAWA, T. KASHIWAKURA, T. OKANE, H. TAKAHASHI, S. SUZUKI, S. KONO, S. SATO, T. KINOSHITA, A. KAKIZAKI, T. ISHII, C. Y. PARK, K. A. KANG, K. SAKAMOTO and T. SAKAMOTO, "Angle-resolved photoemission study of a single-domain Si(001)2x1-Na surface with synchrotron radiation", *Surf. Sci.* **303**, 146 (1994).

T. OKUDA, H. SHIGEOKA, H. DAIMON, S. SUGA, T. KINOSHITA and A. KAKIZAKI, "Surface and bulk core level shifts of the Si(111)3x1-Na and Si(111)87x7-Na surfaces", *Surf. Sci.* **321**, 105 (1994).

A. KAKIZAKI, J. FUJII, K. SHIMADA, A. KAMATA, K. ONO, K. -H. PARK, T. KINOSHITA, T. ISHII and H. FUKUTANI, "Fluctuating local magnetic moments in ferromagnetic Ni observed by spin-resolved resonant photoemission", *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2781 (1994).

J. FUJII, A. KAKIZAKI, K. SHIMADA, K. ONO, T. KINOSHITA and H. FUKUTANI, "Temperature dependence of the spin- and angle-resolved valence band photoemission spectra of Ni(110)", *Solid State Commun.* **94**, 391 (1995).

T. ABUKAWA, M. SASAKI, F. HISAMATSU, T. GOTO, T. KINOSHITA, A. KAKIZAKI and S. KONO, "Surface electronic structure of a single-domain Si(111)4x1-In surface; a synchrotron radiation photoemission study", *Surf. Sci.* **325**, 33 (1995).

T. OKANE, M. YAMADA, S. SUZUKI, S. SATO, T. KINOSHITA, A. KAKIZAKI, T. ISHII, J. YUHARA, M. KATOH and K. MORITA, "Photoemission study of the Ce/Ni(110) system", *J. Phys. Soc. Jpn.* **64**, 1673 (1995).

S. SHIN, Y. TEZUKA, T. KINOSHITA, T. ISHII, T. KASHIWAKURA, M. TAKAHASHI and Y. SUDA, "Photoemission study of the spectral function of V_2O_3 in relation to the recent quantum Monte Carlo study", *J. Phys. Soc. Jpn.* **64**, 1230 (1995).

K. S. AN, R. J. PARK, J. S. KIM, C. Y. PARK, C. Y. KIM, J. W. CHUNG, T. ABUKAWA, S. KONO, T. KINOSHITA, A. KAKIZAKI and T. ISHII, "Mg-induced Si(111)3x1 structure studied by photoelectron spectroscopy", *Surf. Sci.* **337**, L789 (1995).

C. Y. PARK, K. S. AN, J. S. KIM, R. J. PARK, J. W. CHUNG, T. KINOSHITA, A. KAKIZAKI and T. ISHII, "Photoemission study of the Si(111)6x1-Cs surface", *Phys. Rev.* **B52**, 8198 (1995).

S. YAGI, S. TAKENAKA, T. YOKOYAMA, Y. KITAJIMA, A. IMANISHI and T. OHTA, "Asymmetric adsorption of CS₂ on Cu(100) studied by S K-edge X-ray absorption fine structure spectroscopy", *Surf. Sci.* **325**, 68 (1995).

T. YOKOYAMA, S. TERADA, S. YAGI, A. IMANISHI, S. TAKENAKA, Y. KITAJIMA and T. OHTA, "Surface structures and electronic properties of SO₂ adsorbed on Ni(111) and Ni(100) studied by S K-edge X-ray absorption fine structure spectroscopy", *Surf. Sci.* **324**, 25 (1995).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

J. FUJII, A. KAKIZAKI, K. SHIMADA, A. KAMATA, K. ONO, K.-H. PARK, T. KINOSHITA, T. ISHII and H. FUKUTANI, "Temperature dependence of the spin- and angle-resolved valence band photoemission spectra of ferromagnetic Ni(110)", *J. Mag. Mag. Materials* **140-144**, 97 (1995); (the proceedings of the International Conference on Magnetisms, Warsaw, August 1994).

A. KAKIZAKI, J. FUJII, K. SHIMADA, A. KAMATA, K. ONO, K.-H. PARK, T. KINOSHITA, T. ISHII and H. FUKUTANI, "Spin-resolved resonant photoemission of Ni(110)", *J. Mag. Mag. Materials* **140-144**, 34 (1995); (the proceedings of the International Conference on Magnetisms, Warsaw, August 1994).

T. KINOSHITA, H. B. ROSE, Ch. ROTH, D. SPANKE, F. U. HILLEBRECHT and E. KISKER, "A new magnetic linear dichroism in photoabsorption at the Fe $M_{2,3}$ edge", *J. Mag. Mag. Materials*, **148**, 64(1995); (the proceedings of the 14th ICMFS and MRS Symposium, Dsseldorf, August 1994).

K. ONO, J. FUJII, A. KAKIZAKI, T. IKOMA, T. KINOSHITA, T. ISHII, K. TANAKA, K. SHIMADA, Y. SAITOH, T. SENDOHDA and H. FUKUTANI, "Temperature dependence of magneto-optic Kerr effect and spin-resolved photoemission of Ni(110)", *J. Mag. Mag. Materials*, **148**, 74 (1995); (the proceedings of the 14th ICMFS and MRS Symposium, Dsseldorf, August 1994).

S. YAGI, T. YOKOYAMA, Y. KITAJIMA, A. IMANISHI, S. TAKENAKA and T. OHTA, "Adsorption of CS₂ on Cu(111) and Cu(100)", *Physica B*, **208&209**, 447 (1995); (the proceedings of the 8th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure, Berlin, August 1994).

Y. KITAJIMA, S. YAGI, T. YOKOYAMA, A. IMANISHI, S. TAKENAKA and T. OHTA, "Surface structure of ($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30° and ($5\sqrt{3}\times 2$) phases of S/Ni(111)", *Physica B*, **208&209**, 463 (1995); (the proceedings of the 8th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure, Berlin, August 1994).

B-3) 総説, 著書

木下豊彦, 「ドイツでの放射光利用実験」, *SR 科学技術情報* **5-9**, 19 (1995).

B-6) 学会および社会的活動

学会の組織委員

14th International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, E-MRS Symposium on Magnetic Ultrathin Films, Multilayers and Surfaces, Local Organizing Committee (Düsseldorf, August 1994).

11th International Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics, Local Organizing Committee (Tokyo, August 1995).

第9回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム組織委員および, 実行委員 (副委員長) (1995-1996).

C) 研究活動の課題と展望

1994 年は、ドイツに滞在し、スピン分解光電子分光や、磁気 2 色性の研究、光電子顕微鏡の実験に携わってきた。UVSOR に赴任後は、光電子分光実験を進めるとともに、新しい光電子顕微鏡装置の建設を開始した。放射光の特性と上手に組み合わせた実験を行うことによって、様々な興味深い成果が得られることが期待される。4 月より、非常勤研究員の八木伸也氏がグループに加わったので、今後より活発に研究活動を進めていきたい。また、UVSOR では現状のビームラインの再構築を行って、より高度な実験を行うことが必要となってきたが、そのための、新しいビームラインの導入を初めている。まずは、BL7B の分光器を高性能のものに置き換え、ユーザーの要望に答えていきたいと考えている。

木 村 真 一 (助手)

A-1) 専門領域：放射光科学，固体物性

A-2) 研究課題

- a) 強相関伝導系物質の光学的・光電的分光による研究
- b) 挿入光源・真空紫外分光器の開発
- c) 赤外磁気光学効果分光法

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 強相関伝導系物質の光学的・光電的分光による研究：希土類化合物等の強相関伝導系と呼ばれている物質は，フェルミ準位近傍に多体的に生じた電子状態が物性を大きく左右する。この電子状態を明らかにすることを目的として，赤外から真空紫外領域にわたる広いエネルギー範囲での光学スペクトルと共鳴光電子分光を用いて，電子状態に関する知見を得ている。例えば，束縛磁気ポーラロンを示す物質である Gd_2S_3 では，磁気ポーラロンの形成による温度及び磁場での金属－絶縁体転移を光学的に明確に観測した。
- b) 挿入光源・真空紫外分光器の開発：UVSOR に設置予定の円偏光アンジュレータの磁石配置の設計（発生する光の分布，電子の軌道等の計算）を行い，現在建設中である。またそのアンジュレータからの真空紫外光を分光するための分光器を建設している。
- c) 赤外磁気光学効果分光法の開発：放射光と超伝導電磁石を用いた赤外領域での高磁場下での分光装置を建設している。これを用いて，高温超伝導体の c 軸方向のプラズマ振動と外部磁場との相互作用の異方性を光学的に初めて明らかにした。また，放射光の偏光特性を活かして，赤外領域での円偏光二色性の測定を計画している。

B-1) 学術論文

- S. KIMURA, Y. SATO, T. SUZUKI and M. IKEZAWA, "Magnetic Polaron of Gd_2S_3 Studied by Infrared Spectroscopy under Magnetic Field", *J. Phys. Soc. Jpn.* **64**, 200 (1995).
- S. KIMURA, T. NANBA, S. KUNII and T. KASUYA, "Low-energy optical excitation in rare-earth hexaborides", *Phys. Rev. B* **50**, 1406 (1994).
- H. OHTA, S. KIMURA, E. KULATOV, S. V. HALILOV, T. NANBA, M. MOTOKAWA, M. SATO and K. NAGASAKA, "Optical Measurements and Band Calculations of FeSi ", *J. Phys. Soc. Jpn.* **63**, 4206 (1994).
- Y. SHIBATA, K. ISHI, T. TAKAHASHI, T. KANAI, F. ARAI, S. KIMURA, T. OHSAKA, M. IKEZAWA, Y. KONDO, K. KATO, S. URASAWA, T. NAKAZATO, S. NIWANO, M. YOSHIOKA and M. OYAMADA, "Coherent transition radiation in the far infrared region", *Phys. Rev. E* **49**, 785 (1994).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- S. KIMURA, F. ARAI, T. SUZUKI, Y. HAGA and M. IKEZAWA, "Optical spectra of CeAs and LaAs", *Physica B* **206&207**, 780 (1995) (Proc. Int. Conf. Strongly Correlated Electron Systems 1994, Amsterdam, 1994).
- S. KIMURA, Y. SATO, T. SUZUKI and M. IKEZAWA, "Deep magnetic polaron state in Gd_2S_3 ", *Physica B* **206&207**, 786 (1995) (Proc. Int. Conf. Strongly Correlated Electron Systems 1994, Amsterdam, 1994).
- Y. S. KWON, T. S. PARK, J. M. KIM, K. S. AN, I. S. JEON, C. Y. PARK, S. KIMURA, T. NANBA, T.

MATSUMURA and T. SUZUKI, "Far infrared transmission of SmTe under a high pressure", *Physica B* 206&207, 389 (1995) (Proc. Int. Conf. Strongly Correlated Electron Systems 1994, Amsterdam, 1994).

T. SUZUKI, Y. HAGA, D. X. LI, T. MATSUMURA, E. HOTTA, A. UESAWA, M. KOHGI, T. OSAKABE, S. TAKAGI, H. SUZUKI, T. KASUYA, Y. CHIBA, T. GOTO, S. NAKAMURA, R. SETTAI, S. SAKATSUME, A. OCHIAi, K. SUZUKI, S. NIMORI, G. KIDO, K. OHYAMA, M. DATE, Y. MORII, T. TERASHIMA, S. UJI, H. AOKI, T. NAKA, T. MATSUMOTO, Y. OHARA, H. YOSHIZAWA, Y. OKAYAMA, Y. OKUNUKI, A. ICHIKAWA, H. TAKAHASHI, N. MORI, T. INOUE, T. KURODA, K. SUGIYAMA, K. KINDO, A. MITSUDA, S. KIMURA, S. TAKAYANAGI, N. WADA, A. OYAMADA, K. HASHI, S. MAEGAWA, T. GOTO, Y. S. KWON, E. VINCENT and P. BONVILLE, "Anomalous physical properties of the low carrier concentration state in f-electron systems", *Physica B* 206&207, 771 (1995); (Proc. Int. Conf. Strongly Correlated Electron Systems 1994, Amsterdam, 1994).

H. OHTA, S. KIMURA, E. KULATOV, S. V. HALILOV, T. NANBA and M. MOTOKAWA, "The Investigation of Electronic Structure in FeSi by Optical Measurement", *J. Magn. Magn. Mater.* 140-144, 121 (1995) (Proc. Int. Conf. Magnetism 1994, Warsaw, 1994).

M. KAMADA, K. SAKAI, S. TANAKA, S. OHARA, S. KIMURA, A. HIRAYA, M. HASUMOTO, K. NAKAGAWA, K. ICHIKAWA, K. SODA, K. FUKUI, Y. FUJII and E. ISHIGURO, "Monochromator for circularly polarized synchrotron radiation in the photon energy range of 5 - 250 eV", *Rev. Sci. Instrum.* 66, 1537 (1995) (Proc. Int. Conf. Synchrotron Radiation Instrum. 1994, New York, 1994).

C) 研究活動の課題と展望

強相関伝導系物質では、一般に吸収の線幅が広いため、吸収の総和則を満たすためには赤外から真空紫外領域にわたる広いエネルギー範囲での光学測定が必要である。このような広いエネルギー範囲の光物性では、現在では放射光を用いることが不可欠である。今までは、通常の反射・吸収の測定と共鳴光電子分光を行ってきたが、今後はこれらに加えて、得られる情報を増やすために、偏光を使った実験を行っていくことが課題である。放射光の分野では、技術が未発達のところもあり、まずは装置の開発が必要であると考えている。

4. 将来計画

4. 将来計画

分子科学研究所の将来計画は、1993 年度に実施した研究系についての外部評価「“分子研リポート’93” 参照」、及び 1994 年度に行った研究施設の外部評価「“分子研リポート’94” 参照」に基づいて分子研将来計画委員会、4 つの専門委員会で真剣な検討が全所的に行われた。その結果、現在の 3 つの研究施設を再編、統合し、研究系とのより緊密な連携をはかる二つの研究開発センターの創設が合意され、この提案の概要を“分子研リポート’94” に報告した。本年は 2 つのワーキンググループの下で研究開発センター構想をさらに具体化する作業を行い、概算要求を通じてその実現に全力を挙げているところである。ワーキンググループによってまとめられた開発研究センターの具体的内容をここに報告する。

分子研の研究施設のうち電子計算機センターと極端紫外光実験施設は全国の分子科学者の共同利用の観点から、他施設とはすこし異なる性格をもつ大型施設であり、それらの将来計画は広く関心の的となっている。電子計算機センター、極端紫外光実験施設をめぐる環境はそれらの設立当時とは大きく変化しており、この大きな変化に対応し、分子研の施設としての特徴を充分に発揮するような将来計画の立案がせまられている。この問題は昨年行った施設の点検・評価でもとりあげ「“分子研リポート’94”」に報告したが、本年度はさらに所内外の関係者の参加をえてそれぞれの将来構想委員会でこの問題に集中的に取り組んだ。審議はなお継続中であり、最終案をうるにはもうすこしの時間を要するが、現在までの審議状況を中間報告としてここに掲載する。

4-1 「分子制御レーザー開発研究センター」及び「分子物質開発研究センター」の創設

「分子研リポート'94」に報告された開発研究センター構想を具体化するため、2つの開発研究センターのそれぞれについて下記のワーキンググループが構成された。本節はこれらワーキンググループにより立案され、分子研将来計画委員会で承認されたものである。

ワーキンググループ長	中村宏樹 教授
レーザーワーキンググループ	斎藤修二 教授, 小杉信博 教授 森田紀夫助教授, 鈴木俊法助教授
物質ワーキンググループ	薬師久彌 教授, 山下敬郎助教授 鹿野田一司助教授

4-1-1 創設の基本哲学及び必要事項の要約

基本哲学

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端紫外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なければならない。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（分子制御レーザー開発研究センターと分子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、分子制御レーザー開発研究センターと分子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。

必要事項の要約

(1) 必要人員

	分子制御レーザー 開発研究センター	分子物質開発 研究センター	合 計
助教授	4	4	8
助 手	4	8	12
技 官	8	12	20

(2) 床面積

	分子制御レーザー 開発研究センター	分子物質開発 研究センター	合 計
総床面積（電気室，廊下，トイレ，機械室，エレベータースペース階段等を除く）	3,200m ²	3,600m ²	6,800m ²

(3) 創設設備費，運営費

	分子制御レーザー開発 研究センター(億円)	分子物質開発 研究センター(億円)
創設設備費	13.5	12.9
運営費	年間 1.1	年間 1.1
(付属施設経費)		
特別経費	1.2	1.2
計	15.8	15.2

(4) 分子研全体の再編

①分子物質開発研究センターをE-地区に新設し，それに伴って，下記研究系及び施設を同地区に移転する：

- (i) 分子集団研究系，
- (ii) 錯体化学実験施設，
- (iii) 関連領域研究系，

②分子制御レーザー開発研究センターを上記移転に伴う跡スペースに新設し，同時に極端紫外光実験施設の拡充をB-地区で行う。

③液体Heの回収設備を設ける。

4-1-2 分子制御レーザー開発研究センター

(2-1) 創設の必要性

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がその必要性は以下の通りである。

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。分子制御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。

したがって、本センターは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。

一方、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。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はいるが、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施設（UVSOR）は世界で唯一の分子科学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。

(2-2) 研究の学術的・社会的意義

本センターは、レーザー研究者と分子科学研究者が本格的に共同研究を行う我が国初の試みであり、その成果は物理・化学の学際領域の発展に大きく寄与するものである。レーザー技術は急速な進歩を遂げており、レーザーを用いた分子科学研究では、最先端技術をいち早く導入し、重要課題に先鞭をつける体制が不可欠である。一般に、技術が確立、普及する頃には、その技術は古くなっている。このため、国外の有力研究機関でも、学際的研究協力は非常に重要視されている。本センターは、レーザーの開発研究と分子科学研究を結合した研究拠点として、我が国の分子科学研究の国際競争力を高める大きな駆動力となる。分子研は、分子科学専用のシンクロトロン放射光施設を備えた我が国唯一の研究機関であり、分子科学の実験的、理論的研究において世界の中核的存在である。分子研の持つ幅広い、強力な研究体制、特に研究所内の理論、実験を含めた密接な研究協力体制は、レーザー技術の開発とその分子科学への応用を高い次元で実現する。

本センターでは、新しいレーザー化学の創成を目指したレーザー開発を行う。即ち、化学反応を制御する手段として、温度、圧力、溶媒といった巨視的（統計的）な外部因子を利用する古典的な方法に代わって、光の基本的な性質（位相、エネルギー、運動量等）を利用し、分子の内部状態（電子・振動・回転状態）あるいは並進状態（位置、速度）を「直接」制御し、高効率・選択的に化学反応を駆動することを目指す。この目的で、先端的レーザーならびに関連技術の開発・研究を行う。以下、代表的な4研究分野について、その学術的・社会的意義を述べる。なお、これら4分野が専任部門の研究分野となる。

(1) 分子位相制御レーザー開発グループ

研究内容：位相制御化学反応のためのレーザー開発

（超短パルス固体レーザーおよび位相、波形制御されたレーザー光の開発）

化学反応を時々刻々観測し反応機構を理解すること、あるいは、反応途中で反応を制御することは化学者の夢である。化学反応は、フェムト秒(10^{-15} sec)程度の時間内に起こる超高速現象であるため、その観測、制御には、超短パル

スレーザー光が必要である。超短パルスレーザーは、これまで、色素溶媒を発振媒体としてきたが、発振波長を変化させることが難しく、安定性も不十分であった。しかし、近年、チタン-サファイアを始めとする固体結晶が可視域でのレーザー発振媒体に用いられるようになり、波長可変性、安定性、操作性等の問題点は劇的に改善された。今後の分子科学研究においては、固体レーザーを中心としながら、発振波長域の拡大や、位相や波形を制御したレーザー光の開発を行うことが重要な研究課題となる。

位相や波形を制御したレーザー光は、コヒーレンス（波の位相）によって化学反応を制御する可能性をもたらす。原子、分子の関わる微視的な世界は、我々の日常の世界とは異なり、量子力学によって支配されている。その結果、物質は波としての性質（波動性）を持つ。その分子の波の性質は、光照射によって様々に変化しうる。複数のレーザー光を分子に照射し、それぞれの光によって複数の波を分子に誘起させれば、それらは互いに干渉し合い、複雑な波模様を作り出す。特に位相や波形を制御したレーザー光は、分子にこのような波模様を自在に作り出すことができる。このような波の性質を利用すれば、例えば、分子に複数の分解経路（生成物）がある場合に、特定の経路だけに反応が進むように波模様を最適化し、化学反応を制御することが可能になる。また、将来、数フェムト秒のレーザーパルスが得られるようになれば、このような波模様を反応途中で時々刻々と変化させ、化学反応を駆動することが可能になるものと期待される。

(2) 放射光同期レーザー開発グループ

研究内容：光化学のための放射光同期レーザーシステムの開発

（放射光とレーザーを組み合わせた新しい実験技術の開発）

「極端紫外光」と呼ばれる短波長の光は、大気に強く吸収されるため、地球上の自然界には存在しない。しかし、これらの光は分子との相互作用が大きく、上層大気や宇宙空間における分子の生成・分解や物質進化において重要な役割を果たしている。また、原始地球においては大気密度が小さくかなりの極端紫外光が地球上に到達していたと考えられ、生命の誕生に関わった可能性がある。このように、現在の地球上では簡単に手に入らない極端紫外光をいろいろな方法で人工的に作り出して分子科学的に研究することは原始地球や現在の上層大気・宇宙空間での種々の未解決問題の解明に大きく寄与するものである。さらに、半導体デバイス技術で必須になっている光化学反応では、これまで用いられてきた可視・紫外よりも短波長の極端紫外光を使うことにより、半導体表面分子と光の相互作用を局所的な領域に限定することができ、より微細な加工が可能になる。このような応用分野においても極端紫外光を使って分子科学的に探究することが重要である。極端紫外域の分子科学を研究するためには、現在、レーザーとシンクロトロン放射（放射光）という二つの光源が考えられる。このうち、レーザーは分解能や輝度が高く、特定波長での分子の動力学を詳細に研究するには適しているが、広い波長範囲（特に70 nmよりも短波長の領域）には利用できない。一方、放射光は分解能や輝度はレーザーには劣るが、広い波長範囲で利用でき、分子の動力学を総括的に研究することができる。

レーザー光と放射光のこのような特徴を組み合わせれば、広い波長範囲（特に短波長領域）で、詳細な分子動力学の研究が可能になるはずである。具体的には、レーザーと放射光を同期させた2重共鳴実験である。しかし、レーザーを放射光パルスに同期して発振させることは技術的に非常に難しく、これまでは、連続発振(CW)レーザーを用いた、主に原子を対象とした実験が報告されているにすぎない。

本分子制御開発研究センターでは、分子研極端紫外光実験施設(UVSOR)からの放射光(繰り返し90MHz)に同期

したレーザーを開発し、分子を対象とした様々な2重共鳴実験を可能にする計画を立てている。例えば、放射光により分子の内殻励起を行い、その電子緩和・振動緩和をレーザーで追跡する研究や、レーザー励起により生成した電子励起・振動励起分子の極端紫外光吸収の測定が考えられる。これにより、これまで未開拓の波長領域での分子（超励起分子）の挙動について、従来にない詳細な研究を行うことが可能になる。

(3) 特殊波長レーザー開発グループ

研究内容：真空紫外・遠赤外光化学のためのレーザー開発

(新しい発振波長域を持つレーザーおよび粒子線技術の開発)

レーザーの発振波長は、可視域を中心に紫外、赤外域に拡大してきた。しかし、真空紫外よりも短波長、中赤外域よりも長波長側では、化学反応の研究に足る出力と波長可変性が得られていない。これらの波長域で革新的なレーザーが開発されれば、分子の特定の位置（化学結合や構成原子）に選択的にエネルギーを与えることができ、化学反応の解明に大きな成果が得られるものと考えられる。

分子の光吸収確率は一般に短波長になるにつれて増大し、しかも、短波長域では光のエネルギーが分子の結合エネルギーを越えるため、結合開裂など活発な化学反応が引き起こされる。波長が短くなるほど、分子の特定の位置（化学結合や構成原子）にある電子に選択的にエネルギーを与えることが可能になるため、長波長域とは異なる特異的な超励起分子の化学が期待されるようになる。自然界では、真空紫外領域（波長 200 nm 以下）の光は成層圏オゾン層で強く吸収され、そこに活発な光化学反応を起こしている。逆にオゾン層がこれらの光を吸収するおかげで、地上の生物は有害紫外線にさらされずにすんでいる。近年、オゾン層の破壊が世界的な問題となっているが、真空紫外域の化学反応の研究が紫外域ほど進んでいない一つの原因は、現存の真空紫外レーザーが化学反応を研究するに足る出力を有していないことにある。したがって、短波長レーザーの開発は、大気化学の研究にも大きく役立つものと期待される。

さらに波長が短いX線領域の光が発生可能になれば、分子の構造（結合距離、角度）を回折法によって決定することが期待される。同様の理由で、電子線回折法も有効である。回折法は、時々刻々と変化する分子の構造を追跡する上で最も直接的であり、超短パルスレーザーを用いてパルスX線、電子線を発生させれば、化学反応途中にある分子の写真（スナップショット）を撮る事も出来るようになると思われる。

一方、中赤外域のレーザーは、分子振動を励起し特定の化学結合を延ばしたり、空間的配向を揃えることによって、反応を制御する事を可能にする。例えば分子振動を励起した後、さらに電子を励起すれば、電子間のエネルギー移動効率を変化させることができるため、分解反応の効率を制御できる可能性がある。さらに波長の長い遠赤外域のレーザーは、液体中の分子間振動、極性分子の回転運動、分子衝突など、溶液中の化学反応を解明する上で重要な手段を提供するものと期待される。これら赤外、遠赤外領域のレーザー光は、分子やクラスターの精密構造の解明にも極めて有効である。

(4) 分子空間制御レーザー開発グループ

研究内容：原子・分子の空間的制御のためのレーザー開発

(分子のレーザー冷却およびマニピュレーション法の開発)

極低温に冷却されて超低速になった原子や分子の運動は、巨視的なスケールで波動性を示すこと、外場に対して極

端に敏感であることなど、常温の場合とは著しい違いを示すことが予想され、気体原子・分子の新しい状態として学問的に極めて興味深い。レーザー光によってこのような冷却を実現する「レーザー冷却」の研究は、近年いくつかの原子に対しては大きく進展しつつあるが、分子に対する研究は今後委ねられている重要な課題である。

レーザー冷却された原子・分子に関する分子科学上の基礎研究の例としては、極低温下での化学反応の研究が挙げられる。極低温条件における化学反応は、分子の並進運動の著しい波動性のために、高いポテンシャルエネルギー障壁をすり抜ける、いわゆる「トンネル効果」によって進行すると考えられる。このような反応は宇宙空間での物質進化に重要な役割を果たしていると考えられるが、その詳細は解明されていない。レーザー冷却によって、極低温条件下の化学反応を研究する事が出来るようになれば、従来の温度領域では見られない新しい化学を発見できる可能性がある。

このような基礎研究とともに、波動性が顕著となり、外場に対して非常に敏感になった原子・分子に対しては、これらの性質を利用した様々な応用性が期待される。その最も大きな応用は、原子や分子をレーザー光の中に閉じ込めて動かす「レーザーマニピュレーション」であろう。レーザーマニピュレーションは、一個一個の原子・分子の位置や運動を非接触で自由に操るといふ科学における長年の夢の一つをレーザーを用いて実現しようとするものである。これが本格的に実現されるならば、原子や分子の相互の位置関係や運動状態をミクロなスケールで自由に制御することが出来るようになるため、これまで偶然や統計性に頼るほかなかった全く新しい分子や結晶の構築、化学反応・表面反応の精密な制御など、極めて多様な応用において画期的な効果をもたらすものと考えられる。このようなレーザーマニピュレーションの試みは近年急速に盛んになりつつあり、タンパク質などの非常に大きな分子に関しては徐々に実現されてきているが、原子や小さな分子に関しては現在は未だ揺籃期にあるといつてよく、今後の発展が強く期待される未来技術の一つである。

このように、レーザー冷却やマニピュレーションの研究は科学技術に対し画期的な応用性をもたらすことが考えられるため、各種の全く新しいデバイスの開発などを通して、将来、社会に強いインパクトを与えるものと期待される。

(2-3) 組織の転換、再編成、定員要求

(1) 施設再編と教官の新構成

本センターは前述したとおり機器センターの分光部分を吸収・拡大する形で創設する。

専任2部門4グループ： 助教授4，助手4

併任4グループ：助教授（または教授）4，助手4（併任のため増員には無関係）。

現在の教官人員（機器センター助教授1，助手2）を新組織に振り替える。したがって、助教授3，助手2の増員が必要である。

(2) 技官

本センターでは、各研究グループに2名ずつ技官を配備することが必要である。したがって、8名の技官を必要とする。本センターに設置されるような技術開発に重きを置く研究部門は、分子研でも稀であり、独自の高度な技術開発体制が必要である。さらに、これら技官は、設置される大型のレーザー設備の所外研究者による施設利用への支援、あるいは共同利用設備のメンテナンスなどの研究支援を行う上で欠くことができない。現機器センターの技官3名を新組織に振り替えるので、5名の増員が必要となる。

4-1-3 分子物質開発研究センター

(3-1) 創設の必要性

現在の機器センターの物性関連部分、化学試料室および極低温センターを合併・拡充する形で創設するがその必要性は以下の通りである。

理学・工学にまたがる物質科学、材料科学の分野において、分子科学研究所で研究している分子性物質の役割は過去20年間に飛躍的にその重要性を増している。たとえば分子性物質とは無縁のものと思われていた「金属性や超伝導性」は今では常識になっており、超伝導物質群の中で一つの大きな柱を形成している。その他液晶性、強磁性、強誘電性、光非線形性などの機能を備えた分子性物質に熱い視線が注がれている。分子性物質の基礎研究は、井口洋夫前岡崎機構長の先駆的研究を始めとする我が国で生まれた「有機半導体」の研究に端を発する。分子科学研究所はこの研究分野を研究所創設のときより特定研究のテーマとして取り上げ、以後20年間この分野のテーマを継続して研究してきた。その間、「有機超伝導」、「有機強磁性」などの先駆的な研究成果を生み出し、世界を先導してきた。

広く物質科学に目を転ずると、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。この分野の研究にブレークスルーをもたらし、新たな研究を強力に推進する原動力が物性のフロンティアを産み出す物質の開発である事に疑いの余地はない。物質科学は物質合成、物性解析、そして理論研究が一体となって発展していなくてはならない。このような研究は単一のグループだけでは到底なし得ない規模のものであるが、従来は、複数の研究機関にまたがるいくつかの研究グループの共同研究という形で進められてきた。しかし、このような共同研究は、居を同じくして不断の議論を重ねる事によって、真に創造的なアイデアを生み出し、しかもそれを即刻実験に移すという緊密な協力体制を確立する事によって、飛躍的にその効率を高めることができる。正に、物質開発研究にとって計り知れない効果が生まれる。その意味でこの物質開発研究センター構想は、重点領域研究などでの共同研究体制の限界を遥かに越えて、物質合成を中心に据えた総合的な物質開発研究を行なう体制の構築を目指している。

このようなセンターの設立は、物質科学についてのしっかりとした研究実績と研究者集団の基盤があって初めて意味を持つ。分子科学研究所は、この分野の研究拠点として数多くの研究実績に加え、物理学と化学の学際領域における研究推進の場としての十分な経験を積んでいる。それゆえ、本研究所が、このセンター設立に最適の研究機関であると考えている。現在、分子科学研究所は分子集団研究系を中心に強力な物性解析グループを擁し、さらに1995年度には当該分野を研究対象とする新しい理論研究グループが発足している。

これらの研究グループが分子物質開発研究センターで物質合成及び物性測定の特任家集団と一体となって共同研究を行う事によって、物質科学の前線を飛躍的に広げ、真に新しい物質を開発していく事ができる。

(3-2) 研究の学術的・社会的意義

本センターは、物質合成研究者と物性解析研究者が本格的に共同研究を行なう我が国初の試みであり、その成果は広く物理学や化学の枠を越えた物質科学の発展に大きく寄与するものである。

新物質の開発と新しい機能の発見が学術上の飛躍的な発展をもたらす事については、シリコンによる半導体の科学、銅酸化物による強相関電子系の科学等の多くの例をあげることができる。上記のような強力な組織を利用して、この分子物質開発研究センターでは新たな電子機能をもつ分子及び分子集合体を開発する。新物質の合成に当たっては、多角的な方法を採用することが幅広い物質開発につながることから、有機化学や無機化学と共に高圧環境や分子線エピタキシー等の物理的手法をも用いる。そこでは、素単位となる新しい分子の合成を行なうとともに、それらの分子の集合形態を制御するという2段階に亘る手法を駆使して新しい分子システムの構築が図られる。新たな機能をもつ

物質を開発することはそれ自身新しい学問の場を作り出すことであり、真に新しい概念の創出へと導かれる。

物質の中でもっとも小さな機能素子は分子である。生物はこの分子の機能を最大限に利用し生命活動を営んでいるが、近代科学の進歩は半導体のような電子素子を限りなくミクロにし、分子のレベルで、情報伝達、記憶、演算を行わせる高度な機能デバイスを生み出そうとしている。また、膜や界面技術を利用し、エネルギーの変換・輸送・貯蔵・高選択的合成反応を分子レベルで制御しようとする研究も盛んである。21世紀の産業革命はこのような分子素子が実現される事によって達成されると言っても過言ではない。上述した通り、本研究所は設立以来分子集合体の伝導性、光学特性、分子配列制御など、多角的な視点から分子素子開発のための基礎研究を手掛け、現在の「分子エレクトロニクス」のプロジェクト研究に至っている。その過程で、分子素子という課題について高いポテンシャルを獲得している。本センターの目指すものはあくまでも基礎科学であるが、新物質と新機能というテーマは常に応用科学（工学）への展開の可能性を持っている。分子導体、分子磁性、分子誘電性、といった機能は応用分野への波及効果をもつであろうし、室温に近い温度で使える超伝導素子、柔らかい発光素子、高効率太陽電池、カラー印刷用磁性トナー、高速液晶ディスプレイといった分子デバイスが期待できる。また有機薄膜や固体表面に関する基礎研究はこれらの分子デバイスを実用化する上での基盤となる学問になる。

現在の研究の単純延長線上にない物質の開発が、我々の予想だにしない基礎科学及び応用科学の領域を開拓することになることは、想像に難くない。

以下専任助教授4名の研究分野について、その内容及び学術的・社会的意義を述べる。

本センターは、物質提示型の合成研究者と、機能追求型の物性研究者が居を同じくして物質開発を協力的に押し進める我が国初の組織であるが、専任部門では、新しい物質の合成から基礎物性の評価を組織的に行なう。これを強力に推進するためには、特に4つの専任研究グループが互いに相補的であると同時に協力的であり、かつ物性研究を主とする所内併任研究グループや研究系と有機的な協力体制をとることが望まれる。したがって、助教授4名の研究分野については、お互いのバランスと、研究系で行われている研究分野との関係を考慮し、以下の4研究グループの創設を目指す（物質合成3名＋物性評価1名）。

(1) 有機分子制御物質開発グループ

有機物質は多彩な機能、物性を示すことが知られている。例えば、色素などの各種機能性材料はもとより、近年の有機伝導体、超伝導体、磁性体、さらには生体機能に至るまで有機物質が色々な基礎および応用分野で活躍している。このように有機物質が多彩な性質を示す理由は、有機分子が目的に応じて分子構造、電子構造を多種多様に、しかも系統的、漸近的に変化できるという特性を備えている点にある。このような多様性から、従来有機物質には無縁と考えられてきた新しい機能や物性を備えた物質を創出する研究が注目されており、その為には当然ながらその核となる新規な有機分子の合成を推進しなくてはならない。電気伝導性についてみると、かつては有機物質は絶縁体の代表とされてきた。しかし、電子受容体としてTCNQが、電子供与体としてTTFという有機分子が合成され、初めて金属と同じ導電性を示す有機物質が誕生した。さらに、有機合成化学の手法を用いてこれらの分子を修飾することにより極低温で超伝導性を示すものが得られるようになった。この分野の研究のさらなる発展には新物質の合成が不可欠である。そのために伝導体の成分となる新しい電子供与体および電子受容体を合成し、より高温での超伝導などの特異な物性を示す有機物質を開発する。また、従来の有機伝導体は電荷移動錯体などの多成分系に限られているが、これとは違った視点として、未だ実現されていない単一成分での高伝導性物質の開発にも取り組む必要がある。このような

物質は伝導機構の解明など純学問的に重要である上に、分子素子としての応用面でも注目されている。HOMO-LUMO のエネルギー差の小さい分子の設計を基本方針とし、単一成分導体の実現を目指す。

(2) 無機分子制御物質開発グループ

遷移金属錯体では金属の持つ d 電子と有機物質の π 電子との相互作用で無機物質と有機物質の特性を合わせ持った新しい物性を発現させることが可能である。こうした系では性質を異にする電子系の組合せにより多種多様な電子状態を作り出すことができる。例えば、DCNQI という電子受容体に銅が配位した錯体では、電気伝導を担う π 電子が遷移金属の d 軌道上の d 電子と相互作用することによって磁性と伝導性の絡んだ新しい現象が見いだされている。しかしながらこうした物質の例はまだ少なくこの分野は依然として未開拓の領域である。 π 電子と d 電子の効率的な相互作用にはそれぞれのエネルギーレベルの近接化や遷移金属原子と配位子の空間配置制御が必要である。この目的で新規な有機配位子の設計合成と多核遷移金属錯体を作成することにより、電氣的、磁氣的、光学的物性の複合した物性を実現する。また、リトルの高温超伝導体のモデルは遷移金属錯体を念頭に置いていることから、夢の高温超伝導体の可能性もある。高分子配位子を用いて積極的に室温超伝導体の開発に挑戦する。さらに、最近架橋有機分子を持つ遷移金属錯体が強磁性体開発の一つのルートとして注目されていることに関連して、新規な強磁性体の開発にも研究を展開する。

(3) 電子機能探索開発グループ

物質開発は、新しい物質の合成とその基礎物性の評価が一体となることで初めて飛躍的な発展が期待できる。このグループは後者の役割を担う。

まず、物性評価の最も基本的なことから、合成された新物質の構造を明らかにすることが不可欠である。X 線構造解析の手法により構造を決定する。局所的な構造や表面構造を明らかにする必要がある場合は、STM（走査型トンネル顕微鏡）等を活用する。構造と機能の関係を明らかにすることは、一筋縄では行かない困難なものであるが、本グループは単に構造を決定するだけでなく、常に電子機能との関連を探る。したがって、合成された新物質の電子物性をあらゆる角度から調べる。伝導体や超伝導体の研究においては、まず、高温から極低温の広い温度範囲で電気伝導度、熱起電力、ホール係数等の測定により伝導電子の巨視的輸送特性を明らかにする。さらに、強磁場極低温における量子振動の観測から伝導電子を特徴づけるフェルミ面についての情報を得ると同時に、超伝導体については超伝導を特徴づける基本パラメーターを調べ上げる。この結果は、伝導体と超伝導体の物質設計にすぐさまフィードバックされる。また光を用いることにより、より高いエネルギー領域で伝導電子の挙動を調べる。更には、固体の中の分子間、分子内の荷電状態、結合状態をも光学実験により明らかにする。一方、磁性体の物性評価として、広い温度磁場範囲にわたる磁化測定により巨視的磁気特性を明らかにすると同時に、NMR や ESR 等の磁気共鳴の手法を用いて磁気物性の微視的評価を行なう。格子系や電子系の熱力学を調べることは、格子系や電子相の安定性や相転移の起源を明らかにする上で必要となる。この目的の為には比熱を測定する。

以上のような多角的な物性評価を、既設及び新たに導入される設備を駆使して行ない、新しい電子機能の芽を探る。

(4) 分子配列制御物質開発グループ

MBE 法（分子線エピタキシー法）、STM（走査型トンネル顕微鏡）や AFM（原子間力顕微鏡）による分子操作あるいは高圧合成法など特殊合成技術を利用して、分子の配列を人工的に制御する研究を行う。

分子性物質がシリコンなどの半導体や金属物質と異なる最大の特徴は、分子自身が内部構造あるいは形をもっている事であり、それ故に分子の配列の様式によって巨視的な物性が激変する事である。例えば現在広く研究されている BEDT-TTF 塩の場合、同じ分子でありながら、分子の配列の異なる 10 種類の結晶多形が知られている。これらは超伝導を示す金属、単純な金属、異常な金属、半金属、半導体と物質のとりうるほとんど全ての電子状態を実現している。分子性物質の分子配列を制御する事はこのように極めて重要であり、21 世紀に実現するであろう分子エレクトロニクスの鍵をにぎる基礎科学となる。しかし高度に発達した現代の化学をもってしてもこの分子配列の制御はまったく経験に頼るしかないのが現状である。この分子配列を制御する方法を確立するために以下の三つの方法を用いる。

- (i) 超高真空の容器の中で分子ビームを作り、これらの分子を堆積して分子を一個一個並べる方法は迂遠に見えるかもしれないが現在では最も確実に分子配列を制御できる方法である。しかしこれまで取り扱われてきた分子はごく限られたものだけであった。今後はこれまでの経験の上に立ち、より多種類の分子を用いて分子配向に関する基礎データを集積する事が求められている。
- (ii) 近年、トンネル顕微鏡や原子間力顕微鏡を用いて一個一個の分子を望みの場所に並べる方法が急速に発達している。この方法は分子を一つの電子素子とみなしてエレクトロニクスを組み立てる際の基本的な方法となるであろう。この方法を用いた分子デバイスの構築とその評価方法の確立は最も力を注ぐべき分野である。このような少数分子の検出法に威力を発揮するのは分光学である。本研究所が最も得意とする分光学を用いることにより、評価方法を確立する事が急がれる。
- (iii) このほか、高压合成法のように圧力を制御する事によって分子配列の様式を制御することができる。高压合成法はすでにダイヤモンドの合成では確立された方法であるが、分子性物質の合成には全くといってよいほど用いられていない。丸い原子からなる無機物質の場合には圧力を加えるだけで様々な構造を作り出す事ができるが、その構造を凍結して常圧下に取り出せる物質は限られている。異方的な形をもつ分子の場合、一度配列が決まると圧力を加えてもその配列を大きく変える事ができない場合が多い。しかし反面、精密に制御した圧力下で結晶化を行わせると、常圧では予想もつかない分子配列をもつ物質を作り出すことができるし、形をもつ分子が自由に動けないため、逆にその物質を常圧下に取り出せるのである。この種の構造制御法も新しい分子性物質を開発するための未開の分野であり、挑戦する必要がある。

(3-3) 組織の転換・再編と定員要求

(1) 施設再編と教官の新構成

機器センターの一部、極低温センター、化学試料室を再編、統合する。

専任 2 部門 4 グループ：助教授 4，助手 8

併任 4 グループ：教授（または助教授）4，助手 4（併任のため増員には無関係）。

現在の教官人員（助教授 1（化学試料室）及び助手 4（機器センター 1，化学試料室 2，極低温センター 1）），を新組織に振り替える。従って、助教授 3，助手 4 の増員が必要である。

(2) 技官

以下の 4 種の業務に対し、計 12 名の技官を置く。

- (a) ヘリウムの液化と供給，液体窒素の供給は，研究所全体の研究活動にとって重要な業務であるが，この業務を本センターが引き継ぐ。これに3名を充てる。
- (b) 有機合成，無機合成，特殊合成の手法で物質を合成する際の研究支援業務に4名を充てる。
- (c) センター外の研究者が化学合成，精製，分析などの施設利用をする際の支援，依頼された化学分析，廃液処理の業務に，2名を充てる。
- (d) 特に共同利用にとって，物性測定機器の管理運用は重要な業務である。本センターでは，多角的な物性評価を可能とするために，構造決定，電気，磁気，光，熱物性に関する多岐にわたる物性測定装置を備えるので，これらをカバーするために3名を充てる。

現施設の技官8名（機器センター2，化学試料室3，極低温センター3）を新組織に振り替えるので，4名の増員が必要である。

4-2 極端紫外光実験施設の将来計画（中間報告）

4-2-1 に本年度、開催された極端紫外光実験施設（UVSOR）の将来計画に関わる委員会等の概要を述べ、4-2-2 にそれらの委員会での議論を踏まえた上での中間報告を示す。4-2-3、4-2-4 には委員会の内、第1回 UVSOR 将来構想委員会と第1回 UVSOR II 検討会の報告書を添付した。これらの委員会は UVSOR の将来計画をさらに煮詰めるために来年度以降も継続して開催する予定である。

4-2-1 将来計画に関わる委員会等の概要

(1) 学術審議会加速器科学部会ヒアリング（1995. 3. 22）

文部省傘下の現存する3放射光実験施設（東大物性研、高エ研、分子研）と新規放射光光源建設計画を有する大学（東大、東北大、広島大）に対し、学術審議会加速器科学部会の放射光ワーキンググループによるヒアリングが3月と4月に行われた。ヒアリングの主査は東京理科大学の黒田晴雄教授であった。分子研 UVSOR としては、これまでの共同利用・国際協力の実績、1993年、6年の点検評価の報告、他の施設と比較した場合の特徴ある研究成果や研究分野の説明に加え、次節4-2-2の中間報告にまとめたような将来展望について施設長が説明した。

その後、6月に学術審議会加速器科学部会としての答申がまとめられた。この答申の目的は主に第3世代高輝度VUV・軟X線光源の建設計画をどのように位置付けるかということにあったので、直接的にはUVSORの将来計画につながるものではなかった。しかし、間接的にUVSORの将来に関わってくる指摘が含まれており、この点については7月14日開催の第1回UVSOR将来構想委員会で議論された。

(2) 第1回 UVSOR 将来構想委員会（1995. 7. 14）

i) UVSORの現状報告、ii) 所外委員による国内状況と最近の状況変化、特に学術審議会加速器科学部会の答申についての説明、iii) 新規光源建設計画を有しているところの代表者からそれぞれの計画の概要や問題点の説明、iv) UVSORの置かれている状況と将来方針に関して大局的な立場からの検討と討論など。詳細は4-2-3に示す報告書を参照のこと。

(3) 第1回 UVSOR II 検討会（1995. 12. 7）

所外の光源開発の専門家に参画してもらい、将来計画のうち、新光源建設計画に対して検討を行った。詳細は4-2-4に示す報告書を参照のこと。

(4) 第9回将来計画委員会（1995. 12. 27）

本年度の分子研の将来計画に関する全体会議の議題のひとつにUVSORの将来計画が取り上げられた。上記1～3の委員会等の報告がなされた。さらに「分子研レポート'93」と「分子研レポート'94」の報告にあるものをまとめ直した結果、UVSORの将来の方向として次節4-2-2の中間報告にあるように(1)～(4)に大別されることが示された。現時点での取り組み方を含めて、それぞれに対する内容について議論した。来年度以降、議論をさらに煮詰める際には、新しい光源を利用した新しい研究テーマに関する議論を行うこと、また、放射光を利用した研究の特殊性について分野外の研究者にも理解を得る努力をすることなどの指摘があった。

4-2-2 将来計画の中間報告

本年度、実施の各委員会での議論を踏まえた上で、現時点でまとめた UVSOR の将来計画の中間報告を示す。これは、1995 年 12 月 27 日開催の第 9 回分子研将来計画委員会で承認を得たものである。

(1) 光源、分光器、測定装置のスクラップアンドビルドにより世界的に競争力のある研究成果を挙げる

現有装置のスクラップアンドビルドは「分子研リポート'93」の極端紫外光科学分野「点検・評価と課題」の外国人評価結果 (pp. 224-226) および「分子研リポート'93」の UVSOR の点検評価の報告 (pp. 191-196) で強く指摘されており、現在、総力を挙げて実行しているものである。財政的には本年度は補正予算で支援を受けたが、来年度以降、先導的研究設備費 (COE 分) や特別設備費 (概算要求) 等で支援を受けるべく準備しているところである。マンパワーに関しては所内ばかりでなく所外のユーザーにも協力を仰いでいる。

(2) レーザーを併用した新しい放射光分子科学の実験技術やサイエンスを発展させる

UVSOR とレーザーの併用による新研究分野の開拓は「分子研リポート'94」の分子研将来計画委員会研究分野検討小委員会の報告の中で分子制御レーザー開発研究センターの創設 (pp. 201-204) 理由のひとつの柱になっているものであり、また、UVSOR 施設に対する検討事項 (pp. 210-211) にも含まれている。現在、「分子研リポート'94」の将来計画委員会 UVSOR 検討小委員会の検討結果 (pp. 222-223) に従い、既存のレーザーを利用した試行的な実験で研究成果が出始めてはいるが、このような研究を本格的に展開するには、UVSOR 光源の増強と分子制御レーザー開発研究センターの早期実現によるレーザーの開発が必須である。また、「分子研リポート'94」の将来計画委員会 UVSOR 検討小委員会の報告 (p. 223) で自由電子レーザー (FEL) の開発研究は現 UVSOR 施設で今後も続けるべきであるとの指摘があり、来年度より 1995 年度導入の円偏光アンジュレーターを利用した新しいタイプの FEL 開発を始めることになった。

(3) 所外の第 3 世代高輝度 VUV・軟 X 線光源を利用した先端的な分子科学研究を行う

第 3 世代高輝度 VUV・軟 X 線光源の利用計画は「分子研リポート'94」の UVSOR 施設の点検評価の報告 (p. 196) および将来計画委員会 UVSOR 検討小委員会の報告 (p. 223) で UVSOR の将来計画のひとつの選択肢として提案されているものである。これは所外の情勢に大きく左右されるので、現在のところ、所としては具体的な動きにはなっていないが、世界の進歩に遅れないように日本でも早急に高輝度 VUV・軟 X 線放射光の利用を推進しなければならないので、個々の研究者レベルで種々の所外の計画に協力している。なお、「分子研リポート'94」に報告のある将来計画委員会 UVSOR 検討小委員会ではこの将来方針には分子研の独自性が失われる危険性があるとの指摘があった。独自性を失わないように文部省傘下で高輝度 VUV・軟 X 線光源が実現した際には、その敷地内に分子科学研究所の分室と専任スタッフ (助教授 1 名、助手 1 名、技官 1 名程度) を新規に設置・配置し、分子研独自のビームラインを建設して分子科学の研究を推進する態勢が必要とされよう。

(4) 次世代光源を UVSOR の次期計画 (UVSOR II) として建設し、新しい研究分野を開拓する

分子研に適正規模の新規次世代光源を建設するという将来計画については「分子研リポート'94」の将来計画委員会研究分野検討小委員会の報告 (pp. 210-211) に従って将来計画委員会 UVSOR 検討小委員会で検討した結果 (pp. 222-223) 、技術的な可能性を含めて、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。さらに、「分子研リポート'94」の UVSOR 施設の点検評価の報告 (p. 194) 、将来計画委員会研

充分野検討小委員会の報告(p. 211), および将来計画委員会 UVSOR 検討小委員会の報告(p. 222)にあるように UVSOR の長期計画を具体化していく上で光源関係の教授ポジションが必須である。現在, 新光源計画の施設名の仮称を UVSOR II とし, 技術的に検討を進めている。第 1 回 UVSOR II 検討会の報告書を 4-2-4 として添付した。

4-2-3 第 1 回 UVSOR 将来構想委員会報告

日時 1995 年 7 月 14 日 午後 1 時半～4 時半

所外出席者 黒田晴雄(東理大・教授), 竹内伸(東大物性研・所長)
木原元央(高エ研放射光・施設長), 原田義也(千葉大・教授)
佐藤繁(東北大・教授)

分子研出席者 井口洋夫(研究顧問), 田中郁三(研究顧問, 学位授与機構長)
岩田, 小杉, 宇理須(オブザーバー)
伊藤(所長)

1. 以下の資料に基づいて背景を岩田, 小杉が説明した。

1993 年度, 1994 年度 点検評価 報告

将来計画委員会 UVSOR 検討小委員会 報告

分子制御レーザー開発研究センター・分子物質開発研究センター 検討部会 報告

1995 年度後期 UVSOR 運営委員会 資料

2. 学術審議会加速器科学部会の報告を黒田委員が行った。まとめると以下のとおり。

(a) X 線領域のニーズの拡大に対応 (Photon Factory の高輝度化, Accumulation Ring の放射光専用化)

SPRING8 に対し大学等の研究者にも円滑な利用を希望。

(b) 全国共同利用の VUV・軟 X 線第 3 世代高輝度光源の建設計画を早急に具体化すべき (最も緊急な課題)。

現在は物性研が提案している。

(c) VUV・軟 X 線領域の一般的な利用拡大に対応するため, 地域性を考慮しつつ適正規模の小型光源を大学・研究機関で整備。

(d) 人材養成が必要。

3. 東大物性研, 東北大, 高エ研放射光の計画についての説明が各委員からあった。特に, 物性研の第 3 世代高輝度光源計画の進展状況が詳しく報告された。

4. フリーディスカッションの内容を以下にまとめる。UVSOR は, 研究場所のごく近くで実験ができるという garden machine と呼べるような装置になるようキャンパス内に工夫して建設されたものであり, スペースの拡張は考えていなかった。寿命としては 20 年程度を想定した。加速器は門外漢でも運転できる方向で考え, 当初, 加速器の研究には力を入れないことにしていた。chemical machine と位置付け, 赤外領域の利用, VUV 分光・光化学, 有機固体の光物性, 固体表面での光化学反応を利用した物質開発など, 化学に徹した研究を打ち出すよう努力してきた。

UVSOR の点検評価では UVSOR の加速器の性能向上などのためには光源研究者の充実が要望されており, 当初の考え(門外漢でも運転できる加速器)とは違う指摘がなされている。また, chemical machine としての成果はかなり挙げ

っているが、共同利用が始まって10年間強の実績として、ビームラインやビームタイムの半分以上を分子科学分野以外の分野の研究に提供してきている。garden machine としての特徴は所内研究者のアクティビティを高める要因にはなっているが、一方、高分解能な斜入射分光器の導入やレーザーを組み合わせた実験など新しい展開を図る場合にはスペース的な制限が問題になってきている。

学術審議会加速器科学部会の答申（上記（c））が実行に移されると、UVSOR が10年以上前に意図したことのかなりの部分は小型光源の整備で対応できることになる。つまり、小型光源は門外漢でも運転できる加速器に近いものがあり、garden machine として学内にとどめた利用が可能である。このような小型光源が、立命館大学、広島大学に引き続いて他の大学等でも整備されだした場合には、UVSOR の位置づけを変える必要が出てくる。これまでは、他に施設がないから UVSOR を利用するというようなユーザーにも対応する必要があったが、今後は考え直さねばならない。UVSOR は特徴を持った施設として他施設ではできないような実験ができるように整備していかなくてはならない。

時代遅れの二流三流の加速器ではいつまで経っても一流の成果は挙げられないので、二流三流の加速器を運転していること自体が、放射光科学の進歩にとってはマイナスになるという見方がある。このように我々はどうしても加速器の格段の進歩に目を奪われがちであり、加速器は年と共に急速に陳腐化するかのよう錯覚しがちであるが、放射光の研究は加速器ばかりでなく測定装置にも大きく依存することを忘れてはならない。UVSOR は当分は十分な成果の出せる加速器を有しており、整理整頓をすればスペース的にも余裕を持って新しい測定装置が導入できるし、分光器・測定装置のスクラップアンドビルドにより世界的な競争力は維持できると考えられる。ただし、今後、小型光源が大学等で整備されていく場合のことを考えると、ビームラインのスクラップアンドビルドは、分子研 UVSOR の特徴を生かした研究に重点を置く必要がある。従来の VUV 分光・光化学、固体表面光化学、有機固体光物性等の特徴ある研究に加え、レーザーを併用した高度な研究、短波長の自由電子レーザーを利用した研究、レーザーでは励起できない内殻電子に注目した研究などが放射光分子科学の新しい展開として期待される。なお、UVSOR で成果の挙がっている赤外、遠赤外領域での研究は今後は線形加速器を利用した自由電子レーザーを利用する方が優位になっていく可能性がある。赤外、遠赤外領域の利用を UVSOR（偏向部）でどこまでやるのか見極めが必要である。

UVSOR はこれまで国際協力に大きく貢献してきた。アジア地区に関しては研究者を受け入れたり、放射光施設の建設に協力したりしている。現在、韓国と台湾では第3世代の VUV・軟 X 線高輝度光源が完成しており、日本からの利用が期待されている。X 線リングを所有していないこれらの国からの研究者を日本の硬 X 線施設に受け入れ、逆に VUV・軟 X 線光源利用の方は日本人が韓国、台湾の方へ出かけていくのがよいという考えもあるかも知れないが、国交や国際共同利用の経費の問題があり、今はむずかしい。ただし、沖縄、九州地区の研究者は国内の施設よりも韓国、台湾の方が近いので、今後、利用が活発化する可能性はあるだろう。東大物性研が計画・推進している VUV・軟 X 線高輝度光源で成果を挙げうる分野として分子科学は非常に重要な分野であるので、その建設に対する分子研の協力が期待されている。

分子研が5～10年先をめざして、第3世代の次に来るような放射光光源の検討を始めるのなら、所外の光源研究者の支援も得られるものと考えられる。UVSOR での自由電子レーザーやコヒーレント放射光に向けての基礎研究は第4世代とも言える次世代の光源につながるものである。学術審議会加速器科学部会の答申に従って大学等で整備されていくであろう小型光源は学内利用が主目的であり、分子研のような大学共同利用機関とは明らかに目的が異なる。UVSOR の新光源計画では、現存しないような新しいものをめざすべきであり、他施設ではできないような放射光利用研究を可能にするようなものにしなければならない。

4-2-4 第1回 UVSOR II 検討会報告

日時 1995 年 12 月 7 日 午後 1 時半～4 時 50 分

所外出席者 山崎鉄夫（電総研・部長），安東愛之輔（姫工大高度産業研・教授）
春日俊夫（高エ研・教授），加藤政博（高エ研・助手）
田中均（理研大型放射光・先任研究員），高木宏之（東大物性研・助手）

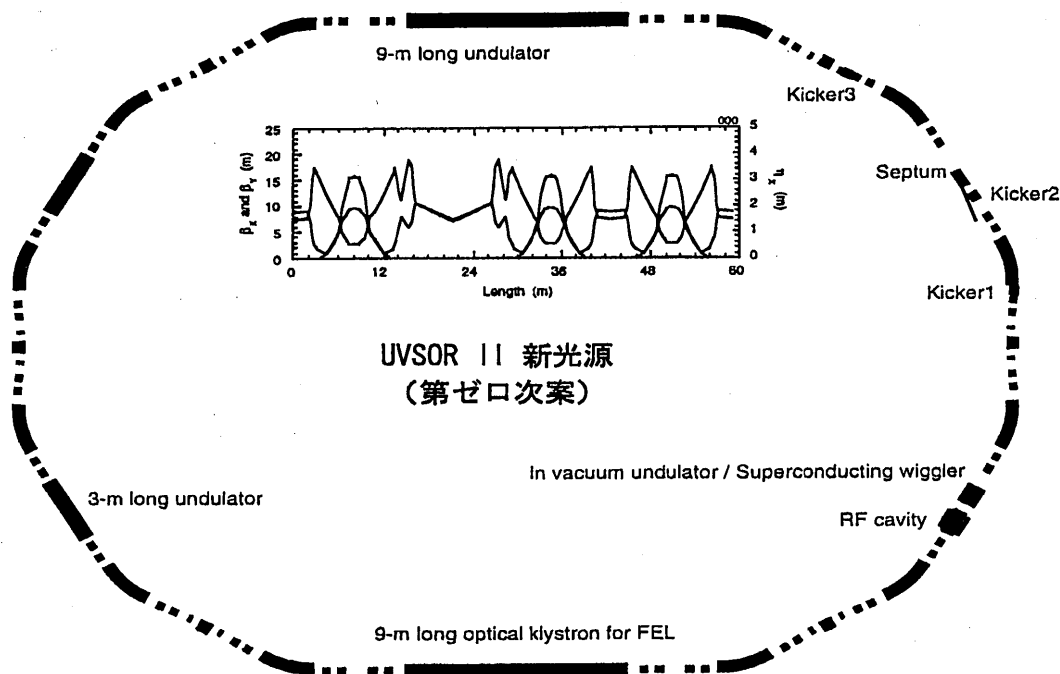
分子研出席者 小杉，濱，鎌田，木下，木村（以上，UVSOR 施設）
宇理須，伊吹，田原，見附，間瀬（以上，極端紫外光科学研究系）
酒井，山崎（以上，技術課），伊藤（所長）

1. 所長が 4-2-2 の中間報告で示されている UVSOR 将来計画（4）について概要を述べ，さらに施設長が将来計画（1）～（4）に関する全般的な説明を行った。
2. 濱助教授を中心として練られた UVSOR II 計画の中核になる中規模（周長にして現在の UVSOR の約 2 倍程度）の光源加速器に関する第ゼロ次案の説明があった。そのデザインの図とパラメータを示す。

放射光の輝度を向上させる方法にはいくつかアプローチがあるが，これは電子のバンチ長を極端に短くする方向で設計されたリングである。一方，現在，主流になっている第 3 世代高輝度光源リングは電子ビーム自身のエミッタンス（位相空間の広がり）を小さくする方向で設計されたもので，そのようなデザインコンセプトを踏襲する限りリングは必然的に極めて大きくなり，規模の点で UVSOR II 計画にそぐわないものとなる。ここで提案されたリングは，UVSOR II 計画として適正規模の範囲で，ある程度の低エミッタンスを実現し（現在の UVSOR の約 1/10），次世代光源のひとつと目されている極短バンチ電子ビームの生成が可能なリングになっている。電子ビームのエネルギーは 1 GeV を基本として（現在の UVSOR は 0.75 GeV），放射光の波長領域を真空紫外から軟 X 線までに絞った。これは国内で進行中の高輝度光源計画と競合しない領域であり，また現在の UVSOR で行われている研究の連続性を考慮したものになっている。

このリングには約 10 m に達する直線部を 2 か所，3.6 m の直線部を 4 か所設けてあり，紫外域～真空紫外域の FEL 及び長尺アンジュレータの導入が可能になっている。バンチ長は理論的に約 4 mm から 100 μm 以下まで可変であり（現在の UVSOR では約 15 cm），ピコ秒以下の時間分解の実験や数十 μm 以上の遠赤外領域で高輝度のコヒーレント放射光を発生させることができる。また，バンチ長が最近のレーザーのパルス幅と遜色ないほど短いことから，レーザーを併用した二重共鳴などの実験でも高効率な測定が可能となる。このような特性は第 3 世代リングからは得られないものである。

極短バンチ電子ビームの生成は加速器物理学において現在も重要なテーマとして研究途上にあり，このリングのデザインには細かい部分で検討するところが残されているが，光源加速器としては特徴のあるものになっているとの指摘が所外出席者の多くからあった。今後，UVSOR II 計画に向けての FEL や極短バンチ長の基礎研究を現存の UVSOR で積み重ね，より確実性の高い計画になるよう練っていく方針が示された。また，理論的なビーム制御の検討についてなど所外研究者の積極的な協力が得られる見込みが立った。



UVSOR II 新光源
(第ゼロ次案)

現UVSOR

53.2 m
Double-bend Achromat

4
750 MeV (430 ~ 800 MeV)
2.2 m

8

28 (4 families)

3.16 (horizontal)
2.62 (vertical)
-4.524 (horizontal)
-4.800 (vertical)
0.0033
113 π nm rad
4.01 $\times 10^{-4}$
11.6 keV / turn (dipoles only)
26 ms (horizontal)
23 ms (vertical)
11 ms

90.115 MHz
50 kV
16
13.2 kHz
48 mm - 160 ps

0.41 mm (horizontal)
0.28 mm (vertical)
1.05 mm (horizontal)
0.20 mm (horizontal)

Circumference
Lattice Type
Number of Super-cells
Number of Unit-cells
Beam Energy
Bending Radius

Number of Dipoles

Number of Quadrupoles

Betatron Number

Natural Chromaticity

Momentum Compaction Factor

Natural Emittance

Natural Energy Spread

Radiation Loss

Betatron Damping Time

Synchrotron Damping Time

RF Frequency
RF Peak Voltage
Harmonic Number
Synchrotron Frequency
Natural Bunch Length (σ)

Beam Size (10 % coupling assumed)
Dipole

3.6 m-long straight section

10 m-long straight section

UVSOR II 新光源 (第ゼロ次案)

118.0 m Racetrack
Modified Triple-bend Achromat

2
6
1 GeV (0.6 ~ 1.5 GeV)
4 m (34° normal dipole)
- 4m (-8° inverted dipole)
12 (normal dipole)
6 (inverted dipole)
68 (9 families)

5.73 (horizontal)
2.60 (vertical)
- 8.588 (horizontal)
- 7.272 (vertical)
0 (- 0.002 ~ + 0.002)
24.1 π nm rad
3.81 $\times 10^{-4}$
28.1 KeV / turn (dipoles only)
28 ms (horizontal)
28 ms (vertical)
14 ms

508.123 MHz
500 kV
200
0 kHz (max 14.3 kHz)
0 mm (max 2.5 mm - 8.5 ps)

0.15 mm (horizontal)
0.17 mm (vertical)
0.46 mm (horizontal)
0.13 mm (vertical)
0.43 mm (horizontal)
0.13 mm (vertical)

3. 電総研から短バンチ生成が可能で FEL に主眼をおいた中規模光源計画の紹介があり、また、姫工大から汎用性があり非常に長尺のアンジュレータを導入可能な中規模光源計画の紹介があった。膨大な予算や敷地面積を必要とする第3世代リングと一線を画すために、それぞれ苦勞しながらデザインをしている状況の説明があった。姫工大光源計画は来年度より具体的に始まることになっており、現在予算関係を詰めているとの報告があった。東大物性研の第4世代高輝度計画については面積的に高エ研 Photon Factory の4倍にもなっている現状が示された。しかし、土地問題もほぼ解決の目途が立ち、かなり実現性が高くなっているようである。一方、東北大の計画は必然的に東大の計画を意識せざるを得ず、これまで光源加速器のデザインの方針がなかなか固めにくかった事情の説明があった。
4. 加速器建設を実現するには充分な時間と人を長期に亘って投入することが必須であり、また、国内・国外情勢を見て計画を增強していく必要もある。これまで光源開発の点で孤立感の強かった UVSOR 施設としては、UVSOR II 計画の実現に向けて他研究所・大学との密接な協力関係を築くことが最優先課題である。今回の検討会では多くの加速器研究者の意見を求めながら将来計画を煮つめて行く方向性が示された。

4-3 電子計算機センター将来計画（中間報告）

分子科学研究所電子計算機センター将来構想委員会（以下、「将来構想委員会」と呼ぶ）では、前年度の点検評価結果を基に将来のセンターのあり方、計算機システム更新、運用方針等に係わる事項について議論した。委員会は、所外委員に榊 茂好（熊本大）教授、岡崎 進（東工大）助教授、山下晃一（東大）助教授、藪下 聡（慶応大）助教授、所内委員に岩田末廣教授、青柳 睦助教授、谷村吉隆助教授、岡本祐幸助教授によって構成された。本報告は、分子研将来計画委員会の討論と諸熊名誉教授（Emory 大学教授）を始めとする研究所外の関係者の意見を取り入れて作成された。

1966年にマリケン教授はノーベル賞受賞講演を「もう既に計算する化学者の時代になっているという私の信念を強調したいと思います。数千人とは言わないまでも数百人の化学者が、ますます多彩な分野の化学情報を得るために、実験室ではなく計算機室に通う時代です」と述べて締めくくっている。1995年の現在では、1966年のマリケン教授の認識を遥かに越える規模で、計算機を利用した研究は、化学研究の中で重要な役割を果たしている。21世紀に向けて、分子科学研究における電子計算機の重要度は一層増大し、実験科学と、計算機を活用した理論科学の競演は科学研究の場に不可欠となる。分子科学研究所計算機センターは、研究所内外の計算機需要の増大に応える体制を常に用意していく必要がある。

4-3-1 現有計算機の構成と利用状況

1995年度の利用者の総計は約712名、研究課題は205件である。1995年1月より電子計算機センターの計算機システムは、スーパーコンピュータ NEC SX-3、並列計算機 IBM SP2、そして高速汎用計算機 NEC HSP から構成されている。この時から、オペレーティングシステム（OS）も UNIX に統一された。

SX-3は3個のベクトル演算器を持ち最高性能は19.2 GFLOPSである。また、2GBの主記憶容量とジョブの一時作業領域として高速に読み書きが可能な RAID ディスクを約60GB持つ。汎用高速計算システム（SP2、HSP）が導入される以前の一年間は、大型汎用機の性能が不十分であったため、スーパーコンピュータ上でベクトル化率の低い小規模なジョブを実行せざるを得ない環境であった。現在ではベクトル化率が高くしかも大容量の主記憶と一時記憶装置を必要とするジョブを中心に利用されている。

並列計算機 SP2 は、平均 100 MFLOPS の性能をもつ 48 個の演算装置（CPU ノード）から構成されており、各 CPU ノードは 40 MB/秒以上の高速度で互いに通信を行うことが出来るネットワークスイッチにより結合されており、メッセージパッシング型の並列計算プログラムの実行を効率よく行うことが出来る。また全 CPU ノードには 2GB 以上の一時作業用のディスクをもち、1995 年度末にはそれぞれのノードのディスクが 4GB に増強される。SP2 では現在約 3 分の 2 の CPU ノードは主に逐次実行型のジョブによって利用され、残りの 3 分の 1 は並列計算ジョブ用に利用されている。SP2 の導入後約 1 年が経過し、現在では並列ジョブ処理環境を利用するユーザの数が徐々に増え、また利用法が高度化する傾向が見られる。

HSP は、高性能の汎用高速計算機であり、2GB の主記憶装置と約 20GB の RAID ディスクをもつ。HSP ではベクトル化率はあまり高くないが、SP2 の逐次専用ノードでは実行が困難な大容量メモリと一時作業ディスクを必要とするジョブの実行に利用され、その意味でスーパーコンピュータと並列コンピュータそれぞれの役割を補間する重要な役

目を果たしている。

この新しいシステムが運用されて、約1年が経過した。分子研計算機センターのCPUサーバーとしての能力は1994年1月にはそれまでのおよそ9倍、1995年1月には1994年1月以前の およそ14倍になったが、学会シーズンが一段落した1995年11月の平均でもその全CPU能力の約62%を、年明けの1月には常時数十件の待ちジョブが待機している状況になっている。当センターの計算機は、365日24時間運転を行っているため、実稼働率が6割を超えた場合には、平日の日中には常に待ちジョブがある状況で、特に学会前の混雑時には投入したジョブが実行されるまでの待ち時間が数日に及ぶ状況も発生している。各計算機のCPU能力の増強により、このような事態を早急に改善しなければならない。

4-3-2 将来の計算機システム

分子科学研究の計算環境を常に時代の先端に保つためには、短期的展望と長期的（具体的には機種更新）展望に立って、その指針となる事項を検討しなければならない。

(2-1) 計算機をめぐる状況

計算機の性能向上は著しく早い。それは単に計算速度が速くなるだけでなく、アーキテクチャーの進歩、OSの变革、情報処理価格の低下など多面にわたっている。現在（および近未来）の計算機は様々な観点から分類することができる。たとえば、CPUの速度の観点（現時点の）からは、1CPUのベクトル性能が6GFLOPS以上の（高価な）計算機、2GFLOPS以下のもの、そしてベクトル演算器を持たない（安価な）ものという分け方ができる。また、並列度の観点から見ると、並列度の高い（3桁以上の）もの、少ないが並列計算が可能なもの、並列計算ができないものという分け方ができる。またCPUとメモリの構成の違いからは、全てのCPUがシステム全体のメモリを共有する「共有メモリ型」と各CPUがそれぞれ局所メモリを持つ「分散メモリ型」に分けることができる。

この十年余の計算機をめぐる一つの特徴は、UNIXをOSとしたRISC CPUをもつワークステーションが高性能かつ安価になったことである。また、この数年では、パーソナルコンピュータ（PC）のハード・ソフト両面の高性能化も顕著である。一方、1980年代に発展したベクトル演算機を持つ高性能（スーパー）コンピュータも並列化され、いっそう強力な研究手段となっている。また、ワークステーションクラスターという形の並列計算技術も重要である。

ワークステーションが安価になり、また国内のいくつかの研究室では研究費も比較的潤沢になったので、所外研究者の分子研計算機センターへの依存度は、数年前と比べて下がっている。かつての大利用者の何人かは課題申請もしていない。国内（学内）情報交換網が遅いのもこの傾向を促進している。研究室の使い勝手の良いワークステーションに慣れた研究者・学生が分子研センターへの接続を避けることになり、結果的に計算規模を小さくする場合も散見される。一方では、計算機センターのCPUへの期待も大きく、実際上記のように予想を上回る勢いで1995年1月からのシステムは利用し尽くされている。計算機の性能向上に伴い、研究に必要な計算量が著しく増大しており、特に大メモリー・大容量ディスク・長時間ジョブへの要求は強い。東大物性研究所の計算機センターは今年度から、分子研計算機センターがこれまで行ってきた方式に似た形で、所外からの計算機利用を受け付けるようになり、非常に多くの申請があったという。センター設立時のように、分子研センターでしか計算化学ができなかったのが異常時であったと言えよう。とはいえ、計算機をめぐる環境の変化は著しく速く、正しい展望をもつ努力を絶え間なくしていなければならない。

(2-2) 機種更新以前の対策

ベクトル、並列、高速スカラから成る3種の計算機システムそれぞれに対して、その特徴を生かした利用形態がユーザーに浸透してくるにつれて、各システム固有に増強を必要とする事項と3種のシステム間のバランスを考慮しなければならない事項が次第に明らかとなってきた。

並列計算機のCPUノードの拡充やメモリー、ディスク資源の増強は、5年ごとのレンタル契約更新に制約されず適時に行える体制を整え、予算的措置の検討が必要である。

現有スーパーコンピュータでは、1995年度より深夜から早朝にかけて3個のベクトルCPUを並列に利用できるジョブクラスを設置し、利用者にベクトル並列プログラムの実行を推進してきたが、更に大規模な計算を行うためにはベクトル演算器の台数を大幅に増やす必要がある。また、配置間相互作用計算や量子動力学計算等の大規模計算を可能とするためには、1つのジョブが4GB以上のメモリーと50GB以上の一時作業ディスクを利用できるシステム構成に拡張する必要がある(現行は、それぞれ2GBと20GB)。

CPUの構成としては、ベクトル並列プログラミングの容易さからみて、現時点では、共有メモリー型の構成が有利であるが、その際、主記憶装置と演算器間には高性能のバスとメモリー競合を回避する高度なソフトウェア機構が要求される。拡張記憶装置は、ディスクよりも高速な一時作業ファイルの格納領域として今後もその重要性は変わらないが、近い将来は今以上に高速なRAID型ディスクが開発される見通しもあり再検討の余地がある。

現段階では並列計算機SP2は、逐次実行ジョブと並列ジョブのCPU資源の分配が2:1程度となるよう運用されている。今後は並列プログラムの開発環境と利用者のプログラミング技術の向上に伴い、大規模で長時間の並列ジョブへの需要が高まってくることが予想される。その場合においても現在の汎用高速計算機HSPとSP2の逐次計算ノードにおいて処理しているような逐次処理型の中規模ジョブを効率よく処理できる環境を用意しておくことが重要であり、特に研究室のワークステーションでは計算しにくい程度の中・大規模分子軌道計算を多量に処理する環境を常に用意しておかなければならない。逐次実行型のジョブと大規模並列ジョブの実行環境を分割した構成をとることも検討する必要がある。現在の運用ではCPU資源を分配するために、CPUの構成として分散メモリー型をとっているが、並列ジョブの実行のみを行う場合には高速なノード間通信機能をもった共有メモリー型の並列計算機の導入も検討する余地がある。逐次実行ジョブに対しても時間制限(現状は最長48時間)が短いと言う声も強く、限られたCPU資源をよりいっそう有効利用できるよう運用面でもさらに工夫が必要である。

プログラムの巨大化に伴い、利用者の保存ファイルを格納するファイルサーバに要求される容量の増加と入出力性能の向上は、すでに重要な課題となっている。センター内のCPUサーバと各種周辺機器を結ぶネットワークは、ファイル共有等の負荷の増大に十分対応できるように現在のバス型からATM等のスイッチ型に移行してゆく必要がある。また利用者からは、センターと所外利用者端末を結ぶネットワークを高速化する強い要望があり、今後も機構ネットワーク組織及び学術情報センターなどのネットワーク組織と協力し、名古屋-岡崎間に主要大学間ネットワークと同等の高速なネットワークを導入するための努力を続けてゆくことが重要である。

以上の様に電子計算機センターの3種の計算機はそれぞれの計算機の特徴を生かした利用がなされてきているが、さらに大容量のメモリーとディスク資源を必要とするベクトル及び並列計算の需要も年々増大している。一方、計算

機のダウンサイズに伴い所内外の各研究室の CPU 能力は数年前に比べて飛躍的に向上しており、分子科学研究者に対し常に最高性能の計算環境を提供することが当センターの重要な使命の一つであることから、ベクトル並列型スーパーコンピュータ、超並列型計算機等の導入により演算能力の早急な増強が望まれている。

(2-3) 1998 年度のスーパーコンピュータ機種更新に向けて

どのようなタイプの計算機を選択するかは、単に演算性能やメモリ容量を考慮するだけでなく、今後の利用分野、利用形態の正確な予測に基づいた判断が重要となる。1999 年度の汎用システム更新を展望に入れて、全システムとして分子科学研究中の計算需要の拡大に応えるシステムを構築しなければならない。

現有の計算機システムは、ベクトル計算 (SX-3)、大規模スカラ計算 (HSP)、並列及び中小規模計算 (SP2) の様にそれぞれの計算機の性能を引き出すように運用されている。現在これらの 3 システムの中では、並列計算と中小規模計算を独立したシステムで運用できることが望まれており、将来は超並列計算機を加えた 4 システムをバランス良く使い分けることが機能分散の観点から重要となる。次期のスーパーコンピュータ機種更新においては、1 CPU 当たりのベクトル性能ができるだけ高いベクトル並列計算機と中小規模計算を処理するための計算機を導入し、1999 年度の汎用機更新において、大規模スカラ計算及び超並列計算を処理できるシステムを導入するなど、全システムの性能バランスを考慮し、1998～99 年の間で計算機システム全体の飛躍的な能力拡大を図る必要がある。1 CPU 当たりのベクトル性能の良い計算機は、使用している半導体技術と関連して高価であり、一見価格性能比が低い、プログラムが一度完成すると、WS では実行できない質的に違う計算科学が可能になる。計算需要の伸びと十年度に販売が予想される計算機の性能・価格を調査し、レンタル料の増額も含め検討しなければならない。そのために機種選定委員会を 1996 年度の早い時期に発足させなければならない。

また、今後も WS の高性能・低価格化が続くことが予想されることから、更新機種のレンタル契約期間（通常 5 年間）中におけるアップグレード可能性の有無も重要な選定要素となる。さらに、現在の計算機システムのように、OS の異なる複数の計算機システムを高速ネットワークで結び、いわゆる分散システムを構成する際には、次期システムと他のシステムとの親和性も重要な要件となる。

4-3-3 分子研における計算分子科学分野の重要性とセンターの役割

理論化学は、多様な化学事象からその基本となる概念を抽出し体系化を図ることを目的としている。

体系化を図る過程においては、個々の物質の構造や物性、化学反応に関与する化合物や溶媒といった具体物の物質の個性が重要となり、興味の対象になる。そこでは出来る限り実験で取り扱っている系の特徴を損なわずに、理論的な考察を行うことが重要となる。今日、理論化学的手法の発展と計算機の進歩によって、従来では不可能と考えられていたような複雑な系を不必要なモデル化を行わずそのまま研究対象として扱うことができるようになってきている。また、多くの簡単な系の厳密解も計算機上で得ることができるようになってきている。分子科学における計算科学は、実験の解析をするにとどまらず実験の先導的な役割を果たしており、その重要性は今後さらに増大する。

一方、分子研の理論部門は 1995 年度から 1 部門が増設され、計算機センターのグループを加えると専任の研究グループは 7 になった。各研究グループは独自にワークステーションを持ちプログラム開発や応用計算を進めているが、同時に計算機センターの計算機利用の中で大利用者でもある。従来、センターの CPU 利用の約 4 割が所内（ほとんど理論系）利用の目安とされていた。分子科学の理論研究においてこれまで以上に計算科学の手法が重要になることが予想され、計算機センターと理論系のいっそうの緊密な連携が必要となる。

上記のように、所外の研究グループも研究室単位で強力な計算環境を持つことも一部では可能になってきている。分子研の理論グループにいつそう卓越した計算環境を提供するためには、所外には公開しない特殊計算機の導入も検討していく必要がある。その一環として、1996年度研究基盤重点設備費に「計算分子科学の展開」を要求する予定である。

計算機のハード・ソフトの両面の進歩は早く、またその最新の成果を研究に取り入れることによって、質的な変化をもたらす研究を進めることが可能になる。ベクトル並列型、超並列型などの新しいアーキテクチャの計算機的能力をフルに活用するための分子科学計算アルゴリズムの開拓や、計算機アーキテクチャの特徴を生かした分子シミュレーションプログラムの開発研究を行うことのできる研究グループが、計算機センター内に新たに1グループ（助教授1，助手1，技官1）は必要である。

4-3-4 国際分子科学計算センターとして

1994年度の点検評価結果に指摘されているように、センターは設立の当初より日本全体の分子科学研究のための大型計算を実行するためのセンターとして出発し、この目標もかなり高い水準で達成されている。実際、過去10数年にわたりコストの面でも、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実行が困難な大規模な分子科学計算分野において成果をあげることができた。また、設立当初より運営委員会を中心とした独自の審査制度を確立し、少なくとも所外に対しては、課金制度なしに研究プロジェクトに対する申請許可制度を導入・運用してきた。

このようなユニークなセンター運営の特徴と優れた計算機環境を生かし、また高速な国際的な情報ネットワークの整備に伴い、将来的には、アジア諸国を中心に、計算環境が十分備わっていないが潜在的に優秀な分子科学研究者を持つ国々の研究者に対し、プロジェクト申請の道を開き、国際的な計算機センターへ飛躍させる事は今後の検討課題である。この制度の実現のためには、国内利用者に負の影響を与えない様にするために計算環境の一層の充実が何より前提であり、さらに課題審査制度の確立、専任の助手（出来る限り外国人の）の採用、高速ネットワークの整備など多くの課題を解決しなければならない。

海外の研究者は、現在でも、国内の研究グループの一員に加わっていれば、インターネットを通じて分子研計算機センターを利用することができる。このような形の国際協力研究も推進していく必要がある。また、プロジェクト方式で国際協力研究課題を新たに設定することが可能である。この場合には、1，2度の訪問を可能にする予算的措置が必要である。

4-3-5 センターライブラリ開発の研究プロジェクト化

計算機センターの目的の中の一つの大切な業務は、分子科学計算のためのプログラムライブラリ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る。過去に、センターは継続的にこれらの事業を進めてきたが、分子研センター発で世界に広まったソフトウェアの開発はあまり多くはない。センターライブラリ開発制度を見直し、件数を絞って集中的に開発支援できる形にしなければならない。外部研究者に研究プロジェクトを公募すると同時に、センターや理論系のスタッフが協力することが望ましい。例えば、大規模な分子軌道計算プログラムの並列化や、量子分子動力学プログラムの開発などは、現在の研究者構成においてもその成果が十分に期待できる。

昨年度の「点検評価」で指摘されているように、1986年のベクトル型スーパーコンピュータのセンターへの導入は、分子動力学計算と反応動力学計算分野の研究者に大きな刺激を与えた。この様に将来の超並列スーパーコンピュータの導入が、新たな分子科学計算分野の進展を促す可能性も十分にあり、超並列時代を見据えた方法論の開拓が重要である。

4-3-6 世界に情報を発信する

センターのスタッフが過去に積極的に参加し、量子化学者のみならず広く化学・物理学研究者から高い評価を受けている QCLDB(Quantum Chemistry Literature Data Base)の開発に対し今後も予算的にはもちろんのこと、センターの開発業務として支援する体制をとり続ける必要がある。現在、U.S.A.のいくつかの国立研究機関では、WWW(World Wide Web)を通じてその機関が作成したデータベースを全世界に公開している。このような形の全世界の学会に対する寄与は、特に生物学や素粒子・原子核の分野などではその研究機関の一つの「業績」として高く評価されている。我が国ではデータベース作成による世界の学会への寄与は、QCLDBを除いて皆無であると言われているが、このQCLDBも、現在は、情報ネットワークを通じての利用は分子研計算機センターの利用権を持っている者に限られており、事実上、国内にのみ閉じている。QCLDBをWWW等を通じて世界中から無料で利用できるようにする環境の整備とそのため予算的処置(データベース作成とそのため環境整備・事務費)および版權(特に、国が主張している)

に関する対策が緊急に必要である。

4-3-7 情報ネットワークと計算機センター

1993年度末に完成した岡崎国立共同研究機構の情報ネットワーク新ORIONによって、分子研のスタッフ・学生の電子メール・インターネットの利用は著しく向上し、ほとんどの研究者にとって情報収集と発信のための不可欠な手段になっている。計算機センターは新ORIONの構築と運用には当初はたずさわらなかったが、1995年度に情報ネットワークの担当技官が採用され、センターに配属されたのを契機に、センターは分子研内のネットワーク業務に関与するようになった。計算機センターの主要目的は、分子科学における計算科学の支援であり、情報ネットワーク特に電子メールなど情報交換を支援する業務はこれまで軽視されてきた。これからも、このような業務は主要業務とはならないが、上述のように、研究所内はもとより国内外との高速情報交換網は、計算科学を推進する上に非常に重要な基盤設備であり、また、情報ネットワークを企画・管理・維持するのに必要な知識や技術は計算機センターのスタッフに要求されている知識や技術と多くの共通部分があるので、センターは分子研内はもとより、岡崎国立共同研究機構内のネットワークの企画・運用に関与する必要がある。

センターの計算機を国内外の研究機関から高速に利用するために、名古屋-岡崎間の情報交換速度を主要大学間と同じ速度に常に維持していく必要がある。スーパーコンピュータをネットワークコンピュータの一つのノードとして活用するためには高速な学術情報ネットワークが不可欠な基盤設備であるので関連機関と連携して実現していかなければならない。

5. 資 料

5. 資 料

5-1 歴代の評議員(1976~1981)

氏名・所属 (当時)	1976. 1. 10~ 1978. 1. 9	1978. 1. 10~ 1980. 1. 9	1980. 1. 10~ 1981. 4. 13
小谷 正雄 東京理科大学長	○	○	○
長倉 三郎 東京大物性研教授	○	○	○
石塚 直隆 名古屋大学長	○	○	○
梅棹 忠夫 国立民族学博物館長	○	○	○
岡村 総吾 東京大工教授	○	○	○ (日本学術振興会理事)
ハインツ・ゲリシャー 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 東京大薬教授	○	○ (東京大名誉教授)	○
関 集三 大阪大理教授	○		
田島弥太郎 国立遺伝学研究所長	○	○	○
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長	○		
森野 米三 相模中央化学研究所長	○	○	○ (相模中央化学研究所 最高顧問理事)
山下 次郎 東京大物性研究所長	○		
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 東京大理教授		○	○
メルビン・カルビン カリフォルニア大学 ケミカル・ヴィ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 (1981～)

氏 名	所 属	第 1 期 '81. 6. 1～ '83. 5. 31	第 2 期 '83. 6. 1～ '85. 5. 31	第 3 期 '85. 6. 1～ '87. 5. 31	第 4 期 '87. 6. 1～ '89. 5. 31	第 5 期 '89. 6. 1～ '91. 5. 31	第 6 期 '91. 6. 1～ '93. 5. 31	第 7 期 '93. 6. 1～ '95. 5. 31	第 8 期 '95. 6. 1～ '97. 5. 31
赤松 秀雄	東大名誉教授, 分子研名誉教授	○	○	○	○'88. 1. 8 死亡				
石川 忠雄	慶應大学長	○							
石塚 直隆	名大学長	○～'81. 7. 22							
飯島 宗一	名大学長	○'81. 9. 1～	○	○	○～'87. 7. 21				
植村 泰忠	東大理教授, 東京理大教授	○	○	○					
神田 慶也	九大学長	○							
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	○	○～'84. 5. 15			○	○	○	
榊 米一郎	豊橋技科大学長	○	○～'84. 3. 31						
島村 修	相模中央研最高顧問理事	○	○						
田島弥太郎	遺伝研所長	○							
馬場 宏明	北大応電研所長	○	○	○	○				
福井 謙一	京大工教授, 京都工繊大学長, 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	○	○'83. 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		○'84. 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		○'84. 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			○	○	○			

氏 名	所 属	第1期 '81.6.1～ '83.5.31	第2期 '83.6.1～ '85.5.31	第3期 '85.6.1～ '87.5.31	第4期 '87.6.1～ '89.5.31	第5期 '89.6.1～ '91.5.31	第6期 '91.6.1～ '93.5.31	第7期 '93.6.1～ '95.5.31	第8期 '95.6.1～ '97.5.31
伊東 椒 鈴木 進 豊沢 豊 平野 龍一 藤田 栄一	東北大理教授, 徳島文理大薬教授 東北大金材研所長 東大物性研所長, 中央大理工教授 東大名誉教授 大阪薬科大学長, 京大名誉教授			○ ○ ○ ○	○ ○ ○ ○	○ ○ ○	 ○ ○		
西原 春夫 倉田 道夫 朽津 耕三 田丸 謙二 早川 幸男	早稲田大学総長 三菱瓦斯化学(株)顧問 長岡技科大教授, 城西大理教授 東京理科大理教授 名古屋大学長				○ ○ ○ ○ ○'87.7.22～	○ ○ ○ ○ ○	 ○ ○ ○'92.2.5 死亡	○	
千原 秀昭 米澤貞次郎 赤池 弘次 三ヶ月 章 伊藤 昌壽	阪大理教授, (社)化学情報協会専務理事 近畿大理工学総合研教授, 近畿大理工教授 統計数理研究所長 日本学術振興会学術相談役, 東大名誉教授 東レ(株)会長				○ ○	○ ○ ○ ○	○ ○ ○ ○	○ ○ ○	○
佐々木慎一 佐野 博敏 櫻井 英樹 松永 義夫 秋本 俊一	豊橋技科大学長 東京都立大学長 東北大理学部長, 東北大理教授 北大触媒研センター長, 神奈川大理教授 学士院会員						○ ○ ○ ○	○ ○ ○	○ ○ ○
岩村 秀 加藤 延夫 黒田 晴雄 塩野 宏 田中 久	東大大学院理学系研究科教授, 九大有機化学基礎研究センター長 名大総長 東京理科大総合研教授 成蹊大法教授 前京都薬科大学長							○ ○ ○ ○ ○	○ ○ ○ ○ ○

氏 名	所 属	第 1 期 '81. 6. 1～ '83. 5. 31	第 2 期 '83. 6. 1～ '85. 5. 31	第 3 期 '85. 6. 1～ '87. 5. 31	第 4 期 '87. 6. 1～ '89. 5. 31	第 5 期 '89. 6. 1～ '91. 5. 31	第 6 期 '91. 6. 1～ '93. 5. 31	第 7 期 '93. 6. 1～ '95. 5. 31	第 8 期 '95. 6. 1～ '97. 5. 31
堀 幸夫	日本学術振興会理事， 金沢工業大副学長							○	○
森本 英武	(株)豊田中央研所長，顧問							○	○
守谷 亨	東京理科大理工教授							○	○
大瀧 仁志	立命館大理工教授								○
清水 良一	統数研所長								○
田隅 三生	東大大学院理学系研究科教授								○
土屋 莊次	日本女子大理教授								○
又賀 昇	(財)レーザー技術総合研第5研究部長								○
丸山 和博	京都工繊大学長								○

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 (カナダ国立研究所ヘルツベルグ天体物理学研究所長) '76.1~'78.1

George 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・ヴィ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・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) '88.1~'91.5

Peter Day (オックスフォード大学教授・Laue-Paul Langevin 研究所長) '91.6~'95.5

Mostafa Amr El-Sayed (ジョージア工科大学教授) '93.6~

Edward William Schlag (ミュンヘン工科大学物理化学研究所長) '95.6~

5-2 歴代の運営に関する委員会委員（1975~1981）

氏 名・所 属（当 時）	'75.7.15~ '77.3.31	'77.4.1~ '78.3.31	'78.4.1~ '79.3.31	'79.4.1~ '80.3.31	'80.4.1~ '81.3.31
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 阪大蛋白研所長	○	○	○		
神田 慶也 九大理教授	○	○ (理学部長)	○ (~'78.11.7)		
朽津 耕三 東大理教授	○			○	
田中 郁三 東工大理学部長	○			○ (教授)	
坪村 宏 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 阪大基礎工教授	○				
村田 好正 学習院大理教授	○	○ (東大物性研 助教授)	○	○	
山寺 秀雄 名大理教授	○				
吉田 善一 京大工教授	○				
和田 昭充 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 椒 東北大理教授		○	○		
大木 道則 東大理教授		○	○		
大瀧 仁志 東工大総合工研教授		○	○		
馬場 宏明 北大応用電研教授		○	○		
福井 謙一 京大工教授		○	○	○	
齋藤 喜彦 東大理教授		○		○	○
諸熊 奎治 分子研教授		○	○	○	
吉原経太郎 分子研教授		○			
霜田 光一 東大理教授			○	○	
武内 次夫 豊橋技大教授			○	○	
山本 常信 京大理教授			○	○	
岩村 秀 分子研教授			○		
坂田 忠良 分子研助教授			○		
木下 実 東大物性研助教授				○	
黒田 晴雄 東大理教授				○	○
山下 雄也 名大工教授				○	○

氏 名・所 属 (当 時)	'75.7.15~ '77.3.31	'77.4.1~ '78.3.31	'78.4.1~ '79.3.31	'79.4.1~ '80.3.31	'80.4.1~ '81.3.31
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					○
志田 忠正 京大理助教授					○
鈴木 洋 上智大理工教授					○
伊達 宗行 阪大理教授					○
田仲 二郎 名大理教授					○
千原 秀昭 阪大理教授					○
土屋 莊次 東大教養助教授					○
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					○

5-3 歴代の運営協議員（1981～）

◎ 会 長 (議 長) 人－人事選考部会に属する運営協議員
(副) 副会長 (副議長) 共－共同研究専門委員会

氏名	所属	第1期 '81.5.1～ '83.4.30	第2期 '83.5.1～ '85.4.30	第3期 '85.5.1～ '87.4.30	第4期 '87.5.1～ '89.4.30	第5期 '89.5.1～ '91.4.30	第6期 '91.5.1～ '93.4.30	第7期 '93.5.1～ '95.4.30	第8期 '95.5.1～ '97.4.30
伊藤 憲昭 大野 公男 角戸 正夫 朽津 耕三 鈴木 洋	名大工教授 北大理教授 阪大蛋白研所長 東大理教授 上智大理工教授	○共 ○人 ○(副) ○人 ○	○ ○人						
千原 秀昭 土屋 莊次 豊沢 豊 廣田 襄 米澤貞次郎	阪大理教授 東大教養学教授 東大物性研教授 京大理教授 京大工教授	○人 ○共 (共～'82.4.30) ○人 ○人 (人～'82.3.31) ○共 (共～'82.5.1)	○	○	○人	○(副)・人			
井口 洋夫 岩村 秀 木村 克美 花崎 一郎 廣田 榮治	分子研教授 〃 〃 〃 〃	◎人 ○人・共 ○共 ○ ○人	◎人 ○人 ○共 ○ ○人	◎ ○人 ○人・共 ○ ○人	○～'87.5.31 ○人・共 ○ ○	○ (◎'90.1.29～) ○共 ○ (◎～'90.1.16)	○ (◎～'92.3.31) ○人・共	○人・共	○
藤山 常毅 諸熊 奎治 吉原經太郎 田中 郁三 笛野 高之	〃 〃 〃(客員)(東大理教授) 〃(客員)(阪大基礎工教授)	○('82.4.30死亡) ○人・共 (共～'82.4.30) ○人・共 ○ ○	○人 ○人・共 ○人	○人 ○人・共	○共 ○人	○人 ○人	○人 (◎～'92.2.14)	○人	○

氏 名	所 属	第1期 '81. 5. 1～ '83. 4. 30	第2期 '83. 5. 1～ '85. 4. 30	第3期 '85. 5. 1～ '87. 4. 30	第4期 '87. 5. 1～ '89. 4. 30	第5期 '89. 5. 1～ '91. 4. 30	第6期 '91. 5. 1～ '93. 4. 30	第7期 '93. 5. 1～ '95. 4. 30	第8期 '95. 5. 1～ '97. 4. 30
山寺 秀雄 田仲 二郎 伊藤 光男 木村 雅男 黒田 晴雄	〃 (客員) (名大理教授) 名大理教授 東北大理教授 北大理教授 東大理教授	○ ○ (共～'82. 5. 1)	○人 ○ ○○共 ○共	○ (副) 人					
高柳 和夫 中島 威 中村 宏樹 丸山 有成 山本 明夫	宇宙研教授 東北大理教授 分子研教授 〃 (客員) お茶女子理教授 (客員) 東工大名誉教授	○ (共～'82. 5. 1)	○ ○人 ○共 ○ ○	○ ○ ○	○人 ○ ○	○人 ○人 ○	○共 ○人	○人 ◎○	○
茅 幸二 菅野 暁 坪村 宏 細矢 治夫 又賀 昇	慶應大理工教授 東大物性研教授 阪大基礎工教授 お茶女子理教授 阪大基礎工教授			○共 ○ ○人 ○人 ○共	○共 ○ ○人 ○ (～'88. 3. 31)	○共			
松永 義夫 北川 禎三 齋藤 一夫 青野 茂行 安積 徹	北大理教授 分子研教授 〃 金沢大大学院自然科学研究科長 東北大理教授			○人 ○共 ○	○人 ○人・共 ○ ○人	○人・共 ○ ○人	○	○人	○
原田 義也 松尾 拓 丸山 和博 大瀧 仁志 薬師 久彌	東大教養学教授 九大工教授 分子研教授 (客員), (京大理教授) 分子研教授 〃			○	○人 ○共 ○('88. 6. 1～) ○('88. 4. 1～) ○('88. 9. 1～)	○ (副) 人 ○ ○共	○共 ○人	○人	○共
木田 茂夫 岩田 末廣 志田 忠正 田隅 三生 仁科雄一郎	〃 慶應大理工教授 京大理教授 東大理教授 東北大金材研教授				○ (～'88. 3. 31)	○人 ○人 ○人 ○共	○人 ○人 ○ ○	○('94. 4. 1～)	○人

[illegible]

5-4 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所点検評価規則

1993 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、もって研究所の活性化を図ることを目的とする。

(委員会の組織)

第 2 条 研究所に、前条の目的を達成するため分子科学研究所点検評価委員会（以下「委員会」という。）を置く。

2 委員会は、次に掲げる者をもって組織する。

- 一 研究所長
- 二 研究主幹
- 三 研究施設の長
- 四 技術課長
- 五 その他委員長が必要と認めた者

3 前項第 5 号の委員の任期は、2 年とし、再任を妨げない。ただし、補欠の委員の任期は、前任者の残任期間とする。

(委員長)

第 3 条 委員会に委員長を置き、研究所長をもつて充てる。

(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関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、1993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、1995年3月31日までとする。

5-5 分子科学研究所将来計画委員会規則

1993 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，1993 年 7 月 19 日から施行する。

分子研レポート '95
－現状・評価・将来計画－

1996 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

管理局総務部庶務課

印刷 〒173 東京都板橋区中丸町 13-1

製本 株式会社 エニウェイ