分子研リポート'96

現状・評価・将来計画



分子科学研究所

岡崎の春

桜時の岡崎はことのほか美しい。
分子研から六所神社越えに乙川、
市役所方面を望んだスケッチ。

Ｆ３、マジック、水彩

伊 藤 光 男

「分子研リポート '96」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（1997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 …… 32
2-9 共同研究 …… 38
2-9-1 共同研究の概要 …… 38
2-9-2 1996年度の実施状況 …… 38
2-9-3 共同研究実施件数一覧 …… 40
2-10 国際交流と国際共同研究 …… 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
2-13-4 岡崎コンファレンスセンター …… 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 …… 74
3-3 電子構造研究系 …… 87
3-4 分子集団研究系 …… 99
3-5 相関領域研究系 …… 111
3-6 極端紫外光科学研究系 …… 122
3-7 錯体化学実験施設 …… 137
3-8 研究施設 …… 153
電子計算機センター …… 153
機器センター …… 155
化学試料室 …… 158
装置開発室 …… 160
極端紫外光実験施設 …… 162
3-9 開発研究センターの創設 …… 174

4．点検評価と課題 …… 175
4-1 論文の発表状況 …… 176
4-2 点検評価国内委員会の報告 …… 177
4-2-1 理論研究系 …… 179
4-2-2 分子構造研究系 …… 181
4-2-3 電子構造研究系 …… 182
4-2-4 分子集団研究系 …… 183
4-2-5 極端紫外光科学研究系 …… 184
4-2-6 相関領域研究系及び錯体化学実験施設 …… 186
4-3 所外の分子科学研究者による評価 …… 188
4-3-1 理論研究系 …… 189
4-3-2 分子構造研究系 …… 193
4-3-3 電子構造研究系 …… 198
4-3-4 分子集団研究系 …… 203
4-3-5 極端紫外光科学研究系 …… 210
4-3-6 相関領域研究系及び錯体化学実験施設 …… 216

5．将来計画 …… 223
5-1 電子計算機センターの将来計画 …… 224
5-1-1 現有計算機の構成と利用状況 …… 224
5-1-2 将来の計算機システム …… 225

5-1-3 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 …… 228
5-1-4 国際分子科学計算センターとして …… 229
5-1-5 センターライブラリ開発の研究プロジェクト化 …… 230
5-1-6 世界に情報を発信する …… 230
5-1-7 情報ネットワークと計算機センター …… 230
5-2 極端紫外光実験施設の将来計画（中間報告その２） …… 233
5-2-1 これまでの経緯 …… 233
5-2-2 平成８年度開催の将来計画に関わる委員会等の概要 …… 237
5-2-3 第２回 UVSOR 将来構想委員会報告 …… 238

6. 資　料 …… 243
6-1 歴代の評議員 (1976～1981) …… 243
6-2 歴代の運営に関する委員会委員（1975～1981） …… 248
6-3 歴代の運営協議員（1981～） …… 250
6-4 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所点検評価規則 …… 253
6-5 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 …… 255

1. 序　言

1．序　言

第一回の分子研リポート'93を出して以来，はや3年が経過し第四回の分子研リポート'96を公表するに至った。

分子研リポートは分子科学研究所の活動状況を報告するとともに，現状に対する評価に基づいて重要な課題を明確に認識し，もって分子研の将来像を探る目的で作られている。1993年度のリポート元年には他にさきがけて，外部評価委員による7研究系（専任18研究部門）の徹底的な評価を行い，これを報告した。これは，分子研の研究者にとって非常に大きな刺激になったと同時に，歯に衣着せぬ辛口の評価が内外に多大な反響を呼んだ。1994年度には5研究施設について同様な外部評価を行うとともに，2年にわたる評価に基づいて将来計画の策定に全所をあげて取り組んだことを報告した。1995年度には将来計画中最大の目玉である，現施設の再編による2つの開発研究センターの創設の検討及び概算要求にむけての成案作りに取り組み，その詳細を発表した。こうして外部評価→将来計画→概算要求というプロセスが3年間で完結し，その結果，後述するように，2つの開発研究センターがほぼ当初計画した形で1997年4月から実現することになった。こうして3年間にわたる努力がみのり一応の成果をうることができたが，これはまさに1993年度に行った外部評価が基礎になっていることを強調したい。

第一回の外部評価を行って以来3年が経過した。この間，分子研をめぐる内外の状勢は大きく変化した。とくに流動性の著しい分子研では，研究者の転出入による大幅な入れ換え，新部門の創設による研究者の新たな参加等が行われた。このような状況の下で研究所全体の外部評価を改めて行うことが必要と考え，本年度（1996年），これを実施した。前回とおなじく，第一線で活躍中の著名な国内，国外の所外の分子科学研究者20名（国内13名，国外7名）に評価をお願いした。評価に当たり，厳しい目で痛いところを容赦無く指摘して欲しい旨を要請した。評価委員による所内研究者とのインタービューを含む会合は約20回にのぼり約半年にわたった。その結果，外部評価委員による報告が提出され，これらを本リポートにそのまま掲載した。大変辛口の評価が多く，実質的な内容になったと思っている次第である。外国人評価委員にはこの他に個々の研究グループについてのさらにつっこんだ評価，意見を親展の形でいただいたが，これは当然公表すべきものではない。今回の評価は7研究系について行ったものであり，1997年度に発足する開発研究センターを含めた施設の点検，評価は来年度に行う予定である。これらの貴重な評価は分子研の新しい将来像の確立に充分に活かされなければならない。

本リポートには外部評価のほかに，電子計算機センターと極端紫外光実験施設の将来計画について，所外の研究者の参加を得て本年度審議された経過が報告されている。この2つの施設は分子科学者の共同利用の観点からもとくに重要であり，昨年度より継続的に取り組んでいるものである。電子計算機センターについてはスーパーコンピューターの更新が焦眉の急であることが結論された。一方，極端紫外光実験施設については最近の大型加速器をめぐる状勢の大きな変化にいかに対応するか，また分子科学研究のユニークな施設としていかにあるべきかを真剣に議論しているところであり，その内容を本リポートに盛り込んだ。

前述したように，1997年4月より2つの開発研究センターが発足することになった。それに伴って，現在の機器センター，極低温センター，化学試料室の3研究施設が廃止される。開発研究センターの内容については分子研リポート'95に詳述されているので，本リポートではその規模のみを述べるにとどめた (3-9)。

しかし，開発研究センターは分子研の研究体制に大きな転換をもたらすものであるので，ここで要点のみを記すことにする（詳しくは分子研リポート'95を参照）。今回認められたのは，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である。前者は3つの開発研究部，後者は4つの開発研究部からなり，各開発研究部は専任の助教授をリーダーとする独立したグループを構成する。開発研究センターの最大の特徴は，開発研究センターのグループが研究系の研究グループとの強い連携のもとで，特定の開発研究を協力して遂行するにある。この点でサービスを主業務とした従来の施設とは異なり，研究のブレークスルーを成し遂げるための新たな施設である。本センターの設立により新しく芽のでた研究を大きく育てる体制がととのったと考えている。

これからは，センター助教授に優秀な人材を得，研究系とセンターが一丸となって研究のピークをつくることがわれわれに課せられた課題である。今回の開発研究センターの創設は分子研研究者の強い要望に対して，文部省をはじめ管理局，関係方面の方々の並々ならぬご尽力によるものであり，ここに厚くお礼申し上げる次第である。

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研究活動状況を記載した。各研究グループの研究内容の詳細については毎年出しているAnnual Review（英文）をご覧いただきたい。

本リポートの作成にあたり，宇理須恒雄教授に全体のまとめをお願いした。また，管理局の方々には資料収集，編集，印刷にあたり大変ご尽力いただいた。ここにこれらの方々に心からお礼申し上げる。

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（1,281㎡）が竣工した。

1983. 3. 30　極端紫外光実験棟第2期工事（1,463㎡）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（3,935㎡）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）（283㎡）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）（951㎡）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。

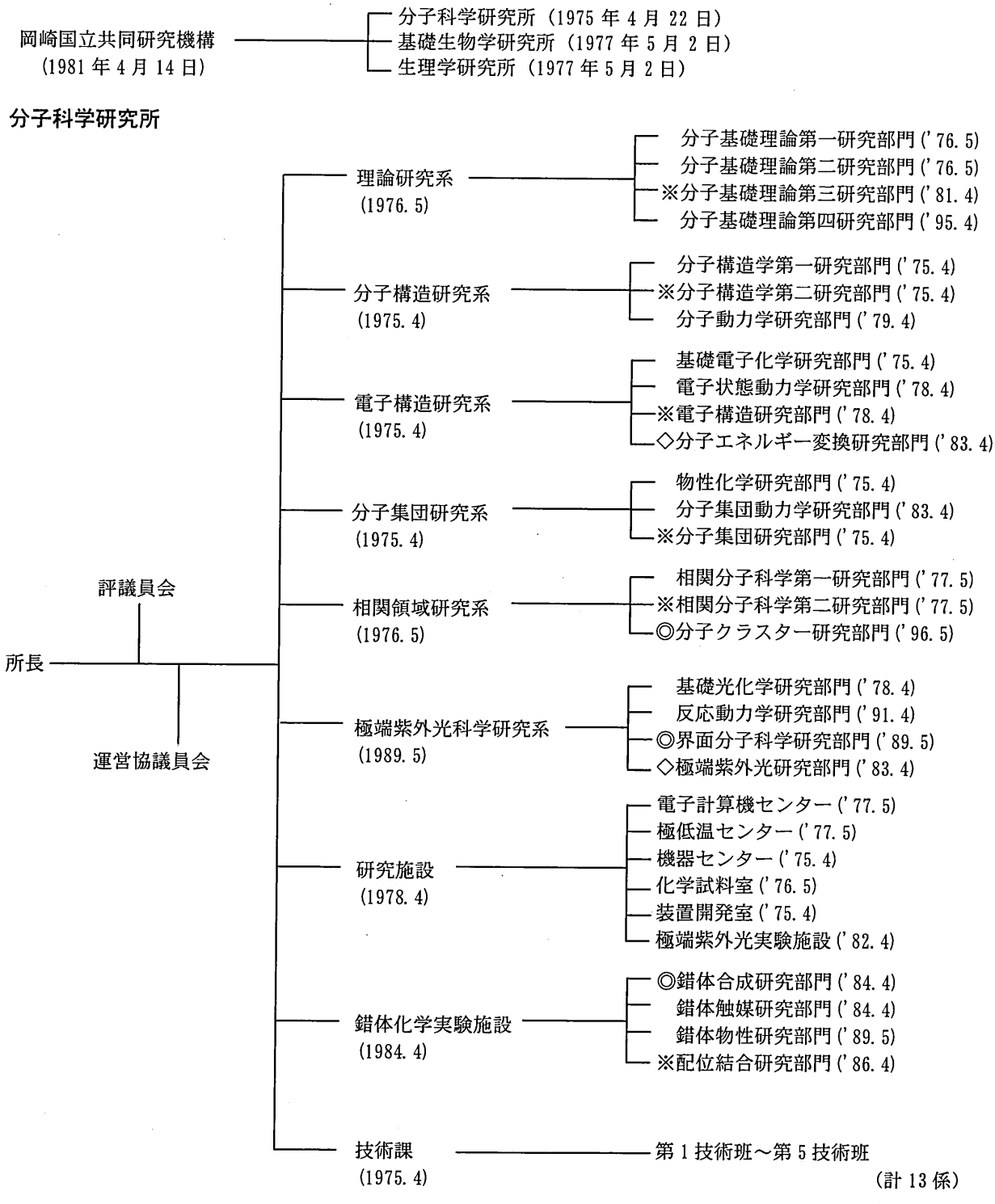
1995. 4. 1　理論研究系に分子基礎理論第四研究部門が設置された。

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. 5. 11　相関領域研究系に分子クラスター研究部門（流動）が設置された。

1997. 4　機器センター，極低温センター，化学試料室が廃止され，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が配置される予定。

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ことになっており，研究所の点検・評価という見地からも大変重要かつ有効である。

評議員

秋本俊一	東京大学名誉教授・学士院会員
伊藤昌寿	東レ(株)相談役最高顧問
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	サイエンスクリエイト(株)常任顧問
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	埼玉大学理学部教授
田中久	前京都薬科大学長・京都大学名誉教授
土屋荘次	日本女子大学理学部教授・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第5研究部長・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 運営協議員会

運営協議員会は，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。運営協議員会は研究所の運営に関する重要事項の議決・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。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
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　恆　雄	極端紫外光科学研究系教授
北　川　禎　三	分子構造研究系教授
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
西　　信　之	相関領域研究系教授
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	相関領域研究系教授

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）に提案し，承認を得る。

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する。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任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任用，あるいは総研大生又はその卒業生から助手への任用は妨げていない。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（1996 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)
山口　兆　(阪大教授)
小杉信博　(分子研教授)
田中晃二　(分子研教授)
中村宏樹　(分子研教授)
西　信之　(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科学研究所の大学共同利用機関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（1996年度）

梶本興亜　(京大教授)
小谷野猪之助　(姫路工大教授)
菅原　正　(東大教授)
塚田　捷　(東大教授)
三上直彦　(東北大教授)
宇理須恆雄　(分子研教授)
齋藤修二　(分子研教授)
薬師久彌　(分子研教授)
渡辺芳人　(分子研教授)
谷村吉隆　(分子研助教授)
宮島清一　(分子研助教授)

2-4-5　学会等連絡会議

所長の要請に基づき学会その他の学術団体等との連絡，運営協議員及び共同研究専門委員各候補者等の推薦等に関することについて，検討し，意見を述べる。

学会等連絡会議構成員（1996年度）

阿知波洋次　(東京都立大教授)
岩崎不二子　(電気通信大教授)
岩原弘育　(名大教授)
大野公一　(東北大教授)
大峯　巌　(名大教授)
加藤　肇　(神戸大教授)
木下修一　(大阪大教授)
小谷章雄　(東大教授)
小谷野猪之助　(姫路工業大教授)
田中健一郎　(広島大教授)
中筋一弘　(大阪大教授)
平尾公彦　(東大教授)
細矢治夫　(お茶の水女子大教授)
増原　宏　(大阪大教授)
渡辺芳人　(分子研教授)
北川禎三　(分子研教授)
平田文男　(分子研教授)
薬師久彌　(分子研教授)
松本吉泰　(分子研助教授)

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，研究所の職員 6 技術課長，他	放射線障害予防規則
電子計算機センター運営委員会	計算機センターの管理運営に関する重要事項。 共同研究の採択に関する調査。	センター長 センターの助教授 教授又は助教授 2 基生研・生理研の教授又は助教授各 1 機構職員以外の学識経験者 4	センター規則 委員会規則
極端紫外光実験施設運営委員会	実験施設の運営に関する重要事項。 共同研究の採択に関する調査。	実験施設長 実験施設の助教授 教授又は助教授 4 職員以外の研究者 7	実験施設規則 委員会規則
錯体化学実験施設運営委員会	実験施設の運営に関する重要事項。	実験施設長 施設の教授又は助教授 2 施設以外の教授又は助教授 2 職員以外の研究者 4	実験施設規則 委員会規則
日米科学技術協力における「光合成による太陽エネルギーの転換」に関する計画委員会	協力事業の企画，立案及び実施に関すること。他	関係研究者のうちから 13	委員会要項 （所長裁定）
実験廃棄物処理委員会	実験廃棄物の処理に関する指導及び監督。処理方法の選定。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，分子研コロキュウム係，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
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
機構連絡会議	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
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
情報ネットワーク管理運営委員会 整備専門委員会	情報ネットワークの管理運営に関し，専門の事項を調査審議する。	教授 1（運営委員） 助教授又は助手 1（管理室員）	委員会規程
情報ネットワーク管理室	機構における情報ネットワークの日常の管理。 将来における情報ネットワークの整備，運用等について調査研究。	次長（技術担当） 助教授又は助手 1 技術職員 1	管理室規程
スペース･コラボレーション･システム事業委員会	事業計画，事業の運営方法に関すること。他	所長，教授 1 情報ネットワーク管理室次長	委員会規程
スペース･コラボレーション･システム事業実施専門委員会	事業計画に関する事項等について調査。	事業委員会委員，教官 1 情報ネットワーク管理室員	委員会規程 委員会要項
宿泊施設・宿舎委員会	宿泊施設（ロッジ）の運営方針・運営費に関すること。（公務員）宿舎の入居者（入替えを含む）を選考すること。他	研究主幹 1	委員会規程
岡崎コンファレンスセンター運営委員会	センターの管理運営に関し必要な事項。	所長，教授 1	センター規程
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	教官 1	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
岡崎南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。記載なきは規程文なし。

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
- Hansmann, H. U. E.　助手
- 松原世明　非常勤研究員
- 升屋正人　非常勤研究員
- Hrusak, J.　文部省外国人研究員　'96. 3. 1～'96. 11. 30
- Li, Y.　学振外国人特別研究員　'95. 5. 25～'97. 5. 24
- Fiedler, A.　学振外国人特別研究員　'96. 5. 1～'98. 4. 30
- Severino, P.　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
- Tolstikhin, O. I.　非常勤研究員
- Iourova, I.　特別協力研究員

分子基礎理論第三研究部門（客員研究部門）
- 美宅成樹　教授（東京農工大工）
- 平谷篤也　助教授（広島大理）
- 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
- 佐藤啓文　助手
- 岸根順一郎　助手
- 秋山良　非常勤研究員

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
藤　原　英　夫	助　手
Ahmad, I. K.	学振外国人特別研究員　'96. 3. 28～'97. 1. 27
Tang, J.	特別協力研究員

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）
金　森　英　人	助教授（東工大理）
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
Kim, Y. R.	文部省外国人研究員　'96. 6. 25～'96. 8. 24, '96. 12. 24～'97. 2. 22
廣　田　　俊	学振特別研究員
Matysik, J.	学振外国人特別研究員　'96. 4. 1～'97. 6. 30
Zhao, X.	学振外国人招へい研究者　'96. 4. 1～'97. 1. 30

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
Rubtsov, I. V.	非常勤研究員
Kang, T. J.	文部省外国人研究員　'96. 7. 4～'96. 8. 31, '96. 12. 23～'97. 2. 24
穴　澤　俊　久	学振特別研究員

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
Gandhi, S. R.	助　手
岡　崎　紀　明	非常勤研究員
高　口　博　志	非常勤研究員
Rabai, G.	学振外国人招へい研究者　'96. 2. 1～'96. 11. 30
Shi, Y.	特別協力研究員

電子構造研究部門（客員研究部門）

小　尾　欣　一	教　授（東工大理）
手　木　芳　男	助教授（大阪市大理）
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)

Heaven, M. C.	教　授	(アメリカ　エモリー大学　教授)　'96. 1. 11～'96. 8. 31
Ostrovsky, V. N.	教　授	(ロシア　サンクトペテルブルグ大学　主任研究員)　'96. 10. 4～'97. 7. 3
Lustsik, A.	助教授	(エストニア　タルトゥ大学　準教授)　'95. 10. 4～'96. 9. 30
Sutter, J. P.	助教授	(フランス　フランス国立中央科学研究所　上級研究員)　'96. 12. 1～'97. 3. 14

分子集団研究系　研究主幹(併)　薬　師　久　彌

物性化学研究部門

薬　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
Kogan, I. L.	文部省外国人研究員　'96. 9. 3～'97. 7. 2
Simonyan, M. V.	学振外国人招へい研究者　'96. 1. 13～'96. 8. 13
井　口　　眞	学振特別研究員
伊　藤　哲　二	特別協力研究員
Dong, J.	特別協力研究員
Ivanov, V. A.	特別協力研究員
中　野　千賀子	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　紀	助　手
圷　　広　樹	非常勤研究員
藤　森　裕　基	学振特別研究員

分子集団研究部門(客員研究部門)

福　山　秀　敏	教　授(東大大学院理学系研究科)
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

相関領域研究系　研究主幹(併)　吉　原　經太郎

相関分子科学第一研究部門

渡　辺　芳　人	教　授
井　上　克　也	助教授
小　崎　紳　一	助　手
細　越　裕　子	助　手
和　田　仙　二	非常勤研究員
Ahn, K. H.	文部省外国人研究員　'96. 7. 3～'96. 8. 26, '96. 12. 17～'97. 2. 21
Yang, H.	特別協力研究員

相関分子科学第二研究部門(客員研究部門)

杉　本　豊　成	教　授(大阪府大先端研)
鳥　海　幸四郎	助教授(姫路工大理)
小　江　誠　司	助手

分子クラスター研究部門（流動研究部門）

西　　信之	教　授
永田　　敬	助教授
大橋和彦	助　手
朱　　雷	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

宇理須恆雄	教　授
見附孝一郎	助教授
間瀬一彦	助　手
吉田啓晃	助　手
水谷雅一	非常勤研究員
Gheyas, S. I.	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
河野光彦	学振特別研究員

極端紫外光研究部門（外国人客員研究部門）

Szichman, E. J.	教　授（イスラエル　ソルク原子力研究所　研究員）'95.10.1～'96.9.21
Horacek, J.	教　授（チェコ　チャールス大学　主任研究員）'96.10.1～'96.12.31
Bayle, J. P.	教　授（フランス パリ南大学　助教授）'97.1.10～'97.5.15
Ornellas, F. R.	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
Terekhin, M. A.	助教授（ロシア　クルチャトフ研究所　主任研究員）'96.10.1～'97.9.30

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
大野人侍	助　手
茂木孝一	非常勤研究員
Wagner, A. F.	文部省外国人研究員 '96.12.27～'97.4.3

極低温センター　　センター長(併)　薬　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　辺　芳　人
山　下　敬　郎　助教授
田　中　彰　治　助　手
北　村　千　寿　学振特別研究員
太　田　　哲　学振特別研究員
Zaman, M. B.　特別協力研究員

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

極端紫外光実験施設　　施　設　長(併)　小　杉　信　博
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（福井大工）
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
廣　瀬　サユミ　学振特別研究員
Ufuktepe, Y.　特別協力研究員

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）
芳　賀　正　明　教　授
櫻　井　　武　助教授
文珠四郎　秀昭　助　手
長　尾　秀　実　助　手

錯体触媒研究部門
塩　谷　光　彦　教　授
吉　川　雄　三　教　授（岡山大理）
中　沢　　浩　助教授（広島大理）
田　中　健太郎　助　手
王子田　彰　夫　非常勤研究員
塩　塚　理　仁　非常勤研究員

錯体物性研究部門
田　中　晃　二　教　授
藤　田　　誠　助教授（併）（千葉大大学院自然科学研究科）
拓　植　清　志　助　手
中　本　忠　宏　特別協力研究員

配位結合研究部門（客員研究部門）
宗像　惠　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　神長暁子

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

相関領域研究系技術係

極端紫外光科学研究系技術係
技官　服部秀男
技官　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
技　官	近　藤　聖　彦

極端紫外光実験技術係

係　長	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 1997 年 2 月 1 日現在。ただし，外国人研究者で 1996 年度中に３か月を超えて滞在した者及び滞在が予定されている者は掲載した。

＊　職名の後に（　）書きがある者は客員教官等で，本務校を記載している。

2-5-2 創立以来の人事異動状況（1997 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	25	45	141	124	72
転出者数	3	11	25	95	80	54
現員	1	14	20	46	44	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	7	7	16	3	4	7
転出者数	6	6	14	2	3	5
現員	1	1	2	1	1	2

部門名	分子クラスター研究部門			有機構造活性研究部門		
区分＼職名	教授	助教授	助手	教授	助教授	助手
就任者数	1	1	2	(1)1	4	4
転出者数	—	—	—	—	—	—
現員	1	1	2	—	—	—

有機構造活性研究部門は，平成 7 年 3 月 31 日限りをもって廃止。（ ）は併任で外数。

(3) 客員研究部門

区分＼職名	教授	助教授
就任者数	73	82
現員	7	8

(4) 外国人客員研究部門

区分＼職名	教授	助教授
分子エネルギー変換機構研究部門	15	13
極端紫外光研究部門	13	11

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分子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　生体高分子の構造・物性の理論的研究

研究課題　1，膜タンパク質の立体構造予測
2，ヒトゲノム計画と物理化学
3，極端紫外光による気相分子の高分解分光

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短寿命分子の物理化学特性及び星間物理・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と星間化学の研究
4，中性原子のレーザー冷却・トラッピングの研究とその応用

分子構造学第二研究部門（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，時間分解ラマン分光法による生体分子反応中間体及び電子励起状態の分子構造の研究
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　1，分子錯体の光解離における１原子かご効果の研究

2，有機ニトロキシドラジカルと遷移金属イオンを用いた新規錯体の構築

3，ワイドバンド固体における多電子過程の研究

4，時間依存型非断熱遷移過程の理論的研究

分子集団研究系

研究目的　新しい物性をもつ物質の構築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，導電性分子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とり組む。

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）

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

研究課題　1，分子クラスターイオンの赤外光解離分光法による分子間電荷移動と構造の解析

2，光電子分光法を用いた分子クラスター負イオンの電子構造の解明

3，分子クラスターイオンを用いたイオン－分子反応の研究

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。特に放射光及び放射光とレーザーの同期などによる気相・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，価電子励起領域の光イオン化ダイナミックス

3，放射光に同期した紫外レーザーシステムの開発とその分子科学研究への利用

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，高速シンチレータのダイナミックスに関する研究

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

4，窒化珪素クラスターSimNn の化学結合の理論研究

5，原子素化学反応（H_2+OH 及び N_2+OH）の量子動力学の研究

6，電子－分子衝突による振動励起及び解離性電子付着に関する研究

7，強誘電性及び反強誘電性液晶における自発分極発生機構

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，超高真空用潤滑膜とアクチュエータの開発

2，精密物性測定装置の開発

3，研究機器の自動制御の研究

4，非線型分光法の研究

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　　新しい構造や特異な機能を有する金属錯体の合成並びに機能発現・金属イオンを含む金属蛋白質の構造及び機能解明

研究課題　1，界面への金属錯体の分子配列を目指した表面錯体化学及びその応用

2，タンパク中においてアセンブルされた金属イオンによる電子伝達と小分子の反応

錯体触媒研究部門

研究目的　　生体分子と金属錯体が形成する超分子に関する研究

研究課題　1，特定のDNA塩基配列を標的とする人工金属錯体

2，金属整列能をもつ人工DNA様オリゴマー

3，　DNA結合能をもつペプチド金属錯体

4，生命誕生前の生体高分子形成における金属イオンの役割

5，金属医薬品の合成

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

2，プロトン濃度変化を利用したエネルギー変換の開発

3，自己組織性精密分子システムの設計・創成・機能発現

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，研究施設と縦糸，横糸の関係を保ちつつ分子科学という布の作成に寄与している。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平成 7 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分子研が支給する。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平成 7 年度，装置開発室で初めて実施し，その後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。

○平成８年度技術研修実施状況（カテゴリー１）

研修者氏名	所属	研修期間	受入先
小山幸子	東京大学物性研究所	1996.10.14～10.25 1996.11.18～11.29	機器センター
加藤丈雄	核融合科学研究所	1996.10.14～10.18	電子計算機センター
土屋　光	東京大学低温センター	1996.10.21～11. 2	極低温センター
千葉裕輝	東北大学科学計測研究所	1996.10.27～11. 9	極端紫外光実験施設
田中伸幸	国立天文台	1996.12. 2～12.13	装置開発室
熊谷喜照	名古屋大学工学部	1996.12. 2～12.20	装置開発室
岡田則夫	国立天文台	1996.12.16～12.21	装置開発室
渡辺千香	東北大学科学計測研究所	1997. 1.20～ 2. 1	装置開発室
押川達夫	静岡大学工学部	1997. 1.20～ 2.24	化学試料室
橋本清治	高エネルギー物理学研究所	1997. 1.27～ 2. 7	電子計算機センター
石田昌紀	東京大学教養学部	1997. 1.27～ 2. 7	電子計算機センター
小林和宏	名古屋大学理学部	1997. 2. 3～ 3. 7	装置開発室

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－岡崎コンファレンス－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

本研究は，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だし，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2つの小テーマを設ける。①多次元的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，白金表面上に物理吸着したメタンの200nm付近の紫外光による光化学が，白金表面の光吸収による間接的な励起ではなく，メタンに局在した電子状態を励起する直接励起のメカニズムで誘起されることを初めて実験的に明らかにした。また，メタンの光解離で生成されるホットな水素原子が誘起する反応を新たに見いだした。

「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，レーザートラップ可能な最も軽い原子であるヘリウム原子のレーザートラップ中での衝突によるイオン化レートをイオン計測により測定すると同時に生成イオン種の質量分析をも行い，ペニングイオン化レートと会合イオン化レートを区別して求めることができた。また，ヘリウム4原子とヘリウム3原子におけるそれらのレートの違いも見いだすことができた。

「レーザー光及び放射光を用いた光化学反応」の研究では，フェムト秒モードロックチタンサファイアレーザーを光源として①時間分解蛍光アップコンバージョン分光装置，及び②光ヘテロダイン検出インパルシブラマン散乱分光装置を製作した。これらの装置を用いてレチナール励起一重項の高い電子励起状態からの超高速緩和ダイナミクス（$S_3 \rightarrow S_2 \rightarrow S_1$）を明らかにし，また，フェムト秒パルスの位相を制御した光ヘテロダイン検出を初めて実現し，CCl_4 の分子振動によるビートの実時間観測など，試料のフェムト秒応答関数の各テンソル成分に比例する信号を得ることができることを実際に示した。

「スピン副準位による状態の選択」の研究では，LaF中にドープされた Pr^{3+} の青色領域の電子励起状態について，Pr核磁気共鳴測定に成功し，磁場強度依存性・角度依存性より共鳴線の同定と単結晶における出現メカニズムを明らかにした。また，液晶分子のディレクターに対する励起レーザー偏光面の角度変化を測定することで，振動ラマン線に由来する部分構造の配向分布を個別に決定できることを理論的・実験的に明らかにした。

「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，軌道放射と厳密に時間同期が取れた紫外モードロックレーザーシステムをほぼ完成させ，これを用いてヘリウム原子の時間分解ポンププローブ分光を行った。21.218eVのアンジュレータ光で He^*（$1s2p\ ^1P$）に励起し，遅延時間を変えながら4.8 eVのレーザーでイオン化して生成した He^+ を質量分析法で検出した。He^* の発光寿命 570ps に対応した狭い遅延時間領域で，He^+ の信号強度の増加が観測された。

「状態選択レーザー光励起による化学反応ダイナミクス」の研究では，フェムト秒レーザーを用いたpump-probe光イオン化法と画像観測法を組み合わせて，反応生成物の出現時間と散乱分布の測定という二つの実験的アプローチを統合し，散乱分布を時間の関数として観測する方法を確立した。この方法を用いて CH_3COCl 解離反応の時間分解観測に初めて成功した。

「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，多準位ガウス・マルコフ型量子フォッカー・プランク方程式のプログラミングを行い，3準位の配位モースポテンシャル系及び反結合準位を含めた4準位系の波束の運動，吸収，ポンプ・プローブスペクトルの計算を行った。この方程式による手法は，散逸や温度効果を量子力学的に正確に取り入れる事ができ，また解離や前駆解離状態の様に，量子準位が連続的で，マスター方程式等で記述できない系にも適用する事ができる。この方法は有色ノイズを取り扱える唯一の方法でもある。この研究で振動状態から，解離状態に至るスペクトルの変化を量子力学的に正確に，初めて明らかにする事ができた。

「光電子分光法による固体表面」の研究では，昨年度建設を始めた放射光による光電子顕微鏡実験をスタートさせた。UVSORの2つのビームラインに装置を接続し，10eVから4keVの広いエネルギー範囲で，光電子分光とその微小領域の分析が行えることがわかった。この装置を用いて，これまでに例のない，直線偏光励起による光電子の内殻

線を使った磁区観察が行えることを示した。また，非常に高い性能を持った光電子アナライザーの特徴を生かし，重希土類化合物の 3d-4f 共鳴光電子分光を高い分解能で行うことにも成功した。

(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用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。

「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，ピラジン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導電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，非平面型のビス（1,3-ジチオール）ドナーから金属的性質を示すカチオンラジカル塩を作成し，それらの物性が包接される溶媒分子に大きく依存することを見いだした。

「有機超伝導体の研究」では，セレン原子を含む π ドナー分子 BETS のつくる一連のλ型結晶構造をもつ超伝導体を作成し，電気抵抗，磁化率の温度変化等を吟味した。種々の物性はアニオンに含まれるハロゲン原子を置換することにより連続的に制御できる。超伝導転移温度は 10K 程度となり，BEDT-TTF 分子以外でも所謂 10K 級超伝導体が実現できることが示された。また，従来の有機超伝導体とは異なり，超伝導相に非磁性絶縁相が隣接していることが判明し，非常に興味がもたれる。

「DCNQI 電子系の研究」では，擬一次元電子系 $(DI\text{-}DCNQI)_2Ag$ を新たに合成し，これがスピンギャップのない反強磁絶縁体であることを明らかにした。絶縁性の起源として，約 200K 付近で $4k_F$ 電荷密度波 (CDW) が 3 次元秩序相として起こること，さらに，この $4K_F$ CDW が，従来の系によく見られる分子のダイマー化のようなボンド型ではなく電荷密度が DCNQI 分子一枚おきに疎密となるウィグナー結晶型の CDW であることも分かった。

「有機超伝導体の研究」では，BEDT-TTF 分子二量体からなる一連の物質系 $(BEDT\text{-}TTF)_2X$ は金属相，超伝導相，非金属相を含むが，$\kappa\text{-}(BEDT\text{-}TTF)_2Cu[N(CN)_2]Br$ の重水素体が超伝導相と非金属磁気秩序相のまさに境界上に位置する物質であることを明らかにするとともに，この超伝導体―絶縁体転移が一次転移であることを示唆する結果を得た。

「低次元強相関系の物性理論」では，$(DCNQI)_2M$(M=Ag, Cu) における金属絶縁体転移と磁気的な転移を説明するために，ボゾン化とスケーリング則による繰込み群方程式を解き，相図と抵抗の温度依存性を調べ，定性的な一致をみた。スピン梯子系の磁化率と核磁気緩和率の温度依存性を，スピンのマヨラナ フェルミオン表示により説明した。強磁場下の第 2 種超伝導体の準粒子状態を自己無撞着に求め，超伝導ギャップ内のランダウ量子化されたバンドの磁気破壊効果を明らかにした。

「π-d 電子系の研究」では，コバルトフタロシアニン一次元導体 $CoPc(AsF_6)_{0.5}$ の磁化率の実験を行い，磁化率に大きな異方性を見いだし，$(CoPc)_2^+$ 二量体のスピン構造をもとにしてこの一次元導体のスピン構造模型を提案した。また導電性の $BDNT\text{-}Ni(mnt)_2$ において強磁性相互作用が働いていることを見いだした。

「液晶における分子運動の NMR 法による研究」では，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ための方法論を開発し，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 12Tm-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。

「液晶における秩序構造の研究」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。その後，分子の回転ポテンシャルにおける非対称性の検出に取り組んでいる。これらを通じて，乱れた系における誘電秩序出現の微視的起源の解明を目指している。

「新規分子性強磁性体の開発研究」では，我々は高い次元性を有し，高温の転移温度を持つ分子磁石の新構築法として，高スピン有機ニトロキシドラジカルと遷移金属イオンの自己集合・集積化の手法を提案した。この手法を発展させて，直線型トリスアミノキシルラジカルとヘキサフルオロアセチルアセトナートマンガン(II)錯体で転移温度 46K という磁気構造が明らかな分子磁性体としては最高の転移温度を持つ新規分子磁石の開発に成功した。

「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，共鳴オージェ過程で一価イオンコアが脱励起した後の内殻励起は，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構築し，新しい反応系の開発を行うとともに，新規な物性・機能を有する物質群の開発を行う。特に，本研究では核酸，タンパクによる高度に制御された反応場を利用した金属錯体による物質変換，気／水界面での金属錯体の集積による物性の創出，ならびに多核金属錯体による２分子の二酸化炭素の活性化を目指して以下の研究を行った。

「特定の DNA 塩基配列を標的とする人工金属錯体」の研究では，チミン塩基に選択的に結合する亜鉛錯体が，RNA ポリメラーゼ II 転写系のプロモーター領域にある AT クラスター部位の構造を融解することを見いだした。さらに，AT 塩基対に結合することが期待されるグリコウリル型金属錯体，および DNA の転写調節領域の回文配列を認識することが期待されるメチオニンを金属配位子とするペプチド二量体－金属錯体を設計・合成した。これらの金属錯体は，DNA の構造・機能の新しい制御法を与えることが期待される。

「金属タンパク質および金属酵素における構造機能相関」の研究では，まず，ラッカーゼ，アスコルビン酸オキシダーゼ，ビリルビンオキシダーゼのようなマルチ銅オキシダーゼにおける三核銅センターにおける各銅センターの立体構造と磁気的性質を ESR，SQUID，共鳴ラマンスペクトルを用いて詳細に調べた。その結果，各タイプの銅結合部位の立体構造はタンパクのコンフォーメーション変化を強く受けるために，温度依存性が顕著であることを明らかにした。また，タイプ３銅間の磁気的相互作用の強さを定量することができた。さらに，阻害剤であるアジ化イオン物をプローブとし，酸素還元過程に関する情報を得ることにより，生体系でのみ見られるユニークな三核銅センターの構造と機能の解明が進みつつある。一方，NO リダクターゼは硝酸呼吸に関与する酵素の中でその不安定さ故に最も研究の遅れている酵素であるが，この膜タンパク質の精製を行い，チトクロム bc コンプレックスであることを明らかにした。現在，キャラクタリーゼーションが進行中であり，可溶性のチトクロムから，膜結合性のチトクロム c サブユニット，さらに反応中心であるチトクロム b サブユニットに至る電子移動プロセスと NO 還元機構の解明を目指している。

「界面への金属錯体の分子配列制御を目指した表面錯体化学」の研究では，金属錯体の溶液エピタキシ法による錯体配列制御を目指して，ベンズイミダゾール環をもつ三座および四座配位子を有する一連のルテニウム錯体を合成し，その気／水界面での単分子膜および LB 膜の性質について検討した。その結果，錯体分子の二次元空間へのパッキングや分子の対称性が錯体膜の配向に大きく影響することが明らかになった。さらに，気／水界面での単分子膜における酸塩基反応や銅イオンとの錯形成反応が起こる系を見いだし，二次元反応場を構築しうる可能性を示した。

「金属錯体による二酸化炭素の活性化」の研究では，多核金属錯体のLUMOが金属—金属結合にあることを考慮して，2電子還元により金属—金属結合を切断させて2つの反応サイトを創成して，2分子の二酸化炭素の活性化を可能にした。その結果，極めて温和な条件下でのシュウ酸合成が可能となった。また，ルテニウム金属錯体の中心金属の電子密度をポリピリジル配位子の酸化還元電位で調整することにより，Ru-CO_2と二酸化炭素（CO_2）およびRu-COと炭酸イオン（CO_3^{2-}）の間での可逆的な酸素イオン（O^{2-}）交換反応が起こることを実証した。その結果，非プロトン条件下での二酸化炭素から一酸化炭素への変換の指針が確立された。

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60回近くに達している。コンファレンスの性格はこの会の提案者であった赤松秀雄初代所長の次の言葉につきる。

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

この方針は今日まで貫かれており，討論の場であることが明記されている。コンファレンスの主題は全国の研究者の提案を受けて選考し，採択された主題の提案者を中心とした世話人に，外国人招待者を含めたすべての運営を一任することにしている。その分野で活発に研究を行っている第一線の外国人研究者と国内の研究者がひざをまじえて非公式に論議を交わすことによって，問題に対する意識を深め展望を拓く契機となっている。またそこで形成された人間関係は研究面のみならずあらゆる面で大きな影響を及ぼしている。若い研究者を刺激し彼らの研究意欲をかきたてていることも重要である。1997年3月現在で58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（1997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57回までの参加研究者総数は約2,750名，その内外国人研究者は約246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　二朗（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一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一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　　巌（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　二朗（名古屋大学教授）　吉原經太郎（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「水素ー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　二朗（名古屋大学教授）　武居　文彦（東京大学教授）

北沢　宏一（東京大学教授）

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

正畠　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

吉原經太郎（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

簇野　昌弘（東北大教授）　薬師　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）　冨宅喜代一（分子研助教授）

大峯　　巌（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

巽　　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）

52「実験室及び天分サブミリ波分光」1995. 3. 14〜3. 16

齋藤　修二（分子研教授）

53「スピン化学の新展開」1995. 10. 19〜10. 21

林　　久治（理化学研究所主任研究員）　廣田　　襄（京都大教授）　佐藤　博保（分子研教授）

54「水素原子移動反応の動力学的研究」1996. 1. 23〜1. 25

閑　　春夫（群馬大教授）

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

千鯛　眞信（東京大教授）　渡辺　芳人（分子研教授）

開催一覧2

回	課題，開催日，提案代表者	外国人招待研究者
56	「凝縮相中の量子動力学；化学系への応用」 1996. 9. 27～9. 29 Coalson, Rob D.（ﾋﾟｯﾂﾊﾞｰｸﾞ大学） 谷村　吉隆（分子研）	Chergui, Majed（ローザンヌ大学　教授）（スイス） Onuchic, Jose Nelson（カリフォルニア大学　教授）（アメリカ） Coalson, Rob D.（ピッツバーグ大学　教授）（アメリカ） Hupp, Joseph T.（ノースウェスタン大学　準教授）（アメリカ） Klug, David R.（ロイヤルカレッジ　講師）（イギリス） Yan, Yijing（香港科学技術大学　準教授）（香港） Schere, Nobert（ペンシルヴァニア大学　準教授）（アメリカ） Cherniyal, Vladimir（ロチェスター大学　教授）（アメリカ）
57	「呼吸鎖末端化酵素の反応場と作動機構」 1996. 10. 28～10. 30 茂木　立志（東大理） 小倉　尚志（分子研）	Gennis, Robert B.（イリノイ大学　教授）（アメリカ） Saraste, Matti（欧州分子生物学研究所　教授）（ドイツ） Wikstrom, Marten（ヘルシンキ大学　教授）（フィンランド） Einarsdottir, Olof（カリフォルニア大学　教授）（アメリカ） Tolman, William B.（ミネソタ大学　教授）（アメリカ） Millet, Francis（アーカンソー大学　教授）（アメリカ） Ludwig, Bernd（ヨハンウルフガングゲーテ大学　教授）（ドイツ）
58	「分子性伝導体研究の現状と将来の展望」 1997. 3. 7～3. 9 小林　速男（分子研） 薬師　久弥（分子研）	Cassoux, Patrick（フランス国立科学研究庁　主任研究員）（フランス） Geiser, Urs（アルゴンヌ国立研究所　主任研究員）（アメリカ） Schweitzer, Dieter（シュツットガルト大学　教授）（ドイツ） Kurmoo, M.（ストラスブール大学　教授）（フランス） Coronado, Eugenio（バレンシア大学　教授）（スペイン） Henriques, Rui T.（先端技術研究所　教授）（ポルトガル） Underhill, Allan E.（ウェールズ大学　教授）（イギリス） Zhu, Daoben（中国科学アカデミー化学研究所　所長）（中国） Yagubskii, E. B.（ロシア科学アカデミー物理化学研究所　教授）（ロシア）

（第55回までの外国人招待研究者は，これまでの「分子研リポート」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 1996 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）
化学合成した金属酵素モデルによる酵素分子変換系の研究	成田 吉徳 （九大教授）

(2) 協力研究

「トルエン誘導体のメチル基内部回転運動の解析と電子状態効果の理論的解明」 始め 92 件

(3) 研究会

研 究 会 名	提案代表者
大気化学反応の素過程	川崎 昌博 （北大教授）
励起子研究…今日の到達点とこれからの課題	林 哲介 （京大教授）
若手分子科学研究者のための物理化学研究会	小谷野猪之助 （姫路工大教授）
有機機能材料の基盤となる新規パイ電子系の分子設計と創出	大坪 徹夫 （広島大教授）
ポリマー・生体系の分子科学	岡本 祐幸 （分子研助教授）
生体分子の安定性と機能に及ぼす水とイオンの役割	平田 文男 （分子研教授）
自己秩序形成系研究の新展開	花崎 一郎 （分子研教授）
クラスターおよび関連物質の分子科学	薬師 久弥 （分子研教授）
放射光とレーザーを併用した分子科学の展望	見附孝一郎 （分子研助教授）
分子動力学ワークショップ	鈴木 俊法 （分子研助教授）

(4) 施設利用

① 機器利用

「希土類マンガナイトの相転移とその物性の研究」　始め 52 件

② 計算機利用

「蛋白質立体構造の変化と運動」　始め 170 件

(5) UVSOR 課題研究

研　究　課　題	提案代表者
BL2B2 用射入分光器の開発建設	見附孝一郎　（分子研助教授）
放射光励起光化学反応用高効率分光器の開発	宇理須恒雄　（分子研教授）
BL7B の整備と新分光システムの性能試験	中川　英之　（福井大教授）

(6) UVSOR 協力研究及び招へい協力研究

「極端紫外光によるニトリル化合物の光解離過程の研究」　始め 25 件

(7) UVSOR 施設利用

「層状イオン結晶の励起子緩和機構」　始め 147 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～'89		'90		'91		'92		'93		'94		'95		'96		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	60	470	2	18	2	20	4	33	1	8	1	6	2	16	2	18	人数：登録人数
協力研究	1,786	1,786	112	112	113	113	127	173	127	176	128	182	95	131	92	121	
招へい協力研究	175	175	3	3	2	2	2	2	3	3	0	0	1	1	0	0	
所長招へい	633	633	161	161	175	175	141	141	105	105	129	129	148	148	62	62	
研究会	146	2,033	10	109	10	93	8	113	9	122	9	143	11	163	10	170	人数：旅費支給者
施設利用 I	803	1,337	77	202	88	211	85	227	66	206	45	129	56	173	51	163	件数：許可件数 人数：許可人数
施設利用 II	1,577	4,375	210	590	213	620	215	657	180	586	187	602	181	583	169	563	
合計	5,180	10,809	575	1,195	603	1,234	582	1,346	491	1,206	499	1,191	494	1,215	386	1,097	
経費	193,008		19,774		20,386		20,879		19,709		21,492		20,054		—		千円

('96 年度の数値は，1997.2.1 現在)

分子科学研究所 UVSOR 共同研究実施一覧

年度 / 項目	'85～'89		'90		'91		'92		'93		'94		'95		'96		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	17	136	2	38	3	37	2	21	2	30	2	28	4	49	3	38	人数：登録人数
協力研究	75	147	28	88	27	102	39	169	36	151	28	123	23	91	24	95	
招へい協力研究	33	33	4	4	5	5	7	7	8	8	9	9	4	4	1	1	
研究会	15	159	2	33	2	39	2	29	2	34	2	51	2	41	1	23	人数：旅費支給者
施設利用	363	1,743	105	521	111	570	109	614	132	714	130	655	136	632	147	671	件数：許可件数 人数：許可人数
合計	503	2,218	141	684	148	753	159	840	180	937	171	866	169	817	176	828	
経費	48,214		14,410		12,783		12,670		12,729		12,729		13,120		—		千円

('96 年度の数値は，1997.2.1 現在)

2-10　国際交流と国際共同研究

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）

	長期滞在者			短期滞在者		
年度	文部省外国人招へい研究者	日本学術振興会外国人招へい研究者	特別協力研究者	研究会	訪問者	合計
86	14	6	19	57	66	162
87	14	5	28	60	80	187
88	13	9	23	67	93	205
89	17	16	18	73	50	174
90	16	13	22	52	50	153
91	17	21	49	159	82	328
92	17	17	56	112	47	249
93	16	14	46	78	29	183
94	15	12	47	86	17	177
95	16	19	23	83	30	171
合計	155	132	331	827	544	1,989

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	48	13	10	6	7	34	5	39	162
87	47	27	15	7	18	27	3	43	187
88	46	21	16	21	20	31	4	46	205
89	38	36	12	15	9	13	4	47	174
90	41	14	8	10	8	13	8	51	153
91	108	24	23	7	34	29	36	67	328
92	48	28	6	6	49	45	20	47	249
93	39	16	16	3	26	17	24	42	183
94	40	16	15	5	24	20	23	34	177
95	34	14	17	9	17	8	9	63	171
合計	489	209	138	89	212	237	136	479	1,989

2-10-2 国際共同研究

1996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，広く国内関係研究者の意見を反映させるために，所長の下に所外から委員11人と所内委員2人からなる研究計画委員会を設置し，研究者の長期派遣，日米情報交換セミナー，グループ共同研究などの企画や応募された企画の審議を行っている。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，評価のために日米間でステアリング・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.において第7回目の会議を開いた。さらに，9月には全米科学財団の担当者R. J. Soderquist氏が来所し今後の事業の進め方を打ち合わせた。

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	1982. 1～1996. 3		7回開催	
研究計画委員会及び幹事会	1979. 6～1996. 3		62回開催	
研究者派遣	1979～1995年度	中・長期派遣	108名	
	1996年度	〃	5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年度		−	
	1996年度		2回	
	1996年11月	「光感応物質の新展開―基礎と応用―」		カリフォルニア
	1996年11月	「光合成分子生物学の新展開」		アリゾナ

(2) 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，日韓合同シンポジウムと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。

合同シンポジウムは，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2年毎に日韓交互で開催しており，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，1997年1月には第7回シンポジウム「Molecular Spectroscopy of Clusters and Related Compounds」を分子科学研究所において開催し，韓国から15名，日本から20名が参加した。

なお，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名の招へいを実施した。

(3) 日中共同研究

日中共同研究は，1973年以来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，合同シンポジウムと研究者交流を実施している。特に，有機固体化学では1983年に第1回の合同シンポジウム（北京）以来3年ごとに合同シンポジウムを開催してきた。1995年10月の第5回日中シンポジウム（杭州）では日本から20名が参加したが，ひきつづいて1998年に第6回のシンポジウムを分子科学研究所で開催することを準備している。

(4) 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。

1996年以降1997年1月現在で，13名がロチェスター大学において共同研究の実施・成果の討議を行い，一方1996年10月より約2か月間，ロチェスター大学から大学院生1名が分子科学研究所において共同研究を行った。

(5) 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名が約3か月間分子科学研究所において共同実験を行った。本年度は，2名をプラハに派遣し，1月には4名の研究者が来所して共同研究を実施した。またこの共同研究を核として他の基金による研究交流も始まり，2年間で研究は大いに促進された。

(6) 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」を実施している。共同研究の内容は，(1)短期若し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。初年度から研究交流が深まり，人物交流が極めて盛んとなり成果が挙がりつつある。特に物性論では「炭素」，反応論では「溶液中における電子移動」の研究を中心に発展してきている。来年度は，研究計画・まとめと評価のための研究会を開催する予定である。

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条第2項，大学共同利用機関組織運営規則第2条第3項）。この制度に基づいた特別研究学生（旧称：大学院受託学生）の受入状況は以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	96
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			1
東京工業大学	4	9	1	1					2	3	4
お茶の水女子大学	1	3					1	1			
横浜国立大学	1										
金沢大学		3									3
新潟大学		2					1	1			
福井大学	2									1	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	3
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	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	1
岡山大学									7	2	1
広島大学		4	6	5		1	1	1	7	6	1
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			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										1
東邦大学											1
北里大学											1
三重大学											2
計	55	115	31	32	24	22	20	27	30	19	25

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修了者を誕生させた。

その専攻の概要は次のとおりである。

構造分子科学専攻

詳細な構造解析から導かれる分子及び分子集合体の実像から物質の静的・動的性質を明らかにすることを目的として教育・研究を一体的に行う。従来の分光学的及び理論的な種々の構造解析法に加え，新しい動的構造の検出法や解析法を用いる総合的構造分子科学の教育・研究指導を積極的に推進する。

機能分子科学専攻

物質の持つ多種多様な機能に関して，主として原子・分子のレベルでその発現機構を明らかにし，さらに分子及び分子集合体の新しい機能の設計，創製を行うことを目的として教育・研究を一体的に行う。新規な機能測定法や理論的解析法の開発を含む機能分子科学の教育・研究指導を積極的に推進する。

大学開設以来の分子科学2専攻の入学者数，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（1996年度）　　単位：人

専　攻	教　授	助教授	助　手
構造分子科学専攻	7	10	13
機能分子科学専攻	7	6	9
計	14	16	22

在籍学生数（1997年1月現在）　　単位：人

入学年度専攻	1992年度	93年度	94年度	95年度	96年度	計	定　員
構造分子科学専攻	1		6	3	10	20	6
機能分子科学専攻		2	3	5	8	18	6

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	96年度（9月修了者まで）	計
構造分子科学専攻	1	3	5	3	14	3 (3)	29 (3)
機能分子科学専攻	5	5	4 (1)	8 (1)	4	3	29 (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	95年度	96年度
構造分子科学専攻	3	6	5	7	12	7	4	10
機能分子科学専攻	9	7	6	6 (1)	9	4 (1)	6	8

（　）内は研究生で外数

外国人留学生数（国別，入学者数）　　単位：人

	構造分子科学専攻			機能分子科学専攻		
	1989-94年度	95年度	96年度	1989-94年度	95年度	96年度
中　国	4		2	3 (1)		
フランス				1		
ロシア				1 (1)		
ﾊﾞﾝｸﾞﾗﾃﾞｨｯｼｭ	1		1			
インド			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
	'89～'91	'92～'95	'96年度	'89～'91	'92～'95	'96年度	計
北海道大学				1			1
室蘭工業大学				1			1
東北大学				1			1
石巻専修大学			1				1
筑波大学			1	1			2
山形大学					2		2
東邦大学						1	1
千葉大学	1	1					2
東京大学	2	2		1	3		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
国際基督教大学						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
北陸先端科学技術大学院大学			2				2
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		3	1	3	3	3	13
京都工芸繊維大学					1		1
立命館大学				1		1	2
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	1	3
岡山理科大学						1	1
山口大学				1			1
広島大学					1		1
九州大学		1			2		3
熊本大学		1	1				2
*その他	1	5	4	3	3		16

* 外国の大学等

2-12 定員と財政

2-12-1 定員

1996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)	7	13 (2)		13 (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		2 (1)	2 (1)	6	10 (2)		10 (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						46	46
合計	1	17 (9)	23 (10)	55	96 (19)	46	142 (19)

（ ）内は客員数で外数である。

2-12-2 財政

（単位：千円）

科目等＼年度	1991年度	1992年度	1993年度	1994年度	1995年度
人件費	1,061,131	1,111,105	1,068,408	1,291,019	1,221,676
運営費，設備費	2,332,729	2,451,962	2,796,887	2,745,703	3,791,336
施設整備費	0	231,026	412,091	31,078	251,772
合計	3,393,860	3,794,093	4,277,386	4,067,800	5,264,784

＊ 機構共通経費が按分として含まれている。

科学研究費補助金（国際学術研究を除く）

区分	1991年度	1992年度	1993年度	1994年度	1995年度	1996年度
件数（件）	52	62	42	63	64	58
金額（千円）	191,620	200,700	180,360	252,630	124,077	151,540

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211種（和70，洋141），単行本11,610冊（和4,102，洋7,508）を所蔵している。

情報図書館では専用電子計算機を利用して，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。

2-13-4　岡崎コンファレンスセンター

岡崎コンファレンスセンターは，学術研究における国内外の交流に開かれた機構の場として，国内外の学術会議はもとより研究教育活動にかかる各種行事に利用できる機構の共通施設として平成9年2月に竣工された。センターは，共同利用研究者の宿泊施設である三島ロッジに隣接して建てられている。

機構内の公募によって「岡崎コンファレンスセンター」と命名された建物は，延べ床面積2,863m^2，鉄筋コンクリート造り2階建てで，大型スクリーン及び最新のAV機器等を備えた250人が参加可能な大会議室，150人の中会議室，100人の小会議室のほか，研究成果の展示等に利用できるホワイエなどが設けられている。中会議室，小会議室は，会議等の目的に応じて2分割して使用することもできる。

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。分子科学研究所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	シンクロトロン放射とは	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	吉原經太郎　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
1996. 6. 28	分子を積み上げて超伝導体を作る話	小林　速男　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
1995 年度	4	122

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) 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

d) 不安定な分子やクラスターおよび反応中間体の構造

e) 簡単な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

f) 遷移金属を含む簡単な分子の電子構造

g) 希ガス原子クラスターとそのイオンの構造，分光，動力学

h) 対称性の破れが現れる分子系の構造と分光学

A-3) 研究活動の概略と成果

a) 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２電子４中心積分の高速計算を可能にする方法を開発した。電子相関を含む波動関数とエネルギー計算に適用するアルゴリズムの研究を進めた。また，２乗可積分関数を用いた光電子脱離断面積の計算方法を開発し，負イオンクラスター$Cl^-(H_2O)_n$系への応用計算を進めた。負イオンの電子状態には電子相関が重要なので，配置間相互作用法と結合させプログラムを開発している。

b) モンテカルロ MC 法と非経験的分子軌道 MO 法と結合させて，M^+ (M = B, Mg)と$(H_2O)_n$のクラスターの反応を追跡した．Mg^+イオンの場合，n=6 で水素脱離反応 $MOH^+(H_2O)_5 + H$ が発熱反応になることが以前の計算で明らかにしてあったが，250K でのモンテカルロ計算では反応は進行しなかった。一方，B^+では n=2, 3 において 300K のモンテカルロでクラスター内反応や水素脱離反応が進行することを予言することができた。MC と MO を結合する方法は適用限界を適切に判断すると様々な応用が可能であることが明らかになった。

フェノールと水のクラスター，水だけのクラスターに加えて，７アザインドールとその２量体の水との錯体ついて，構造と赤外吸収スペクトルを計算し，振動スペクトルの帰属を行い，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) Al_nNa, Al_nS, Si_nC_m, Si_nNa, Si_nF_m, C_nN の中性，陽イオン，陰イオンのクラスターに加え，Si_nN_m, C_nP, C_nB についても研究を進めた。特に C_n 鎖の末端にヘテロ原子が結合したときの C_n 鎖骨格の構造と安定性について一般則を見い

だした。また，Si クラスターの反応のモデルとして Si_4 を取り上げ，H_2 および NO との反応過程と生成物を調べた。

d) 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索した。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。また，NO2 と NO2+の基底・励起状態のポテンシャル曲面の詳細を改めて計算し光電子スペクトルの再帰属を行った。アンモニア分子の 2 量体(NH3)2 の励起状態と n 量体陽イオン(NH3)n+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。特に，クラスター内陽子移動が進行せずに(NH3)n+型の安定な錯体に留まっている条件を明らかにし，その構造の同定のための振動スペクトルの予測計算をおこなった。

e) CS2 分子に加え，HNO, HOCl, NCS, HCCS, HCCP など簡単であるが，基底および励起状態が複雑な電子構造をしている分子のポテンシャルエネルギー曲面を精度高く計算し，加えてそのポテンシャルエネルギー曲面上の核の運動の波動関数を求め，振電相互作用を定量的に調べた。2 変数および 3 変数のシュレジンガー方程式を数値的に解くプログラムを実用化し，また百瀬 (京大) が開発した多原子分子のフランク・コンドン因子を調和振動子近似の範囲内で正確に計算するプログラムを広く利用されやすいように改善し公開した。

f) M を前期遷移金属とする MH と MH2 分子の電子構造を系統的に調べた。CuF と CuH のポテンシャル曲線と双極子モメント曲線をいろいろなレベルの近似多電子波動関数によって計算し，特に，通常ほとんど同じ程度の近似精度を持つ QCISD(T)と CCSD(T)と言われる方法がこれらの分子で異なる振る舞いをする事を明らかにし，QCISD 法の利用について近似の限界を明らかにした。Fe と NO の反応も追跡している。

g) 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。光解離過程の動力学計算を実行し解離生成物の光エネルギー依存性を調べた。

h) $HOOH^+$イオンの調和振動数と赤外吸収強度を分子軌道法の各種の近似レベルで計算し，OH の反対称振動の振動数と吸収強度が近似レベルに著しく依存することを例示し，それが OO 結合距離の変化と強く結合していることを示した。OO 距離が伸びると陽電荷が一つの OH に局在するようになり，分子の対称性が壊れる。このような現象は A_2^+や A_2^-に特徴的な現象であり，実際に対称性が壊れている場合と近似関数に依存する見かけの場合とがあり，その両者を理論的にも実験的にも区別することは困難である。

B-1) 学術論文

F. R. ORNELLAS and S. IWATA, "Structures and energetics of new nitrogen and silicon molecules: an ab initio studies of Si_2N_2.", *J. Phys. Chem.*, **100,** 16155-16161 (1996).

T. ASADA and S. IWATA, "Hybrid procedure of ab initio molecular orbital calculation and Monte Carlo simulation for studying the intracluster reactions:Applications to $Mg^+(H_2O)_n$ (n=1 - 4)", *Chem. Phys. Letters*, **260,** 1-6 (1996).

H. KAWAMATA, Y. NEGISHI, R. KISHI, S. IWATA, NAKAJIMA and K. KAYA, "Photoelectron spectroscopy of silicon-fluorine binary cluster anions (Si_nF_m) , **105,** 5369-5378 (1996).

F. R. ORNELLAS and S. IWATA, "Ab initio studies of silicon and nitrogen clusters: Cyclic or linear S_2N", *J. Phys. Chem.*, **100,** 10919-10927 (1996).

R. KISHI, A. NAKAJIMA, S. IWATA and K.KAYA, Electron-correlation effects on geometrical and electronic structures of SiNa clusters", *Surface Review and Letters*, **3**, 365-369 (1996).

A. NAKAJIMA, T. TAGUWA, N. NAKAO, K. HOSHINO, S. IWATA and K. KAYA, "Photoelectron spectroscopy of binary metal cluster anion containung sulfur atom", *Surface Review and Letters*, **3**, 417-421 (1996).

A. NAKAJIMA, T. TAGAWA, N. NAKANO, R. KISHI, S. IWATA and K. KAYA, "Photoelectron spectroscopy of silicon-carbon cluster anions", *Surface Review and Letters*, **3**, 411-415 (1996).

H. WATANABE and S. IWATA, "Theoretical studies of geometric structures of phenol-water clusters and their infra-red absorption spectra in the O-H stretching region", *J. Chem. Phys.*, **105**, 420-431 (1996).

S. TEN-NO and S. IWATA, "Multi-configuration self-consitent field procedure employing linear combination of atomic-electron distributions", *J. Chem. Phys.*, **105**, 3604-3609 (1996).

C-G. ZHAN and S. IWATA, "Ab initio studies on the structures, vertical electron detachment energies and fragmentation energies of C_nN^- clusters", *J. Chem. Phys.*, **104**, 9058-9064 (1996).

R. KISHI, M. GOMEI, A. NAKAJIMA, S. IWATA and K. KAYA, "Theoretical studies of carbon doped small silicon clusters: Electron affinities of Si_nC (n=2 - 5), *J. Chem. Phys.*, **104**, 8593-8604 (1996).

H. WATANABE and S. IWATA, "Theoretical studies of boron - water cluster ions $B^+(H_2O)_n$ and aluminium - water clusters $Al^+(H_2O)_n$:Isomers and intra-cluster reactions", *J. Phys. Chem.*, **100**, 3377-3388 (1996).

Y. SONODA and S. IWATA, "Theoretical studies of the chemical processes of producing methylamine and methanol in the interstellar space", *Bull. Chem. Soc. Japan*, **69**, 575 - 579 (1996).

T. S. FUJII and S. IWATA, "Theoretical studies of the ground and low-lying excited electronic states of the early transition metal dihydrides with state averaged MC SCF method, *Chem. Phys. Letters*,, **251**, 150-156 (1996).

C-G. ZHAN and S. IWATA, "Ab initio studies on structures of the hexa-coordinate phosphorus intermediate for the phosphoryl ester exchange and N→O migration reactions of dimethyloxyphosphoryl-threonine", *Chem. Phys. Letters*, **247** 401-407 (1995).

B-3) 総説，著書

R. KISHI, A. NAKAJIMA, S. IWATAand K. KAYA, "Electronic and geometric structures of silicon-M binary clusters (M= C and Na)" In "Structures and Dynamics of Clusters", ed. by T.Kondow, K.Kaya, A.Terasaki, 209-218 (1996).

S. IWATA and H. WATANABE, "Theoretical studies of molecular spectroscopies of some small clusters" In "Structures and Dynamics of Clusters", Ed. by T.Kondow, K.Kaya, A.Terasaki, 607-612 (1996).

B-4) 招待講演

S. IWATA, "Hybrid procedure of ab initio MO and Monte Carlo simulation: Application to the intracluste reactions.", The fifth Eurasia Conference on Chemical Science, Guangzhou, China, Dec. 1996.

S. IWATA, "Spectroscopies, reactions and dynamics of molecular clusters.", The 5th Current Trends in Computational Chemistry, Jackson State Univ., USA, Nov. 1996.

S. IWATA, "Theoretical studies of intracluster reactions", Gordon Conference on Molecular and Ionic Clusters, Italy, May, 1996.

B-6) 学会および社会的活動

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，学術振興会等の役員

学術振興会特別研究員等審査会専門委員：1994-1995

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：1995-1995

東京大学物性研究所運営協議会委員：1996-1997

学会誌編集委員

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

科学研究費の研究代表者，班長等

重点領域研究「化学反応理論」領域代表者：1993-1996

学術振興会産学協同研究支援事業「化学反応・分子設計の計算化学ネットワークの構築」世話役：1995-1995

B-7) 他大学での講義

神戸大学理学部 1997 年 1 月 22 日－24 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・分光学の理論的研究を進めていくために，既存の方法を駆使すると同時に，新しい方法も開発する。実験的に研究が進められている広い範囲の大きさのクラスターを理論的にも取り扱っていく。小さい側から溶液化学の研究を進めていくという見方もできる。

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

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

岡　本　祐　幸（助教授）

A-1) 専門領域：生物化学物理，計算科学

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

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，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。最近では，新たに焼き戻し法と 1/k サンプル法をもこの分野に導入した。また，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が，現在 RISM などの強力な手法とモンテカルロシミュレーションとの合体を進めているところである。

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とき，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。我々はこの方法を 2 階の差分方程式に基づく手法として一般化し，特にシュレーディンガー方程式に基づいた対角化法も開発した。そして，最大及び最小固有値の近傍ばかりでなく，任意の区間で固有値を求められるように手法を改良した。

B-1) 学術論文

A. MITSUTAKE, T. IITAKA and Y. OKAMOTO, "A Method for Calculating the Eigenvalues of Large Hermitian Matrices by Second-Order Recursion Formula", *Comp. Phys. Comm.*. **96**, 217 (1996).

U.H.E. HANSMANN, Y. OKAMOTO and F. EISENMENGER, "Molecular Dynamics, Langevin, and Hybrid Monte Carlo Simulations in Multicanonical Ensemble", *Chem. Phys. Lett.* **259**, 321 (1996).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

U.H.E. HANSMANN, "On the Protein Folding Problem", *Nucl. Phys.* B (Proc. Suppl.) **47**, 188 (1996).

U.H.E. HANSMANN and Y. OKAMOTO, "Thermodynamics of Helix-Coil Transitions in Amino-Acid Homopolymers Studied by Multicanonical Algorithms", *Nucl. Phys.* B (Proc. Suppl.) **47**, 842 (1996).

B-3) 総説，著書

Y. OKAMOTO, "Predicting Protein Tertiary Structures from the First Principles", *Association of Asia Pacific Physical Societies Bulletin,* Vol.**5**, No. 3&4, December , 4 (1995).

B-4) 招待講演

岡本祐幸，「新モンテカルロ法による蛋白質の立体構造予測」，日本生物物理学会年会，札幌，1995 年 9 月。

U.H.E. HANSMANN, "On the Protein Folding Problem", LATTICE '95, Melbourne, July 11-15, 1995.

Y. OKAMOTO and U.H.E. HANSMANN, "Statistical Mechanics of Helix-Coil Transition Studied by Multicanonical Algorithms", The Third International Conference on Computational Physics, Chung-Li, Taiwan, November 13-17, 1995.

B-7) 他大学での講義

奈良女子大学理学部，「物理数学Ⅰ」（1995 年 4 月－1996 年 3 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。我々がこの分野に導入した，マルチカノニカル法と焼き戻し法と 1/k サンプル法は拡張アンサンブル法と総称できるが，これらの手法では確率重みを決定するのが簡単ではないので，これを簡略化する必要がある。また，溶媒の効果については，計算時間をいかに短縮するかが重要である。

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。

首　藤　啓（助手）*)

A-1) 専門領域：非線形動力学

A-2) 研究課題

a) 非可積分系のトンネル現象に関する研究

b) 非可積分系の複素半古典論および複素古典力学に関する研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 非可積分系のトンネル現象に関する研究：カオスが存在する状況での量子トンネル現象を複素半古典論を用いることにより解析し，非可積分系において初めて現われる，新しいクラスの量子トンネル現象，‘カオス的トンネリング’を提唱した。

b) 非可積分系の複素半古典論および複素古典力学に関する研究：複素古典経路間に存在する木構造および指数関数的最大優越の原理をもとに，非可積分系でのストークス現象の処理法を考案した。複素半古典論に寄与するトンネル経路とジュリア集合の関係を発見した。

B-1) 学術論文

A. SHUDO and K.S. IKEDA, "Stokes Phenomenon in Chaotic Systems: Pruning Trees of Complex Paths with Principle of Exponential Dominance", *Phys. Rev. Lett.* **76,** 4151 (1996).

B-3) 総説，著書

首藤啓，池田研介，「カオス系の量子トンネリング」『パリティ』1995 年 11 月号 p.30.

B-4)招待講演

A. SHUDO, "Complex Classical Trajectories and Chaotic Tunneling", Emile Borel Semester *Chaos and Quantization*, Paris, January, 1996.

C) 研究活動の課題と展望

非可積分な系の純量子力学的効果（トンネル・局在・回折）の本質を，（複素）半古典論を通して抽出すると共に，それらが現実の原子分子のダイナミクスでいかに顕在化するかを探る。異なる内部自由度間のエネルギー交換に注目することにより，力学系の摂動論的観点から，溶液の遅い緩和過程に対する統一的理解を試みる。

*) 1996 年 4 月 1 日関西学院大学理学部助教授

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) 非断熱遷移の理論

c) 超励起分子の特性と動力学

d) 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取扱う超球座標法を用いて反応機構の解明を進めている。$O(^3P)$+HCl 系で反応分子の回転励起が反応に大きな影響を及ぼす事，生成物の回転状態分布に特異性がある事を見出した。新たに，超球楕円座標系を導入し計算の高効率化による反応機構解明の促進をも目指している。また，4原子系(H_2+OH, N_2+OH)への挑戦も行っている。

b) 非断熱遷移の理論：Landau-Zener-Stueckelberg 型の一次元非断熱遷移理論を完成した成果に基づき，この理論を用いて一次元多準位問題の解析を行った。 Landau-Zener 型については理論の有効性を確認した。非断熱トンネル型について更に解析を進めている。指数関数ポテンシャルのあるモデルに対する量子力学的厳密解析解と有効半古典近似解の導出に成功した。一次元非断熱遷移の統一理論の完成を目指している。また，我々の理論は時間依存の問題にも幅広く適用する事が出来るので，その研究をも進めている。

c) 超励起分子の特性と動力学：2原子分子の超励起状態の特質と動力学の解明を統一的に進める事の出来る手法を開発した。CO 分子を例として解析した。

d) 分子スイッチ機構の提唱：非断熱トンネルにおける完全反射現象を利用した新しい分子スイッチを提唱している。基本となる半古典論的理論を構築するとともに，不純物導入による完全反射バンドあるいはエネルギーフィルターの構成，及びそれらを利用した効率の良い波束のスイッチングを実証した。また，連続状態中束縛状態の存在をも実証した。

B-1)学術論文

K. TSUDA, K. MORIBAYASHI and H. NAKAMURA, "Quantum Dynamics of the Mu+H_2(HD, D_2) and H+MuH(MuD) Reactions", *J. Chem. Phys.* **103** (13), 5512-5521 (1995).

K. MORIBAYASHI and H. NAKAMURA, "Accurate Quantum Dynamics of the Light Atom Transfer Chemical Reaction O+HCl ¨OH+Cl", *J. Phys. Chem.* **99** (42), 15410-15420 (1995).

F. O. GOODMAN and H. NAKAMURA, "On the Multiple Peaks in Charge-Transfer Probability vs. Laser Frequency in the Theory of Laser Assisted Surface Ion Neutralization", *Prog. in Surface Science* **50**, 389-405 (1995).

M. HIYAMA and H. NAKAMURA, "Superexcited States of CO Near the First Ionization Threshold", *Chem. Phys. Lett.* **248**, 316-320 (1996).

C. ZHU, E. E. NIKITIN and H. NAKAMURA, "Semiclassical Analysis of Resonance States Induced by a Conical Intersection", *J. Chem. Phys.* **104** (18), 7059-7067 (1996).

V. I. OSHEROV and H. NAKAMURA, "Quantum Mechanically Exact Analytical Solutions of a Two-State Exponential Model", *J. Chem. Phys.* **105** (7), 2770-2779 (1996).

C. ZHU and H. NAKAMURA, "Two-by-two diabatic approach for multi-channel curve crossing problems", *Chem. Phys Lett.*. **258**, 342-347 (1996).

B-3) 総説，著書

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.), (1996), Chap.12.

H. NAKAMURA and C. ZHU, "Landau, Zener, Stueckelberg, and all that now completely solved", *Comments on Atomic and Molecular Physics.* **32**, pp.249-266 (1996).

M. HIYAMA and H. NAKAMURA, "Characteristic and Dynamics of Superexcited States of CO", In "Dissociative Recombination: Theory, Experimant and Application", edited by D. Zaifman, J. B. A. Mitchell, B. Rowe and D. Schwalm (World Scientific, 1996), pp.212-215.

H. NAKAMURA, "Theory for Nonadiabatic Transitions Governing Chemical Phenomena — Complete Solutions in Sixty Years", Chemistry Today No.305, pp.36-42 (1996) [in Japanese].

H. NAKAMURA, "New Developments of the Theory of Nonadiabatic Transitions", Butsuri (in press, 1996) [in Japanese].

B-4)招待講演

F. O. GOODMAN and H. NAKAMURA, "On the multiple peaks in charge-transfer probability versus laser frequency in the theory of laser assisted surface ion neutralization", 15-th Canadian Conference on Surface Science, Special Sympojium Celebrating 25 years of Progress in Surface Science (Waterloo, Canada, 1995).

M. HIYAMA and H. NAKAMURA, "Characteristics and dynamics of superexcited states of CO", The 3rd International Sympojium on Dissociative Recombination: Theory, Experiment and Application (Dead Sea, Israel, 1995).

H. NAKAMURA, "Quantum dynamics of the triatomic reaction systems: $O(^3P)$+HCl, Mu+H_2(HD)+D_2) and H+MuH(MuD)", International Conference on Theoretical Reaction Dynamics (Nottingham, U. K., 1995).

H. NAKAMURA and M. HIYAMA, "Characteristics and dynamics of superexcited states of molecules", 1995 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, Symposium on "Structure, Dynamics and Cntrol of Excited States", (Honolulu, USA. Dec. 1995).

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）

学会の組機委員

ICPEAC（原子衝突物理学国際会議）第 9 回（1979）組織委経理担当

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

ICPEAC（第 21 回）準備委員会委員，運営委員会委員

文部省，学術振興会等の役員

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～）

科学研究費の研究代表者，班長等

重点領域研究班長（1992～1995）

B-7) 他大学での講義，客員教授

集中講義

総合研究大学院大学，「湘南レクチャー」，1995 年 8 月

名古屋大学理学部，1995 年 11 月

客員教授

ウォータールー大学応用数学科，1994 年 7 月～1997 年 6 月

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。化学反応の量子動力学に対する新手法の開発と機構解明の促進，一次元非断熱遷移の統一的理論の完成，多次元トンネル理論の開発，超励起状態の統一的理解への挑戦，及び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等を一層推進していく。

谷　村　吉　隆（助教授）

A-1) 専門領域：化学物理理論，非平衡統計力学

A-2) 研究課題

a) 非線形高次光学過程における分子の振動モードの非調和振動子性の研究

b) 多準位量子フォッカー・プランク方程式によるモース・ポテンシャル分子系の超高速分光

c) スピングラス熱浴と相互作用する二準位分子系の均一，不均一広がりと単分子分光

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) 非線形高次光学過程における分子の振動モードの非調和振動子性の研究：遠赤外レーザーや非共鳴高次光学過程を用いれば，分子の基底状態や励起状態のポテンシャル面を直接調べる事が可能である。最近，世界各地で行われる様になった非共鳴5次光学過程の実験は，均一，不均一広がり区別するために提案したものであるが，今回の研究で，非調和振動子性の効果についても検討可能となった。今回は，5次に留まらず，さらに（2n+1）次の実験を解析可能な表式を導出し，4次や5次といった非調和振動子性が，7次や9次といった高次光学過程により検出可能な事を示した。また，基底状態だけでなく，励起状態の非調和振動子性を考慮した共鳴高次光学過程の理論も提出した。

b) 多準位量子フォッカー・プランク方程式によるモース・ポテンシャル分子系の超高速分光：4年前に提案した多準位量子力学的フォッカー・プランク方程式は，溶媒効果をガウス・マルコフ熱浴との相互作用で記述し，任意のポテンシャル面や，レーザー相互作用の様な時間依存の相互作用を研究するのに最適な方法である。今回，この定式化に基づいたプログラムを開発し，四準位の配位モース・ポテンシャル系のパンプ・プローブスペクトル等を計算した。計算は非断熱遷移過程がある場合とない場合の二通り行い，非断熱遷移の効果がスペクトルとしてどの様に現れるかについて調べた。

c) スピングラス熱浴と相互作用する二準位分子系の均一，不均一広がりと単分子分光：最近の超高分解能のレーザー技術の進展により，結晶中にドープされた一つ一つの分子を，選択的に検出可能となった。このモデルとして，二準位分子系を二次元スピングラス熱浴に埋め込んだモデルを考案し，熱浴が与えるノイズがフラクタル的である事や，スピングラス系の不均一広がりや均一広がりが蛍光スペクトルにどの様な影響を与えるかについて考察した。

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：k 型の BEDT-TTF の超伝導状態を研究するために，BEDT-TTF

の二量子体及び四量体の電子状態を計算し，トランスファーや励起エネルギーの大きさを計算した。簡単な CI 計算を行い，この系が非常に電子相関が強い系である事を調べた。

B-1) 学術論文

K. OKUMURA and Y. TANIMURA, Unified time-path approach to the generating functional of Brownian oscillator system - the bilinearly corrected Feynman rule for nonequilibrium processes, *Phys. Rev.* **E53,** 214 (1996).

K. OKUMURA and Y. TANIMURA, Unified time-path approach to the effect of anharmonicity on the molecular vibrational spectroscopy in solution, *J. Chem. Phys.* **105,** 7294 (1996).

N. TOMITA, S. TEN-NO and Y. TANIMURA, Ab initio molecular orbital calculations by the resonating Hartree-Fock approach: Superposition of non-orthogonal Slater determinants, *Chem. Phys. Let.* **263,** 687 (1996).

K. OKUMURA and Y. TANIMURA, The (2n+1)th-order off-resonant spectroscopy from the (n+1)th-order anharmonicites for molecular vibrational modes in condensed phase, *J. Chem. Phys.* (1997) in press.

Y. TANIMURA and K. OKUMURA, First-, third-, and fifth-order resonant spectroscopy of anharmonic displaced oscillators system in the condensed phase, *J. Chem. Phys.* (1997) in press.

B-4) 招待講演

Y. TANIMURA, "Effects of Anharmonicity in Femtosecond Pump-Probe Spectroscopy of Molecular System in the Condensed Phase", Rochester-IMS Symposium, Rochester, Feb. 26, 1996.

谷村吉隆, 「Stochastic Liouville 方程式から量子 Fokker-Planc 方程式へ」，第一回久保シンポジュム，金沢 1996 年 3 月 30 日

谷村吉隆, 「多準位量子 Fokker-Planck 方程式による分子のスペクトル解析」，量子確率解析とその周辺，京都，1996 年 10 月 23 日

B-6)学会及び社会的活動

学会の組織委員

第 8 回理論化学シンポジュム　組織委員 1996

第 56 回岡崎コンファレンス　組織委員 1996

学会誌編集委員

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

C) 研究活動の課題と展望

分子の振動モードの周波数そのものが揺動している状態を，系と熱浴が座標の線形で結合しているモデルを拡張し，二次で結びついているモデルを考案し，その応答関数を経路積分を実行する事により求め，その様な揺動がスペクトルに及ぼす影響をしらべる。それに対する 5 次，7 次の高次光学過程のスペクトルを計算し，これら高次の光学過程の実験により，これらの効果を調べる事が可能かどうかを検討する。

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。レーザー光のパルス形を調節する事により化学反応や非断熱遷移過程をコントロール出来るかどうか（オプティカルコントロール）を，溶媒の影響下において調べる。

スピングラス熱浴と相互作用する二準位分子系の研究においては，多数の二準位分子を，スピングラス熱浴に配置した場合の，個々の分子からのフォトン・エコーやパンプ・プローブ等のシグナルを計算し，不均一広がり，均一広がり等の違いがシグナルにどの様に現れるかを調べ，シグナルからドメイン構造等の情報を得る事が，可能かどうかについて検討する。

有機物超伝導体については，4量体まで行った量子化学計算の結果を用い，周期的境界条件を付加したCI計算を行う。その結果をもとに，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。この方法を化学反応に応用するためには原子核座標に関するエネルギーの微分を計算する方法を確立する必要がある。また，電子励起状態の取扱を可能にするためには多電子配置を考慮する必要がある。この二つの点で一般化した RISM-MCSCF 法を開発した。また，その応用例として SN2 反応のポテンシャル曲面を計算した。（京都大学・加藤重樹氏のグループと当グループとの共同研究）

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。我々は以前に一般化ランジェヴァン方程式と 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(SSSV 方程式)。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。SSSV 方程式はオーバーダンプの極限の方程式であり，短時間領域で問題となるメモリを考慮していない。現在，この記憶項を RISM 理論に基づき分子論的に導出する試みを行っている。（京都大学・鄭誠虎氏との共同研究）また，溶媒の粘性と分子内自由度との動的カップリングの問題を評価する基本的な方法論の開発を始めた。（京都大学・宗像豊哲氏との共同研究）

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。これらの方法に基づきエンケファリン（5 残基のポリペプチド）の限られたコンフォーメーションに関する水和自由エネルギーの計算を行った。（京都大学・木下正弘氏，九州工業大学・入佐正幸氏および岡本グループとの共同研究）これまでの研究で RISM 計算の約 100 倍の高速化と数値解のドラスティックな安定化に成功し，マルチカノニカル法による溶液内での蛋白立体構造予測の可能性が出

てきた。

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。この理論に基づき溶質の摂動に対する溶媒の電場揺らぎの非線形的応答を評価する方法を確立した。（京都大学・鄭誠虎氏との共同研究）

B-1) 学術論文

H.L. FRIEDMAN, F. RAINERI, F. HIRATA and B. PERN, "Surrogate Hamiltonian description of solvation dynamics. Site-number density and Polarization charge density formulation,", *J. Stat. Mech.*, **78**, 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, "Molecular theory for the non- Equilibrium Free Energy Profile in Electron Transfer Reaction," *J. Phys. Chem.*, **99**, 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).

F. HIRATA, T. MUNAKATA, F. RAINERI and H.L. FRIEDMAN, "An Interaction-Site Representation of the Dynamic Structure Factor of Liquid and Solvation Dynamics," *J. Mol. Liquids*, **65/66**, 15 (1995).

S. CHONG and F. HIRATA, "Non-linear Effects in the Free Energy Profile of electron transfer reaction: an integral equation approach," *J. Mol. Liquids*, **65/66**, 345 (1995).

M. IRISA, T. TAKAHASHI, F. HIRATA and T. YANAGIDA, "Solvation free energy of protein reproduced by the combination of the extended scaled particle theory and the Poisson-Boltzmann equation," *J. Mol. Liquids*, **65/66**, 381 (1995).

S. CHONG and F. HIRATA, "The free energy profiles for the electron transfer reactions calculated from the integral equation method of liquids," *Molecular Simulation,* **16**, 3 (1996).

M. KAWATA, S. TEN-NO, S. KATO and F. HIRATA, "Solvent Effect on Acidity: A Hybrid approach based on the RISM and Hartree-Fock equation," *J. Phys. Chem.*, **100**, 1111 (1996).

M. KAWATA, S. TEN-NO, S. KATO and F. HIRATA, "Theoretical study of the basicities of methylamines in aqueous solutions: A RISM-SCF calculation of solvation theromodynamics," *Chem. Phys.*, **203**, 53 (1996).

M. KINOSHITA and F. HIRATA, "Application of the reference interaction site model theory to analysis on surface-induced structure of water," *J. Chem. Phys.*, **104**, 8807 (1966).

R. UEOKA, Y. MATSUMOTO, K. GOTO, T. ITO, S. MORI, Y. MATSUMOTO, A. SAKOGUCHI, Y. IHARA and F. HIRATA, "A remarkably enhanced diastereoselectivity for the hydrolysis of dipeptide esters responding to pH and temperature in buffer solutions," *Tetrahedron letters*, **37**, 3461 (1996).

H. SATO, F. HIRATA and S. KATO, "Analytical energy gradient for the reference interaction site model multiconfigurational self-consistent-field method: Application to 1,2-difluoroethylene in aqueous solution," *J. Chem. Phys.*, **105**, 1546 (1996).

S. YOSHIDA, F. HIRATA and T. MUNAKATA, "Shear-induced distortion of intramolecular and intermolecular correlations in liquids: Time-dependent density-functional theory," *Phys. Rev.* **E 54**, 1763 (1996).

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

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.

平田文男，「溶液中のイオンの水和構造と揺らぎ」，重点「少数多体系の化学」合同研究会「水クラスターの化学」，三重県湯の山，1995 年 11 月

平田文男，「固液界面構造の積分方程式理論に基づく研究」，第 6 回北海道大学触媒化学研究センター研究討論会「電極触媒化学と表面化学の接点」，札幌，1996 年 1 月 18, 19

F. HIRATA, "A Theoretical Study for Proton Afinity in Solution," 第 54 回岡崎コンファレンス "Dynamic Studies on Hydrogen Atom Transfer Reaction," 岡崎，1996 年 1 月 23-25

平田文男，「第一原理に基づく蛋白質立体構造予測の展望と戦略（その 2）」，生物物理若手第 36 回夏の学校，1996 年 7 月 21-24，八王寺

平田文男，「水溶液中の弱酸の解離に関する理論的研究」第 6 回有機素反応研究会，1996 年 8 月，箕面市

F. HIRATA, "Solvation Thermodynamics", A Satelite meeting in 14th IUPAC Conference on Chemical Thermodynamics "Energetic Basis of Sructural Biology: Molecular Insight from Thermodynamics Applied to Macromolecules in Water," August, 1996, Keihanna.

平田文男，「溶媒和の平衡・非平衡過程：電子状態から蛋白質まで」，第 19 回溶液化学シンポジウム，1996 年 11 月 7-9，佐賀

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- ）

学会の組織委員

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

Pacifichem '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

分子研研究会「生体高分子の安定性に及ぼす水とイオンの役割」(1996 年 11 月)，組織委員長

The Satellite Meeting of AIRAPT-16 & HPCJ-38 "Structure and Function of Biological Systems under Extreme Conditions: Pressure and Temperature Effects," (August, 1997, Keihanna Science City) 組織委員

第 26 回溶液国際会議（1999 年 7 月，九州），組織委員

文部省，学術振興会等の役員

新技術事業団領域探索プログラム「生体系と水」コーデイネーター

B-7) 他大学での講義

名古屋大学大学院理学研究科，「液体の積分方程式理論」（1995 年 12 月）

京都大学大学院薬学研究科，「生体高分子と水」（1995 年 11, 12 月）

九州大学大学院工学研究科，「分子性液体の統計力学と化学過程」（1996 年 5 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) 溶媒和のダイナミックス。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。

*)　1995 年 10 月 16 日着任

米 満 賢 治（助教授）*)

A-1) 専門領域：物性理論

A-2) 研究課題

a) 1次元電子格子系のスケーリング

b) $(R_1R_2\text{-DCNQI})_2M$ 塩の金属絶縁体転移

c)磁場下の超伝導体の束縛状態と準粒子バンド

d) 2層銅酸化物の擬スピンギャップ異常

e) スピン梯子系の磁気的励起と応答関数

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 1次元電子格子系のスケーリング：1次元電子系において，金属絶縁体転移の近傍のスピンギャップ生成は格子との結合のしかたによって大きく異なる。エネルギースケールを徐々に小さくしたときのスピンと電荷の干渉を追うことによって，電子密度に依存したスピンギャップ相の起源を明らかにした。

b) $(R_1R_2\text{-DCNQI})_2M$ 塩の金属絶縁体転移：$(R_1R_2\text{-DCNQI})_2M$ は，M=Ag のときに電子帯充填率が 1/4 のバンドを，M=Cu のときにそれが 1/3 と 1/6 の複数のバンドを持つと考えられている。光電子分光の実験から金属相では朝永ラティンジャー液体が示唆され，低温では格子変形をともなうモット絶縁体に転移している。繰込み群によりこれらの相転移を議論し，M=Ag のとき，1次元性がよい $R_1=R_2=Me$ ではスピンパイエルス状態が，3次元性が無視できない $R_1=R_2=I$ では反強磁性状態が基底状態になることとそれぞれの抵抗の温度依存性を定性的に再現できた。M=Cu のとき，$4k_F$ の格子振動との結合や d 軌道の混成による強相関のため，周期3の電荷密度波とモット絶縁体が共存することを示した。

c) 磁場下の超伝導体の束縛状態と準粒子バンド：酸化物超伝導体のようなコヒーレンス長の短い第2種超伝導体では，磁束の渦に束縛された準粒子状態が低温物性や磁束の運動に影響する。 s 波超伝導体のモデルと d 波超伝導体のモデルのボゴリューボフ-ドゥジャン方程式を自己無撞着に解いて，秩序パラメーターと束縛状態の詳細を調べた。フェルミ面の異方性，束縛状態の重なりによるバンド形成，ランダウ量子化（局在化），格子の離散性に起因する磁気破壊（非局在化）が複雑に絡み合うことがわかった。磁束のコアにおける化学ポテンシャルでの状態密度は従来の評価よりずっと大きく，ドハース-ファンアルフェン効果の実験を説明する可能性があることを示した。

d) 2層銅酸化物の擬スピンギャップ異常：スピンに依存する散乱を摂動的に取り入れる方法を開発した。2層銅酸化物の異常金属相を説明するため，層間のハイゼンベルク相互作用を仮定し，この方法を適用した。層内の強い反強磁性揺らぎが層間の反強磁性的結合を特徴的な波数で増強し，シングレットの磁気励起が優勢になり，スピン揺らぎは遮蔽された。動的スピン帯磁率，中性子非弾性散乱，核磁気縦緩和，スピンエコー崩壊などにおける擬スピンギャップ異常を定性的に説明した。

e) スピン梯子系の磁気的励起と応答関数：ツベリックによって提唱されたスピン梯子系のマヨラナ表示を使って，静的帯磁率と核磁気縦緩和を計算した結果，一見矛盾するようにみえた実験結果をとてもよく説明することがわかった。

B-1) 学術論文

H.-B. SCHÜTTLER, K. YONEMITSU and J. ZHONG, "Berry Phases, Pairing Symmetry, and Nodeless *d*-Wave States in a Strongly Correlated Polaron Model", *J. Supercond.* **8**, 555 (1995).

K. YONEMITSU and M. IMADA, "Spin-Gap Phase in Nearly-Half-Filled One-Dimensional Conductors Coupled with Phonons", *Phys. Rev. B* **54**, 2410 (1996).

J. KISHINE and H. NAMAIZAWA, "Superconductivity of Carriers Doped into the Static Charge Density Wave State in Two-Dimensional Square Lattice", *Prog. Theor. Phys.* **93**, 519 (1995).

J. KISHINE, "Spin Fluctuations in an Itinerant Heisenberg System: Naive RPA Treatment", *Prog. Theor. Phys.* **94**, 543 (1995).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. YONEMITSU, A.R. BISHOP and J. LORENZANA, "Local Vibronic and Electronic Excitations of Doping-Induced States in the Copper Oxides", in "Manifestations of the Electron-Phonon Interaction in High-Tc Superconductivity", ed. by R. Baquero, 83 (World Scientific, 1995).

B-7) 他大学での講義

東北大学工学部機械知能系「数学 B」1995 年 10 月～1996 年 3 月

東北大学理学部物理学科「1 次元電子格子系のスピンギャップ」1995 年 12 月

C) 研究活動の課題と展望

$(DCNQI)_2M$ の金属絶縁体転移の金属側からの振る舞いはスケーリング則で定性的に説明できそうだが，低温側の絶縁体の物性を説明するためには 3 次元性が本質的である。相転移での擬 1 次元性，光電子分光に見られるスペクトル移動との関連などを明らかにするため，理論を改良する。また，磁場下の第 2 種超伝導体の複雑な準粒子状態について数値計算を進め，量子的な振動を再現する。さらに，スピン梯子系におけるマヨラナフェルミオンの起源をさぐり，強結合固定点を表す場と自由フェルミオン場の関係を，解析計算と数値計算の両側から調べる。

*) 1996 年 2 月 1 日着任

3-2 分子構造研究系

分子構学第一研究部門

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) 短寿命分子のミリ波・サブミリ波分光と分子構造

a-1)変角振動励起状態 HCCS, DCCS のマイクロ波分光：直線 4 原子分子の Renner-Teller 効果

数年前から進めてきた直線 4 原子ラジカル HCCS および DCCS の変角振動励起状態でのマイクロ波スペクトルを，最近展開した二つの変角振動についての Renner-Teller 効果理論に基づいて解析した。ν_4 及び ν_5 の振動励起状態，$\mu/\kappa^2\Sigma$ 状態の異常に大きいスピン回転結合定数 γ は二つの変角振動の干渉的な Renner-Teller 効果として説明され，今回その Renner パラメーター，$|\varepsilon_{45}|$ を初めて決定した。

a-2)電子励起状態にある NCl ラジカルのマイクロ波分光

電子励起状態での純回転スペクトルの測定は，光マイクロ波二重共鳴などの特殊な手法を用いる以外は非常に難しく，特に第二電子励起状態はこれまで二例しか報告されていない。第一電子励起状態[$^1\Delta$, E(a-X)=9260 cm^{-1}]および第二電子励起状態[$^1\Sigma^+$, E(b-X)=15040 cm^{-1}]にある NCl($X^3\Sigma^-$)の純回転スペクトルをマイクロ波分光法で初めて明らかにした。得られた分子定数および電子基底状態についての分子定数から，三つの低い電子状態のポテンシャルについて詳細な知見が得られた。

a-3)含りんフリーラジカル H_2PO 及び含りんカルベン HCCP のマイクロ波分光

含り化合物，例えば PH_3，の燃焼反応で生成するフリーラジカル H_2PO のマイクロ波スペクトルを初めて明らかにし，これまで量子化学計算で問題とされてきたその分子構造に最終的な決着を与えた。また，これまで，分光学としても，量子化学計算でも全く報告のなかった含りんカルベン HCCP を初めて検出し，その分子構造論的特徴を明らかにした。

a-4)メチルラジカル誘導体 CHF_2 のマイクロ波分光

CH_3 ラジカルは平面構造，CF_3 ラジカルは傘型構造，CH_2F ラジカルは擬平面構造を持つ。これとの関連して，CHF_2 ラジカルの構造は分子構造論および量子化学計算の観点から注目されてきた。今回，CH_2F のマイクロ波スペクトルを初めて検出し，非常に複雑なスペクトルを帰属，解析した。その結果，反転運動のトンネル効果による分子構造の差異が非常に小さく，一つの回転スペクトルと考えられた微細，超微細構造が，反転運動の対称性に応じて異なった超微細構造(通常の一重項分子の場合には単なるスピン重率に対応)の重なりとして説明出来ること

を明らかにした。これは分光学的に初めての例である。

a-5)3d 遷移金属酸化物のマイクロ波分光

各種の 3d 金属を含む酸化物，$TiO(^3\Delta_r)$, $MnO(^6\Sigma^+)$, $CoO(^4\Delta_i)$, $NiO(^3\Sigma^-)$, $CuO(^2\Pi_i)$のマイクロ波スペクトルを初めて測定し，これらの酸化物の特徴，特に，多重項状態におけるスピン・軌道相互作用を介する高次相互作用項を決定できることをいくつかの例について示した。

b) サブミリ波・遠赤外高感度分光法の開拓

前年度に開発した周波数可変遠赤外サイドバンドレーザー分光器の感度の向上を図りおよび短寿命分子を測定出来るように整備を進めた。分光システムの現在の感度は一秒の時定数で $3x10^{-5}$ である。周波数測定精度は十分長い予熱の後で 100 kHz 以内であった。現在，OH ラジカルのモニターなどで短寿命分子の測定の準備を進めている。

d) サブミリ波望遠鏡の開拓

平成 6 年 11 月に東京管区気象台富士山測候所構内に設置し，富士山頂での大気透過度を連続自動測定している 230GHz のラジオメーターを，平成 8 年 9 月に撤去した。ここ 1 年 9 ヶ月の大気透過度自動測定の結果，サブミリ波望遠鏡のサイトとして冬期の富士山頂は世界的に見ても最も良い場所の一つであると結論できた。

さらに，サブミリ波望遠鏡バックエンドとして，冬季富士山頂での無人自動運用可能で，かつ，衝撃や厳しい環境でも安定な音響光学型分光計を開発し，製作した。現在性能を試験し，来年度に予定している仮組立に備えている。

B-1) 学術論文

M. GOTO, K. NAMIKI and S. SAITO, "Microwave Spectra of the ZnH and ZnD Radicals in the $X^2\Sigma^+$ State", *J. Mol. Spectrosc.*, **173**, 585(1995).

M. KANADA, S. YAMAMOTO, S. SAITO and Y. OSAMURA, "Molecular Structure of the Linear C_3H Radical: Microwave Spectrum of the ^{13}C Substituted Species", *J. Chem. Phys.*, **104**, 2192(1996).

H. OZEKI and S. SAITO, "The Microwave Spectrum of the CD_2 Radical", J. Chem. Phys., 104, 2167(1996).

J. TANG and S. SAITO, "Microwave Spectrum of the FS_2 Radical in the Ground Electronic X^2A" State", *J. Chem. Phys.*, **104**, 7437(1996).

K. NAMIKI and S. SAITO, "Microwave Spectrum of the NiO Radical in the $X^3\Sigma^-$ State", *Chem. Phys. Lett.*, **253**, 343(1996).

K. KOBAYASHI, M. GOTO, S. YAMAMOTO and S. SAITO, "The Microwave Spectrum of the NCl Radical in the Electronically Excited ($a^1\Delta$) State", *J. Chem. Phys.*, **104**, 8865(1996).

T. HIRAO, S. SAITO and H. OZEKI, "Microwave Spectrum and Molecular Structure of the Dihydrophosphoryl Radical H_2PO in the X^2A' Ground Electronic State", *J. Chem. Phys.*, **105**, 3450 (1996).

M. IZUHA, S. YAMAMOTO and S. SAITO, "Microwave Spectrum of Silylidene, H_2CSi", *J. Chem. Phys.*, **105**, 4923 (1996).

Y. SEKIMOTO, H. YOSHIDA, T. HIROTA, Y. TAKANO, E. FURUYAMA, S. YAMAMOTO, S. SAITO, H. OZEKI, J. INATANI, M. OHSHI, A.G. CARDIASMENOS and S.L. HENSEL, "Measurement of 220 GHz Atmospheric Opacity on Mt Fuji with a Radiometer/Radome System", Internat. *J. Infrared and MM Wave*, **17**, 1263 (1996).

J. TANG and S. SAITO, "Microwave Spectroscopy of the HCCS and DCCS Radicals($X^2\pi_i$) in Excited Vibronic State: a Study of the Renner-Teller Effect", *J. Chem. Phys.*, **105**, 8020 (1996).

K. KOBAYASHI and S. SAITO, "The Microwave Spectrum of NCl in the Second Electronically Excited State($b^1\Sigma^+$)", *J. Phys., Chem.*, **101**, 1068 (1996).

M. TONOOKA, S. YAMAMOTO, K. KOBAYASHI and S. SAITO, "The microwave spectrum of the NH_2 radical: the hyperfine structure of the $^2B_1$ ground electronic state", *J. Chem. Phys.*, **106**, 2563 (1997).

B-2) 総説，著書

齋藤修二，尾関博之，「高感度・高分解能サブミリ波・遠赤外分光法」，固体物理，**31**, 101 (1996).

斎藤修二，「宇宙からのたより」，化学と工業，**49**，643 (1996).

B-3) 受賞

齋藤修二，分子科学研究奨励森野基金 (1985).

齋藤修二，仁科記念賞 (1991).

齋藤修二，東レ科学技術賞 (1993).

B-4) 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，学術振興会等の役員

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-).

科学研究費の研究代表者，班長等

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-5) 他大学での講義

大阪大学大学院理学研究科，分光学特論，(1996.12).

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

c) 液体ヘリウム中のイオンのレーザー分光

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。前年度までに，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衝突イオン化レートを蛍光寿命から測定したが，本年度は，これをイオン計測により測定すると同時に生成イオン種の質量分析をも行い，ペニングイオン化レートと会合イオン化レートを区別して求めることが出来た。また，^{4}He 原子と ^{3}He 原子におけるそれらのレートの違いも見いだすことが出来た。

b) エキゾチック原子（分子）のレーザー分光： 昨年度までに二本の共鳴線を観測して，反陽子ヘリウム原子（$\bar{p}$-He^{2+}-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，さらにそれらに加えて，反陽子 ^{4}He 原子および反陽子 ^{3}He 原子においてそれぞれ三本づつの計六本の共鳴線を観測することができた。これらの内の二本は，昨年度までに確立したレーザー誘起消滅法をさらに拡張したレーザー二重共鳴消滅法によって観測され，また，他の二本は，分子的描像における振動量子数の変化分が 2 であるような非常に弱い共鳴線であったことが特筆される。これらの共鳴波長は理論予測と極めてよく一致し，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った。また，これらの遷移において，時間分解測定や圧力依存性などの測定も行われ，関連準位に関する詳しい情報が得られた。

c) 液体ヘリウム中のイオンのレーザー分光：液体ヘリウム中のイオンは，液体ヘリウム中の中性原子・分子の場合とは異なり，周りのヘリウム原子に対するイオンの強い分極作用によって，イオンの周りに固体のヘリウムの氷の殻を形成することが予想されている。このような状況下におけるイオン及び液体ヘリウムの物理を調べることを目的として，液体ヘリウム中のイオンのレーザー分光を本年度から開始した。現在までに，レーザーアブレーションによって液体ヘリウム中に生成されたバリウム原子イオンに関する予備的な実験を行っている。

B-1) 学術論文

A. FUJII and N. MORITA, "Three-color triple resonance spectroscopy of highly excited *ng* Rydberg states of NO: Decay dynamics of high-*l* Rydberg states", *J. Chem. Phys.* **103**, 6029 (1995).

F.E. MAAS, R.S. HAYANO, T. ISHIKAWA, H. TAMURA, H.A. TORII, N. MORITA, T. YAMAZAKI, I. SUGAI, K. NAKAYOSHI, F.J. HARMANN, H. DANIEL, T. VON EGIDY, B. KETZER, A. NIESROJ, S. SCHMID, W. SCHMID, D. HORVATH, J. EADES and E. WIDMANN, "Laser induced resonant transition at 470.724 nm in the $v = n$-l -1 = 2 cascade of metastable antiprotonic helium atoms", *Phys. Rev. A* **52**, 4266 (1995).

B. KETZER, F.J. HARTMANN, H. DANIEL, T. VON EGIDY, A. NIESTROJ, S. SCHMID, W. SCHMID, T. YAMAZAKI, I. SUGAI, K. NAKAYOSHI, R. S. HAYANO, F.E. MAAS, H.A. TORII, T. ISHIKAWA, H. TAMURA, N. MORITA, D. HORVATH, J. EADES and E. WIDMANN, "Isotope effects on delayed annihilation time spectra of antiprotonic helium atoms in a low-temperature gas", *Phys. Rev. A* **53**, 2108 (1996).

H.A. TORII, M. HORI, T. ISHIKAWA, F.E. MAAS, R.S. HAYANO, N. MORITA, M. KUMAKURA, I. SUGAI, B. KETZER, H. DANIEL, F.J. HARTMANN, R. POHL, R. SCHMID, T. VON EGIDY, D. HORVATH, J. EADES, E. WIDMANN and T. YAMAZAKI, "Laser-induced resonant transitions in the $v = n$-l-1 = 2 and 3 metastable cascades of antiprotonic ^{3}He atoms", *Phys. Rev. A* **53**, R1931 (1996).

B-3) 総説，著書

早野龍五，森田紀夫，「レーザーで反陽子を射落とす–長寿命反陽子原子の実証–」パリティ，10巻，10号，69 (1995).

B-4) 招待講演

N. MORITA, "Observation of Laser-Induced Resonant De-excitation of $\bar{p}$-He^{2+}-e^- Atomcules", *Quantum Electronics and Laser Science Conference (QELS'95)*, Baltimore, Maryland (USA), May 1995.

N. MORITA, "Laser Spectroscopy of Antiprotonic Helium Atoms", *The Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO/Pacific Rim'95)*, Makuhari, Chiba (Japan), July 1995.

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および会合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。液体ヘリウム中のイオンのレーザー分光については，予備的実験において得られた結果を基に，本格的な研究を進めて行きたい。特に，超流動液体ヘリウム中の RF イオントラップを実現し，イオン種の選択的観測を行うとともに，イオンの寿命を延ばすことを考えている。

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，生体分子科学

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振動緩和

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。$O_2 \rightarrow H_2O$ を触媒するチトクロム酸化酵素，$O_2 \rightarrow H_2O+SO$ を触媒するチトクロム P-450，$H_2O_2 \rightarrow H_2O$ 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，共鳴ラマン分光の研究により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 O_2 還元機構の研究は 1993 年の化学会進歩賞受賞の栄誉に輝いた。

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。数ピコ秒以前に統計分布しない時間のあることを実験データより指摘した。

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，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の製作，酵素反応中間体測定用フローラマン装置の製作及びダイオードレーザーを用いた新しい赤外分光システムの製作。

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

M. ASANO-SOMEDA, S. SATO, K. AOYAGI and T. KITAGAWA, "Time-resolved resonance Raman spectra of meso-substituted copper porphyrins in the T_1 state: Implication for the solvent dependent red-shift of emission spectra.", *J. Phys. Chem.* **99**, 13800-13807 (1995).

P. JEWSBURY, S. YAMAMOTO, T. MINATO, M. SAITO and T. KITAGAWA, "The proximal residue largely determines the CO distortion in carbon monoxy globin proteins. An ab initio study of a heme prosthetic unit.", *J. Phys. Chem.* **99**, 12677-12685 (1995).

J.S. AHN, T. KITAGAWA, Y. KANEMATSU, Y. NISHIKAWA and T. KUSHIDA, "Glass transition of Zn-substituted myoglobin probed by absorption and site-selective fluorescence spectroscopies.", *J. Lumin.* **64**, 81-86 (1995).

S. MASATOKI, M. TAKAMURA, M. MATSUURA, K. KAMOGAWA and T. KITAGAWA, "Raman spectroscopic observations of anomalous conformational behavior of short poly(oxyethylene) chains in water ", *Chem. Lett.* 991-992 (1995).

T. KOHZUMA, C. DENNISON, W. MCFARLANE, S. NAKASHIMA, T. KITAGAWA, T. INOUE, Y. KAI, N. NISHIO, S. SHIDARA, S. SUZUKI and A.G. SYKES, "Spectroscopic and electrochemical studies on active-site transitions of the type 1 copper protein pseudoazurin from Achromobacter cycloclastes.", *J. Biol. Chem.* **270**, 25733-25738 (1995).

Y. HAYASHI, T. KAYATANI, H. SUGIMOTO, M. SUZUKI, A. UEHARA, Y. MIZUTANI, T. KITAGAWA and Y. MAEDA, "Synthesis, characterization, and reversible oxygenation of m-alkoxo-diiron(II) complexes with a dinucleating ligand, N, N, N', N'-tetrakis{2-(6-methylpyridyl)methyl}-1,3-diaminopropan-2-olate.", *J. Am. Chem. Soc.* **117**, 11220-11229 (1995).

S. HIROTA, T. MOGI, Y. ANRAKU, R.B. GENNIS and T. KITAGAWA, "Resonance Raman study on axial ligands of heme irons in cytochrome bd-type ubiquinol oxidase from Escherichia coli.", *Biospectroscopy* **1**, 305-311 (1995).

P. JEWSBURY and T. KITAGAWA, "The distal-CO interaction in carbonmnooxy myoglobins: the molecular dynamics of 3 distal mutants.", *Biophys. J.* **68**, 1283-1294 (1995).

D.A. PROSHLYAKOV, T. OGURA, K. SHINZAWA-ITOH, S. YOSHIKAWA and T. KITAGAWA, "Microcirculating system for simultaneous determination of Raman and absorption spectra of enzymatic reaction intermediates and its application to the reaction of cytochrome c oxidase with hydrogen peroxide.", *Biochemistry* **35**, 76-82 (1996).

T. OGURA, S. HIROTA, D.A. PROSHLYAKOV, K. SHINZAWA-ITOH, S. YOSHIKAWA and T. KITAGAWA, "Time-Resolved Resonance Raman Evidence for Tight Coupling between Electron Transfer and Proton Pumping of Cytochrome c Oxidase upon the change from the Fe^{v} Oxidation Level to the Fe^{IV} Oxidation Level.", *J. Am. Chem. Soc.* **118**, 5443-5449 (1996).

I. FREBORT, P. PEC, L. LUHOVA, H. TOYAMA, K. MATSUSHITA, S. HIROTA, T. KITAGAWA, T. UENO, Y. ASANO, Y. KATO and O. ADACHI, "Two amine oxidases from Aspergillus niger AKU 3302 contain topa quinone as the cofactor. Unusual cofactor link to the glutamyl residue occurs only at one of the enzymes.", *Biochim. Biophys. Acta* **1295**, 59-72 (1996).

M. NAGAI, K. IMAI, S. KAMINAKA, Y. MIZUTANI and T. KITAGAWA, "Ultraviolet resonance Raman studies of hemoglobin quaternary structure using a tyrosine a42 mutant: Changes of a_1b_2 subunit interface upon the TÆR transition.", *J. Mol. Struct.* **379**, 65-75 (1996).

D.A. PROSHLYAKOV, T. OGURA, K. SHINZAWA-ITOH, S. YOSHIKAWA and T. KITAGAWA, "Resonance Raman/absorption characterization of the oxo-intermediates of cytochrome c oxidase generated in its reaction with hydrogen peroxide: pH and H_2O_2 concentration dependence.", *Biochemistry* **35**, 8580-8586 (1996).

S. HIROTA, T. OGUARA, S. SHINZAWA-ITOH, S. YOSHIKAWA and T. KITAGAWA, "Observation of multiple CN-isotope-sensitive Raman bands for CN-adducts of hemoglobin, myoglobin, and cytochrome c oxidase; Evidence for vibrational coupling between the Fe-C-N bending and porphyrin in-plane modes", *J. Phys. Chem.* **100**, 15274-15279 (1996).

S. HIROTA, T. LI, G.N. PHILLIPS, J.S.O. JR., M. MUKAI and T. KITAGAWA, "Perturbation of the Fe-O_2 bond by near-by residues in heme pocket: Observation of $n_{Fe\text{-}O2}$ Raman bands for oxymyoglobin mutants.", *J. Am. Chem. Soc.* **118**, 7845-7846 (1996).

M. ASANO-SOMEDA, K. AOYAGI and T. KITAGAWA, "Time-resolved resonance Raman spectra of octaethyl-porphinato copper(II) in the lowest excited triplet state.", *Chem. Phys. Lett.* **118**, 7845-7846 (1996).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. KITAGAWA, S. KAMINAKA, Y. MIZUTANI, K. IMAI and M. NAGAI, "UV resonance Raman studies of quaternary structures of hemoglobin using several mutants.", *VIth Europian Conf. Spectrosc. Biol. Mol. Kluwer Academic Pub.* 235-236 (1995).

S. NAKASHIMA, T. KITAGAWA and J. S. OLSON, "Time-Resolved Resonance Raman Study of the Recombination Dynamics Photodissociated Carbon Monoxide to Sperm Whale Myoglobin and Its Mutants", *Proc. Yamada Conf. J. Mol. Liquids* **65/66**, 317-320 (1995).

T. KITAGAWA, S. NAKASHIMA, Y. MIZUTANI, M. MUKAI and J. S. OLSON, "Resonance Raman spectrosocpy of protein dynamics.", *ICORS XV (S. A. Asher and P. B. Stein Eds.) John-Wiely & Sons Inc.* 426-427 (1996).

S. KAMINAKA, A. TSUNESHIGE, T. YONETANI and T. KITAGAWA, "Ultraviolet resonance Raman study of Fe-Zn Metal-hybrid hemoglobins as a T-state model.", *ICORS XV (S. A. Asher and P. B. Stein Eds.) John-Wiely & Sons Inc.* 432-433 (1996).

S.G. KRUGLIK, Y. MIZUTANI, V.A. ORLOVICH and T. KITAGAWA, "Time-resolved Stokes/anti-Stokes resonance Raman study of primary photoprocesses in the solutions of nickel-porphyrins.", *ICORS ICORS XV (S. A. Asher and P. B. Stein Eds.) John-Wiely & Sons Inc.* 122-123 (1996).

V.A. ORLOVICH, Y. UESUGI, Y. MIZUTANI, S.G. KRUGLIK, A.G. SHVEDKO and T. KITAGAWA, "SRS-based source of 3_3ps, 1 kHz pulses in near-UV-visibe spectral range for TR^3 applications.", *ICORS XV (S. A. Asher and P. B. Stein Eds.) John-Wiely & Sons Inc.* 1242-1243 (1996).

T. KITAGAWA, Y. MIZUTANI, Y. UESUGI and S.G. SERGEI, "Vibrational cooling of electronically excited metallo-porphyrins revealed by ps time-resolved resonance Raman spectroscopy.", *Annu. Meet. Korean Chem. Soc.* **SB12**, 561-564 (1996).

B-3) 総説，著書

T. KITAGAWA and T. OGURA, "Oxygen activation mechanism at binuclear site of heme-copper oxidase superfamily as revealed by time-resolved resonance Raman spectroscopy.", *Pro. Inorg. Chem.* **45,** 431-479 (1997).

北川禎三，化学総説 No.24 "生物無機化学の新展開" (森島績他編) "時間分解共鳴ラマン分光法" pp.2-10 (1995).

北川禎三，"機器分析のてびき" 第 3 巻，"ラマン分光法" (塩川二郎他編) pp.139-158 化学同人 (1996).

北川禎三， 新タンパク質応用工学（旗野昌弘監修）"時間分解共鳴ラマン分光法"（フジテクノシステム）(1996).

B-4) 招待講演

T. KITAGAWA, S. NAKASHIMA, Y. MIZUTANI, M. MUKAI and J.S. OLSON, "Resonance Raman spectrosocpy of protein dynamics.", *ICORS XV (S. A. Asher and P. B. Stein Eds.) John-Wiely & Sons Inc.* 426-427 (1996).

T. KITAGAWA, Y. MIZUTANI, Y. UESUGI and S. G. SERGEI, "Vibrational cooling of electronically excited metallo-porphyrins revealed by ps time-resolved resonance Raman spectroscopy.", *Annu. Meet. Korian Chem. Soc.* **SB12,** 561-564 (1996).

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

日本分光学会学術賞，北川禎三，1996 年

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員，委員

IUPAC Assciate Members of Commision on Biophysical Chemistry 1996. 1~

日本分光学会 東海支部幹事 1986.4-1991.3

日本分光学会 評議員 1987-現在

日本化学会 東海支部代議員 1986-1988

日本化学会 東海支部幹事 1988-1990

日本化学会 化学展 92 企画委員会副委員長 1991

日本化学会 賞推薦委員 1994

学会の組織委員

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

International Conference on Time Resolved Vibrational Spectroscopy, International Organizing Commitees 1989-

11th International Conferens on Photobiology, Symposium organizer 1992

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

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

VIIIth International Conference on Bioinorganic Chemistry, Organizing Committe.

文部省，学術振興会等の役員

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, 1996-

科学技術庁研究開発局評価委員　1994

学会誌編集委員

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 (Editional Board) 1993-現在

Journal of Raman Spectrocopy (Advisory Board) 1995-現在

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

科学研究費の研究代表者，班長等

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

重点研究「生体金属分子科学」領域代表者　1996-

B-7) 他大学での講義

富山大学　1996 年 12 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：時間分解赤外分光

b) 生体 NO の合成及び反応機構：グアニレートシクラーゼの共鳴ラマン分光

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ックスとそれに対するアミノ酸置換の効果：時間分解共鳴ラマン分光

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及び溶媒配位：ピコ秒時間分解共鳴ラマン分光

h) 高感度赤外分光法の開発

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) 疑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の分子分光学的研究

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。LaF_3中にドープされたPr^{3+}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) フラーレン頬のラジカルの分子分光学的研究：テトラフェニルフォスフェイトとの塩を形成したC_{60}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. SUZUKI, Y. MARUYAMA, T. KATO, T. AKASAKA, K. YAMAMOTO, H. FYNASAKA and T. TAKAHASHI, "Chemical Reactivities of the Metallofullerene: EPR Study of Diphenylmethano -La@C_{82} Radicals", *J. Am. Chem. Soc.*, **117**, 9606 (1995).

T. AKASAKA, S. NAGASE, K. KOBAYASHI, T. SUZUKI, T. KATO, K. KIKUCHI, Y. ACHIBA, K. YAMAMOTO, H. FUNASAKA and T. TAKAHASHI, "Synthesis of the first adducts of the dimetallofullerenes $La_2@C_{80}$ and $Sc_2@C_{84}$ by addition of a disilirane.", *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **34**, 2139 (1995).

T. SUZUKI, Y. MARUYAMA, T. KATO, K. KIKUCHI, Y. NAKAO, Y. ACHIBA, K. KOBAYASHI and S. NAGASE, "Electrochemistry and Ab Initio Study of the Dimetallofullerene $La_2@C_{80}$.", *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **34**, 1094 (1995).

T. AKASAKA, S. NAGASE, K. KOBAYASHI, T. SUZUKI, T. KATO, K. YAMAMOTO, H. FUNASAKA and T. TAKAHASHI , "Exohedral derivatization of an endohedral metallofullerene Gd@C_{82}", *J. Chem. Soc., Chem. Comm.* 1343 (1995).

T. AKASAKA, T. KATO, S. NAGASE, K. KOBAYASHI, K. YAMAMOTO, H. FUNASAKA and T. YAKAHASHI, "Chemical Derivatization of Endohedral Metallofullerene La@C_{82} with Digermirane.", *Tetrahedron*, **52**, 5015 (1996).

B-4) 招待講演

T. KATO, "An ESR Detection of the Spin Multiplet Term of Gd@C_{82}", the 187th Meeting of The Electrochemical Society in Reno, Nevada, May, 1995.

T. KATO,"ESR Study on Electronic Structure and Chemical Reactivity of Metallofullerenes", the 189th Meeting of The Electrochemical Society in Los Angeles, May, 1996.

T. KATO, "ESR Measurements of C_{60}^- Anion Crystals", the 189th Meeting of The Electrochemical Society in Los Angeles, May, 1996.

B-6) 学会及び社会活動

学会の組織委員

Session Organizer of the Metallofullerenes Session at the symposium of "Fullerenes: Chemistry, Physics, and New Direction VII", held at the 187th Meeting of The Electrochemical Society in Reno, Nevada, May, 1995.

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や，ラマンビート検出法による磁気共鳴分光により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ックスへの応用

c) 紫外フェムト秒分光法による比較的単純な分子の溶液内反応初期過程の研究

d) 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

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。フェトム秒パルス系列の制御によって，2次元分光法を実現し，分子の低振動に関しては5次の分光で，高振動に関しては7次の分光で位相緩和に及ぼす均一効果と不均一効果を区別することができた。

c) 紫外フェムト秒レーザーを励起光源として，いくつかの比較的単純な小分子の溶液中での動的挙動を過渡吸収法を用いて測定した。具体的には純 CH_3I 中での I_2 生成反応，CH_2I_2 の1光子励起によるカチオン生成，ヘキサトリエンの励起状態ダイナミクスと異性化反応，純ベンゼン中でのベンゼンダイマーカチオン生成について研究を行った。

d) アンテナクロロフィルの数を減らした光合成光化学系Ⅰ反応中心（濃縮粒子）において電子供与体クロロフィル P700 を選択光励起して，電子励起エネルギーの再分配過程と励起状態の寿命を測定した。P700 の励起状態から4ピコ秒以内で電子移動が起こる事がわかった。

B-1) 学術論文

P.B. BISHT, H. PETEK, K. YOSHIHARA and U. NAGASHIMA, "Excited State Enol-Keto Tautomerization in Salicylic Acid: A Supersonic Free Jet Study", *J. Chem. Phys.* **103**, 5290 (1995).

T.S. KIM, Y.S. CHOI and K. YOSHIHARA, "Fluorescence Lifetimes of the van der Waals Clusters of Octatetraene (S_1)-Rare-Gas Atoms:External Heavy Atom Effect", *Chem. Phys. Lett.* **247**, 541 (1995).

K. TOMINAGA, G.P. KEOGH and K. YOSHIHARA, "Liquid Dynamics Studied by Higher Order Non-Linear Optical Spectroscopy", *J. Mol. Liq.* **65/66**, 398 (1995).

K. YOSHIHARA, Y. NAGASAWA, A. YARTSEV, A.E. JOHNSON and K. TOMINAGA, "Solvent and Nuclear Dynamic Effects on Intermolecular Electron Transfer", *J. Mol. Liq.* **65/66**, 59 (1995).

E.V. SLOBODCHIKOV, J. MA and K. YOSHIHARA, "High-Power and High-Repetition Rate Femtosecond Chromium-Doped Forsterite Laser", *Rev. Laser Engin.* **23**, 1090 (1995).

E.V. SLOBODCHIKOV, J. MA, K. TOMINAGA and K. YOSHIHARA, "Cavity-Dumped Femtosecond Kerr-Lens Mode Locking in a Chromium Forsterite Laser", *Opt. Lett.* **21**, 354 (1996).

M.J.E. MORGENTHALER, K. YOSHIHARA and S.R. MEECH, "Red-Edge Excitation Fluorescence Study of the Inhomogeneous Broadening of Electronic Transitions in Solution", *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* **93**, 629 (1996).

K. TOMINAGA and K. YOSHIHARA, "Temporally Two-Dimensional Femtosecond Spectroscopy of Binary Mixture of CS_2", *J. Chem. Phys.* **104**, 1159 (1996).

K. TOMINAGA and K. YOSHIHARA, "Fifth-Order Nonlinear Spectroscopy on the Low-Frequency Modes of Liquid CS_2", *J. Chem. Phys.* **104**, 4419 (1996).

H. PAL, Y. NAGASAWA, K. TOMINAGA and K. YOSHIHARA, "Deuterium Isotope Effect on Ultrafast Intermolecular Electron Transfer", *J. Phys. Chem.* **100**, 11964 (1996).

M. IWAKI, S. KUMAZAKI, K. YOSHIHARA, T. ERABI and S. ITOH, "ΔG_0 Dependence of the Electron Transfer Rate in Photosynthetic Reaction Center of Plant Photosystem I: Natural Optimization of Reaction between Chlorophyll *a* (A_0) and Quinone", *J. Phys. Chem.* **100**, 10802 (1996).

V.F. KAMALOV, I.A. STRUGANOVA and K. YOSHIHARA, "Temperature Dependent Radiative Lifetime of J-Aggregates", *J. Phys. Chem.* **100**, 8640 (1996).

J.M. REHM, G.L. McLENDON, Y. NAGASAWA, K. YOSHIHARA, J. MOSER and M. GRAETZEL, "Femtosecond Electron-Transfer Dynamics at a Sensitizing Dye-Semiconductorn (TiO_2) Interface", *J. Phys. Chem.* **100**, 9577 (1996).

S.A.P. MERRY, S. KUMAZAKI, Y. TACHIBANA, D.M. JOSEPH, G. PORTER, K. YOSHIHARA, J.R. DURRANT and D. KLUG, "Sub-Picosecond Equilibration of Excitation Energy in Isolated Photosystem II Reaction Centers Revisited: Time-Dependent Anisotropy", *J. Phys. Chem.* **100**, 10469 (1996).

K. OHTA, Y. NAITOH, K. SAITOW, K. TOMINAGA, N. HIROTA and K. YOSHIHARA, "Ultrafast Dynamics of Photoexcited Trans-1,3,5-Hexatriene in Solution by Femtosecond Transient Absorption Spectroscopy", *Chem. Phys. Lett.* **256**, 629 (1996).

K. TOMINAGA and K. YOSHIHARA, "Overtone Vibrational Dephasing in Liquids Studied by Femtosecond Fifth-Order Nonlinear Spectroscopy", *Phys. Rev. Lett.* **76**, 987 (1996).

T. HAYASHI, T. MIYAHARA, S. KUMAZAKI, H. OGOSHI and K. YOSHIHARA, "Intermolecular Photoinduced Electron Transfer between Multifunctional Porphyrin and Ubiquinone Analogues Linked by Multi-Hydrogen Bonding Interaction", *Angew. Chem.* **35**, 1964 (1996).

B-2) 国際会議のプロシーデイングンス

S. KUMAZAKI, D.M. JOSEPH, B. CRYSTALL, Y. TACHIBANA, J.R. DURRANT, J. BARBER, G. PORTER, K. YOSHIHARA and D.R. KLUG, "Experimantal Observation of Multiple Trapping/charge Separation Steps in the Isolated PS2 Reaction Centre", in *Photosynthsis:from Light to Biosphere*, vol. 1, P. Mathis Ed., Kluwer Acdemic Publ. Dordrecht, p.883 (1995).

M. IWAKI, S. KUMAZAKI, K. YOSHIHARA, T. ERABI and S. ITOH, "ΔG Dependence of the Rate Constant of $P700^+A_0^-$ → $P700^+Q^-$ Reaction in the Quinone-Reconstracted PSI Reaction Center," in *Photosynthsis:from Light to Biosphere*, vol. 2, P. Mathis Ed., Kluwer Academic Publ. Dordrecht, p.147 (1995).

K. YOSHIHARA, H. PAL, H. SHIROTA, Y. NAGASAWA and K. TOMINAGA, "Femtosecond Intermolecular Electron Transfer: Towards Better Understanding of the Role of Vibrational Motions", in *Femtochemistry: Chemistry and Physics of Ultrafast Processes in Molecular Media*, M. Chergui Ed., World Scientific, p. 540 (1996).

K. TOMINAGA and K. YOSHIHARA, "Fifth and Seventh Order Nonlinear Spectroscopy with Femtosecond Pulses", in *Prog. Crystal Growth and Chract.*, vol. 36, S. Watanabe Ed., Elsevier, p. 371 (1996).

B-3) 総説，著書

K. YOSHIHARA, "Rising Research Activities in Asia", *JPA NEWSLETTER* **34**, 1 (1995).

K. YOSHIHARA, "Femtosecond Higher Order Non-Linear Vibrational and Rotational Spectroscopy of Molecules: CARS and Raman Echo," *Ultra Precision* **5**, 8 (1995).

K. YOSHIHARA, "Prospects for Ultrafast Phenomena in Chemistry", *Kagaku to Kogyo* (in Japanese) **49**, 905 (1996).

K. YOSHIHARA and K. TOMINAGA, "Development and Application of High-Order Nonlinear Vibrational Spectroscopy", *Opt News* (in Japanese) **92**, 16 (1996).

B-4) 招待講演

K. YOSHIHARA, "Intermolecular Electron Transfer Faster than Solvation Dynamics", 28th Jerusalem Symposium, Electron Transfer: From Isolated Molecules to Biomolecules, Jerusalem (Israel), May 1995.

K. YOSHIHARA, Y. NAGASAWA, H. PAL, A.P. YARTSEV, A.E. JOHNSON, P. BISHT and K. TOMINAGA, "Effects of Vibrations in Chemical Dynamics:High-Frequency Vibrational and Low-frequency Solvent Dynamical Effects on Intermolecular Electron Transfer", Seventh International Conference on Time Resolved Vibrational Spectroscopy, Santa Fe (USA), June 1995.

K. YOSHIHARA, "Time-Resolved Higher Order Non-linear Spectroscopy", Institute Seminar, Korea Research Institute of Standards and Science, Taejon (Korea), June 1995.

K. YOSHIHARA, "Intermolecular Electron Transfer", Department Seminar, Kyungbuk National University, Taegu (Korea), June 1995.

K. YOSHIHARA, "Dynamical Aspects of Intermolecular Electron Transfer", Seminar at Laser Spectroscopy Study Group and Department of Chemistry, Sungkyunkwan University, Seoul (Korea), July 1995.

K. YOSHIHARA, "Ultra-Violet Femtosecond Studies of Small Molecules in Solution", XVIIth International Photochemistry Conference, London (UK), August 1995.

K. YOSHIHARA, "Ultrafast Intermolecular Electron Transfer and Related Phenomena", Japan-Czech Conference of Molecular Science, Prague (Czech), September 1995.

K. YOSHIHARA, H. PAL, H. SHIROTA, Y. NAGASAWA and K. TOMINAGA, "Femtosecond Intermolecular Electron Transfer: Towards Better Understanding of the Role of Vibrational Motions", Femtochemistry: The Lausanne Conference, Lausanne (Switzerland), September 1995.

K. YOSHIHARA, B. KIM, Y. LEE, Y.S. CHOI, T-S. KIM, H. PETEK and R.L. CHRISTENSEN, "Transition-State Spectroscopy of Dissociation and Isomerization", Pacific Basin Chemical Congress, Honolulu (USA), December 1995.

K. YOSHIHARA, H. PAL, H. SHIROTA, Y. NAGASAWA and K. TOMINAGA, "Femtosecond Intermolecular Electron Transfer: Its Dynamical Aspects", Pacific Basin Chemical Congress, Honolulu (USA), December 1995.

K. YOSHIHARA, "Energy Equilibration and Charge Separation in Photosystem I Reaction Centre", Royal Society of Chemistry Faraday Symposium, Manchester (UK), March 1996.

K. YOSHIHARA, "Energy Equilibration and Charge Separation in Photosystem I Reaction Centre", Molecular and Global Photosynthesis, London (UK), March 1996.

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，吉原經太郎，光パラメトリック発振器による高出力ピコ秒連続波長可変レーザー，1983 年

レーザー学会功労表彰，吉原經太郎，1993 年

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

日本化学会賞，吉原經太郎，超高速レーザー分光法による励起分子の研究，1996 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 10 回超高速現象国際会議　組織委員　1996

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，学術振興会等の委員等

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　1994-1996

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

学会誌編集委員

「分光研究」編集委員　1971-1973

「レーザー研究」編集委員　1984-現在

Bulletin of Chemical Society of Japan 編集委員　1975

「光化学」 編集委員長　1989-1991

Photochemistry and Photobiology, Associate Editor 1984-1987

Chemical Physics, Editorial Board Member 1980-現在

Laser Chemistry, Editorial Board Member 1989-現在

Journal of Luminescence, Editorial Board Member 1990-1996

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

科学研究費の研究代表者，班長等

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　1991-1996

B-7) 他大学での講義研究

慶応大学理工学部　1995 年 6 月

東京都立大学工学部　1995 年 7 月

大阪大学理学部　1995 年 11 月

松　本　吉　泰（助教授）

A-1) 専門領域：表面科学

A-2) 研究課題

a) メタンの光化学と活性化

b) 固体表面上でのホット原子の反応

c) 表面熱反応のダイナミクス

d) シリコン表面の熱酸化反応

e) 多光子光電子分光による表面電子状態の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) メタンの光化学と活性化：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。その励起のメカニズムは不明な点が多かったが直線偏光を用いた反応断面積の測定から，従来表面光化学で言われてきた表面励起に由来するものではなく，メタンに局在化した電子状態からの励起が重要であることを初めて示すことができた。

b) 固体表面上でのホット原子の反応：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。特に吸着種を光解離することによりエネルギー的に高い状態にあるホットな解離片を生成することができ，また，これが更に他の吸着種と反応を起こす。本年度は Pt(111)の清浄表面のメタンの紫外光分解によって生成されるホットな水素原子が共吸着種と引起こす反応が存在することを明確に確認し，そのダイナミクスを角度分解飛行時間分布測定を行なうことにより明らかにした。

c) 表面熱反応のダイナミクス：Pt(111)表面上でのメタンの熱分解は大きなエネルギー障壁があるために大きな衝突エネルギーを要する。このダイナミクスを知る一つの方法としてはその逆反応であるメチルと水素吸着種の熱再結合反応の詳細を調べることである。この表面上で紫外光によりメタンから簡単にメチル基と水素原子を生成できることが判明したのでこれを利用し，レーザー誘起熱脱離反応によって脱離してくるメタンの空間分布，速度分布を明らかにした。その結果を，解離付着確率の実験から得られたパラメータをもとにした RRKM 理論の予測結果と詳しい比較検討を行なった。

d) シリコン表面の熱酸化反応：Si(100)表面上での N_2O による熱酸化反応についてはこの吸着種の吸着状態を昇温脱離，XPS の測定から大きく分けて物理吸着と化学吸着の 2 つの吸着種が存在することを明らかにした。また，物理吸着種が解離し，解離片の酸素原子が表面のシリコン原子と結合する際にその近傍にある N_2O 吸着種を脱離させる可能性のあることを実験的に初めて示した。

e) 多光子光電子分光による表面電子状態の研究：金属表面上での非占有表面電子状態の詳細を知ることが表面光化学における励起メカニズムを明らかにすることがもっとも重要な点である。そこで，波長可変ナノ秒レーザー，あるいは，フェムト秒チタンサファイアレーザーを光源とする多光子光電子分光装置を開発し，Pt(111)清浄表面に適用した。その結果，フェルミ準位直下にある占有表面状態から鏡像準位への共鳴遷移を実験的に確認し，そのエネルギー位置を決定することに成功した。

B-1) 学術論文

H. KATO, K. SAWABE and Y. MATSUMOTO, "Adsorbed States and Thermal Reactions of N_2O on Si(100) below Room Temperature: Desorption Induced by Dissociation", *Surf. Sci.* **351**, 43 (1996).

Y.A.GRUZDKOV, K. WATANABE, K. SAWABE and Y. MATSUMOTO, "Photochemistry of Methane on a Deuterium Covered Pt(111) Surface", *Surf. Sci.* **363**, 195 (1996).

K. WATANABE, M.C. LIN, Y.A. GRUZDKOV and Y. MATSUMOTO, "Mechanism for the Desorption of Molecularly and Dissociatively Adsorbed Methane on Pt(111) Probed by Pulse-Laser Heating", *J. Chem. Phys.* **104**, 5974 (1996).

K. WATANABE, K. SAWABE and Y. MATSUMOTO, "Adsorbate-Localized Excitation in Surface Photochemistry: Methane on Pt(111)", *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1751 (1996).

I. KINOSHITA, T. ANAZAWA and Y. MATSUMOTO, "Surface and Image-Potential States on Pt(111) Probed by Two- and Three-Photon Photoemission", *Chem. Phys. Lett.* **259**, 445 (1996).

B-3) 総説・著書

沢辺恭一，松本吉泰，「表面吸着種の光誘起反応」，表面，**27**, 273 (1996).

B-4) 招待講演

Y. MATSUMOTO, "Photochemistry and Desorption Dynamics of Methane on Pt(111)", Gordon Research Conference on Dynamics at Surfaces, Proctor, NH（アメリカ）1995 年 8 月

Y. MATSUMOTO, "Dynamics of Photo-Induced Reactions on Metal and Semiconductor Surfaces", Department Seminar, Pittsburgh, PA（アメリカ）1995 年 8 月

Y. MATSUMOTO, "Photo-Induced Reactions of Methane Adsorbed on Metal Surfaces", DQPSS '95, Osaka, 1995 年 9 月

Y. MATSUMOTO, "Surface Photochemistry of Methane on Pt(111)", Fritz-Haber-Institut Seminar, Berlin,（ドイツ）1996 年 5 月

Y. MATSUMOTO, "Excitation Mechanism in Surface Photochemistry", IUVSTA Workshop, Kitzsteinhorn,（オーストリア）1996 年 5 月

松本吉泰，「表面光化学における励起メカニズム」，理研シンポジウム，和光，1995 年 10 月

松本吉泰，「表面光化学における励起メカニズム」，第 20 回名古屋分子科学セミナー，名古屋，1996 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51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ックス」の研究課題のもとで金属や半導体の清浄表面に吸着した分子種の光誘起過程に開する研究をおこなってきた。今後もさらに，吸着種の幾何学的・電子的構造を明らかにすることにより，光誘起過程の機構と動的挙動に関する分子論的な理解を深めることに研究の主眼を置く。特に，多光子電子分光を吸着種系に適用し，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通して，表面での化学結合の理解を実験のサイドから深めて行く。

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 $N_2O \cdot H_2O$ の光分解過程を議論するために，前年度は対応する2分子反応，$N_2O + h\nu \rightarrow O(^1D) + N_2$，$O(^1D) + H_2O \rightarrow 2OH$ をフロー・セル中でしらべた。本年度は，^{18}O を含む水の同位体を用いて，錯体起源の反応 $N_2{}^{16}O \cdot H_2{}^{12}O + h\nu \rightarrow {}^{16}OH + {}^{18}OH + N_2$ を研究した。2分子反応の場合と同様に，生成する2種類の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，錯体起源の反応では，2分子反応にくらべて，OH の振動・回転温度がかなり低いこと，また，回転温度に関しては ^{16}OH と ^{18}OH でほとんど差ながないこと，振動温度については，錯体起源の反応でも ^{18}OH の方が大きいエネルギーを持っていること，等が示された。これと，ごく最近行ったドップラー幅の測定結果等から，錯体起源の反応では，光照射とともに，まず N_2 が系を離れ，比較的短い寿命（数 nsec 程度）を持った $^{18}OH^{16}OH$ のような中間体を生成し，これが分解して $^{16}OH + {}^{18}OH$ となるものと結論された。

b) 自己秩序形成系の光応答

Briggs-Rauscher 系の光応答について調べ，この系では光照射が暗条件における系の分岐構造をシフトさせるだけでなく，全く新しい分岐を系にもたらすことを見出した。この結果，2 種の定常状態と一つの振動状態が共存する3重安定状態や2種の振動状態が共存する2重安定状態を見い出した。これらは少なくとも化学振動系においてははじめての発見である。これについて，理論的な考察を加え，このような複雑な多重安定性の出現が自己触媒反応の鍵となる分子（この場合は HIO_2）の閾値が光によって変化するためであることを示した。

pH 振動系 SO_3^{2-}/BrO_3^-/ferrociyanide 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，反応中に生成する ferriciyanide がこの系の光応答を決定していることを示した。また，この系のサブシステムである，$SO_3^{2-}/BrO_3^-/H^+$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すとともに，この系が3変数からなる連立微分方程式で表現可能であり，解析的な解を得ることが出来ることを示した。さらに，類似の系である SO_3^{2-}/BrO_3^-/Marble や SO_3^{2-}/H_2O_2/Marble について研究を行い，これらがカオス的振動を示す可能性を示唆した。また，SO_3^{2-}/H_2O_2/ferrociyanide /Hydrogen Carbonate 系について実際に，カオス振動を観測することに成功した。

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，自己触媒反応速度の酸強度依存性が対応する均一水溶液系と大幅に異なる現象について詳細な議論を行った。

B-1)学術論文

V. VANAG and I. HANAZAKI, "The pH Dependence of the Belousov-Zhabotinsky Reaction in Water-in-Oil Reverse Microemulsion of AOT in Octane", *J. Phys. Chem.*, **100**, 10609-10614 (1996).

N. TANAKA, M. TAKAYANAGI and I. HANAZAKI, "Nascent Rotational and Vibrational Distribution in ^{16}OH and ^{18}OH produced in the Reaction of $O(^1D)$ with $H2^{18}O$", *Chem. Phys. Letters*, **254**, 40-46 (1996).

M. TAKAYANAGI and I. HANAZAKI, "Internal Rotation of the Methyl Group in the *m*-Tolunitrile_Rare Gas Complexes", *J. Phys. Chem.*, **100**, 10037-10040 (1996).

A. KAMINAGA, G. RABÁI, Y. MORI and I. HANAZAKI, "Photo-Response of the Ferrocyanide-Bromate-Sulfite Chemical Oscillator under the Flow Condition", *J. Phys. Chem.*, **100**, 9389-9394 (1996).

G. RABAI and I. HANAZAKI, "pH Oscillations in the Bromate-Sulfite-Marble Semibatch and Flow Systems", *J. Phys. Chem.*, **100**, 10615-10619 (1996).

N. OKAZAKI, Y. MORI and I. HANAZAKI, "Photoinduced Bifurcation and Multistability in the Oscillating Briggs-Rauscher Reaction", *J. Phys. Chem.*, **100**, 14941-14948 (1996).

G. RABÁI and I. HANAZAKI, "Chaotic pH Oscillations in the Sulfur(IV)-Hydrogen Peroxide-Marble Flow System", *J. Phys. Chem.*, **100**, 15454-15459 (1996).

I. HANAZAKI and G. RABÁI, "Origin of Chemical Instability in the Bromate-Sulfite Flow System", *J. Chem. Phys.*, in press.

G. RABÁI, A. KAMINAGA and I. HANAZAKI, "Chaotic pH Oscillations in the Hydrogen Peroxide-Sulfite-Ferrocyanide-Hydrogen Carbonate Flow System", *Chem. Commun.*, 2181 (1996).

N. TANAKA, U. NAGASHIMA, M. TAKAYANAGI, H.L. KIM, and I. HANAZAKI, "Photochemical Reaction Dynamics of the $N_2O/H_2{}^{18}O$ van der Waals Complexes", *J. Phys. Chem.*, in press.

G. RABÁI, A. KAMINAGA and I. HANAZAKI,"Mechanism of the Oscillatory Bromate Oxidation of Sulfite and Ferrocyanide in a CSTR. A Comment", *J. Phys. Chem.*, **100**, 16441-16442 (1996).

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) 光励起分子の分子内電子緩和および解離動力学

b) 光解離過程における立体動力学

c) 超高速光イオン化画像観測法による化学反応の可視化

d) クラスターにおけるケージ効果の研究

e) 交差分子線法による非弾性，反応性散乱の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a)アセチレンのA状態からの前期解離過程を，吸収，蛍光励起，共鳴多光子イオン化などの多様なレーザー分光法を用いて観測し，解離エネルギー，解離障壁，解離におけるエネルギー分配，振動回転状態依存性，解離反応時間などを観測した。水素原子の Doppler 分光から解離の出口付近に 1.5 kcal/mol のエネルギー障壁が存在することを見い出し，この結果から，解離の主経路は a 状態であると推定した。さらに，これを証明するために分子線増感燐光励起装置を新たに製作し，項間交差によって生成する三重項分子の直接検出に初めて成功した。ナノ秒の pump-probe 実験との比較から，基底状態を経由する解離経路の存在をも示した。

b) 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）を選択的しながら画像化した。この画像の偏光依存性を解析するための理論を，量子力学的ならびに半古典的に導き，3 原子分子の光分解によって生成する 2 原子分子の回転，また散乱原子の電子軌道の空間配向を解析する手法を確立した。解離原子の速度，角度，偏向状態の解析から，OCS, N_2O の光解離過程には 2 つの電子状態が関与していることを実験的に見い出し，さらに量子化学的に求められたポテンシャル曲面上での波束計算との比較から，Renner-Teller 相互作用を含む分子の複雑な解離動力学を明らかにした。

c) フェムト秒レーザーによる Pump-probe 法と光イオン化画像観測法によって，光解離反応における散乱分布をサブピコ秒で時間分解撮影することに初めて成功した。これにより，分子回転より速い速度で，散乱分布の時間発展を追跡することを可能にした。

d) Ar-HI の van der Waals 錯体の電子スペクトルを初めて観測し，基底状態および Rydberg 状態における安定構造，解離エネルギーを求め，量子化学計算と比較した。

e) 光イオン化画像観測装置，および光分解型酸素原子線源を備えた交差分子線装置を製作した。

B-1) 学術論文

H. KATAYANAGI, Y. MO and T. SUZUKI, "223 nm photodissociation of OCS. Two components in $S(^1D_2)$ and $S(^3P_2)$ channels", *Chem. Phys. Lett.* **247** 571 (1995).

N. HASHIMOTO and T. SUZUKI, "Energy and state dependence in the quenching and predissociation of C_2H_2", *J. Chem. Phys.* **104** 6070 (1996).

T. SUZUKI, H. KATAYANAGI, Y. MO and K. TONOKURA, "Evidence for multiple dissociation components and orbital alignment in 205 nm photodissociation of N_2O", *Chem. Phys. Lett.* **256** 90 (1996).

Y. MO, H. KATAYANAGI, M.C. HEAVEN and T. SUZUKI, "Simultaneous measurement of recoil velocity and alignment of $S(^1D_2)$ atoms in photodissociation of OCS", *Phys. Rev. Lett.* **77** 830 (1996).

S.W. NORTH, T.J. SEARS, G.E. HALL and T. SUZUKI, "Comment on "energy partitioning in photodissociation of methyl, ethyl, and *n*-propyl iodides at 304 nm"", *Chem. Phys.* **211** 515 (1996).

T. SHIBATA and T. SUZUKI, "Photofragment ion imaging with femtosecond laser pulses", *Chem. Phys. Lett.* **262** 115 (1996).

B-3) 総説，著書

鈴木俊法，「光イオン化画像観測法による化学反応動力学の研究」，分光研究，**45** 3 (1996).

鈴木俊法，「化学反応における散乱分布の画像化と量子状態の完全測定」，表面，**34** 323 (1996).

B-4) 招待講演

T. SUZUKI "New imaging approaches to molecular photodissociation dynamics", An international symposium on "Modern trands in chemical Dynamics,"（台湾）1996 年 12 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，新しい実験手段を導入し，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新しい突破口を模索する。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。

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

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，それを電気抵抗の実験で確認すると同時に圧力誘起電荷移動を説明するための電子構造模型を提案した。これらの物質の格子定数の圧力依存性を測定して圧縮率を求めるとともに，この模型を構造的な面から検証した。

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。昨年度まで研究した PF_6^-, AsF_6^-, SbF_6^-, ClO_4^-, BF_4^- に比べて大きな $M(mnt)_2^-$ (M=Ni, Pd, Pt, Au) をもちいて電荷移動塩を合成してその物性を調べた。（1:1）の導電性電荷移動塩の中で BDNT-$Ni(mnt)_2$ が低温で強磁性的な相互作用を示す事を発見した。負のオンサイトクーロンエネルギーをもつ物質の探査のために BDNT 以外の（1:1）の導電性電荷移動塩も調べている。金属的な振る舞いをする（1:1）の電荷移動塩 DMTSA-BF_4 の電気的，光学的，磁気的な性質を総合的に調べ，この物質が 150 K付近で弱い二量化を伴う構造相転移を起こす事を見出した。

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 OMTTF-C_{60} 電荷移動錯体に低温下でカリウムをドープする実験を行って超伝導相を見出した。またポリ（3-アルキルチオフェン）に C_{60} をドープした後，さらにアルカリ金属をドープした C_{60} 三元化合物における超伝導相の研究を低磁場マイクロ波吸収と磁化測定により行い，同一試料の中に多種類の超伝導相を見出した。

B-1) 学術論文

J. DONG, K. YAKUSHI and Y. YAMASHITA, "Spectroscopic Study of BDNT and its Monocation and Dication Salts", *J. Mater. Chem.*, **5**, 1735-1740 (1995).

J. DONG, K. YAKUSHI, Y. YAMASHITA, K. IMAEDA and H. INOKUCHI, "Electronic and Vibronic Structure of Organic Charge-Transfer Salt, *m*-BDNT-PF_6", *phys. stat. sol. (b)* **195**, 611-625 (1996).

V.N. DENISOV, A.N. IVLEV, B.N. MAVRIN, K. YAKUSHI, J. DONG and Y. YAMASHITA, "Resonant Raman Scattering in Single Crystals of BDNT, $BDNT^+$, and $BDNT^{2+}$", *Chem. Phys. Lett.*, **246**, 176-182 (1995).

K. YAKUSHI, J. DONG, M. URUICHI and Y. YAMASHITA, "Spectroscopic Studies on BDNT Having a Property of One-Step Two-Electron Oxidation: $BDNT^{0}$, $BDNT^{1+}$, and $BDNT^{2+}$", *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **284**, 223-234 (1996).

E. FRANKEVICH, A.A. ZAKHIDOV, K. YOSHINO, Y. MARUYAMA and K. YAKUSHI, "Photoconductivity of Poly(2,5-diheptyloxy-p-phenylene vinylene) in the Air Atmosphere. Magnetic Field Effect and mechanism of Generation and Recombination of Charge Carriers", *Phys. Rev B*, **53**, 4498-4508 (1996-II).

M.E. KOZLOV, V.A. IVANOV and K. YAKUSHI, "A key to the understanding of electron-molecular vibration coupling in organic charge-transfer salts: application of the two-side Hubbard model", *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 1011-1020 (1996).

N. YAMASAKI, H. ARAKI, A.A. ZAKHIDOV, H. MISOBUCHI, K. YAKUSHI and K. YOSHINO, "A new metastable superconductor $Li_2Na_2N_yC_{60}$ prepared from azides", *Physica C*, **259** 265-270 (1996).

H. ARAKI, A.A. ZAKHIDOV, K. TADA, K. YAKUSHI and K. YOSHINO, "Alkali-metal doping of fullerene-conducting polymer composite: evolution of conductivity and ESR", *Synthetic Metals*, **77**, 291-297 (1996).

K. YOSHINO, A.A. ZAKHIDOV, H. KAJII, H. ARAKI, K. TADA, T. NOGUCHI, T. OHNISHI and K. YAKUSHI, "Multiphase superconductivity in OO-PPV/C60 composite doped by alkali metals. Low-field microwave absorption and SQUID study", *Physica C*, **264** 161-171 (1996).

A. OTSUKA, G. SAITO, T. TERAMOTO, Y. SUGITAa, T. BAN, A.A. ZAKHIDOV and K. YAKUSHI, "A Search for New Ionic C_{60} Charge Transfer Complexes", *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **284**, 345-356 (1996).

T. YOKOYAMA, K. KOBAYASHI, T. OHTA and A. UGAWA, "Anharmonic Interatomic Potentials of Diatomic and Linear Triatomic Molecules Studied by Extended X-ray-Absorption Fine Structure", *Phys. Rev.* **B53**, 6111 (1996).

B-3) 総説，著書

薬師久弥， 「π-d 電子系の研究動向」応用物理 64, 985-994 (1995)

薬師久弥， 「分子性導体研究の源流をたどる」化学 51, 26-29 (1996)

K. YAKUSHI, "π-d Interaction in Phthalocyanine Conductors", "*Materials and Measurements in Molecular Eelectronics*" ed. by K. Kajimura and S. Kuroda, Springer Proceedings in Physics 81, 203-216 (1996)

B-4)招待講演

K. YAKUSHI, "π-d interaction in phthalocyanine conductors", 5-th China-Japan Joint Symposium (Zheiiang Univ. of Hangzhou) Oct. 5-10, (1995).

K. YAKUSHI, "One-dimensional phthalocyanine conductors under high pressure", PHTHALOCYANINE SYMPOSIUM, 1995 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, (Honolulu, Hawai) Dec. 17-22 (1995).

K. YAKUSHI, "π-d interaction in phthalocyanine conductors", International Symposium on Materials and Measurements Molecular Electronics (M^3E '96), (Tsukuba) Feb. 6-8 (1996).

K. YAKUSHI, "π-d interaction in phthalocyanine conductors ", Anglo-Japanese Meeting under the Programme "Molecular Materials for Electronics" and "Molecular Materials for NLO Devices and Thin Films" (Royal Institution of the Great Britain) Feb. 26 (1996).

K. YAKUSHI, "One-dimensional phthalocyanine conductors under high pressure", Nagoya Conference, Perspectives in Organic-inorganic Hybrid Solids — Molecular Design and Functionality —" , (Nagoya Univ.) March, 14-16 (1996).

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- ）

日本化学会職域代表（1995- ）

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）

B-7) 他大学での講義

東京大学理学系研究科　1995年10月

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孤立スピンと伝導電子の共存という重い電子系と共通の問題を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り，従来有機物で困難であったバンド充満率の圧力による制御を可能にした。困難な実験をともなうが，高圧下の構造・磁性・伝導性の観点からの研究を推進したい。(2) は全く新しい発想に基づくもので，現在はその探査の途上にある。この状態は (1:1) の導電性電荷移動塩において最も顕著に見出されるので，ここ暫くは様々な (1:1) の導電性電荷移動塩の基礎物性を調べてゆきたいと考えている。

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) まず，この系での金属—非金属転移に関係して，κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu[N(CN)$_2$]Br の重水素体が超伝導相と非金属相の正に境界上に位置することを磁化率と NMR の測定から明らかにした。非金属相側では，κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu[N(CN)$_2$]Cl と同じように低温でスピンキャントを伴う反強磁性転移を示す。転移温度は 15 K と Cl 塩(27K)に比べて低い。磁気モーメントも Cl 塩より小さい値が示唆されているが，磁気構造は Cl 塩と同様格子と整合の関係にある。さらに 80K 付近を急冷することにより超伝導相が非金属磁気秩序相に変わることを見出した。これは，モット転移近傍にある超伝導相に対する乱れの効果として注目される。この急冷は，磁気秩序相側に対して，磁気モーメントの不均一な分布とスピンキャントの抑制をもたらす。

b) 超伝導の発現機構に直結する電子対の対称性を明らかにするために，κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu[N(CN)$_2$]Br について NMR 緩和率と電子比熱の温度依存性を測定し，d 波的な電子対形成を支持する実験結果を得てきたが，今年度はさらに電子比熱の磁場依存性を調べた。磁場によって復活する電子比熱係数は，s 波超伝導に期待される磁場に対する線形依存性を示さずに，むしろ，d 波超伝導（厳密にはギャップに line nodes のある超伝導）に期待される磁場の 1/2 乗依存性に従う結果を得た。擬 2 次元超伝導体 κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu(NCS)$_2$ におけるボルテックスの状態を調べるために，BEDT-TTF 分子内で伝導電子との超微細結合が大きい中心炭素サイトと，きわめて小さい両端のエチレン基の炭素サイトおよび水素サイトで，核スピン一格子緩和率を測定した。結果の解析から，超伝導状態での緩和率を準粒子による寄与とボルテックスからの寄与に分離することに初めて成功し，後者の周波数依存性についての知見を得た。

c) 昨年までの研究で，(DI-DCNQI)$_2$Ag がスピンギャップのない絶縁体であり，10K 以下で反強磁性転移を示すことを明らかにした。この系は Ag が閉殻+1 価であるから d 電子の絡まない純粋パイ電子系とみなせる。DCNQI 系全体における絶縁体としては，(DMe-DCNQI)$_2$Ag のように上と同じ純粋パイ電子系ながら低温で非磁性化するパイエルス系と，加圧下(DMe-DCNQI)$_2$Cu のようにパイ電子系でのパイエルス転移と d 電子系でのモット絶縁が同時に起こり局在スピンが d 電子系のみに残るパイエルス-モット絶縁体の 2 種類が現在までに知られている。したがって，(DI-DCNQI)$_2$Ag に見出された電子状態は，第 3 の新しいタイプの絶縁体である。今年度，^{13}C-NMR のスペクトルの観察から，約 200 K付近で $4k_F$ ＣＤＷが 3 次元秩序相として起こること，さらに，この $4k_F$ ＣＤＷが，DCNQI 分子のダイマー化のようなボンド型ではなく電荷密度が DCNQI 分子一枚おきに疎密となるウィグナー結晶的なサイト型のＣＤＷであることが分かった。

B-1) 学術論文

A. KAWAMOTO, K. MIYAGAWA, Y. NAKAZAWA and K. KANODA, "Reply to the Comments", *Phys. Rev. Lett.* **75,** 3587 (1995).

Y. NAKAZAWA, A. KAWAMOTO and K. KANODA, "Characterization of Low-Temperature Electronic States of the Organic Conductors α-(BEDT-TTF)$_2$*M*Hg(SCN)$_4$ (*M*=K, Rb, and NH_4) by Specific-Heat Measurements", *Phys. Rev. B* **52,** 12890 (1995).

A. KAWAMOTO, K. MIYAGAWA, Y. NAKAZAWA and K. KANODA, "Electron Correlation in κ-Phase Family of BEDT-TTF Compounds studied by ^{13}C-NMR", *Phys. Rev. B* **52,** 15522 (1995).

H. TANIGUCHI, H. SATO, Y. NAKAZAWA and K. KANODA, "Highly Anisotropic Superconductivity in the Layered Organic conductor, α-(BEDT-TTF)$_2$$NH_4$Hg(SCN)$_4$", *Phys. Rev. B* **53,** R8879 (1996).

Y. NAKAZAWA and K. KANODA, "Electronic Structure of Insulating Salts of κ-(BEDT-TTF)$_2$X Family Studied by Low Temperature Specific Heat Measurements", *Phys. Rev. B* **53,** R8875 (1996).

K. KANODA, K. MIYAGAWA, A. KAWAMOTO and Y. NAKAZAWA, "NMR Relaxation Rate in the Superconducting State of the Organic Conductor, κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu[N(CN)$_2$]Br", *Phys. Rev. B* **54,** 76 (1996).

V.A. IVANOV and K. KANODA, "Strong Electron Correlation in κ-(BEDT-TTF)$_2$X Salts", *Physica C* **268,** 205-215 (1996).

B-2) 国際会議プロシーディングス

V.A. IVANOV and K. KANODA, "κ-BEDT-TTF Salts as Layered Correlated Electron Systems", *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **285,** 211-216 (1996).

K. HIRAKI and K. KANODA, "Ground States of DCNQI-Metal Complexes, (R_1,R_2-DCNQI)$_2$M; (R_1, R_2=CH_3, I, M=Ag, Cu, $Li_{1-x}Cu_x$)", *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **285,** 157-162 (1996).

B-4) 招待講演

鹿野田一司, "超伝導状態のタイプ", 有機エレクトロニクス材料研究会第 74 回講演会, 東京, 5 月, 1995 年.

K. KANODA, "NMR Study of Organic Superconductors", The 5th China-Japan Joint Symposium on Conduction and Photo-conduction in Organic Solids and Related Phenomena, Hangzhou, China, Oct., 1995.

K. KANODA, "Molecular Arrangement and Metal-Insulator Transition", The Vth International Conference on Intelligent Molecular Systems with Controlled Functionality, Hayama, Japan, Nov. 1995.

鹿野田一司, "有機導体におけるモット転移", 重点領域研究「モット転移近傍の異常金属相」公開講演会, 東京, 1 月, 1996 年

鹿野田一司, "κ-(BEDT-TTF)$_2$X 系の電子相関と金属絶縁体転移", 日本物理学会分子性固体有機導体分科シンポジウム, 金沢, 3 月, 1996 年

鹿野田一司, "二次元有機系(BEDT-TTF)$_2$X の磁性と超伝導 -----^{13}C NMR-----", 日本物理学会磁気共鳴分科シンポジウム, 金沢, 3 月, 1996 年

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)

日本物理学会　東海支部委員 (1994-1996)

B-7) 他大学での講義

名古屋大学理学部，「物性化学」，1995 年 4 月～9 月

C)　研究活動の課題と展望

a) 金属相から非金属相までを含む一連の擬 2 次元分子性導体$(BEDT\text{-}TTF)_2X$ は，多くの場合，2 次元伝導面内のユニットセルに 4 つの BEDT-TTF 分子を含む。その中でも，2 量体化の強い物質群における金属ー絶縁体転移は，バンドの 1/2 フィリング化のもとでのモット転移として理解できることを現在までの研究で明らかにしてきた。しかしながら，非二量体系においても，絶縁体は存在し，その起源は明らかでない。今後，この点を明らかにすべく，$(BEDT\text{-}TTF)_2X$ 非二量体系における分子間の電荷移動と絶縁体化との関係に特に注目し，NMR ナイトシフトを調べる。これにより，分子性導体における金属ー絶縁体転移の包括的な理解に寄与することを目指す。

b) 超伝導の対称性については，対象とする物質をさらに広げ，従来同様 NMR と比熱測定でより系統的な研究へと展開を図り，BEDT-TTF 系全般での超伝導の発現機構の鍵を探る。垂直磁場下にある $BEDT\text{-}TTF_2X$ のボルテックス系の集団動力学については，従来の電気抵抗と NMR-T_1 の測定に加え，T_2 の測定を行うことにより，ボルテックスの面内と面間の動的相関をさらに深く調べ，現在議論の的になっている磁場—温度相図を完成させる。

c) 前年同様，磁気的絶縁体$(DI\text{-}DCNQI)_2Ag$ と非磁気的パイエルス絶縁体$(DMe\text{-}DCNQI)_2Li$ 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。さらに，DCNQI 分子として，DMe-DCNQI と DI-DCNQI に加え，DBr-DCNQI についても，Ag 塩，Li 塩とその部分置換塩を作成し，電子状態を NMR で調べる。そして，これら多様な電子相を，オンサイトクーロンエネルギー，一次元鎖内及び鎖間の移動積分，鎖 p 軌道と金属イオン軌道との混成の度合い，バンドフィリング及び乱れをパラメーターとして統一的に理解することを目指す。

分子集団動力学研究部門

小　林　速　男（教授）

A-1) 専門領域：固体化学

A-2) 研究課題

a) 新規分子性超伝導体の相図

b) 二次元π金属中の磁性イオン間相互作用

c) 磁性イオンを持つ有機超伝導体

d) 極低温X線結晶構造解析

e) 新規分子性伝導体の合成的研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 最近，一連の有機超伝導体の系列，λ-$BETS_2Ga(X_zY_{4-z})$ (X,Y=F, Cl, Br; 0<z<4)を見い出した。アニオンの組成を連続的に変える事が可能であり，結晶格子体積がX，Y，zの変化とともに連続的に変化し，それにともなって超伝導転移温度，電気的，磁気的振舞いが連続的に変わる。化学的手段によりこれほど連続的，広範囲に物性を制御し得る有機超伝導体は他になく，超伝導転移を系統的に研究することを可能としている。超伝導相に接して反強磁性相ではなく非磁気的絶縁相が存在する事が確かめられた。極めて多くの研究が蓄積されているκ型BEDT-TTF系以外で始めて同様に詳しい相図を求めることが可能な二次元π金属系が得られた事は二次元π伝導系の統一的理解に重要であろう。

b) 低温におけるπ金属電子，磁性イオン間相互作用が注目されるようになった。現実には局在磁気モーメントと金属電子が低温まで共存する系は極めて少なく，現在，注目されている系の一つはλ-$BETS_2FeCl_4$である。この系は反強磁性転移とカップルした特異的な金属-絶縁体転移を示す。磁気測定，高圧下での磁気抵抗測定を行った。強相関π電子系の絶縁化磁気転移と高スピン $FeCl_4$ アニオンの反強性転移との結合が特異性の起源であると予想される。磁性イオン間相互作用の機構の解明は今後の大きな課題である。

c) これまで詳細な研究が蓄積された代表的有機π電子超伝導体であるTMTSF系とκ-BEDT-TTF系では電荷密度波絶縁相と超伝導相が互いに接して存在している。これらは単一π電子系の性質である。λ-$BETS_2(Ga_xFe_{1-x})Cl_4$では従来の系とは異なり，超伝導を担うπ有機層と磁性を担う混合アニオン層が独立に存在する。超伝導は0<x<0.5の広範囲で観測されるが，超伝導転移の直上の温度でFeイオン間に反強磁性相互作用が働いていることが確かめられた。超伝導と磁気秩序相が共存する新たな分子性金属の開拓の可能性を示唆するもので，このような系を実現することは今後の分子性結晶の物性開拓の目標となるであろう。

d) 最近まで10K程度の低温でX線構造解析が可能な環境は殆ど存在しなかった。3年ほど以前に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，状況は急速に変わりつつある。今年度，新たに装置を立ち上げつつある状況であるが，ヘリウムフロータイプ低温装置を装着し，5.5Kまでの構造解析が可能となった。このような低温でのX線構造研究は我々のタイプの装置でないと困難であろうと予想している。既に5.5Kで二次元金属 $Ni(dmit)_2$ やBETS伝導体等で構

造を決定しており，通常の構造解析としては十分の精度を得たが，更に強度データの精度向上を目指し，改善の工夫を進めている。

e) 現在，新たな分子性伝導体の構成分子の合成的研究を開始した段階である。目標とする分子は種々存在し，新規中性ラジカル分子を含む幾つかの試みがなされた。また，金属錯体分子については，ロシアのグループが多くの伝導体を報告している $M(ddds)_2$ の類似，新規分子 $M(ddds)_2$(M=Ni,Au)の合成を行った。dddt 配位子の S を Se に交換した配位子を持つ分子である。多くのアンモニウ塩，中性分子の結晶を作成し，結晶構造等を調べた。今後部分酸化塩や有機 π ドナー分子との錯体の作成を試みる。

B-1) 学術論文

A. KOBAYASHI, A. SATO, K. KAWANO, T. NAITO, H. KOBAYASHI and T. WATANABE, "Origin of the Resistivity Anomalies of (EDT-TTF)[$M(dmit)_2$]", *J. Mater. Chem.*, **5**, 1671 (1995).

H. KOBAYASHI, H. TOMITA, T.NAITO, A. KOBAYASHI, F. SAKAI, T. WATANABE and P. CASSOUX, "New BETS Conductors with Magnetic Anions", *J. Am. Chem. Soc.*, **118**, 368 (1996).

M. INOKUCHI, H. TAJIMA, T. OHTA, H. KURODA, A. KOBAYASHI, A. SATO, T. NAITO and H. KOBAYASHI, "Electrical Resistivity under High Pressure and Upper Critical Magnetic Field of the Molecular Superconductor α-(EDT-TTF)[$Ni(dmit)_2$]", *J. Phys. Soc. Jpn.*, **65**, 538 (1996).

H. TAJIMA, A. KOBAYASHI, Y. OHTA, A. SATO, T. NAITO and H. KOBAYASHI, "Meissner and Diamagnetic Shielding Efect of α-EDT-TTF[$Ni(dmit)_2$]", *Syn. Met.*, **79,** 141 (1996).

M. TAKAHASHI, M. TASKEDA, K. AWAGA, Y. MARUYAMA, A. KOBAYASHI, H. KOBAYASHI, S, SCHENK, N. ROBERTSON and A.E. UNDERHILL, "Mossbauer Spectroscopic Study of the Reentrant Phase Transitions in TBA[$Fe(tdas)_2$]", *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **286**, 77 (1996).

H. TAJIMA, A. KOBAYASHI, T. NAITO and H. KOBAYASHI, "Shubnikov-de Haas Effect and Angular-Dependent Magnetoresistance Oscillation of κ-$(BETS)_2GaCl_4$", *Solid State Commun.*, **48**, 755 (1996).

T. NAITO, H. KOBAYASHI, A. KOBAYASHI and A.E. UNDERHILL, "New Synthetic Metals Based on a Thiadiazole Network", *J. C. S. Chem. Commun.*, **1996**, 521.

B-2) 国際会議のプロシーディングス

H. KOBAYASHI, A. KOBAYASHI, T. NAITO, M. TOKUMOTO, L. BROSSARD, N. KUSHU and P. CASSOUX, "Molecular Metals Based on BETS and Magnetic Anions-λ- and κ-$BETS_2FeCl_4$ and θ-$BETS_4Cu_2Cl_6$", *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **285**, 11, 1996

N. KUSH, C. FAULMANN, P. CASSOUX, L. VALADE, I. MALFANT, J. -P. LEGROS, C. BOWLAS, A. ERRAMI, A. KOBAYASHI and H. KOBAYASHI, "Molecular Compounds Exhibiting Coupled Conducting and Magnetic Properties and Based on $(Cation)_n[M(dmit)_2]_2$ and $(BETS)_2$(anion) Salts", *Mol. Cryst, Liq. Cryst.*, **284**, 247 (1996).

A.KOBAYASHI, T. SAITO, T. NAITO and H. KOBAYASHI, "$M(dmit)_2$ and $M(dmise)_2$ (M=Ni, Pd) Compounds with One-, Two- and Three Dimensional Metallic Bands", *Mol. Cryst, Liq. Cryst.*, **284**, 85, 1996.

H. KOBAYASHI, A. SATO, T. NAITO, K. KAWANO, A. KOBAYASHI, H. TANAKA, T. SAITO, M. TOKOMOTO, L. BROSSARD and P. CASSOUX, " New BETS Superconductors and Metals with tetrahadral Non-Magnetic and Magnetic

Anions", *Mol. Cryst, Liq. Cryst.*, **284**, 85, 1996.

B-3) 総説，著書

小林昭子，小林速男，「イメ-ジングプレ-ト低温 X 線構造解析装置とその分子性金属結晶への応用」，固体物理，**31**, 35 (1996).

小林速男，小林昭子，徳本圓，「磁性イオンを対イオンとする有機分子性金属 $BETS_2FeCl_4$」，固体物理，**31**, 653 (1996).

B-4) 招待講演

H. KOBAYASHI, A. KOBAYASHI, H. TANAKA, T. SAITO, M.TOKUMOTO, L. BROSSARD and P. Cassoux, "New BETS Superconductors and Metals with Tetrahedral Non-Magnetic and Magnetic anions", Hawaii, December, 1995.

A.KOBAYASHI, T. SAITO, T. NAITO and H. KOBAYASHI, "$M(dmit)_2$ and $M(dmise)_2$ (M=Ni, Pd) Compounds with One-, Two- and Three Dimensional Metallic Bands", Hawaii, December, 1995.

H. KOBAYASHI, A. KOBAYASHI, T. NAITO, M. TOKUMOTO, L. BROSSARD, N. KUSHU and P. CASSOUX, "Molecular Metals Based on BETS and Magnetic Anions-λ- and κ-$BETS_2FeCl_4$ and q-$BETS_4Cu_2Cl_6$", Nagoya, March, 1996.

H. TAJIMA, A. KOBAYASHI, T. NAITO and H. KOBAYASHI, "Shubnikov-de Haas Effect and Angular Dependent Magnetoresistance Oscillation of κ-$BETS_2GaCl_4$", Utah, July, 1996.

P. CASSOUX, K. DUNBAR, O. DYACHENKO, C. FAULMABNN, H. KOBAYASHI and A. KOBAYASHI, "Interplay of Conductivity and Magnetism in Organic-Inorganic Compounds", Utah, July, 1996.

H. TAJIMA, A. TAKAHASHI, H. KURODA, A. KOBAYASHI and H. KOBAYASHI, "Magnetic Transition in $Me_4N[Ni(dmit)_2]_2$", Utah, July, 1996.

B-6) 学会及び社会活動

学会誌編集委員

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)

B-7) 他大学での講義

東京大学理学系研究科化学専攻　化学結晶学（1995 年前期）

東京工業大学理学部化学科　物理化学特別講義（1995 年前期）

C)　研究活動の課題と展望

(1)分子性超伝導体の超伝導機構等の解明は停滞している。物性化学の立場としてはこれまで物質開拓研究の過程で蓄積された分子設計の知識を基に，新たな飛躍をもたらし得る物質群を生み出す事が現在の最重要課題である。二次元 π 金属系に取り込まれた磁性イオンの振る舞い等，物性的観点に立つ新らたな舞台設定を図ることも重要であろう。(2)低温 X 線結晶構造解析の可能な温度範囲は 5.5K まで引き下げられ，構造研究が物性研究に寄与し得る範囲は大幅に拡大した。高圧下の単結晶構造研究についても早急に改善を図る必要がある。

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

d)新しい有機電荷移動錯体の物性開発

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 12 Tm^{-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。この技術を，双極子デカップリング下での希薄スピンの NMR へと応用すべく，開発的研究を展開中である。

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。更に，分子の回転ポテンシャルにおける非対称性と集団における誘電秩序との関係を中心に，乱れた系における誘電物性の微視的立場からの解明に取り組んでいる。

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，p 電子系のホスト格子，即ちグラファイト層間や C_{60} 格子間に挿入された時，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-グラファイト及びナトリウム-水素-C_{60} という，二種の（次元性の異なる）3 元化合物について，^{13}C，^{1}H，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 核の電場勾配テンソル，及び各原子種の運動性などを定量的に明らかにした。

d) 有機電荷移動錯体の新しい電子物性を開拓すべく，化学修飾によって電子受容体の電子親和力や構造を調節した新しい BEDT-TTF 錯体を系統的に合成し，その構造–物性相関を検討した。従来型の錯体集合様式に加えて，電子供与体分子のラジカルが梯子状に配列する結晶構造を実現した。

B-1) 学術論文

H. OGATA, S. MIYAJIMA, K. MATSUTSUJI and T. ENOKI, "NMR Study of Sodium-Hydrogen-Graphite Ternary Intercalation Compound", *J. Phys. Chem. Solids*, **57**, 703-706 (1996).

T. NAKAI and D. KUWAHARA, "Spinning Sideband Summation for Quadrupole MAS NMR Spectra Using a Magic-Angle Turning Technique", *Chem. Phys. Lett.*, **249**, 205-209 (1996).

H. GOTO, T. FUJINAWA, H. ASAHI, T. INABE, H. OGATA, S. MIYAJIMA and Y. MARUYAMA, "Crystal Structures and Physical Properties of 1,6-Diaminopyrene-*p*-Chloranil (DAP-CHL) Charge Transfer Complex. Two Polymorphs and their Unusual Electrical Properties", *Bull Chem. Soc. Jpn.*, **69**, 85-93 (1996).

Y.S. CHOI, J.J. KIM and S. MIYAJIMA, "Diffusive Loss of Surface Adatoms and Surface Enhanced Raman Scattering Intensity"., *Chem. Phys. Lett.*, **255**, 45-48 (1996).

Y.H. KIM, B.G. KIM, J.J. KIM, T. MOCHIDA and S. MIYAJIMA, "Dimensionality Crossover and the Nonlinear Dielectric Response in Betaine Phosphate/Arsenate Mixed Crystals", *J. Phys. Condensed Matter*, **8**, 6095-6103 (1996).

D. KUWAHARA and T. NAKAI, "Spinning-Sideband Suppression in DOR NMR Spectra Using a Magic-Angle Turning Technique", *Chem. Phys. Lett.*, **260**, 249-252 (1996).

O. OISHI and S. MIYAJIMA, "New PFG-NMR Spectrometer with a Rotatable Quadrupole Coil for the Measurement of Anisotropic Self-Diffusion Coefficient Tensor". *J. Magn. Reson. Ser. A*, **123**, 64-71 (1996).

E. FRANKEVICH, Y. MARUYAMA and H. OGATA, "Laser Pulse Induced Transient Photoconductivity of C_{70} Single Crystal", *J. Phys. Chem. Solids*, **57** 483-494 (1996).

K. NISHI, H. SEKIYA, H. HAMABE, Y. NICHIMURA, T. MOCHIDA and T. SUGAWARA, "Fluorescence Excitation Spectra of Jet-Cooled 9-Hydroxyphenalenone Derivatives. Effects of Symmetrical Substitution on Deuterium Atom Tunneling", *Chem. Phys. Lett.*, **257**, 499-502 (1996).

B-3) 総説，著書

中井利仁，「双極子結合がもたらす固体 NMR の新局面－同種 2 スピン結合系を例として－」化学と工業，第 49 巻 2 号 115-118（1996）.

宮島清一，大石修，「複雑系の空間ダイナミクスと物質構造－パルス磁場勾配スピンエコーNMR の進歩－」 固体物理 第 31 巻 12 号 947-956（1996）.

B-4) 招待講演

S. MIYAJIMA, "Competition and Frustration in Doubly Reentrant Liquid Crystal", National Meeting of the Korean Physical Society (October, 1995, Taejon, Korea)

S. MIYAJIMA, "High Resolution ^{13}C NMR Study on the Antiferroelectric Chiral Liquid Crystal MHPOBC", Physics Department Seminar, Korea Advanced Institute for Science and Technology (October, 1995, Taejon, Korea)

S. MIYAJIMA, "Competing Interaction in Doubly Reentrant Liquid Crystals", Physics Department Seminar, Seoul National University (October, 1995, Seoul, Korea)

S. MIYAJIMA, "Development of Pulsed Field Gradient NMR Spectroscopy for Slow and Anisotropic Translational Dynamics", Physics Department Seminar, Korea University (October, 1995, Seoul, Korea)

S. MIYAJIMA, "Alkali-Hydrogen-Graphite Intercalation Compounds as Novel Electronic Systems", Seminar, Research Center for Theoretical Physics, Seoul National University (October, 1995, Seoul, Korea)

S. MIYAJIMA, "Competition and Frustration in Doubly Reentrant Liquid Crystal", Joint Seminar, Physics Department and Research Center for Dielectric and Advanced Matter Physics, Pusan National University (October, 1995 Pusan, Korea)

S. MIYAJIMA, "Development of Pulsed Field Gradient NMR Spectroscopy for Slow and Anisotropic Translational Dynamics", Physics Department Seminar, Chonbook National University (October, 1995, Chonju, Korea)

中井利仁，「反強誘電性液晶の分子構造及び分子運動上の特質－^{13}C NMR より－」分子研研究会「液晶の分子科学」（1995 年 11 月，岡崎）

宮島清一，「分子間の誘電秩序と分子内の回転秩序との競合がもたらす相転移」分子研研究会「液晶の分子科学」（1995年11月，岡崎）

宮島清一，「分子間の誘電秩序と分子内の回転秩序との競合がもたらす相転移」「固体分子のダイナミックスと構造－物性の相関」研究会（1996年1月，東京）

宮島清一，「空間ダイナミクスと物質構造－パルス磁場勾配 NMR の新しい展開－」第 75 回東海高分子講演会（1996年4月，岐阜）

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-）

学会の組織委員

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）

第20回液晶討論会実行委員（1993-1994）

B-7) 他大学での講義

宮島清一，「分子情報論」名古屋大学情報文化学部　1996年9月

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。実験技術の開発の面では，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 相関領域研究系

相関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) 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

c) ペルオキソ－Fe(III)ポルフィリン錯体の合成及び反応性に関する研究

d) 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と人工ペルオキシゲナーゼの設計

e) 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)ポルフィリン錯体の反応性を詳しく検討することで，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) 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，複数の中間体を通っ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。

c) シトクローム P-450 が触媒する反応の中に，ペルオキソ－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，ペルオキソ中間体を観測することすら出来ないので，その合成モデル系を用いて，ペルオキソ中間体の反応性に関する研究を行っている。ペルオキソ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。

d) 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 O=Fe(IV)ポルフィリンπカチオンラジカル（通常 compound I と呼ばれる）を選択的に与えるのに対し，後者は，反応性の低い O=Fe(IV)ポルフィリン（comppound 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，反応中心を構成するヘムの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 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。更に，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い，ペルオキシダーゼに匹敵する高い酸素添加活性を有すると同時に，生成物に 80%以上の不斉を導入する人工酵素系を構築することに成功している。

e) 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ことが出来ず，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素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た。具体的には，西洋ワサビペルオキシダーゼの蛋白表面をポリエチレングリコールで修飾することでトルエンやベンゼンに可溶な酵素を調整した。過酸との反応をトルエン中で検討した結果，水溶液系で見いだされている全ての反応中間体の直接観測に成功した。溶媒をクロロベンゼンに代えることで，より低温下で反応を行うことが可能となり，不安定化学種の寿命が数十倍になること最近見いだし，現在，不安定化学種の精密なキャラクタリゼーションを検討中である。

B-1) 学術論文

S. OZAWA, E. SAKAMOTO, T. ICHIKAWA, Y. WATANABE and I. MORISHIMA, "Model Studies of Nitrosyl Intermediates in the Catalytic Cycle of Dissimilatory Nitrite Reductases," *Inorg. Chem.* **34**, 6362 (1995).

T. MATSUI, S. NAGANO, K. ISHIMORI, Y. WATANABE and I. MORISHIMA, "Preparation and Reactions of Myoglobin Mutants Bearing both Proximal Cysteine Ligand and Hydrophobic Distal Cavity: Protein Models for the Active Site of P-450," *Biochemistry* **35**, 13118 (1996).

S. OZAKI, T. MATSUI and Y. WATANABE, "Conversion of Myoglobin into a Highly Stereospecific Peroxygenase by the L29H/H64L Mutation," *J. Am. Chem. Soc.* **118**, 9784 (1996).

S. OGO, H. CHEN, M.M. OLMSTEAD and R.H. FISH, "Aqueous Organometallic Chemistry. 2. ^{1}H NMR Spectroscopic, Synthetic, and Structural Study of the Chemo- and Diastereoselective Reactions of $[Cp^*Rh(\eta^1\text{-}H_2O)_3]^{2+}$ with Nitrogen Ligands as a Function of pH," *Organometallics* **15,** 2009 (1996).

H. CHEN, S. OGO and R.H. FISH, "Bioorganometallic Chemistry. 9. The Molecular Recognition of Aromatic and Aliphatic Amino Acids and Substituted Aromatic and Aliphatic Carboxylic Acid Guests with Supramolecular (η^5-Pentamethylcyclopentadienyl)rhodium-Nucleobase, Nucleoside, and Nucleotide Cyclic Trimer Hosts via Non-Covalent π-π and Hydrophobic Interactions in Water: Steric, Electronic, and Conformational Parameters," *J. Am. Chem. Soc.* **118,** 4993 (1996).

S. OZAKI and P.R. ORTIZ DE MONTELLANO, "Molecular Engineering of Horseradish Peroxidase: Thioether Sulfoxidation and Styrene Epoxidation by Phe-41 Leucine and Threonine Mutants," *J. Am. Chem. Soc.* **117,** 7056 (1995).

C.A. ROESSNER, J.B. SPENCER, S. OZAKI, C. MIN, B.P. ATSHAVES, P. NAYAR, N. ANOUSIS, N.J.

STOLOWICH, M.T. HOLDERMAN and A.I. SCOTT, "Overexpression in *Escherichia coli* of 12 Vitamin B12 Biosynthetic Enzymes," *Protein Expression and Purification.* **16,** 155 (1995).

P.R. ORTIZ DE MONTELLANO, S. OZAKI, S.L. NEWMYER, V.P. MILLER and C. HARTMANN, "Structural Determination of the Catalytic Activities of Peroxidases," *Biochem. Soc. Trans.* **23,** 223 (1995).

B-2) 国際学会のプロシーディングス

S. OZAKI, T. MATSUI and Y. WATANABE, "Molecular Engineering of Myoglobin: Conversion of Myoglobin into Peroxidase," in *Peroxidases, Biochemistry and Physiology IV*; C. Obinger, U. Burner, C. Ebermann, C. Pennel, and H. Greppin Eds., University of Geneva, p.52-58 (1996).

B-4) 招待講演

Y. WATANABE, "High Valent Iron Porphyrin Complexes," 1996 Conference on Oxygen Intermediate in Nonheme Metallobiochemistry, Minneapolis (U.S.A.), June 1996.

Y. WATANABE, "Roles of Amino Acid Residues Around Heme on the Formation of High Valent Intermediates," 11th International Symposium on Microsomes and Drug Oxidations, Los Angeles (U.S.A.), July 1996.

渡辺芳人，「ヘム酵素の電子状態と反応機構」，理研シンポジウム・MR サイエンス'95，和光，1995 年 12 月.

渡辺芳人，「ペルオキシダーゼの酸素活性化におけるプロトンネットワークの役割」，日本化学会第 70 春季年会特別企画：金属化合物による生体機能の制御，横浜，1996 年 3 月.

渡辺芳人，「鉄ポルフィリン錯体が生成する酸化活性種の分子設計」，日本化学会第 71 秋季年会シンポジウム：次世代合成化学の鍵・触媒化学の最前線，横浜，1996 年 10 月.

B-6) 学会及び社会活動

学協会役員，委員

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

富山大学工学部（1996 年 2 月 9 月）

大阪大学大学院工学研究科（1996 年 5 月）

群馬大学工学部（1996 年 11 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来た。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，同様な化学種の直接観測がを通じて活性部位を構成するアミノ酸の酵素活性発現における役割を分子レベルで解明し，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，人工的な活性部位を導入した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の合成研究

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示し，一次元メタ磁性体については磁気異方性に関する詳細な知見を得ることができた。また46 Kの転移温度を持つ三次元磁性体についても磁気異方性に関する知見を得た。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の合成研究：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，およびニトロニルニトロキシド基を持つビラジカルを合成し，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。この類縁体である，イミノニトロキシド基とニトロキシド基を有するビラジカルも合成し，構造および分子内強磁性的相互作用についても詳細に調べた。

B-1) 学術論文

K. INOUE, T. HAYAMIZU and H. IWAMURA, "High-Spin polynitroxide Radicals as Versatile Bridging Ligands for High Tc Transition Metal Ligands", *Mol. Clyst. Liq. Cryst.*, **273**, 67 (1995).

K. INOUE and H. IWAMURA, "Spontaneous Magnetization in a 2 : 3 Complex Formed by 3,4',5-Tris(*N*-oxy-*tert*-butylamino)biphenyl and Manganese(II) bis(hexafluoroacetylacetonate)", *Adv. Mater.*, **8**, 73 (1996).

K. INOUE, T. HAYAMIZU, H. IWAMURA, D. HASHIZUME and Y. OHASHI, "Assemblage of the Electron Spins of the Organic Trinitroxide Radical with a Quartet Ground State by Means of Complexation with Paramagnetic Transition Metal Complexes. A Molecule-Based Magnet with Three-Dimensional Structure and High T_C of 46 K", *J. Am. Chem. Soc.*, **118**, 1803 (1996).

K. MATSUDA, N. NAKAMURA, K. INOUE, N. KOGA and H. IWAMURA, "Design and Synthesis of a " Starburst "-Type Nonadiazo Compound and Magnetic Characterization of Its Photoproduct", *Chem. Euro. J.*, **2**, 259 (1996).

H. IWAMURA, K. INOUE and T. HAYAMIZU, "High-spin polynitroxide radicals as versatile bridging ligands for transition metal complexes with high ferri/ferromagnetic T_C", *Pure Appl. Chem.*, **68**, 243 (1996).

K. INOUE, and H. IWAMURA, "Magnetic Characterization of One-dimensional Molecule-based Metamagnet made of Mn(II)(hfac)$_2$ and 1,3-Bis(*N*-oxy-*tert*-butylamino)benzene", *Mol. Clyst. Liq. Cryst.*, **286**, 133 (1996).

J. OJIMA, N. HIRAIWA, S. KONDO, K. ASANO, C. SAKON, H. HIGUCHI. K. INOUE and G. YAMAMOTO, "Synthesis and properties of dimethano-bridged terradehydro[21]-, -[23]- and -[25] annulenones", *J. Chem. Soc. Perkin Trans*, 3027 (1995).

T. KAWAKAMI, A. ODA, W. MORI, K. YAMAGUCHI, K. INOUE and H. IWAMURA , "Theoretical Studies of the Ferromagnetic Intermolecular Interaction of *P*-Carboxylate Phenyl Nitronyl Nitroxide", *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **279**, 29 (1996)

K. MATSUDA, N. NAKAMURA, K. INOUE, N. KOGA and H. IWAMURA, "Toward Dendritic Two-Dimensonal Polycarbenes: Synthesis of 'Starburst'-Type Nona- and Dodecadiazo Compounds and Magnetic Study of their Photo-products", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **69**, 1483 (1996)

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. INOUE and H. IWAMURA, "Ferrimagnets Made by Assembling High-Spin Organic Polyradicals by Mean of Complexation with Magnetic Metal Ions. VII. One-Dimensional Chains Made by an Alternating Array Of Mn(II)$(Hfac)_2$ and 1,3-Bis(*N*-oxy-*tert*-butylamino)benzenes", *Proc., Mater. Res. Soc.*, **413**, 313 (1996)

B-3) 総説，著書

井上 克也，「高次元分子性フェリ磁性体」化学　4月号(1995)化学同人

井上 克也，「高スピンポリラジカルを配位子とする金属錯体の合成－高温分子強磁性体をめざして－」，化学と工業，49巻2号，119 (1996).

B-4) 招待講演

井上 克也，「高スピンポリニトロキシドラジカルを配位子とするマンガン錯体の次元性の制御とその磁性」　分子科学研究所研究会－π-d 複合電子系分子性固体の設計と新規物性（岡崎），1995年6月

K. INOUE and H. IWAMURA 'Hybrid Ferrimagnets Made by Self-Assemblage of Manganese(II) Bis(hexafluoroacetylacetonate) and High-Spin p-Conjugated Polynitroxide Radicals' N.A.T.O. Advanced Reaserch Workshop MAGNETISM: A SUPERMOLECULAR FUNCTION, (Carcans-Maubuisson, France), Sep., 1995

井上 克也，「 高スピンポリニトロキシドラジカルとマンガンイオンの Self-Assembly による高温分子性強磁性体の構築」，日本化学会第70春季年会（若い世代の特別講演会）（東京），1996年3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

分子クラスター研究部門（流動研究部門）

西　信　之（教授）*)

A-1) 専門領域：分子クラスターの構造，反応と電子状態。液体の不均一構造と機能。

A-2) 研究課題

a) 分子クラスターイオンにおける電荷共鳴相互作用と電荷移動ダイナミックス

b) 分子クラスターイオンの構造と光励起ダイナミックス

c) 液体中の分子クラスター形成による局所構造の発生

1. 液滴の断熱膨張によって分離したクラスターの質量分析法によるクラスター組成解析
2. X線回折による液体中のクラスター分子の動径分布測定
3. ラマン分光法による液体中での分子の集合構造解析

d) 分子および分子クラスターの振動励起状態とプロトン移動

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) サイズ選別されたイオンクラスターを長光路オクタポールイオントラップに閉じ込め，これに近赤外から紫外に至る広い波長範囲のレーザー光を照射し解離スペクトルを測定すると，励起によって吸収されたエネルギーが最終的には蒸発解離に費やされるため，実質的な吸収スペクトルの観測が可能である。ベンゼンの2量体から6量体までの陽イオンクラスターについてこの電子スペクトルを測定したところ，3量体が若干のずれを示したものの，4量体から6量体の電子スペクトルは2量体のそれと基本的には同一であった。即ち，電荷は2個のベンゼン分子の共鳴相互作用によって共有されており，まわりの分子はこの共鳴に対しては傍観者であることがわかった。しかし，蒸発中性分子のエネルギー分配を調べたところ，分子内振動がかなり励起されたままであることから，クラスター内部で次々と電荷が移動しイオン状態と中性分子状態とを交互に経験し，これが分子内振動励起を蒸発に至る長い時間保持している原因と考えられた。このような電荷共鳴による電荷の2分子への局在は，ベンゼンとナフタレンあるいはベンゼンとトルエンといった異種分子の2量体イオンにおいても見いだされ，電荷共鳴吸収帯および局在励起帯の位置と強度から局在化の割合が求められた。

更に，ベンゼン2量帯イオンの系に対してホールバーニング分光法を適用した結果，電荷共鳴吸収帯として見られた2本のバンドは異性体に依るものではなく，1種の2量帯イオンが示す本質的な遷移であり2量帯イオンの対称性が C_{2h} 以下に低下し，分子面の2軸が非等価となっている可能性が示唆された。

b) サイズ選別されたイオンクラスターの運動エネルギーを徐々に減速し，ほぼゼロになったところで不活性ガスとともに極低温基板上に蒸着固定し，積層し，フーリエ変換赤外分光によって振動スペクトルを観測し理論計算との対応によって安定構造を決定する装置を開発している。本装置の新しい点は，液体から分離したクラスターを定常的に蒸着できる点であり，イオン性の分子など気体としては分離できない物質のクラスターイオンあるいは分子イオンの固定が可能なことである。蒸着室までは5段の差動排気システムとなっており低沸点オイルや中性分子の混入を極力避ける工夫がなされている。蒸着試料室は分光器のセル室にそのまま挿入され，スペクトルの観測が行われる。この実験によって得られたスペクトルをもとに，オクタポールイオントラップを用いて，分子

場に影響されないフリーのイオンクラスターの吸収が高分解能で観測される。

一方，オクタポールイオントラップを用いたイオンクラスターの赤外解離スペクトル測定システムを完成させつつあるが，試験的にベンゼン3量体カチオンのC-H伸縮振動領域で測定を行ったところ，2940-3020cm^{-1}に複雑なバンド構造が観測された。中性ベンゼンで赤外活性なモードは1種類であることから，この構造の解析は面白そうである。基音励起状態から倍音および結合音準位への赤外-赤外二重共鳴実験によって更なる手がかりが得られるであろう。この手法は，プロトン付加水クラスターのプロトン移動の問題へ本格的に適用されるであろう。

c) 1. 水とアルコールの混合の問題をアルコールの疎水性の違いをパラメーターとして調べている。クラスターの分布を議論するときに，イオン化室で液滴の断熱膨張によって生じたクラスターを高質量領域まで強度が質量に依存しない電場磁場型の質量分析計を備えた新しい装置が開発された。これによって相対的なクラスターの分布や強度の比較が可能になった。水-メタノール，水-エタノール，水-プロパノールの系でクラスターの強度と水和数の混合比依存性を調べたところ，クラスターの強度が最も強くなるのは，混合のエンタルピー変化が最大になる濃度においてであること，また，この付近よりアルコールの濃度が低いところでは水の濃度の二次に比例していたのが，逆に高くなると水和数の変化が水の濃度の1次に比例した変化となる事が明らかになった。混合のエンタルピー変化が負で最大になるということは，予想されるとおり分子間結合の生成によるクラスターの増加である。このとき，メタノールは水だけの系とほぼ同様な結合様式を示すが，エタノールとイソプロパノールは結晶性の高次構造を取り，疎水性が高いn-プロパノールは逆ミセル的な集合構造をとることが示唆された。

2. 溶液は結晶のような連続的規則構造は取っていないが，X線回折によって得られた動径分布関数には結晶と同じ様な動径分布の規則性が現れることがある。これは，数～数十オングストロームの範囲では分子間の規則的な構造がある程度は保たれている，即ち，クラスターが形成されていることを意味している。水-メタノール，水-エタノール，水-プロパノールの系で動径分布関数の濃度依存性を詳しく調べたところ，アルコールの疎水基が大きくなるほど水の水素結合ピークの強度は著しく減少し，炭化水素鎖同士の距離に対応するピークはより顕著になる傾向にあった。このような濃度依存性は上記の質量分析の結果と一致した。

3. 液体の分子間振動モード領域のラマンスペクトルは内部の分子間の結合の様子を素直に伝えてくれる。水-エタノール混合系で 20～450cm^{-1} にわたってラマンスペクトルの濃度変化を調べたところ，極めて興味深い結果が得られた。即ち，純粋の水のスペクトルに見られた水分子間の O-O 伸縮振動モードは，エタノールの添加と共に減少し，混合のエンタルピー変化が最大になる濃度をすぎたあたりでピークとしては認められなくなる。ところが，この濃度の手前のところでエタノール集団に特有のエタノール分子間の O-O 伸縮振動モードのピークが出現し，濃度の増加と共に強度を強めていった。これらの二つのピークの位置は濃度変化を示さなかった。混合系では当然，水分子とエタノール分子との結合に基づく水－エタノールの O-O 伸縮振動モードが相当の強度で中間領域に出現するはずである。しかし，このような信号はピークとしては現れなかった。水集団とエタノール集団があたかも独立に存在，即ち，ミクロには相分離を起こしているような結果であった。これは，これら水集団クラスターとエタノール集団クラスターとの相互作用は弱く，液体内では同種分子間の集積が優先することを示している。

B-1) 学術論文

M. MATSUMOTO, N. NISHI, T. FURUSAWA, M. SAITA, T. TAKAMUKU, M. YAMAGAMI and T. YAMAGUCHI, "Structure of Clusters in Ethanol-Water Binary Solutions Studied by Mass Spectrometry and X-Ray Diffraction" Bull. Chem. Soc. Jpn., **68**, 1775-1783 (1995).

K. OHASHI, Y. NAKAI and N. NISHI, "Photodissociation mechanism of benzene cluster ions on the excitation with hn = 0.5-3.0 eV" Laser Chem., **15**, 93-111 (1995).

A. WAKISAKA, S. TAKAHASHI and N. NISHI, "Preferential Solvation controlled by Clustering Conditions of Acetonitrile-Water Mixtures" J. Chem. Soc. Faraday Trans., **91**, 4063-4069 (1995).

N. NISHI, M. MATSUMOTO, S. TAKAHASI, T. TAKAMUKU, M. YAMAGAMI and T. YAMAGUCHI, "Clusters in Ethanol-Water Binary Solutions Studied by Mass Spectrometry and X-ray diffraction" Structures and Dynamics of Clusters, Frontiers Science Ser. **16**, 113-120 (1996).

K. OHASHI, Y. NAKAI, T. SHIBATA, Y. INOKUCHI and N. NISHI, "Electronic Structures of Aromatic Cluster Ions" Structures and Dynamics of Clusters, Frontiers Science Ser. **16**, 357-362 (1996).

K. OHASHI, K. ADACHI and N. NISHI, "Unimolecular Dissociation Kinetics of Benzene Cluster Ions" Bull. Chem. Soc. Jpn., **69**, 915-924 (1996).

K. OHASHI, Y. NAKAI, T. SHIBATA and N.NISHI, "Spectroscopy and excited-state dynamics of benzene-trimer ion" Surf. Rev. Lett., **3**, 601-605 (1996).

B-3) 総説，著書

西　信之，「アルコールは水クラスター構造を強めるか？」 科学（岩波書店），65，833-841 (1995).

西　信之，「溶液モデルとしての 2 成分クラスター」季刊 化学総説 , No.25, 201- 216 (1995).

B-4) 招待講演

N. NISHI, "Structure of Clusters in Ethanol-Water Binary Solutions Studied by Mass Spectrometry and X-ray Diffraction", Yamada Confernce XLIII on Structures and Dynamics of Clusters, Shimoda, Japan, May 1995.

N. NISHI, "Structual Change of Bulk Water due to Cluster Formation of Solute-Polymer Hydrates in Dilute Aqueous Solution", International Chemical Congress of Pacific Basin Societies", Honolulu, USA, December 1995.

西　信之，「クラスターレベルで見た水溶液中の超分子構造の発生と水構造の変化について」分子構造総合討論会，仙台，1995 年 9 月

B-6) 学会および社会的活動

B-7) 他大学での講義

福岡女子大学人間環境学科　1995 年後期

C) 研究活動の課題と展望

平成 8 年度から「分子クラスター流動部門」をスタートさせ，イオンクラスター内部でのプロトンや電子の移動機構を明らかにする目的から，イオンビームトラップ法および分子イオンクラスターのソフトランディングマトリックス固定法による赤外分光研究を開始した。この目的のためには，赤外－赤外，赤外－近赤外，赤外－紫外等の二重共鳴法を用いて関連する振動座標，あるいは反応座標ポテンシャルを決めていかねばならない。この二重共鳴実験は平成 9 年度に開始できる見通しである。おおよその情報を得るためには，マトリックス法が有効であり，更に ab initio 計算を併用し，このようなダイナミカルな過程を起こす要因を明らかにしたい。

*) 1996 年 5 月 10 日着任

永　田　敬（助教授）*)

A-1) 専門領域：分子反応動力学，クラスター化学

A-2) 研究課題

a) 気相クラスター負イオンの幾何構造・電子構造

b) クラスター負イオンの関与する新しい反応の探索

A-3) 研究活動の概略と主な成果および展望

a) 気相分子クラスター負イオンの幾何構造・電子構造について実験(光電子分光)と理論(*ab initio* 計算)の両面から研究を行った。特に，異なる電子構造を持つ構造異性体(electronomer)の探索とそれらの安定化の要因を明らかにすることに重点を置いた。その結果，$[(CO_2)_nX]^-$(X = H_2O, MeOH, EtOH)において$[CO_2^-\cdots X(CO_2)_{n-1}]$構造を持つ異性体と $[C_2O_4^-\cdots X(CO_2)_{n-2}]$構造を持つ異性体が共存することを見い出し，溶媒和環境が electronomer の共存を支配していることを示した。

b) 凝縮相のラジカル負イオン・CO_2^-は電子移動による還元反応を起こすことが知られている。これに対し，気相クラスター負イオン$(CO_2)_n^-$が全く異なる反応性を持つことを明らかにした。クラスターイオン－分子反応 $(CO_2)_n^-$+ CH_3I を調べ，$[CH_3CO_2\cdots I]^-$構造を持つ新奇な分子負イオンが生成することを見いだした。この反応では$(CO_2)_n^-$が CH_3I を親核的に攻撃し，一段の反応で carboxylation が進行したと推定される。

B-1) 学術論文

T. TSUKUDA, H. YASUMATSU, T. SUGAI, A. TERASAKI, T. NAGATA and T. KONDOW, "Collision Processes of a Size-Selected $(C_6F_6)_n^-$ (n = 1- 5) with a Silicon Surface ", *J. Phys. Chem.* **99**, 6367 (1995).

H. YASUMATSU, T. TSUKUDA, T. SUGAI, A. TERASAKI, T. NAGATA and T. KONDOW, "Solvent Effects on Collisional Processes of Size-Selected $I_2^-(CO_2)_n$ Cluster Ions with Silicon Surface ", *Surf. Rev. Letters.* **3**, 901 (1996).

T. TSUKUDA, H. YASUMATSU, T. SUGAI, A. TERASAKI, T. NAGATA and T. KONDOW, "Dissociative Scattering of Size-Selected $(C_6F_6)_n^-$ (n = 1 - 5) from a Silicon Surface ", *Surf. Rev. Letters.* **3**, 875 (1996).

T. TSUKUDA, M. SAEKI and T. NAGATA, "Formation of $[(CO_2)_nCH_3I]^-$ anions in reaction of $(CO_2)_N^-$ with CH_3I ", *Chem. Phys. Letters* **251**, 309 (1996).

B-4) 招待講演

永田　敬，「気相分子集合体の負イオン形成とその電子構造」日本化学会東北支部主催「第 15 回物理化学コロキウム」，仙台，1995 年 11 月.

T. NAGATA, "Isomerization and Reactions of Negatively-Charged Molecular Clusters", NAIR Workshop '96 on Cluster Science（筑波）1996 年 3 月.

B-5) 受賞，表彰

分子科学研究奨励森野基金　永田　敬 (1991).

B-7) 他大学での講義

東京大学教養学部，基礎現代化学，1995.4 - 7

東京大学教養学部，分子科学特論Ⅰ，1995.4 - 7

東京大学教養学部，物質科学セミナーⅠ，1995.4-7

東京大学教養学部，構造化学，1995.10 - 1996.2

東京大学大学院総合文化研究科，機能要素解析学Ⅰ，1995.10 - 1996.2

東京大学大学院理学系研究科，分子動力学，1995.6 - 7

C) 研究活動の課題と展望

電子過多の気相分子集合体を対象にして，それらの特殊な構造(幾何構造と電子構造)とダイナミクス(光誘起過程，反応性など)との相関を調べる。特に，気相クラスター負イオンと凝縮相での溶媒和電子，溶媒和負イオンの挙動の相違に着目し，種々のダイナミクスを支配する「溶媒和」の本質を明らかにしたい。

*) 1996 年 5 月 10 日着任

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。遷移金属を含んだ分子錯体の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負の勾配（減少）を示し，その勾配が系に依存するという興味深い現象を初めて見い出したが，これは励起子的な状態が shake-up を伴って脱励起する過程によることを突き止めた。共鳴光電子放出はオージェラマン過程と呼ばれる二次の光学過程に従っているので，内殻励起状態の寿命幅に隠されて吸収スペクトルでは観測することができない状態を見つけることができる。また，直線偏光性を利用し単結晶試料に対する偏光吸収スペクトルの測定にも取り組んでいる。

b) 内殻励起分子の振動分光と解離ダイナミクスの研究：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，炭素，窒素，酸素の 1s 内殻や硫黄などの 1s 内殻，2p 内殻の励起状態を研究している。これまで気相分子の高分解能軟X線吸収スペクトルや脱励起スペクトルの解析から Rydberg－原子価混合による振動準位異常，脱励起過程における Renner-Teller 効果や Jahn-Teller 効果の影響，振電相互作用により初めて許容になる振電状態，大きな交換相互作用 (LS)によってスピン軌道相互作用の分裂が観測できない励起状態などを発見してきた。また，解離イオンの放出角の偏光方向に対する異方性・等方性，角度相関，運動エネルギー依存性から変角振動の途中で解離性のポテンシャルにオージェ過程で脱励起する機構の存在を明らかにした。

B-1) 学術論文

N. KOSUGI, "Molecular symmetries and vibrations in high-resolution inner-shell spectroscopy", *J. Electron Spectrosc. Rel. Phenom.* **79**, 351 (1996).

J. ADACHI, N. KOSUGI, E. SHIGEMASA, A. YAGISHITA and P.A. HATHERLY, "Angular correlation between fragment ions from the nitrogen *K*-shell excited and ionized N_2O", *J. Electron Spectrosc. Rel. Phenom.* **79**, 491 (1996).

N. KOSUGI, K. UEDA, Y. SHIMIZU, H. CHIBA, M. OKUNISHI, Y. SATO and E. SHIGEMASA, "Rydberg and valence states in the C 1s photoabsorption and resonance Auger spectra of CH_3F", *Chem. Phys. Letters.* **246**, 475 (1995).

K. UEDA, Y. SHIMIZU, H. CHIBA, M. OKUNISHI, K. OHMORI, Y. SATO, E. SHIGEMASA and N. KOSUGI, "C 1s and F 1s photoabsorption and subsequent electronic decay of CH_4, CH_3F, CH_2F_2, CHF_3, and CF_4", *J. Electron Spectrosc. Rel. Phenom.* **79**, 441 (1996).

J.T. FRANCIS, C.C. TURCI, T. TYLISZCZAK, G.G.B. DE SOUZA, N. KOSUGI and A.P. HITCHCOCK, "Electron-impact core excitation of SF_6. I. S 2*p*, S 2*s*, and F 1*s* spectroscopy", *Phys. Rev. A* **52**, 4665 (1995).

M. NAKAMURA, Y. TAKATA and N. KOSUGI, "Resonant Ni 3p and 3s photoemission for the Ni 2p core-excitation in NiO", *J. Electron Spectrosc. Rel. Phenom.* **78**, 115 (1996).

S. HOSOKAWA, T. KOUCHI, I. ONO, M. TANIGUCHI, Y. TAKATA and N. KOSUGI, "A soft-x-ray core absorption study on the electronic states in Ag- and Cu-photodissolved amorphous $GeSe_2$ using synchrotron radiation", *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 1607 (1996).

S. NAOE, K. FUKUI, H. ABE, M. WATANABE, A. HIRAYA, N. KOSUGI and Y. TAKATA, "L_3 absorption spectrum of Germanium single crystal", *J. Electron Spectrosc. Rel. Phenom.* **79**, 5 (1996).

H. OJI, R. MITSUMOTO, E. ITO, H. ISHII, Y. OUCHI, K. SEKI and N. KOSUGI, "Core hole effect in NEXAFS spectroscopy of aromatic hydrocarbons: chrysene, perylene and coronene", *J. Electron Spectrosc. Rel. Phenom.* **78**, 383 (1996).

T. YOKOYAMA, S. TERADA, A. IMANISHI, Y. KITAJIMA, N. KOSUGI and T. OHTA, "Adsorption of SO_2 on Ni(100) and Ni(111) surfaces", *J. Electron Spectrosc. Rel. Phenom.* **80**, 161 (1996).

B-3) 総説・著書

N. KOSUGI, "*Ab initio Bound-State Calculations for Inner-Shell Ionized and Excited States of Simple Molecules*", in *Atomic and Molecular Photoionization, Frontiers Science Series No.18*, A. Yagishita and T. Sasaki Eds., Universal Academy Press, p.89 (1996).

N. KOSUGI, "Theory and Analysis of XANES: MO Approach", in *X-ray Absorption Fine Structure for Catalysts and Surfaces, Series on Synchrotron Radiation Techniques and Applications, Vol.2*, Y. Iwasawa Ed., World Scientific, p.60 (1996).

B-4) 招待講演

N. KOSUGI, "Molecular Symmetries and Vibrations in High-Resolution Inner-Shell Spectroscopy", The 11th International Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics (VUV-XI), Tokyo, Japan, 1995.8.

N. KOSUGI, "Ab initio Bound-State Calculations for Inner-Shell Ionized and Excited States of Simple Molecules", Oji International Seminar on Atomic and Molecular Photoionization, Tsukuba, Japan, 1995.9.

N. KOSUGI, "Molecular Symmetries and Vibrations in High-resolution Inner-shell Absorption Spectroscopy", Steacie Institute for Molecular Science, National Research Council of Canada, 1996.3.1.

N. KOSUGI, "High-resolution Molecular Inner-shell Spectra and their Interpretation using ab initio MO calculations", Department of Chemistry, McMaster University, 1996.3.7.

N. KOSUGI, "Molecular Vibrations and Inner-Shell Absorption Spectroscopy", Department of Chemistry, University of Western Ontario, 1996.3.13.

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－

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

原子分子の光イオン化に関する王子国際セミナー　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　1994－

光イオン化国際ワークショップ‘97　プログラム委員　1996－

文部省，学術振興会等の役員

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

東京大学物性研究所軌道放射物性研究施設運営委員会　委員　1994－

東京大学物性研究所高輝度光源計画推進委員会　委員　1995－

B-7) 他大学での講義等

カナダ McMaster 大学化学科　1996年1月～3月（客員教授）

C)　研究活動の課題と展望

内殻が励起できるほどの高いエネルギーを有する軟X線と分子の相互作用には多電子励起，非断熱遷移，ラマン散乱など重要な基礎過程が含まれている。しかし，内殻励起分子ではフェムト秒の時間スケールで種々の脱励起過程が起きるために寿命幅の制約があり，単純な方法では分子振動を分離した研究はほとんど不可能である。軽元素の内殻励起状態の脱励起過程においては輻射過程の確率は非常に少なく，電子を放出する過程が支配的である。軟X線励起の場合，オージェラマン過程（あまりよい言葉使いではないが）と呼ばれている二次の光学過程に相当する電子放出過程の寄与が大きい。そのため，内殻励起状態の寿命幅より狭い高分解能の光のエネルギーを走査し，特定の価電子イオン状態へのイオン化チャンネルによる電子の収量スペクトルを測定すれば，内殻励起状態の寿命の制約から逃れて価電子スペクトルと同程度に分子振動の研究を展開することができる。このような研究のためには放出電子の運動エネルギーを高分解能で観測することが必須である。さらに，電子を放出した後のイオンの中には基底状態からの直接励起では観測が難しい超励起状態や解離性励起状態が多数存在する。そのため，脱励起過程の研究には親イオンあるいはフラグメントイオンを直接観測することも必須である。ここで，特定のチャンネルで放出されるイオンの収量スペクトルをとることで寿命幅の制約を逃れられる可能性もある。今後，我々は互いに密接に関係している電子とイオンの両方の観測を組み合わせ，オージェラマン過程を利用して分子振動を分離した上での脱励起ダイナミクスの研究を他に先駆けて展開していきたい。

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) 超高速時間分解レーザー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) ナノ秒時間領域，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，シストー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) ピコ秒時間領域，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て用いることによって，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)フェムト秒時間領域，分子超高速緩和ダイナミクスの観測と新しい分光手法の開発：フェムト秒時間分解蛍光アップコンバージョン分光法によってレチナール励起一重項における高い電子励起状態からの超高速緩和ダイナミクス（$S_3 \rightarrow S_2 \rightarrow S_1$）を明らかにした。また，時間領域のラマン分光法であるインパルシブラマン散乱分光において，初めて光の位相を安定化させた光ヘテロダイン検出を実現し，試料のフェムト秒３次の応答関数の各テンソル成分に比例する信号を得る方法を開発した。

B-1) 学術論文

T. TAHARA and H. HAMAGUCHI, “Investigation of Single-Vibronic-Level Fluorescence Lifetimes of Jet-Cooled S_1 Trans-Stilbene above the Isomerization Barrier”, *Bull. Chem. Soc. Jpn*, **69**, 925 (1996).

S. TAKEUCHI, T. MASUDA and T. KOBAYASHI, “Near-infrared dynamics of photoexcitations in a substituted polyacetylene”, *Phy. Rev.,* **B52**, 7166 (1995).

S. TAKEUCHI, T. MASUDA and T. KOBAYASHI, “Visible to near-infrared femtosecond dynamics of photoexcited gap states in substituted polyacetylenes”, *J. Chem. Phys.,* **105**, 2859 (1996).

H. YUGAMI, R. YAGI, S. MATSUO and M. ISHIGAME, “Observation of persistent spectral hole burning of Eu^{3+} in β”-alumina at 110 K”, *Phy. Rev.*, **B53**, 8283 (1996).

H. YUGAMI, Y. SHIBAYAMA, S. MATSUO, M. ISHIGAME and S. SHIN, “Proton sites and defect-interactions in $SrZrO_3$ single crystals studied by infrared absorption spectroscopy”, *Solid State Ionics* **85**, 319 (1996).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. TAHARA and H. HAMAGUCHI, "Picosecond 2D-CARS and Fluorescence Studies on the Primary Processes of Retinal Photoisomerization", *Proceedings of XVIIth International Conference on Photochemistry* (1995), London, UK.

B-4) 招待講演

T. TAHARA and H. HAMAGUCHI, "Picosecond Time-Resolved 2D-CARS Spectroscopy: Development and Application", The Tokyo Symposium on "New Developments in Ultrafast Time-Resolved Vibrational Spectroscopy", Tokyo, December 1995.

田原太平，「時間分解ラマン・コヒーレントラマン分光法による溶液光化学反応の研究」，近畿物理化学セミナー，京都, 1996 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（主として凝縮相での）光化学反応を研究する。フェムト秒時間領域では分子の核運動のコヒーレンス（波束）をも実時間観測することができるが，化学反応におけるコヒーレンスの意義については未だ明らかでない点が多い。これを念頭におきながら，種々の時間分解分光法を駆使して，化学反応に対する新しい知見を得るべく分光実験を行う。これら研究を行う過程で，既存の方法の単なる改良にとどまらず，新しい分光手法（例えばレーザーと放射光を組み合わせた分光実験など）の開発をめざす。特に現在，放射光の時間特性を利用した新しいエネルギー領域での時間分解分光の開発に興味をもっている。

反応動力学研究部門

宇 理 須 恆 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 光反応用分光技術の開発

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。昨年度 Si(100)表面の SiHn の IRAS による検出に成功したことから，今年度は SiHn の放射光による反応を調べ表面構造と放射光照射効果についての詳細な知見を得た。また，Si 表面に Ge を数モノレーヤ堆積し，その表面での原子状水素の挙動を調べた結果，Ge が異常に早い速度でエッチングされる現象を見い出した。

b) 配向，配列を制御した分子凝集層での VUV 光反応： 昨年度に引き続き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。放射光の照射では AlC 結合が，1254eV の X 線照射では 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初めて見い出した可能性が強く，このことを証明するために DMAH の吸収断面積スペクトルを真空紫外の領域で測定し，X 線照射では，π_{CH3}状態が励起されるのに対し，放射光照射ではσ_{AlC}の寄与が加わることによることが分かった。

c) 高感度 FTIR 技術と反応のその場観察技術の開拓：昨年度開発した高感度（10^{-4}の S/N）赤外反射吸収スペクトルその場観察測定系について，窒素パージ系やデータ処理系に改造を加えた。

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)/$CoSi_2$/Si(100) の構造を有する BML 基板の製作法を確立した。今年度はさらに表面が Ge である Ge/Si(100)/ $CoSi_2$/Si(100) 基板を製作した。

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検出する，電子－イオンコインシデンス測定法を開発し，H_2O や NH_3 の低温凝集層に適用した。オージェ刺激脱離において経由する途中の価電子所状態を直接観察することに成功するとともに，共鳴オージェ遷移においてイオン脱離効率が増大する現象を見い出した。

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を製作するとともに，これを導入するビームライン建設を進めた。

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。そこで1995年度よりこの計画をスタートした。今年度は，超高真空槽を制作し，10^{-11}torrの到達真空度を確認した。また，高温加熱のできる試料ホルダーを作成した。

B-1) 学術論文

A. YOSHIGOE, K. MASE, Y. TSUSAKA, T. URISU, Y. KOBAYASHI and T. OGINO,"*In Situ* Observation of Silicon Hydrides on Si(100) Surfaces During Synchrotron-Radiation-Stimulated Si_2H_6 Gas Source Molecular Beam Epitaxy", *Appl. Phys. Lett.* **67**, 2364 (1995).

A. YOSHIGOE, M. NAGASONO, K. MASE and T. URISU, "Synchrotron Radiation Irradiation Effects for SiHn on Si(100) Surface in the Synchrotron Radiation Stimulated Si Gas Source Molecular Beam Epitaxy", *Jpn. J. Appl. Phys.* **34**, 6894 (1995).

Y. PARK, S. RHEE, Y. IMAIZUMI and T. URISU, "Effect of SR Irradiation on SiO_2 Thin Film" *J. Korean Vac. Soci.* **4**, 156 (1995).

S. SATO, S. MINOURA, T. URISU and Y. TAKASU, "IRAS and TDS Study on the Photolytic Decarbonylation of Iron Pentacarbonyl Adsorbed on a SiO_2 Film with a Buried Metal Layer", *Appl. Surf. Science* **90,** 29 (1995).

S.I. GHEYAS, T. OGATA, M. NISHIO, T. URISU and H. OGAWA, "Synchrotron Radiation Assisted Surface Processes of Diethylzinc on GaAs(100)", *Jpn. J. Appl. Phys.* **34**, 6886 (1995).

Y. IMAIZUMI, Y. TSUSAKA and T. URISU, "Synchrotron Radiation Irradiation Effects on Low-temperature Condensed Layer of Dimethyl Aluminum Hidride on SiO_2", *J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **80**, 93 (1996).

J. OHARA, Y. GOTO, M. NAGASONO, T. KURAHASHI, T. HATTORI and T. URISU, "Metallization on Piezoelectric Ceramics Surfaces by Synchrotron Radiation Irradiation", *J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **80**, 81 (1996).

K. MASE, M. NAGASONO, T. URISU and Y. MURATA, "Development of Electron-Ion Coincidence Spectroscopy for the Study of Surface Dynamics", *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **69**, 1829 (1996).

M. NAGASONO, K. MASE and T. URISU, "Auger Electron-Ion Coincidence Study for H_2O Adsorbed on SiO_2/Si(100) at 80 K", *Surface Sci.* **363**, 342 (1996).

T. URISU, A. YOSHIGOE and Y. IMAIZUMI, "Synchrotron Radiation-Stimulated Semiconductor Process and New Prospects of Core Electron Excitation Photochemistry", *Optoelectronics -Devices and Technologies-* **11**, 57 (1996).

B-3) 総説，著書

宇理須恒雄，高輝度X線源の利用技術-半導体プロセスへの利用，レーザ研究，23巻，742-751（1995）

宇理須恒雄，放射光とその応用-表面光反応プロセス，光アライアンス7巻，30-32（1996）

B-4) 招待講演

T. URISU, "Synchrotron Radiation Stimulated Si Gas Source MBE and Process Monitoring" , on Synchrotron Radiation Research, Hsinchu, Taiwan, June22-23,(1995).

T. URISU, "Synchrotron Radiation Stimulated Etching, CV Synposium D and Epitaxial Growth and Reaction Mechanism", Symposium on Chemical Applications of Synchrotron Radiation, 1995 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, Honolulu, Hawaii, USA, Dec. 17-22 (1995).

宇理須恒雄, "放射光励起表面反応過程", 東北大学電気通信研究所シンポジウム, 光プロズマ表面励起過程 , 仙台, 11 月 30 日-12 月 1 日 (1995) .

T. URISU, "New Prospects of Hard-Photon Processing-Exploration of Intelligent Process", Photon Technology Workshop, Tsukuba, March 11-12 (1996).

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員，委員

レーザ学会評議員 (1983～1985)

放射光学会評議員 (1993～1994)

電気学会，放射光励起プロセス技術調査専門委員会幹事 (1992～1994)

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 (1994～1995)

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)

姫路工業大学ニュースバル利用検討委員会委員 (1996～)

学会の組織委員

第 5～10 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)

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について調べる電子-イオンコインシデンス法によるオージェ緩和過程や，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。また，表面反射吸収赤外分光法と STM とを組み合わせて，single molecule での内殻励起反応の観察を行う研究を新たに進める。

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時間分解ポンプ・プローブまたは2重共鳴分光。

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建設し，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推定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) 紫外モードロックレーザーとアンジュレータ光を組み合わせて，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た。レーザーパルスとマルチバンチ放射光を厳密に同期させることで，分解能約500psの時間分解ポンププローブ測定が可能となった。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。

B-1) 学術論文

K. MITSUKE, Y. HIKOSAKA, T. HIKIDA and H. HATTORI, "Autoionization of NO in an Excited Valence State Affected by Perturbations from Valence-Rydberg Mixing", *J. Electron Spectrosc. Rel.Phenom.* **79**, 395(1996).

H. YOSHIDA and K. MITSUKE, "Positive Ion-Negative Ion Coincidence Spectroscopy of CO_2 for Observation of Doubly Excited Rydberg States", *J. Electron Spectrosc. Rel. Phenom.* **79**, 487(1996).

H. HATTORI and K. MITSUKE, "Autoionization of Acetylene Studied by Two-Dimensional Photoelectron Spectroscopy", *J. Electron Spectrosc. Rel. Phenom.* **80**, 1(1996).

T. HIRAYAMA, T. NAGAI, M. ABO, I. ARAKAWA, K. MITSUKE and M. SAKURAI, "Excitonic Energy Transfer Process in Ne-Kr Alloy Studied by Photon Stimulated Desorption of Metastable Atoms", *J. Electron Spectrosc. Rel. Phenom.* **80**, 101(1996).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. MITSUKE, "Ion-Pair Formation from Superexcited Molecules", in "Atomic and Molecular Photoionization", A. Yagishita and T. Sasaki Eds., University Press, pp.187-196 (1996).

B-4) 招待講演

K. MITSUKE, "Autoionization of NO in an excited valence state affected by perturbations from valence-Rydberg mixing", International Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics (VUV-XI), Tokyo, August 27 - September 1 (1995).

K. MITSUKE, "Ion-pair formation from superexcited molecules", Oji International Seminar on Atomic and Molecular Photoionization,Tsukuba, September 4-7 (1995).

K. MITSUKE, "Autoionization dynamics of molecules studied by two-dimensional photoelectron spectroscopy", Symposium on Chemical Applications of Synchrotron Radiation, 1995 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, Honolulu, Hawaii, December 17-22 (1995).

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）

原子衝突研究協会，企画委員（1996-）

学会の組織委員

質量分析連合討論会，実行委員（1993）

日本放射光学会年会，実行委員（1995-1996）

C) 研究活動の課題と展望

光電子分光，蛍光分光，質量分析，各種同時計測法などを用い，気相分子の光イオン化過程の詳細を研究する。とくに，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て，励起分子の内部状態を観測し，発光・解離・異性化・振動緩和などの過渡現象を時間分解ポンプ・プローブ法や２重共鳴法で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，CF_3Br 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，オージェ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.N. OLNEY, C.E. BRION and T. IBUKI, "Absolute photoabsorption of BrCN in the valence shell and the bromine M, carbon K and nitrogen K shell regions (5-540 eV)", *Chem. Phys.* **201**, 505 (1995)

T. IBUKI, T.N. OLNEY and C.E. BRION, "Ionic photofragmentation (11.5-160 eV) and PIPICO spectroscopy (40-130 eV) of BrCN in the valence shell and bromine 3d regions", *Chem. Phys.* **203**, 359 (1996)

T. IBUKI and A. KAMAMOTO, "Photoabsorption cross section and radiative processes of $GeCl_4$ in the valence region of 6-31 eV". Chem. Phys. Lett. **260**, 314(1996)

T. IBUKI and K. OKADA," Photoabsorption and fluorescence excitation spectra of CF_3CN in the region of 6-41 eV", *Chem. Phys. Lett.* **263**, 173 (1996)

T.IBUKI, M. KOMO, Y. ASARI, A. HIRAYA and K. SHOBATAKE, "Photoabsorption and fluorescence cross sections of $SiCl_4$ in the region of 6.2-31 eV", *J. Chem. Phys.* in press.

B-3) 総説，著書

T. IBUKI, "Application of Synchrotron Radiation to Molecular Science" in "Atomic, Molecular and Cluster Phisics", S. A. Ahmad Ed., Narosa Pub. House, India, p.266-271(1996)

B-4) 招待講演

伊吹紀男，「価電子領域における状態選択的化学反応過程」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，岡崎。1996年1月

B-6) 学会及び社会的活動

学会誌編集委員

日本放射光学会編集委員（1992-1994）

科学研究費の研究代表者，班長等

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) 他大学での講義等

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）物質化学持論，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。

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) 新たな透明伝導性アモルファスとして $2CdO \cdot PbO_2$ を発見した。そして，前年度に発見した Cd_2GeO_4, $AgSbO_3$ も含め，これらの物質郡に特徴的な輸送特性を明らかにした。

b) SiO_2: Ge ガラスへの紫外光照射による Bragg Grating 形式とオリジンと考えられる GeE'中心の光吸収帯の特定とそに振動子強度を決定した。また，エキシマーレーザー光の照射による欠陥生成は 2 光子吸収によるバンド遷移から生じるか，2 光子エネルギーの値がハンドギャップよりも 10% 程度大きくないと欠陥生成効率は数桁落ちることがわかった。アモルファス物質に固有な mobilty gap との関連が示唆された。

c) $TlAlF_4$ と $Tl_2Nb_2O_{6+x}$ のエネルギーバンド構造を光電子分光により明らかにした。特に後者については遷移金属以外では初めて混合原子価状態が実現していることを見出した。

B-1) 学術論文

H. HOSONO, N. KIKUCHI, N. UEDA and H. KAWAZOE, "Amorphous Transparent Conductor 2CdO EGeO2 Conversion of Amorphous Insulating Cadmium Germanate by Ion Implantation, " *Appl. Phys. Lett*, **67**, 2663(1995)

H. MIZOGUCHI, T. OMATA, H. KAWAZOE, H. HOSONO and N. UEDA, "Features of Valence Band Structure of TlAlF4," *J. Phys.: Condens. Matter*, **8**, 303(1996)

H. HOSONO, Y. YAMASHITA, N. UEDA and H. KAWAZOE, "New Amorphous Semiconductor: 2CdO・PbOx," *Appl. Phys. Lett*. **68**, 661(1996)

H. HOSONO, H. KAWAZOE and J. NISHII, "Defect Formation in SiO2: GeO2 glasses Studied by Irradiation with Excimer Laser Light," *Phys. Rev.* **53**, R11921(1996)

H. MIZOGUCHI, H. KAWAZOE, T. UEDA, S. HAYASHI, H. HOSONO and N. UEDA," Formation and Optical Absorption Spectra of Mixed Valence State of Tl in Tl2Nb2O6+x with Pyrochlere Structure," *Bull. Chem. Soc. Jpn*., **69**, 115(1996)

H. HOSONO, M. MIZOGUCHI, H. KAWAZOE and J. NISHII, " Correlation between Ge E' Center and Optical Absorption Band in SiO2:GeO2 Glasses," *Jpn. J. Appl. Phys*. **35**, L234(1996)

L. YANG, R.F. HAGLUND, C.W. WHITE, R.A. ZUHR and H. HOSONO, "Probing Interface Properties of Nanocomposites by third-order Nonlinear Optics," *Appl. Phys*. **A62**, 403(1996)

B-2) 国際会議のプロシーデイングス

N. MATSUNAMI, H. HOSONO and M. TAZAWA, "Characterization of Ion. Irradiated α-Carbon Films," Proceedings of the 9th International Conference on Ion Beam Modification of Materials, p.999-1002(1996)

B-3) 総説，著書

細野秀雄,「酸化物の構造とデータベース」, 酸化物エレクトロニクス調査報告書（I), 日本電子工業振興会(1996)

B-4) 招待講演

H. HOSONO, " Photochemical Reaction in SiO2-GeO2 Glasses and Nonlinear Optical Properties," Topical Meeting of Optical Society of America, Portland, USA, September, 1995.

H. HOSONO, "Approach to transparent crystalline and Amorphous Oxides for Optoelectronic Application," The 2nd Int. Symp. on Oxide Electronics, Yokohama, December, 1996.

細野秀雄，「新しい酸化物アモルファス半導体－透明伝導性アモルファス－」第 22 回アモルファス物質の物性と応用セミナー，川崎，1995 年 12 月

細野秀雄，「最近の結晶化ガラスの研究動向と話題－特に新しい多孔質結晶化ガラスについて－」第 36 回ニューガラスセミナー，1995 年 11 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

学協会役員・委員

International Committee of Radiation. Effects in Insulators(1995～)

日本電子工業振興協会「酸化物エレクトロニクス専門委員会」委員（1995～）

学会の組織委員

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

学会誌編集委員

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

日本セラミックス協会論文誌編集委員（1986～88）

B-7) 他大学での講義

東京工業大学工学部総合理工学研究科

東京理科大学基礎工学部

東京都立大学工学部

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 $MgIn_2O_4$，$AgSb_2O_7$ 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年に専任と流動各1部門より始まり，現在は流動，客員部門を含めて4研究部門（錯体合成，錯体触媒，錯体物性，配位結合部門）を持つまでになってきた。現在の主な研究活動としては，専任部門である錯体触媒部門では，生体超分子，特に新しい構造を有するDNAの金属錯体およびその機能発現についての研究を，また錯体物性部門では，Ru，Mo，Co，Rhの錯体による小分子，なかでも炭酸ガスと窒素分子の固定化反応を調べているほか，自己集合能を有するPd，Pt錯体を中心とする超分子化学の研究を進めている。流動部門である錯体合成部門では，異相界面での配列制御を目指したFeおよびRu表面錯体の合成化学ならびに，金属タンパク質および金属酵素の構造と機能の研究を行っている。客員部門としては錯体配位結合部門があり，配位結合を有する錯体集合体の構造と物性について研究している。金属錯体は有機化学や物理化学などの他分野でもその重要性がますます認識されてきており，今後は現在の研究体制に新たな専任部門などを加えて，広領域の錯体研究をカバーし，錯体化学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（すなわち四より高い配位数をもつ）ケイ素 (IV) 錯体の異性現象の研究に力を入れている。当研究室で光学分割に成功した $[Si(phen)_3]^{4+}$ 錯体は，水溶液中でラセミ化に対して安定な八面体型ケイ素 (IV) 錯体としては最初のものである。最近，光学活性な $[Si(bpy)_3]^{4+}$ 錯体，$[Si(ht)_3]^{+}$（htはヒノキチオラトイオン）の幾何・光学異性体，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，バナジウム，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，ゼオライトと室温で強く相互作用する窒素分子の吸着サイトの解析も行っており，この現象の有効性（新素材の開発など）を検討している。

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（主として部分電荷について）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

Y. KURODA, Y. YOSHIKAWA and M. NAGAO, "Dsorption Phenomenon of Adsorbed Water on a Homogeneous SrF_2 Surface at Lower Temperatures," *Langmuir,* **11**, 4031 (1995).

M. HIROTSU, K. NAKAJIMA, M. KOJIMA and Y. YOSHIKAWA, "Manganese(III) Complexes Containing Optically Active Tetradentate Schiff Base Ligands. Effect of Phenyl Substituents," *Inorg. Chem.* **34**, 6173 (1995).

T. YOSHII, M. KOJIMA and Y. YOSHIKAWA, "Force Field Calculations of Antitumor Platinum Complex Systems," *J. Coord. Chem.* **37**, 305 (1995).

F. MD. AKHTER, M. KOJIMA, K. NAKAJIMA and Y. YOSHIKAWA, "Photochemical Desulfurization of a Sulfinato-*S*-Cobalt(III) Complex. Formation of an Organic Peroxide Complex," *Chem. Lett.* **1996**, 81.

F. MD. AKHTER, M. HIROTSU, I. SUGIMOTO, M. KOJIMA, S. KASHINO and Y. YOSHIKAWA, "Photochemistry of Cobalt(III) Complex Containing a Sulfinate-*S* Ligand. Linkage and Geometrical Isomerization," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **69**, 643 (1996).

S. UTSUNO, A. SUGANUMA and Y. YOSHIKAWA, "Solid-State Circular Dichroism Specta of *Trans*-Diamminetetranitro-cobaltate(III) Salts and *Mer*-Triamminetrinitrocobalt(III)," *Inorg. Chim. Acta*, **244**, 1(1996).

Y. KURODA, Y. YOSHIKAWA, H. HAMANO and M. NAGAO, "Dielectric Behavior in the Y_2O_3-H_2O System at Lower Temperature with Desorption Phenomenon of Adsorbed H_2O in the SrF_2-H_2O System, " *Langmuir*,**12**, 399 (1996).

T. ITOH, Y. FUJII, T. TADA, Y. YOSHIKAWA and H. HISADA, "Thermodynamic and Kinetic Studies of Zinc(II) Triamine Complexes as Models of CA and AP," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **69**, 1265 (1996).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

M. FUJITA, T. FUJIHARA, M. KOJIMA and Y. YOSHIKAWA, "Preparative Study and Characterization of the *Cis*-Diammintetranitrocobaltate(III) Ion, " Proceedings of the 31st International Conference on Coordination Chemistry, 52 (1996), Vancouver, Canada.

M. MURATA, M. KOJIMA, M. KITA, S. KASHINO and Y. YOSHIKAWA, "Oxidation of $[Co\{OS(O)CH_2CH_2NH_2\}(en)_2]^{2+}$ Optical Resolution and Characterization of $[Co\{OS(O)_2CH_2CH_2NH_2\}(en)_2]^{2+}$ " Proceedings of the 31st International Conference on Coordination Chemistry, 135 (1996), Vancouver, Canada.

M. KOJIMA, F. MD. AKHTER, K. NAKAJIMA and Y. YOSHIKAWA, "Photochemical Desulfurization of a Sulfinato-*S* Cobalt(III) Complex. Formation of an Organic Peroxide Complex, " Proceedings of the 31st International Conference on Coordination Chemistry, 183 (1996), Vancouver, Canada.

Y. KURODA, H. HAMANO, H. MAEDA, R. KUMASHIRO, Y. YOSHIKAWA and M. NAGAO, "Stabilization of Copper Metal Clusters in Mordenite Nanopores: Water Treatment of Evacuated Copper-Ion-Exchanged Mordenite at 300 K, " Second International Symposium, Effect of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids(ISSHAC), Sept. 4-10, 202 (1995), Zakopane-Levoca, Poland-Slovakia.

B-4) 招待講演

吉川　雄三,「金属錯体の力場計算」, 筑波大学大学院化学研究科高度化推進に係わる公開シンポジウム, 1996 / 3

B-5) 受賞

東海化学工業会賞, 1980 年

B-6) 学会及び社会的活動

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）

科学研究費の研究代表者, 班長等

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

高知大学理学部　1995 年 9 月

岡山大学理学部　1995 年 12 月

岡山大学大学院自然科学研究科　1995 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系で重要な役割を果している筈である」との観点に立って, 一層発展させたい。今後は, より厳密に含有元素をコントロールした生体の栽培を通して, 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。

*)　1996 年 4 月 1 日岡山大学理学部教授

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) 遷移金属とリン間に多重結合をもつ錯体の研究

b) 遷移金属とリン間に共有結合をもつ錯体の研究

c) 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

d) 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) 遷移金属とリン間に多重結合をもつ錯体の研究：ホスフェニウムを配位子とする6族遷移金属錯体と種々の3級リン化合物との反応により，OR基，SR基，NR_2基は3級リンからホスフェニウムのリンへ転位することを明らかにした。

b) 遷移金属とリン間に共有結合をもつ錯体の研究：ホスホネート配位子は遷移金属とリン間に共有結合をもつ点で興味深いが，一般にホスホネートとカルボニルを配位子とする錯体においては，CO は置換不活性である。しかし，リンイリドを反応試剤に用いると，CO が容易に活性化されることが明らかとなった。

c) 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：ピアノイス型鉄およびルテニウムのホスホラン錯体において，異常原子価リンフラグメントであるホスホラン部分が遷移金属からシクロペンタジエニル配位子へ，異常原子価構造を保持したまま転位する反応を見出した。

d) 触媒機能を有する新しい錯体の創製：トリスピラゾリルボレートを配位子とするチタン錯体と水との反応を検討し，その結果チタンと酸素間に二重結合を有する錯体を単離することに成功した。また，この錯体はオレフィンの重合に対して触媒活性を示すことを明らかにした。

B-1) 学術論文

T. MIZUTA, T. YAMASAKI, H. NAKAZAWA and K. MIYOSHI, "P-C Bond Cleavage of Phosphorus-Bridged [1]Ferrocenophane Coordinated to the $[Cp(CO)_2Fe]^+$ Fragment", *Organometallics*, **15**, 1093 (1996).

H. NAKAZAWA, Y. YAMAGUCHI and K. MIYOSHI, "Conversion of Transition-Matal Complexes with Stannyl and Phosphenium Ligands into Those with Stannylene and Phosphine Ligands by Alkyl Migration from Sn to P", *Organometallics*, **15**, 1337 (1996).

Y. YAMAGUCHI, H. NAKAZAWA and K. MIYOSHI, "Cationic Phosphenium Complexes of Group 6 Transition Metals. Systematic Approach to Elucidation of Influence of Substituents of the Phosphenium Phosphorus on the Stability of the Complexes", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **69**, 983 (1996).

H. NAKAZAWA, Y. YAMAGUCHI and K. MIYOSHI, "Reactivity of Cationic Transition-Metal Phosphenium Complexes", *Phosphorus, Sulfur and Silicon*, **109** 129 (1996).

H. NAKAZAWA, Y. YAMAGUCHI, K. MIYOSHI and A. NAGASAWA, "^{95}Mo NMR Studies on Cationic Phosphenium Complexes of Molybdenum", *Organometallics*, **15**, 2517 (1996).

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 a Cationic Phosphenium in Iron Complexes Containing CR_3, SiR_3, orSnR_3", 31st ICCC (International Conference on Coordination Chemistry) Abstract 8L9, Vancouver (Canada, August, 1996).

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)

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や反応性に注目して研究を進めている。特に注目しているのは，いわゆる配位結合ではなく，共有結合，多重結合，異常原子価結合などをもつ錯体の合成とその特異的反応の開発である。二重結合をもつ錯体については二重結合部分の反応性が，その遷移金属が他にどのような配位子を有しているかにより大きく異なることを見出した。ここらへんをさらに詰めて行きたい。さらに，これらの結合が触媒反応に反映されるような系を開発していきたいと考えている。

*) 1996年4月1日広島大学理学部助教授

芳　賀　正　明（教授）*)

A-1)専門領域：錯体化学

A-2)研究課題

a) プロトンにより誘起されるスイッチング機能を有する金属多核錯体の合成

b) プロトンと共役した電子移動が可能な金属多核錯体の合成

c) 異相界面への金属錯体の配向，配列制御

d) 異相界面における金属錯体膜の状態分析および評価法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) プロトンにより誘起されるスイッチング機能を有する金属多核錯体の合成：中心のRuイオンが架橋配位子ビス(ベンズイミダゾリル)ジピリジンで3個のOsイオンと架橋されたRuOs混合金属四核錯体において架橋基のプロトン化状態をpHを変化させることにより変えられる。中心のRuサイトと周辺に位置するOsサイトのM(II/III)酸化電位のpH依存性においてpHが低い領域ではOsサイトが先に酸化されるが，pHが高くなるとRuサイトが先に酸化される電位の交差現象がpH5付近で観測された。また高pH領域で一電子酸化され生成する混合原子価Ru(III)Os(II)状態においてプロトン濃度の違いにより分子内電子移動が誘起されることを見出した。この四核錯体で金属イオンを置き換えたり，配位子に置換基を導入することにより電位の交差するpH位置を変えることが可能であることがわかった。

b) プロトンと共役した電子移動が可能な金属多核錯体の合成：ビス（ベンズイミダゾリル）ジピリジンで架橋されたRu二核錯体において架橋基のプロトン化および脱プロトン化によりMLCT励起状態の性質が変わることを共鳴ラマンおよび過渡吸収スペクトルから明らかにした。さらに，混合原子価錯体の原子価間電荷移動吸収帯から金属間相互作用がプロトン化状態の違いにより大きく変化することを明らかにした。

RuRh混合金属二核錯体においては，プロトン化状態の違いにより蛍光強度が大きく変化する蛍光スイッチとなることもわかった。

c) 異相界面への金属錯体の配向，配列制御：金属錯体の異相界面への配向制御は，錯体の物性をコントロールするときの基本的な課題である。そこで，非線形光学材料や光電変換材料への応用を意識しながら一連の長鎖アルキル基をもつ四座配位子ビス（ベンズイミダゾリル）ジピリジルおよび三座配位子ビス（ベンズイミダゾリル）ピリジルを有するルテニウム錯体を新たに合成した。これらはいずれも水面上で単分子膜として安定であることがわかった。また，アピカル位にシアノ基を有する四座配位子を有するルテニウム錯体をラングミュアブロジェット膜としてガラス基板上に移しとったときに基板上に対して四座配位子は平行に配列することがXPSにおけるシアノ基のN1sピークの分裂することから明らかになった。現在，水面上での錯形成反応についてさらに詳しく検討している。

d) 異相界面における金属錯体膜の状態分析および評価法の開発：金基板上に自己組織化膜として配列したチオール類のアルキル基の長さを変化させたときに金から出てくる光電子収量が指数関数的に減少することを見出し，深さ分析として紫外光電子分光法の有効性を示した。

また，水面上に展開した両親媒性ルテニウム錯体から放出される光電子しきいエネルギーが表面圧ー面積曲線と

ほぼ同じシグモイド型の変化を示し，気体膜から液体膜への遷移を紫外光電子分光法からも明らかにできることがわかった。このことは水面での凝集状態や電子状態をその場観察できることを示している。

B-1) 学術論文

M. HAGA, M.M. ALI and R. ARAKAWA, "Proton-induced Switching of Electron Transfer Pathways in Dendrimer-Type Tetranuclear RuOs3 Complexes", *Angew. Chem. Int. Ed. Engl*, **35**, 76-78 (1996).

M. HAGA, M.M. ALI, S. KOSEKI, K. FUJIMOTO, A. YOSHIMURA, K. NOZAKI, T. OHNO, K. NAKAJIMA and D.J. STUFKENS, "Proton-induced Tuning of Electrochemical and Photophysical Properties in Mononuclear and Dinuclear Ruthenium Complexes Containing 2,2'-Bis(benzimidazol-2-yl)-4,4'-bipyridine: Synthesis, Molecular Structure, and Mixed-Valence State and Excited-State Properties", *Inorg. Chem.*, **35**, 3335-3347 (1996).

R. ARAKAWA, G. MATSUBAYASHI, N. OHASHI, S. FURUUCHI, T. MATSUO, M.M. ALI and M. HAGA, "Electrospray and Collision-induced Dissociation Mass Analysis of Star-burst Type Tetranuclear Complexes", *J. Mass Spectrom*, 31, 861-866 (1996).

R. ARAKAWA, T. MATSUO, K. NOZAKI, T. OHNO and M. HAGA, "Analysis of Multiply Charged Ions of Ruthenium(II) Tetranuclear Complexes by Electrospray Ionization Mass Spectrometry", *Inorg. Chem.*, **34,** 2464-2467 (1995)

H. MONJUSHIRO and I. WATANABE, "Probing Depth of Ultraviolet Photoelectron Yield Spectroscopy in Hydrocarbon Films", *Anal. Sci.*, **11**, 797-800 (1995).

T. ICINOSE, H. MONJUSHIRO and Hiroshi WATARAI, "Charge-up Phenomena of Insulated Metals in X-ray Photoelectron Spectroscopy", *Anal. Sci.*, **12**, 43- 47 (1996).

H. MONJUSHIRO, K. MIZUGUCHI and Y. YOKOYAMA, "Measurement of Photoacoustic Spectra with Improved Resolution and Its Application to Uranyl Complexes", *Anal. Sci.*, **11**, 841-842 (1995).

M. HAGA, K. HIRATSUKA, M. KATO, H. KUROSAKI, M. GOTO, R. ARAKAWA and S. YANO, "Self-assembled Dinuclear Platinum(II) Complexes with 6,6'-Bis(1-methylbenzimidazol-2-yl)-2,2'-bipyridine:Synthesis, X-ray Structure, and Solution Behaviors", *Chem. Lett.*, 1143-1144 (1995).

H. NAGASHIMA, M. SAITO, Y. KATO, H. GOTO, E. OSAWA, M. HAGA and K. ITOH, "Electronic Structures and Redox Properties of Silylmethylated C60", *Tetrahedron*, **52**, 5053-5064 (1996).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

M. HAGA, M.D. HOSSAIN, K. NOZAKI and T. OHNO, "Photoinduced Electron Transfer Processes with $[(bpy)_2Ru(L\text{-}Dicarboximide\text{-}L)Ru(bpy)_2]^{4+}$ (L = (2-Pyridyl)benzimidazole", Proceeding of 11th International Symposium on the Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds, (1995).

M.M. ALI, K. KANO and M. HAGA, "Proton-induced Switching in Starburst Tetranuclear RuOs Complexes", Proceeding of '95 Asian Conference on Electrochemistry, 48 (1995).

M. HAGA and M.M. ALI, "Proton-induced Electron Transfer Reaction in Polynuclear Ru and Os Complexes", Proceeding of International Symposium on Electron Transfer in Proteins and Supramolecular Assemblies at Interfaces, 167 (1996).

K. TANAKA, A. ICHIIMURA, I. KINOSHITA, M. HAGA, W. MORI, M. KATO and S. YANO, "Comparison with Several Oxidation States of Ruthenium Binuclear Complexes: Ruthenium Analogue for Iron-Protein Active Site Model", Proceeding of Nagoya Conference, 149 (1996).

B-3) 総説，著書

芳賀正明，「スイッチング機能を有する金属錯体」化学工業，46巻8号，671ー679（1995）

芳賀正明，「プロトン移動・電子移動共役錯体の分子設計と応用」電気化学および工業物理化学，64巻1号，11ー15（1996）

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員，委員

錯体化学研究会運営委員（1995年11月～）

基礎錯体工学会運営委員（1994年10月～）

学会誌編集委員

日本化学会トピックス編集委員（1990年4月～1992年3月）

C) 研究活動の課題と展望

溶液中でのプロトンにより誘起される種々のスイッチング機能を固体上で発現するために，溶液での多核化錯形成反応を利用して二次元界面上の配位子に金属イオンを順次結合させていく溶液錯形成エピタキシ法を確立したい。そのために，金属錯体がとる多彩な立体構造(平面，四面体，八面体など)を如何にしたら2次元表面に分子配列できるかを結晶構造のパッキング，錯体間相互作用を考慮して配位子および金属錯体層の設計を行う必要がある。それとともに二次元表面分子集合体の状態を知るための新しい方法として紫外光電子分光法の適用範囲について検討したい。これらの基礎のうえに，金属錯体のもつ酸化還元特性，磁気特性を生かした錯体膜のエネルギー変換および情報変換に関する機能発現を目指したい。

*) 1996年4月1日着任

櫻　井　武（助教授）*)

A-1) 専門領域：　生物無機化学，生化学，　錯体化学

A-2) 研究課題

a) マルチ銅オキシダーゼの活性中心と反応機構

b) ブルー銅タンパク質の電子移動反応

c) NO リダクダーゼの単離とキャラクタリゼーション

d) ブロモペルオキシダーゼの単離と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) ラッカーゼおよびアスコルビン酸オキシダーゼにさまざまのアニオン性の阻害剤を作用させ，嫌気下で酵素反応させることにより，通常，観測不可能なタイプ 3 銅に由来する ESR シグナルを測定し，タイプ 3 銅の立体構造が 4 面体的に大きく歪んでいることを明らかにした。また，休止状態の酵素の ESR スペクトルの温度変化から，溶解状態と凍結状態ではタンパクのコンフォメーション変化によって，各タイプの銅の立体構造が変化するばかりでなく，タイプ 2 銅の酸化状態の変化が起こることを示した。このような事実について，さらに SQUID によって検討しており，酸素の結合及び 4 電子還元部位であるタイプ 2，3 銅によって形成される三核銅クラスターの構造と反応の詳細についてアプローチしている。

b) 酸性から塩基性までの 6 種のブルー銅タンパク質の直接電気化学を実現した。静電相互作用，疎水結合，水素結合などさまざまの非共有相互作用するプロモーターで修飾した金電極およびグラシーカーボン電極を用いることにより，タンパクと電極との相互作用を制御して，電子移動反応を行った。酸化と還元の電子移動速度を個別にステップ法で決定し，さらに，電子移動反応の熱力学パラメータを求めた。これらの実験によって，タンパク北側の配位イミダゾールが電子移動反応のルートであると結論した。

c) 脱窒菌による硝酸イオンから窒素への変換による呼吸鎖の理解と NO の代謝を理解する目的で，NO リダクターゼの単離とそのキャラクタリゼーションを行いつつある，この酵素は極めて疎水性の高い膜結合性のチトクロム *bc* コンプレックスであることを確認した。

d) 能登の海底に自生しているツルアラメからブロモペルオキシダーゼを単離してそのキャラクタリゼーションを行った。当初この酵素はバナジウム含有と予想していたが，バナジウムの存在は確認できておらず，新種のブルモペルオキシダーゼである可能性もある。

B-1) 学術論文

T. SAKURAI, "Restrained Reduction of Type 3 Copper in Laccase and Ascorbate Oxidase," *Biochem.* (*Life Sci. Adv.*) **14**, 17 (1995).

T. SAKURAI and J. TAKAHASHI, "EPR Spectra of Type 3 Copper in *Rhus vernicifera* Laccase and *Cucumis sativus* Ascorbate Oxidase," *Biochim. Biophys. Acta* **1248**, 143 (1995).

T. SAKURAI and J. TAKAHASHI, "Room Temperature ESR Spectra of *Rhus vernicifera* Laccase and Derivatives," *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **215**, 235 (1995).

T. SAKURAI and F. NOSE, "Direct Electrochemistry of Blue Copper Proteins at Au Electrodes Modified with Promoters," *Chem. Let.* 1075 (1995).

T. SAKURAI , "Cyclic Voltammetry of Cucumber Ascorbate Oxidase," *Chem. Lett.* 481 (1996).

Y. NAKAO, C. MORI, T. SAKURAI, K. MATSUMOTO and H. KIMOTO, "Dinuclear Nickel(II) Complexes Containing a Dinucleating Ligand *N,N,N',N'*-Tetrakis-[(1-ethyl-2-benzimidazolyl)methyl]-2-hydroxy-1,3-diaminopropane and an Acetate Ion," *Chem. Lett.* 641 (1996).

T. SAKURAI, J. TAKAHASHI and H. HUANG, "FT-IR Spectra of the Azide-Type 3 Copper in Laccase and Ascorbate Oxidase," *Chem. Lett.* 651(1996).

B-3) 総説，著書

櫻井武,「生体微量元素」，櫻井弘，田中英彦偏，廣川書店，52-57，184-188（1996）

櫻井武,「バイオサイエンス ESR」，櫻井弘偏，廣川書店，443-455（1996）

B-7) 他大学での講義

奈良女子大学大学院理学研究科（1995 年 10 月 - 1996 年 3 月）

C) 研究活動の課題と展望

マルチ銅オキシダーゼのタイプ 2，3 銅からなる三核銅クラスターは末端酸化酵素におけるヘムーCu 中心とともに生体系において酸素を水にまで 4 電子還元する部位であるが，その構造および機能の解明が難航しており，なかなかブレークスルーができない。われわれは現在，磁気的および分光学的手段を用いてアプローチしているが，中間体を検出することが最も重要なポイントであり，欧米の研究者達の多くが避けて通っている問題にチャレンジする必要がある。また，生体系の電子移動反応についてはここ数年，われわれは電気化学的アプローチをしてきたが，既存の手法の応用では引き出せる情報に限界があるようであるので，他の測定手段の導入や新しい測定系の開発を行うことによって，より本質的な問題にチャレンジできるであろう。NO リダクターゼについては膜タンパク固有の難しさの壁が厚い。生体試料を研究対象としていると生体系固有の問題にあたってしまい，なかなか化学レベルの研究にまで到達しにくいことがある。学際的研究を目指しているとしばしばそのような壁が立ちはだかることがあり，個人の能力の高さが要求されるところである。

*) 1996 年 4 月 1 日着任

錯体触媒研究部門

塩　谷　光　彦（教授）

A-1) 専門領域：生物無機化学

A-2) 研究課題

a) 特定の DNA 塩基配列を標的とする人工金属錯体の分子設計

b) 金属整列能をもつ人工 DNA 様オリゴマーの合成

c) DNA 結合能をもつペプチド金属錯体の合成

d) 多核多次元 NMR 法による安定同位体標識化 DNA と金属錯体の相互作用解析

e) 金属医薬品の合成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 特定の DNA 塩基配列を標的とする人工金属錯体の分子設計：RNA ポリメラーゼ II 転写系のプロモーター領域にある AT クラスター部位に着目し，チミン塩基あるいは AT 塩基対に結合することによりこれらの構造を認識・変換することが期待される，新しいグリコウリル型金属錯体を設計・合成した。現在，これらの構造，溶液内挙動について検討している。また，これと関連して，環状型亜鉛錯体がアデノウィルスの TATA ボックスの構造を不安定化することを見出した。

b)金属整列能をもつ人工 DNA 様オリゴマーの合成：核酸塩基の代わりに金属配位子を有し，金属錯生成により二重らせん或いはその他の高次構造を形成する，人工 DNA 様多核金属錯体を合成している。これらを，モレキュラー・ワイヤー，金属イオンを活性点とする DNA 構造変換，転写調節などに展開したい。

c) DNA 結合能をもつペプチド金属錯体の合成：蛋白質は，α-ヘリックス，β-シートなどの特殊な構造部位により DNA の特定位置に結合するが，このような相互作用は通常蛋白質全体の高次構造を必要とする。DNA 結合性金属錯体をオリゴペプチドに担持することにより，DNA 上にオリゴペプチドの折れたたみが誘起され，三者による超分子が形成されると考えられる。メチオニン，システイン，およびヒスチジンなどのアミノ酸残基を金属配位子とする，ペプチド二量体－金属錯体を合成している。これらを DNA 転写調節領域の回文配列の認識，或いは金属中心のレドックス反応を利用した DNA の湾曲に適用する。

d) 多核多次元 NMR 法による安定同位体標識化 DNA と金属錯体の相互作用解析：DNA の核酸塩基の窒素原子を ^{15}N で選択的に標識し，NMR で解析することにより，金属イオンと核酸塩基の相互作用を直接的，かつ動的な過程として観察することができる。チミン塩基部位の N3 位を標識化したチミジンを合成し，亜鉛錯体との相互作用を ^{15}N NMR で解析した結果，脱プロトン化した N3 と亜鉛イオンの結合は，N3 の化学シフトに顕著な効果を及ぼすことが明らかになった。

e) 金属医薬品の合成：正電荷を有するアミドペンダント型環状テルビウム錯体は，グアニン塩基を多く含む多重鎖核酸と選択的に相互作用し，グアニン塩基からのエネルギー移動を経由する強い蛍光を発することを見出した。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 は，グアニン塩基を多く含む繰り返し配列をとっており，極めてユニークな四重鎖構造を形成している。テロメア DNA と相互作用する化合物は理想的な制ガ

ン剤となるといわれている。現在，テルビウム錯体とテロメア DNA モデルとの相互作用およびその機構について検討している。

B-1) 発表論文

E. KIMURA, T. IKEDA, M. SHIONOYA and M. SHIRO, "Molecular Recognition of Terephthalic Acids by Supramolecular Self-Assembly of Acridine-Pendant Zn(II)-cyclen Complex", *Angew. Chem., Int. 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. INOUYE, 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).

K. KOBAYASHI, M. SHIONOYA, E. KIMURA, K. TSUBOYAMA and S. TSUBOYAMA, "Molecular Structure of Chloro-[(2*S*, 5*S*, 8*S*, 11*S*)-2,5,8,11-tetraethyl-1,4,7,10-tetraazacyclododecane] zinc(II) Perchlorate", *Anal. Science*, **11**, 1029 (1995).

X.H. BU, D.L. AN, X.C. CAO, Y.T. CHEN, M. SHIONOYA and E. KIMURA, "Stabilization of Ni(III) Ion by Novel Macrocyclic Dioxotetraamines Bearing Functional Pendant", *Polyhedron* , **15**, 161 (1996).

Y. INOUYE, T. KANAMORI, M. SUGIYAMA, T. YOSHIDA, T. KOIKE, M. SHIONOYA, H. FUJIOKA and E. KIMURA, "Differential Contribution of Metal Complexation and Dimerization to the Chemotherapeutic Potential of Bicyclen-Zn_2^{II} Complex against Human Immunodeficiency Virus", *Biol. Pharm. Bull.* , **19**(3), 456 (1996).

X.H. BU, X.C. CAO, Z.H. ZHANG, Z.A. ZHU, Y.T. CHEN, M. SHIONOYA and E. KIMURA, "Novel Structure of an Unusual *cis* Nickel(II) Complex of a New Dioxocyclam bearing 2-Methylfuran Pendants", *Polyhedron* , **15**, 1203 (1996).

E. KIMURA, Y. KODAMA, M. SHIONOYA and T. KOIKE, "A New Cyclam with a Triphenylphosphine-pendant and Its Metal Complexes", *Inorg. Chim. Acta*, **246**, 151 (1996).

B-3) 総説，著書

E. KIMURA and M. SHIONOYA, "Zinc Complexes as Targeting Agents for Nucleic Acids" in Metal Ions in Biological Systems: Probing of Nucleic Acids by Metal Ion Complexes of Small Molecules, Ed. H. Sigel and A. Sigel, Marcel Dekker Inc., Vol. 33, p29-52 (1996).

B-4) 招待講演

塩谷光彦，核酸を認識する金属錯体の分子設計，第 34 回日本薬学会中国四国支部大会，高松，1995,10

塩谷光彦，核酸を認識・変換する金属錯体の分子設計，地域交流センターセミナー，大分大学工学部，1995,10

塩谷光彦，DNA と金属錯体が関与する超分子形成と機能，高分子九州支部フォーラム，熊本大学工学部，1996,1

B-6) 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～）

日本化学会生体機能関連化学講習会実行委員長（1996）

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

生体内では，進化の過程において精密に設計された低分子・高分子化合物が特異な相互作用をしており，その結果形成された超分子システムが生命活動という高度な物質機能を発現している。本部門では，生体超分子の動的構造・機能を分子レベルで明らかにすることを目的とし，DNA・ペプチド・金属錯体が形成する超分子とその機能に関する研究を行う。DNA の特定部位を認識・変換する新しい金属錯体を設計・合成し，これらが DNA の高次構造や蛋白質との相互作用をどのように制御できるかを種々の分光学的手法により明らかにする。また，本研究を通して DNA の新しい構造・機能を探求し，さらにバイオモレキュラー・マシンの創製を目指したい。

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)金属に結合した二酸化炭素の反応性

b)金属錯体上での二分子の二酸化炭素の活性化によるシュウ酸生成

c)プロトン濃度勾配を駆動力とする酸化還元反応

A-3) 研究活動の概略と成果

a) 配位子を電子貯‘庫とする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経由する新規ギ酸生成機構の確立

c) Ru-CO_2 を触媒とする CO_2 と CO_3^{2-} 間の可逆的 O^{2-} 交換反応

d) Ru 上での多段階二酸化炭素還元反応中間体（Ru-CO_2，Ru-COOH，Ru-CO，Ru-CHO，Ru-CH_2OH）の構造解析

e) アコ金属錯体のプロトン解離と共役させた酸化還元反応

B-1) 学術論文

H. NAGAO, N. KOMEDA, M. MUKAIDA, M. SUZUKI and K. TANAKA, "Structural and Electrochemical Comparison of Copper(II) Complexes with Tripodal Ligands", *Inorg. Chem.* in press.

K. TOYOHARA, H. NAGAO, T. ADACHI, T. YOSHIDA and K. TANAKA, "Crystal Structure of [Ru(bpy)2(CO)(h1-C(O)OH)]+ (bpy =2,2'-bipyridine) as a Key Intermediate in CO_2/CO Conversion", *Chem. Lett.*, 27 (1996).

H. NAKAJIMA, H. NAGAO and K. TANAKA, "Control of the Co-ordination Mode of 1,5-Naphthylidine Ligated to Ruthenium(II) Bipyridine Complexes", *J. Chem. Soc.*, Dalton Trans., 1405 (1996).

T. OOKUBO, H. SUGIMOTO, T. NAGAYAMA, H. MASUDA, T. SATO, K. TANAKA, Y. MAEDA, H. OKAWA, Y. HAYASHI, A. UEHARA and M. SUZUKI, "cis-μ-1,2-Peroxo Diiron Complex: Structure and Reversible Oxygenation", *J. Am. Chem. Soc.*, **118**, 701 (1996).

T. DANIELE, H. NAGAO, H. NAKAJIMA, K. TANAKA and A. NAKAMURA, "Seven-coordinated 2,2':6'2"-terpyridinemolybdenum(II) Complexes: Synthesis, Structure and Reactivity of [Mo(CO)(C_7H_8)(4,4',4"-R_3terpy)X]X' (R = H or tBu)", *J. Organometallic Chem.*, **509**, 225 (1996).

Y. KUSHI, H. NAGAO, T. NISHIOKA, K. ISOBE and K. TANAKA, "Remarkable Decrease in Overpotential of Oxalate Formation in Electrochemical CO_2 Reduction by Metal-Sulfide Cluster", *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 1223-1224 (1995)

H. NAKAJIMA, T. MIZUKAWA, H. NAGAO and K. TANAKA, "Catalytic Formation of Ketones via Double Alkylation of Carbon Monoxide Resulting from Reductive Disproqu=quinoline)", *Chem. Lett.*, **251** (1995).

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).

K. TOYOHARA, H. NAGAO, T. MIZUKAWA and K. TANAKA, "Ruthenium Formyl Complexes as the Branch point in Two- and Multi-Electron Reduction of CO_2", *Inorg. Chem.*, **34**, 5399 (1995).

H. NAKAJIMA, Y. KUSHI, H. NAGAO and K. TANAKA, "Multi-Step CO_2 Reduction Catalyzed by $[Ru(bpy)_2(qu)(CO)]^{2+}$ (bpy = 2,2'-bipyridine, qu = quinoline). Double Methylation of Carbonyl Moiety Resulting from Reductive Disproportionation of CO_2", *Organometallics*, 14, 5093 (1995).

K. TOYHARA, K. TSUGE and K. TANAKA, "Comparison of Ru-C Bond Characters Involved in Successive Reduction of Ru-CO_2 to Ru-CH_2OH", *Organometallics*, 14, 5099 (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).

D. OOYAMA, 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)ruthenium (2-), and a Chracterization of the Product Species", *Bull. Chem. Soc. jpn.*, **68**, 2897 (1995).

H. NAKAJIMA and K. TANAKA, "Novel Reversible Metallacyclization in $[Ru(bpy)_2(\eta^1\text{-napy})(CO)]^{2+}$ (bpy = 2,2'-bipyridine, napy = 1,8-naphtyridine) by Intramolecular Attack of Non-Bonded Nitrogen of napy to Carbonyl Carbon", *Chem. Lett.*, 891 (1995).

T. DANIEL, N. SUZUKI, K. TANAKA and A. NAKAMURA, "Fluxional Behavior of tert-butyl-substituted 2,2':6'2"-terpyridylmolybdenum(0) and 2,2'-bipyridylmolybdenum(II) complexes: Enhanced Solubility and Ease in NMR Study Caused by the tert-Butyl Group", *J. Organometallic Chem.*, **505**, 109 (1995).

T. DANIELE, H. NAGAO, K. TANAKA and A. NAKAMURA, "Norbonadiene(bipyridyl)molybdenum(II) Complexes: Synthesis, Structure and Reactivity of $[Mo(CO)(C_7H_8)(C_{10}H_6R_2N_2)X_2]$ (X = I, Br)", *Chem. Ber.*, **128**, 1007 (1995).

B-3) 総説，著書

K. TANAKA, "Carbon Dioxide Fixation by Catalysed by Metal Complexes", *Adv. Inorg. Chem*, **43**, 409 (1995).

B-4) 招待講演

K. TANAKA, "Carbon-carbon bond formation in multi-electron reduction of CO_2 by homogeneous catalysis", Third International Conference on Carbon Dioxide Utilization, Norman, Oklahoma (U. S. A) April 30 - May 4, 1995

K. TANAKA, "Carbon-carbon bond formation in CO_2 reduction by metal complexes", Pacifichem '95, Honolulu (U. S. A) December 17 - 22, 1995.

K. TANAKA, "Nitrite reduction by copper complexes", Pacifichem '95, Honolulu (U. S. A) December 17 - 22, 1995.

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）

第 8 回生物無機化学国際会議組織委員(1995～97)

文部省・学術振興会等の役員

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）

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (1996～)

B-7) 他大学での講義

熊本大学工学部　1995 年 12 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，炭素ー酸素結合が開裂して一酸化炭素に変換される。また，金属ー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，触媒的なシュウ酸合成が可能であることを示した。アコ金属錯体からのプロトン解離と共役させた酸化還元反応による新反応系の開発。

3-8 研究施設

電子計算機センター

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:CaNC/CaCN 分子内異性化反応に関与する電子基底及び励起状態のポテンシャルエネルギー曲面を，状態平均多参照配置 SCF 軌道を基底とした配置間相互作用法（MR-CI）により決定し，得られたポテンシャルエネルギーを多自由度スプライン関数にフィットした。次にこれを用いた波束動力学計算を行い，分子内振動エネルギー再配分（IVR）過程における大振幅振動の役割，および吸収・発光スペクトルを解析した。さらに波束動力学の計算結果から spectral 法を用いて固有関数を求め振動回転結合と異性化反応の関係についても解析をおこなった。他の系としてホルムアルデヒド分子の高い振動励起エネルギー領域において，固有値に対する振動パラメタの 2 次微分（曲率）の分布を調べることにより，振動準位構造とコリオリ摂動に対する状態の安定性を解析した。ここで求めた曲率分布の結果を他の簡単な量子カオス系（スクジアムビリヤード，スタンダードマップと比較した結果，ホルムアルデヒド系は高励起状態においても比転的長周期の準安定周期軌道が混在し小曲率を持つ準位の割合が大きい点で，スクジアムビリヤード系の分布に近いことを示した。

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明確に理解する目的で，簡単なモデル系について半古典的手法を用いた解析を行った。近可積分系の反交差は古典的な共鳴と関係があり，トーラス間のトンネル現象によるものとして説明されるが，分子の高励起状態のような非可積分系では，位相空間上の任意の二点を結ぶ実軌道が常に存在することがエルゴード性により保証されており，第ゼロ近似としては，反交差の起源を実軌道によるものであると考えるのが適当である。非可積分系の反交差と実軌道との関係を調べるために，まず，スタジアムビリヤード系に対するトレース公式を求め，フーリエ解析により量子力学的な結果との定量的な比較を行なった。次に，パラメターによる固有値変化に対して透熱変換を導入し，この結果，短い周期軌道への依存性が増大することを示した。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した。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た。

c) 分子軌道並列計算手法の開発研究:非経験的分子軌道計算を並列処理するための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，レチナール分子，ベリリュームクラスターの電子状態計算を行なった。複雑な数値計算を含んだ 2 電子積分計算を小規模なタスクに分割し，負荷の軽い計算機に動的に割り振るアルゴリズム

（pool 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, S. MINAMINO and M. AOYAGI, "Theoretical study of the potential energy surfaces and dynamics of CaNC/CaCN", *J. Chem. Phys.* (submitted)

S. KONDO, K. TOKUHASHI, H. NAGAI, A. TAKAHASHI, M. AOYAGI and S. MINAMINO, "Ab initio energetics calculation of elementary reactions relevant to low temperature Silane Oxidation by Gaussian-2 Theory", *J. Phys. Chem.* (in press)

B-4) 招待講演

青柳睦，「ワークステーションクラスタは MPP を駆逐するか」情報処理学会 JSPP96，早稲田大学（東京都），1996 年 6 月 18～20 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ックスに関る重要な課題の一つである高振動励起状態の問題を主な研究テーマとしてきた。電子状態理論の分野では今後，配置間相互作用法等の電子相関を記述する既存理論の検討と並列処理に適した新たな方法論の開発を行って行きたい。これによって化学的に興味のある大規模系への応用が可能となるだけでなく，反応動力学の基礎となるポテンシャル曲面を精密計算できる範囲が拡張される。また分子内のダイナミックスを理解する上で非常に重要な IVR の諸問題を，これまでと同様に実現的な系の特徴を中心に考察してゆく。さらに簡単な量子カオス系との比較を行うなど，より基本的な物理概念とも結び付けて発展させたい。

機器センター

猿倉　信彦（助教授）*)

A-1) 専門領域：量子エレクトロニクス，非線形光学

A-2) 研究課題

a) 遠赤外超短パルスレーザー

b) 紫外波長可変固体レーザー

c) 非線形光学

d) 超高速分光

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 遠赤外超短パルスレーザー

今までレーザーの波長におけるデッドスポットであった遠赤外領域において，世界で初めて，半導体非線形ミラーを用いての遠赤外超短パルスレーザーの発生に成功した。この領域は分子物質のフォノンやエキシトンを直接励起することができるため，非常に重要である。

b) 紫外波長可変固体レーザー

紫外波長領域において，世界で初めて全固体，かつコンパクトな mJ クラスの出力を持つ波長可変紫外超短パルスレーザーを実現した。

c) 非線形光学

半導体において，レーザー照射による遠赤外複素屈折率の変化を測定した。

d) 超高速分光

上記の成果をもとに，半導体において，エキシトンの準位に共鳴する遠赤外超短パルス光により，強制的にエキシトンを解離させる実験を現在準備中である。

B-1) 学術論文

N. SARUKURA, M.A. DUBINSKII, Z. LIU, V.V. SEMASHKO, A.K. NAUMOV, S.L. KORABLRVA, R.Y. ABDULSABIROV, K. EDAMATSU,Y. SUZUKI, T. ITOH and Y. SEGAWA, "Ce^{3+} activated fluoride crystals as prospective active media for widely tunable ultraviolet ultrafast lasers with direct 10-nsec pumping" *IEEE selected topics in Quantum electronics*, **1**. 792-804 (1995).

R. KOMATSU, T. SUGAWARA, K. SASSA, N. SARUKURA, Z. LIU, S. IZUMIDA, Y. SEGAWA, S. UDA, T. FUKUDA and K. YAMANOUCHI, "Ultraviolet application of $Li_2B_4O_7$ crystals:generation of the fifth and fourth harmonic of Nd:YAG lasers" *OSA TOPS on Advanced Solid-State Lasers*, 346-348 (1996).

T. ITATANI, T. SUGAYA, T. NAKAGAWA, Y. SUGIYAMA, Z. LIU, C. LIU, S. IZUMIDA, N. SARUKURA, T. HIKITA and Y. SEGAWA, "High-repetition-rate Mode-locked Ti:sapphire laser using a saturable Bragg reflector", *OSA TOPS on Advanced Solid-State Lasers*, 239-241 (1996).

Z. LIU, N. SARUKURA, T. HIKITA, Y. SEGAWA, M.A. DUBINSKII, V. SEMASHKO, K. NAUMOV, L. KORABLEVA and Y. ABDULSABIROV, "Ultraviolet picosecond pulses from an all-solid-state Ce:LiSAF master oscillator and Ce:LiCAF power amplifier system", *OSA TOPS on Advanced Solid-State Lasers*, 66-68(1996).

H. OHTAKE, K. TANAKA, T. TSUKAMOTO and T. SUEMOTO, "Electronic Raman scattering of photoexcited electrons in germanium", *J. Phys. Soc. Jap.*,**65**,622-626 (1996)

B-2) 国際会議のプロシーディングス

N. SARUKURA, Z. LIU, Y. SEGAWA, H. TASHIRO, V.V. SEMASHKO, A.K. NAUMOV and M.A. DUBINSKII, "Direct ultraviolet picosecond-pulse train generation from a self-injection-seeded solid-state laser", CLEO '95, paper CTuR6

T. IZAWA, M. MAEDA, N. YAMAMURA, R. UCHIMURA, T. YAKUOH, N. SARUKURA, Z. LIU, X.W. XIA, Y. SEGAWA and H. TASHIRO, "Full-range tuning of a CW Ti: sapphire laser with a single set of extremely broad-band, low-loss mirrors" CLEO '95, paper CMI7

N. SARUKURA, Z. LIU, Y. SEGAWA, S. KOSHIHARA, K. SHIMOYAMA, Y. KONDO, Y. SHIBATA, T. TAKAHASHI, S. HASEB and M. IZAWA, "Diffraction effects in spatial and spectral properties of THz radiation from bulk GaAs excited by ultrashort pulse" QELS'95, paper QThG3J

Z. LIU, N. SARUKURA, Y. SEGAWA, S.L. KORABLEVA, R.Y. ABDULSABIROV and M.A. DUBINSKII, "Ultraviolet short pulse generation and amplification in new tunable laser medium; Ce:LuLiF4" CLEO Pacific Rim '95 , paper TuB3

T. IZAWA, M. MAEDA, N. YAMAMURA, R. UCHIMURA, T. YAKUOH, N. SARUKURA, Z. LIU, S. IZUMIDA and Y. SEGAWA, "Full-range tunable CW Ti: sapphire laser using a single set of extremely broad-band, low-loss mirrors" CLEO Pacific Rim '95 , paper WB3

N. SARUKURA, Z. LIU, Y. SEGAWA, S. KOSHIHARA, K. SHIMOYAMA, Y. KONDO, Y. SHIBATA, T. TAKAHASHI, S. HASEBE and M. IKEZAWA,"Diffraction effects in spatial and spectral properties of THz radiation from ultrashort-pulses-excited GaAs" CLEO Pacific Rim '95, paper FP5

P. DENG, Q. ZHANG, F. GAN, N. SARUKURA, Z. LIN and Y. SEGAWA, "Novel design of high-gain amplifiers using high-concentration and high single-pass-gain Ti: sapphire grown by new growth techniques" CLEO Pacific Rim '95 , paper WB1

K. SHIMAMURA, V.V. KOCHURIKHIN, T. MAEDA, T. TANIUCHI, T. FUKUDA, N. SARUKURA and Y. SEGAWA , "Growth and Optical Properties of Nd3+ doped REVO4(RE=Y, Gd) Single Crystals for Laser Applications" CLEO Pacific Rim '95

N. SARUKURA, Z. LIU, Y. SEGAWA, V.V. SEMASHKO, A.K. NAUMOV, S.L. KORABLEVA, R.Y. ABDULSABIROV and M.A. DUBINSKII, "Direct, ultraviolet, sub-nanosecond pulse-train generation from an all-solid-state Ce: LiCAF laser pumped by the fourth harmonic of a Nd: YAG laser" OSA Annual meeting '95, paper WW7

N. SARUKURA, Z. LIU, S. IZUMIDA, Y. SEGAWA, V.V. SEMASHKO, A.K. NAUMOV, S.L. KORABLEVA, R.Y. ABDULSABIROV and M.A. DUBINSKII, "Ultraviolet picosecond pulses from an all-solid-state Ce:LiSAF master oscillator and Ce:LiCAF power amplifier system" Advanced solid-state lasers '96, paper FG6

R. KOMATSU, T. SUGAWARA, K. SASSA, N. SARUKURA, Z. LIU, S. IZUMIDA, Y. SEGAWA, S. UDA, T. FUKUDA and K. YAMANOUCHI, "Ultraviolet application of Li2B4O7 crystals: Generation of the fifth and fourth harmonic of Nd:YAG lasers" Advanced solid-state lasers '96, paper FG2

T. ITATANI, T. SUGAYA, T. NAKAGAWA, Y. SUGIYAMA, Z. LIU, C. LIU, S. IZUMIDA, N. SARUKURA, T. HIKITA and Y. SEGAWA, "High-repetition-rate mode-locked Ti:sapphire laser using a saturable Bragg reflector" Advanced solid-state lasers '96, paper FF2

B-3) 総説・著書

光学技術コンタクト「非線形ミラー」

光学「新紫外波長可変固体レーザー」

B-4) 招待講演

猿倉信彦，"Present and future of new laser technologies for scientific researches"

NIBB International Symposium (Tue.,Nov.12～Thu., Nov. 14, 1996)

B-5) 受賞

電気学会論文発表賞（1994）

B-6) 学会及び社会活動

学協会役員，委員

科学技術庁委員（1995）

通産省電子技術総合研究所客員研究員（1994）

C) 研究活動の課題と展望

近赤外領域のチタンサファイアレーザーの様にエレガントで新しい固体レーザー媒質などを用いた全固体紫外波長可変レーザーや遠赤外超短パルスレーザーの開発とその分子科学への応用を手がける予定でいる。

*) 1996年2月15日着任

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クー分子を合成した。これらの中にはヘテロ原子の相互作用で特異な分子集合体を形成するものや，一段階で二電子酸化還元を行うものがある。

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-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：非古典的なチアジアゾール環を利用することで世界最小のバンドギャップを持つポリマーの合成に成功した。

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，ビス（1，3ージチオール）ドナーなどの新規物質の合成に応用した。

B-1) 学術論文

M. HIRAYAMA, T. TERASAKA, M. ITASAKA, T. SUZUKI, Y. YAMASHITA and T. MIYASHI, "ESR of the Trianion and Anion Radicals of Benzo[g][1,2,5]thiadiazolo[3,4-b]quinoxaline-5,10-dione and Its Selenium Analogue", *Chem. Lett.*, 837 (1995).

E. HASEGAWA, H. KATAGIRI, D. NAKAGAWA, T. HORAGUCHI, S. TANAKA and Y. YAMASHITA, "Electron Transfer Induced Stereoselective Cyclization of 2,2'-Disubstituted Dibenzoylmethane to anti-Cyclopropane-1,2-diol", *Tetrahedron Lett.*, **36**, 6915 (1995).

J. DONG, K. YAKUSHI and Y. YAMASHITA, "Spectroscopic Study of Solid BDNT and Its Monocation and Dication Salts", *J. Mater. Chem.*, **5**, 1735 (1995).

M. TOMURA and Y. YAMASHITA, "Syntheses and Properties of Novel Conducting Dithiolato-Metal Complexes Having Peripheral Heteroatoms and Extended π-Conjugated Systems", *J. Mater. Chem.*, **5**, 1753 (1995).

M. HIRAYAMA, T. TERASAKA, Y. MORITA, T. SUZUKI, Y. YAMASHITA and T. MIYASHI, "ESR of the π-Radical Formed by Photoreduction of Bis(1,2,5-selenadiazolo)tetracyano-quinodimethane in Methanol. Observation of a Large ^{77}Se Hfs", *Chem. Lett.*, 1021 (1995).

V.N. DENISOV, A.V. IVLEV, B.N. MAVRIN, K. YAKUSHI, J. DONG and Y. YAMASHITA, "Resonant Raman Scattering in Single Crystals BDNT, $BDNT^{1+}$ and $BDNT^{2+}$", *Chem. Phys. Lett.*, **246**, 176 (1995).

M. HIRAYAMA, T. TERASAKA, Y. YAMASHITA, T. SUZUKI, T. MIYASHI and Y. USUI, "ESR of the Anion Radical of 2,6-Dithioxobenzo[1,2-d:4,5-d']bis[1,3]dithole-4,8-dione. Observation of the Satellites of ^{17}O, ^{13}C, and ^{33}S and the Second-Generation Satellites due to Both ^{13}C and ^{33}S in Natural Abundance", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **68**, 3337 (1995).

C. KITAMURA, S. TANAKA and Y. YAMASHITA, "New Narrow-Bandgap Polymers Composed of [1,2,5]Thiadiazolo[3,4-g]quinoxaline and Aromatic Heterocycles", *Chem. Lett.*, 63 (1996).

C. KITAMURA, S. TANAKA and Y. YAMASHITA, "Design of Narrow-Bandgap Polymers. Syntheses and Properties of Monomers and Polymers Containing Aromatic-Donor and o-Quinoid-Acceptor Units", *Chem. Mater.*, **8**, 570 (1996).

Y. YAMASHITA, M. TOMURA and K. IMAEDA, "Unusual Cation Radical Salts of Nonplanar Bis(1,3-dithiole) Donors Incorporating Solvent Molecules", *Chem. Commun.*, 2021 (1996).

J. DONG, K. YAKUSHI, Y. YAMASHITA, K. IMAEDA and H. INOKUCHI, "Electronic and Vibronic Structure of Nonplanar Organic Charge Transfer Salt m-BDNT-PF_6", *Phys. Stat. Sol. (b)* **195**, 611 (1996).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. YAKUSHI, J. DONG, M. URUICHI and Y. YAMASHITA, "Spectroscopic Studies on BDNT Having a Property of One-Step Two-Electron Oxidation: $BDNT^{0}$, $BDNT^{+1}$, and $BDNT^{2+}$", *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **284**, 223 (1996).

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）

有機合成化学協会東海支部幹事(1995-)

学会誌編集委員

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，ドナーアクセプター系分子で HOMO–LUMO ギャップの縮小により単一成分として高電導性の実現を計る。さらに，真性導電性を目指した小さなバンドギヤツプポリマーの開発や分子エレクトニクスを目的とした分子電線や分子スイッチの開発研究を行う。

装置開発室

渡　邉　三千雄（助教授）

A-1) 専門領域：装置関発

A-2) 研究課題

a) 真空技術

b) 精密駆動技術

c) 高圧技術

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 多目的超高真空下試験装置を試作し，現状 $8^{X}10^{-11}$ torr 下での試験が出来るようになった。この装置に，摩擦試験ユニットを付加し，超高真空下での摩擦試験を実施する予定。その第一段階として，超高真空下における潤滑膜の評価と開発に取り組む。

b) ピエゾ素子駆動型アクチュエータを入手し，性能を評価した。精度が不十分なので今後改良する。

c) NMR 用高圧プローブを検討し，現在試作中。

C)　研究活動の課題と展望

A-2)で述べた項目を逐次推進し，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：量子エレクトロニクス

A-2) 研究課題

a) 放射光を用いた短波長域フェムト秒フォトンエコー

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 放射光を用いた短波長域フェムト秒フォトンエコー：インコヒーレント・フォトンエコー測定法は，超短パルスレーザーでなく連続スペクトル光を用いてフェムト秒時間分解能のフォトンエコー測定を可能にする。これまでに放射光の可視・紫外光を用いてこれが実証されてきた。これを発展させるべく，放射光の特質を生かして，真空紫外領域のフォトンエコー測定を可能にし固体の色中心の位相緩和時間を測定する手法を確立する事を目標にしている。現在そのための装置を製作中である。

C)　研究活動の課題と展望

放射光のX線領域の連続スペクトル光を用いることにより，同様の手法のフォトンエコーにより，将来的には内殻励起の位相緩和現象を研究できる可能性がある。

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) 新物質の光物性研究と新しい測定方法の開発

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：固体の内殻励起状態は，輻射過程，光電子放出，欠陥生成，脱離などの種々の脱励起過程を経て，エネルギーを散逸する。これらの各過程の起こる機構やそれらに含まれる物性情報との関係などを解明することを目的として，研究を行っている。たとえば，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，Cs ハライドについて，その遷移に温度依存性があることを見いだし，電子格子相互作用による効果が大きいことを明らかにした。

b) イオン結晶表面における光スパッタリング過程の研究：結晶表面を電子線や光で励起すると，表面で光反応が生じたり，欠陥が生成されたり，構成原子が放出したりする。これらの機構を解明することを目指して研究を行っている。たとえば，アルカリハライドの構成原子の放出について，光脱離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。また，レーザーと放射光の同期を取り，レーザー誘起蛍光法により脱離原子の測定ならびに脱離の時間応答性に成功し，基底状態原子のナノ秒の脱離を初めて見いだした。

c) 半導体表面における吸着，結合状態の研究：結晶表面はバルクとは異なった構造と電子状態を示し，表面に特有の物性を発現させたり，表面での光反応に関係している。そこで，清浄および吸着した表面における電子状態の研究を行っている。たとえば，電子放出材としての負の電子親和力表面をもつ O_2/Cs/GaAs について，共吸着状態の研究を行い，2 段階の過程で負の電子親和力表面が形成されることを見いだした。

d) 新物質の光物性研究と新しい測定方法の開発：放射光を利用した研究を行う上で，測定装置の開発は不可欠であるとの認識の基に，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した。また，シンクロトロン放射光を分光する新型分光器を建設し，円偏光を発生させるアンジュレーターも建設した。これらが，接続した暁には，円偏光が真空紫外領域で利用することが可能になり，電子のスピン状態に依存した状態分析や光反応の研究ができるものと期待している。また，$C_{60}F_{48}$ や $CsTaF_6$,BaFCl などの電子状態を調べた。

B-1) 学術論文

S. HIROSE and M. KAMADA, "Photon-Stimulated Desorption of Excited-State Sodium Atom from NaF and NaCl under Valence-Band and Core-Level Excitations", *J. Phys. Soc. Jpn,* **65**, 1849 (1996).

T. YAMANAKA, T. MATSUSHIMA, S. TANAKA and M. KAMADA, "Orientation of oxygen admolecules on a stepped platinum (113) surface" *Surface Science*, **349**, 119 (1996).

S. KIMURA, Y. SATO, F. ARAI, M. IKEZAWA, M. KAMADA, K. KATOH and M. KASUYA, "Optical and Photoelectrical Studies of Electronic Structure of $R_3Au_3Sb_4$(R=La,Ce and Pr)", *J. Phys. Soc. Jpn,* **64**, 4278 (1995).

S. HIROSE and M. KAMADA, "Dynamics of Photon-Stimulated Desorption of Excited-State Alkali Atoms from Alkali Halides", *J. Phys. Soc. Jpn*, **64**, 4434 (1995).

B-2) 国際会議のプロシーデイングス

S. KIMURA, M. KAMADA, H. HAMA, X.M. MARECHAL, T. TANAKA and H. KITAMURA, "Design of a helical undulator for UVSOR", *J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, **80**, 437 (1996)

M.A. TEREKHIN, N. YU. SVECHNIKOV, V.G. STANKEVITCH, A.A. KOLMAKOV, V.A. STEPANOV, N. BEZMELNITSIN, M. KAMADA, K. KAN'NO and I. AKIMOTO, "Radiative transitions in C_{60} thin films under SR excitation", *J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, **78**, 445 (1996)

I. OUCHI, I. NAKAI, M. KAMADA and S. TANAKA, "Polarized abosrption spectra of polyethylene terephthalate and polyethylene naphthalate films in soft x-ray region", *J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, **78**, 363 (1996)

M. ITOH, N. OHNO, H. YOSHIDA, S. HASHIMOTO, K. KAN'NO and M. KAMADA, "Auger-free luminescence in mixed alkali halides", *J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, **79**, 117 (1996)

S. TANAKA, N. TAKAHASHI, K.P. LEE and M. KAMADA, "Surface core exciton of alkali chloride film on Si(100)", *J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, **80**, 205 (1996)

M. KAMADA, N. TAKAHASHI, S. HIROSE, S. OHARA, M.A. TEREKHIN, S.S. GALAKTINOV and S.S. GALAKTIONOV, "Photoelectron and Luminescence Spectra of BaFCl, BaFBr, and $CsTaF_6$", *J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, **80**, 143 (1996)

S. HIROSE and M. KAMADA, "Photon-Energy Dependence of Excited-State Na Desorption from Na Halides by Synchrotron Radiation", *J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, **80**, 113 (1996)

T. YAMANAKA, T. MATSUSHIMA, S. TANAKA and M. KAMADA, "Orientation and desorption of oxygen admolecules on a Pt(113) stepped surface", *J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, **80**, 105 (1996)

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

Int. Symp. on Application of Synchrotron Radiation (Hefei, 1994)　1994.10

Int. Advisary Committee

日本放射光学会合同シンポ組織委員　1995. 1

学術雑誌編集委員

Synchrotron Radiation News 誌 Correspondent　1993　4-現在

C) 研究活動の課題と展望

シンクロトロン放射光とレーザーの同期実験に成功し，光脱離のダイナミックスの研究が大きく進展したので，今後は単純な系での機構解明と新材料物性研究への適用の段階になった。また，2 光子内殻分光実験やフォトンエコーなどの放射光分光学の新しい課題への試みも引き続き遂行したい。さらに，研究課題の飛躍のために数年かけて開発してきた，新型分光器，スピン角度分解光電子分光装置および円偏光アンジュレーターの建設が一段落し，性能試験を遂行中であるので，いよいよ，それらを用いた，放射光物性研究が始められる段階になった。

濱　広　幸（助教授）

A-1) 専門領域：加速器物理，原子核物理

A-2) 研究課題

a) 加速器を用いた可干渉光生成の研究

b) 円形加速器における非線形ビームダイナミクスの研究

c) 高エネルギー γ 線を用いた元素生成過程の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a)電子蓄積リングに基づく自由電子レーザー（FEL）の実験的基礎研究において，円偏光アンジュレータを用いたオプティカルクライストロンを考案し，これを用いて紫外域の FEL 実験を行ない，世界で最も短波長（240nm）のレーザー発振に成功した。

b) 高調波加速空洞を併用した 2 加速空洞システムを用いた電子蓄積リングにおけるバンチ結合型不安定性の振る舞いとランダウ減衰による安定化の様子を，理論計算と比較しよい一致を得た。

c) 自由電子レーザーを利用して，共振器内での光子と電子の衝突による非常に強度の強い γ 線発生を実験的に調べた。この γ 線の高強度・単色性を利用し，これまで測定が困難といわれた微小反応断面積の光子－核反応を調べる可能性を開いた。

B-1) 学術論文

H. HAMA, K. KIMURA, J. YAMAZAKI, S. TAKANO, T. KINOSHITA and M-E. COUPRIE, "Microscopic Study on Lasing Characteristics of the UVSOR Storage Ring Free Electron Laser", *Nucl. Instr. and Meth.* **A375**, 32 (1996).

H. HAMA, "A Helical Optical Klystron for an UV-FEL Project at the UVSOR", *Nucl. Instr. and Meth.* **A375**, 57 (1996).

K. KIMURA, J. YAMAZAKI, S. TAKANO, T. KINOSHITA and H. HAMA, "Gain Narrowing of Spectral and Temporal Widths in the UVSOR-FEL", *Nucl. Instr. and Meth.* **A375**, 62 (1996).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

S. KIMURA, M. KAMADA, H. HAMA, X.M. MARECHAL, T. TANAKA and H. KITAMURA, "Design of a Helical Undulator for UVSOR", *J. Elec. Spec. and Rel. Phen.* **80**, 437 (1996).

E. NAKMURA, H. HAMA, J. YAMAZAKI, T. KINOSHITA, O. MATSUDO, H. YONEHARA, T. KASUGA, G. ISOYAMA and M. WATANABE, "Construction and Commissioning of a Superconducting Wiggler for the UVSOR Storage Ring", *J. Elec. Spec. and Rel. Phen.* **80**, 421 (1996).

H. HAMA, "Status and Recent Progress on the UVSOR Storage Ring", *Proc. of 4th Int. Conf. on Synch. Rad. Sources, Kyongju, Korea*, 46 (1995).

B-4) 招待講演

H. HAMA, "Microscopic Study on Lasing Characteristics of the UVSOR Storage Ring Free Electron Laser", *17th Int. Free Electron Laser Conf., New York City, New York*, August 1995.

C) 研究活動の課題と展望

次世代の光源といわれて久しい自由電子レーザーであるが，紫外あるいは真空紫外の短波長領域においては，困難な状況にある。UVSOR-FEL でこれまで行なってきた短波長化にいったん区切りをつけ，FEL の制御および性能の向上のため，加速器物理や光学などの多方面からのアプローチを行ない，また FEL に最適化されうる電子蓄積リングのデザインを進める。加えて FEL の応用の観点から，He 燃焼による元素生成過程で重要な軽い核の (α, γ) 反応における共鳴状態の断面積を，FEL 共振器内での逆コンプトン散乱で生成する高エネルギー γ 線を用いて測定する実験の可能性を探る。

木　下　豊　彦（助教授）

A-1) 専門領域：放射光光物性，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) UVSOR 軟 X 線ビームラインの改造

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a-1)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。

a-2)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。core level に対する実験を行い，理論計算との比較を試みた。

a-3)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 cross section 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，これまでには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て，さらなる発展が期待される。

a-4)単純金属の内殻電子の高分解能光電子分光:単純金属の一つであるアルミニウム表面の高分解能光電子分光を高エネルギー物理学研究所，放射光実験施設において行った。よくキャラクタライズされた表面を準備することにより，これまでにない精度で内殻線の非対称パラメーターを決めることができた。これによって，光電子放出にともなう多体効果の影響を精度よく議論した。

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，予備的なデータを得た。今後，いろいろな物質に対して測定を行っていく予定である。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たいして行い，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。

c) 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，300～6000Åの領域で固体分光の実験に利用されてきたが，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進めている。500～10000Å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。

d) UVSOR 軟 X 線ビームラインの改造：UVSOR の BL7A に設置されている 2 結晶軟 X 線分光器は 1.7keV 以下の領域で分光実験が行える世界でも貴重なビームラインである。（他の施設では熱負荷や放射線損傷などのため，この領域をカバーできる結晶がダメージを受けやすい。）一方，このビームラインでは挿入光源の一つである 4 テスラーウィグラーの利用により，高エネルギー領域の光の利用も可能となっている。しかし，ウィグラー光利用の際には，低エネルギー用の分光結晶はダメージを受けやすいために偏向電磁石からの光を利用するべくビームラインを動かす作業が必要となっている。この作業は労力と時間を必要とし，ビームラインの性能を発揮できないままユーザータイムに供せざるを得ないような状況も生じている。また，ユーザーからは光を鏡によって集光することによりより小さいサンプルに対する実験を行いたい旨の要求も出てきている。集光を行うことにより，これまでは不可能であった光電子分光実験も可能になることが期待できる。われわれは所外ユーザーの協力もあおぎ，これらの要求を満たすようなビームラインの改造計画をスタートさせた。その一つは 2keV 以下の分光結晶であり，放射線損傷の少ない YB66 の利用である。スタンフォードの施設についでこの分光結晶による分光実験に成功した。また，1997 年度には集光と高エネルギー光をカットするフィルター作用を兼ね備えたミラーシステムをビームラインに導入することにより，上記の問題の解決に当たりたい。

B-1) 学術論文

Y. SAITOH, T. MATSUSHITA, S. IMADA, H. DAIMON, S. SUGA, J. FUJII, K. SHIMADA, A. KAKIZAKI, K. ONO, M. FUJISAWA, T. KINOSHITA and T. ISHII, "Spin-resolved 3p and 3s Core-level Photoemission Spectra of Ferromagnetic Nickel", *Phys. Rev.* B52 R11549 (1995).

F. U. HILLEBRECHT, T. KINOSHITA, D. SPANKE, J. DRESSELHAUSE, CH. ROTH, H.B. ROSE and E. KISKER, "New magnetic linear dichroism in total photoelectron yield for magnetic domain imaging", *Phys. Rev. Lett.* **75** 2224 (1995).

F.U. HILLEBRECHT, H.B. ROSE, T. KINOSHITA, Y.U. IDZERDA, G. VAN DER LAAN, R. DENECKE and L. LEY., "Photoelectron diffraction in magnetic linear dichroism", *Phys. Rev. Lett.* **75** 2883 (1995).

K.S. AN, R.J. PARK, J.S. KIM, C.Y. PARK, S.B. LEE, T. ABUKAWA, S. KONO, T. KINOSHITA, A. KAKIZAKI, and T. ISHII, "Initial interface formation study of the Mg/Si(111) system", *J. Appl. Phys.* **78** 1151 (1995).

H.B. ROSE, A. FANELSA, T. KINOSHITA, CH. ROTH, F.U. HILLEBRECHT and E. KISKER, "Spin-orbit-induced spin-polarization in W 4f photoemission", *Phys. Rev.* **B53** 1630 (1996).

M. WATANABE, T. KINOSHITA, A. KAKIZAKI and T. ISHII, "Line shape asymmetry of 2p core level photoemission spectrum of Al(100) single crystal", *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** 1730 (1996).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

H.B. ROSE, T. KINOSHITA, CH. ROTH and F.U. HILLEBRECHT, "Photoelectron diffraction in spin-resolved photoemission and magnetic linear dichroism"; Proceedings of the International Workshop on Spin-Orbit Influenced Spectroscopies of Magnetic Solids, Herrsching, Germany, April 1995, in Lecture Notes of Physics, edited by H. Ebert and G. Schütz, Springer Verlag, Berlin 1995, p.105-124.

T. KINOSHITA, H.B. ROSE, CH. ROTH, D. SPANKE, F.U. HILLEBRECHT and E. KISKER, "A new type of magnetic linear dichroism at Fe and Co M2,3 edges"; *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **78** 237 (1996).(Proceedings of the 11th International Conference on Vacuum Ultra Violet Radiation Physics, Tokyo August 1995).

T. KINOSHITA, H.B. ROSE, CH. ROTH. F.U. HILLEBRECHT and E. KISKER,"Magnetic linear dichroism in spin-resolved Gd 4f photoemission"; *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **78** 333 (1996).(Proceedings of the 11th International Conference on Vacuum Ultra Violet Radiation Physics, Tokyo August 1995).

D. SPANKE, J. DRESSELHAUSE, T. KINOSHITA, CH. ROTH, H.B. ROSE, F.U. HILLEBRECHT and E. KISKER, "Element-specific magnetic domain imaging based on linear and circular magnetic dichroism in photoabsorption"; *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **78** 299 (1996).(Proceedings of the 11th International Conference on Vacuum Ultra Violet Radiation Physics, Tokyo August 1995).

Y. SAITOH, S. SUGA, A. KAKIZAKI, T. MATSUSHITA, S. IMADA, H. DAIMON, K. ONO, M. FUJISAWA, T. KINOSHITA, T. ISHII, J. FUJII and K. SHIMADA, "Spin-resolved core-level photoemission spectra of ferromagnetic nickel"; *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **78** 329 (1996).(Proceedings of the 11th International Conference on Vacuum Ultra Violet Radiation Physics, Tokyo August 1995).

T. MATSUSHITA, S. SUGA, Y. TANAKA, H. SHIGEOKA, T. NAKATANI, T. OKUDA, T. TERAUCHI, T. SHISHIDOU, A. KIMURA, H. DAIMON, S.J. OH, A. KAKIZAKI, T. KINOSHITA, H. NEGISHI and M. INOUE, "Angle-resolved photoemission study of MxTiS2 (M=Mn, Fe, Co, Ni; x=1/3, 1/4)"; *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **78** 477 (1996). (Proceedings of the 11th International Conference on Vacuum Ultra Violet Radiation Physics, Tokyo August 1995).

K.S. AN, R.J. PARK, J.S. KIM, C.Y. PARK, C.Y. KIM, J.W. CHUNG, T. KINOSHITA and A. KAKIZAKI, "Photoemission study for Mg/Si(111)1x1 surface"; *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **80** 165 (1996). (Proceedings of the 11th International Conference on Vacuum Ultra Violet Radiation Physics, Tokyo August 1995).

T. OKUDA, H. DAIMON, H. SHIGEOKA, S. SUGA, T. KINOSHITA and A. KAKIZAKI, "Surface core level shifts of the Au adsorbed Si(111) reconstructed surfaces"; *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **80** 229 (1996).(Proceedings of the 11th International Conference on Vacuum Ultra Violet Radiation Physics, Tokyo August 1995).

T. ABUKAWA, M. SASAKI, F. HISAMATSU, M. NAKAMURA, T. KINOSHITA, A.KAKIZAKI, T. GOTO and S. KONO, "Core-level photoemission study of the Si(111)4x1-In surface"; *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **80** 233 (1996).(Proceedings of the 11th International Conference on Vacuum Ultra Violet Radiation Physics, Tokyo August 1995).

T. OKANE, M. YAMADA, S. SUZUKI, S. SATO, T. KINOSHITA, A. KAKIZAKI, T. ISHII, T. KOBAYASHI, S. SHIMODA, M. IWAKI and M. AONO, "Photoemission and ion scattering study of Ce/Ni(110) and Ce/Cu(110) systems"; *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **80** 241 (1996). (Proceedings of the 11th International Conference on Vacuum Ultra Violet Radiation Physics, Tokyo August 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).

第 10 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，プログラム委員(1996-1997).

7th International Conference on Electron Spectroscopy, Local Commitee (Chiba,September 1997).

C) 研究活動の課題と展望

昨年に引き続いてわれわれのグループでは固体，および固体表面の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すすめている。光電子顕微鏡では予備的なデータを得，これからは実際の物質に対する研究に進む段階に来た。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。マンパワーの不足という問題はあるが，外国人特別研究員や所内外のグループとの協力によって研究を進めている。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ているが，そのための新しいビームラインの導入を初めている。BL7B の分光器を高性能直入射のものに置き換える作業が進行中であり，さらに BL7A の軟 X 線 2 結晶分光器では集光機能を備え付ける改良を進めたり，新しい分光結晶（YB66）による分光を試みたりといった改造を進めている。今後，これらの改造ビームラインからの成果が上がってくることが期待される。

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) 赤外磁気光学効果分光法の開発

c) 挿入光源・真空紫外分光器の開発

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，総合的な電子状態に関する知見を得ている。例えば，ヘビーフェルミオンで混合原子価を示す Yb_4As_3 は，通常の金属とは違った電気抵抗・ホール効果を示すことが以前より知られていたが，この原因が明確ではなかった。そこで，遠赤外から真空紫外領域 (2meV～50eV)の光反射スペクトルの温度変化を，39～320K の間で詳細に調べ，電子状態の情報を得た。その結果，フェルミ準位近傍の 4f-5d 混成により多体的に生じたホールバンドが，温度の上昇によってフェルミ準位に近づき，200K 付近でフェルミ準位を横切り，伝導帯に移行したためであることがわかった。また，混合原子価状態にある，Yb_3S_4，TmSe 等の電子状態を，光反射，共鳴光電子，共鳴逆光電子分光により調べている。

b) 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の建設が完了した。この装置は，波長範囲: 1meV～1eV，温度範囲: 10～400K，磁場範囲: 0～8T の各パラメータを 3 次元的に変えた分光測定が可能である。例えば，磁気ポーラロンを示す物質である GdAs は，約 0.4eV にキャリアによるプラズマ端が観測されるが，その反射スペクトルの磁場変化は，温度 78K では 6T で約 2%であるが，15K では約 20%に達することが観測された。このキャリアは，Gd^{3+}の作る磁気モーメントで散乱されており，低温になるほどその散乱は強い。また，この状態は磁場を加えることで，散乱が弱くなり，その結果が，反射スペクトルの磁場による変化として現れると考えられる。今後は，放射光の円偏光性を利用し，赤外領域での磁気円偏光二色性を用いた電子状態の研究を行っていく予定である。

c) 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，建設を完了した。また，次世代放射光の挿入光源として，赤外円偏光ウィグラーを提案している。

B-1) 学術論文

N. SHINO, S. SUGA, S. IMADA, Y. SAITOH, H. YAMADA, T. NANBA, S. KIMURA and S. KUNII, "Photoemission, inverse photoemission and optical studies of rare-earth hexaborides", *J. Phys. Soc. Jpn.* **64** 2980 (1995).

S. KIMURA, Y. SATO, F. ARAI, M. IKEZAWA, M. KAMADA, K. KATO and M. KASAYA, "Optical and Photoelectrical Studies of Electronic Structure of $R_3Au_3Sb_4$ (R=La, Ce and Pr)", *J. Phys. Soc. Jpn.* **64,** 4278 (1995).

B-2) 国際会議のプロシーデイングス

S. KIMURA, F. ARAI and M. IKEZAWA, "Mixed valence of praseodymium oxides", *J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **78**, 135 (1996).

M. MATSUMOTO, K. SODA, K. ICHIKAWA, T. TAGUCHI, K. JOUDA, M. KAGEYAMA, S. TANAKA, N. SATA, Y. TEZUKA, S. SHIN, S. KIMURA and O. AITA, "Photoemission study of CeO_2 and $SrCeO_3$", *J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **78**, 179 (1996)

S. KIMURA, H. HAMA, M. KAMADA, X. MARÉCHAL, T. TANAKA and H. KITAMURA, "Design of a helical undulator for UVSOR", *J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **80,** 437 (1996).

B-3) 総説，著書

木村真一，「光電子分光と光物性」 物性研究 **65**-4 (1996-1), p. 445. （強相関伝導系の物理 若手夏の学校 講義ノート)

B-4) 招待講演

S. KIMURA, "Applications of IR and Far IR Synchrotron Radiation in Japan", Japan-US Seminar of New Far Infrared Source, Detectors and Solid State Measurements, Fujiyoshida, 1995.

S. KIMURA, "Optical Study of Low Carrier Concentration Systems", Japan-France Seminar on Thermal, Magnetic and Electric Properties of Rare-Earth Compounds, Toyama, 1996.

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遠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，広いエネルギー範囲で円及び直線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，先ずは装置の開発が必要であると考えている。

下　條　竜　夫（助手）*)

A-1) 専門領域：化学反応動力学

A-2) 研究課題

a) 分子の光イオン化解離過程のダイナミクス

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 現在 PEPICO 等の測定により，内殻励起後のオゾンのイオン化解離ダイナミクスの研究を行っている。またイオン化解離の新たな測定方法として，二次元画像観測法を利用したコインシデンス測定装置の開発に従事している。

B-1) 学術論文

T. GEJO, P. FELDER and J.R. HUBER, "The concerted photodissocation of azomethane at 193 nm", *Chem. Phys.*, **195** 423 (1995).

M.-A. THELEN, T. GEJO, J.A. HARISSON and J.R. HUBER, "The photodissocation of ozone in the Hartly band: Fluctuation of the vibrational state distribution in the $O_2(^1D_g)$ fragment", *J. Chem. Phys.*, **103** 7946 (1995).

A. FURLAN, T. GEJO and J.R. HUBER, "Probing curve crossing by wavelength dependent recoil anisotropy: The photodissociation of CF3I at 275-303 nm studied by photofragment translational spectroscopy ", *J. Phys. Chem.*, **100** 7956 (1996).

T. GEJO, J.A. HARISSON and J.R. HUBER, "The three-body photodissociation of 1,3,5-triazine", *J. Phys. Chem.*, **100** 13941 (1996).

T. GEJO, H. BITTO and J.R. HUBER, "Quantum beats in the S_1 dynamics of acetaldehyde ", *Chem. Phys. Letters*, **261** 443 (1996).

C) 研究活動の課題と展望

気相中でのイオンの解離は質量分析の基本的な研究課題であり，また大気物理化学や宇宙化学の分野でも重要な現象である。とくに短い寿命の孤立イオンの解離はもっとも単純な単分子反応の一つであり化学反応の重要なテーマでもある。４月から UVSOR に赴任後，今までの分子の光中性解離ダイナミクスの研究から，新たにこの光イオン解離過程の研究に従事している。今後は自由電子レーザー（FEL）と SOR 光のパンプ・プローブ実験，クラスター内またはマトリックス中での分子のイオン化解離過程など，UVSOR の独自性を生かした分子の解離ダイナミクスの実験に着手していきたいと考えている。

*) 1996 年 4 月 1 日着任

3-9 開発研究センターの創設

分子研リポート'95 でその詳細を発表した開発研究センター構想が認められ，1997 年度に 2 つの開発研究センターが創設されることになった。創設される開発研究センターの内容は次の通りである。

分子制御レーザー開発研究センター

(1)分子位相制御レーザー開発研究部

(2)放射光同期レーザー開発研究部

(3)特殊波長レーザー開発研究部

分子物質開発研究センター

(1)パイ電子開発研究部

(2)融合物質開発研究部

(3)機能探索研究部

(4)分子配列制御研究部

各研究部は専任の助教授をリーダーとする独立の研究グループを構成する。

開発研究センターの目的は，分子科学に新機軸をもたらす可能性のある特定の開発研究を研究系との緊密な協力の下で推進し，分子科学の新分野の開拓とその飛躍的発展を期するにある。この点でサービスを主業務としていた従来の施設とは異なり，研究のブレークスルーを成しとげるための新たな施設である。本センターの設立により新しく芽の出た研究を大きく育てる体制がととのったと考えられる。センター助教授に優秀な人材を得，研究系とセンターが一丸となって研究のピークをつくることがわれわれに課せられた課題である。

なお，2 つの開発研究センターの創設に伴って，現在の機器センター，極低温センター，化学試料室の 3 研究施設は廃止され，これらの施設で行ってきたサービス業務は 2 センターが引き継ぎ行うことになる。

４．点検評価と課題

4．点検評価と課題

分子研では3年前の1993年に他にさきがけて，外部評価委員による7研究系（専任18研究部門）の徹底的評価を行い，これを分子研リポート'93に報告した。これは分子研の研究者にとって非常に大きな刺激になったと同時に，歯に衣着せぬ辛口の評価が内外に多大な反響を呼び，外部評価の分子研方式として有名になった。1994年には5研究施設について同様な外部評価を行うとともに，2年にわたる評価に基づいて将来計画の策定に全所をあげて取り組んだことを報告した。1995年には将来計画中の最大の目玉である，現施設の再編による2つの開発研究センターの創設の検討および概算要求にむけての成案作りに取り組み，その詳細を分子研リポート'95に発表した。こうして外部評価→将来計画→概算要求というプロセスが3年間で完結し，その結果，2つの開発研究センターがほぼ当初計画した形で1997年4月から実現することになった。こうして3年間にわたる努力が実り一応の成果を得ることができたが，これはまさに1993年に行った外部評価が基礎になっていることを強調したい。

第一回の外部評価を行って以来3年が経過した。この間，分子研をめぐる内外の情勢は大きく変化した。とくに流動性の著るしい分子研では，研究者の転出入による大きな入れ替え，新部門の創設による研究者の新たな参加等が行われた。このような状況の下で研究所全体の外部評価を改めて行うことが必要と考え，本年度(1996年)これを実施した。前回と同じく，第一線で活躍中の著名な国内，国外の所外の分子科学者20名（国内13名，国外7名）に評価をお願いした。評価にあたり，厳しい目で痛いところを容赦無く指摘して欲しい旨を要請した。評価委員による所内研究者とのインタビューを含む会合は約20回にのぼり約半年にわたった。その結果，外部評価委員による報告が提出され，これらを本リポートにそのまま掲載した。外国人評価委員にはこの他に個々の研究グループについてのさらにつっこんだ評価，意見が所長への親展の形で提出されたが，これは当然公表すべきものではない。今回の評価は7研究系について行ったものであり，施設系については来年度に行う予定である。

4-1には分子研の発表論文数の推移を示した。

4-2には国内の外部評価委員を含む点検・評価委員会の実施状況と各研究系についての一般的報告を載せた。

4-3には所外の国内委員及び外国人評価委員から提出された報告書をそのまま掲載した。

4-1 論文の発表状況

分子研では毎年 Annual Review（英文）を発刊し，これに発表した全ての学術論文のリストを記載している。

論文発表状況

編集対象期間	ANNUAL REVIEW	原著論文の数	総説等の数
～ '78.8	1978	25	13
'78.9 ～ '79.8	1979	55	7
'79.9 ～ '80.8	1980	85	21
'80.9 ～ '81.8	1981	114	24
'81.9 ～ '92.8	1982	149	14
'82.9 ～ '83.8	1983	177	29
'83.9 ～ '84.8	1984	153	26
'84.9 ～ '85,9	1985	196	31
'85.9 ～ '86.8	1986	207	45
'86.9 ～ '87.8	1987	287	42
'87.9 ～ '88.8	1988	247	39
'88.9 ～ '89.8	1989	281	60
'89.9 ～ '90.8	1990	320	60
'90.9 ～ '91.8	1991	260	23
'91.9 ～ '92.8	1992	303	41
'92.9 ～ '93.8	1993	298	41
'93.9 ～ '94.8	1994	211	26
'94.9 ～ '95.8	1995	293	23
'95.9 ～ '96.8	1996	332	40

4-2　点検評価国内委員会の報告

分子科学研究所の6研究系のそれぞれについて，所内，所外各々2～3名の当該分野の研究者で構成する国内委員会を設け，分子研創設以来の当該分野の発展，現状と国際的位置づけ，分子研の役割と評価，分子研にたいする期待などについて議論を行った。なお，相関領域研究系については，錯体化学実験施設とあわせて一つの委員会を設置して評価を行った。

各委員会の構成，開催日時は以下のとおりである。なお，所長はオブザーバとして全委員会に出席した。委員会には委員のほか，関係する研究系のグループリーダーもオブザーバとして出席した。

1. 理論研究系

開催日　平成8年10月21日

委員　市川　行和　（宇宙科学研，教授）
　　立矢　正典　（物質工学研，主席研究員）
　　平尾　公彦　（東大工学部，教授）
　　中村　宏樹　（分子研，教授）
　　岩田　末廣　（分子研，教授）
　　平田　文男　（分子研，教授）

オブザーバ
　　谷村　吉隆　（分子研，助教授）
　　岡本　祐幸　（分子研，助教授）
　　米満　賢治　（分子研，助教授）

2. 分子構造研究系

開催日　平成8年9月17日

委員　田隅　三生　（埼玉大理学部，東大大学院，教授）
　　志田　忠正　（京大大学院，教授）
　　高見　道生　（理研，主任研究員）
　　斎藤　修二　（分子研，教授）
　　北川　禎三　（分子研，教授）

オブザーバ
　　森田　紀夫　（分子研，助教授）
　　加藤　立久　（分子研，助教授）

3. 電子構造研究系

開催日　平成8年9月26日

委員　茅　　幸二　（慶応大理工，教授）
梶本　興亜　（京大理学部，教授）

吉原　經太郎（分子研，教授）
花崎　一郎　（分子研，教授）

オブザーバ

松本　吉泰　（分子研，助教授）
鈴木　俊法　（分子研，助教授）

4. 分子集団研究系

開催日　平成8年8月8日

委員　岩村　　秀　（九大有機基礎センター，教授）
寿栄松宏仁　（東大理学部，教授）
薬師　久弥　（分子研，教授）
小林　速男　（分子研，教授）

オブザーバ

鹿野田一司　（分子研，助教授）
宮島　清一　（分子研，助教授）
山下　敬郎　（分子研，助教授）
井上　克也　（分子研，助教授）

5. 極端紫外光科学研究系

開催日　平成8年10月1日

委員　太田　俊明　（東大理学部，教授）
簇野　嘉彦　（東工大理学部，教授）
小杉　信博　（分子研，教授）
宇理須恒雄　（分子研，教授）

オブザーバ

伊吹　紀男　（分子研，教授）
田原　太平　（分子研，助教授）
見附孝一郎　（分子研，助教授）

6. 相関領域研究系＋錯体化学実験施設

開催日　平成8年9月7日

委員　生越　久晴　（京大工学部，教授）
山内　　脩　（名大理学部，教授）
田中　晃二　（分子研，教授）
塩谷　光彦　（分子研，教授）
渡辺　芳人　（分子研，教授）

委員会においては，全く自由な意見の交換を行った。しかし，一応の討議項目として，

分子研創設以来，この 22 年間におけるこの分野の発展，概念，現象，方法，物質，技術

日本におけるこの分野の現状と国際的位置づけ

分子研の役割と評価

この分野で今後発展が期待されるもの

新しい芽がでるとすればどの領域でだれに期待されるか

分子研に期待されるものは何か

分子研にたいする諸々の意見，批判

などについて意見を求めた。各委員会でなされた議論の要約を次に掲げる。

まとめかたは各委員会でばらばらで，特にスタイルを統一することはしなかった。

4-2-1 理論研究系

(1) 分子研創設以来の 20 年間における理論分野の発展

分子科学の理論は実に幅広いが，大別して，電子状態，動力学，統計力学と 3 つに分類できる。電子状態については，計算機環境（ソフト，ハード共に）が格段に進歩し，20 年前はとても扱えなかった系が今では扱えるようになった。動力学については，この 20 年間で化学反応等の素過程を量子力学に基づいて解くための，基礎的手法が確立された。例えば，時間に依存した手法（波束動力学）とか，超球座標系の導入など，新しいものが開発された。レーザーの実験（動力学）等の発展に従い，それに対応した理論の手法も開発された。統計力学では，ドジャンに代表される高分子の研究，複雑系の概念の登場などの展開がある。

(2) 日本におけるこの分野の発展とその国際的位置づけ

分子研に計算機センターが開設されてから，日本の計算化学が大いに発展し，質的にも世界的に見て，高いレベルを保っている。しかし，日本は計算化学以外の分野の理論化学研究者が少なすぎる。外国に比較して，日本の化学における理論の講座数は大変少ない。アメリカのトップ 10 の大学における理論研究教官の割合は化学科全体で 15%，物理化学だけに限ると 30%ある。分子研では以前 15%だった。昨年，理論第 4 が出来て 20%になったが，それでもまだ少ない。日本の大学の化学科全体として，理論の研究室は増加傾向にはあるが，アメリカに比較すると問題外に少ない。また，アメリカのトップ 10 の大学の理論化学の教授・助教授 45 名のうち，多くが統計力学及び凝縮系を専門とし，電子状態が少ないのに対し，日本の化学では，殆ど電子状態である事も問題である。

分子科学とは何かと考えると，まず学際性が出発点である。日本の大学では，化学科で統計力学はおろか，量子力学をちゃんと教えられる人は少ないが，アメリカでは化学者が昔から複雑系や蛋白質をやっており，化学科の中で授業で経路積分法を教えている所もある。日本では，理論が化学の中で依然として正しく理解されていない事に加え，化学物理の分野が物理学会の中で認知されていないのも問題である。そのために学際性の強い研究が日本では育ちにくい傾向にある。

(3) 分子研の果たした役割とその評価

上に述べたように，分子研の計算機センターが開設当初から，共同利用機関として日本中の理論分子科学者計算時間を提供し，多くの研究の発展に果たした役割の大きさは計り知れない。特に，日本の電子状態の分野の発展には分子研の計算機センターが不可欠であった。しかし，最近はワークステーションの普及により，個々の研究室で計算可能となってきた。

また，動力学の分野では，新しい手法の開発等に関して特に分子研のメンバーが活躍した。3 つ目の分野である統計力学では分子研は，あまり貢献できなかったが，昨年理論第 4 ができて，この分野での分子研からの今後の寄与が期待される。

(4) この分野で今後発展が期待されるもの

これまで日本国内では化学の中で理論の重要さが正しく認識されなかったために，カリキュラムの不備や学会発表の場の不足などの問題があったが，最近その歪みが是正される気運が少しずつながら出てきている。今後，これまで伸びが遅れていた複雑系や生体系など，学際性の強い研究の発展が期待される。また，ドジャンで代表されるような，高分子の分野の進展も期待される。

(5) 分子研の運営方法，研究体制及び設備に関して

運営方法については，まず，人事の流動性が分子研では非常に高く，研究の活性化に寄与している。但し，教授・助教授に関しては 10 年位は腰を落ち着けて研究できる環境が望ましい。その為には，前回にも議論されたが，種々の委員会や雑用を減らす運営をしなければならない。また，総合研究大学院大学関係の維用も多過ぎるのではないか。秘書の正規職員化や外国人担当の事務官の充実も重要である。更には，サバティカル制度の本格的な導入も望まれる。

研究体制の充実については，まず，IMS フェローのような博士研究員が各研究グループに最低 1 名は配分されるように増員すべきである。博士研究員を増やし，大学院関係の雑用も減らせれば，教授・助教授がもっと研究に専念出来る様になるのではないか。

最後に，計算機センターの役割であるが，上で述べたように，ワークステーションの普及により，小規模計算は個々の研究室で可能になってきた。その結果逆に，大型スーパーコンピューターの高速性と大容量メモリとを駆使した大規摸計算の必要性が高まっている。共同利用機関として，厳正に評価されて選ばれた比較的少数の研究者による大型計算を支援していく必要があるのではないか。それにもかかわらず，計算機センターが現有するスーパーコンピューターの性能は国内の他の共同利用研究所の計算機センターに比べて，既に数分の 1 の能力に落ちてしまっており，次期更新では大幅な計算機性能の向上が最重要課題である。特に，COE に指定された現在，所内のユーザーへの重点的計算機時間の配分についても真剣に検討する必要がある。

4-2-2　分子構造研究系

(1)　分子研のあり方

研究所は大別して2種類あると考えられる。一つは目的が明確な，どちらかというと応用性を追求する傾向にある研究所。もう一つは，明確な目的は定めず，これまでにない全く新しいものが生まれることを期待する研究所で，純粋な基礎研究を行うものである。分子研は，明らかに後者に属するものであり，今後は，より重要性を増すものと期待される。その成功は，ひとえに研究者の創造性と意欲とにかかっているが，分子研は，それをいっそう助長し促進するような体制作りに努めなければならない。

(2)　分子研全体としての研究テーマ

分子研全体として見た研究テーマは，最近大きく変わってきており，特に，生物分子科学と言うべき分野が大きく伸長している。これは，前回（3 年前）の外国人評価委員の意見を大きく取り入れた結果であるが，世界の趨勢とも合致している。また，その結果として，岡崎国立共同研究機構内の他の2研究所との情報交換・共同研究も以前と比べてはるかに進んでおり，良い傾向である。ただし，生物分子科学といっても，非常に広い領域にわたっているので，分子研では分子科学的手法や考え方を用いなければ出来ないものをやらねば意味がない。すなわち，分子科学の専門家でなくては手が出せないような領域のことであり，それを追求して行くべきである。一方，分子研における生物分子科学の伸長につれて，以前盛んであった気相分子の研究が手薄になってきてはいるが，これは世界の趨勢から見てもいたし方ないとの意見もあった。

(3)　人事

助手の任期6年というのは，相当によく守られている。これは分子研の人事が依然流動性に富んでいることを示すものであり，また，他研究機関に受け入れて貰えるだけの研究者が育っていることを示すものであろう。

人事選考に関しては，もう少し明確に分子研の方向性と連動させる必要があるとの意見がある一方，必ずしも明確にしなくても，各分野の応募者数は世の趨勢に応じて変化するものなので，自然に世の中の要請に応じたものになってくるとの意見もあった。現在は後者の方向で人事を行っているが，この点については，今後，適宜，検討して行くべきことであろう。

(4)　研究予算

日本では一般に予算配分が実績主義であり，実績に応じて研究予算が与えられる傾向が強い。これでは研究実績の少ない若い人材が育ちにくい。その点，分子研では現在，若い研究者を研究予算面でより強くサポートすることを意図的に行っており，特に，新任の助教授に対しては，許す限りの最大限の予算的サポートを行っている。これは，新しい意欲的な研究を進める上で大いに役立っていると考えられる。

(5)　研究体制

分子研では伝統的に教授・助教授がそれぞれ独立に比較的小さなグループ単位で研究を行ってきており，今後もそのままでよいのかという意見がある。しかし，多様な研究と個性を重んじる観点からは，基本的にはこのままでよいと考えられる。また，アメリカなどにおけるいわゆる大研究室を見ても，基本的には教授や助教授一人

を核とするグループであり，ポストドクトラルフェロー（以下ポスドクと略す）を大量に採用することによって大きなグループになっている。分子研の場合も研究分野によっては，そのような方向で大研究グループ化を進めていくのが適当であろう。分子研でのポスドクの充当率は，以前に比べてかなり改善され，教授・助教授一人当りにほぼ一人割り当てられる程度になってきている。しかし，上のような目的のためにはまだまだ不十分であり，何らかの方策を講じる必要がある。この点は国の施策とも強く関連しており，今後の大きな課題である。一方，たとえ大きな研究グループになったとしても，やはり，その構成員それぞれの個性を重んじたものにすべきであることは言うまでもない。

現在のような分子構造，電子構造という研究系の分け方に関しては，現在の学界の状況や研究内容の状況から見て，すでに意味のないものになってきている。今後，合併ないし再構成の可能性を検討すべきであろう。

(6) 研究テーマ

分子構造系の各研究グループに共通のものは「分光学」である。そのうち，いわゆる高分解能分光の分野は，大学における講座も次第に無くなってきており，人気も無くなってきているようである。しかし，基礎となる重要な分野であり，他分野との結びつきによってその価値が再認識されている。天文学，生物学，高エネルギー物理学といった，大きく異なる分野との結びつきをより積極的に図り，分子科学的考え方や手法が深く関わった新しい境界領域を開拓することが重要であろう。これは高分解能分光学のためのみならず，それらの異分野にも高分解能分光学の緻密な考え方や手法が与える影響が大きいと考えられる。このような新しい領域を切り開く，意欲的な研究が進められる場合には，必ずしも従来のように限られた，短い期間における論文の数を問題にすべきではなく，より長い視点での評価が重要であろう。

4-2-3 電子構造研究系

電子構造研究系の両部門とも，研究方向は魅力的であり，その研究業績は世界的に評価されている。この意味では，十分な実績を上げていると言える。しかし，もっと欲を言えば，分子研においてブレイクスルーを生みだし，これを契機として，世界の研究者が追随して一つの研究分野を形成する，というような画期的な研究を，如何にして分子研から発信できるかが今後大きな課題である。

分子研が，日本の分子科学を世界的レベルに引き上げた功績は大きい。しかし，これからは，分子研は，あらゆる分野で日本の分子科学のリーダーシップをとるのではなく，むしろ突出した研究のピークを出すことが必要である。この意味で，計画されている２つの開発研究センターを利用して，インパクトのある研究成果を上げることを希望する。

分子研における研究の活力の源の一つは，研究者が雑務にとらわれず研究に専念できることにある。しかし，一方では，国内外の研究者との交流や分子研内部の運営に費やす努力や事務負担は膨大である。このような負担をできるだけ取り除き，能力と時間を研究に集中することができれば，研究の大きな推進力となるものと期待される。教授がいっそう忙しくなることはある程度覚悟して，助教授層をこれらの負担から解放する必要がある。

分子研の助教授には昇格がないが，これが正しい選択であるかどうかは難しい問題である。分子研の活力の一つは，若い人にチャンスが与えられることにある。助教授に昇格がないのであれば，むしろ積極的に教授の数を減らしてでも，若い人にチャンスを与える運営をすることも可能ではないか。例えば，研究費が不十分であったために，過去に，

研究機材があまり広汎に普及していなかった研究分野（超高速分光など）では，ある年齢以上の世代には人材が少ない。そうであれば，むしろ，教授の代わりに，若手研究者を助教授で採用して，積極的運営を行っても良いのではないか。

分子研は，採用されて誇りに思えるような博士研究員制度を創設することが必要である。理研の場合には，基礎科学特別研究員制度を創設し，待遇に関しても思いきった施策を行ったことで，優秀な人材を集めることに成功している。これら採用された研究員の就職も非常に順調である。日本のように終身雇用が基本となっている環境では，プライドが持てるようなポジションでなければ，短期雇用の博士研究員に優秀な人材を集めることは難しい。

分子研に関する基本的な分光，反応の研究は地味でアピールが難しい面があるが，今後も分子研の中心的な研究テーマとして継続して行かなければならない。化学反応の研究の目標の一つは，反応を制御することにあったが，近年，注目されている「コヒーレンスによる反応制御」は，量子力学が直接関わっている問題であり，非常に興味深い。

溶液や超高速分光の研究も継続して行かなければならない。チタンサファイアを中心とするフェムト秒レーザーは広く普及し始めており，これらを用いた超高速分光も今後さらに大きく発展することが期待される。外国においても大きな研究プロジェクトが計画されている。しかし，何をやるかが最も重要な点である。

クラスターと溶液の研究には類似性があるが，過去のクラスターの研究では，極低温のクラスターに関する研究が主であった。クラスターの研究を溶液の研究と結びつけるには，揺らぎのあるクラスターを生成して，これを研究する必要がある。

より複雑な系として，生物に関連した研究は，分子研にとって避けられない研究テーマではないかと思われる。生物には興味を引く問題が多々ある。ただし，物理化学者が生物の本質的な問題にどう切り込めるかが研究における最も重要な点であり，これを良く吟味する必要がある。モデル化合物の研究に終わるのでは不十分である。この意味で，生物の研究者と共同研究を行うことも考えられる。また，物理の研究者との相互作用をもっと密にして，概念，研究対象に物理からもっと発想を取り入れることも考えるべきである。大学に比べて，分子研は，このような研究交流を意識的に行っているようではあるが，研究会といった表面的なものではなく，積極的に共同研究を推進することを考えるべきである。ただし，分子研が研究面で手を広げることによって，中心的な研究テーマである基本的な分子の研究に空洞化が起こってはならない。

分子研におけるレーザーを用いた研究は，大部分が，ユーザー的な立場（市販のレーザーを組み合せて実験する）という姿勢で行われてきた。しかし，世界の先端を切り開くような研究を行うためには，レーザーの開発から取り組まねばならない場合が多くなっており，研究支援体制，共同研究がなければ，装置主導の先端的な研究はできない。分子制御レーザー開発センターの発足は時宜を得たものである。ただし，センターの研究者と分子科学の研究者が独自の研究を伸ばしているだけというような状況に陥らないように，分子科学の研究の方向性を充分見据えて，密接な関係をもって研究を進めることが必要である。

4-2-4　分子集団研究系

分子研創設以後の約20年間の物性科学分野におけるめざましい進歩とその潮流の中で分子研の果たした役割，今後の方向などについては3年前の点検評価の際に行われ，分子研リポート'93に包括的な議論がまとめれている。これらの議論を踏まえてその後の物質・計測技術に関する一般的な議論をまず行った。物質については有機導体・超伝導体，酸化物超伝導体，分子磁性体，炭素クラスターなどに関連する研究はその後も継続されているが，例えば光と磁性，伝導性と磁性といった2つの機能を併せもつ複合的機能性物質の重要性が指摘された。分子研においてもこの方向に

沿った研究がなされている。さらに物質開発的な立場からは超分子の既念がますます重要性を増やしてきている。また計測技術の面からは最近の質量分析装置の進歩が指摘された。現在では数千から数万の分子量をもつ巨大分子の選別を可能としており，分子研としてもこの種の装置の導入を考えるべきである。また東大物性研同様，分子研の共同利用研としての性格はますます薄れてきている。研究者の交流を促進させ，小人数の徹底した議論を通して互いのアイディアを交換する場として共同利用研としての分子研を位置づけることも必要である。

つづいて物性科学分野のグループリーダーが最近の研究の紹介を行い，その研究の進め方さらに今後の方向について議論を行った。分子導体，分子磁性体，液晶など物性科学分野は有機化学，錯体化学，物理化学，物性物理学の広い分野にまたがる境界領域の学問なので，これらの分野の専門家との共同研究が必要とされている。分子研ではこれらの各分野から人材が集まっているので，その特徴を活かして大学ではできない研究を行うべきである。しかし分子研内で研究室間の大規模な共同研究が行われているとは思えない。分子研の中の閉じた共同研究で物性研究を完結させる事ができると思えないが，分子研内における共同研究を核として国内外の研究グループと共同研究を行う事でピークを作る事ができるであろう。分子研においてはすでに興味ある物質の萌芽がいくつも見られるが，まだ物性物理学のまな板の上にはのっていない。分子研には物性物理学の研究者がいるが，もっと充実させるべきである。もしこれが困難なら，その物質の重要性を説いて所外の研究者を巻き込む努力をしなければならない。客員教官制度を活用して物性物理学者との緊密な共同研究を実行するのも一つの方策である。

分子研に望まれる研究形態の例として，ある典型的な物質を開発し，その物質を分子研の主導で全国のあるいは全世界の物性物理学者に提供していく事によって物性研究のピークを作る事が指摘された。しかし物質として既に認知されてしまった（ある意味では既に古くなった）物質を長年にわたって物性物理学者に提供しつづける事は非常に困難である。このような態勢を実現するためにはルーチン的な物質合成を行う技官などをその物質を開発した特定の研究グループに集中的に投入すべきである。ある物質を認知させるためにはその物質に到達するまでに数多くの合成と物性評価の試行錯誤が必要であり，この過程こそ物質開発における要である。通常はすでに認知された物質を用いての華やかな物性研究の方へ評価が集まり，この要となる部分が必ずしも正当に評価されていない。物質開発も物性研究も両面ともに重要なことは言うまでもないが，分子研はこの物質開発の過程に主要な力を注ぐべきであろう。

前回の点検評価において指摘された大研究室制の導入，センター構想の実現，物性理論部門の充実，博士研究員の充実は3年後の現在，理論部門の増設，分子物質開発研究センターの設立，COE研究機関としての認定による博士研究員の増加によってある程度実現されている。しかし物性理論部門と博士研究員はあまりにも不十分であり，これらの充実は依然として重要である。さらに新センターにおける併任制度を利用して大きな研究グループを作る事が求められる。

4-2-5　極端紫外光科学研究系

(1)　極端紫外光科学分野の状況，分子研の役割，評価

分子研の放射光利用研究は国際的に固有の成果をあげてきたことは間違いないが，広い意味での分子－光子の相互作用を見直すべき時期にきている。そもそも極端紫外光科学とは何かを考える必要がある。ツールを中心とした学問は考えにくい。極端紫外光と分子あるいは凝集系との相互作用を考える学問と言えるだろう。しかし，化学においても，物理においても，放射光科学というのは十分認知されてはいない。放射光は何でもできるが切り口が鈍いという欠点や，成果の割にビームライン建設などの労力が大変というような点が，原因ではないかと考えられる。方法論の開発が重要で，まだ発展段階にあるといえ，今後エネルギー分解能 $E/\Delta E$ が，10^5 や 10^4 ま

で改善されて，振動構造が分けらるようになると，もっと多くの研究者の興味を引くのではないか。このような低エミッタンス指向以外に，短パルス化の動きも注目すべき状況にある。

(2)現状の問題点など

(a) 分子研の所内に利用者が広がらない。初期は興味を持ったグループはいくつかあったが現在では，極端紫外光科学研究系と施設の人に利用がほとんど限られている。新しい化学がアウトプットされていないのではないか。第3世代のリングでエネルギー分解能が上がれば，一般の分子科学者がやろうとする気になることも期待される。

(b) 化学の分野で一般的な光としての市民権を得ていない。放射光を用いれば何でもできるが，レーザーに比べて切り口が鈍い点が原因ではないか。ビッグサイエンスの性格や，出向ユーザとしての制約なども原因である。化学会の中で集まって議論して煮詰めるような場も必要なのではないか。

(c) 研究室間の collaboration が希薄になりつつある。異なる研究系間の相互作用が小さくなってきた。若い助教授の相互作用が少ない。ゆとりが無くなってきた，多忙になって，ちょっと協力という気持ちにならなくなってきたのが原因と思う。研究者があちこちに広がって顔をあわせられない。拡大路線を取りすぎた。

(d) 本当に独創的な研究を生み出すには，ゲリラ，意外性の発想が必要なのではないか。研究者を飢餓状態にすることも必要なのではないか。UVSOR がなければ，他の施設の最適なビームラインを選んで出向きゲリラ的な研究ができるかもしれない？　しかし，一般的に出向ユーザには限界があり，ユーザはサンプルを変えるしかない。その意味で，共同研究のファクターが問題になっている面もある。

(e) UVSOR の場合マンパワーが圧倒的に少ない点が問題である。

(f) 装置面では，UVSOR の場合，斜入射領域での分解能が不十分である。ビームラインによっては，分光した光が弱い。大きな計画だけでなく，このような細かい点での改良も必要ではないか。

(g) Berkeley で計画しているように，所内専用ラインに LiF のカットオフ(1050A)より短波長(20-100eV)のアンジュレータがあると良いのではないか。UVSOR の BL3A はそれに使えるが，高次光が多く含まれていること，施設利用なので専用にできないことなどが問題である。

(3) 今後の展望，何を研究すべきか。

(a) 90MHz の Multi-bunch でもレーザとの同期実験が出来る点は，UVSOR の特長である。同期実験の観点からは，エミッタンスを小さくすること，パルス幅を現在の 400ps よりせばめることは，望ましい方向ではあるが，強度が弱くなることに注意しないといけない。UVSOR の光パルス間のジッターは同規模の他のリングに比べて，十分に小さいことは有利な点である。Laser と放射光の同期実験については分子系を系統的，かつ網羅的にやらないといけない。同期実験に関連し，時間分解分光，反応ダイナミクスは今後の重要な問題である。この種の課題は中，小型リングでも，比較的容易に行える。

(b) 高分解能化は色々な観点から重要である。振動順位を分けられれば，レーザー分光の研究者からのユーザも増えるであろう。ビームライン 4B は UVSOR 最後の斜入射分光器のビームラインとなる予定である。

(c) 二次元電子分光や二次元発光分光も面白い。ただし，これらについても高分解能化が望まれる。

(d) 固体物理関係の分野はマンパワーが必要なので，苦しい戦いになるのではないか。固体物理の中でも分子

科学に近いプロジェクトに絞って進めた方が良いのではないか。

(e) 光化学反応応用はユニークな仕事であるが，engineering の中の basic な所をやって欲しい。多層膜分光器は第 3 世代の新型分光器で代用できるのではないか。高いエネルギー分解能がすぐ欲しくなるであろう。

(f) 凝集系については，H_2O のイオン化ポテンシャルすら決まっていない。DNA の研究者が気相のイオン化ポテンシャルを用いているなど，研究が遅れており，今後の重要な課題である。

(g) フリーラジカル，励起分子の光吸収断面積の測定なども重要である。電子ビームや放電と放射光分光を組み合わせるのも良い。

(h) 性能的に遅れた UVSOR を利用した研究は，今後苦しい戦いを強いられる。他の第 3 世代リングの施設に分子研の branch office をつくることも考える必要があるのではないか。分子研として，UVSOR のみに閉じこもらないで，第 3 世代リングの利用をどう進めるかは今後非常に重要である。また，本当の意味での分子科学専門放射光施設が必要で，次期計画が非常に重要である。

4-2-6 相関領域研究系及び錯体化学実験施設

(1) 現状の問題

相関・錯体化学の領域では新物質の創成が研究をリードしていると考えることができる。独創的な発想に基づく新しい物質の開発は新たな理論，物性あるいは物質変換を誘発する。したがって，「物質開発センターの設立」により，研究所全体が新物質創成の重要性を再認識することが，分子科学研究所がこの分野において中心的な役割を果たすために必要不可欠である。一方，最近の全国レベルでの中型測定装置(NMR, EPR, Mass, CD, X 線等)の改善により，相関・錯体が利用している装置は国内の大学などと比べてかなり貧弱になってきており，そのため他大学の装置を利用せざるを得ない事態が起きつつある。物質開発面からみれば，創造性のある新物質を合成した研究者が，その物性測定を全国の大学の中から共同研究者を捜して依頼する時代になりつつある。このような状況は「魅力のある研究所」としての分子科学研究所の根幹に関わる問題である。

(2) 指向性と展望

分子科学研究所での相関・錯体では，その研究グループの大きさから，独創性のない発想で流行の研究の追随は行うべきではなく，21 世紀の人類が抱える最大の難題“資源・環境・情報”を分子レベルで化学的に具象化しうるテーマにチャレンジすることが望まれる。特に以下の分野はその重要性にも関わらず，化学的にはまだまだ未成熟であることから，分子研の限られた人数でも，独自の物質を開発し，その発想により突破口を開き，国際的に指導的な役割を果たせることが期待される。

1) 分子による生体類似機能を持った酵素およびタンパク質のモデル化，特に，生体系が行なっている不活性小分子(N_2, CO_2, CH_4, O_2，飽和炭化水素化合物等）の代謝系への取り込み，ならびにイオンの濃度勾配（H^+，Na^+，Ca^{2+}等）を利用したエネルギー変換を化学的に具象化させることは，大量のエネルギーを便用することなく資源・環境・情報の制御システムを構築する際の一つの指針となることが期待される。
2) 金属錯体による生体分子の構造・機能制御。
3) 分子集合体による機能性材料たとえば光学材料，磁性体，伝導性物質の開発。
4) 超分子による新たな物性科学の創設。
5) 不安定化合物たとえば，ラジカルや電子欠損化合物，異常原子価化合物，超ひずみ化合物等，異常状態にある化

台物の合成と，その触媒作用と物性。

6) 高選択性・特異性を有する新規錯体触媒の開発。

(3)研究体制及び設備

分子研での助手の任期制，助手・助教授の内部昇格禁止など研究者個人には不利な点があるにも関わらず，全国の大学との間で活発な人事交流が行われている。これは分子研の研究レベルの高さを反映していると思われる。しかしながら，国際的に指導的な役割を担っている研究グループと比較するまでもなく，現状の相関・錯体の研究規模は小さく，人的なサポート体制が是非とも必要となる。ある程度の規模の研究チームを形成するためには，独自の研究を全面的に出し，高い資質を備える学生の興味を引き起こし大学から分子研へ目を向けさせることも重要であるが，基礎科学のセンターとしての分子科学研究所で行われている研究が，総研大の学生に大きく依存をする事態となれば，その存在自体が疑問視されることになりうる。

現在，幸いなことに国全体での博士研究員枠の総数が増大し，文部省以外の省庁の研究所では独自の博士研究員枠を持つに至っており，その定員はますます増えることが予想されている。その結果，博士過程を終了した若手研究者が大学に比べて研究設備の整った各省庁の研究所で目的設定型の研究を行い，研究の大きな推進力となることが考えられる。一方，基礎科学センターとしての分子科学研究所における博士研究員の数は，COE に指定された現在でも，極めて少ない数に限られている。若手博士研究員が国立の研究機関で活躍する機会が増大することは，日本の学問の向上から喜ばしいかぎりであるが，21 世紀を見据えた基礎科学の発展からは文部省の研究所こそ，十分な人的サポートが与えられるべきであり，次代の日本を背負う研究者は文部省が中心になり育てるべきであると思われる。

4-3　所外の分子科学研究者による評価

4-2 に述べた国内評価委員会の個々の所外委員から各研究分野における分子研の研究の評価その他の意見が所長へ報告された。

さらに，国際的な視点からの評価を得る目的で，上記の各分野について第一線で活躍中の著名な外国人研究者に来所していただき評価，意見を求めた。依頼した外国人研究者は次の通りである。

理論研究系	Professor William H. Miller Department of Chemistry, University of California
	Professor Peter G. Wolynes School of Chem. Sci., University of Illinois
分子構造研究系	Professor Mostafa A. El-Sayed School of Chemistry and Biochemistry Georgia Institute of Technology
電子・構造研究系	Professor W. Carl Lineberger JILA and Department of Chemistry and Biochemistry University of Colorado
分子集団研究系	Professor Patric Cassoux Laboratoire de Chimie de Coordination du CNRS
極端紫外光科学研究系	Dr. Irene Nenner CEA-Centre d'Etudes de Saclay，SPAM
相関領域研究系＋錯体化学実験施設	Professor Herbert D. Kaesz Department of Chemistry and Biochemistry, University, of California,Los Angeles

各外国人評価委員は下に掲げた日程で来日，来所し，各研究系の所内研究者とのインタビュー，意見交換を 2〜3 日にわたって行った。各評価委員による報告は所長に提出された。

理論研究系（Miller 教授，Wolynes 教授）

面接日　平成 8 年 12 月 12 日〜13 日

面接者　岩田末廣教授，中村宏樹教授，平田文男教授，岡本祐幸助教授，谷村吉隆助教授，米満賢冶助教授，青柳睦助教授

分子構造研究系（El-Sayed 教授）

面接日　平成 8 年 11 月 4 日〜5 日

面接者　斉藤修二教授，北川禎三教授，森田紀夫助教授，加藤立久助教授

電子構造研究系（Lineberger 教授）

面接日　平成 8 年 8 月 1 日～2 日

面接者　吉原經太郎教授，花崎一郎教授，松本吉泰助教授，鈴木俊法助教授

分子集団研究系（Cassoux 教授）

面接日　平成 8 年 11 月 25 日～26 日

面接者　薬師久弥教授，小林速男教授，鹿野田一司助教授，宮島清一助教授，山下敬郎助教授，井上克也助教授，米満賢治助教授

極端紫外光科学研究系（Nenner 博士）

面接日　平成 8 年 10 月 25 日～26 日

面接者　小杉信博教授，宇理須恒雄教授，伊吹紀男教授，田原太平助教授，見附孝一郎助教授，細野秀雄助教授，鎌田雅夫助教授，木下豊彦助教授，濱広幸助教授

相関領域研究系＋錯体化学実験施設（Kaesz 教授）

面接日　平成 8 年 11 月 1 日～4 日

面接者　田中晃二教授，渡辺芳人教授，西信之教授，芳賀正明教授，塩谷光彦教授，桜井武助教授，藤田誠助教授

以上の国内所外委員及び外国人評価委員による評価，意見は各評価委員の許可を得て公表することにした。以下にそれらを掲載する。

4-3-1　理論研究系

理論化学は化学研究の基礎であり，あらゆる物質科学の基盤をなす学問である。わが国の理論化学は過去 10 数年で大きな発展を遂げたといってよい。理論的手法の進展とその応用研究の発展，理論化学研究グループの成長，実験研究者との共同研究の進展などの面で大きな成果をあげている。こうした発展は分子科学研究所の理論グループ抜きにしては語れない。電子状態理論，反応動力学の第 1 人者をそれぞれ教授として迎え，理論化学のメッカとして十分にその役割を果たしてきた。一流の研究者をスタッフとして迎えることができたとともに，分子科学研究所の計算機センターの果たした役割や共同研究，施設利用のためのさまざまな活動もそれを支えてきた。活発な研究活動は多くの研究者がこぞって共同研究を望んだこと，内外を問わずいつも研究者が研究所を訪問したことなどにも明らかである。研究所第 1 期の評価としては，当初の目標を上回る成果を挙げてきたといってよい。

時の流れとともに世代交代がおこり，人もかわりつつある。学問としての理論化学も，さらなるブレークスルーを図り，一層高いレベルに引き上げる必要に迫られている。理論化学は大きな可能性を秘めている。21 世紀には間違いなく，現在よりもはるかに重要な学問として位置付けられるであろう。しかし，これを実現するには理論化学の思いきった展開が必要である。現在の理論化学の単なる外挿では不可能であり大きチャレンジが求められている。世界の理論化学における日本のリードを確固たるものにするために，分子研の理論グループに課せられた責任は大きい。

研究活動の中心は人である。優れた能力を持つ人材をいかに確保するか，またその能力を最大限に発揮できる環境をいかに整備するかが重要である。この意味においては中堅から若手研究者の奮闘が大いに望まれている。わが国の理論化学を学問的にリードしてきた第 1 期の教授たちが研究所を去る前に，どこまで中堅，若手が学問的に成長し，

その後を引き継ぐことができるかが分子研の理論グループの未来を握っている。

これまでのような情報の発進基地になりうるかどうか，中堅から若手の理論研究者に課せられた責任は大きい。幸いにも優れた能力をもつ人材を迎かえ入れている。今後の成長が大いに楽しみである。

研究所は総合大学院大学として博士過程の大学院生を受け入れている。多くの研究所，特に大学付置の研究所では世代交代とともに研究活動が当初より不活発になるところが少なくない。この原因の 1 つに大学院生をもっていないことがしばしば指摘されてきた。大学での研究活動と教育活動は車の両輪のようなもので，互いに刺激しあい，いい効果を生むといわれている。そうした面があることは否めない。しかし，分子研は大学付置の研究所とは，設立の目的や目標としているところが明らかに異なる。学生の教育にともなう膨大な雑務をなぜ引き受けたのか，大いに疑問である。博士研究員ではなぜいけないのだろうか。どうしても教育活動が必要というのであれば，博士過程のみという中途半端な制度はやめて修士過程から学生を迎える制度に変える方がいい。学生にとっても不幸である。

分子研の計算機センターがわが国の理論化学，計算化学の発展に果たしてきた役割は大きい。それは計算機環境が世界の一流のレベルにあったからである。現状はどうか？　廉価なワークステーションが購入できるようになった現在，大学にいる多くの研究者はそれぞれの研究室に戻りつつある。これは単なる使い易さの問題だけではない。それだけ分子研の計算機の魅力がなくなったせいである。明らかに現在の計算機パワーは世界の一流からみると見劣りする。これは分子研にとっても，分子研を利用している側にとってもまことに不幸なことである。分子研の計算機センターの在り方については早急な見直しが必要である。早急に設備を充実すること，だれのための計算機か，その運用，利用形態をいかにするのかを抜本的に見直さねばならない。現在のベクトルスーパーコンピュータは，ハード的には過渡期に入り，演算速度の改善には限界がみられる。しかし，超並列コンピュータによるテラフロップスマシンは近未来に日常化し，これまでの理論計算やシミュレーションとは比べものにならない高い信頼性と高精度の情報を提供し，新たな可能性を秘めている。テラフロップスは超並列計算機によって達成される。超パラレルマシーン，テラフロップス環境のパラダイムに向けて今，行動を起こさねば，とりかえしのつかない悔いを残すことになるであろう。また，私自身は分子研の計算機は八方美人的な運用ではなく，分子研の研究者がもっと大いに利用できるように現在よりも利巳的な運営であってもいいと考えている。最新の設備を縦横に駆使して優れた成果が次々と分子研から発進されることを望んでいる。

いづれにせよ，分子研の理論グループは大きな節目にさしかかりつつある。これまでのように世界に誇れる研究活動ができるのかどうか，分子研が理論化学のメッカとしての地位を保ちうるのかどうかは若いスタッフたちにかかっているといっても過言ではない。大いに期待している。

（国内所外委員 A）

日本の理論化学の研究体制は 2 つの点で大きな問題点を持っている。1 つは理論化学の Faculty の数が少ないことである。数年前に米国の大学の化学科のトップ 10 について，全 Faculty（有機化学，無機化学を含む）に占める理論化学の Faculty の割合を調べたところ，その割合は 15 パーセントであった。この数字と日本の主要 10 大学における理論化学の Faculty の割合と比較すると，日本では理論化学の Faculty の数が，最近増えたとはいえ，まだ如何に少ないかがわかる。

もう 1 つの問題点は日本ではこの数少ない理論化学の Faculty の専門分野が著しく量子化学に偏っていることである。米国の大学の化学科のトップ 10 には当時 45 名の理論化学の Faculty がいたが，そのうち量子化学を専門分野とする Faculty は数名に過ぎず，majority は広い意味で統計力学を専門分野とする Faculty であった。言うまでもなく量子化学

と統計力学は理論化学の二つの大きな柱であり，最近の理論化学におけるノーベル賞受賞者も量子化学分野（ポーリング，マリケン，福井，ホフマン）と統計力学分野（オンサガー，フローリー，プリゴジーン，マーカス）が拮抗している。ところが日本では統計力学を専門分野とする理論化学の Faculty は皆無に近い。この理由は，「統計力学を専門分野とする Faculty がいないからこの分野の人材が育たない→人材が育たないから Faculty の数が増えない」という悪循環を繰り返しているからである。

日本の理論化学，特に化学における統計力学分野の研究を発展させるために分子研の理論系が果たすべき役割は大きい。この点で分子研が最近理論系の講座の数を 1 つ増やし，また統計力学を専門分野とする Faculty の数を増やしたことは大いに評価できる。分子研で今後統計力学分野の優秀な人材が育ち，それが全国に散らばって，将来日本のこの分野の研究が質，量ともに成長することを期待する。分子研の理論系の講座の数についてはもっと増やしてもいいと思う。欧米一流大学では物理化学の Faculty のうち 1/3 は理論化学を専門分野としている。分子研の研究分野は大雑把に言って物理化学に限られていることを考えると，分子研の全講座に占める理論系の講座の割合は 1/3 程度にしてもいい。また，外国人の Faculty の採用も積極的に考えるべきである。

（国内所外委員 B）

分子研が設立された当時，「分子科学」は化学と物理学の境界にまたがる学際研究分野として考えられていた。それから 20 年たった現在でも，分子科学の学際性は変わっていない。むしろその学際性はますます強まっており，今や生物学にまでまたがるようになってきた。そこで学際性という観点から分子研理論系のこれまでの仕事を振り返ってみると，必ずしも十分満足のいくものではなかったように思える。もちろんそれぞれのグループの仕事は大変すばらしいものである。特に，理論化学の面ではまさに Center of Excellence と呼ばれるにふさわしい地位を確立してきた。一方，物理学の方から眺めると，「化学物理」という分野がわが国では確立していないこともあって，分子研の仕事は原子分子物理や物性物理のなかに埋もれてしまってあまり目だっていない。ましてや物理学と化学にまたがった真に学際的な研究はほとんどなかったのではないだろうか。これは，最近までわずか専任 2 部門という小所帯であったことが主な原因であろう。幸いなことに，現在では 3 部門 6 研究室となり，人員構成も化学・物理出身がほぼ半分ずつということで，これから大いに学際的な研究が花開くことと期待される。それこそが分子研の存在意義を真に主張できるポイントである。

理論系では何をやるべきか，あるいは何をやるべきでないかということが今回の評価の一つの課題であった。しかし，研究で最も重要なのは人である。特に，大きな道具立てを必要としない（もちろん，計算機環境は重要であるが）こともあって，理論では余計人に重点が置かれる。そもそも分子科学のあらゆる分野を分子研でそろえることは不可能であり，ある時点をとればかなり偏っていても構わないのではないだろうか。分子科学における COE を維持していくことのできる人を常に確保することが最も重要である。分野間のバランスをとるには，人事の交流により行うのが良いと思われる。この面では分子研は非常に良い実績をあげている。是非今後もこの面で努力してもらいたいものである。強いていえば，教授についてももう少し交流があってもよいのではなかろうか。

最後に，これは常に指摘されることであるが，研究以外の雑用をできるだけ減らすことを強く勧告したい。特に最近仕事量が増えているのは，大学院関係と国際交流関係である。総研大のシステムからくる問題だと思われるが，大学院のための仕事は普通の大学よりも多いのではないだろうか。国際交流は今や分子研のアクティビティの大きな部分を占めている。しかしそのために教授から助手までが（共同研究以外に）費やす時間はかなりのものである。以上の 2 件に関わる雑用は研究とも密接に関係しており，また毎年新たな問題が発生する仕組みになっているので，容易

には減らすことができないかもしれない。しかし研究所全体で何とかすることを真剣に考えてほしい。

（国内所外委員Ｃ）

Review of Theoretical Division of IMS

W.H. Miller

Peter G. Wolynes

We were extremely impressed with the health and intellectual vitality of the theoretical division. There have been many changes in recent years: replacement of departures and an actual expansion of the division. The group is quite young and noticeably interactive both internally and with other divisions of the Institute. The wide range of excellent work represents a good balancing of fundamental chemical physics addressing central unsolved problems for both simple and complex systems and the applications of theory to particular systems of interest to chemists more broadly. The new thrusts in biomolecules, liquids and the theory of the solid state complement nicely the traditional strength of the division in molecular theory. The group can probably be considered the most important theory group in Japan. We note that theory is underrepresented in Japanese chemistry department when considered from the point of view of the intellectual opportunities of the field, much as it was in the U.S. decades ago. We expect the I.M.S. group will act as the nucleus for the future growth of theory in the chemical community nationally. In future appointments it is crucial that the balance between fundamental and applied work and between the study of simple and complex systems be maintained. The only areas of theory not yet well covered by the division relate to materials science where there are new opportunities in the study of polymers, clusters and nanostructures. The various theoretical research efforts are reasonably well coupled to experimental programs in the Institute. One should consider strengthening interactions with the nearby national Institutes which can offer experimental expertise in the biological areas. This may be very crucial for the theorists now working on biophysical problems.

I.M.S. continues to have high visibility in the international scientific community, and it is crucial that this be maintained. The younger faculty (Associate Professors) should in particular be encouraged (and supported) to attend international conferences to present their work and also in order to establish personal contacts with scientists worldwide. These personal contacts are also important to maintaining a steady flow of international visitors to I.M.S. which has been one of its traditional strengths compared to other Japanese institutions.

Outstanding computing capabilities have been one of the hallmarks of I.M.S. since its inception. This is natural, since it serves as a central facility available to all Japanese researchers. The highest priority should be given to maintaining forefront computational facilities at I.M.S., so that scientists can implement new ideas and approaches that would not be feasible on their home computing facilities. One aspect of this could be major investment in advanced parallel computing platforms, but the precise nature of the next generation of advanced computing needs to be decided by I.M.S. senior scientists. The important matter is that I.M.S. retain its unique role in advanced computing capabilities.

前記英文の和訳

分子科学研究所理論研究系の評価

W. H. Miller

Peter G. Wolynes

理論研究系の健全さと知的バイタリティーに我々は大変深い感銘を受けました。近年，同研究系は転出者の後任の採用及び系の新しい拡張と言った多くの変化を経験しました。研究グループは大変若く，系内のみならず研究所の他の系との顕著な相互作用を持っております。本研究系で行われている広範囲に亘る優れた研究は，簡単な系から複雑な系までに及ぶ重要な未解決問題に係る化学物理の基本的課題とより広く化学者一般が興味を抱く具体的体系への理論の応用との間のバランスを旨く取ったものになっています。生体分子，液体及び固体物性理論と言った新しい研究の推進は分子理論における本研究系の伝統的強さを旨く補完するものであります。本理論研究系は日本で最も重要な理論グループであると考える事が出来るでしょう。分子科学の知的発展という観点から見ますと，日本の化学関係学科では理論が過小評価されています。これは丁度，何十年か前のアメリカに似ています。分子研の理論グループが日本国内の化学界における今後の理論の成長にとって“核”となる事を期待します。将来の人事においても，基本的課題と応用の間の，又簡単な系と復雑な系のバランスが旨く維持されてる事が大変重要であります。本理論系によって現在十分にカバーされていない唯一の分野としては，高分子やクラスターあるいはナノ構造の研究に見られる様な新しい発展を秘めた物質科学に関係したものであります。様々な理論的研究は分子研の実験研究とも十分に連携しています。ただ，生物学における実験的専門知識を提供し得る近接の国立研究所との相互作用をもっと強めるべきでしょう。これは，生物物理的課題に現在取り組んでいる理論家には恐らく，大事なことでしょう。

分子研は世界の科学界において際立った存在を維持していますが，今後ともこれを維持して行く事は極めて大切な事であります。特に，若いスタッフ（助教授）は進んで国際会議に出席して自分達の研究成果を発表し世界中の科学者との個人的な交流を深める事が必要です。また，それが出来る様に援助すべきです。こう言った交流は，日本の他の研究機関と比較して分子研の伝統的な優れた側面であった訳ですが，国際的な研究者来訪の日常的な流れを維持する為にも重要な事です。

優れた計算機環境も分子研の創設以来の特質であります。これは，分子研が日本全国の研究者に対して中心的施投としての役割を持っている事から自然な事です。分子研に最先端の計算機施設を維持する事は最優先に実現されるべきであります。それによって，固々の研究室の計算機環境では実施不可能である様な新しいアイディアと手法が実現可能となります。これを可能にする１つの考え方は優れた並列計機環境を作り出す事だと思われますが，次世代の高等な計算機システムをどの様に構築するかについては分子研の年配研究者達による決定を尊重すべきでしょう。大事な事は分子研が優れた計算機環境を有するというその貴重な役割を保持する事であります。

4-3-2　分子構造研究系

1. 分子研リポート'93 に記載されている，分子科学研究所及び分子科学系についての前回の評価は，現在も概ね通用すると思う。
2. 分子研の場合，評価基準を何に求めるかという問題がある。つまり，大学の場合ならば，研究環境が同じランクにある大学の同種分野の研究者間での比較が多くの場合可能であるが，分子研については同種のものが少なくとも国内にはないため，相対評価は難しい。

3. したがって，ある分子の研究を国際的にリードしているかどうかという点での，いわば絶対評価をしなければならないことになる。
4. 分子研の個々の所員の研究活動は一般に高い水準にあることは疑いない。しかし，現在の分子研の研究が質，量ともに真に出界の最高水準にあるかとうかは疑問である。
5. その原因の一つは分子研の体制そのものにあるというのが，以前からの私の見解である。分子研では個々のグループが小さいうえ，グループ間の協力はほとんと行われていないようにみえる。グループを大きくする一つの方法は大学院生を集めることであるが，これをすると必然的に研究の進め方が大学と似てきて，研究所らしさがなくなるという自己矛盾に陥る危険性がある。
6. 一方最近の大学では，特別推進研究に加えて，COE 研究費，はたまた戦略研究や未来研究など出資金による大型予算等を獲得する研究室が出てきており，良いか悪いかは別として，これらの研究室は「研究所化」する可能性もある。
7. このような状況下で，今後の分子研の体制をどうするかは，これまで以上に大きな問題になっていると思うが，如何であろうか。

（国内所外委員 A）

今回分子構造系の外部評価委員として参加した評価委員会での意見交換をもとに，特に高分解能分光に関する研究活動について意見を述べたい。

分子科学研究所は創設以来多数の優れた成果をあげており，国際的にも高い評価を得ていることは周知の事実である。分子科学研究所では創設以来高分解能分光が主要研究テーマの一つとなってきたが，この間分光学に関する考え方がかなり変化し，分子定数の精密決定が主目的であった時代から最近では分野間にまたがる研究の一端として，他分野と緊密な連携のもとで進める研究，すなわち分光学の成果が関連分野で本質的な役割を果たす様な研究を評価する傾向が強まっている。この点，現在分子構造系で進めている星間分子としての不安定分子の研究並びに星間分子の観測はこのような研究の典型的な例であり，電波天文の研究者と緊密な連携のもとで多くの成果をあげている事を高く評価したい。一方もう一つの研究テーマであるエキゾティック分子の研究では，価電子の一つを反陽子で置き換えた分子ヘリウム原子の分光学的研究というチャンレンジングな研究に成功し，これも極めて高く評価を得ている。これはほとんど純粋な物理学の研究であるが，化学を母体とする分子科学研究所でこのような研究が行われている事は，研究所の運営の柔軟性を示すものとして歓迎したい。

次に研究の展望であるが，星間分子については現在サブミリ波望遠境の建設が国内で計画されているなど新しい展開が予想され，実験室での測定の重要性はまだ続きそうである。しかし最近星間空間の不安定分子による赤外，可視領域での吸収，発光スペクトルの観測が外国で報告されており，長期的には可視赤外領域での不安定分子の研究の重要性が再浮上する可能性がある。また第二のグループが行っているレーザー冷却等のテーマは，物理学の色彩が強い事もあって先端的な研究テーマの寿命が比較的短く，ある期間努力をしてなおかつ近日中に成果が見込まれない様な場合には思い切りよくテーマの見直しを行う事も必要であろう。またこれらの研究では，論文もそう簡単に書ける分野でもないことを考えると，チャレンジ性の高い研究とともに出来ればある程度定常的に成果を出せる研究を併せて進める事が好ましいように思われる。

このグループの研究テーマ設備は，研究費，スペースを含めて一昔前ほどではないにせよ大変恵まれているといえる。ただ研究室の構成人員を見ると，研究活動を円滑に進めるには研究者の数がもう少し多くてもよいように思う。

定員が限られている以上博士研究員，訪問研究員に頼る事になるが，任期2〜3年の博士研究員の数を増やす事，それも分子科学研究所の裁量で採否が決定できる人員枠を確保する事が分子研のさらなる発展のためには極めて重要と思われる。対象は当然外国人も含まれるが，外国人の若手研究者は玉石混淆のことが多く，研究所である程度責任を持って採用を決定できるシステムが望ましい。博士研究員の質と量は一面では研究活動の評価を反映するものであり，分子科学研究所の更なる活性化のための現時点での緊急課題の一つと考えられる。

（国内所外委員Ｂ）

現在の研究系の構成は創設時の骨組みを保ち，分子科学の分野を均等に網羅するものとなっている。このような構成は創設当初は当然のものであったが20年を経た現在，この構成を見直す必要はないだろうか？

この20年の間に分子科学自体は系の名称となっている「分子構造学」と「分子動力学」や「電子構造学」と「電子状態動力学」，あるいは孤立分子と分子集合体とを区別することの意味を薄くしながら進展してきた。勿論，この変化に応じて分子研の研究内容も変化してきたが，一方で教官公募の文面には既存の枠組みの保持を意識していることがにじみ出ている場合もある。組織の構成が均等であることは研究所の運営面においてはイージーであろうが，即応性ある研究を行う上では最良であるとは限らない。仮に既存の枠組みをはずしたとすると，教授・助教授の公募に際して研究所全体としての意思が現在よりも強く反映された公募文ができるだろう。勿論，現在でも教授会議・主幹会議などで文案についての議論がなされていると思うが先述のように系の継承性が多少とも意識される結果，公募の文面に追力が欠けることがあると思うのは筆者の偏見でなければ幸いである。ある種のセクショナリズムを徹底的に除き，時代に即応した研究分野が何であるかを研究所全体として議論したあとが感じられるような公募かできないものかと考える。

系あるいは研究部門の画一的な間仕切りを見直し，研究所の構成がいわば，網目構造がアメーバ構造に近づけることは多大のエネルギーを要すると予想される。これは平等な共同生活を好む日本人にとって障壁の高い作業であろうが，あえてこれを乗り越えてダイナミックな研究の場が生まれることを考えたい。企業がその活力を維持するためには常に組織の統排合や新規事業への進出を必要としている。

ところで，たとえばAnnual Reviews of Physical Chemistryのようなグローバルなレビュー誌でとりあげられる分野はこの20年の間に大きく変わっているがそれと比べると分子研の研究テーマには先導性，飛躍性，意外性に欠けるところがあり，海外での研究をシュアな手法で洗練していくというスタイルのものが多いと言わざるを得ない。この状態を脱却するには固定観念的な”分野”を一旦，忘れてみずみずしい感性を持った人材を迎え入れることのできるメカニズムを作ることが必要である。

（国内所外委員Ｃ）

M. A. El-Sayed
Julius Blown Professor
Department of Chemistry and Biochemistry
Georgia Institute of Technology, Atlanta

I have read the material prepared for the review process and heard the focus of the research efforts of the research directors of the Molecular Structure group; Prof. Kato, Prof. Kitagawa, Prof. Morita and Prof. Saito. This group continued to be productive,

carrying our original research of the highest quality and are answering questions of a very fundamental nature. The research interests of this group cover very broad areas of molecular science : e.g. the determination of the structure of the unique species formed from the interaction of antiprotons with the helium atoms, the spectra and structure of simple radicals that might be present in space, the hyperfine structure of ions in solids in different sites, the structure and reactivity of C_{60}^- and metal fullerenes, determining the reorientation of molecules in liquid crystals during phase transitions and the structure and function of important photobiological systems such as the reaction center in photosynthesis, legated Hemoglobin and Cytochrome-c oxidase.

The senior members of this groups, Prof. Kitagawa and Prof. Saito are internationally well known. They are invited frequently to speak at numerous national and international meetings and to write review articles about their respective fields. The published work of all the members of this group appear mostly in highly respected refereed journals and the productivity is quite high. The different members of the groups invest in building new instrumentation to pursue their molecular science research. Examples are : the collaborative efforts in the building of Mount Fuji telescope, the building of the far-infrared spectrometers, the building of the Raman-beat spectrometer and the building of picosecond or the UV Raman spectrometers. It was good to see that the number of the researchers in the photobiology group has increased. This has stimulated more activity in this important area. The proposed future directions of the members of this group all sound very important and new and original science is expected to be completed.

As to future directions of IMS in general, I would still suggest a further increase in the research activity in the area of Molecular Biology. An establishment of a molecular biology center in between IMS and the Institute of biology is a natural outgrowth of new research areas. X-ray diffraction and NMR imaging could be directions that would complement the work of Prof. Kitagawa in the field of structural biology. In addition, it would give more challenging research activity for the members of strong theoretical group at IMS.

Another area is Environmental Molecular Science. With the strength of IMS in the area of Laser photochemistry and dynamics, the area of atmospheric environmental research becomes another natural area to develop.

A third area in which resources should be used is that of nano-particles. Now that IMS is planning to have a material center, new researchers in the area of nanostructures, both synthesis and properties, should be added. These particles constitute new materials whose properties are size dependent and need to be understood. Again theorists at IMS will have new directions (e.g. quantum confinement and surface plasmons) that would offer them new challenges.

Proposals to further development : I suggest a restructuring of the different departments at IMS. Of course this is "easy said than done". The present departmental structure does resemble that used when IMS was founded. The activity at IMS has certainly changed and is now rapidly changing. In order to assist this change, a new departmental classification might help. A zero order classification could be as follows : 1) Theory (in such research in developing basic theory is carried out, without any application), 2) Spectroscopy and Structure, 3) Dynamics, 4) Kinetics and environmental science, 5) Material, 6) Molecular biology and 7) Instrumentation. Each of departments 2-6 should have both theoretical and experimental components. This would induce stronger coupling between theory and experiments.

There is no doubt that IMS has well recognized national and international scientific impacts. The Okazaki Conferences, the postdoctoral and visiting programs, its well recognized scientists that it is very rich in having as well as its first rate facilities, all makes it a unique scientific institution. It is now evolving to meet the changes occuring in science and scientific support. I do wish it a very successful evolution.

M. A. El-Sayed
Georgia Institute of Technology
Nov. 5, 1996

前記英文の和訳

分子構造

評価のために準備した資料（注：前もってお送りした資料）を読みました。分子構造グループの研究リーダーすなわち加藤，北川，森田，斎藤各教授の研究成果の要点を聞きました。このグループは最高級の独創的な研究を行いながら多くの成果を上げ続け，非常に基本的な問題に答えつつあります。このグループの研究の対象は分子科学の広い分野を網羅しています。すなわち，反陽子とヘリウム原子との相互作用から生ずる特異な原子種の構造の決定，宇宙空間に存在する可能性のある簡単なラジカルのスペクトルと構造，固体内のいろいろな場所での超微細構造，C_{60}^-と金属フラーレンの構造と反応，相転位の際の液晶中の分子配向の決定，および，ヘモグロビンやチトクローム-c 酸化酵素に代表される呼吸系と，光合成の反応中心のような光生物系に含まれる分子の構造と機能です。

このグループの年長のメンバーである北川教授，斎藤教授は国際的によく知られています。彼らは非常に多くの国内，国際会議での講演を頼まれたり，また，それぞれの分野についてのレビューを書くよう頻繁に要請されます。このグループ全員の出版論文は多くの場合高く評価されているレフリー付雑誌に発表され，しかも非常に多作です。グループのいろいろなメンバーは自分たちの分子科学研究を追求するために新しい装置の製作に研究費を使っています。例としては，富士山望遠鏡の共同建設，遠赤外分光計，ラマンビート分光計，ピコ秒あるいは UV ラマン分光計の製作があります。光生物グループでの研究者の数が増加するのは好ましいことです。それはこの重要な分野の活動をますます活発にします。このグループのメンバーにより提案されている将来の方向はすべて非常に重要で，新しい独創的な科学が達成されるだろうと思われます。一般的に IMS の将来の方向としては，あいかわらず“分子生物学”の分野での研究活動の一層の増加を提案します。IMS と生物研究所による分子生物学センターの建設は新しい研究領域の当然の成り行きです。X線回折と NMR イメージング法は構造生物学における北川教授の研究を補足する方向であり得ましょう。さらに，IMS の強力な理論グループのメンバーに対してはますます挑戦に値する研究活動を提供することになるでしょう。

もう一つの分野は環境分子科学です。レーザー光化学やダイナミックスの領域における IMS の力をもってすれば，大気環境研究の領域は発展させるべきもう一つの当然の分野になります。研究費が使われるべきもう一つの分野はナノ粒子の分野です。IMS が物質センターを計画しているのであれば，合成と物性の双方にわたるナノ構造分野の新しい研究者を加えるべきです。これらの粒子は，その物性がサイズ依存性を持つ新しい物質からなり，理解される必要があります。これも IMS の理論家に対して新しい挑戦をつきつけるような新しい方向（すなわち，量子閉じ込めや表面プラズモン）になるでしょう。

将来の発展に対する提言：IMS のいろいろな部門の再構成を提案します。もちろん，これは“言うは易し行うは難し”です。現在の部門構成は IMS が創設された時のものを反映しています。IMS における活動は確かに変わって来たし，今や急速に変わりつつあります。この変化を助長するためには，新しい部門構成に変えることが役に立つかもしれません。零次のおおまかな構成としては次ぎのようなのがあり得ましょう：1）理論（いかなる応用も考慮せず，基

礎理論を発展させるように研究が行われる），2）分光と構造，3）動力学，4）反応論と環境科学，5）物質，6）分子生物学，7）装置開発。2-6 部門のそれぞれは理論および実験の両要素を持つべきです。これは理論と実験の強い結びつきをもたらします。

IMS は国内，国際的にもよく認められ，科学的インパクトを与えてきたことは疑いもありません。岡崎コンファレンス，博士研究員や招へいプログラム，第一級の施設のみならず有名な科学者が大変多い研究所，これら全ては本研究所を他にはないような科学研究所にしています。今やこの研究所は科学や科学支援に起こりつつある変化に対応すべく発展しつつあります。それが非常に成功を約束される発展になることを望みます。

M. .A. El-Sayed
Georgia Institute of Technology
Nov. 5, 1996.

4-3-3　電子構造研究系

吉原グループ

吉原グループは，分子研創設以来わが国の電子状態研究の主要な柱を支えてきた重要な部門である。特に，この数年来フェムト秒パルスによる超高速時間分解分光を本格的に研究する数少ない研究室としで世界的に知られ,これからますますの発展を遂げようとしている現在，吉原教授が退官される事に問題を感じる次第である。時間分解がマイクロ秒であったフラッシュホトリシスが，光化学の新しい局面を開拓したのと同様に，フェムト秒の世界はピコ秒をはるかに超えた重要な情報を与えてくれる。たとえば，波束の形を制御し，その発展を見る研究は，複雑系を扱う化学の世界に量子力学を直接導人した興奮を与えるものであり，また大学の研究室では処理しえない技術と費用を要するという観点からも，分子研の何処かでより発展的に研究がなされる事を希望する。同グループの富永助手は，きわめて優秀である。同氏にやる気を起こさせる場を与える事はできないのだろうか。

松本グループ

松本氏は，表面科学に光化学を導人する立場から興味ある仕事を展開されている。特に最近のメタン分子の表面での光解離反応の研究は，分子科学者ならではの仕事であり，表面科学に大きなインパクトを与えるものとして高い評価が与えられるものであり，同グループの研究がますます発展する事は間違いない。同氏の活力と若さを考えると，この研究を発展させ，表面に設計された活性点を作り，そこでの反応のダイナミックスを追求するなど，混沌としている触媒化学にインパクトを与える方向を目指してほしいと願うのは，要求過多であろうか。

花崎グループ

同グループは，分子クラスターの動力学および分光学的研究と，非線形反応つまり振動反応に力点がおかれていた。前者に関しては，国内外の大学でおこなわれている研究と四敵する程度の成果を挙げているが，それ以上に抜きんでていないという点での贅沢な要望が残る。後者の研究は，きわめてユニークであり，花崎氏は本来この研究をより中心に推進されるべきであったと言える。退官後も，この研究をますます推進されるよう希望する。

鈴木グループ

同グループは，気相反応機構を精密に研究するという意味で，鈴木氏の高い能力から考えて絶対に間違いのない方向を進んでおられるが，本評価委員としては不満が残る。簡単な分子の素反応との研究は勿論重要なテーマであり，大学の研究室でなされるべき問題である。分子研において，助教授層は，次の世代の研究テーマを堀り起こし，その先駆けをするべきである。現在のテーマに今後数年（10 年？）の発展は予想しても 21 世紀への夢を感じないのは，本評価委があせっているせいなのだろうか。

（国内所外委員 A）

電子構造研究系では，教授陣が初代の陣容であるのに対し，助教授層は 2 代目の新しい陣容となっており，いわば分子科学研究所の歴史が凝縮されている。評価という点では，電子構造研究系を構成するスタッフの研究業績・国際的活動・教育への寄与・国内の研究への啓蒙の役割のどれをとっても十二分である。

基礎電子化学研究部門（吉原グループ）は，広く超高速現象を扱う我が国でほとんど唯一の研究室として，液相・生体関連反応の研究を発展させてきた。もちろん高額の装置を必要とするため，大学の研究室では実現不可能なことも多いわけであるが，それだけに我が国の超高速反の“顔”としての責任は本部門にかかっていたといえる。その中で，最近では，超高速分子間電子移動反応における分子の骨格振動の寄与に関する実験的検証や，高次の非線形振動分光に関して世界最初のデータを提出するなど，インパクトのある仕事が行われている。世界的に見て，超高速レーザーを用いた研究がますます盛んになりつつある今，この研究部門の持つ意味は大きいし，これまで人を育ててきた意義も大きい。特にこの研究部門では，国内外を問わず多くのポストドックを研究陣に組み入れた体制をとって来たが，研究の展開や人を育てるという意味でポストドックが大きな役割を果たしてきたことは間違いない。将来の研究体制において，ポストドックの重要性を示唆する好例を作ったと評価できる。

電子状態動力学部門（花崎グループ）も我が国の化学反応研究の一つの“顔”である。ここでは，クラスターの反応が一つのテーマとして取上げられてきた。このテーマは，世界的に注目を集めたテーマであるが，十分な定量化・理論化が達成されていない。当部門でも，精力的に研究されたが，理論グループとの連携があれば，一層の発展があったのではないかと思われる。一方，液相の反応としては，振動反応が中心テーマであった。振動反応の研究は，これまで我が国では盛んではなかっが，当部門で見いだされた，光敏感 pH 振動反応の研究は特筆に値する。比較的遅く研究をスタートさせて，この分野での世界的な研究グループとしての位置を確立されたことは大きな実績である。

これら 2 つの研究グループを率いてこられた初代教授の方々は，本年度をもって退官されるが，分子研を確立する大切な時期にあって，職責を全うされたことに改めて敬意を表したい。

一方，両部門には非常に有力な若手の助教授がすでに着任されて，順調に研究を進めておられる。基礎電子化学部門（松本グループ）では，固体表面における吸着分子の電子状態と反応のダイナミックスに着目した研究を進めようとしている。孤立分子の研究が極限にまで精緻になって量子力学計算との境目が薄れつつある現在，相互作用によって大きく影響を受けた分子の挙動を研究対象とし，その分野を開拓しようとするのは当然の方向であろう。タラスター や液相反応では相互作用が比較的小さいのに対し，固体表面では電子移動を伴うほど大きく，本質を掴みやすいかもしれない。手法としては，光を用いた反応の開始と生成物のエネルギー・電子状態・並進運動の観側を中心としている。研究の方向は正統であり，これまでの成果は世界的にも高く評価されている。

電子状態動力部門（鈴木グループ）では，気相化学反応の正統的研究とも言うべき，反応と光分解の精緻なダイナミックスが研究されている。短時間の間に最先端の手法を導人し，いくつかの興味ある系について実験結果を出して

世界に問うている。検出装置とレーザーの発達で，これらを組み合わせた実験手法の開発は世界的にしのぎを削っており，分子研もこの仲間に入ったとの感を抱かせる。

教授の方々の役割が，「分子研の世界的な位置づけの確立と国内の分子科学研究の育成」であったのに対して，今後の分子研を背負う人々の役割は，「分子研を発信源とする世界的な研究を作り上げていく」ことであろう。これが実現できるかどうかは，研究者個人の資質に加えて，分子研の姿勢や研究支援体制にもかかっていよう。開拓的な研究を歓迎し評価する姿勢，予算的な支援，ポストドックなどの人的な支援，装置開発が積極的に行える体制，研究に十分な時間を使える配慮などが要請されよう。

（国内所外委員 B）

November 18, 1996

Professor Mitsuo Ito

Director-General

Institute for Molecular Science

Myodaiji, Okazaki 444

Japan

Dear Professor Ito:

It was my very great pleasure to visit the Department of Electronic Structure at the Institute of Molecular Science from July 31, 1996 through August 3, 1996. The faculty of the Department of Electronic Structure were extremely cooperative and helpful in allowing me to review their many activities during a rather short visit. I am very grateful to all of them for their assistance and cooperation in allowing me to prepare this review in such a short time. The following is my report on the Department of Electronic Structure.

The Department of Electronic Structure

This department is fairly small, consisting of two senior professors (Professors Hanazaki and Yoshihara) and two associate professors (Professors Suzuki and Matsumoto). However, the faculty have earned an outstanding reputation for studies on dynamics of molecular excited states and chemical reactions, surface effects and dynamics of solvation. This outstanding reputation is obvious from many different indicators of excellence: outstanding publications in the most important research journals, invited lectures at major international conferences and a truly impressive collection of outstanding Japanese and international collaborators. While emphasizing dynamics, the time scales of the programs range from that of molecular vibration and electron transfer to minutes! The systems studied range from diatomic molecules to J-aggregates to the photosynthetic reaction center. Given the breadth of topics and the small size of the staff, it is especially important that the topics selected for study be chosen well. The staff of the Department of Electronic Structure have done an outstanding job in identifying the critical issues in each of the areas of investigation.

There have been many outstanding achievements in each of the research groups in the three years since the last review of the Department of Electronic Structure. While these accomplishments are very beautifully presented in the annual reviews of IMS, I mention a few highlights in this letter. Professor Yoshihara is carrying out definitive experiments on intermolecular electron transfer, experiments separating clearly the role of nuclear rearrangement of the donor or acceptor and the relaxation of the solvent.

Professor Hanazaki is continuing beautiful studies of state-selected products in simple bimolecular reactions as well as remarkable studies of the photoresponse of very complex oscillatory chemical reactions. Associate Professor Matsumoto takes great advantage of his gas-phase background to study detailed molecular dynamics on surfaces. The recent observation that methane photodissociates at much longer wavelengths on Pt(111) than in the gas-phase is an exciting and important observation. Associate Professor Suzuki continues the great IMS tradition of detailed understanding of the dynamics of elementary gas-phase reactions. His just-published work on photofragment ion imaging using femtosecond real-time clocking of α-bond cleavage in acetone is a major accomplishment and greatly extends the experiments of Zewail.

These accomplishments make it very clear that the scientists in the Department of Electronic Structure continue to be at the forefront of their fields and reflect great credit upon the Institute for Molecular Science. The overall objective of IMS has been to perform important research at the leading edge of many facets of basic molecular science. The IMS rapidly established a leadership position, and today it is a leading institution internationally in the area of molecular science. It can attract outstanding scientists from Japan and around the world to participate in its research programs. The Department of Electronic Structure, however, is at an extremely critical period in its life. Both Professors Yoshihara and Hanazaki must retire in the next year, and it is absolutely critical that they be replaced by scholars of the highest rank, capable of continuing and extending the leadership exhibited by IMS in the past. In order to accomplish this critical task, it is essential that the competition for these positions be broadly-based and open to applicants at all levels from all institutions. It is critical that the startup funds, the continuing support and the access to graduate students be such that these positions are among the most attractive in the world. Only with such outstanding appointments will the Department of Electronic Structure and IMS be able to continue its excellence and leadership in molecular science.

The IMS has a relatively small number of faculty to cover an extremely broad area. In order to do so, the faculty are of necessity spread very thinly across the fields of molecular science. Mechanisms are needed to increase the effective size of the groups at IMS. Possibilities include additional postdoctoral associates, especially for those experimental projects which are extremely complex, involving sophisticated lasers and machines. Other possibilities include bringing additional students to IMS and increasing the interactions between the research groups at IMS.

The Institute for Molecular Science and the Department of Electronic Structure at IMS are very important components in the global study of molecular structure and dynamics. The Department of Electronic Structure has played a critical role, both in Japan and in the world, in the studies of molecular reaction dynamics. As a new generation of scientists takes the helm of this department, it is absolutely vital that IMS make these positions extremely attractive and then appoint the best possible scientists to fill them. In this fashion, the great tradition of IMS will be ensured for the next 20 years.

With best wishes,

W. Carl Lineberger

E.U.Condon Distinguished Professor of Chemistry and Biochemistry Fellow of JILA

前記英文の和訳

（Lineberger 教授より伊藤所長あての書簡）

1996 年 7 月 31 日から 8 月 3 日までの期間，分子科学研究所・電子構造研究系を訪問し，電子構造研究系の皆さんの協力をえて，この短い訪問の間にそのさまざまな活動を調査することが出来ました。皆さんの協力のおかげでかかる短期間にこの報告書を作成できたことを感謝します。以下は電子構造研究系に関する私の報告です。

電子構造研究系

この研究系はかなり小規模で二人の教授（花崎，吉原）と二人の助教授（鈴木，松本）からなっている。しかしながら，この研究系は励起状態分子の動力学や化学反応，表面効果，さらに溶媒和の動力学などの研究によって高い評価をかちえている。このような高い評価はさまざまな卓越性の指標からあきらかである：たとえば，もっとも重要な専門誌へのすぐれた論文発表，主要な国際会議における招待講演，そして優秀な国内および国外からの共同研究者達が集まっていることも印象にのこる。動力学に関していえば，研究の時間スケールは分子振動や電子移動のようなものから分のオーダーにまで及んでいる。あつかわれる系は２原子分子から J-aggregate そして光合成反応中心にまでおよんでいる。課題が広範囲におよぶことと小規模な人員を考えると，研究課題をうまく選ぶことがことに大切であると思われるが，電子構造研究系のスタッフは各々の研究分野において重要な問題点は何かをはっきりさせることに成功している。

前回の電子構造研究系の評価以後３年間に，各研究グループは多くのすぐれた仕事をしている。これらは分子研のアニュアル・レビューにくわしく書かれているので，ここでは 2, 3 のハイライトに言及するにとどめたい。吉原教授は分子間電子移動についての明確な実験研究や電子供与体または受容体の再編成と溶媒緩和とを明快に分離する実験をおこなっている。花崎教授は簡単な 2 分子反応における生成物の状態選択に関しての鮮やかな研究をつづけるとともに，非常に複雑な振動化学反応の光応答についての注目すべき研究を行っている。松本助教授はその気相の経験を最大限に活かして，表面における詳細な分子動力学を研究している。メタンの光分解が気相に比べてはるかに長波長でおこるという最近の発見は興味深く，かつ重要である。鈴木助教授は分子研の伝統である，気相素反応過程の詳細な研究を行っている。最近出版されたばかりの，アセトンのα結合開裂に対するフェムト秒リアルタイムクロッキングを用いた光分解物イオンのイメージングに関するする研究が主な業績であり，Zewail の実験を大幅に発展させたものである。

これらの業績からみて，電子構造研究系の科学者達がこれからも彼らの分野の最前線に立ち，分子科学研究所の誉れとなるであろうことはあきらかである。分子研の全体的な目標は基礎的な分子科学のさまざまな側面において最先端の研究を行うことにあった。分子研は急速に指導的地位を確立し，現在では分子科学の分野において国際的にみても指導的な研究機関となっており，国内外からとくに優れた研究者を集め，その研究プロジェクトに参加させることが可能である。しかしながら，電子構造研究系は現在その歴史において極度にクリティカルな時期にさしかかっている。吉原，花崎両教授が来年退官の予定であり，その後任に過去において分子研が示したリーダーシップを引き継ぎ，発展させることができるような，第一流の研究者を迎えることが絶対に重要である。この困難な人事を成功させるには，すべての研究機関のさまざまなレベルの応募者に対し，人事を広く公開することが重要である。立ち上げ用の予算と継続的な研究費の支給，および大学院生の供給がうまくおこなわれ，これらの地位が世界中でもっとも魅力的なものであるようにする必要がある。このような特別に好条件の契約が出来てはじめて，電子構造研究系および分子研

は今後も分子科学における優れた，指導的な研究機関でありつづけることが出来るのである。

分子研は比較的少数の職員で極端に広い分野にわたる仕事を行っている。その結果，職員は分子科学の各分野に薄く広く散らばることになる。分子研の各研究グループの人数を実質的にふやす工夫が必要である。たとえば，博士研究員の増員などが考えられるが，これは操作の込み入ったレーザーや測定器などを用いる，高度に復雑な実験研究プロジェクトにおいてはことに重要である。また学生数をさらにふやして分子研の研究グループとの相互作用をより密にすることも必要である。

分子科学研究所および分子研の電子構造研究系は分子構造および分子動力学の研究全体の非常に重要な一部分である。電子構造研究系は日本および世界の分子反応動力学研究において決定的な役割を演じてきた。新しい世代の科学者達にこの研究系の舵取りをまかせるにあたっては，この地位を特別に魅力的なものとし，可能な限りベストな人材をもってこのポストを埋めることが分子研の死命を制することになると思われる。このようにしてはじめて，分子研の偉大な伝統が次の 20 年間存続することが保証されるのである。

W. Carl Linberger

E.U. Condon Distinguished Professor of Chemistry and Biochemistry Fellow of JILA

4-3-4　分子集団研究系

(1)分子科学研究所においては，創立以来約 20 年の間に分子性物質の研究で顕著な業績が挙げられた。なかでも，有機電荷移動錯体／電荷移動塩の電導性・超電導性，超高スピン有機分子/有機強磁性体，不斉合成触媒の分子設計等の研究がハイライトとして取り上げられ，内外で高く評価されている。1993 年の外部評価では，これらの研究の展開が分子研の中では必ずしも十分であるとは言えないという批判があったが，その後の人事によって教官の交替・補充が行われ，これらのよき伝統が次世代に継承され，新しい姿で発展をみていることは，高く評価したい。分子研で芽生えた研究テーマが全国に広がり各々の場所で育てばよいという見方もあるが，分子研にその研究分野の拠点があることは，求心力となり，わが国における強力な展開に欠かせない意義がある。

(2)分子性物質の特徴は，その反応性・物性・機能性が一義的には分子の性質で決まり，尚且つバルクの性質には分子の集合様式に大きく左右されるものがある点にあると言えよう。従って，個々の分子の研究と分子集合組織体の研究とが車の両輪のようにバランスよく進められなければならない。分子の設計・合成は，相関領域研究系及び化学試料室においてこれまで実績を積みかなり強力である。また分子集合組織体の研究は，主として分子集合研究系において行われ，研究対象はかつての分子性結晶，有機薄膜，超微粒子から液晶，ポリマーと広がりが認められる。研究のウエートは測定・解析に強く，新しい分子集合組織体の系統的構築の研究となると，概念，手法ともにまだ発展の余地があると考えられる。TTF やフラーレンの例をみるまでもなく，新物質の誕生が新しい科学を拓いている。計画に含まれていることとは思うが，物質開発研究センターでは，分子集合組織体の構築研究の柱をぜひ 1 本立てることを希望する。

(3)分子性物質の研究では反応性・機能性の測定・解析を精密に行い，これらのデータと分子・分子集合の構造のパラメータとの相関関係を求め，その解析から一般則を導く。この一般則が，新しい分子性物質の構造と物性・反応性・機能性を設計する指導原理となる。これまで電導性，磁性，光物性等，構造と対応させるパラメータは一

つであったが，21 世紀は複合物性・機能というか，別の言葉を使えば分子構造との相関関係を考えるべきパラメータが複数となるものに研究の関心が移っていくであろう。これに対応して先導性を発揮するには，分子科学研究所の従来の研究グループ間の研究交流を積極的に進める必要がある。

(4)分子科学研究所の「分子性物質研究グループ」の研究発表状況には目覚しいものがあり，先端的研究情報の発信が世界に向けて行われているのは，誠に慶ばしい。しかしながら，ルーティンな論文が見受けられないわけではない。論文の数というものは，大学それも比較的恵まれない研究環境の研究者にとってはそれなりの意義があるものの，世界の研究をリードする宿命をもつ研究所の研究者にとっては，意味は少なく質にこそ意義がある。毎年に 10 報またはそれを遥かに越える数の論文を発表することには麻薬的な快感があり，一度習慣性がつくと止まらなくなり，ある時期には研究発表論文を書くことが目的となり，研究が近視眼的にまた小粒となり兼ねない。所長が論文の数に一定の制限を設けるのがよい時期に来ているのではなかろうか。これによって分子科学研究所からでる論文が一層重厚なものとなり，国際的により高く評価されることとなろう。

(5)新しい分子性物質の発ガン性，慢性毒性には全く未知なところがあり，研究者がこれら及び揮発性物質の蒸気に不必要に曝されることはできるだけ避ける努力が必要である。この意味で，研究棟と実験棟とが分離しているのは，誠に好ましいことである。しかしながら，分子性物質の研究では，それが合成，精製であれ物性測定であれ，リアルタイムでの観察が重要であり，しかもそれが長時間にわたることがしばしばである。従って実験研究の合間を縫ってデータの整理を行ったりデスクワークを行ったりしなければならない。この際，物質を扱う実験研究とデスクワークのバランスをとることおよび研究指導を能率よく行う観点からは，研究棟と実験棟とが完全に分離しているのは，若干非能率で問題がある。新しい分子物質開発研究センターでは，換気と距離とをバランスよく配置した設計を配慮されたい。

(国内所外委員 A)

分子科学研究所の種々の活動状況について，少し専門分野の異なる一研究者の立場から，その印象を以下に述べさせていただきます。

評価委員会でお会いした方々の研究活動についてでありますが，まず，鹿野田一司氏の活躍が最も目を引くかと思います。氏の有機超伝導体の系統的で勢力的な研究とその電子相図モデルの提案は独創的であり，この分野の多くの実験および理論の研究者の注目を集めていると思います。氏の研究手法は，自ら試料作製および物性実験を行ないモデルを提案すると同時に，多くの共同研究者を動員し総合的な理解に達しようとする点であり，高く評価できると考えます。井上克也氏の分子磁性体の研究は，今回初めて伺いましたが，おおいに発展性が期待できるものかと考えます。しかし，この研究の発展には，集合体での磁気構造および電子構造の研究が不可欠であり，この分野の研究者との密接な共同研究が必要であろうと思れます。山下敬郎氏の新規な電荷移動錯体の合成やナローバンドの半導体ポリマーの研究は，これらの物質自身は大いに興味深いものでありますが，詳しいキャラクタリゼーションによってその特異性を明かにすることが期待されるものであろうと思われます。良質の結晶を合成し，研究所内および所外の研究者との連係的研究が必要なのではないかと考えます。

分子研には，上記のように優れた物質合成の研究者を多く擁しており，さらに新しく物質開発の研究センターが設置されることを伺いましたが，非常に多くの新規のかつ新奇な物質が生まれつつあり，今後さらに多くが期待されま

す。物性研究者の側からは，分子研がこれら新規物質の発信基地として他の研究者との共同研究を通じて共同研究所としての機能を推進されることを，強く希望するものです。従来から，斎藤軍司氏らの有機導体・超伝導体など多くの物性物理研究者との共同研究によって飛躍的に発展した分野があり，今後も分子研で独自に開発された物質については全国的な共同研究を積極的に展開されることが極めて重要であろうかと思います。分子研を中心とするネットワークを設置するのも一案かと思います。

次に，分子研の運営について，述べさせていただきます。

まず，分子所の教官人事に関する運営方針，特に昇進人事の制限については，評価委員会において述べましたように，我が国の国立研究所の中でも非常に先駆的な役割を果たしてこられたものと考えます。分子研が，全国共同利用研究所としての使命を持ち全国的な人事交流に一端の責任があることはその一つの理由とはなりますが，一方の重要な視点は最も優れた人材を常に分子研に引きつけておく積極的な機能をメカニズムとして働いている点であります。後者については，個々の教員の活躍を Encourage すると同時に研究所もその責任（研究環境の確保など）を持つことになり研究活動が活性化される一方，常に最も優秀な人材を採用，確保できる機構となるからであり，研究所の目的遂行に最も重要な要素となるからであります。我々，東京大学物理学専攻では，助教授の高年齢化が深刻になっております。我々が教授人事に関して内部助教授からの昇格を一部認めてきたことが一つの要因であり（実際は多くの要因が考えられますが），最近ではより公募に近い方策を検討し始めました。物性研究所も，内部昇進を認めており，助教授の高年齢化の問題を抱えております。貴研究所が，全国共同利用研究所として，この方針を率先してやってこられた指導性は高く評価されるものと考えます。最近，高エネルギー研究所が改組されるに当たり，教官の「任期制の撤発」および「定年延長」という内部教官に都合の良い提案が内部の教官組織から提出されていることを考えますと，ますます，貴研究所の方針は貴重であります。

最後に，非常に困難な問題ですが，是非，お考えいただきたい件であります。

現在，どの研究教育機関でも，状況は悪化する一方かと思いますが，分研での教官，特に教授の方々に掛かる Administration および Community Organization などの負担増加についてであります（助教授の方々については，研究に没頭されているように思いますので，この指摘は当たりません）。以前，客員教授として１年間ご厄介になりましたが，この時，分子研の教授の方々の上記の業務による忙しさは尋常ではなかったように思います。これが定常的であるなら，教授の方々の真の研究活性度に影響することを危惧いたしております。小生の個人的印象で，研究所の運営の詳細を全く知らず，間違っている場合には深くお詫びいたしますが，研究所の教授は（大学も勿論ですが，少なくとも研究機関は），本来の研究に時間を集中できる態勢を持つべきかと思います。

勿論，分子科学研究所は，設立以来ずっと，研究活動およびコミュニティーの組織・運営について，全国共同利用研究所として，自律的に倫理感をもってその使命および責任を果たしてこられたことを高く評価しておりますが，研究者の独自性を損なうことのないようご配慮いただければと考え，意見を述べさせていただきました。

（国内所外委員 B）

Report on Review of the Department or Molecular Assemblies and Related Groups

1) Introduction

This report is based on the interviews with seven groups of IMS. It concerns the four groups of the Department of Molecular Assemblies (Profs. K. Yakushi and H. Kobayashi, Associate Profs. K. Kanoda and S. Miyajima), one group of the Research Facilities-Chemical Materials Center (Associate Prof. K. Yamashita), one group of Department of Applied Molecular Science

(Associate Profs. K. Inoue) and one group of the Department of Theoretical Studies (Associate Prof. K. Yonemistu).

Would it be necessary to emphasize the excellency of the research, of the scientists, of the facilities, and, consequently, of the international reputation of' IMS? Indeed it is, because that is simply the truth. IMS, as an institute devoted to basic research is unique, and more and more unique throughout the present period when budgets supporting basic research shrink in most developed countires. Most striking is the absence of pressure to look for industrial contract money and the consequent apparent freedom for choosing research projects.

The inter of the research subjects and the quality of the people carrying out these works is outstanding. This is not just a polite statement but may be quantified by the number of papers which is close to 300 for the 1993-present period (for an averaged total of 30 people, including graduate students). More important is the averaged quality of these papers which might be quantified by their averaged impact factor of 1.85 (Maximum is 6.62 for *Phy. Rev. Lett., J. Phys. Soc. Japan* has 1.92 and *Bull. Soc. Chim. Japan* has 0.84).

Another important asset of IMS is "interdisciplinary". For example, the expertise, of just the seven groups that I have interviewed range from plain synthetic chemistry to theory of correlations, with physical chemistry and experimental physics in between. This interdisciplinarity is not just related to the juxtaposition in the same location, but results in effective collaborations as indicated by the origin of the authors of the publications.

Finally, the facilities which are available at IMS are great. Space is sufficient and most of the equipments that I have seen are modern and of top quality. Research Facilities exist.

Although located in it a rather small city, far away from Tokyo of other large centers, the IMS research workers seem to have no difficulties in interacting with colleagues of other universities and research institutes, as evidenced by the large number of cooperations resulting in common publications.

This being said, one might wonder why this review is needed, and the only advice would be “leave it as it is”. However, there is always room for improvement.

2) Research Subjects

The field of molecular science, and even the field of molecular conductors which is the main common topic of the concerned groups, has become so vast that I would not dare to make any suggestion of new directions of research (these kinds of suggestions are often based on personal taste, with little knowledge of other subjects than those of interest for the reviewer, and often based on "fashionable" trends observed in the literature). However, given the manpower available in these groups, I certainly feel that the number of subjects is far too large and that these groups should concentrate their efforts, through a collaborative concerted brainstorming, on a smaller number of research projects.

3) Manpower

As said above, IMS was able to attract excellent scientists for filling positions of Professor and Associate Professors. Therefore I have no suggestion for improving this recruiting process. However, the international reputation of these prominent colleagues is not as high as it should be (this is evidenced by the number of invitations to give lecture in international meetings which is relatively small, especially when compared the number of their invited lectures in purely Japanese meetings). This is certainly due

to the language barrier.

The general rule following which Associate Professors of IMS can be only promoted to Professors positions if they move out of IMS to another institution is an excellent rule and should be further implemented in the future. However, if there were, for any reason, a superior interest for IMS (for example keeping here a unique expertise), then this rule should be broken, but naturally in exceptional cases .

IMS has been reasonably successful in attracting good post-docs and visiting scientists. In some cases however, it seems that the visiting scientists conduct independent research on subjects which many be not related to the main topics of the host group or department. It thus happens that several projects were only developed during the stay of the concerned visiting scientist and abandoned after his departure. It should be made clear to the visiting scientists that, although some degree of freedom might be granted to them for developing independent research on their personal subjects, they should participate to a large extent of their time to projects of interest to the host group.

IMS was less successful in attracting a large number of graduate students and the GUAS program does not seem fully efficient. This is certainly due to the geographical location of IMS and there is no remedy to that.

Nevertheless some options, which I realize might be difficult to apply in Japan, are left:

- make the GUAS program more attractive by increasing associated benefits (grant, housing, ...);
- reserve a given percentage of new IMS positions to the best graduate students once they have completed PhD;
- negotiate agreements with local universities (Nagoya, Osaka, ...) according to which undergraduate students from that university engaged in a joint doctoral course will obtain a "double-label" IMS-Concerned University PhD degree;
- establish an independent Under-Graduate school related to IMS were students will be attracted by grants and additional attractive benefits. For example, it should be publicized that theoretical and especially practical studies will be pursued within the IMS facilities.

The number of post-doc. students and visiting scientists may also be increased by offering additional benefits (salary, housing, training courses in Japanese, multi-national cultural environment, ...).

The number of technical assistant which is considered as optimal in France (but not implemented) is approximately one per permanent research worker. However, make sure that this personal really assist the research worker and does not conduct autonomous research. Thus, if budget allows it, it seems that an increase in the number of technical assistants in the reviewed groups could be suggested.

4) Organization of the Department

All groups in the Department of Molecular Assemblies and the related groups that I have reviewed are much too small in the number of Research Associates, Graduate Students and Technical Assistants (the average number is approximately 3), thus the necessary “critical mass” is often not attained.

I have also the feeling (but a longer visit would be necessary to check whether this feeling is not justified) that, in some cases, a research associate seems to conduct independent research which is not closely supervised by the groups leader, increasing thus the dispersion of the efforts. Consequently, as stressed above and given the available manpower the number of topics for studies is far too large.

This is partially compensated by an extensive, apparently efficient network of collaborations with other laboratories in Japan or

abroad. Collaborations within the Department and with the related groups is satisfactory, but may be improved.

In any case, a few options are left to improve this situation:

- increase man power (see above),

- decrease number of subjects by recentering and by and enhancing collaborations within IMS,

- define internally high priority projects which will receive special support and funding.

The availability of "Research Facilities" is crucial for an institute such as IMS. However, the goals and purposes of Research Groups and Research Facilities are fundamentally different. I am not sure that these differences are well identified at IMS. The other designation for "Research Facilities" is "Service Labs", which implies that the members of these "Service Labs" are supposed to *serve* the Research Groups. A research worker should not loose time by carrying routine characterization (spectroscopic techniques, X-ray, ...) which should be carried out on request by the personal of these "Service Labs". However, in turn, the members of the "Service Labs" are not supposed to conduct independent research, except for improving the performances and specifications of the techniques employed. Thus an increase of personal in these "Service Labs" may be suggested, provided that they are independent from the research groups. Their management should be autonomous, but the General Direction of IMS must control that they are duly carrying out the work that they are commissioned to do. In such a case, the qualifications, title (and salary) of members these "Service Labs" may be as high as those of research workers, if justified by responsibilities.

Patrick Cassoux

前記英文の和訳

分子集団研究系ならびに関連研究グループの評価

(1)はじめに

この報告は分子研の以下の７名の研究グループとの会見にもとづいて書かれたものである。分子集団研究系（薬師久弥，小林速男教授，鹿野田一司，宮島清一助教授），化学試料室（山下敬郎助教授），相関分子科学研究系（井上克也助教授），理論分子科学研究系（米満賢治助教授）。

国際的に高い評価を受けている分子科学研究所の研究，研究者，研究施設の優秀さを今更強調する必要があるとも思えないが，それは真実であるので先ずは強調したい。基礎科学を目指す研究所として分子研は，ユニークであるが，先進国で基礎科学に対する予算が縮小されつつある現在，その役割は益々貴重になりつつある。私のもっとも驚いたことは分子研の研究者が企業からの研究費を獲得するための圧力を感じていない事，その結果として研究課題を全く自由に選択している事である。

研究課題に対する興味とそれを遂行する研究者の資質は非常に優れている。これはたんなる外交辞令ではなく 1993 年から現在までの間に発表された 300 に近い論文数によって裏付けれている。(この間の研究者総数は大学院生をふくめて 30 名である。)さらにこれらの論文の質は平均のインパクト因子 1.85 で評価されるであろう。（インパクト因子は最高が *Phys. Rev. Lett.*の 6.62，*J. Phys. Soc. Jpn* が 1.92，*Bull. Chem. Soc. Jpn.*が 0.84 である。）

分子研のもう一つの長所は学際性である。たとえば私の会見した７名の専門領域は有機合成化学から電子相関の理論にわたりその間に物理化学と実験物理学の領域がある。この学際性はたんに同じ場所で研究しているというだけではなく，有効な共同研究へと結びついている事が発表論文の共著者名からもうかがえる。

最後に分子研で使用出来る研究設備は素晴らしい。特に研究スペースが豊富である。（時には他の人から孤立して

いると感じるくらいの広さを感ずる。）多くの実験設備が近代的で最高の可能性を持っている。また研究設備をもっている。

東京その他大きな都市から離れた割合小さな町にあるにもかかわらず，分子研の研究者との共同研究に困難さを感じていないように見える。このことは多くの共著の発表論文によって証明されている。

ここまで読み進まれた方は何故この研究評価が必要なのか不思議に思われるかもしれない。またもっともよい助言は「このままでよい。」という事になるかもしれない。しかし物事には常に改善の余地があるものである。

(2)研究課題

分子科学の分野は，いやこの研究グループの大半が関心を抱いている分子性導体の分野でさえ，とてつもなく広がっており，それ故に研究の新しい方向を敢えて指示しようと思わない。（この種の示唆は他の分野への知識不足のために個人的な興味に終始する事が多く，またその時代の華やかな流行に乗った研究課題になる場合が多い。）しかし，これらの研究グループの研究者数に比べて研究課題数が多すぎると思う。もっと研究課題を絞り込み，共同研究者とのブレーンストーミングを通じて力を集中すべきであると考える。

(3)マンパワー

前にも述べたように，分子研は教授職と助教授職に優秀な研究者を引き付ける事に成功しているので，この公募の過程を改善する事については何も言うことがない。しかし，これら優れた研究者の国際的な評価はもっと高くてよいはずである。（これは国内における会議における招待講演に比べて，国際会議等への招待講演数が比較的少ないことにあらわれている。）これは言葉の問題もあろうと思うので，そうであるのならお許しいただきたい。またそれ故に英語の研鑽を強く勧める。

分子研の助教授が内部昇進を認められていないという規則は素晴らしいもので，今後も実行してほしい。しかし，もし何等かの理由で，分子研にとって最高の利益がある場合（たとえば余人をもって代え難い専門技術等をもっているなど），この規則は破られるべきである，しかし当然例外的な場合である。

分子研は当然のことながら，優秀な博士研究員と客員研究員を集めるのに成功している。しかし，時には客員研究員が独立に研究したり，その研究グループや研究系の主要研究課題に関係しているとは思えない研究を行う場合があるように思える。この様な時，複数の研究課題がその客員研究員がいる間だけ行われ，その後の放棄されるという事態が生じる。客員研究員の個人的な興味にもとずく独立した研究を行うための幾許かの自由が与えられることも時には必要かもしれないが，彼等は大部分の時間を対応研究グループの研究課題に割くべきである。この事を客員研究員に徹底させる必要がある。

分子研は多くの大学院生を集めるのに成功してると思えず，総研大プログラムが100%有効に機能しているとは思えない。これは分子研の置かれている地理的な状況に追うところが大きいので，その点はどうしょうもない事である。

にもかかわらず，次のような方策を提案したい。これは日本においては実現する事が困難かもしれないが。

－助成金，学生寮など関連する特典を設ける事によって総研大を魅力あるものにする。

－分子研のある割合の職を，学位を習得した優秀な学生のために用意する。

－名古屋や大阪などの大学と次のような協定を結ぶ努力をする。これらの大学と共同の学部一貫性の博士過程をもち，この過程を卒業し，博士過程を修了した学生は分子科学研究所－〇〇大学博士という２重の称号を与える。

－分子研に関連した学部学生用の独立したスクールを設立し，助成金その他の特典を設ける。たとえば理論や特に実用的な研究を分子研の設備を利用して行う等の宣伝を行う。

博士研究員，学生，客員研究員の数も付加的な特典(給与，住宅，日本語研修コース，複数の国の文化的環境，等々)を与える事によって増やす事ができるであろう。

フランスにおいて適切と思われている技術支援者の数は一人の専任教官につきおおよそ一人である。この技術支援者は実際に研究者の技術支援をするのであって自律的な研究を行うわけではない。もし予算が許すなら，このような技術支援者の数を増やしたほうが良いように思う。

(4)研究系の組織

私の会見した分子集団研究系の研究グループおよび関連する研究グループの助手，技官，大学院生の研究スタッフの数は小さすぎ，（平均しておよそ3名である）研究活動に必要な最低限の人数が確保されていない場合がある。

また助手がグループリーダーとは独立に研究を行っているために力が分散されてしまう場合があるように思える。（このことはもっと長期間滞在し，この直感が正しいかどうかを確かめる必要があるであろうが。）したがって，前項で強調したように利用できるマンパワーに比べて研究課題があまりにも多すぎる。この問題は，国内，国外との大規模な共同研究のネットワークによってある程度補われている。分子集団系内および他研究系との共同研究は満足すべきものではあるが，もっと促進されてよい。

いずれにせよ，この状況を改善するためには2，3の選択肢があげられる。

－研究者数を増やす。

－研究課題の再編による集中化と分子研内部での共同研究を促進する事によってもっと研究課題を減らす。

－所内において優先度の高い研究プロジェクトを設け，それに対して特別の支援と予算措置を行う。

分子研のような研究所には「研究施設」はなくてはならない。しかし，研究グループと研究施設の目指すところは基本的に異なるはずである。この違いが分子研においてはっきりと認識されているとは思えない。「研究施設」の別名は「サービスラボ」であり，これら「サービスラボ」の職員は研究グループを支援することが想定されているはずである。研究者は決まりきった作業（分光学的な技術，X線回折，その他）に時間を割くべきではなく，それらの作業は研究者の要求に応じて，これら「サービスラボ」の職員によってなされるべきである。一方，「サービスラボ」の職員は装置の性能や仕様の向上のための研究を除いて独立した研究を行う事を想定されていないはずである。もしこれらの職員が研究グループから独立していれば，この「サービスラボ」の職員数を増やす事を勧めたい。彼等の管理は研究とは独立に自律的に行われるべきであり，彼等が行うべき業務がきちんと実行されるように分子研全体としての管理がなされるべきである。その様な場合，制度上許されるならば，この「サービスラボ」の職員の資質，肩書き（給与）は研究者と同程度の高さをもつであろう。

4-3-5　極端紫外光科学研究系

UVSOR光源は現時点では世界的にみて，2－3流であり，専任スタッフも限られていることから，新しい放射光利用研究の推進は非常に苦しい闘いを余儀なくされている。

UVSORが世界で生き残るためには，その特長を活かした研究を重点的に推進することが肝要であろう。UVSORのユニークなところは，

(1)世界で唯一の分子科学研究を中心にした放射光施設であること。

(2)分子科学研究の為の人的，装置的リソースがすぐ側にあること。

したがって，ケミストが得意とする，様々な分子（毒性，爆発性などを含む）の電子状態，分子構造，化学反応を対象とするスペクトロスコピー。特に，物質合成部門と連携して，新物質の物性評価を行うことは，有効であろう。

既に端緒が開かれているが，研究所のレーザー専門家との共同研究として，レーザー・放射光の同期励起現象の挑戦は注目に値する。

放射光を用いた光化学反応研究もあまり他の施設で重点的に行われていない研究分野であり，UVSOR の人的リソースを活かした利用分野と思われる。

しかし，第 3 世代の放射光施設が次々に建設されている現在，分子科学研究の最先端の研究をする上で，現在の UVSOR は不十分であることは明らかである。もちろん，大改造して第 3 世代化する事も一つの選択であるが，我が国で建設中，あるいは計画中の第 3 世代リングに分子研の分室を設けて，専用ビームラインをもって研究をする事の方がより現実的で時宜を得た方法であるように思われる。そして，それらの経験を基にして，新しい将来計画を作り出すことが次の重要な課題となるであろう。

（国内所外委員Ａ）

分子研の極端紫外光科学研究系を構成するメンバーは，この分野においてきわめてサーキュレーションがよく評価の高いジャーナルに多くの原著論文を発表するとともに，対応する国内外の研究集会においても多くの興味深い報告を行っている。これらを反映して，同系における研究成果に対するこの分野での評価はかなり高いということができる。しかし，ここではこのようなポジティブな面の内容の詳細を指摘するのでなく分子研のこの分野はさらに今後こうあって欲しい，あるいはこうあるべきではないかという観点から，以下にコメントを大局的なものから具体的なものに至るまで示すことにする。

分子科学のこの分野における国内外の研究の現状を分子研のそれと比較すると，いわゆる研究環境については分子研の場合他に類例が極めて少ないといえる程に良好な状態にあると言える。これは分子研について分野によらず一般的にもよく言われることであるが，ここで対象となっている極端紫外光科学においても当てはまる。このことを踏まえてまず言えることは，その研究成果が他の国内外の研究グループではなし得ず分子研だからこそなし得たものであるというように，格段により高レベルの独創性のある成果が期待できないものだろうか。そのためには，今まで以上に国内外他グループとの実質的に深い研究上の交流が行われることは言うまでもなく，さらにアクティビティーの高い国内外の若い共同研究者（博士研究員，大学院学生等）の参画が必要と考えられる。所内の他の系（理論，実験共に）との交流ももっと盛んに行われるべきであろう。

研究の具体的な内容に対するコメントは次のとおりである。

1) 放射光（SR）の利用がかなり一般化しつつある昨今において，極端紫外光科学のより一層の発展のために重要と思われることは，光と分子の相互作用に関する科学という基本に立って，何がより明らかにされており，何がまだ明らかにされていないかという問題に立ち返ってみることと思われる。そうすることによって，極端紫外光領域の分子科学における重要性があらためて浮彫りにされ，新しい具体的な研究の展望が開かれることが期待されると思われる。
2) 極端紫外光科学における実験方法，実験技術，実験装置について，できれば大規模なもの，逆にどんなに小規模なものでも，これは分子研で創案されたものであるというものを次々と出して欲しい。
3) 分子のいろいろな特徴を端的に反映した極端紫外領域における分子科学の研究が展開され始めているが，実験

装置面でのオリジナリティーを追求することと同じ位あるいはそれ以上に重要なことと思う。

4) 放射光（SR）とレーザーの組合わせについては，新しいプロジェクトが最近スタートしているが，そのきっかけはすでに数年以上も前にあったと思われるので，むしろ遅すぎた感が強い。電子線衝撃（放電も含む）との組合わせも行われてもよいだろう。

5) 極端紫外領域のアンジュレーター光（国内外共に，より短波長領域のものが大部分）による高分解能分光とそれに基づいたダイナミックスの研究も早く着手されるべきでしょう。

6) SR光の極端パルス化を早く実現して，それを生かした実験を行いたいものである。

（国内所外委員Ｂ）

Evaluation Report of the Department of Vacuum UV Photosciences

Institute for Molecular Sciences, Okazaki, Japan

The interviews and various visits were organized by Professor T. Urisu, Director of the Department. Professor N. Kosugi, member of the Department and Director of the UVSOR facility and three associate professors being UVSOR staff members, H. Hama, M. Kamada, T. Kinoshita were interviewed. Similarly, I met Professor T. Ibuki and three associate Professors of the Department, K. Mitsuke, T. Tahara, H. Hosono for the present evaluation task. However, the activities of UVSOR external users of IMS were not considered.

General evaluation

The general standard of the scientific results is very good, considering the number and quality of publications in high standard international journals. The international; reputation is also good considering the significant number of invited persons in the past three years, namely Pr. N. Kosugi, Pr. T. Urisu, Pr. H. Hama and Pr. M. Kamada in national and international conferences. The organization of «OKAZAKI conference», symposia, workshops and user's meetings at IMS participates positively to the reputation of their organizers and of the Department. I wish also to stress that international collaboration projects with well established groups in Japan or in foreign countries, contribute also to build up the reputation of the Department. The successful joint projects of Pr. Kosugi, who has led to an impressive scientific production, is quite demonstrative. Finally it is clear that the talent of scientists, recently arrived at IMS, will certainly gain an international recognition in due time.

The scientific policy to develop new fields in molecular sciences both in the gas and condensed phases, that has been introduced in the Department is generally valuable and very often ambitious. Three complementary aspects appeared to me. One is the very important investment in instrumental development on the UVSOR machine, insertion devices, beam lines, and monochro-mators for significant improvement of performances in the UV, VUV and soft X-ray range. Among others, I wish to emphasize the success of the operation of the free electron laser (FEL) in the UV with a tunability in down to 239 nm, which is the world record today, and the perfect synchronization of VUV synchrotron radiation and a UV mode locked laser for pump-probe experiments. Another aspect is the development of new experimental stations around UVSOR as well as in laboratory experiments (ultra-fast lasers, inverse photo-emission). This program has produced numerous valuable and promising results (more details can be found in the confidential part of my report) within a short time. The third aspect is the strategy of research associating basic molecular sciences in view of applications either in the search of conductive insulator oxides produced by ion implantation and of advanced photochemical processes using SR. This is one of the original area of research with SR that originated at IMS.

Recommendations

My first recommendation is first to strengthen the orientations chosen by the department, namely «Molecular spectroscopy and dynamics in the UV and soft X-ray range», «SR induced surface photo-chemistry and applications to new processes» «Spectroscopy and imaging of adsorbates on surfaces» «Optical properties of new materials», «Primary processes of photochemical reactions». This goal could be achieved by increasing the scientific life in the department for example on the basis of series of seminars (formal or informal), collaborations with more theoreticians, more interactions with external users of UVSOR and other IMS departments. It is a chance to find in the same location several scientists with different backgrounds. They should interact more and take advantage of their different culture.

My other recommendations are :

- Continue to develop a large variety of pump-probe *in situ* experiments. This includes for example, SR/laser combination (synchronized or not), SR/Laboratory probes or FEL/laser (see below) as well as SR/IRAS, SR/STM, SR/UPS or XPS etc..... Discussions should be conducted to examine, especially for condensed matter or material science studies, other ideas for structural probes such as (soft) X-ray absorption, (far) IR spectroscopy with laboratory lasers and FEL etc....
- Promote the development of the UV-Free electron laser and the machine development. This action should be accompanied by reinforcing the technical staff in the machine group which is in charge of both the development and maintenance of UVSOR, insertions devices and FEL. This is the << heart >> of the facility to assure to the users the best Photon source. The present number of technicians and engineers is quite inferior by far compared to most facilities in the world. It should be increased, independently of the number of beam lines or users.
- Encourage the use of FEL in a one photon mode and two photon mode in combination with SR, which is naturally synchronized, or with laboratory lasers. This means for simultaneous use of FEL with SR that efforts should be made to operate the FEL at the nominal energy of the machine, with a reasonable current and high stability. Explore also the same SR/FEL combination at lower particle energy.

These recommendations are possible only by securing the existence of a SR machine with one or more FELs at IMS despite the context of flourishing projects of new synchrotron radiation sources in Japan. The location of this facility within the Institute of Molecular Sciences, i.e. with a collection of prestigious groups and (active and potential) users is certainly a strong advantage, because it is known to be a very stimulating place to generate new ideas in molecular and also material sciences. The success of many other facilities in the world is recognized to be closely linked to the presence in the immediate area of a strong scientific community. For UVSOR or the following machine, the existing collaboration with neighboring universities or institutions are part of this advantage.

Several projects of different importance and schedule were presented to me : one is the UVSOR II new machine with short pulses and UV-FELs, another is a new high energy soft X-ray beam line to be installed on the TOKYO 3rd generation machine (not yet approved), others are the use of several beam lines in the soft-X-ray range of the Photon Factory (being upgraded in 1 997), the possible use of a soft-X-ray beam line at SPR1NG8 on a collaborative basis, and of the future SUBARU machine (approved) on the SPR1NG8 site. It seems to me that IMS should preserve at OKASAKI the existence of a SR facility mainly for the reasons mentioned above. But the project should be *quite original or specialized* compared to other existing machines or those in project in Japan, and should be supported by a *larger community* than the present one, perhaps beyond the Department of UV photo-sciences at IMS, to produce a strong scientific case. Therefore, I recommend to

- elaborate a project along the lines of UVSOR II, i.e. including the UV FEL but with more ambition on the existence of additional coherent and pulsed IR and far IR FELs sources (LINAC FELs?). Extensive « many sources » for multi-color experiments, should be offered to the users in molecular and material sciences in the near future. Along this line, the growing needs for *in situ* studies combining (but not necessarily synchronizing) X-rays with other spectroscopies, imply that the existence of one wiggler and a conventional X-ray line on UVSOR II, without increasing the nominal energy of the particles. If synchronization of SR with lasers are being developed for time resolved pump-probe experiments, the operation of the machine with a small number of bunches should be optimized. These points could be discussed in connection with the «Center of Laser Research and Development » or other projects associated to material sciences being developed at IMS.
- Preserve access to at least one third generation machine in Japan for molecular sciences especially from IMS research. High spectral resolution, tight focusing, flexible polarization, offered by high brillance machines are certainly necessary to a number of very advanced experiments which could not be performed at the present UVSOR facility, and Perhaps in the future at UVSOR II. Finally, I encourage the groups leaders to preserve internationalization of the research by keeping a «visiting scientist» program, and collaborations with foreign SR facilities.

Irene Nenner

15 November 1996

前記英文の和訳

極端紫外光科学研究系の点検評価レポート

本評価と訪問の計画は，研究系主幹の宇理須教授により進められた。研究系のメンバーであり，UVSOR 施設長でもある小杉教授，UVSOR スタッフである濱，鎌田，木下の 3 名の助教授，および，研究系の伊吹教授と見附，田原，細野の 3 名の助教授が今回の評価の対象である。しかし，UVSOR 外部ユーザの研究活動は，今回の評価では考慮されていない。

一般的評価

高い水準の国際誌での発表の質と量から，科学的成果の一般的水準は大変高いと評価できる。小杉教授，宇理須教授，濱助教授，鎌田助教授の国内および国際会議における過去 3 年の招待講演の顕著なことから，国際的評価もまた高い。分子研での岡崎コンファレンス，シンポジウム，ワークショップ，および，ユーザーズミーティングは，研究系および，担当者の評価を高める働きをしている。私はまた，国内外の高い評価を得ているグループとの国際的共同研究プロジェクトが研究系の評価を高めていることを強調したい。素晴らしい科学的成果を得ている小杉教授の国際共同プロジェクトはそれを立証している。最後に，最近採用された研究者の才能は，間違いなく近いうちに，その国際的評価を得ることと思われる。

研究系において採択されている，気相および凝集相の両方における分子科学での新分野を開拓する科学的方策は一般的に価値が高く，且つ，野心的なものが非常に多い。三つの相補的な側面に気づいた。一つは，UV，VUV，および軟 X 線領域における大きな性能向上のための，UVSOR 加速器，挿入光源，ビームライン，および分光器への大変重

要な装置開発的投資。これらのうち，今日世界記録である，239nm までの波長可変を達成した UV 領域の自由電子レーザ（FEL）発振の成功，および，ポンププローブ実験のための VUV 放射光と UV モードロックレーザの完全な同期の成功を特に強調したい。二つ目としては，実験室装置（超高速レーザおよび逆光電子分光など）を含む UVSOR 周辺の新しい実験装置の開発である。これらの計画は，短期間のうちに多くの価値ある素晴らしい結果を生み出した。第三の側面は，イオンインプランテーションにより作られる導電性酸化物や放射光（SR）を用いた高度光化学プロセスの応用科学に基礎的な分子科学を関連させる研究戦略である。SR プロセスについては，分子研で創出された SR を利用する研究の独創的分野の一つである。

勧　告

私は先ず，研究系によって選択された方針を強化することを勧める。即ち，《UV，および，軟X線領域における分子分光とダイナミックス》，》《SR 誘起表面光化学と新プロセスへの応用》，《表面吸着種の分光とイメージング》，《新材料の光化学特性》，《光化学反応の初期過程》である。このゴールは，例えば，一連のセミナー，より多くの理論家との共同研究，UVSOR 外部ユーザや，分子研の研究系とのより一層の交流をもとにして，その科学的な寿命をのばすことによって達成されるであろう。同一の場所で，異なったバックグラウンドの色々な科学者と会えるのは素晴らしい。もっと相互作用しあい，異なった文化を有効に利用しあうべきである。

その他の勧告を以下に示す。

- 多様なポンプープローブのその場観察実験の開発を継続せよ。これは，例えば，SR/レーザの結合（同期，非同期），SR/実験室プローブ，又は FEL/レーザ（以下を見よ），同様に，SR/IRAS，SR/STM，SR/UPS，XPS。特に，凝集物質または材料科学研究のため，（軟）X 線吸収，実験室レーザ，および FEL による（遠）赤外分光等々の構造を研究する方法について検討するために，議論がなされるべきである。
- UV 自由電子レーザ，および光源加速器の開発を推進せよ。このことには，UVSOR 加速器，挿入光源および，FEL の開発と保守の両方を任務とするマシングループにおける技術スタッフの強化が伴われるべきである。この点は，ユーザに最善の光源を保証するための施設の心臓である。現在の UVSOR の技官と技術研究者の数は，世界のほとんどの施設と比較してはるかに劣ったものである。
- 同期した SR，あるいは実験室レーザと結合した 1 光子または，2 光子モードでの FEL の利用を推奨せよ。FEL と SR の同期利用に対しては，これは FEL を，装置の通常のエネルギーで動作する努力が必要である。また，より低いリングエネルギーでの同様な SR/FEL 結合実験を探索せよ。

  現在，日本において新しい放射光光源のプロジェクトが華やかであるが，これらの勧告は，一つもしくはそれ以上の FEL を有する SR 装置を，分子研内に確保することによってのみ可能である。この施設を分子科学研究所，即ち著名なグループや（活発，あるいは潜在的な）ユーザの集団とともに所有することは，間違いなく大きな利点である。分子科学研究所は，分子および材料科学において，新しい考えを生み出す刺激的な場所として知られているからである。世界における他の多くの施設の成功は，実力のある科学者集団のすぐそばに存在することと密接に関連していると認識されている。UVSOR，または次期計画の設備に対して，隣接する大学や研究所との間でなされている協力関係もこの有利な点の一つである。

  異なった重要度と年次計画で進行しているプロジェクトが，私に示された。一つは短パルスと UV-FEL を持った UVSOR II 次期計画であり，もう一つは，東京大学第 3 世代装置（まだ承認されていない）に設置される予定の新

しい高エネルギー軟X線ビームラインである。それ以外にも，フォトンファクトリ（1997年にアップグレードが予定）の軟X線におけるいくつかのビームラインの利用，共同研究ベースでのSPRING8での軟X線ビームラインや，SPRING8サイトでの将来のニュースバル装置（承認済み）の利用などである。私には分子研は主として上に述べた理由から，SR施設を岡崎に独自に保有し続けるべきであると考える。ただし，そのプロジェクトは，他の既存の施設や計画中の施設と全く独創的な的を絞った物であるべきである。そして，その計画は，強力な研究環境をつくりだすために，おそらく極端紫外光科学研究系を越えた，現在よりもより大きな研究者集団によって支持されるべきである。従って，私は次のように勧告する。

- UVSOR II計画の線に沿った，即ちUV/FELばかりでなく，さらに意欲的にコヒーレントなパルス赤外および遠赤外（LINAC FEL？）をも含む光源の計画を作る努力をすること。
- 分子科学および材料科学のために，広く多色実験を行うために《多様な光源》が近い将来提供されるべきである。この線に沿って考えると，X線と他の分光手段とを結合した（かならずしも同期を伴うわけではない）その場観察の研究に対する要望が増大している現在，UVSOR IIリングにウィグラーを使った通常のX線ビームラインを一本，リングエネルギーを上げることなく設置することが必要である。もし，SRとレーザの同期が時間分解ポンプ－プローブ実験のために開発されつつあるならば，バンチ数を減らしたモードに対して加速器を最適化して運転することが必要である。これらの点は，現在分子研で議論されている，分子制御レーザ開発センターや分子物質開発研究センターと関連づけて議論されるべきである。
- 分子科学の研究，特に分子研としての研究のために，国内において，少なくとも一つの第三世代装置の利用を確保すること。高輝度光源によって提供される高いスペクトル分解能，高い集光性，偏光可変性は，現在のUVSOR施設，そしておそらく将来のUVSOR IIにおいても出来ないであろう，たくさんの非常に先端的な実験にとって間違いなく必要である。

最後に，外国人招聘研究員のプログラムや，外国のSR施設との共同研究を維持することにより，研究の国際化を続けることをグループリーダーに奨励する。

イレーヌ　ネンナー

1996年11月15日

4-3-6　相関領域研究系及び錯体化学実験施設

はじめに

総括的な観点から大学における科学研究を眺めた場合，日本を取り巻く諸般の理由から大学は21世紀に向けて自己改革を追られ，各大学がその対応に苦慮している。さらに，第二次世界大戦後，半世紀経過したわが国の大学の教育・研究体制のありかたについて論議が重ねられている。抜本的な改革を行わない限り，国際的にも孤立し学術研究の活力を減ずることは必至である。組織を改革するためには，組織の構成メンバーの抜本的な意識変革とともに，改組に伴う必要な予算措置を講じなければならない。すでに，多くの大学は将来のありかたを模索しながら改組等をくり返しているが，決して満足すべき解答を得ていないのが現状であろう。

さて，国立研究諸機関は関係する研究分野をもつ大学とは無縁であり得ないのは自明の理である。特に，学部・大学院の教育と研究の両面について責任をもつ大学と異なり，国立研究所では研究を専念業務とし，教育に関する負担は少ない。それだけに，高度の研究者集団を中心とする組織は大学の研究組織よりもより機能的かつ流動的な要素が

要求される。分子科学研究所が独自性を維持し，将来さらに発展するために，外部からいくつか指摘させていただく。

(1) 研究体制について

現在，大学では後期博士課程の大学院学生に対して講義は殆ど行われていない。多くの場合，博士論文のための研究に専念しており，ときには学部学生の指導に関係したりするが，その処遇については欧米先進諸国と異なるところが多い。（現在の TA のシステムは定着し，欧米諸国のレベルに達していない。）経済的には学術振興会の特別研究生として援助したり，優秀な学生には学位取得における飛び級などでカバーされている。このような現状では，分子研を希望する学生が多く存在しても不思議ではない。さて，将来の日本の科学研究の中軸となる博士課程に進学する大学院学生の充足率は低い。修士課程を修了した多くの優秀な学生が民間企業に就職を希望する現実がある。（その理由は省略するが）もし日本の博士課程の大学院生にたいする優れた教育政策が策定され，その効果的な実施が可能となれば，大学から優秀な学生が積極的に分子研を希望するだろうか？ 大学で起こっている問題と分離して分子研は独自の将来の展望を呈示し得るのだろうか？

高度の科学研究が期待されている分子研の研究の中心は博士研究員であるべきと考えられる。ただし，この問題は博士の学位取得後，海外の大学へ博士研究員を希望するもの，期限つきであれば，将来の生活を考慮するために民間企業の研究所を望むものと競合する。博士研究員を吸収する社会の枠のなかで，分子研として特色のあるポジションを提示することが肝要であろう。規制緩和の一つとして，共同利用以外に，大学の助手クラスの優秀な研究者が大学院生とともに分子研で短期間研究可能な場所と機会を提供し，分子研から魅力的な情報が大学院生に直接伝わることが望まれる。単に研究所外から共同研究のための試料を提供することも必要であろうが，実際に試料がつくられる実験を理解し，随時その場で研究討議がなされることが望ましい。分子研の複数の研究者と研究について議論することも研究所と大学両者の活性化に貢献する可能性がある。

流動部門について，現在の方式が理想的なのか？ これまで拝見した状態では，その成果がよく見えてこない。これも規制緩和の方向で，新しい方策を検討する時期であろうと思われるが？ 国内外の研究者の交流を重んじるならば，現行法に拘束されないで，それに代わる新しい運営法により分子研をさらに活性化し得るのではなかろうか。

ドイツでは，有名大学の教授の席を拒否してもマックス・プランク研究所で研究を継続することを望む研究者がいる。（もっとも大学自身に問題があるから，このようなことが起こり，一般的とはいえないと思われる。）また，同研究所の規模と研究の分野の広さは人事交流には有利に働き，大学との交流を円滑に行い得る可能性が高い。大学および国立研究所の組織について柔らかい構造が望まれる。

(2) 評価方法について

国立研究機関の評価の中心は研究活動とそのレベルが対象となるだろう。具体的に評価の対象は論文であり，量と質が問われるのは，大学と変わらない。さて，論文の生産量はスタッフと大学院生に比例するとすれば，大学が有利とされ，教育等に割くことの時間を考えると，研究所が有利と考えられている。大学の研究室の組織も多様であり，大講座制，小講座制，またその中間的なものもあり，大学についても一様に論ずることは危険である。これまで多くの研究者が分子研から外部に転出した事実は，当然研究者の資質が優秀であることを証明している。一方，研究所の若い研究者は大学におけるような雑事は少ないために研究に専念し得るので，同一のレベルで比較することは困難であるが，外部へ転出する場合に優位と判断されるのが一般的な見方である。したがっ

て，国立研究機関に対しては，論文も含めて相対的な評価よりも絶対的な評価が要求されるであろう。また，論文の発表件数は一つの評価のパラメーターとなり得るが，研究分野により異なることは周知の事実であり，それぞれの分野の評価基準によらざるを得ない。本研究所では，海外の権威のある研究者の中から評価委員を依頼されているのは，評価の客観性を高める意味で重要で，予算の枠があれば，各分野について複数の評価委員に依頼することが望ましい。

(3) 相関・錯体化学分野の評価，その他

相関領域・錯体化学分野の発展については，過去の評価委員会の報告に記載されているので，ここで繰り返す必要はないと考えられる。両分野の研究室は世代交代が終わり，新しいメンバーで研究が推進されており，新しい研究室の立ち上げと，研究成果が得られるまで数年を要するために，現時点で研究の評価をすることは無意味である。むしろ，これからどのようなアイデアをもって研究標的を決めてゆくのか，この領域では将来何が重要な研究なのか，基本的な問題を認識しながら研究を進めることが要求される。

学際的な研究が必要ではあるが，この言葉を利用する科学者が多いのも現実である。化学から見てその周辺にある学問領域から研究テーマを選んだとしても，異なる領域にフィードバックし得る研究成果が必要であり，化学から見て新しい考え方，新しい概念を引き出せなければ，研究におけるひとつのポーズと看做される。新しい領域が市民権を得るためには，猛烈な試練と自然淘汰が待ち構えていることを想起する必要があろう。理想的には，分子研にはそのような研究室が存在し，日本の化学をリードする研究集団が中枢を占める組織であることを念じたい。

分子研の創設以来20年が経過したが，知る限りのところでは，錯体化学研究所の設立を考慮された時期があったことは事実である。また，非常に努力されたが，実現されないままに時間が経過し，設立に関する問題は風化しつつあるように思える。では，何故これまでに錯体化学研究所の設立が困難を極めており，依然としてその可能性について模索を継続されているのか？これに関しては，過去の経過について徹底的な解析と問題点を整理しておく必要がある。大学の学部で分類されている研究分野と研究者に執着することなく，分野間の壁を外して考え直さなければ，可能性は極めて遠くになることを覚悟すべきであろう。設立への積極的な姿勢と次の時代に対する先見性がなければ，多くの科学者の支援と理解が得られない。先進国諸国ではこのような例があるとか，現在このような研究が盛んであるとか，ではなくて，これから錯体化学の進むべき方向を明確に提示すべきである。研究所が若い研究者にとって，居心地のいいサロンを提供するのではなく，将来ノーベル賞受賞者を輩出するような研究環境を具備されんことを期待したい。

（国内所外委員A）

分子科学研究所錯体化学実験施設について

1. 現在の分子科学研究所錯体化学実験施設は創設期の困難を乗り越え，気鋭の研究者をそろえて発展期に入りつつあるとの印象が強い。分子研の存在がわが国の化学研究に大きなインパクトを与え続けてきたのに対して，本実験施設は錯体化学研究所設立に向けてわが国の錯体化学者が志を同じくして集まる一つの道場の働きをしてきたように思われる。この吸引力はその成否は別として本施設の存在意義の一つとして十分理解しうるものであった。また分子研が国内外の研究者の研究交流の場として特に若手研究者に強い刺激を与え，その成長を促す役割を果してきたのと同様に，本施設で研究に従事する機会を与えられ，大きく成長していった学生，研究者が数多いことも極め

て意義深いことである。

2. 大学と研究所とでは様々な条件が異なり，それぞれ固有の社会的責務を有する。研究の遂行という観点からは研究所は目標の設定とその達成を最も効果的に行うことが求められ，いずれも高いレベルが期待される。文部省直轄研の場合にはそのための特別の予算措置等がなされるのは当然であり，COE として存在するにふさわしい人的物的環境が維持発展させられるべきである。

大学は高等教育と研究の場としての役割を果すことが求められ，学生の受入れと高等教育は社会に対する責任である。一方では，独立した創造的研究者養成にふさわしい先端的研究の場であることも不可欠である。時代の進歩と社会の要請の変遷に対応するために，多くの大学において遅ればせながら学部改革，大学院重点化がなされつつあり，このような改革により高度な教育と新分野の研究を目指して生まれ変わろうとしている。大学院最先端設備費，研究基盤重点整備費，高度化推進特別経費等の予算措置により設備面での充実は１０年前に比べれば格段の差がある。ただし，現実には研究者の意識改革も必要であり，施設の改善には今後数十年の歳月を要するなど厳しい問題も多い。しかしながら，大学の充実により，巨大科学は別として，単なる設備の違いだけの研究所では存続し得ない時代になっており，次世代の研究所および本施設をどのように方向づけるかが問われるところである。

3. 本実験施設において小分子，生体関連分子，超分子など，分子の大きさ，組成の複雑さのバラエティに富む系が研究対象とされるようになり，錯体化学と生体関連化学などが総合的に活用されていることは評価される。現代の研究の流れはより複雑な機能性分子系の創造に向けられており，若い研究者を引きつけるためには化学－生物学間の領域を追究し，むしろ生物領域に入り込んでいくことが必要であろう。生物学が化学を言語にしつつある時代である。タンパク質，核酸，複数成分からなる多元反応系，その他生体反応系ユニットの研究を化学者が行うべきであり，とくに錯体化学者の貢献度は大である。今後，研究対象としての物質の概念と分子の世界を拡げることが必要で，研究所設立を目指すならばこの方向のプロジェクトを掲げるべきではないか。錯体化学研究所というような一般的概念の研究所は説得力がなく，目的志向の強いものであることが必要であると思う。このことは本施設の活動のあり方についても言えることであり，いかなる目標に向って研究を遂行しているかを明確に示すことがアイデンティティの確立に最も有効である。

4. 研究体制から見て本施設が必要十分であるとは言えない。明らかに人手不足であろう。しかし，組織としての定員増は困難であることから，PD の採用あるいは大学院生の受入れにより実験面を強化することを考えることは必要である。流動部門は一定期間好条件で研究に専念できるという点で，とくに若手研究者にメリットが大きいと思う。しかし，純増は勿論のこと定員確保も容易でない大学にとって，流動部門に定員を拠出することは常に困難を伴う。大学改革により教育面での負担が増大しつつある現状では定員を拠出した大学に対する支援が配慮されるべきであり，さもなくば大学の協力を得ることは益々困難となろう。流動部門のあり方も含めて本施設の研究体制を考える時期にあるように思われる。

（国内所外委員Ｂ）

Open Report on the Visit to the
Coordination Chemistry Laboratories
of the Institute for Molecular Science (IMS) at Okazaki

Visitor: Professor H. D. Kaesz, University of California, Los Angeles
Dates: 2-4 November 1966

Interviews were conducted with the Director of the Coordination Chemistry Laboratories, Prof. Koji Tanaka, two members of the research staff, Profs. Mitsuhiko Shionoya, and Yoshito Watanabe, and two visiting associates, Profs. Masaaki Haga and Takeshi Sakurai. The Confidential Portion of this report contains detailed comments about the individual programs reviewed.

A rather dramatic change in the staff of the Coordination Chemistry Laboratories was encountered following my visit three years ago. At that time greater emphasis in the frontier areas of bio-inorganic chemistry was advised and this has been admirably fulfilled in the new appointments.

The international reputation of the work of the Coordination Chemistry Laboratories at IMS is evident in the Journals of high standing in which it has been accepted. Further evidence is seen in the membership of Prof. Koji Tanaka on the organizing committees of a number of international Symposia and on the Editorial Boards of several well-recognized scientific journals.

The question of the relationship of the research of the Coordination Chemistry Laboratories to the general goal of the IMS was addressed in each of the interviews. In most cases, the opportunity to make use of special facilities for research not generally available at Japanese Universities was cited. Additionally, the opportunity to start an independent program of research at a much earlier time than would be possible for younger investigators in the usual academic environment was cited as an advantage of affiliating with the IMS.

However, personnel resources at the Coordination Chemistry Laboratories are limited. In order to maintain chemical research at a competitive level, somewhat lager groups should be provided to the chemists than may traditionally be the case for physics or physical chemistry.

前記英文の和駅

相関・錯体施設の評価

相関・錯体施設の評価のため，錯体化学実験施設長・田中晃二教授，二人の専任教官・塩谷光彦教授と渡辺芳人教授ならびに二人の流動教官・芳賀正明教授と櫻井武助教授に対して面接を行った。各個人の詳細な評価は，この報告書の “Confidential” の部分に記載してある。

私が 3 年前に訪問した後に，錯体化学実験施設では人事面で非常に大きな変革がなされた。当時，生物無機化学の境界領域での研究を強く助言していたが，新しい人事により見事にその分野の研究が活発に行われているようになった。

分子科学研究所・錯体化学実験施設の国際的評価は，彼らの発表している雑誌のレベルの高さから明らかである。また，田中晃二教授が幾つかの国際会議の組織委員と著名な雑誌の審査委員をしていることからも理解される。

分子科学研究所としての研究目標と相関・錯体系での研究の問題点に関しては，個々のレポートに記載した。分子

研に採用される研究者の大きなメリットに関しては，多くの場合，日本の大学では使用が困難な研究施設が利用可能なことと，大学に比べてかなり若い研究者が独立して研究出来ることがあげられている。

しかしながら，相関・錯体系での人的資源はかなり制限を受けている。これらの分野において一般的な競争に耐えうる研究のレベルを保つためには，物理または物理化学の分野よりも，もっと大きな研究グループを作り上げることが必要である。

5．将来計画

5．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 7 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 年度に実施した 5 研究施設についての同様な外部評価（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及び 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，機器センター，極低温センター，化学試験室の 3 つの研究施設を再編，統合し，研究系とのより緊密な連帯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。1995 年度は 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に向けての成案づくりに取り組み，その詳細を"分子研リポート'95" に報告した。その結果前述したように，1997 年 4 月より 2 つの開発研究センターが発足することになった。

分子科学研究所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の将来計画については，前記の 1994 年度の施設の点検評価にひきつづき，1995 年度，1996 年度と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でいるものである。本章には，この電子計算機センターと極端紫外光実験施設の将来計画について現在までの審議状況を中間報告として掲載する。

5-1　電子計算機センターの将来計画

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，1994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，薮下　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。さらに，1996年5月には「次期スーパーコンピュータ検討委員会」においても検討を加え，10月には，将来構想委員会との合同委員会が開かれ，次機種の構成と必要な計算機資源等についても突っ込んだ論議が行われた。「検討委員会」には，所内からは，岩田，青柳，岡本に加え，平田文男教授が，所外からは，古賀伸明（名古屋大学）助教授，志田典弘（名古屋工業大学）講師，橋本健朗（都立大）助教授が加わった。

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。30年経過後の1996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。

特に90年代の後半に入って，計算化学，計算物理の役割に質的転換が起きたと言えるほどである。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共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，かつ計算機の高度な利用を支援する体制を常に用意していく必要がある。

5-1-1　現有計算機の構成と利用状況

平成8年11月現在の利用者の総計は約680名，研究課題は184件である。電子計算機センターの計算機システムには，平成6年1月にスーパーコンピュータ NEC SX-3 が，平成7年1月に並列計算機 IBM SP2 と高速汎用計算機 NEC HSP が導入された。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。また，平成8年9月より高速汎用システムの演算能力を増強する目的で NEC HPC を導入し公開運用を行っている。

平成6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。

計算機センターの利用者は大別すると4つに分類される。

グループA：分子研理論部門（センター含む）。

グループB：所外の大きな理論グループ。

グループC：所外の小さな（一人ないし三人程度の若い）理論グループ。

グループD：実験を主体とする研究グループ。

平成7年度におけるそれぞれのグループが計算機を利用した割合（%）はおおよそ，A（33），B（46），C（8），D（13）になる。

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。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。

分散メモリ型並列計算機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40MB/秒以上の高速度で互いに通信を行うことができ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できる。SP2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2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。また平成8年10月からは10台の日立H9000/735から構成されるWSクラスタを，並列演算処理が可能な量子化学計算プログラムであるGaussian94-Lindaの専用機として公開運用している。

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完する重要な役割を果たしている。さらに平成8年9月より高速汎用システムの演算能力を増強する目的でNEC HPCを導入した。1GBの主記憶と2GBの拡張記憶装置を有し，HSPと同様中規模なベクトルジョブの処理に利用されている。

分子研計算機センターのCPUサーバーとしての能力は平成6年1月にはそれまでのおよそ9倍，平成7年1月には平成6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平成8年11月の平均でもその全CPU能力の約65%が利用されており，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。

分子研計算機センターは，国の内外において高い評価を得てきた。海外から分子研に共同研究に来る理論研究者の多くは，分子研計算機センターの能力に魅力をいだいている。しかしながら，その期待を満たすことができない事態になりつつある。実際，平成7年9月から10ケ月，客員助教授として理論第一部門に滞在したサンパウロ大学（ブラジル）のF.Ornellas教授は，「分子研レターズ」に参考資料1のような感想を述べている。

5-1-2 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速い。それは単に計算速度が速くなるだけではなく，アーキテクチャーの進歩，OSの変

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 5 GFLOPS 以上の（高価な）計算機，4 GFLOPS 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。さらに，並列計算機では CPU 間を結ぶ通信経路のトポロジーと通信性能の違いによって幾つかの形態がある。

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。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。しかしながら，分子研計算機センターのこの 2，3 年の全般的な傾向から判断すると，小型計算機の普及は，よりチャレンジングな計算の必要性を喚起して，より大規模な計算の要望が高くなることも示している。実際，計算機センターの CPU 稼働率は予想を上回る勢いで増加し，平成 7 年 1 月以降システムは高稼働率を維持し続けている。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昨年度から，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。

上記のように分子研計算機センターの利用者は四つに分類できる。今後のセンターの運営はグループ A と B により一層力点をおいた方針を取ることが望ましい。同時に，グループ C と D の研究者にとって，本センターはその研究遂行上不可欠なものであるのも事実であるので，適切な配慮が必要である。

(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，平成 7 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 4 GB 以上のメモリと 50 GB 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 2 GB と 20 GB)。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競合を回避する高度なソフトウエ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であろう。

現段階ではメモリー分散型並列計算機 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 スイッチ等を用いたスター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も，ベクトル並列型スーパーコンピュータ，共有メモリ型と分散メモリ型の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) 平成 10 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。平成 11 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の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（参考資料 2）。

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, HPC)，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。

平成8年5月と10月には，所内外7名の委員から構成される次期スーパーコンピュータ検討委員会が開催され，平成10年時点でのスーパーコンピュータの性能予想に加えて，センターの主要な計算利用分野である分子動力学と分子軌道計算を例に，近い将来に要求される計算機資源（CPU台数，メモリ構成，ディスク容量等）について活発な議論を行った。ここでは，並列度の高いプログラムへ比較的容易に移行が可能な分子動力学（MD）分野の研究者と大規模な配置間相互作用計算など並列化が困難な分野の研究者からそれぞれ，計算機資源の要求に関し対照的な意見が出された。大規模なMD計算を実行する研究者からは，できるだけ多くのCPUを利用できる並列計算機が必要であり，数百ギガバイト以上の高速な外部磁気ディスクが望まれる等の意見があり，一方，電子状態分野の研究者からは1CPUの演算能力が高いこと，大容量の主記憶と拡張記憶装置を有し外部ディスクの容量も大量に必要となることなどが示された。また共通の要望事項としては，高度な自動並列化機能を持つコンパイラ，並列計算用に最適化された科学演算ライブラリや並列プログラム開発支援ツールを有すること等が指摘された。プログラム言語としては，今後Fortran90が重要となることはもちろん，HPF(High Performance Fortran)，KAP等のプリプロセッサの導入を検討すること，ベクトル並列化に対応できるC++言語を導入することなどが検討された。

平成6年と7年1月の機種更新によって，既述のように平成5年12月以前に比して，おおよそ14倍の処理能力向上を達成できた。平成10年度のスーパーコンピューター更新と11年度の汎用システム更新において，前回以上の飛躍的強化をはからなければならない。分子研計算機センターの利用者の研究分野は，上述のように多岐にわたっている。要求される計算機のタイプ，構成もかならずしも一様ではない。2年にわたる更新を利用して，その多様性も対処しなければならない。

2年間にわたるレンタル更新によって，並列化が困難な計算にも対処できる共有メモリー型のベクトル並列計算機および比較的並列化しやすいシミュレーション計算向けの分散メモリ型の超並列計算機を導入する必要がある。両計算機の導入によって，分子科学理論研究に必要な超大規模計算を可能にしなければならない。1CPU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。しかしながら，プログラムが一度完成すると，ワークステーションでは実行できない質的に違う計算科学が可能になるので，1CPU当たりの速度が速い計算機への期待は大きい。両タイプの計算機の適切な運用によって，中小規模計算を大量に処理できるシステムも構築することも必要である。

これらの期待される増強の実現のためには，スーパーコンピューターのレンタル料の大幅な増額が不可欠である。

計算機の進歩は速く，特に，内外の計算機メーカーの動向について常に最新の情報を取得しておく必要がある。

5-1-3　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，90年代の後半に至り計算的手法の重要性は質的転換を遂げたと言える。21世紀において計算分子科学は一層の発展が期待されている。特に，分子研の理論部門は平成7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，国内外のいくつかの研究グループは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。計算機センターは，研究所内の理論グループに卓越した計算環境を提供していく必要がある。そのためには，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，理論研究系と計算機センターのスタッフが中心となって，たとえば文部省研究基盤重点設備費に「計算分子科学の展開」を要求していくなどの努力も必要である。

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。計算機のハード・ソフトの両面の進歩は速く，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の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。

5-1-4　国際分子科学計算センターとして

分子科学研究所には常時多くの外国人研究者が長期滞在し，共同研究を進めている。なかでも理論部門における外国人長期滞在研究者の割合は高い。インターネットを通じての計算機利用が可能になった今日，これら長期滞在者は帰国後も共同研究が継続されるようになっている。このようなインターネットを通じた国際共同研究の推進も進めていく必要がある。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望ましい。

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は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。

5-1-5　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もう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エ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，理論研究系とセンタースタッフとの強力な連携が必要である。

5-1-6　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。オハイオ州立大学の Shavitt 名誉教授（量子化学発展の立て役者の一人）からは，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ように強い要望がだされている（参考資料 3）。その実現のためには，1) データベース作成・管理・運用のためのハードウエアの整備，2) データーベース作成のための謝金と事務費の確保，3) 版権に関する問題などを解決しなければならない。

5-1-7　情報ネットワークと計算機センター

平成 5 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，平成 7 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。

[参考資料　1]

「分子研レターズ」からの抜粋

Scientifically, we started, I hope, a long standing collaboration. Quite a lot of work was carried out and various papers have already resulted and others are in the process of being completed. However, in various occasions I felt the Computational resources were below my expectations and some projects had to be interrupted.

Ornellas, Fernando Rei

[参考資料　2]

分子科学研究所電子計算機センターに望む

分子科学研究所電子計算機センターには，4 種類のそれぞれ特徴をもった計算機が配備されており，我々の研究グループもこれを大いに利用している。我々は主に振動スペクトルに関係した理論計算を行っているのであるが，対象とする系が大きく，また複雑になるほど，振動スペクトルの解析における理論計算への依存度は高くなる。したがって，計算速度が速く大容量のメモリが使用できるスーパーコンピューターを利用する価値は非常に高い。現在配備されているスーパーコンピューターの計算能力は，非常に高いレベルにあるが，理論計算の対象は今後さらに大きく，複雑なものへ推移し，解析方法もさらに精密化していくと期待される。これは，現実的に有用な分子系のダイナミクスや機能を，ミクロなレベルで理解することにつながり，さらに新奇な物性を有する分子の開発にもつながる。そのためには，分子科学研究所電子計算機センターに，現在以上に高い計算能力を有するスーパーコンピューターが配備されることが切に望まれる。

田隅　三生

埼玉大学理学部

東京大学大学院理学系研究科

[参考資料 3]

QCLDB を World Wide Web 上で公開することを要望する手紙

Professor Ito

Director General of the Institute for Molecular Science

Okazaki, Japan

Dear Professor Ito

I am writing concerning the Quantum Chemistry Literature Data Base (QCLDB), compiled and maintained by a group of Japanese quantum chemists and distributed throughout the world.

The group who have created and are maintaining the QCLDB have done a very important service to the quantum chemistry community worldwide. Unlike general chemisry and physics literature data bases, such as Chemical Abstracts, QCLDB is focused for the needs of quantum chemistry researchers and other chemists who need to find out what theoretical calculations have been carried out on specific molecules and with what results. It is extremely difficult to extract this kind of data from the huge number of entries in more general data bases. The availablity of QCLDB helps avoid unnecessary duplication and wasted effort, and helps the researcher design more useful research plans which build upon the experience of previous work.

Until now QCLDB has been distributed mainly as computer tapes (or other electronic media), with annual updates, to be purchases by research groups and installed on their own computers or workstations. This procedure is cumbersome, and cannot keep up continuously with the rapid developments in quantum chemistry research. With the establishment of the Internet and the World-Wide Web, it is now possible to provide a much more convenient and timely service by making the data base accessible on the Web and keeping it continuously up-to-date. Such a service is bound to become very well-known and popular in the quantum chemistry community and among many other chemistry researchers. With the increasing popularity of quantum chemistry theoretical calculations in many fields of chemical research, including organic and inorganic chemistry, such a service should have a very beneficial impact on further progress in chemistry. I request and urge you to do whatever you can to support the achievement of this kind of service.

Thank you very much for consideration of this matter.

Sincerely,

Isaiah Shavitt
Professor Emeritus
Department of Chemistry
The Ohio State University
Columbus, OH 43210-1185
USA

Telephone: 614-292-1668
Fax: 614-292-1685
E-mail: shavitt@mps.ohio-state.edu

5-2　極端紫外光実験施設の将来計画（中間報告その 2）

施設完成後，10 年を経た平成 6 年度に極端紫外光実験施設（UVSOR）の将来計画について検討を開始し，今年で 3 年目になった。昨年度，将来計画について中間報告を提出したが，計画を具体化するためには，来年度以降も他の放射光施設計画の状況を的確に把握していく必要がある。よって，今年度も昨年度に引続いて中間報告の形でまとめることにした。

以下では，5-2-1 にこれまでの経緯をまとめ，5-2-2 に今年度に開催された委員会等の概要を述べる。また，5-2-3 に第 2 回 UVSOR 将来構想委員会の報告書を添付する。なお，将来構想委員会等の委員会は来年度も開催する予定である。

5-2-1 これまでの経緯

平成 6 年度（分子研リポート'94 を参照のこと）

(1)　平成 6 年度実施の将来計画委員会（第 1 回～第 8 回，委員長　吉原經太郎）

本将来計画委員会の小委員会に位置付けられている研究分野検討小委員会及び UVSOR 検討小委員会で UVSOR 関係の将来計画について具体的な検討が行われたのちに，それらの報告に基づいて本委員会において全体の将来計画が取りまとめられた。

(2)　平成 6 年度実施の研究分野検討小委員会（第 1 回～第 5 回，委員長　中村宏樹）

研究分野検討小委員会の報告の中に「レーザー開発研究センター（仮称）を創設し，関連研究部門と UVSOR 施設との連携を密にする」「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ねばならない」という提言がある。

それに沿う形で，UVSOR が直接関係する研究分野に関連して二つの開発計画案が出された。(i) 現在の UVSOR 光源と組み合わせるためのレーザー開発，(ii) 自由電子レーザーの開発研究（短波長 FEL 利用実験及び FEL・アンジュレータ放射光同期実験のための専用リングの建設）。さらにこれら二つの開発計画を実現するための UVSOR の将来計画として以下の提案がなされた。

(i)　観測系の将来計画

6 つの研究分野において 9 テーマ（各テーマは 3 年間で成果を挙げる）の予算が認められているが，現在，テーマ数の倍以上（20 本）のビームラインを使って，より広くテーマをこなしている。このような実態から判断して，少なくとも研究分野当たり 2 テーマ，計 12 テーマまでフルに認めてもらう必要がある。さらに，7 番目の新しい研究分野として「レーザー・放射光多光子実験」をスタートさせる。世界で唯一の分子科学専用放射光実験施設を有し，レーザー開発研究センターの創設を計画している分子科学研究所は，この新しい研究分野で成果の挙げられる世界で唯一の研究機関である。現在まで，レーザー光と放射光を併用する試行的実験を行ってきているが，目に見える形の成果が挙がっていない。これは UVSOR からの放射光に完全同期する高繰り返しのレーザー技術が未成熟であったためと UVSOR 施設側に放射光の同期制御を担当する研究者を欠いていたためである。この二つの課題を解決すべく，新しく

「レーザー・放射光多光子実験」として研究組織を作る。具体的には，極端紫外光科学研究系から 1 研究グループ，レーザー開発研究センターから 1 研究グループがUVSOR施設に併任し，UVSOR施設側で新設する専任研究チーム(助教授 1，助手 1，技官 1）と協力して，新規研究分野「レーザー・放射光多光子実験」を推進する。

(ii) 光源系の将来計画

昭和 63 年に検討された施設将来構想（通称木村委員会の）で第 3 世代高輝度光源施設の新設が提言されているが，具体化には到っていない。現時点では，世界的な進歩と日本の情勢から判断して，長期プランとして第 3 世代の次の世代を目指すことが適当である。蓄積リングによる自由電子レーザー（FEL）は次世代光源として非常に有力な候補であり，広いエネルギー範囲のチューナビリティや放射光との同期性にも特徴がある。これまでの UVSOR における FEL の研究成果に基づけば，実用的な FEL を発生させるリングを設計することができる。紫外から可視域の実用 FEL の開発を行ない分子科学研究に利用するとともに，同じリングでアンジュレータ放射光も発生させて自ら同期している FEL と高輝度放射光を併用した分子科学研究を行う。今後，UVSOR の光源の改良に加え，FEL 専用リングの建設や高輝度アンジュレータの基礎研究を行うためには光源加速器の分野で組織を強化する必要がある。具体的には現状の助教授 1，助手 1 に加え，新たに教授 1，助手 1（技官は 2）を追加要求する。極端紫外光実験施設のような大型設備では継続性が重要であり，10 年以上にわたる長期的ビジョンに基づいて分子科学専用超高輝度リングの建設計画を推進していく必要上，他の施設とは異なり，教授職を設ける必要がある。

（注）分子研の各施設は固有の問題を抱えているが，それらの問題に対して施設に密着し長期的に責任を持って取り組む体制（組織）づくりが必要である。その案として，施設に専任の教授を置くこと，あるいは，研究系部門が併任として施設組織に加わることが提言されている。UVSOR では，観測系に対しては後者（研究系から施設長の部門が併任），光源系に関しては前者で対処する。

(3) 平成 6 年度実施の UVSOR 検討小委員会（第 1 回，第 2 回，委員長 岩田末廣）

レーザー開発研究センター（仮称）の創設に関連して研究分野検討小委員会で提案された将来計画を中心に，以下の 4 項目について検討した。

(i) 現在の UVSOR の光源加速器，分光器，測定装置をどうするか

分光器や測定装置については計画的にスクラップアンドビルドを進める必要がある。ただし，今後 10 年，老朽化対策を施しながら光源加速器を維持できたとしても，UVSOR を利用した分子科学研究のレベルが世界的に見て陳腐化する危険がある。光源加速器を更新できるまでの生き残り作戦として，新たな挿入光源の導入や，すでにある挿入光源の高性能なものへの置き換えなどが重要である。加速器分野を含む光源関係の組織の補強（現員を含めて教授 1，助教授 1，助手 2 とする）の緊急度が高い。

(ii) UVSOR でどういうサイエンスを進めるべきか

これまでの 6 つの研究分野（分光実験，光電子分光実験，光化学実験，化学反応素過程実験，固体・表面光化学実験，光励起新物質合成実験）を一層，推進しなければならない。具体的研究課題としては，光誘起化学反応・表面反応の研究，VUV・軟 X 線を利用した化学的見地に立った分光法，赤外光を利用した研究，分子固体・薄膜の研究などである。また，レーザーと放射光の同期をとった研究については，早急に新たな成果を挙げるべく組織を作る必要が

ある。同期の困難が原理的にない自由電子レーザーと放射光の組み合わせの研究方向も探るべきである。

(iii) 第3世代高輝度放射光を利用した分子科学研究をどのように進めるべきか

第3世代の高輝度光源は高分解能分光を行うのに非常に適している。内殻励起の分子分光（振動分光，解離ダイナミクス）の研究に不可欠であり，また，ビームサイズが小さいためレーザーを併用する場合でも適している。東大物性研の高輝度 VUV・軟 X 線光源計画が文部省に認められた段階で，分子研独自のビームラインを建設できるように働きかけることも放射光分子科学の新たな展開のためのひとつの選択肢となる。

(iv) UVSOR の次に来るものは何か

FEL 専用リングの是非について，さまざまな観点から議論が行われた。新リングの建設計画は技術的な可能性も含めて，またより長期的な観点とも関連づけながら，充分検討する必要がある。

平成7年度（分子研リポート'95 を参照のこと）

(4) 平成7年度実施の将来計画委員会（第9回，委員長 吉原經太郎）

平成6度にまとめられた所の将来計画を具体化するための概算要求を目指す立案作業がワーキンググループ(WG)によって行われた。その概算要求案が本委員会において承認された。UVSOR 施設が関係するものとして「分子制御レーザー開発研究センター」の立案が含まれている。一方，UVSOR 施設と電子計算機センター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る。それらをめぐる環境は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迫られている。平成7年度，この問題について所外の関係者を加えて集中的に審議するために，所長の諮問委員会（UVSOR 関連では UVSOR 将来構想委員会及び UVSOR-II 検討会）が開催された。H7.7.14 に開かれた第1回 UVSOR 将来構想委員会において，所外メンバーを中心に UVSOR 設立来の国内状況と最近の状況変化，特に文部省学術審議会加速器科学部会の平成7年度答申について議論し，さらにそれらに基づき UVSOR の将来計画について検討した。H7.12.7 に開かれた第1回 UVSOR-II 検討会では，所外の光源開発の専門家に参画をお願いし，UVSOR の新光源建設計画について検討した。それらの報告書に基づいた UVSOR の将来計画の中間報告が本委員会において承認された。

(5) 平成7年度実施の開発研究センターＷＧでの検討内容から（WG 長 中村宏樹）

当初，レーザー開発研究センター（最終的には分子制御レーザー開発研究センターと命名）の計画の中に含まれていた自由電子レーザー（FEL）専用リングの建設計画は，UVSOR の更新計画として検討されることになり，機器センターの改組・増強に相当するレーザー開発研究センターの計画とは切り離されることになった。それに伴い，UVSOR の更新計画等に関わる光源加速器分野の教授グループの要求もレーザー開発研究センター計画とは独立のものとなった。なお，レーザー開発研究センターには (i)分子位相制御，(ii)放射光同期，(iii)特殊波長，(iv)分子空間制御の4つのレーザー開発研究部が置かれ，放射光同期を推進するレーザー研究者の増員要求はレーザー開発研究センターから出されることになった。UVSOR 施設として計画していた新規研究分野「レーザー・放射光多光子実験」についても，その研究組織はレーザー開発研究センターに置かれ，主たる予算要求もレーザー開発研究センターから出されることになった。それに伴い，UVSOR 施設側の将来計画としての7番目の研究分野の要求やそのための増員要求はしないこと

になった。レーザー開発研究センターで推進される「レーザー・放射光多光子実験」プロジェクトの具体的な研究テーマは，レーザーと放射光を多光子的に使って生成した種々の対称性の超励起状態の特質や動力学，レーザーにより生成した電子励起・振動励起分子の VUV・軟 X 線吸収と動力学，放射光で生成した中性の解離種・脱離種のレーザーによる検出，放射光で選択的に生成した多価イオンや内殻励起分子のレーザー分光，内殻励起分子の電子緩和・振動緩和のレーザーによる追跡，内殻励起分子のレーザーによる反応制御などである。

(6) 平成 7 年度に承認を得た UVSOR 将来計画（中間報告）の概要

上述の第 9 回分子研将来計画委員会で承認を得た UVSOR の将来計画（中間報告）の概要は以下の通り。4 計画を段階的に実現していくものである。

将来計画 (1) 光源，分光器，測定装置のスクラップアンドビルドによる世界的研究成果の達成

これは国内外研究者による UVSOR の点検評価で強く指摘されているものであり，現在，総力を挙げて実行している。この計画は文部省学術審議会加速器科学部会の平成 7 年度答申にも合致し，COE 施設としての先端的な研究志向を強化するものである。また，性能向上のための技術開発は(iv)の新光源建設計画を実現するためのＲ＆Ｄとなっている。

将来計画 (2) レーザーを併用した実験技術の開発と新しい放射光分子科学の展開

これは「分子制御レーザー開発研究センター」の 4 つの研究の柱のひとつ「放射光同期レーザー開発研究」に直結するものである。現在，UVSOR では既存のレーザーを利用した試行的な研究と円偏光アンジュレーターを利用した新しいタイプの自由電子レーザー（FEL）の開発研究が始まっているが，本格的にこのような研究を展開するには，前者については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り，後者については(iv)の新光源建設を実現することが望まれる。

将来計画 (3) 第 3 世代高輝度 VUV・軟 X 線光源（分子研外）を利用した先端的分子科学研究の遂行

この計画は，所外の情勢に大きく左右されるが，学術審議会の答申にもあるように，諸外国の放射光分子科学の進歩に遅れないように日本でも早急に第 3 世代高輝度 VUV・軟 X 線放射光の利用を推進する必要がある。文部省下で高輝度 VUV・軟 X 線光源が実現した際には，分子研の独自性を失わないようにその光源のある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，助手 1，技官 1）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体制を構築する。

将来計画 (4) UVSOR 次期計画としての次世代光源の建設と新研究分野の開拓

放射光分子科学の新たな展開には第 3 世代高輝度光源だけでは不十分である。UVSOR で現在，成果の挙がっている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 3 世代の次に来る第 4 世代とも言える次世代の光源につながるものであり，第 3 世代光源では実現不可能な放射光分子科学の新しい展開につながるものである。本計画では 5 年程度の先のスタートをめざして，現存しないような新しい光源の建設を開始し，他施設では出来ないような放射光利用研究を可能とする。このような UVSOR の長期計画を具体化していく上では光源関係の教授職が新たに必須である。現在，新光源計画の施設名の仮称を UVSOR-II とし，所外の専門家の支援を受けて技術的に検討を進め，80m×100m 程度の敷地に収まる一次案が完成している。

放射光の輝度を向上させる方法にはいくつか方法がある。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）を小さくするものであり，そのような設計理念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 の次期計画にはそぐわない。一方，UVSOR-II 計画では，適正規模の範囲で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の目標である極短バンチ電子ビームの生成を可能とする。極短バンチ電子ビームは第3世代リングからは得られない。電子ビームのエネルギーは現在の UVSOR で行われている研究の連続性を考慮して 1 GeV （現在の UVSOR は 0.75 GeV）とするので，放射光の波長領域は国内で進行中の高輝度光源計画とは競合しない。このリングには約 10m に達する直線部を 2 ヵ所，3.6m の直線部を 4 ヵ所設けてあり，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 4mm から 100 μm 以下まで可変であり（現在の UVSOR では約 15cm），他のところで計画されているリングでは不可能な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の高輝度コヒーレント放射光による研究が可能となる。さらに，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，レーザーとの2重共鳴の実験でも高効率な測定が可能となる。なお，この次世代の光源はB地区の現在の UVSOR 施設及びその周辺の若干の敷地を利用して建設する計画である。

5-2-2 平成8年度開催の将来計画に関わる委員会等の概要

(1) 平成8年度外国人評価（H8. 10. 24-29）

極端紫外光科学研究系の評価委員として来所した Nenner 博士に依頼して，分子研における極端紫外光科学の将来展望とは切り離すことのできない UVSOR の将来計画 (1) ～ (4) のそれぞれについても評価を受けた。詳細は点検評価の章を参照のこと。

(2) 第2回 UVSOR 将来構想委員会（H8. 12. 10）

(i) UVSOR の将来計画の進行状況の報告，(ii) 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，(iii) UVSOR の置かれている状況と将来計画に関して大局的な立場からの検討と討論など。詳細は 5-2-3 に示す報告書を参照のこと。

(3) 第10回将来計画委員会（H8. 12. 25）

本年度の分子研の将来計画に関する全体会議の議題として UVSOR の将来計画が取り上げられた。これまでの経緯の説明と本年度の報告がなされた。現時点での取り組み方を含めて，それぞれの内容について議論した。平成11年度以降の概算要求に向けて可能なところから準備を始めることが了承された。

5-2-3　第2回 UVSOR 将来構想委員会報告

日時　　平成8年12月10日　午後1時半～5時10分

出席者

東理大総研	黒田晴雄
高エ研放射光	木原元央
東大物性研	神谷幸秀
広大理	谷口雅樹
名大工	水谷宇一郎
分子研顧問	井口洋夫，田中郁三（学位授与機構）
所内	所長，小杉，宇理須，岩田

配布資料

- 分子研リポート'95
- 開発研究センターの概算要求関連資料
- 将来計画 (1) と (2) についての現状
- ビームラインの現状
- 人員構成の現状
- 共同研究の現状
- 平成8年度外国人評価レポート

まず配布資料に基づき，平成7年度に中間報告としてまとめた4つの将来計画，すなわち，

> UVSOR の4つの将来計画
> (1) 光源，分光器，測定装置のスクラップアンドビルドによる世界的研究成果の達成
> (2) レーザーを併用した実験技術の開発と新しい放射光分子科学の展開
> (3) 第3世代高輝度 VUV・軟 X 線光源（分子研外）を利用した先端的分子科学研究の遂行
> (4) UVSOR 次期計画としての次世代光源の建設と新研究分野の開拓

について，現在までの取り組みを含めて小杉が簡単に説明した。また，分子研の施設改編計画による開発研究センター創設の構想及び分子研における共同研究の研究形態の変更について所長から説明があった。以下では，所外の状況や将来計画の各項目についてのフリーディスカッションの内容を記す。

高エ研，東大，広大，名大で進行している計画について

高エ研は平成9年度より機構組織に改組される予定である。放射光実験施設（Photon Factory，PF）のビームライン関係者は物質構造科学研究所に所属することになる。物質構造科学研究所では放射光，中性子，低速陽電子，ミュオンなど加速器によって得られるビームを利用した研究が行われる。施設として優れているという PF の設立来の基本条件についてはこの改組によっても変わらず，今後も放射光施設の COE として広い分野における施設利用で優れた成果が挙げられるように努力する。ただし，平成7年度に受けた点検評価の結果に従い，改組後は外部ユーザーの研究支援に加えて施設内スタッフ自身の研究も推進する方向で検討を始めている。PF リングは今年度末より来年度の途中まで高輝度化のための改造を行う。また，SPring-8 ではできないような実験を可能にするため，トリスタン主リング

への入射加速器であるARリングを大電流シングルバンチ及び極短バンチ長のX線施設として改造して利用する方向で考えている。放射光以外では，平成10年度に向けて大型ハドロン計画の概算要求が始まる予定である。

東大計画は日本で唯一の世界的に競争力のある第3世代高輝度VUV・軟X線光源として位置づけられているので，全国的な支援の中でできうる限り最高の技術を投入して建設することが期待されている。物性研の施設としての計画ではなく，大学の施設としての計画になっており，全学的な支援が得られるように組織を編成中である。建設予定地は柏キャンパス内である。平成9年度から走り出すことは文部省には認められず，平成10年度実現を目指して新たな努力をしている。日本で唯一の施設なので，優れた成果を挙げるためにも，これまで放射光科学で実績のある大学や研究機関に独自の特徴あるビームラインを建設していただくように依頼しているところである。物性研から研究者が移籍して建設の中心勢力になるので，どうしても物性研究が中心になる。その他の分野については学外研究者にかなり負うことになる。

広大リング（HiSOR）は学内利用目的のために平成7年度予算で建設がスタートし，平成8年度にはビームライン関係の専任スタッフを擁する放射光科学研究センターが設立された。理学部色が強い施設である。リングを運転したり改良したりする加速器関係のスタッフは学内には置かない。リングの性能は企業の技術力に完全に負っている。学生に対する教育を非常に重視している。留学生を受け入れ，国際交流に貢献する体制も作った。全国的に利用を公開するような施設ではないが，自治体，地域産業界，近隣大学などの共同利用は考える必要がある。学内研究者の個人レベルの共同研究の他，客員研究員や受託研究員の枠内での共同利用の形態を模索中である。現在，岡山大学が専用ビームラインを持とうとしている。なお，広大リングで実現不可能な研究についてはSPring-8やPFなどの学外の全国共同利用施設を積極的に利用する。

名大リング（NSSR）計画は概算要求中のものである。建設地は決まっていない。基礎科学を指向するUVSORと相補的な役割を果たすことを強く意識して，放射光工学の研究，さらには放射光医療工学の研究を目指した施設となっている。文部省学術審議会の平成7年度答申に書かれている大学への小型リングの設置目的にはない硬X線領域の利用を主目的としている。工学部色が強いこともあるが，利用波長も利用研究内容も広大リングとはかなり異なる。なお，学内利用専用の大学の施設と分子研のようなCOEの研究所の施設では設置目的が違うので，地理的に近接しているからと言ってUVSORとの相補性をことさら強調する必要はないのではないかとの意見があった。

将来計画 (2) について

昨年度末から現在に至るUVSOR関係の研究者の努力の結果，レーザーをUVSORからの放射光に同期させる技術的問題はほぼ解決した。今後は分子科学として意味のある研究を展開していかねばならない。一方，FELについても直線偏光アンジュレータで270nmの短波長化に成功し，今年の6月に成果発表をしたが，その後，円偏光アンジュレータを使うことで世界記録の240nmを切ることにも成功している。また，現在，FELの発振が長時間安定しており，実際の分子科学の研究にも利用できるものとなってきた。

レーザーを併用した研究テーマはPFでも創設期からあるが，未だに多くの成果を挙げるまで到っていない。大きなプロジェクトを立てることもしていない。この種の実験は施設利用的な細切れのビームタイムの配分では成果を挙げることが難しい。広大リングでも計画だけはあるが，最初のフェーズでは取り上げない。所内にレーザーの研究者がいることが必須である。分子研においては，レーザーをフルに利用して研究している研究者が多くいるので，そのよ

うな研究者が放射光利用を考えるところに分子研の特徴があるのではないか。このように将来計画 (2) は分子研にふさわしいものであり，継続的に研究を進めるべきである。

将来計画 (3) について

東大計画は日本で唯一の世界的に競争力のある第3世代高輝度 VUV・軟 X 線光源として位置づけられているので，先端的分子科学研究に必須のものになるであろう。また，東大の学内には放射光を利用して分子の分光や動力学の研究を推進する研究者集団の母体がないので，分子科学研究所の関与が大いに期待される。ただし，現在のところ，東大計画は文部省には認められていないので，分子研としてはまだ，概算要求にのせることはできない。また，分子研が分室を作る際には必ずそのための定員を純増で獲得する必要がある。現在の分子研定員の中からやりくりするならば本末転倒である。分室の定員については，PF に分室を有している東大理学部や東大物性研の現状と比較して分子研計画では建設期においても学生などの支援が期待できないことを考慮すると，助教授 1，助手 1，技官 1 が妥当なところである。

将来計画 (4) について

平成 7 年度に検討した UVSOR-II の一次案に盛り込んだアイデアはその後，兵庫県立姫路工大高度産業科学技術研究所のニュースバル計画（兵庫県の産業界の利用を主目的として設立）で取り込まれることになった。分子研としては，ニュースバル計画での光源加速器の成否を見ながら，一層すぐれた特性を有するリングを立案していく必要がある。光源加速器として特徴あるものにすればするほど開発的要素が増えるが，ビームライン（分光器，測定装置）のデザインは特殊なものに限定されるわけではない。ビームタイムの 7, 8 割は通常のユーザーモードでの運転が可能であろうし，ビームラインも特別なものにはならない。ただし，利用の割合は少なくてもリングの特性を積極的に利用した新しい研究に挑戦することが重要である。

UVSOR では以前から光源加速器分野で教授職を置くことを考えてきた。ただし，純増要求ではなく助教授の教授職への振替案であったので，すでに在任している助教授の扱いについて妙案がなく，これまで挫折してきた。UVSOR の次期計画で教授職を純増要求するのは妥当である。

これまでは共同利用に供されている放射光施設が少なかったために，UVSOR の本来の設立理由であった分子科学を指向した共同研究に集中するわけにはいかなかった。今後は各大学に小型リングが配置されるであろうし，次期計画では原点に戻って分子科学の COE としてふさわしい施設を建設すべきである。現在の UVSOR で達成されている FEL の成果は次期計画につながるものとして評価できる。また，同期レーザーを使った時間分解実験を展開していく場合，放射光技術としては極短パルス化（極短バンチ化）が必須であり，この点に関してもこれまでの UVSOR の成果が評価できるが，電流がどこまでとれるかという点でまだ実用化までの距離はあるであろう。ピコ秒を切る極短パルス化が可能になったとしてもジッターが押さえられないと時間分解実験には使えないことも忘れてはならない。

FEL 利用実験やレーザー併用実験は所内専用ビームラインで集中的に成果を挙げるようにすべきであろう。所内研究者が所外ユーザーに遠慮することはない。分子研では所内研究者が中心となって利用研究の成果を挙げないと UVSOR-II 設置の意味はない。その点は PF と大きく異なる。今後は従来の装置設備中心の共同利用ではなく，人物を中心とした共同研究に移行すると思われるので，優れた研究者集団を擁しているという面から UVSOR でも新機軸を出すべきである。そのためには，装置設備で勝負するという考えから脱却して身軽になった上で，実験方法に特徴を

出すような方向で割り切って考えることも必要であろう。

次期計画は基本的には現在の UVSOR の規模（土地，人員，予算）を大きく変えるものではなく，所内での位置付けも変わらない。極端紫外光実験施設の設立後に極端紫外光科学研究系ができたために現在の UVSOR の位置づけに曖昧なところがあるが，次期計画では分子研の他の施設やセンターのように研究系が施設を主導していく態勢が望まれる。

6. 資　料

6. 資　料

6-1　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	東北大理教授，徳島文理大薬教授			○	○	○			
鈴木　進	東北大金材研所長			○					
豊沢　豊	東大物性研所長，中央大理工教授			○	○	○	○		
平野　龍一	東大名誉教授			○	○				
藤田　栄一	大阪薬科大学長，京大名誉教授				○	○	○		
西原　春夫	早稲田大学総長				○	○			
倉田　道夫	三菱瓦斯化学(株)顧問				○	○			
朽津　耕三	長岡技科大教授，城西大理教授				○	○	○	○	
田丸　謙二	東京理科大理教授				○	○	○		
早川　幸男	名古屋大学長				○'87. 7. 22～	○	○'92. 2. 5 死亡		
千原　秀昭	阪大理教授， (社)化学情報協会専務理事				○	○	○	○	
米澤貞次郎	近畿大理工学総合研教授， 近畿大理工教授				○	○	○	○	
赤池　弘次	統計数理研究所長					○	○	○	
三ヶ月　章	日本学術振興会学術相談役， 東大名誉教授					○	○		
伊藤　昌壽	東レ(株)相談役最高顧問						○	○	○
佐々木慎一	サイエンスクリエイト(株)常任顧問						○	○	○
佐野　博敏	東京都立大学長						○		
櫻井　英樹	東北大理学部長，東北大理教授						○	○	
松永　義夫	神奈川大理教授						○	○	○
秋本　俊一	学士院会員							○	○
岩村　秀	九大有機化学基礎研究センター教授							○	○
加藤　延夫	名大総長							○	○
黒田　晴雄	東京理科大総合研教授							○	○
塩野　宏	成蹊大法教授							○	○
田中　久	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	金沢工業大副学長							○	○
森本　英武	(株)豊田中央研顧問							○	○
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	埼玉大理教授								○
土屋　荘次	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~

6-2 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		○	○	○	
吉原經太郎 分子研教授		○			
霜田 光一 東大理教授			○	○	
武内 次夫 豊橋技大教授			○	○	
山本 常信 京大理教授			○	○	
岩村 秀 分子研教授			○		
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　荘次　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					○

6-3 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	名大工教授	○共							
大野　公男	北大理教授	○人	○						
角戸　正夫	阪大蛋白研所長	○(副)							
朽津　耕三	東大理教授	○人	○人						
鈴木　洋	上智大理工教授	○							
千原　秀昭	阪大理教授	○人	○						
土屋　荘次	東大教養学教授	○共 (共～'82.4.30)		○					
豊沢　豊	東大物性研教授	○人							
廣田　襄	京大理教授	○人 (人～'82.3.31)		○人	○(副)・人				
米澤貞次郎	京大工教授	○共 (共～'82.5.1)							
井口　洋夫	分子研教授	◎人	◎人	◎					
岩村　秀	〃	○人・共	○人	○人	○～'87.5.31				
木村　克美	〃	○共	○共	○人・共	○人・共	○ (◎'90.1.29～)	○ (◎～'92.3.31)		
花崎　一郎	〃	○	○	○	○	○共	○人・共	○人・共	○
廣田　榮治	〃	○人	○人	○人	○	○ (◎～'90.1.16)			
藤山　常毅	〃	○ ('82.4.30 死亡)							
諸熊　奎治	〃	○人・共 (共～'82.4.30)	○人	○人	○共	○人	○人 (◎～'92.2.14)		
吉原經太郎	〃	○人・共	○人・共	○人・共	○人	○人		○人	○
田中　郁三	〃(客員)(東工大理教授)	○							
笛野　高之	〃(客員)(阪大基礎工教授)	○	○人						

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	〃(客員)(名大理教授)	○							
田仲　二朗	名大理教授	○ (共～'82. 5. 1)	○人						
伊藤　光男	東北大理教授		○	○(副)　人					
木村　雅男	北大理教授		○○共						
黒田　晴雄	東大理教授		○共						
高柳　和夫	宇宙研教授		○	○					
中島　　威	東北大理教授		○人						
中村　宏樹	分子研教授	○ (共～'82. 5. 1)	○共	○	○人	○人	○共	○人	○
丸山　有成	〃(客員)　お茶女子理教授		○	○	○	○人	○人	◎○	
山本　明夫	(客員)　東工大名誉教授		○		○	○			
茅　　幸二	慶應大理工教授			○共	○共	○共			
菅野　　暁	東大物性研教授			○	○				
坪村　　宏	阪大基礎工教授			○人					
細矢　治夫	お茶女子理教授			○人	○人				
又賀　　昇	阪大基礎工教授			○共	○ (～'88. 3. 31)				
松永　義夫	北大理教授			○人	○人				
北川　禎三	分子研教授			○共	○人・共	○人・共	○	○人	○
齋藤　一夫	〃			○					
青野　茂行	金沢大大学院自然科学研究科長				○	○			
安積　　徹	東北大理教授				○人	○人			
原田　義也	東大教養学教授				○人	○(副)人			
松尾　　拓	九大工教授				○共				
丸山　和博	分子研教授(客員)，(京大理教授)			○	○('88. 6. 1～)				
大瀧　仁志	分子研教授				○('88. 4. 1～)	○	○共		
薬師　久彌	〃				○('88. 9. 1～)	○共	○人	○人	○共
木田　茂夫	〃				○ (～'88. 3. 31)				
岩田　末廣	分子研教授					○人	○人	○('94. 4. 1～)	○人
志田　忠正	京大理教授					○人	○人		
田隅　三生	東大理教授					○人	○		
仁科雄一郎	東北大金材研教授					○共	○		

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
村田　好正	東大物性研教授					○	○(副)		
中筋　一弘	分子研教授					○	○人	○人 (～'94.3.31)	
飯島　孝夫	学習院大理教授						○人	○(副)	
伊藤　公一	大阪市立大理教授						○人	○人	
小川禎一郎	九大総合理工教授						○共	○共	
小尾　欣一	東工大理教授						○共	○	
京極　好正	阪大蛋白研教授						○人	○人	
田中　晃二	分子研教授						○	○共	○人
齋藤　修二	分子研教授						○(～'92.4.1)	○共	○共
川崎　昌博	北大電子科学研教授							○人	○人
近藤　保	東大理教授							○人	○(副)人
斎藤　軍治	京大理教授							○	○
塚田　捷	東大理教授							○共	○共
山口　兆	阪大理教授							○人	○人
宇理須恆雄	分子研教授							○	○共
中村　晃	分子研教授							○	
小杉　信博	分子研教授								○
渡辺　芳人	分子研教授								○共
大澤　映二	豊橋技科大工教授								○
生越　久靖	京大工教授								○
小谷　正博	学習院大理教授								○人
西　信之	分子研教授								○人
三上　直彦	東北大理教授								○共

6-4　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，もつて研究所の活性化を図ることを目的とする。

（委員会の組織）

第2条　研究所に，前条の目的を達成するため分子科学研究所点検評価委員会（以下「委員会」という。）を置く。

2　委員会は，次に掲げる者をもって組織する。

一　研究所長

二　研究主幹

三　研究施設の長

四　技術課長

五　その他委員長が必要と認めた者

3　前項第5号の委員の任期は，2年とし，再任を妨げない。ただし，補欠の委員の任期は，前任者の残任期間とする。

（委員長）

第3条　委員会に委員長を置き，研究所長をもつて充てる。

（招集）

第4条　委員会は，委員長が招集し，その議長となる。

（委員会の任務）

第5条　委員会は，次に掲げる事項について企画，検討及び実施する。

一　点検評価の基本方針に関すること。

二　点検評価の実施に関すること。

三　点検評価報告書の作成及び公表に関すること。

四　その他点検評価に関すること。

（点検評価事項）

第６条　委員会は，次の各号に掲げる事項について点検評価を行うものとする。

一　研究所の在り方，目標及び将来計画に関すること。

二　研究目標及び研究活動に関すること。

三　大学等との共同研究体制及びその活動に関すること。

四　大学院教育協力及び研究者の養成に関すること。

五　教官組織に関すること。

六　研究支援及び事務処理に関すること。

七　総合研究大学院大学との連係及び協力に関すること。

八　施設設備等研究環境及び安全に関すること。

九　国際共同研究に関すること。

十　社会との連携に関すること。

十一　学術団体との連携に関すること。

十二　管理運営に関すること。

十三　学術情報体制に関すること。

十四　研究成果等の公開に関すること。

十五　財政に関すること。

十六　点検評価体制に関すること。

十七　その他委員会が必要と認める事項

２　前項各号に掲げる事項に掲げる具体的な点検項目は，委員会が別に定める。

（専門委員会）

第７条　委員会に，専門的事項について調査審議するため，専門委員会を置くことができる。

２　専門委員会に関し必要な事項は，委員会が別に定める。

（点検評価結果の対応）

第８条　研究所長は，委員会が行った点検評価の結果に基づき，改善が必要と認められるものについては，その改善に努めるものとする。

（庶務）

第９条　委員会の庶務は，総務部庶務課において処理する。

（雑則）

第10条　この規則に定めるもののほか，委員会の運営に関し必要な事項は，委員会の議を経て研究所長が定める。

附則

１　この規則は，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。

6-5　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

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　'96
－現状・評価・将来計画－

1997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・製本　株式会社　エニウェイ