# 「分子研リポート '98 」目次

1	序	È	······································	1
2	分子	科学研	T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	8
		2-4-7	主幹·施設長会議	9
		2-4-8	大学院委員会	9
		2-4-9	特別共同利用研究員受入れ審査委員会	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(1999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		27
		2-7-1	技術研究会	. 28
		2-7-2	技術研修	. 30
		2-7-3	人事交流	. 31
		2-7-4	受賞	. 31
	2-8	特別研	究と岡崎コンファレンス	32
		2-8-1	特別研究の経緯	. 32
		2-8-2	第5期特別研究	. 32
		2-8-3	岡崎コンファレンス	. 37
	2-9	共同研	究	.42
		2-9-1	共同研究の概要	42
		2-9-2	1998年度の実施状況	42
		2-9-3	共同研究実施件数一覧	44
	2-10	国際3	交流と国際共同研究	45
		2-10-1	国際交流	. 45
		2-10-2	国際共同研究	. 46
		2-10-3	多国間国際共同研究の推進	48

	2-11	大学院教育	49
		2-11-1 特別共同利用研究員	49
		2-11-2 総合研究大学院大学	51
	2-12	定員と財政	54
		2-12-1 定員	54
		2-12-2 財政	54
	2-13	共通設備	55
		2-13-1 情報図書館	55
		2-13-2 岡崎コンファレンスセンター	55
		2-13-3 共同利用研究者宿泊施設	55
		2-13-4 職員会館	55
	2-14	地域社会との交流	56
		2-14-1 国研セミナー	56
		2-14-2 一般公開	57
		2-14-3 見学受け入れ状況	57
3 .	研究	系および研究施設の現状	59
	3-1	論文の発表状況	59
	3-2	理論研究系	60
	3-3	分子構造研究系	83
	3-4	電子構造研究系	96
	3-5	分子集団研究系	107
	3-6	相関領域研究系	121
	3-7	極端紫外光科学研究系	134
	3-8	錯体化学実験施設	154
	3-9	研究施設	172
		電子計算機センター	172
		分子制御レーザー開発研究センター	174
		分子物質開発研究センター	186
		装置開発室	194
		極端紫外光実験施設	196
4 :	分子	研研究会「2010年の分子科学を語る」	209
	4-1	挨拶;分子研所長 伊藤光男	209
	4-2	プログラム	210
	4-3	予稿と点描	212
	4-4	インフォーマルミーティング「分子研の今後のあり方について」	233
5 .	将来	計画及び運営方針	241
	5-1	電子計算機センター将来計画	241
		5-1-1 現有計算機の構成と利用状況	241
		5-1-2 平成11年度の計算機システム更新	241
		5-1-3 分子研所内及び岡崎国立共同研究機構におけるセンターの役割	243
		5-1-4 国際分子科学計算センターとして	245

		5-1-5	センターライブラリ開発の研究プロジェクト化			245
		5-1-6	QCLDBの事業化			245
		5-1-7	情報ネットワークと計算機センター			245
	5-2	極端紫	外光実験施設の将来計画			247
		5-2-1	Munro教授によるUVSOR外部評価(原文)			247
		5-2-2	Munro教授によるUVSOR外部評価(和訳)			250
	5-3	岡崎国	立共同研究機構の将来計画と現在の到達点			254
		5-3-1	これまでの経過			254
		5-3-2	平成10年の活動			254
		5-3-3	生命環境科学研究センター			255
		5-3-4	まとめ			256
6 .	資料					257
	6-1		評議員( 1976~ )			257
	6-1 6-2	歴代の				
	•	歴代の	評議員( 1976~ )			262
	6-2	歴代の 歴代の 歴代の	評議員( 1976 ~ ) 運営に関する委員会委員( 1975 ~ 1981 )			262 263
	6-2 6-3	歴代の 歴代の 歴代の 岡崎国	評議員( 1976~ ) 運営に関する委員会委員( 1975~1981 ) 運営協議員( 1981~ )	壬期に	関する規則	262 263 266
	6-2 6-3 6-4	歴代の歴代の歴代の歴代の 団崎国	評議員( 1976 ~ ) 運営に関する委員会委員( 1975 ~ 1981 ) 運営協議員( 1981 ~ ) 立共同研究機構分子科学研究所研究教育職員の(	王期に	関する規則 バ任期制の取扱いについて	262 263 266 267
	6-2 6-3 6-4 6-5	歴代のの歴代のの同様ののののでは、これでは、これでは、これでは、これでは、これでは、これでは、これでは、これ	評議員(1976~)	王期に制	関する規則 バ任期制の取扱いについて	262 263 266 267 268
	6-2 6-3 6-4 6-5	歴代のののののののののののののののののののののののののののののののののののの	評議員(1976~)	王期に制	関する規則ベ任期制の取扱いについて	262 263 266 267 268
	6-2 6-3 6-4 6-5	歴代のののののののののののののののののののののののののののののののののののの	評議員(1976~)	王期に 則に基づ ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	関する規則	262 263 266 267 268 268
	6-2 6-3 6-4 6-5	歴歴歴岡岡所分分流のの国国へ研究の	評議員(1976~) 運営に関する委員会委員(1975~1981) 運営協議員(1981~) 立共同研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規 の寄稿(再録) 肝における同業者評価 は学研究所における研究者の流動性	壬期に 削に基づ 伊藤 中村 西	関する規則	262 263 266 268 268 271 275

### 1.序 言

1993年度に分子研リポートの一号をだして以来、今年で6年を迎え、ここに分子研リポート'98をお届けすることになった。私にとってはこれが所長としての最後のリポートとなり感慨深いものがある。

本年度行った主なものは法的任期制の導入と分子研および分子科学の将来についての討論集会である。前者については分子研リポート '97にその審議経過を詳しく報告したが、それに基づいて1999年1月から研究系助手に法的任期制の導入を決定し実施することになった。内容的には従来おこなってきた助手の任期制と同じであるが、再任にあたり所外委員が加わった運営協議員会のチェックを受ける点が異なる。詳しくは中村宏樹教授による学振の学術月報の記事に紹介されており、本リポートの巻末に資料として掲載した。なお、外部評価、流動部門についての記事も添付している。

21世紀を目前に控え、分子研、分子科学の将来について改めて考えようという気運が高まってきた。これをうけて、"2010年の分子科学を語る"という研究会を3日間にわたり開催した。第一線で活躍中の若手をふくむ多くの分子科学研究者、および境界領域の研究者の参加をえて自由な雰囲気のもとで活発な議論が行われた。私自身の脱線で混乱を招いた場面もあったが、互いに本音で語ることができたのは大変よかったと思っている。研究会の講演要旨および自由討論を本リポートに再録した。研究会で示された皆さんの分子科学への熱い想いが、新所長のもとで結集され分子研、分子科学の大いなる発展につながることを念じてやまない。

最後に、本リポートの作成にあたり、平田文男教授、広報担当の佐藤敦子さん、管理局の方々に大変ご尽力をいた だきました。これらの方々に心からお礼申し上げます。

> 分子科学研究所長 伊藤光男

### 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。

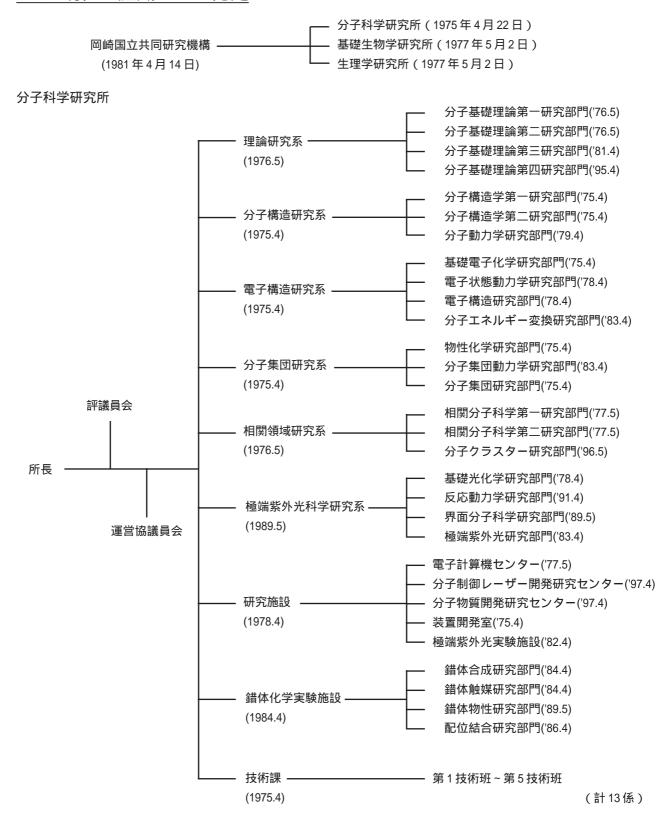
### 2-2 沿 革

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(5.115 m<sup>2</sup>)が竣工した。
- 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 1977. 4.18 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(2,752 m<sup>2</sup>)が竣工した。
- 装置開発棟 (1,260 m²), 機器センター棟 (1,053 m²), 化学試料棟 (1,063 m²) が竣工した。 1978. 3.11
- 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(1,429 m<sup>2</sup>)が竣工した。
- 1979. 3.24 実験棟第2期工事(3,742 m²), 極低温センター棟(1,444 m²)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 m<sup>2</sup>)が竣工した。
- 1983. 3.30 極端紫外光実験棟第2期工事(1,463 m²)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 m<sup>2</sup>)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 m<sup>2</sup>)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 m<sup>2</sup>)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. 4.1 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設置された。

### 2-3 現在の組織とその発足



は外国人客員研究部門 は客員研究部門 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(1998年度)の評議員会の構成メンバーは下記の通りである。又,分子研創設以来の評議員メンバーの一覧表 も資料として6-1に示してある。評議員会の大きな特長は2名の外国人評議員が存在することである。現在は、ヘブラ イ大学の Levine, Raphael D. 教授とインディアナ大学の Parmenter, Charles S. 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 立命館大学理工学部教授 大 瀧 仁 志 大 塚 榮 子 北海道大学薬学部教授 加藤延夫 愛知芸術文化センター総長,名古屋大学名誉教授 京 極 好 正 大阪大学たんぱく質研究所長 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 後藤圭司 豊橋技術科学大学長 塩 野 成蹊大学法学部教授、東京大学名誉教授 宏 清 水 良 一 統計数理研究所長 高 橋 理 一 (株)豊田中央研究所取締役副所長 田隅三生 埼玉大学理学部長,東京大学名誉教授 土屋荘次 日本女子大学理学部教授,東京大学名誉教授 中 西 敦 男 (社)日本化学会常務理事 細矢治夫 お茶の水女子大学理学部教授 本 多 健 一 東京工芸大学長,東京大学名誉教授 又智 昇 (財)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 丸山和博 京都大学名誉教授 安岡弘志 東京大学物性研究所長 山崎敏光 日本学術振興会監事,東京大学名誉教授 Levine, Raphael D. ヘブライ大学教授

インディアナ大学教授

### 2-4-2 運営協議員会

Parmenter, Charles S.

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全ての事項の議決・承認機関であり,特 に重要な教官の選考を行う「人事選考部会」と、全国の大学等との共同研究の実施に関する諸事項を審議する「共同 研究専門委員会」をその下部組織としてもっている。

所長選考に際しては,運営協議員会は評議員会から意見を求められることになっており,所長候補者を評議員会に推 薦することとされている。現委員(1998年度)を以下に,また,創設以来の委員を6-2,6-3に示す。

#### 6 分子科学研究所の概要

#### 運営協議員

大 澤 映 二 豊橋技術科学大学工学部教授

岡田 īF 大阪大学大学院基礎工学研究科教授

生 越 久 靖 福井工業高等専門学校長

加藤 重樹 京都大学大学院理学研究科教授

小 谷 正 博 学習院大学理学部教授

小谷野 猪之助 姫路工業大学理学部教授

名古屋大学物質科学国際研究センター教授 彦

田中武彦 九州大学理学部教授 籏 野 嘉 彦 東京工業大学理学部長

三上直彦 東北大学大学院理学研究科教授

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

小 林 速 男 分子集団研究系教授 齋 藤 修 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

信之 西 電子構造研究系教授 藥師久彌 分子集団研究系教授

渡辺芳人 相関領域研究系教授

#### 2-4-3 人事選考部会

人事選考部会は運営協議員会の下に設置され,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、人事選考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。同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、部会長は人事選考部会 に報告し審議を行う。

所長は,部会長から受けた答申結果を教授会議(後述)に報告し,了解を得る。

分子科学研究所における教官の任用は ," 短期助手 " の場合を除いて全て公募による候補者の中から選考される。 教 授又は助教授を採用する場合には、まず教授・助教授懇談会において当該研究分野及び募集方針の検討を行い、それ に基づいて作成された公募文案を教授会議,人事選考部会で審議した後公募に付する。研究系でのいわゆる内部昇任 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(1998年度)

加藤重樹(京大教授) 岩田末廣 (分子研教授) 小 谷 正 博 (学習院大教授) 小 杉 信 博 (分子研教授) 関 一 彦 (名大教授) 小 林 速 男 (分子研教授) 田 中 武 彦 (九大教授) 田中晃二 (分子研教授) 三 上 直 彦 (東北大教授) 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研の共同利用研としての最も重要な機能の一つである。本委員会では,共同研究計画(課題研究,協力研究,招へい研究,研究会等)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(1998年度)

 阿知波
 洋
 次
 (都立大教授)
 齋
 藤
 修
 二
 (分子研教授)

 大
 澤
 時
 二
 (分子研教授)

 梶
 本
 興
 亜
 (分子研教授)

 小谷野
 猪之助
 (姓路工大教授)
 一
 本
 祐
 幸
 (分子研助教授)

 山
 崎
 雄
 (分子研教授)
 山
 下
 敬
 郎
 (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,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(1998年度)

市 川 行 和 (宇宙研教授) 平 尾 公 彦 (東大教授) 岩崎不二子(電通大教授) 細 矢 治 夫 (お茶の水女子大教授) 梶 本 興 亜 (京大教授) 三 上 直 彦 (東北大教授) 加藤 肇 (神戸大教授) 山内 薫 (東大教授) 加 藤 重 樹 (京大教授) 北 川 禎 三 (分子研教授) 小 林 速 男 (分子研教授) 澤 木 泰 彦 (名大教授) 一 彦 (名大教授) 西 信 之 (分子研教授) 紀久夫 (阪大教授) 平 田 文 男 (分子研教授) 張 中 筋 一 弘 (阪大教授) 見 附 孝一郎 (分子研助教授) 濱 口 宏 夫 (東大教授)

#### 2-4-6 教授会議

分子科学研究所創設準備会議山下次郎座長の申し送り事項に基づいて,分子研に教授会議を置くことが定められている。同会議は分子研の専任・客員の教授・助教授で構成され,研究及び運営に関する事項について調査審議し,所長を補佐する。所長候補者の選出にあたっては,教授会議は独立に2名の候補者を選出し,運営協議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選考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 特別共同利用研究員受入審查委員会

他大学大学院からの学生(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・生理研の教授または 助教授各 1 機構職員以外の学識経験者 4	センター規則
分子制御レーザー開発研 究センター運営委員会	分子制御レーザー開発研究センターの 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	委員会規則
分子物質開発研究センタ ー運営委員会	分子物質開発研究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。	教授又は助教授 3   職員以外の研究者若干	
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
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	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 1 分子物質開発研究センター 長,同助教授 錯体化学実験施設の教官 1	委員会規則
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。	(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	
設備・安全・節約委員会		(原則)	
図書委員会	購入図書の選定。他	│各研究室から各 1 │施設から必要数	
広報委員会	Annual Review , 分子研レターズ等の 研究所出版物作成に関すること。 研究所公式ホームページの管理運営。	関係研究者のうちから7	
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。	(原則) 各研究室から各 1 施設から必要数	

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 関する申し合わ 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	連絡会議規定
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 委員会規定
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	委員会規定
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	委員会規定
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	委員会規定
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)	委員会規定
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	管理室規定
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	委員会規定
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	委員会規定 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(入れ替えを含む)を選考すること。他	研究主幹 1	委員会規定
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	センター規定
発明等委員会	発明に係わる権利,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	発明規定 データベース取 扱規定 委員会規定
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	傷害防止規定
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	情報図書館規定 委員会規定
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	防火管理規定 委員会規定
	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 委員会規定
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	委員会規定
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。記載なきは規程文無し。

### 2-5 構成員

### 2-5-1 現在の構成員

伊藤光男 所長

馬 場 宏 明 研究顧問

長 倉 三 郎 研究顧問,名誉教授

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丸由有成名誉教授丸由原經太郎名誉教授去一郎名誉教授岩村秀名誉教授

#### 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

杉 田 有 治 助 手

陳 飛 武 非常勤研究員

西 川 武 志 リサーチ・アソシエイト

Baeck Kyoung-Koo 文部省外国人研究員 '98.6.22 ~ '98.8.21 , '98.12.21 ~ '99.2.20

佐 藤 克 彦 学振特別研究員

### 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

宮 崎 州 正 非常勤研究員

丸 山 豊 非常勤研究員

Shin, S. 文部省外国人研究員 '98.6.24 ~ '98.8.23 , '99.1.4 ~ '99.3.3

Chaudhuri, S.学振外国人特別研究員 '98.3.5 ~ '98.10.7Wang, Y.学振外国人特別研究員 '99.3.23 ~ '01.3.22Mil'nikov, G. V.学振外国人招へい研究者 '99.3.1 ~ '99.12.31

分子基礎理論第三研究部門(客員研究部門)

池 田 研 介 教 授(立命館大理工)

季 村 峯 生 助教授(山口大医療技術短期大学部)

天 能 精一郎 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

Sethia, A. 非常勤研究員

桑 原 真 人 非常勤研究員

Kovalenko, A. F. リサーチ・アソシエイト

小 川 卓 広 学振特別研究員

秋 山 良 学振特別研究員

道 康 学振特別研究員 森

#### 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

学振外国人特別研究員 '96.3.28 ~ '97.1.27 , '97.2.22 ~ '98.8.21 Ahmad, I. K.

Whitham, C. J. 特別協力研究員 '98.10.22 ~ '99.2.21

#### 分子構造学第二研究部門(客員研究部門)

谷 本 光 敏 教 授(静岡大理)

鍔 木 基 成 助教授(姫路工業大理)

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

毅 非常勤研究員 内田

齋 藤 有 紀 非常勤研究員

文部省外国人研究員 '98.1.8 ~ '98.7.7 Varotsis, C. A.

Kim, Y. 文部省外国人研究員 '98.6.19 ~ '98.8.18 , '98.12.20 ~ '99.2.19

Proniewicz, L. M. 文部省外国人研究員 '98.12.1 ~ '99.3.31 Kruglik, S. G. 学振外国人特別研究員 '97.3.19 ~ '98.7.18 Maiti, N. C. 学振外国人特別研究員 '98.1.31 ~ '00.1.30

Hu, Y. 学振外国人特別研究員 '98.11.15 ~ '00.11.14

#### 電子構造研究系 研究主幹(併) 西 信之

#### 基礎電子化学研究部門

西 信之教授

渡邊一也助手

中林孝和助手

穴 澤 俊 久 学振特別研究員

#### 電子状態動力学研究部門

藤井正明教授

鈴 木 俊 法 助教授

高口博志助手

酒 井 誠 助 手

利 非常勤研究員 王

Mo, Y. X. 学振外国人特別研究員 '97.3.27 ~ '99.3.26

#### 電子構造研究部門(客員研究部門)

松 本 吉 茶 教 授(総研大)

高 柳 正 夫 助教授(東京農工大大学院生物システム応用科学)

井 口 佳 哉 助 手

#### 分子エネルギー変換研究部門(外国人客員研究部門)

Munro, I. H. 教 授 (イギリス ダレスベリ研究所副所長) '97.10.4 ~ '98.8.18

Tembe, B. L. 教 授 (インド インド工科大学準教授) '98.12.1 ~ '99.3.31

Wójcik, M. J. 助教授 (ポーランド ヤジロニアン大学教授) '97.12.12 ~ '98.12.14

Bu, Xian-He 助教授(中国 南開大学教授) '98.12.15 ~ '99.6.14

#### 分子集団研究系 研究主幹(併) 藥 師 久 彌

#### 物性化学研究部門

藥師久彌教授

中 村 敏 和 助教授

中澤康浩助手

Maksimuk, M. Y. 非常勤研究員

Simonyan, M. 文部省外国人研究員 '98.6.11 ~ '99.6.10

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

安 達 隆 文 非常勤研究員

Narymbetov, B. Z. 学振外国人特別研究員 '98.4.1 ~ '00.3.31

#### 分子集団研究部門(客員研究部門)

野 上 隆 教 授(電通大電気通信)

武 田 定 助教授(群馬大工)

長谷川 真 史 助 手

#### 相関領域研究系 研究主幹(併) 渡 辺 芳 人

#### 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

熊 谷 等 非常勤研究員

速 水 真 也 非常勤研究員

松 井 敏 高 学振特別研究員

Roach, M. P. 学振外国人特別研究員 '97.11.2 ~ '99.11.1

#### 相関分子科学第二研究部門(客員研究部門)

荒 川 一 郎 教 授(学習院大理)

御 崎 洋 二 助教授(京大大学院工)

小 江 誠 司 助手

#### 分子クラスター研究部門(流動研究部門)

三 好 永 作 教 授

田中桂一 助教授

長 門 研 吉 助教授

原田賢介助手

Tapas, K. G. 非常勤研究員

溝 口 麻 雄 非常勤研究員

Bailleux, S. 学振外国人特別研究員 '98.4.1 ~ '00.3.20 Belov, S. 学振外国人招へい研究者 '99.1.30 ~ '99.3.30

#### 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 肋教授

高 田 恭 孝 助手

竹 内 佐 年 助 手

Ågren, H. A. 文部省外国人研究員 '98.11.3 ~ '99.1.31

Sarkar, N. 学振外国人特別研究員 '98.3.21 ~ '98.6.30

Arzhantsev, S. Y. 学振外国人特別研究員 '98.11.27 ~ '00.11.26

藤 野 竜 也 特別協力研究員

#### 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

水 谷 雅 一 助手

宮 前 孝 行 非常勤研究員

### 界面分子科学研究部門(流動研究部門)

上 野 信 雄 教 授

櫻井 誠 助教授

松本益明助手

野々垣 陽 一 助 手

#### 極端紫外光研究部門(外国人客員研究部門)

Lisy, J. M. 教 授(アメリカ イリノイ大学教授) '98.4.1 ~ '98.8.27

教 授(インド インド科学研究所準教授) '98.9.1 ~ '99.2.28 Umapathy, S.

Kovalenko, A. F. 助教授(ウクライナ 凝縮系物理学研究所研究員) '97.10.4 ~ '98.7.31

Pettersson, L. G. M. 助教授(スウェーデン ストックホルム大学物理研究所講師) '98.8.1 ~ '99.1.31

#### 研究施設

電子計算機センター センター長(併) 岩 田 末 廣

青 柳 睦 助教授

助手 南部伸孝

高 見 利 也 助 手

大 野 人 侍 助手

伊藤正勝 非常勤研究員

#### 分子制御レーザー開発研究センター センター長(併) 齋 藤 修 二

分子位相制御レーザー開発研究部

佐 藤 信一郎 助教授

渡邊一雄助手

放射光同期レーザー開発研究部

猿 倉 信 彦 助教授

大 竹 秀 幸 助 手

特殊波長レーザー開発研究部

平 等 拓 範 助教授

栗村 直助手

学振外国人特別研究員 '99.3.1 ~ '01.2.28 Pavel, N. I.

#### 分子物質開発研究センター センター長(併) 小 林 速 男

#### パイ電子開発研究部

山 下 敬 郎 助教授

田中彰治助手

非常勤研究員 Zaman, M. D.

#### 融合物質開発研究部

藤 井 浩 助教授

船橋靖博助手

#### 機能探索研究部

永 田 央 助教授

桑原大介助手

伊藤 肇 助 手

#### 分子配列制御研究部

鈴 木 敏 泰 助教授

阪 元 洋 一 助 手

#### 装置開発室 室長(併) 北 川 禎 三

渡 邉 三千雄 助教授

浅 香 修 治 助 手

#### 極端紫外光実験施設 施設長(併) 小 杉 信 博

鎌 田 雅 夫 助教授

木 下 豊 彦 助教授(併)(東大物性研)

広 幸 助教授 濱

田中 均 助教授(理化研)

田 中 慎一郎 助 手

保坂将人助手

下 條 竜 夫 助 手

江 田 茂 助 手

More, S. D. 学振外国人特別研究員 '98.10.14 ~ '00.10.13

#### 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)

西田雄三教授

小澤智宏助手

川口博之助手

#### 錯体触媒研究部門

塩 谷 光 彦 教 授

櫻井 弘 教 授(京都薬科大)

溝 部 裕 司 助教授(東大生産技術研)

田 中 健太郎 助 手

Bu, X.-H. 特別協力研究員 '98.5.1 ~ '98.12.14

#### 錯体物性研究部門

田中晃二教授

藤田 誠 助教授

拓 植 清 志 助 手

楠 川 隆 博 助 手

杉 本 秀 樹 非常勤研究員

高 橋 雅 樹 学振特別研究員

Yu, Shu-Yan 学振外国人特別研究員 '97.9.1 ~ '99.8.31

Biradha, K. 学振外国人特別研究員 '98.9.1 ~ '00.8.31

#### 配位結合研究部門(客員研究部門)

足 立 吟 也 教 授(阪大大学院工)

飛 田 博 実 助教授(東北大大学院理)

#### 技術課 課長酒井楠雄

第1技術班 班 長 松 戸

#### 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

小 林 かおり 技 官

技 官 長 友 重 紀

#### 電子構造研究系技術係

係 長 木 下 敏 夫

技 官 片 柳 英 樹

### 第2技術班 班 長 西 本 史 雄

#### 分子集団研究系技術係

今 枝 健 一 係 長

技 官 賣 市 幹 大

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

 係
 長
 水
 谷
 伸
 雄

 技
 官
 永
 園
 充

 技
 官
 足
 立
 純
 一

#### 第3技術班

#### 電子計算機技術係

 主任
 水 谷 文 保

 技官
 寿 島 史 綱

 技官
 南 野 智

 技官
 内 藤 茂 樹

#### 装置開発技術係

 係
 長
 会
 井
 北
 功
 出
 光
 功
 別
 上
 上
 上
 大
 大
 大
 五
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上
 上

#### 第4技術班 班 長 山 中 孝 弥

分子制御レーザー開発技術係

#### 極端紫外光実験技術係

 係
 長
 蓮
 本
 美

 主
 任
 山
 崎
 潤一郎

 技
 官
 近
 藤
 直
 範

 技
 官
 林
 憲
 志

#### 第5技術班 班 長 加 藤 清 則

#### 分子物質開発技術第一係

 係
 長
 永
 田
 正
 明

 技
 官
 戸
 村
 正
 章

 技
 官
 野
 村
 幸
 代

#### 分子物質開発技術第二係

係長吉田久史主任高山敬史技官酒井雅弘

#### 錯体化学実験技術係

技 官 水川 哲 徳

- \* 整理日付は1999年3月1日現在。ただし,外国人研究者で1998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(1999年1月1日現在)

### (1) 専任研究部門等

職名区分	所長	教 授	助教授	助手	技官	非常勤研究員*
就任者数	4	30	54	157	128	99
転出者数	3	13	28	108	88	79
現 員	1	17	26	49	40	20

<sup>\*</sup>非常勤研究員 = IMSフェロー

( )は併任で外数。

### (2) 流動研究部門

部門名	部門名 錯体合成研究部門				界面分子科学研究部門			
職名区分	教 授	助教授	助手	教 授	助教授	助手		
就任者数	8	8	18	4	5	9		
転出者数	7	8	16	3	4	7		
現 員	1	0	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			
職名区分	教 授	助教授	助手	教 授	助教授	助手	
就任者数	2	3	3	1	4	4	
転出者数	1	1	2	1	4	4	
現員	1	2	1	-	-	-	

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

職名区分	教授	助教授
就任者数	81	92
現 員	7	8

### (4) 外国人客員研究部門

区 分	教 授	助教授
分子エネルギー変換機構研究部門	18	16
極端紫外光研究部門	17	13

### 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 、分子シミュレーションによるタンパク質の立体構造予測及び折り畳みに関する研究

#### 分子基礎理論第二研究部門

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

研究課題 1 、化学反応諸過程の動力学に関する理論的研究

- 2 原子分子過程における電子状態遷移の理論的研究
- 3 凝縮系における分子の光学過程に関する理論的研究
- 4 凝縮系における電子的励起の緩和と伝播の理論的研究

#### 分子基礎理論第三研究部門(客員)

非線形力学と散乱現象の理論的研究 研究目的

研究課題 1 金属微粒子における自発的合金化のシミュレーションによる研究

- 2 ,自発的な状態間遷移とカオス的遍歴
- 3 ,電子及び陽電子 多原子分子散乱過程の比較論的理論研究
- 4,イオン及び原子 固体表面散乱による表面フォノン生成,消滅過程,そしてそのエネルギー散逸 過程の理論的研究

#### 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

1 ,溶液中の平衡・非平衡過程に関する統計力学的研究 研究課題

- 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 ,固体 液体界面の統計力学的研究
- 5 、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
- 6 ,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

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 研究課題

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)

1 ,短寿命分子の高感度高分解能分光 研究目的

2 ,呼吸系末端酸化酵素の構造と機能

研究課題 1、含遷移金属短寿命分子の回転スペクトルと分子構造の研究

2 キノールオキシデースのヘム近傍構造の解明

#### 分子動力学研究部門

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 研究目的

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 分子および分子集合系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

を解明するとともに,これを応用する研究を行う。

#### 基礎電子化学研究部門

分子の励起状態の研究及びその化学反応,エネルギー変換、電荷輸送制御などへの応用 研究目的

研究課題 1,分子間相互作用および化学反応や電荷輸送過程の分子クラスターレベルでの研究

2 ,固体表面でのレーザー誘起化学反応と表面電子状態の研究

#### 電子状態動力学研究部門

研究目的 励起分子の構造、化学反応、及びこれに伴う緩和の素過程を明らかにする

研究課題 1 ,励起分子の構造及び緩和過程に関する研究

2 ,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おける分子間相互作用の研究

研究課題 1 ,励起分子の動的挙動の研究

2 ,分子間相互作用の分子構造や化学反応への影響

#### 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 放射光励起表面反応の走査型トンネル顕微鏡によるその場観察

2 分子性溶液中のイオン拡散

3 プロトントンネルの理論的研究

4 、金属錯体によるDNAの構造・機能制御

#### 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 ,分子性導体の機能探査と電子構造の研究

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 分子集合体の物性機能発現と凝縮系の動的物性の研究

研究課題 1 ,有機磁性金属 , 超伝導体の開発と物性研究

2 ,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

#### 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

1 .金属酵素及び合成モデル系の構造と機能の解明 研究課題

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

1 ,原子・分子・クラスターの電子状態に対する理論的研究 研究課題

2 ,分子クラスターの分子間大振幅振動遷移の直接観測

3 対流圏大気中におけるクラスターイオン生成過程の研究

#### 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創製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

3 ,超高速分光による分子ダイナミクスの研究

#### 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 ,気相における光イオン化及び光解離のダイナミックス
- 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 ,極端紫外光反応を用いた表面ナノ構造の形成とその物性の研究

#### 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 放射光プロセスを用いたナノ加工とフォトニック結晶の製作

- 2 シンクロトロン放射光を用いた光化学素過程とサイトスペシフィック効果
- 3 ,放射光励起光電子分光法による表面・界面電子状態の研究
- 4 .小形放射光装置とウィグラーの開発

#### 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 ,固体表面に接触する会合性液体の微視的構造に関する統計力学的研究

- 2 ,水素結合クラスターイオンの分光学的及び動力学的研究
- 3 キノン誘導体の共鳴ラマンスペクトル
- 4 , 遷移金属化合物の内殻励起の量子化学

#### 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 ,大規模電子状態計算の手法の開発とその応用

#### 分子制御レーザー開発研究センター

研究目的 分子科学の今後の発展のために、分子科学の研究手段としてふさわしい、市販にはない新しい レーザーシステムを開発し、新しい分野の開拓を目指す。

研究課題 1,分子指紋領域ピコ秒フェムト秒レーザーシステムの開発とそれを用いた分子小集団系の反応制御

- 2 ,放射光に完全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応用
- 3 ,赤外パルスレーザーシステムの開発とそれを用いた時間分解振動分光

#### 分子物質開発研究センタ -

新たな機能を有する分子の設計、開発および評価に関する研究 研究目的

研究課題 1 ,新規な 電子ドナ - およびアクセプタ - 分子に基づく有機導電体の開発研究

- 2 ,酵素の構造と機能発現および人工酵素の分子設計の研究
- 3 ,水素引き抜き反応による炭化水素類の物質変換の研究
- 4 ,有機分子性結晶の高圧構造と金属化の研究

#### 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 ,超高真空用油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

シンクロトロン放射による極端紫外光源の研究・開発とこれを用いた分子科学の研究 研究目的

研究課題 1 .極端紫外光源の研究・開発

2.極端紫外用観測システムの開発と気体及び固体の分光学的研究

#### 錯体化学実験施設

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)

新しい構造や特異な機能を有する金属錯体の合成ならびに機能発現 研究目的

研究課題 1 ,金属錯体による酸素分子の活性化の機構解明

2 ,神経性疾患と金属イオンとの関連性

### 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

技術課は所長に直属した組織として、現在6研究系及び6付属研究施設に配属された技官によって構成されている。文 部省教室系技官が組織化されたのは、1975年に創設された分子科学研究所技術課が最初で、単に技官の身分、給与の待 遇改善だけを目的としたのではなく,強力な研究支援体制が確立されることを期待して制度化されたのである。各々の 技官は,配属された部署の教官の指示のもとに業務を行うが,技官が部署の枠の中にとじこもってしまうと,本人の技 術向上の障害になるばかりでなく,大きな研究支援体制がとれなくなる。技術課の役割はこのような垣根を取り外し,技 官の技術向上のための環境を作ると伴に、技官組織を有効に活用して、広く分子科学の研究支援を行うことである。

平成 10 年度現在,技術課技官の定員は44人で,研究系に配属された技官を研究系技官,研究施設に配属された技 官を施設系技官と称しているが、携わる研究支援業務の内容は大きく異なる。研究系技官は、教官と密に協力して毎 日の研究を進めるために高い専門知識が要求される。また、その仕事を行っているうちに学位を取得し教官として転 出していく者が大部分である。施設系技官は,機械工作,電子計算機,回路工作,ガラス工作,化学分析など特別の 技術を持つ者や、レーザーシステム、ヘリウム液化機、放射光加速器など特別な装置を運転できる能力を持つ者など であり、転出先については、それぞれの技術や能力を必要とする大学や研究所の施設に限られている。日常の努力の 方向も両者で全く異なるため物事の考え方などにおいても差異がある。それぞれの特徴を十分に生かした技術課の運 営が望まれ、平成7年度から概算要求書に「技術課の整備」として、現在の1課制から2課制にすることを要求している。

表 1 年齢構成

施設系技官				研究系	ī 技官	
		57				
		56				
		55				
		54				
		53				
		52				
		51				
		50				
		49				
		48				
		47				
		46				
		45				
		44				
		43				
		42				
		41				
		40				
		39				
		38				
		37				
		36				
		35				
		34				
		33				
		32				
		31				
		30				
		29				
		28				
		27				
		年齢				
4 3 2	1		1	2	3	4
人数				人	数	

表 2 勤続年数

施設系	技官				研究系	核技官	
			21				
			20				
			19				
			18				
			17				
			16				
			15				
			14				
			13				
			12				
			11				
			10				
			9				
			8				
			7				
			6				
			5				
			4				
			3				
			2				
			1				
			0				
			年数				
4 3	2	1		1	2	3	4
人	数				人	数	

分子科学研究所教官の流動性が高いことは,所外からも高く評価されている。技官の流動性は,研究系技官は高い が,施設系技官はあまり高くない。表1に研究系技官と施設系技官の年齢構成を,表2に技術課での勤続年数を示す。 人事の流動は組織活性化のための重要な要因である。技術課は発足時より常にこの問題を考慮してきた。特に施設系 技官の活性化のために,次のような活動を行ってきている。

### 2-7-1 技術研究会

施設系技官が他の大学,研究所の技官と技術的交流を行うことにより,技官相互の技術向上に繋がることを期待し, 昭和50年度,分子研技術課が他の大学,研究所の技官を招き,第1回技術研究会を開催した。内容は日常業務の中で 生じたいろいろな技術的問題や仕事の成果を発表し,互いに意見交換を行うものである。その後,毎年分子研でこの 研究会を開催してきたが、参加機関が全国的規模に広がり、参加人員も300人を超えるようになった。そこで、昭和 57年度より同じ大学共同利用機関の高エネルギー物理学研究所(現,高エネルギー加速器研究機構),名古屋大学プラ ズマ研究所(現,核融合科学研究所)で持ち回り開催することになり現在に至っている。表3に今までの技術研究会 開催場所及び経緯を示す。

### 表 3 技術研究会開催機関

総称200 分子科学研究所	年度	開催機関	開催日	分科会	備考	
昭和51 分子科学研究所	昭和50	分子科学研究所	昭和50年2月26日	機械	名大(理)(工)のみ	
報和51年2月   模様 (回路) 名大江口部談析   報和51年2月   模様 (回路) 名大丁与研密技術   報知55年2月   模様 (回路) 名大丁与研密技術   公子科学研究所   昭和53年6月2日   模様 (回路)   名大丁与研密技術   公子科学研究所   昭和53年6月2日   模様 (回路)   名大丁与研密技術   公子科学研究所   昭和53年6月2日   模様 (回路)   公子科学研究所   昭和55年2月   模様 (回路)   電子計算機   電子計算機   電子計算機   電子計算機   電子計算機   位温分科会を創設   公子科学研究所   昭和55年2月   模様 (回路) 電子計算機   位温分科会を創設   公子科学研究所   昭和55年2月   模様 (回路) 電子計算機   位温分科会を創設   技術部長 内田 童   公子科学研究所   昭和55年2月   模様 (回路) 電子計算機   位温分科会を創設   技術部長 内田 童   公子科学研究所   昭和56年1月30日   模様 (回路) 電子計算機 (位温   技術部長 内田 童   公子科学研究所   昭和56年1月30日   模様 (回路) 電子計算機 (位温   技術部長 内田 童   公子科学研究所   昭和56年3月30日   模様 (回路) 電子計算機 (位温   技術部長 内田 童   公子科学研究所   昭和56年3月30日   模様 (回路) 電子計算機 (位温   技術部長 内田 童   公子科学研究所   昭和56年3月30日   模様 (回路) 電子計算機 (位温   技術部長 馬帽 斉 3 研究機関対ち回り開始が始まる   電本2・デラブマ研究所   昭和56年3月39-20日   模様 (回路) 電子計算機 (位温   電子研究所   平成4年3月19-20日   模様 (位温   電子計算機 (位温   電子計算機 (位温   電子研究所 (定3・研究所)   電の4年3月19-20日   模様 (位温   電子計算機 (位温   電子研究所) (電子研究所)   電の4年3月19-20日   模様 (位温   電子計算機 (位温   電子計算機 (位温   電子計算機 (位温   電子研究所) (定3・研究所) (定3・研究所) (信用 (位温   電子計算機 (位温   電子研究所) (定3・研究所) (定3・研究所) (信用 (位温   電子計算機 (位温   電子研究所) (定3・研究所) (信息 (位温   電子研究所) (信息 (位温	昭和51	公子科学研究所	昭和50年7月20日	機械	学習院大など参加	
照和53年2月 機械、(回路) 名大ブラ研図館技術		刀丁件子饼光川	昭和51年2月	機械、(回路)	名大(工)回路技術	
昭和55年6月2日   機成、回路   会大力子研阅验技術   会大力子研阅验技術   公和55年6月2日   機成、回路   分科4字研究所   昭和55年6月2日   機械、回路、電子計算機   電子計算機関連の分科会を創設   分子科字研究所   昭和55年6月19日   機械   回路、電子計算機   電子計算機関連の分科会を創設   分子科字研究所   昭和55年6月19日   機械   回路、電子計算機   電子計算機関連の分科会を創設   分子科字研究所   昭和55年7月   機械   回路、電子計算機   低温   技術部長   内田 量   分子科学研究所   昭和55年7月30日   機械   四路、電子計算機   低温   技術部長   内田 量   分子科学研究所   昭和55年7月71-18日   機械   ガラス・セラミック   化温度   大学連長   藤若   節世   日本   日本   日本   日本   日本   日本   日本   日	昭和52	公子科学研究所	昭和52年7月	機械	都城工専など参加	
昭和55   日本   日本   日本   日本   日本   日本   日本		73 3 11 <del>3 W</del> 176171	昭和53年2月	機械、(回路)	名大プラ研回路技術	
昭和54年7月   現底   現底   現底   現底   の間。電子計算機   電子計算機関連の分科会を創設   電子計算機関連の分科会を創設   電子計算機   電子計算機   電子計算機   電子計算機   電子計算機   電子計算機   電和55年1月9日   根域   例子科学研究所   昭和56年1月30日   根域   の路。電子計算機   低温   技術部長   内田 童   分子科学研究所   昭和56年1月30日   根域   回路。電子計算機   低温   技術部長   内田 童   分子科学研究所   昭和56年1月30日   根域   回路。電子計算機   低温   技術部長   内田 童   方子科学研究所   昭和56年7月   根域   回路。電子計算機   低温   技術部長   馬場 育 3 研究機関が合こり   現本の   日和58年3月17-18日   根域   回路。電子計算機   低温   技術部長   馬場 育 3 研究機関が始まる   日和58年3月17-18日   根域   回路。電子計算機   低温   支持部基   支持部   大阪   大阪   支持部   支持部   支持部   支持部   大阪   大阪   大阪   大阪   大阪   大阪   大阪   大	昭和53	分子科学研究所	昭和53年6月2日	機械、回路		
昭和54   一級		高エネルギー物理学研究所	昭和53年10月27日	機械技術		
分子科学研究所   昭和55年2月   機械   回路、電子計算機   低温   分子科学研究所   昭和56年1月30日   機械   回路、電子計算機   低温   技術部長   内田 量   分子科学研究所   昭和56年1月30日   機械   回路、電子計算機   低温   技術部長   内田 量   分子科学研究所   昭和56年1月30日   機械   回路、電子計算機   低温   技術部長   内田 量   技術部長   内田 量   分子科学研究所   昭和56年1月30日   機械   回路、電子計算機   低温   技術部長   内田 量   技術部長   内田 量   技術部長   内田 量   大野藤   内田 量   大野藤   大野藤   内田 量   大野藤   大野		分子科学研究所	昭和54年7月	機械、回路、電子計算機	電子計算機関連の分科会を創設	
照和555 分子科学研究所 昭和55年10月24日 機械 四路、電子計算機、低温 技術部長 内田 童 分子科学研究所 昭和56年1月30日 機械 回路、電子計算機、低温 技術部長 内田 童 分子科学研究所 昭和56年1月30日 機械 回路、電子計算機、低温 技術部長 馬場 斉 3研究機関持ち回り開催が始まる 昭和56年1月30日 機械 回路、電子計算機、低温 技術部長 馬場 斉 3研究機関持ち回り開催が始まる 昭和56年 3 研究機関持ち回り開催が始まる 昭和56年 3 研究機関持ち回り開催が始まる 日本 2 大子学研究所 昭和56年 3月17-18日 機械 回路、電子計算機、低温 技術部長 馬場 斉 3研究機関持ち回り開催が始まる 1 大子学研究所 昭和56年 3月19-20日 機械 ブラスとラミック、低温回路、電子計算機 装置技術 大学研究所 昭和66年 3月19-20日 機械 三工・ルギー物理学研究所 昭和66年 3月19-20日 機械 回路、電子計算機 装置技術 日本 1 大術部長 田口 博司 日本 1 大術部長 田口 東京 1 大術部長 三面 月 1 大術部長 三面 1 大術が所開酵協会 化学分析を創設 日本 1 大術部子 1 大術部長 三面 月 1 大術部子 1 大術部長 三面 月 1 大術部子 1 大術部長 1 大術部を設全 化学分析を創設 日本 1 大術・アク処理 日本 1 大術部長 1 大術部 1 大術部長 1 大術部を設全 化学分析を創設 日本 1 大術・アク処理 1 大術・アク処理 1 大術・アク処理 1 大術・アク処理 1 大術・アク処理 1 大術・アク処理 1 大術・アクル 1 大術・アクル 1 大術部長 1 大術部長 1 大術部 1 大術部長 1 大術部長 1 大術部長 1 大術部長 1 大術部 1 大術部長 1 大術部	昭和54	高エネルギー物理学研究所	昭和54年10月19日	機械		
昭和55   分子科学研究所   昭和56年1月30日   機械 回路、電子計算機、低温   低温分科会を創設 技術課長   内田 電		分子科学研究所	昭和55年2月	機械、回路、電子計算機		
照和6年1月30日 機械。回路、電子計算機、低温 技術課長 内田 章 分子科学研究所 昭和56年1月30日 機械 回路、電子計算機、低温 技術課長 内田 章 分子科学研究所 昭和56年1月30日 機械 四路、電子計算機、低温 技術部長 馬場 3 研究機関持ち回り開催が始まる 昭和56年1月30日 機械 回路、電子計算機、低温 技術部長 馬場 3 研究機関持ち回り開催が始まる 昭和56年 3月19-20日 機械 がラスセラミック、低温回路、電子計算機、装置 技術部長 配口 博司 超和67年 3月19-20日 機械 がラスセラミック、低温回路、電子計算機、装置 技術部長 山口 博司 超和67年 3月19-20日 機械 がラスセラミック、低温回路、電子計算機、装置 技術部長 山口 博司 超和67年 3月19-20日 機械 回路、電子計算機、装置 技術部長 山口 博司 移列を呼称の所 昭和62年 3月19-20日 機械 回路、電子計算機、装置 技術部長 山口 博司 移列を呼称の所 昭和62年 3月19-20日 機械 回路、電子計算機、装置 技術部長 回路 電子計算機、装置 技術部長 回路 電子計算機、装置 技術 (福温、電子計算機、装置 技術部長 阿部 賈 平成元年 3月29-20日 機械 回路、低温、電子計算機、装置 技術部長 阿部 賈 平成元年 3月29-20日 機械 回路、低温、電子計算機、装置 技術部長 阿部 賈 平成3年 3月19-20日 機械 (福温、電子計算機、装置 技術部長 阿部 賈 平成3年 3月19-20日 機械 (福温、計測制御、電子計算機、装置 技術 (福温、計測制御、電子計算機、装置 技術 (福温、計測制御、電子計算機、装置 大阪・アの6 高エネルギー物理学研究所 平成6年 3月23-24日 機械 (福温、計測制御、電子計算機、装置 新売機長 村井 勝治 研究所開討論会 大阪・学科学研究所 平成6年 3月23-24日 機械 (福温、計測制御、電子計算機、装置 大府部院長 三国 男 研究所開討論会 大学科学研究所 平成8年 3月18-19日 分析 平成8年 3月18-19日 分析 平成8年 3月18-19日 機器分析 日立 東京年 中成9年 2月6-7日 装置 所集 8月 9月 9月 11-12日 機器分析 日立 中成9年 2月6-7日 装置 1月 4-15日 機器分析 日立 大阪・学座業科学研究所 平成9年 2月6-7日 装置 1月 4-15日 機器分析 平成9年 2月6-7日 装置 1月 4-15日 機器分析 平成9年 2月6-7日 接続 20路、計測・制御、装置・回路 計算機、データ処理 研究所問討論会 化学分析を創設 計測・制御、装置・回路 計算機、データ処理 研究所 中成9年 2月2-28日 機器分析 日立 1月2-28日 機器分析 日技術部の共催 平成11年 11月2-28日 機器 3分析 百法 11年 11年 11年 機器 3分析 百法 11年 11年 11年 11年 11日 機器 3分析 百法 11年 11年 11年 11年 11年 11年 11年 11年 11年 11		高エネルギー物理学研究所	昭和55年10月24日	機械		
照和56 高エネルギー物理学研究所 昭和56年1月30日 機械 四路、電子計算機、低温 技術部長 馬場 斉 3研究機関持ち回り開催が始まる 昭和56 分子科学研究所 昭和59年3月19-20日 機械、回路、電子計算機、低温 実行委員長 勝若 節也 子計算機、計測制御、電子計算機、低温 実行委員長 酒井 楠雄 3研究所間討論会 投験合科学研究所 平成5年3月19-20日 機械、回路、電子計算機、低温 実行委員長 高工ネルギー物理学研究所 昭和62年3月19-20日 機械、回路、電子計算機、低温 東行委員長 勝若 節也 子計算機、装置技術 部間62 名古屋大学ブラズマ研究所 昭和62年3月19-20日 機械、回路、電子計算機、大面 2ヶ所の第二章 大阪市の第二章 大阪市の第二章 大阪所間診論会 2ヶ所で懇談会 第二本ルギー物理学研究所 平成3年3月23-24日 機械、回路、電子計算機、装置技術 機械 計測制御、低温、電子計算機、装置技術 機械 計測制御、電子計算機、装置技術 機械 計測制御、電子計算機、装置技術 で現 3 研究解码第二章 14 大阪 1 大	昭和55	分子科学研究所	昭和56年1月30日	機械、回路、電子計算機、低温		
岡和エルドー物理学研究所   昭和56年3月17-18日   機械   回路、電子計算機、低温   技術部長   馬埠 育 3 研究機関持ち回り開催が始まる   昭和59年3月19-20日   機械   回路、電子計算機、低温   表研究機関持ち回り開催が始まる   昭和69年3月19-20日   機械   回路、電子計算機、低温   東行委員長   藤市   東北   東北   東京   東京   東京   東京   東京   東京	昭和56	分子科学研究所	昭和56年7月	機械、回路、電子計算機、低温		
昭和50年   日本17-17-18   日本18-18-19   17-18   日本18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-18   18-	ндуноо	高エネルギー物理学研究所	昭和56年1月30日	機械		
昭和59 名古屋大学プラズマ研究所 昭和59年11月15-16日   機械、ガラス・セラミック、低温回路、電 実行委員長 藤若 節也   機械、ガラス・セラミック、低温回路、電 実行委員長 藤若 節也   機械、計測制御、低温、電子計算機、装置 技術部長 山口 博司   機械 回路、電子計算機、装置 技術部長 山口 博司   機械 回路には 分子科学研究所   昭和62年3月19-20日   機械 回路、低温、電子計算機、装置 技術部長 山口 博司   機械 回路、電子計算機、装置 技術部長 山口 博司   日本の元   公子科学研究所   昭和63   第二ネルギー物理学研究所   平成元年3月23-24日   機械、自路、低温、電子計算機、装置   技術部長 阿部 實   技術部長 阿部 實   大阪行部発所   平成2年3月19-20日   機械、信温、計測制御、電子計算機、装置   技術部長 阿部 實   機械、信温、計測制御、電子計算機、装置   技術部長 阿部 實   機械、低温、計測制御、電子計算機、装置   大阪が総合科学研究所   平成4年2月6-7日   機械、低温、計測制御、電子計算機、装置   大阪が総合科学研究所   平成5年3月11-12日   装置   、	昭和57	高エネルギー物理学研究所	昭和58年3月17-18日	機械、回路、電子計算機、低温		
昭和69 高エネルギー物理学研究所 昭和61年3月19-20日 機械、計測制御、低温、電子計算機、装置 技術部長 山口 博司 技術部長 山口 博司 分子科学研究所 昭和62年3月19-20日 機械、回路、電子計算機、装置技術 昭和63年3月29-24日 機械、回路、低温、電子計算機、装置 技術部長 阿郎 實 平成元 分子科学研究所 平成2年3月19-20日 機械、回路、低温、電子計算機、装置 技術部長 阿郎 實 2 ヶ所で懇談会	昭和58	分子科学研究所	昭和59年3月2-3日	機械、回路、電子計算機、低温		
照和10 高エネルギー物理学研究所 昭和10年3月19-20日 技術 短和10年3月19-20日 機械、回路、電子計算機、低温 技術部長 田田 博司 知10年3月19-20日 機械、回路、低温、電子計算機、装置技術 技術部長 阿部 實 技術 ア成元年3月23-24日 機械、回路、低温、電子計算機、装置 技術部長 阿部 實 技術 分子科学研究所 平成3年3月19-20日 機械、回路、低温、電子計算機、装置 技術 中成3年3月19-20日 技術 平成3年3月19-20日 投稿、[温、電子計算機、総合技術 2 ヶ所で懇談会 機械合料学研究所 平成4年2月6-7日 機械、[温、計測制御、電子計算機、装置 技術部長 阿部 實 技術 の子科学研究所 平成6年3月11-12日 装置 長輩 「大阪大学研究所 平成6年3月23-24日 技術 (低温、計測制御、電子計算機、装置 技術部長 阿邦 中成6年3月23-24日 投稿 (低温、計測制御、電子計算機、装置 技術部長 村井 勝治 研究所間が協会 研究所間が協会 研究所 平成6年3月23-24日 投稿 (低温、計測制御、電子計算機、装置 技術部長 三国 現研究所間が協会 研究所間が協会 研究所間が協会 研究所間が協会 研究所間が協会 大阪大学研究所 平成8年3月18-19日 投稿 (四路、計測制御、電子計算機、化学 技術部長 三国 現研究所間が協会 大阪大学研究所 平成8年3月18-19日 投稿 (四路、計測制御、電子計算機、化学 技術部長 三国 現研究所間が協会 ボールギー物理学研究所 平成8年3月18-19日 投稿 (四路、計測制御、電子計算機、化学 技術部長 三国 現研究所間が協会 大阪大学研究所 平成8年3月18-19日 投稿 (四路、計測制御、電子計算機、化学分析を創設 大阪大学産業科学研究所 平成8年11月14-16日 機器分析 名古屋大学理学部 平成9年2月27-28日 機器分析 名古屋大学理学部 平成9年2月27-28日 機器分析 名古屋大学理学部 平成9年2月27-28日 機器分析 日技術部の共催 平成9年3月11-12日 機械 (回路、低温、電子計算機、装置技術 工学部、情報学部、電子工学研究所 各技術部の共催 平成11年3月4-5日 機器・分析 日技術部の共催 平成11年3月4-5日 機器・分析 日技術部の共催 平成11年3月4-5日 機器・分析 日技術部の共催 平成11年3月4-5日 機器・分析 日本は11年3月4-5日 機器・分析 日本は11年3月4-5日 機器・分析 日本は11年3月4-5日 東北大学 平成11年3月4-5日 標路・分析 日本は11年3月4-5日 東北大学 平成11年3月4-5日 機器・分析 日本は11年3月4-5日 東北大学 平成11年3月4-5日 機器・分析 日本は11年3月4-5日 機器・分析 日本は11年3月4-5日 東北大学 平成11年3月4-5日 機器・分析 日本は11年3月4-5日 東北大学 平成11年3月4-5日 機器・分析 日本は11年3月4-5日 東北大学 平成11年3月4-5日 機器・分析 日本は11年3月4-5日 東北大学 平成11年3月4-5日 機器・分析 日本は11年3月4-5日 機器・大学 平成11年3月4-5日 東北大学 平成4年3月4-5日 東北大学 平成41年3月4-5日 東北大学 平成41年3月4-4日 東北大学 東北大学 平成41年3月4-4日 東北大学 平成41	昭和59	名古屋大学プラズマ研究所	昭和59年11月15-16日	子計算機、装置技術	実行委員長 藤若 節也	
昭和02         名古屋大学ブラズマ研究所         昭和03年3月29-30日         機械、自測制御、低温、電子計算機、装置技術           昭和03         高エネルギー物理学研究所         平成元年3月29-24日         機械、自測制御、低温、電子計算機、装置技術           平成元         分子科学研究所         平成3年3月19-20日         機械、低温、電子計算機、総合技術           平成2         核融合科学研究所         平成3年3月19-20日         機械、低温、計測制御、電子計算機、装置技術           平成3         高エネルギー物理学研究所         平成4年2月6-7日         機械、低温、計測制御、電子計算機、装置技術           平成4         分子科学研究所         平成6年3月23-24日         機械、低温、計測制御、電子計算機、装置技術部長 三国 元明究所間討論会 技術部長 三国 見研究所間討論会 技術部長 三国 見研究所間討論会 分析           平成6         高エネルギー物理学研究所         平成7年2月16-17日         機械、回路、計測制御、電子計算機、栄置技術部長 三国 見研究所間討論会 方術           平成7         今科学研究所         平成8年3月18-19日         機械、回路、計測制御、電子計算機、学 技術部長 三国 見研究所間討論会 研究所間討論会 研究所間討論会 研究所間討論会 研究所間認談会 化学分析を創設 研究所間認談会 化学分析を創設 研究所問認談会 化学分析を創設 表置技術部の力機構 のよ 低温、電子計算機、装置技術 のよ に温 電子工学研究所 と計算機、受解 のよ に温 電子工学研究所 と計算機、分析 工学部、情報学部、電子工学研究所 各技術部の共催 中成11年3月4-5日 平成11年3月4-5日 平成11年3月4-5日 平成11年3月4-5日 平成11年3月4-5日 平成11年3月4-5日 平成11年3月4-5日 平成11年1月11日 機器・分析			昭和61年3月19-20日	技術	技術部長 山口 博司	
昭和63   高エネルギー物理学研究所	昭和61					
平成元	昭和62	名古屋大学プラズマ研究所	昭和63年3月29-30日			
平成2         核融合科学研究所         平成3年3月19-20日         機械、低温、計測制御、電子計算機、装置 技術         装置 技術         機械、低温、計測制御、電子計算機、装置 技術         装置 支援         大大         工作委員長 酒井 橋雄 3研究機関代表者会議 技術         工作委員長 酒井 橋雄 3研究機関代表者会議 技術部長 村井 勝治 研究所間討論会         工作委員長 酒井 橋雄 3研究機関代表者会議 研究所間討論会         工作不動理学研究所         平成6年3月23-24日 技術         機械、低温、計測制御、電子計算機、装置 技術部長 三国 見 研究所間討論会         大校和部長 三国 見 研究所間討論会         大校和部長 三国 見 研究所間討論会         大校析課長 酒井橋雄 研究所間討論会         工学所問討論会 研究所間討論会         化学分析を創設         計測・制御、電子計算機、化学 分析 会力         化学分析を創設         計測・制御、装置・回路 計算機・データ処理         本成8年9月19-20日 計算機・データ処理         計測・制御、装置・回路 計算機・データ処理         初めての分散開催         初めての分散開催           平成8         大阪大学産業科学研究所 名古屋大学理学部 平成9年2月27-28日 静岡大学 平成9年11月27-28日 静岡大学 平成9年11月26-27日 機器・分析 名古屋工業大学 高工ネルギー加速器研究機構         平成10年11月26-27日 機器・分析 至方工学研究所 各技術部の共催         工学部、情報学部、電子工学研究所 各技術部の共催           平成10年11月26-27日 東北大学         平成10年11月26-27日 機器・分析 平成11年3月4-5日 平成11年11月11日         機器・分析         工作、低温、回路・制御、装置、計算機 平成11年11月11日	昭和63			技術		
平成3         高エネルギー物理学研究所         平成4年2月6-7日         機械、低温、計測制御、電子計算機、装置 技術           平成4         分子科学研究所         平成5年3月11-12日         装置I、装置II、低温、電子計算機         実行委員長 酒井 楠雄 3研究機関代表者会議           平成5         核融合科学研究所         平成6年3月23-24日         機械、低温、計測制御、電子計算機、装置 技術部長 村井 勝治研究所間討論会           平成6         高エネルギー物理学研究所         平成7年2月16-17日         機械、低温、計測制御、電子計算機、装置 技術部長 三国 晃 研究所間討論会           平成7         分子科学研究所         平成8年3月18-19日         機械、回路、計測制御、電子計算機、化学 技術課長 酒井楠雄研究所間討論会 研究所間影論会 化学分析を創設 計算機・データ処理           平成8         大阪大学産業科学研究所         平成8年9月19-20日         計測・制御、装置・回路計算機・データ処理           本店屋大学理学部         平成9年2月6-7日         装置開発A.B、ガラス工作           北海道大学理学部         平成9年2月6-7日         機器分析           平成9年2月27-28日         概述、回路、低温、電子計算機、装置技術           平成9年5月11-12日         機械、回路、低温、電子計算機、装置技術           平成9年2月27-28日         機器分析           本店屋工業大学         平成10年11月26-27日         機器分析           高工ネルギー加速器研究機構         平成11年3月4-5日         工作、低温、回路・制御、装置、計算機           平成11年11月11日         機器・分析	平成元	分子科学研究所	平成2年3月19-20日		2ヶ所で懇談会	
平成4         分子科学研究所         平成5年3月11-12日         装置1、装置11、低温、電子計算機         実行委員長、酒井 楠雄 3 研究機関代表者会議 3 研究機関代表者会議 3 研究機関代表者会議 3 研究機関代表者会議 3 研究機関代表者会議 3 研究機関代表者会議 技術部長 村井 勝治 研究所間討論会 投術 (低温、計測制御、電子計算機、装置 技術部長 三国 晃 研究所間討論会 2 技術部長 三国 晃 研究所間認談会 化学分析 2 技術課長 酒井楠雄 研究所問懇談会 化学分析を創設 3 計測・制御、装置・回路計算機、データ処理 2 大阪大学産業科学研究所 平成8年1月14-15日 機器分析 2 古屋大学理学部 平成9年2月6-7日 装置開発A,B、ガラス工作 1 北海道大学理学部 平成9年2月6-7日 装置開発A,B、ガラス工作 1 大海道大学理学部 平成9年9月11-12日 機械、回路、低温、電子計算機、装置技術 2 平成9年1月27-28日 機器分析 2 大阪大学産業科学研究所 2 平成9年11月27-28日 機器分析 2 大阪大学産業科学研究所 2 平成9年11月27-28日 機器分析 2 大学部、情報学部、電子工学研究所 2 大学部、情報学部、電子工学研究所 2 大学部、信報学部、電子工学研究所 2 大学部、信報学部、電子工学研究所 2 大学部、信報学部、電子工学研究所 2 大学部、信報学部、電子工学研究所 2 大学部、信報学部、電子工学研究所 2 大学部、信報学部、電子工学研究所 2 大学部、第二本ルギー加速器研究機構 2 平成10年11月26-27日 機器・分析 2 大学部、信報学部、電子工学研究所 2 大学部、信報学部、電子工学研究所 2 大学部、行政部、公司、第二本ルギー加速器研究機構 2 平成11年3月4-5日 工作、低温、回路・制御、装置、計算機 東北大学 2 平成11年11月11日 機器・分析 2 中成11年11月11日 機器・分析 3 中域11年11月11日 2 中域11年11月11日 機器・分析 3 中域11年11月11日 2 中域11年11月1日	平成2	核融合科学研究所	平成3年3月19-20日	技術		
平成5         核融合科学研究所         平成6年3月23-24日         機械、低温、計測制御、電子計算機、装置 技術部長 村井 勝治研究所間討論会 技術           平成6         高エネルギー物理学研究所         平成7年2月16-17日         機械、低温、計測制御、電子計算機、装置 技術部長 三国 晃 研究所間討論会 研究所間討論会 研究所間討論会 研究所間討論会 持統 研究所間討論会 持統 研究所間討論会 持統 研究所間認談会 化学分析を創設 持続 できる	平成3	高エネルギー物理学研究所	平成4年2月6-7日			
平成6         高エネルギー物理学研究所         平成7年2月16-17日         機械、低温、計測制御、電子計算機、装置技術部長 三国 晃研究所間討論会           平成7         分子科学研究所         平成8年3月18-19日         機械、回路、計測制御、電子計算機、化学分析を創設         技術課長 酒井楠雄研究所間懇談会 化学分析を創設           平成8         国立天文台・電気通信大学共催         平成8年9月19-20日         計測・制御、装置・回路計算機・データ処理         初めての分散開催           平成8         大阪大学産業科学研究所         平成8年11月14-15日         機器分析         初めての分散開催           名古屋大学理学部         平成9年2月6-7日         装置開発A,B、ガラス工作         北海道大学理学部         平成9年2月27-28日         低温           平成9         中域9年9月11-12日         機械、回路、低温、電子計算機、装置技術         工学部、情報学部、電子工学研究所 各技術部の共催           平成10         平成10年11月26-27日         機器・分析         工学部、情報学部、電子工学研究所 各技術部の共催           平成10年11月26-27日         機器・分析         工作、低温、回路・制御、装置、計算機 東北大学         平成11年11月11日         機器・分析	平成4	分子科学研究所	平成5年3月11-12日			
平成7         分子科学研究所         平成8年3月18-19日         機械、回路、計測制御、電子計算機、化学 技術課長 酒井楠雄 研究所間懇談会 化学分析を創設           平成8         国立天文台・電気通信大学共催 平成8年9月19-20日 計算機・データ処理         計測・制御、装置・回路計算機・データ処理         計測・制御、装置・回路計算機・データ処理         初めての分散開催           平成8         大阪大学産業科学研究所 平成9年2月6-7日 装置開発A,B、ガラス工作 北海道大学理学部 平成9年2月27-28日 低温         概温         本の9年9月11-12日 機械、回路、低温、電子計算機、装置技術 各技術部の共催           平成9         中成9年11月27-28日 機器分析 名技術部の共催         工学部、情報学部、電子工学研究所 各技術部の共催           平成10         本成10年11月26-27日 機器・分析 名古屋工業大学 平成10年11月26-27日 機器・分析 名古屋工業大学 平成10年11月26-27日 機器・分析 名技術部の共催         平成11年3月4-5日 工作、低温、回路・制御、装置、計算機 平成11年3月4-5日 世報器・分析           平成11         東北大学 平成11年11月11日 機器・分析	平成5	核融合科学研究所	平成6年3月23-24日			
平成7         分子科字研究所         平成8年3月18-19日         分析         研究所間懇談会 化学分析を創設           平成8         国立天文台・電気通信大学共催         平成8年9月19-20日         計測・制御、装置・回路計算機・データ処理         初めての分散開催           大阪大学産業科学研究所         平成8年11月14-15日         機器分析         初めての分散開催           名古屋大学理学部         平成9年2月6-7日         装置開発A,B、ガラス工作         北海道大学理学部         平成9年2月27-28日         低温           平成9年         東京の日11-12日         機械、回路、低温、電子計算機、装置技術         工学部、情報学部、電子工学研究所 各技術部の共催           平成10         平成10年11月27-28日         機器・分析         名古屋工業大学 平成10年11月26-27日 機器・分析           平成11         平成11年3月4-5日         工作、低温、回路・制御、装置、計算機           東北大学         平成11年11月11日         機器・分析	平成6	高エネルギー物理学研究所	平成7年2月16-17日			
平成8       単成8年9月19-20日       計算機・データ処理         大阪大学産業科学研究所       平成8年11月14-15日       機器分析         名古屋大学理学部       平成9年2月6-7日       装置開発A,B、ガラス工作         北海道大学理学部       平9年2月27-28日       低温         水砂       核融合科学研究所       平成9年9月11-12日       機械、回路、低温、電子計算機、装置技術         平成9       中成9年11月27-28日       機器分析       工学部、情報学部、電子工学研究所 各技術部の共催         平成10       名古屋工業大学       平成10年11月26-27日       機器・分析         平成10       平成11年3月4-5日       工作、低温、回路・制御、装置、計算機         東北大学       平成11年11月11日       機器・分析	平成7	分子科学研究所	平成8年3月18-19日	分析		
イカラ       名古屋大学理学部       平成9年2月6-7日       装置開発A,B、ガラス工作         北海道大学理学部       平9年2月27-28日       低温         水海道大学理学部       平成9年9月11-12日       機械、回路、低温、電子計算機、装置技術         平成9       中成9年11月27-28日       機器分析       工学部、情報学部、電子工学研究所 各技術部の共催         平成10       名古屋工業大学       平成10年11月26-27日       機器・分析         東成11年3月4-5日       工作、低温、回路・制御、装置、計算機         東北大学       平成11年11月11日       機器・分析		国立天文台・電気通信大学共催	平成8年9月19-20日			
北海道大学理学部	平成8	大阪大学産業科学研究所	平成8年11月14-15日	機器分析	初めての分散開催	
核融合科学研究所   平成9年9月11-12日   機械、回路、低温、電子計算機、装置技術   工学部、情報学部、電子工学研究所   各技術部の共催   名古屋工業大学   平成10年11月26-27日   機器・分析   高エネルギー加速器研究機構   平成11年3月4-5日   工作、低温、回路・制御、装置、計算機   東北大学   平成11年11月11日   機器・分析		名古屋大学理学部	平成9年2月6-7日	装置開発A,B、ガラス工作		
平成9     静岡大学     平成9年11月27-28日 機器分析     工学部、情報学部、電子工学研究所 各技術部の共催       平成10     名古屋工業大学     平成10年11月26-27日 機器・分析       高エネルギー加速器研究機構     平成11年3月4-5日 工作、低温、回路・制御、装置、計算機       東北大学     平成11年11月11日 機器・分析		北海道大学理学部	平9年2月27-28日	低温		
静岡大学   平成9年11月27-28日   機器分析   名技術部の共催   名技術部の共催   名古屋工業大学   平成10年11月26-27日   機器・分析   高エネルギー加速器研究機構   平成11年3月4-5日   工作、低温、回路・制御、装置、計算機   東北大学   平成11年11月11日   機器・分析	平成9	核融合科学研究所	平成9年9月11-12日	機械、回路、低温、電子計算機、装置技術		
平成10       高エネルギー加速器研究機構       平成11年3月4-5日       工作、低温、回路・制御、装置、計算機         東北大学       平成11年11月11日       機器・分析		静岡大学	平成9年11月27-28日	機器分析		
高エネルギー加速器研究機構   平成11年3月4-5日   工作、低温、回路・制御、装置、計算機   平成11年11月11日   機器・分析   平成11年11月11日   機器・分析	平成10	名古屋工業大学	平成10年11月26-27日	機器・分析		
平成11		高エネルギー加速器研究機構	平成11年3月4-5日	工作、低温、回路・制御、装置、計算機		
'^^-'   分子科学研究所	平成11	東北大学	平成11年11月11日	機器・分析		
75 TI WINDIN	T/JX, 1 F	分子科学研究所	平成12年3月	5 つの分科会		

#### 2-7-2 技術研修

平成7年度より,施設系技官の活性化のために,他大学,研究所の技官を一定期間,分子研の付属研究施設に受け入れ て,技術研修を行うことを試みている。分子研のような大学共同利用機関では,全国の研究者との交流が共同研究等を通 じて日常的に行われている。それが双方の研究者の活性化に大いに役立っている。同じ様なことがお互いの技官の間で行 うことができれば,技官の活性化につながるであろうことを期待して,現所長の配慮により,技術研修制度が試みられた。 これは派遣側,受け入れ側双方にとって非常に好評であった。しかしこの試みが分子研だけのもでは,その効果には限界 があり、また分子研の技官も外へ出て研修する機会を持たなければ、真の活性化にならないと考え、平成8年度に同じ大 学共同利用機関の高エネルギー物理学研究所(現,高エネルギー加速器研究機構),核融合科学研究所,国立天文台の技官 の責任者に趣旨を説明し、各研究所に技術研修のための技官受入体制を作ってもらうことを提案した。各責任者から賛同 を得て,高エネルギー加速器研究機構は平成9年度から,核融合科学研究所は平成10年度から実施されている。表4に分 子研の技術研修受入状況を示す。将来的には正式に制度化して定着をはかりたい。

表 4 技術研修受入一覧

			TT //2 HD 88	
年度	氏 名	所属	研修期間	受 入 施 設
平成7年度	石飛 義明	12. Tr	3/11/96 ~ 3/22/96	UVSOR
	内山 隆司	東京大学、低温センター	1/22/96 ~ 1/31/96	極低温センター
	佐藤 健	東北大学、理学部、物理学科	1/22/96 ~ 2/2/96	UVSOR
	千葉 裕輝	東北大学、科学計測研究所	3/11/96 ~ 3/22/96	UVSOR
	福田 武夫	国立天文台、天文機器開発実験センター	2/19/96 ~ 3/19/96	装置開発室、メカトロニクス
	渡辺 千香	東北大学、科学計測研究所	3/4/96 ~ 3/29/96	装置開発室、エレクトロニクス
	石田 晶紀	東京大学、教養学部	1/27/97 ~ 2/7/97	電子計算機センター
	岡田 則夫	国立天文台	12/16/96 ~ 12/21/96	装置開発室、メカトロニクス
	加藤 丈雄	核融合科学研究所	10/14/96 ~ 10/18/96	電子計算機センター
平	小林 和宏	名古屋大学、理学部	2/3,4,7,10,12-14,17-21, 24- 28,3/3 3/7/97	装置開発室、エレクトロニクス
	小山 幸子	東京大学、物性研究所	10/14/96 ~ 10/25/96	機器センター
成 8	小山 幸子	東京大学、物性研究所	11/18/96 ~ 11/29/96	機器センター
年	田中 伸幸	国立天文台	12/2/96 ~ 12/13/96	装置開発室、エレクトロニクス
度	千葉 裕輝	東北大学、科学計測研究所	10/27/96 ~ 11/9/96	UVSOR
	土屋 光	東京大学、低温センター	10/21/96 ~ 11/2/96	極低温センター
	橋本 清治	高エネルギー物理学研究所	1/27/97 ~ 2/7/97	電子計算機センター
	藤谷 喜照	名古屋大学工学部	12/2 ~ 6、12/9 ~ 13、 12/16 ~ 12/20/96	装置開発室、ニューマテリアル
	渡辺 千香	東北大学、科学計測研究所	1/20/97 ~ 2/1/97	装置開発室、エレクトロニクス
	大畠 洋克	高エネルギー加速器研究機構	2/2/98 ~ 2/6/98	分子物質開発研究センター
	岡田 則夫	国立天文台、天文機器開発実験センター	12/14/97 ~ 12/23/97	装置開発室、メカトロニクス
	加藤 浩司	東京大学、教養学部共通技術室	2/9/98 ~ 2/18/98	電子計算機センター
	蒲田有紀子	国立天文台、天文機器開発実験センター	1/26/98 ~ 1/30/98	分子物質開発研究センター
	神澤 富雄	国立天文台、天文機器開発実験センター	1/26/98 ~ 1/30/98	分子物質開発研究センター
平	木村 一郎	北陸先端大学院大学	2/2/98 ~ 2/10/98	装置開発室、メカトロニクス
成9年度	小菅 隆	高エネルギー加速器研究機構	12/8/97 ~ 12/19/97	UVSOR
	小松 史道	北陸先端科学技術大学	12/1/97 ~ 12/10/97	分子物質開発研究センター
	坂本 彰弘	国立天文台、野辺山宇宙電波観測所	17/73/UX ~ 3/6/UX	分子物質開発研究センター、 装置開発メカ
	高富 俊和	高エネルギー加速器研究機構	12/8/97 ~ 12/19/97	UVSOR
	千葉 裕輝	東北大学、科学計測研究所	11/17/97 ~ 11/22/97	UVSOR
	東嶺 孝一	北陸先端科学技術大学	11/12/97 ~ 11/21/97	装置開発室、エレクトロニクス
	松下 幸司	名古屋大学、理学部、装置開発室	2/2/1998 ~ 3/27/1998	装置開発室、メカトロニクス
		•	•	

年度	氏	名	所 属	研 修 期 間	受 入 施 設
平成 10 年度	飯田	忠夫	石川工業高等専門学校	9/28/98 ~ 10/9/98	電子計算機センター
	藤谷	善照	名古屋大学、工学部	11/24/98 ~ 12/22/98	装置開発室、メカトロニクス
	山下	忠雄	石川工業高等専門学校	3/8/99 ~ 3/12/99	分子物質開発研究センター
	藤田	陽一	高エネルギー加速器研究機構	2/22/99 ~ 2/26/99	装置開発室、エレクトロニクス
	福嶋϶	津広	国立天文台	2/22/99 ~ 3/2/99	装置開発室、メカトロニクス
	多田野	幹人	高エネルギー加速器研究機構	3/15/99 ~ 3/19/99	UVSOR
	内山	隆司	高エネルギー加速器研究機構	3/15/99 ~ 3/19/99	UVSOR

### 2-7-3 人事交流

先に述べたように,研究施設に配属された施設系技官の流動性はあまり高くない。理由は多々あるが,最も障害に なっているのは、技術の特殊性にある。スペシャリストになればなるほど、現状では、待遇等の問題で他機関への異 動が困難になってくる。しかし、同じ部署に長い間いれば、いろいろ弊害も出てくる。人事異動は組織活性化に不可 欠な要因である。これらの問題を考慮し、1995年10月から3年間の期限を付けて、名古屋大学理学部技官と分子研装 置開発室技官との交換人事を行った。さらに,1997年6月から2年間の期限で北陸先端科学技術大学院大学技官と分 子研極端紫外光実験施設技官との交換人事も行った。これらは期限が来るともとの部署へ戻るという人事異動である。 尚名古屋大学との人事交流は3年間の期限がきたが、メンバーを替え、さらに継続した。

### 2-7-4 受賞

早坂啓一(1995年定年退官) 日本化学会化学研究技術有功賞(1985)

低温工学協会功労賞(1991)

酒井楠雄 日本化学会化学技術有功賞(1995) 加藤清則 日本化学会化学技術有功賞(1997) 西本史雄 日本化学会化学技術有功賞(1999)

### 2-8 特別研究と岡崎コンファレンス

特別研究は,研究系各研究部門及び研究施設で行われている研究を基盤とし,研究所内外の研究者が協力して行う 独創的かつ開発的な研究であり,特に研究系及び研究施設の枠を超えて,研究者が協力集中して行っている。その発 展に資するため,国際的規模での研究集会 - 岡崎コンフェレンス - を年2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,金属および半導体表面上に単分子層吸着した分子種にレーザー 光を照射することにより誘起される多様な非熱的過程を調べている。本年度は ,(1) Si(100)表面に吸着した稀ガス (Xe, Kr)の光刺激脱離,(2)メタンの表面光化学,について重点的に研究を行なった。前者では,清浄 Si(100)表面 において、稀ガスが近赤外からから紫外に至る広い波長範囲の光照射によって脱離することを確認し、その光反応断 面積の波長依存性と脱離種の並進速度分布を測定した。これには、基盤の光吸収によって生じた電子と空孔がバンド 端まで緩和し、そこで表面状態を介して再結合する時に励起する表面フォノンが重要な働きをしていると結論された。 後者では、銅を基盤として実験を行ない、今まで行なってきた白金やパラジウムなどの遷移金属との比較を行なった。 その結果, Cu(111)面でもメタンは193 nm の光で解離することが判明した。これは,基盤中のsp電子由来の電子状態 が大きな役割を果たしている可能性を示している。

「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,前年度に測定した衝突イオン 化断面積の詳しい理論解析を行った。衝突する原子が両方とも準安定3重項励起状態にいるときにヘリウム-3原子の 断面積がヘリウム-4原子のそれよりも約3倍大きいことや、レーザー光の存在下ではその差が非常に小さくなること などの理由を明らかにすることができた。超流動液体ヘリウム中の原子・イオンのレーザー分光研究では、レーザー アブレーションによって液体ヘリウム中に分布されたイッテルビウム原子イオンの蛍光スペクトルおよびレーザー誘 起蛍光スペクトルを観測することができ,ヘリウムバブルに閉じこめられた原子やイオンに特有な,励起スペクトル における大きな青方変位や、自由原子には見られない励起スペクトルの分裂、励起状態における強い混合などが観測 された。また、それらのスペクトルの半定量的な解釈も同時に見出した。

「時間分解分光による凝縮相分子ダイナミクスの解明」の研究では、フェムト秒時間分解蛍光分光によるレチナール、 7 - アザインドール二量体に対する一連の研究過程から,フェムト秒領域では51状態からの蛍光のみならず高い電子 励起状態(Sn 状態)からの蛍光も一般的に観測されるとの理解にいたった。この理解にもとづき,ポリアセンに対す るフェムト秒蛍光測定を行い,S₀,S₁状態両方からの蛍光をそれぞれ時間分解測定することに成功した。フェムト秒 時間吸収分光を用いて,水溶性ポルフィリン Cu(II)(TMpy-P4)の光励起後の緩和過程を研究した。多波長におけるマル チチャンネル測定により、信頼性のあるフェムト秒~ピコ秒領域の時間分解吸収スペクトルが初めて測定できた。ピ コ秒時間分解ラマン分光により、レチナールの光異性化反応の研究を行った。これによりレチナール分子のシス-トラ ンス光異性化反応機構の全体像が明らかになった。また,アゾベンゼンの光異性化反応を研究し,寿命数ピコ秒の電 子励起状態のラマンスペクトルを測定することに成功した。さらに光パラメトリック増幅(OPA)および差周波発生 を用いて、フェムト秒赤外光を発生させる装置を製作するとともに、前年度放射光施設UVSORにおいて製作したピコ 秒レーザーと放射光の同期にもとづく時間分解測定システムを用いて,有機固体試料について時間分解遠赤外スペク トルの測定を試みた。

「化学反応素過程の可視化」の研究では,交差分子線画像観測装置により,エネルギー66 meV における Ar と NO の 回転非弾性散乱を研究した。Ar が NO 分子の二つの異なる原子,N端とO端に衝突するために起こる二重虹散乱を明 瞭に観測すると共に,ある特殊な条件でN端とO端の両方に衝突して起こる,多重虹散乱を初めて発見した。光分解 実験では,OCSの光解離動力学を散乱原子の画像観測と量子化学計算によって求められたポテンシャル曲面上での波 束動力学計算と比較し,分子の変角振動によって誘起される非断熱解離を明らかにした。また,フェムト秒レーザー を用いた pump-probe 法と光電子の画像化実験を組み合わせ,時間分解光電子画像化法を開発した。サブピコ秒の紫外 光でNOをA状態に励起し,さらにサブピコ秒の光イオン化によって光電子がP波となって空間に放出される様子が 観測された。この手法は,励起状態の緩和動力学や波束運動を可視化する手法として有望である。また,立体化学の理論研究では,原子分子の角運動量偏向を多光子吸収によって解析するための量子論,半古典論を構築した。半古典論については,NO2の光解離によって生成する NO のベクトル相関の解析に適用し,その正しさを証明した。

「スピン副準位による状態の選択」の研究では ,高分解能レーザー光とラジオ波の二重共鳴法によるラマンヘテロダ インビート検出磁気共鳴法を展開している。選択的に励起状態を指定してそれに関する磁気共鳴測定ができるという この方法論の特徴を生かして,青いレーザー光を用いた  $LaF_3$  単結晶にドープされた  $Pr^{3+}$  イオンの回りの La 核の NQR測定や , 1 , 4 ジブロモナフタレン単結晶の一重項 - 三重項吸収遷移を用いた励起三重項状態のESR測定を行った。特 に後者はラマンへテロダインビート測定法を分子系に応用した世界最初の例である。ゼロ磁場分裂した励起三重項状 態の ESR 遷移と, その電子スピンに結合している Br 核の NQR 遷移の信号が得られた。有機分子単結晶でラマンヘテ ロダインビート測定法が応用可能と解ったので、今後本方法の特徴が生かせるような系を選び精力的に応用していく。 「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、重要な化学反応の殆どが溶液中でおこる 事を考慮し,凝縮相の効果を考察した。化学反応を解析するためには,レーザー分光の技術が中心的役割をしている が、レーザー場と分子の相互作用は量子過程であり、また、化学反応自体も、非断熱遷移過程や量子トンネル過程等 の量子過程が中心的な役割をしており、量子効果を理解する事が非常に重要である。量子効果自体は波動方程式を解 く事により記述できるが,これに溶媒等の効果を含めようとすると,量子散逸の問題となり,通常の理論で解析する 事は出来ない。特に化学反応の問題は,複雑な形状のポテンシャルで記述される場合が多く,このようなポテンシャ ル下での運動を、溶媒の効果を取り入れ考察出来る手法が望まれる。量子フォッカー・プランク方程式は、このよう な目的に合致した手法であり、任意のポテンシャル面に対する波束の運動を量子的に溶媒の効果を取り入れながら考 察する事が出来る。本年度はこの手法を用いて、強いレーザー光で励起されたモースポテンシャル系の光解離過程と 前駆解離過程について考察し,このような分子系のシュタルク効果と,その波束の運動について考察を行った。

「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,UVSOR 施設内において開発された軌道放射 光とモードロックレーザーの同期照射システムを用いて, $N_2$  または $N_2$ Oの光イオン化で生成する $N_2$ <sup>+</sup>のレーザー誘起 蛍光分光を行った。イオントラップを利用することで,回転線を完全に分離することが可能となったため,回転温度 が精度よく求められた。また,OCS 分子を放射光で超励起し,中性解離で生成した基底硫黄原子をレーザー 2 光子共鳴 1 光子イオン化法で検出することに成功した。いずれのレーザー分光法も,放射光励起された分子から生成する解離種に対して適応された例はない。高光子密度・高分解能・高干渉性といったレーザーの特長を生かしたこの種のポンププローブ分光測定は,真空紫外・軟 X 線領域の励起状態の緩和および崩壊ダイナミクスの研究に今後大いに活用されるものと期待される。

#### (2) 分子エレクトロニクス:分子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,光機能性など主に電子物性の立場から興味ある分子性固体や液晶物質の研究を行っている。

「有機超伝導体の研究」では昨年,λ-BETS<sub>2</sub>(Fe,Ga)Cl<sub>4</sub>で前例のない金属 - 超伝導 - 絶縁体転移を見出したが,超伝導 状態はほぼ完全マイスナー状態であることを確認した。又,新たに,Feの磁気秩序と 電子系の超伝導が競合してい る金属 - 超伝導 - 金属転移を示す類似系を見出した。さらに,最近,同様なBETS伝導体で,反強磁性有機分子性金属 を初めて発見した。これらの発見は有機分子性伝導体を舞台とした磁気,伝導物性が急速に発展していることを示す ものである。

「分子性導体における新電子相の探索」では微視的な観点から分子性導体の電子状態を調べ,新規な電子相や新機能 物質を探索することを目的としている。まず , 磁化率 , EPR , 輸送現象測定により基本的な電子物性を調べ , EPR の g 主値解析,緩和時間測定,選択的同位体置換試料によるNMR測定をおこない,詳細な電子状態ならびに相転移の機構 を理解する。現在,そのために必要な装置を整備しつつ研究を行っている。

「 - d電子系の研究」では金属上に局在スピンをもつ $CoPc(AsF_6)_{0.5}$ ともたない $NiPc(AsF_6)_{0.5}$ のフタロシアニン導体 混晶を作成し,構造,電気物性,磁性,分光法による電子状態の研究を行なっている。 電子とd電子の相互作用の 直接的な観測, Co3d 電子の一次元バンド形成などの興味ある事実が明らかにされた。その他 電子性の分子導体 DMTSA、BEDT-ATD、BDT-TTPの電荷移動塩について反射分光法とラマン分光法を用いた研究を行ない、バンド構造, 金属・絶縁体転移,伝導度スペクトルの形状と電子相関の関係,電荷分離状態についての実験データを集積している。

「低次元強相関系の物性理論」では,擬1次元有機導体(TMTCF)2Xにおける次元クロスオーバーを,ウムクラップ 過程による電荷局在からのフェルミ面回復という観点で整理した。2次元電子系Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>8</sub>の擬ギャップを,波数 に依存した準粒子重みの繰込みフローから説明した。強く二量化した 2 バンド 2 次元電子系 (Et,,Me<sub>4-v</sub>N)[Pd(dmit)<sub>2</sub>]<sub>2</sub> を 強結合展開により調べ,その伝導性と磁性を次元性の効果から定性的に理解した。1次元 -d電子系 CoPc(AsF<sub>6</sub>)<sub>0.5</sub> の 絶縁相でのスピン揺らぎの役割を求めた。ハロゲン架橋複核白金錯体の電子状態を調べた。銅酸化物超伝導体の同位 体効果を、局所的反強磁性相関を伴うポーラロンの動力学から説明した。ポリマーにおける光誘起分極反転の可能性 を議論し、その安定性を分子動力学計算で確認した。

「新規なドナー・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 およびアクセプター分子を合成し、これらを成分とする高伝導性の電荷移動錯体およびイオンラジカル塩を開発した。 また、ヘテロ原子の分子間相互作用を利用して分子テープ状構造やヘリカル構造などの特異な結晶構造を構築した。さ らに,新規なドナー・アクセプター型分子を設計し,小さなHOMO-LUMO差を有する分子を開発した。

「新規分子性強磁性体の開発研究」では、キラル高スピンビスニトロキシドラジカルと常磁性遷移金属イオンの自己 集合組織化を用いて,はじめて光透過性のあるキラルな分子磁性体の構築に成功した。この分子磁性体は従来から知 られている磁気光学効果(ファラデー効果,カー効果)の他に新しい物性として予測されている磁気不斉光学効果を 示す可能性があり、今回合成したキラル磁石について磁気光学効果の研究を進めている。

「液晶における動的秩序構造の研究」では、当研究所において開発した回転四極コイルによる2次元磁場勾配型NMR 分光器を用いて,分子の自己拡散異方性を系統的に調べた。その結果,いくつかのスメクティックA液晶において自 己拡散異方性が温度によって反転することを見出した。また、キラル液晶においてアルキル鎖の著しい捻れを実験的 に検出し,反強誘電性の微視的起源の理解を一歩進めることができた。

「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。

「レーザーと放射光を組み合わせた分子固体の電子状態研究」では ,単波長のレーザーと波長連続の放射光という特 徴ある2つの光源を組み合わせた2光子励起蛍光システムを構築し,通常の光学遷移では観測できないパリテイ禁制 の励起電子状態を検出することを目的とした。システムは無事完成し, BaF2 や CaF2 の真空紫外領域にある P 型励起

子状態の測定に成功した。その結果,励起子の束縛エネルギーや価電子-伝導帯間のエネルギーを正確に決めることが出来た。さらに内殻準位を2光子励起した場合についても研究を進行中であり,カスケード過程や共鳴過程などの興味有る現象が検出されつつある。

#### (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御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。

「金属配位結合により二重鎖を形成する人工 DNA」の研究では、フェニレンジアミン、アミノフェノール、カテコールなど、天然には存在しない、金属配位能を有する核酸塩基を導入した人工ヌクレオシドを設計、合成した。この人工ヌクレオシドを含むオリゴヌクレオチドは、水素結合の代わりに金属配位結合により塩基対を形成することを明らかにした。また、一本鎖 DNA をテンプレートとしてシークエンス特異的に自発集合することが期待される新規金属錯体、及び二本鎖 DNA の周囲に環状に集合化することが期待される新規金属錯体を合成した。これらの人工 DNA は遺伝子の機能制御という観点からだけではなく、導電性材料など、新しい機能性分子としての物性発現も期待される。

「金属酸素錯体と生体高分子との反応」では、金属錯体による過酸化水素の活性化に関する基本的、理論的な研究を行い、活性化の本質はパーオキサイドイオンと不飽和なd-軌道にある電子との相互作用によって誘導されることを明らかにした。その結果をもとに金属酸素錯体による DNA、RNA、蛋白質(特にアミロイド蛋白、プリオン蛋白)の切断・分解反応の機構を明らかにし、いわゆる神経性疾患(アルツハイマー、プリオン病)の予防を考えたいと思っている。

「遷移金属を活用した自己組織性分子システム」の研究では、小分子からの自己組織過程を経て、ナノサイズに到達する二次元および三次元構造が組あがる系を見い出した。たとえば、小分子10成分から約3ナノメートルに到達する巨大な環状構造体や、3次元的に閉じた約2ナノメートルの構造体の構築に成功した。また、これらの構造体が内部空孔に巨大分子(カルボラン等)や複数の有機分子を選択的にとりこむことも明らかにした。さらには、骨格に含まれる金属核として白金を用いると、得られる三次元構造は酸塩基条件でも安定となり、このような構造体が分子サイズの「反応容器」としてつかえる可能性を示した。実際に、自己組織化した三次元化合物の内部空間で、いくつかの化学反応が促進されることを明らかにした。一方、三次元かご構造同士を内部連結させた「三次元インターロック化合物」の自己組織化にも成功した。このような錯体の分子認識機能を利用することで、感知機能や分離機能を有する機能性分子、さらには新規な合成反応や触媒反応の開発が期待できる。

「プロトン濃度勾配からのエネルギー変換」では、アクア金属錯体が、溶液のプロトン濃度に従いヒドロキシ及びオキソ錯体に変化することを利用して、外部回路を通じて、これらの錯体間に酸化還元反応を起こさせることにより、pH 勾配を直接電気エネルギーに変換することに成功した。

「金属錯体による二酸化炭素の活性化」の研究では,金属に単座配位したナフチル配位子が極めて容易に還元され,フリーの窒素が強い塩基に変化することを利用して,二酸化炭素由来のRu-CO結合にナフチル配位子を可逆的な架橋させて,Ru-CO結合の還元的開裂によるCO発生の抑制とRu-CO基の活性化を同時に行うことに成功した。その結果,ナフチル配位子を有するRu金属錯体を触媒として4級アルキルアンモニュム塩を電解質とする二酸化炭素の電気化学的還元反応では,全く副反応を伴うことなく,ケトンのみが選択的に高速で生成する反応系を完成させることに成功した。

## 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,すでに63回に達している。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。1999年3月現在で63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。

1976年1月に行われた第1回岡崎コンファレンスから第62回までの参加研究者総数は約3,214名,その内外国人研 究者は約286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

宏(大阪大学教授) 坪村

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-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ー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)

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

博(京都大学教授) 幸田清一郎(東京大学助教授)

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-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 博(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

簱野 昌弘(東北大教授) 藥師 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 興亜(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 吉斯(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

斎藤 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

干鯛 眞信(東京大教授) 渡辺 芳人(分子研教授)

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. (ピッツバーグ大学) 谷村 吉隆(分子研助教授)

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(東大理教授) 小倉 尚志(分子研教授)

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(分子研教授) 藥師 久彌(分子研教授)

59.「無機化合物を構成要素とする機能性積層膜の分子構築とその機能」1997.8.7 ~ 8.9

山岸 皓彦(北海道大学教授) 芳賀 正明(分子研教授)

60.「化学反応ダイナミクスの光制御」1997.9.22 ~ 9.24

藤村 勇一(東北大学教授) 川崎 昌博(京都大学教授)

61.「時間分解振動分光による液体ダイナミクス」1998.1.21 ~ 1.23

富永 圭介(分子研助手) 奥村 剛(分子研助手) 斉藤真司(名古屋大学助手)

# 開催一覧 2

回	課題,開催日,提案代表者	外国人招待研究者
62	「分子科学における構造的階層:ナノ・メゾ構造からミクロ構造まで」 1999.1.10~1.13 相田 卓三(東大教授) 藤田 誠(分子研助教授)	Julius Rebek, Jr. (スクリップス研究所教授) (アメリカ) Steven C. Zimmerman (イリノイ大学教授) (アメリカ) Andrew D. Hamilton (イェール大学教授) (アメリカ) Roeland J. M. Nolte (ナイメージェン大学教授) (オランダ) Michael J. Zaworotko (ウィンニペグ大学教授) (カナダ) J. Fraser Stoddart (カリフォルニア大学ロサンゼルス校教授) (アメリカ) Craig J. Hawker (IBMアルマデン研究センター教授) (アメリカ) Jeffrey S. Moore (イリノイ大学教授) (アメリカ) Jerry L. Artwood (ミズーリ大学教授) (アメリカ) Achim Muller (ビエルフェルド大学) (ドイツ) Garry S. Hanan (ウォータールー大学教授) (カナダ) Kimoon Kim (ポハン大学教授) (韓国) Stefan Hecht (カリフォルニア大学教授) (アメリカ) Virgil Percec (ケース ウェスタン リザーブ大学教授) (アメリカ) James D. Wuest (モントリオール大学教授) (カナダ) Myongsoo Lee (ヨンセイ大学教授) (韓国) Jean-Pierre Sauvage (ルイパスツール大学教授) (フランス) David N. Reinhoudt (トゥエンテ大学教授) (オランダ) Wendy Naimark (カリフォルニア工科大学助手) (アメリカ)
63	「気相分子クラスターのレーザー分光 - 構造とダイナミックスの接点 - 」1999.3.23~3.25 江幡 孝之(東北大)藤井 正明(分子研)	Samuel Leutwyler(ベルリン大学)(ドイツ) Hans J. Neusser(ミュンヘン工科大学)(ドイツ) Andreas. C. Albrecht(コーネル大学)(アメリカ) Soritis. S. Xantheas(パシフィック・ノースウェスト研究所)(アメリカ) Karl Kleinermanns(デュッセルドルフ大学)(ドイツ) Michael Topp(ペンシルヴァニア大学)(アメリカ) Robert Laenen(ミュンヘン工科大学)(ドイツ) Rainer Weinkauf(ミュンヘン工科大学)(ドイツ) Claude Dedonder-Lardeux(パリ南大学)(フランス)

(第61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 1998年度の実施状況

### (1) 課題研究

課題名	提案代表者					
化学反応に対する溶媒効果の分子論	平田	文男	(分子研教授)			

### (2) 協力研究

「X線非干渉性散乱因子の計算」を始め 107件

## (3) 研究会

研 究 会 名	提案代表者
若手分子科学研究者のための物理化学研究会	梶 本 興 亜 (京都大教授)
光励起による相転移とその前駆現象	鎌 田 雅 夫 (分子研助教授)
低温マトリックス単離法の新展開	中 田 宗 隆 (東京農工大教授)
物理化学の現状と将来	吉 原 經太郎 (北陸先端科学技術大学院大教授)
放射光を用いたナノ構造の科学と工学	宇理須 恆 雄 (分子研教授)

### (4) 施設利用

機器利用

「半導体薄膜の評価」を始め 48件

計算機利用

「蛋白質立体構造の変化と運動」を始め 174件

# (5) UVSOR 課題研究

研 究 課 題	提案代表者					
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)					
有機薄膜のための角度分解光電子強度解析用ビームラインの開発建設	上 野 信 雄 (分子研教授)					
放射光励起光反応高効率分光ビームラインの開発建設	宇理須 恆 雄 (分子研教授)					

# (6) UVSOR協力研究及び招へい協力研究

「極端真空紫外領域における臭化シアンの光解離過程」を始め 26 件

# (7) UVSOR 施設利用

「元素添加非晶質  $SiO_2$  ならびに非晶質  $Si_3N_4$  の光吸収および発光特性」を始め 157 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	'76 ~	- '91	'9	2	'9	3	'9	)4	'9	5	'9	6	'9	7	'9	8	備考
項目	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	64	508	4	33	1	8	1	6	2	16	2	18	3	23	1	3	人数: 登録人数
協力研究	2,011	2,011	127	173	127	176	128	182	95	131	92	121	117	181	107	157	
招へい 協力研究	180	180	2	2	3	3	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	
所長 招へい	969	969	141	141	105	105	129	129	148	148	62	62	118	118	105	105	
研究会	166	2,235	8	113	9	122	9	143	11	163	10	170	6	121	5	79	人数: 旅費支給者
施設利用	968	1,750	85	227	66	206	45	129	56	173	51	163	50	152	48	146	件数: 許可件数 人数: 許可人数
施設利用 II	2,000	5,585	215	657	180	586	187	602	181	583	169	563	186	694	174	680	
合計	6,358	13,238	582	1,346	491	1,206	499	1,191	494	1,215	386	1,097	480	1,289	440	1,170	
経費	233,	,168	20,8	379	19,7	709	21,	492	20,	054	20,	390	28,0	003	-	-	千円

('98年度の数値は, 1999.2.1現在)

# 分子科学研究所 UVSOR 共同研究実施一覧

年度	'85 <sup>-</sup>	- '91	'9	2	'9	3	' <u>g</u>	)4	'9	5	'g	)6	'9	7	'9	8	備考
項目	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	22	211	2	21	2	30	2	28	4	49	3	38	3	43	3	39	人数: 登録人数
協力研究	130	337	39	169	36	151	28	123	23	91	24	95	23	88	24	104	
招へい 協力研究	42	42	7	7	8	8	9	9	4	4	1	1	1	1	2	2	
研究会	19	231	2	29	2	34	2	51	2	41	1	23	1	18	0	0	人数: 旅費支給者
施設利用	579	2,834	109	614	132	714	130	655	136	632	147	671	153	706	157	751	件数: 許可件数 人数: 許可人数
合計	792	3,655	159	840	180	937	171	866	169	817	176	828	181	856	186	896	
経費	75,	407	12,0	670	12,7	729	12,	729	13,	120	13,	279	14,0	068		-	千円

('98年度の数値は, 1999.2.1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	短期流	带在者		
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	特別協力研究員	研究会	訪問者	合計
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
96	18	22	20	55	65	180
97	17	17	20	99	19	172
合計	162	160	324	864	482	1,992

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
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
96	37	10	13	13	25	14	11	57	180
97	41	16	7	7	12	21	15	53	172
合計	472	195	133	96	224	211	154	507	1,992

# 2-10-2 国際共同研究

1998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「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、現在期目に入っている。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人から成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いる。

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 ~ 1998.3		8 回開催
研究計画委員会及び幹事会	1979.6 ~ 1998.3		毎年1回
研究者派遣	1979 ~ 1997 年度	中・長期派遣	116 名
	1998 年度	中・長期派遣	3名
現在進行中のグループ共同研究			4 組
日米情報交換セミナー	1981 ~ 97 年度		全部で 24 回開催

1998年度には以下の3件を開催した。

・プロトン移動にカップルした電子移動 ハワイ

・炭酸固定反応と光合成器官に対する環境の影響 カリフォルニア

・結晶状態での光合成 カリフォルニア

98年3月に開催されたステアリングコミッティーにおいて、1999年度の事業をもって、本事業をとりあえず終了することが日米間で合意を見た。99年度には "Photoconversion and Photosynthesis: Past, Present, and Perspective" という情報交換セミナーを岡崎コンファレンスセンターで開催し、今後の展望までを含めた総括的な意見交換の場とすることが決定されている。

### (2) 日韓共同研究

分子科学研究所と韓国高等科学技術院(KAIST)の協力で、1984 年以来、日韓合同シンポジウムと韓国研究者の分子科学研究所への受け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、1997年1月分子研で開いた第7回シンポジウムに引き続き、第8回シンポジウム「Molecular Spectroscopy and Theoretical Chemistry」を1999年1月8,9の2日間、韓国のテジョン(Taejon)市において開催した。日本側からは派遣団長の伊藤光男分子研所長をはじめ全国の大学、研究機関から13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 か月ずつ招聘しており、1998 年度も 3 名の招聘を実施した。

### (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、をとりあげ、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、ひきつづいて1998年10月22日 - 25日に第6 回の合同シンポジウムを岡崎コンファレンスセンターで開催した。中国からは若手10名を含む34名が、日本からは80 名が参加し、盛況の内に終了した。第7回は2001年広州において開催される予定である。

### (4) 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事を目的としている。文部 省科研費、海外学術研究の支援により、初年度は所長はじめ6人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人が約3か月間分子研において共同研究を行った。1996年度は、2人 をプラハに派遣し,1月には4人の研究者が来所して共同研究を実施した。1997年度からは学振の2国間共同研究と して、日本側は北川禎三が代表になり申請、受理された。1997年度は2人を派遣し、6人を受け入れた。1998年度は 4人を派遣し、6人を受け入れた。1999年6月にプラハで3日間のジョイントセミナーを実施する事になっている。

### (5) 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12月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。1996年2月に分子研側から7名が参加して研究会をロチェスターにおいて開催し,これまでの双方の研究成果の 発表・討議を行うと共に、具体的な研究課題の実施に関する検討も行った。その結果、「超高速分光による凝縮相電荷 移動ダイナミクス」「生体関連電荷移動反応」「新物質の開発」「凝縮系中分子の動力学の理論的研究」の主要4テーマ を中心に共同研究を開始した。平成9年度以降は、上記課題に関連する広範な研究者が本プロジェクトに参加し、平 成10年11月の事業終了までに延べ89名がロチェスター大学において共同研究の実施・成果の討議等を行った。

# 2-10-3 多国間国際共同研究の推進

分子科学研究所は設立当初から分子科学分野における日本の代表研究機関として多くの国際共同研究を推進してき た。今迄に日英,日米「光合成による太陽エネルギー転換」,日韓,日中,日・イスラエル,日・チェコ,日米(ロチェ スター大学),日・インド(学術振興会)等の共同研究を実施してきている。日本全体の分子科学分野の世話役として 研究者の交流や合同討論会の開催等で多くの成果を挙げる事が出来たのではないかと思う。上述の中のいくつかは前 節で述べられている通り,現在も活発に推進されている。しかし,これらの共同研究は全て二国間共同研究であり,分 子科学研究所及び研究そのものの一層の国際化に十分対処出来なくなってきている。分子研では既に,平成6年実施 の将来計画検討において国籍を限らない多国間にまたがる国際共同研究を推進できる様にすべきであるという提言を 行い概算要求を行っている(分子研リポート'94~'97参照)。

残念ながらこの計画は未だ認められるに至っていない。ここで改めて、その重要性を説いておきたい。先ず第一点 は、言うまでもない事であるが、国際共同研究のグローバル化が一層進んでいるという事である。国籍を越えた科学 者の流れは今や日常茶飯事であり、しかも研究グループの多国籍化が常識とさえなってきている。外国国籍の大学院 学生や博士研究員が多くいるのは最早アメリカだけではない。こういう状況の下では国籍を限った二国間共同研究が 有効に働かないのは明らかである。第二点は,共同研究において"日本の分子科学研究所"かつ"世界の拠点"とし てその国際性及び主導性を自ら発揮出来る体制を構築していかなくてはならないという事である。分子研には既に、 色々な形で外国人研究員が常時多数滞在して研究に従事しているが,実際にはそれに倍した所内及び国外からの共同 及び協力研究実施の希望が殺到している。また、分子研には極端紫外光実験施設や電算計算機センター等世界に類の ない分子科学専用の大型研究施設があり、これらを有効に活用した国際共同研究をもっと支援していかなくてはなら ない。最後に、研究というものの本質に根差す計画性・偶然性・セレンディピティ(発見・発案能力)を支え、具体 的課題毎に2~3年の計画性を持ちうると同時に柔軟に臨機応変に対応出来る体制が必要である。

以上の考えの基に我々は「光反応の分子科学」、「物性分子科学」、「理論分子科学」の分子科学3大分野に亘る国際 研究推進計画を概算要求し推進しようとしている。これらの各分野毎に所内で課題募集を行い、分野当り2~3件を 所長の下で採択しそれぞれ2~3年計画で実施出来る安定した体制を構築していきたいと考えている。

# 2-11 大学院教育

# 2-11-1 特別共同利用研究員

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 た特別共同利用研究員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。

特別共同利用研究員(1991年度までは受託大学院生,1992年度から1996年度までは特別研究学生)受入状況 (年度別)

	4077	00										
所 属	1977 ~ 82	83 ~ 88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98
 北海道大学	4	5	1									
室蘭工業大学	-	2										
東北大学	2	5	1	1			2					1
山形大学												6
筑波大学												1
群馬大学							1					
埼玉大学	1	1					-					
千葉大学											1	1
東京大学	1	17	3	2	2	2	1			1	1	1
東京工業大学	4	10	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	1 .	3								3	3	
新潟大学		2				1	1					
福井大学	2	_				· ·	· ·		1	1		1
信州大学						1	1		<u>'</u>	<u>'</u>	1	
岐阜大学						<u>'</u>	1	1			<u>'</u>	
名古屋大学	12	24	5	4	5	3	2	2	1	3	3	3
日日屋八子   名古屋工業大学	2	4		'					'			1
<u>ロロ屋工業</u> ステー	1	15	6	3	3	2						'
三重大学		10								2	2	2
京都大学	2	3	1	2	2		7	5	4	4	2	2
京都工芸繊維大学		6	'						7	7		
大阪大学	5	12		2	2	2	1					
神戸大学	+ 5	12					<u>'</u>				1	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	1	
広島大学		10	5		1	1	1	7	6	1	'	
山口大学	1	10			'	<u>'</u>	<u>'</u>	,				
愛媛大学	2				1							
高知大学					1	1						
九州大学	2	6	7	8	5	4	1			1	2	1
佐賀大学		1	'			2	4	5	1	'		'
熊本大学		4					2		'			
琉華八子     琉球大学		'										1
東京都立大学	9	6	1	1								'
大阪市立大学	1	2	'	'								
学習院大学	1 '										1	
北里大学										1	1	
10主ハチ   慶應義塾大学		2	1	1						'	1	1
上智大学	1		'	'							'	'
工具八子   東海大学	+ '	1										
東京理科大学		'										1
東邦大学										1		'
   星薬科大学		1								'		
生業性人子   早稲田大学	1	'								1	5	2
千個四八子   名城大学	'									'	2	2
計	55	146	32	24	22	20	27	30	19	25	27	28
пІ		140	52					30	13			20

# 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け持ち,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およ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。従来の分光学的およ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、さらに分子およ 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(1998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	8	6	9
計	15	16	22

### 在籍学生数(1999年1月現在) 単位:人

入学年度専攻	1995年度	96年度	97年度	98年度	計	定員
構造分子科学専攻	1	10	8	12	31	6
機能分子科学専攻	2	7	9	7	25	6

#### 学位取得状况 単位:人

専 攻	1991年度	92年度	93年度	94年度	95年度	96年度	97年度	98年度 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	1	3	5	3	14	10(3)	1(3)	1(2)	38(8)
機能分子科学専攻	5	5	4(1)	8(1)	4	7(1)	3(2)	1	37(5)

### ( )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	97年度	98年度
構造分子科学専攻	3	6	5	7	12	7	4	10	10	12
機能分子科学専攻	9	7	6	6(1)	9	4(1)	6	8	9	7

# ( )内は研究生で外数

# 外国人留学生数(国別,入学者数) 単位:人

	<b></b>	<b>请</b> 造分子科学専项	女	機能分子科学専攻			
	1989-96年度	97年度	98年度	1989-96年度	97年度	98年度	
中国	6		2	3(1)	1		
フランス				1			
ロシア				1(1)			
バングラディッシュ	2					1	
インド	1						
チェコ					1		

# ( )内は研究生で外数

# 大学別入学者数

1. 24 A MA	構	造分子科学専	攻	機能分子科学専攻			±⊥
大学名等	'89 ~ '96	'97年度	'98年度	'89 ~ '96	'97年度	'98年度	計
北海道大学				1		1	2
室蘭工業大学				1			1
東北大学				1			1
山形大学				2			2
筑波大学	1			1			2
群馬大学					1		1
千葉大学	2	2	1				5
東京大学	4	1		4	1		10
東京工業大学				1	1		2
お茶の水女子大学	2		1	1			4
電気通信大学	1						1
横浜国立大学	1						1
長岡技術科学大学	1						1
富山大学	1						1
福井大学	,					1	1
金沢大学	1		1	2		'	4
・	2		'				2
静岡大学	1						1
帮问人子 名古屋大学	1	1		2			
名古屋大学 名古屋工業大学	4	1					3
	1		4				1
豊橋技術科学大学	1		1				2
三重大学	1					4	1
京都大学	4	1	1	9		1	16
京都工芸繊維大学		1		1			2
大阪大学	5			2			7
神戸大学		1					1
奈良女子大学					1		1
鳥取大学			1				1
岡山大学	1			2			3
広島大学			1	1	1		3
山口大学				1			1
愛媛大学			1				1
九州大学	1	1		2			4
熊本大学	2						2
北陸先端科学技術大学院大学	2	1					3
名古屋市立大学					1		1
大阪府立大学	2						2
姫路工業大学				1			1
石巻専修大学 	1						1
学習院大学	1		1	2			4
慶應義塾大学	1			2			3
国際基督教大学				1			1
中央大学				1			1
東京電機大学	1						1
東京理科大学	1			1			2
東邦大学	1			1	1		2
日本大学				1	'		1
明星大学	1			'			1
		4		4		2	
早稲田大学	2	1		1		3	7
立命館大学				2			2
名城大学			1				1
岡山理科大学				1			1
* その他	10		2	6	2	1 1	21

<sup>\*</sup> 外国の大学等

# 2-12 定員と財政

# 2-12-1 定員

1998 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)	3(1)	5	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)	14(3)	16	33(5)		33(5)
技術課						44	44
合計	1	17(9)	29(10)	52	99(19)	44	143(19)

<sup>()</sup>内は客員数で外数である。

# 2-12-2 財政

(単位:千円)

科目等	1993年度	1994年度	1995年度	1996年度	1997年度
人件費	1,068,408	1,291,019	1,221,676	1,333,573	1,346,850
運営費,設備費	2,796,887	2,745,703	3,791,336	3,002,740	2,795,476
施設整備費	412,091	31,076	251,772	344,400	88,987
合計	4,277,386	4,067,800	5,264,784	4,680,713	4,231,313

<sup>\*</sup>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	1993年度	1994年度	1995年度	1996年度	1997年度	1998年度
件数 (件)	42	63	64	58	62	74
金額 (千円)	180,360	252,630	124,077	151,540	242,093	226,900

# 2-13 共通設備

## 2-13-1 情報図書館

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 455種(和230,洋225),単行本32,380冊(和5,936,洋26,444)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。このほか学術文献検索システムによるオンライン情報検索のサービスも行っている。またライブラリー カードを使用することによって、情報図書館は24時間利用できる体制になっている。

## 2-13-2 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、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月に竣工した。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

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2,863m²,鉄筋コンクリー ト造 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, 50 人の小会議2室などが設けられている。中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、小会議室 は1室としての使用も可能である。

## 2-13-3 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。

## 2-13-4 職員会館

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

# 2-14 地域社会との交流

# 2-14-1 国研セミナー

このセミナーは、岡崎国立共同研究機構と岡崎南ロータリークラブとの交流事業の一つとして行われているもの で 岡崎市内の小・中学校の理科教員を対象として 機構の教官が講師となって行われている。分子研担当分を以下に示す。

開催日	テーマ	講師
1986. 1.18	分子研の紹介	諸熊 奎治 教 授
1986. 6. 7	シンクロトロン放射とその応用	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
1997. 6.13	生体系と水の分子科学	平田 文男 教 授
1998. 6.12	電子シンクロトロン放射光による半導体の超微細加工 - ナノプロセスとナノ化学 -	宇理須恆雄 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)	
第8回	1997.11.15 (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
1996年度	7	180
1997年度	9	436
1998年度	6	184

1998年度は平成11年2月現在

# 3.研究系および研究施設の現状

# 3-1 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
~ 1978.8.	1978	25	13
1978.9. ~ 1979.8.	1979	55	7
1979.9. ~ 1980.8.	1980	85	21
1980.9. ~ 1981.8.	1981	114	24
1981.9. ~ 1982.8.	1982	149	14
1982.9. ~ 1983.8.	1983	177	29
1983.9. ~ 1984.8.	1984	153	26
1984.9. ~ 1985.8.	1985	196	31
1985.9. ~ 1986.8.	1986	207	45
1986.9. ~ 1987.8.	1987	287	42
1987.9. ~ 1988.8.	1988	247	39
1988.9. ~ 1989.8.	1989	281	60
1989.9. ~ 1990.8.	1990	320	60
1990.9. ~ 1991.8.	1991	260	23
1991.9. ~ 1992.8.	1992	303	41
1992.9. ~ 1993.8.	1993	298	41
1993.9. ~ 1994.8.	1994	211	26
1994.9. ~ 1995.8.	1995	293	23
1995.9. ~ 1996.8.	1996	332	40
1996.9. ~ 1997.8.	1997	403	41
1997.9. ~ 1998.8.	1998	402	44

# 3-2 理論研究系

## 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原子イオン錯体
- c) 無限鎖系に対する密度汎関数法プログラムの開発と高分子の構造と振動数計算
- d) 原子および分子クラスターの構造と反応
- e) 簡単な分子の励起状態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) 分子軌道法と密度汎関数法による実験解析

### A-3) 研究活動の概略と成果

- a) 結合クラスター応答理論を多参照配置展開に一般化する理論により有効ハミルトニアンを導出し,簡単な系の励起状態に適応した。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の基底関数として,箱型ポテンシャルの固有関数を用いることとし,必要な分子積分プログラムを開発した。固有値スペクトル分布を繰り返し法で求める方法を開発し,離散および連続スペクトル系に応用した。
- b) 水クラスター負イオン $(H_2O)_n$  の構造を分子軌道法によって研究した。いわゆる双極子場束縛型に加えて,余剰電子が二つの水分子の OH に包まれる内部包含型ともいえる異性体が n=2,3,4 から安定に存在する事を見いだした。内部包含型では $(OH)\{e\}(HO)$ 結合とも呼べる電子雲と複数の(OH)結合の相互作用で安定になっている。1 族金属 M (Li,Na) と水クラスターの錯体 M  $(H_2O)_n$  にもこの形の結合は見いだされ,金属から放出された電子の安定化に寄与して, $M(H_2O)_n$  のイオン化しきい値が n>3 で M にも n にもあまり依存しない原因となっている可能性が強いことが明らかになった。また, $X^-(H_2O)_n$  (X=F,CI,Br) の分子内振動と分子間振動の相互作用も調べている。 $Mg^+(H_2O)_n$  の理論電子スペクトルと光解離励起スペクトルを比較し,異性体が実験スペクトルに寄与していることを明らかにした。
- c) 解析的微分を含む一次元結晶軌道・密度汎関数プログラムを開発し,基本的な高分子に適用した。HF方程式の解析的2次エネルギー勾配法に必要な公式を導出し,実用的プログラムを完成した。さらに2次メラー・プレセット摂動法のエネルギー期待値に対する解析的1次微分計算を導出し,実用的なアルゴリズムを見いだしてプログラムを開発した。新たに開発したプログラム群を利用して,水素結合ポリマー(HF)n(n=)の構造・振動スペクトルを計算し,有限鎖の結果と比較し,水素結合鎖において非加成性が強いことを明らかにした。
- d) アルゴンクラスター陽イオンが光吸収後,非断熱遷移を繰り返しながら電子的基底状態に無輻射的に遷移していく様子を,TullyのMDQT(量子遷移を伴う分子動力学)とDIM(分子中2原子分子)ハミルトニアンを組み合わせて追跡した。減衰過程を簡単なモデルで解析することができた。各モンテカルロステップごとにab initio MOCI計算を実行し,Si<sub>2</sub>C<sub>2</sub>-の光電子スペクトルをシミュレートした。直線型と環状型の二つの異性体が混在しかつ有限の内部エネルギーを持っていると仮定するならば実験結果を説明できる。窒素分子の2量体の分子間ポテン

- シャルを高精度に計算し,分光学的にこの2量体が観測できる条件を検討した。
- e) AISiの21個断熱ポテンシャルを高精度で計算し,可視部の吸収スペクトルで観測される位置を正確に予測した。こ の分子の基底状態は4重項4cであり、その1.2 eV以内に5個の2重項がある特異な電子構造をしている。[Fe,N, O]から構成される4重項と2重項の多くの異性体の構造を密度汎関数法で調べ尽くした。シンクロトロン光を使っ た超高分解能 ZEKE によって観測された Not の解離極限に近い振動準位を高精度の配置間相互作用法によって解 析した。さらに, HCCS, HCCN, HCCPなど4原子分子のヤーンテラー効果のポテンシャルエネルギー曲面も系 統的に調べた。
- f) (CO<sub>2</sub>), クラスターと CH<sub>3</sub>I との反応で形成される CH<sub>3</sub>CO<sub>2</sub>I の構造を同定し, さらにこの負イオンの光解離励起ス ペクトルと解離分岐比を理論的に解析した。キシレンの二つのメチル基内部回転ポテンシャルエネルギー曲面を 計算し,内部回転準位を求め,電子遷移に伴う内部回転準位間のフランク・コンドン因子を計算し,実験と比較 し,観測されている状態を群論的に分類した。

### B-1) 学術論文

- C.-G. ZHAN and S. IWATA, "Ab initio MO and density functional studies on the vibrational spectra of 1,4-benzoquinone, and its anion and dianion," Chem. Phys. 230, 45-56 (1998).
- N. WATANABE, H. HAYASHI, Y. UDAGAWA, S. TEN-NO and S. IWATA, "Static structure factor and electron correlation effects studied by inelastic x-ray scattering spectroscopy," J. Chem. Phys. 108, 4545-4553 (1998).
- S. HIRATA and S. IWATA, "Density functional crystal orbital study on the normal vibrations and phonon dispersion curves of all-trans polyethylene," J. Chem. Phys. 108, 7901-7908 (1998).
- A. FIEDLER and S. IWATA, "The variety of [Fe, N, O] isomers. A theoretical study," J. Phys. Chem. 102, 3618-3624 (1998).
- H. WATANABE and S. IWATA, "Theoretical assignment of the photodissociation excitation spectra of the Mg+ ion complexes with water clusters," J. Chem. Phys. 108, 10078-10083 (1998).
- T. TSURUSAWA and S. IWATA, "Dipole-bound and interior electrons in water dimer and trimer anions: ab initio studies," Chem. Phys. Letters 287, 553-562 (1998).
- S. HIRATA and S. IWATA, "Analytical second derivatives in ab initio Hartree-Fock crystal orbital theory of polymers," J. Mol. Struct. (THEOCHEM) 451, 121-134 (1998).
- F. R. ORNELLAS and S. IWATA, "A theoretical study of the electronic structure and spectroscopic properties of the lowlying electronic states of the molecule AlSi," Chem. Phys. 232, 95-110 (1998).
- S. HIRATA and S. IWATA, "Analytical energy gradients in second-order Møller-Plesset perturbation theory for extended systems," J. Chem. Phys. 109, 4147-4155 (1998).
- S. HIRATA and S. IWATA, "Ab initio Hartree-Fock and density functional studies on the structures and vibrations of an infinite hydrogen fluoride polymer," J. Phys. Chem. 102, 8426-8436 (1998).
- M. V. VENER and S. IWATA, "Model study of H-bonded ROH···(NH<sub>3</sub>)<sub>5</sub> clusters: a search for possible ground state proton transfer species," Chem. Phys. Letters 292, 87-91 (1998).
- A. WADA, H. KANAMORI and S. IWATA, "Ab initio MO studies of Van der Waals molecule (N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>: Potential energy surface and internal motion," J. Chem. Phys. 109, 9434-9438 (1998).

### B-4) 招待講演

岩田末廣、「分子クラスターの量子化学」、筑波大学大学院化学研究科高度化推進経費に係わる公開シンポジウム、 つくば, 1998年12月.

- S. IWATA, "Quantum chemistry of solvated metal atom in water clusters," The international conference on chemistry of small manybody system, Tokyo (Japan), December 1998.
- T. IKEGAMI and S. IWATA, "Photodissociation Processes in Ar cluster cations," Mini-symposium on surface reaction, Okazaki (Japan), December 1998.
- **S. IWATA**, "Structures of water cluster anions and metal-water clusters and photoionization dynamics of  $Ar_n^+$ ," 13 th Canadian Conference on Theoretical Chemistry, Vancouver (Canada), August 1998.
- S. IWATA and T. TSURUSAWA, "Structure and Spectroscopy of water cluster anions," International Conference on Water in Gases, Paris (France), June 1998.

岩田末廣,「分子クラスターの量子化学」,日本化学会第74春季年会,大阪,1998年3月.

- T. IKEGAMI and S. IWATA, "Photodissociation dynamics of argon cluster ions," The Okazaki COE Conference on Molecular Science of Excited States and Nonadiabatic Transitions, Okazaki (Japan), March 1998.
- S. IWATA, "Hybrid procedure of ab initio MO and Monte Carlo samplings: application to water clusters," XII International Conference on Computers in Chemical Research and Education, Pune (India), January 1998.

### 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 (豊橋) (1993.7).

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

### 文部省、学審等の委員

日本化学会関東支部委員(1976-1978).

日本化学会学会賞等選考委員(1991-1992)

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-).

慶応義塾大学大型研究助成審查委員(1994-).

東京工業大学総合情報処理センター外部評価委員(1995-1995).

日本化学会学術賞等選考委員(1996-1997).

東京大学物性研究所運営協議会委員(1996-).

北海道大学理学研究科化学専攻 外部評価委員(1998).

### 学術雑誌編集委員

日本化学会関東支部委員(1976-1978).

「化学と工業」編集委員(1979-1981).

Bulltin of Chemical Society of Japan 編集委員(1981-1983).

日本化学会学会賞等選考委員(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(1994-1997).

Computer Physics Communication (Specialist editor) (1986-1993).

Theoretica Chimica Acta (1994-1997).

Theoretical Chemistry Accounts (1997-).

### 科研費の班長・研究代表者

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). 計算科学技術活用型特定研究開発推進事業研究代表者(1998-).

### B-7) 他大学での講義

東京大学理学系大学院化学専攻,客員教授,1997年5月1日-1999年3月31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。特に,大気環境における原子・分子過程にかかわる分子 の分光学的・化学反応データの正確な第一原理計算を進める。

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) 蛋白質分子の第一原理からの立体構造予測問題および折れ畳み問題

### A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 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,溶媒の効果を取り入れるのが困難であるばかりでなく,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ーをもってしても,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。我々はシミュレーションがエネルギー極小状態に留まらない強力な計算手法を,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拡張アンサンブル法(代表的なものが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,新たに独自の拡張アンサンブル法の開発に成功した。また,最小エネルギー構造ばかりでなく,小ペプチド系の折れ畳みの自由エネルギーランドスケープを温度の関数として求めた。更には,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,RISMやSPTなどの強力な手法と徐冷モンテカルロ法との合体にも成功した。

### B-1) 学術論文

- U. H. E. HANSMANN and Y. OKAMOTO, "Tertiary Structure Prediction of C-Peptide of Ribonuclease A by Multicanonical Algorithm," *J. Phys. Chem. B* **102**, 653-656 (1998).
- M. KINOSHITA, Y. OKAMOTO and F. HIRATA, "First-Principle Determination of Peptide Conformations in Solvents: Combination of Monte Carlo Simulated Annealing and RISM Theory," *J. Am. Chem. Soc.* **120**, 1855-1863 (1998).
- M. KINOSHITA, Y. OKAMOTO and F. HIRATA, "Calculation of Solvation Free Energy for a Peptide in Salt Solution Using the RISM Theory," *J. Comput. Chem.* 19, 1724-1735 (1998).
- U. H. E. HANSMANN, F. EISENMENGER and Y. OKAMOTO, "Stochastic Dynamics Simulations in a New Generalized Ensemble," *Chem. Phys. Lett.* **297**, 374-382 (1998).
- M. KINOSHITA, Y. OKAMOTO and F. HIRATA, "Singular Behavior of the Reference Interaction Site Model Theory Observed for Peptide in Salt Solution," *Chem. Phys. Lett.* **297**, 433-438 (1998).

## B-2) 国際会議のプロシーディングス

**U. H. E. HANSMANN and Y. OKAMOTO**, "Generalized Ensemble Simulation of Peptides and Proteins," in *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics X*, D. P. Landau, K. K. Mon, and H.-B. Schüttler, Eds., Springer Verlag, 180-185 (1998).

Y. OKAMOTO, "Towards the Prediction of Protein Tertiary Structures from First Principles," Physica A 254, 7-14 (1998). U. H. E. HANSMANN, "Generalized Ensembles: A New Way of Simulating Proteins," *Physica A* 254, 15-23 (1998).

### B-3) 総説、著書

Y. OKAMOTO, "Protein Folding Problem as Studied by New Simulation Algorithms," Recent Res. Devel. in Pure & Applied Chem. 2, 1-23 (1998).

岡本祐幸, 「モンテカルロシミュレーションで探るタンパク質の折り畳み機構」, 物性研究 70, 9 月号, 719-742 (1998).

岡本祐幸,「複雑な系を解く新しいサンプル法 - マルチカノニカル分子動力学法」, 化学 53, 9 月号, 66-67 (1998). 岡本祐幸,「モンテカルロシミュレーションによるタンパク質の立体構造予測」, 生物物理 38, 10 月号, 203-207 (1998).

### B-4) 招待講演

岡本祐幸,「蛋白質の立体構造予測シミュレーション」,第 11 期 CAMM フォーラム 1 月例会,港区,1998 年 1 月

岡本祐幸,「蛋白質の folding simulation」,第10回情報化学講習会,千代田区,1998年1月22日.

岡本祐幸、「蛋白質の折り畳みのモンテカルロシミュレーション」、筑波大学計算物理学研究センター研究会、つ くば,1998年3月23-24日.

Y. OKAMOTO, "Protein Folding Simulations by New Algorithms," International Symposium Protein Structure, Stability and Folding, Moscow (Russia), June 22-26, 1998.

岡本祐幸、「拡張アンサンブル法による蛋白質の折れ畳みシミュレーション」、第43回物性若手夏の学校、下高 井郡山ノ内町,1998年8月22日-8月24日.

Y. OKAMOTO, "Protein Tertiary Structure Predictions by Monte Carlo Simulations," Keihanna International Workshop, Keihanna (Japan), August 29-31, 1998.

### B-6) 学会および社会的活動

### 学術雑誌編集委員

Journal of Molecular Graphics and Modelling (International Editorial Board) (1998-).

## 科学研究費の研究代表者、班長等

日本学術振興会未来開拓学術研究推進事業「第一原理からのタンパク質の立体構造予測シミュレーション法の 開発」プロジェクトリーダー(1998-).

### B-7) 他大学での講義

立命館大学理工学部、「蛋白質の折れ畳みのモンテカルロシミュレーション」、1998年2月14日.

北海道大学大学院理学研究科,「マルチカノニカル法による蛋白質の折れ畳みシミュレーション」, 1998年12月16日 - 18日.

## 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37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。現在アミノ酸数56の蛋白質Protein Gの構造予測に挑戦して いるが,単純な溶媒効果を取り入れたシミュレーションでは正しい構造が得られず,溶媒の効果の厳密な寄与の 取り入れを更に進める必要があることが分かってきた。

## 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、化学反応動力学論

### A-2) 研究課題:

- a) 化学反応の量子動力学
- b) 非断熱遷移の理論と応用
- c) 分子過程の外場による制御
- d) 分子スイッチ機構の提唱
- e) 超励起分子の特性と動力学

## A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 超球楕円座標系とSVD(Slow/Smooth Variable Discretization)法に基づき重 軽 重反応系における水素原子移行 の動力学をポテンシャル曲線間の非断熱遷移として理解する事に成功した。化学反応動力学を振動非断熱遷移と して概念化出来る。全角運動量 J が一般の場合も容易に取り扱える様に理論を拡張するとともに,電子的に非断 熱な化学反応の量子動力学への挑戦をも開始した。
- b) Landau-Zener-Stueckelberg型非断熱遷移の理論を完成したが,共線系反応に現われる鋭い共鳴の解析に成功する等 理論の有用性を実証した。3次元化学反応への応用も進めている。更に, Rosen-Zener-Demkov 型をも包含した統 一理論の構築を目指した研究も進めている。
- c) 我々が開発した時間依存非断熱遷移理論を旨く用いて外場による非断熱遷移の制御を有効に行う新しいアイデア を提唱した。レーザー場による分子過程の制御にも旨く適用出来ることを示した。
- d) 非断熱トンネルにおける特異な現象である完全反射を用いて周期系で分子スイッチが原理的に可能である事を以 前示したが、これを2次元狭窄のモデルに拡張しやはリスイッチングが原理的に可能である事を確かめた。
- e) 超励起状態の関与する動力学を扱う時に必要となるLippmann-Schwinger型の特異積分方程式を解析的に有効に処 理する手法を開発し応用した。解離性再結合過程における有効性を示した。

### B-1) 学術論文

- J. HORACEK, W. DOMCKE and H. NAKAMURA, "Electron Attachment and Vibrational Excitation in Hydrogen Iodide: Calculations Based on the Nonlocal Resonance Model," Z. Phys. D 42, 181-185 (1997).
- O. I. TOLSTKHIN, V. N. OSTROVSKY and H. NAKAMURA, "Cumulative Reaction Probability without Absorbing Potentials," Phys. Rev. Lett. 80, 41-44 (1998).
- V. I. OSHEROV, V. G. USHAKOV and H. NAKAMURA, "Semiclassical Theory of Nonadiabatic Transitions in a Two-State Exponential Model," Phys. Rev A 57, 2672-2682 (1998).
- O. I. TOLSTIKHIN and H. NAKAMURA, "Hypersphesical Elliptic Coordinates for the Theory of Light Atom Transfer Reactions in Atom-Diatom Collisions," J. Chem. Phys. 108, 8899-8921 (1998).

K. NOBUSADA, O. I. TOLSTIKHIN and H. NAKAMURA, "Quantum Mechanical Elucidation of Reaction Mechanisms of Heavy-Light-Heavy Systems:Role of Potential Ridge," J. Chem. Phys. 108, 8922-8930 (1998).

G. V. MIL'NIKOV, C. ZHU, H. NAKAMURA and V. I. OSHEROV, "Semiclassical Treatment of Resonances in the Collinear O + HO Exchange Reaction," Chem. Phys. Lett. 293, 448-454 (1998).

C. ZHU and H. NAKAMURA, "Improvement of the Adiabatic Phase Integral for the Landau-Zener Type Curve Crossing," J. Chem. Phys. 109, 4689 (1998).

O. I. TOLSTIKHIN, V. N. OSTROVSKY and H. NAKAMURA, "Siegert Pseudo-State Formulation of Scattering Theory: One-Channel Case," Phys. Rev. A 58, 2077-2096 (1998).

Y. TERANISHI and H. NAKAMURA, "Control of Time-Dependent Nonadiabatic Processes by an External Field," Phys. Rev. Lett. 81, 2032-2035 (1998).

V. N. OSTROVSKY and H. NAKAMURA, "Patterns of Time-Propagation on the Grid of Potential Curves," Phys. Rev. A 58, 4293-4299 (1998).

K. NOBUSADA, O. I. TOLSTIKHIN and H. NAKAMURA, "Quantum Reaction Dynamics of Heavy-Light-Heavy Systems: Reduction of the Number of Potential Curves and Transitions at Avoided Crossings," J. Phys. Chem. 102, 9445-9453 (1998).

### B-4) 招待講演

H. NAKAMURA, "Complete solutions of Landau-Zener-Stueckelberg curve crossing problems and their generalizations and applications," The Okazaki COE Conference on Molecular Science of Excited States and Nonadiabatic Transitions, Okazaki (Japan) (1998).

H. NAKAMURA, "Quantum mechanical elucidation of reaction mechanisms of heavy-light-heavy systems," International Symposium on Elementary Chemical Processes, Perugia (Italy) (1998).

中村宏樹、「非断熱遷移と化学反応」、第4回低温化学セミナー、東海(茨城)(1998)。

中村宏樹,「非断熱遷移と化学動力学」,分子構造総合討論会,松山(愛媛)(1998).

### 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回組織委経理担当(1979).

ICPEAC (第17回及第18回)全体会議委員(1991, 1993).

ICPEAC (第21回)準備委員会委員,運営委員会委員

文部省、学術振興会等の役割等

学術審議会専門委員(1991-1995).

## 学術雑誌編集委員

Computer Physics Communication, Specialist editor (1986-).

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

ウォータールー大学応用数学科, 客員教授, 1994年7月 - . 東京大学教養学部,「化学動力学の基礎」,1998年1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特に電子的非断熱反応 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理論の構築と応用,時間依存外場による分子 過程の制御,超励起状態の統一的理解,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よる溶液の振動モード解析
- b) 凝縮相中分子の化学反応過程と電子移動反応過程の研究
- c) フラストレーションのある極性溶媒系での電子移動反応と分子分光
- d) 有機物導体の電子状態の研究

### A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 2次元ラマン等の高次光学過程による実験がポピュラーになるにつれ,様々な系を理論的に解析してほしいという声が強くなってきた。高次光学過程のスペクトルは,3次や4次の分極率や双極子の時間相関関数を求める事により計算されるが,溶媒等散逸のある系でこれらを計算する事は,量子力学の観測理論にも通じる厄介な問題である。本年度は,経路積分等,解析的な手法を用いて分子の振動モード間の結合が2次元ラマン分光で解析可能である事,周波数領域の実験スキームやTHz分光を用いても,2次元ラマンと同様な研究が可能な事,フォッカー・プランク方程式を用いた数値計算を行う事により,任意のポテンシャル系に対する2次元ラマンを計算する事が可能である事を示した。
- b) 水素移動反応等のトンネル過程や ,光合成中心等における電子移動反応は量子過程であるが ,その量子過程は ,溶 媒や蛋白質等の環境により孤立系とは非常に異なったものになっており ,場合よっては制御さえされていると考えられる。その研究のために ,経路積分法の新しい計算方法である最適化摂動理論という ,ファインマンの変分法を一般化した理論を用い ,まずモースポテンシャル系の 2 時間相関関数がこの手法により計算可能である事を示した。現在 ,その手法を 2 重井戸ポテンシャル系に対して拡張を行っている。また , ガウス・マルコフ型量子フォッカー・プランク方程式に低温補正項を入れて ,任意のポテンシャルに対する極低温でのトンネル効果の数値計算も行っている。常温の場合については ,自由度が 2 つある配位振動子系での電子移動反応の化学反応率を ,白色ノイズ型量子フォッカー・プランク方程式を用いて計算する事を目論んでおり ,既にプログラムの作成は終わっている。
- c) 極性溶媒中の分極分子のエネルギーポテンシャル面は,溶媒の分極等のマクロなパラメーターを軸としてプロットすると,マーカスによって示された様に,パラボラになる事が知られている。しかし,一般的には,これは中心極限定理等がよく効く,高温での事だけであり,極性溶媒のように,フラストレートした系においては,低温ではガラス転移してしまい,そのポテンシャル面は沢山の極小を持った非常に異なったものとなる。このような状態での溶媒ダイナミックスとそれが溶質分子に及ぼす効果は,高温の場合と非常に異なっているはずであるのだが,そのような効果はまだあまり調べられていない。本研究では,二準位系と相互作用するスピングラス熱浴系のモデルを考え,それが誘起するノイズやその不均一性について調べた。その結果,ノイズが1/f的である事等を示した。また,フラクタルノイズで揺動される二準位系の吸収スペクトルについても,確率過程的理論を一般化する事により解析的な研究を行い,自然緩和との相互作用により,吸収ピークが分裂する等,特異な現象を発見した。

d) DCNQI-M塩(M:金属)は,金属や置換基を変化させる事により様々な状態を取る。このような多様性は,分子 の僅かな違いを反映していると考えらるが,理論的な研究としてはモデルを仮定し,そのパラメータを実験から 決め,物性を探るというトップダウン的なアプローチを取る場合が多い。これに対し,我々は,最近ハード的に もソフト的にも非常に強力になった,量子化学計算を用いて,それをベースにモデルを構築し,その物性研究を 行い実験と比較するというボトムアップ的アプローチをこころみた。DCNQI 分子の中性,アニオン両方のモノ マーをab initio HF/DZPレベルで行い実験データーと比較して,よい一致を見た。さらにダイマーの電子状態を計 算し,トランスファー積分を評価した。サイト間のトランスファー積分を計算するため,テトラマーのab initio HF 計算で得られた電子軌道を DCNQI 分子に局在化させ, LUMO 軌道のみを考慮した, テトラマー, オクタマーモ デルの有効ハミルトニアンを構築し,それを厳密対角化して基底状態を求めたところ,サイトーつごとに電子が 反強磁性にならぶ signlet 状態である事がわかり、実験と一致する結果を得た。同様な計算を BEDT - TTF 塩につ いても行っている。

### B-1) 学術論文

- Y. TANIMURA, "Fifth-order two-dimensional vibrational spectroscopy of a Morse potential system in condensed phases," Chem. Phys. 233, 217-229 (1998).
- M. CHO, K. OKUMURA and Y. TANIMURA, "Coherent two-dimensional Raman scattering: Frequency-domain Measurement of the intra- and intermolecular vibrational interactions," J. Chem. Phys. 108, 1326-1334 (1998).
- Y. TANIMURA, H. TAKANO and J. KLAFTER, "Spectral random walks and line broadening of impurity molecules in an Ising spin glass environment," J. Chem. Phys. 108, 1851-1858 (1998).
- G. GANGOPADHYAY and Y. TANIMURA, "Absorption line shape of impurity molecule driven by a fractal noise," Chem. Phys. Lett. 289, 97-104 (1998).
- K. OKUMURA and Y. TANIMURA, "Two-dimensional THz spectroscopy of liquids: nonlinear vibrational response to a series of THz laser pulses," Chem. Phys. Lett. 295, 298-304 (1998).
- Y. MARUYAMA and Y. TANIMURA, "Pump-probe spectra and nuclear dynamics for a dissipative molecular system in a strong laser field: predissociation dynamics," Chem. Phys. Lett. 292, 28-34 (1998).
- Y. IMAMURA, S. TEN-NO, K. YONEMITSU and Y. TANIMURA, "Theoretical Study on correlation of 1-D(DCNQI)2M(M=Li,Ag) salts," Chem. Phys. Lett. 298, 15-20 (1998).

### B-4) 招待講演

- Y. TANIMURA, "Femtochemstry", Symposium on Japanese-American Frontiers of Science, Irvine (USA), August 1998.
- Y. TANIMURA, "Fifth-order two-dimensional vibrational spectroscopy of a Morse potential system in condensed phases", 凝縮相中の超高速分光,台北, September 1998.
- Y. TANIMURA, "Gaussian-Markovian quantum Fokker-Planck approach to nonlinear spectroscopy of a displaced Morse potentials system", 韓国化学会年会, 天安市 (韓国), October 1998.

# B-6) 学会および社会的活動

#### 学会の組織委員

The Okazaki COE conference on "Molecular Science of Excited States and Nonadiabatic Transitions," March 25-28, 実行 委員 (1998).

#### 学術雑誌編集委員

Association of Asia Pacific Physical Bulletin 編集委員 (1994-).

Journal of Physical Society of Japan 編集委員 (1998-).

# B-7) 他大学での講義、客員

物質科学研究所,1997年6月1日-5日.

京都大学大学院理学研究科化学科,併任助教授,1998年4月-.

## C) 研究活動の課題と展望

2次元ラマン分光は,分極率の3次相関関数を直接観測する実験スキームであり,非調和振動子性等,系の微細 な違いを検出する事が出来る。しかしながら、このスペクトルの解析は、2次元マップされたシグナルをパター ンマッチ的に行う点,通常の分光とは大きく異なっており,また,微細な違いが反映される分,理論的にも精度 の高いものが要求される。今後の研究として、トロポロンの異性化反応のような、トンネル過程が重要となる系 での3次,5次光学過程のスペクトルを計算する事を試みる。この目的のために,以前に導出したガウス・マル コフ型のフォッカー・プランク方程式に,さらに低温補正を加えた式を用いる。最近の計算機はメモリー容量が 飛躍的に増加したが,これを用いて,電子移動反応や,プロトン誘起電子移動等,2次元ポテンシャル面で特徴 化できる計算も行う予定である。以上は数値的な計算であるが、解析的な研究として、ファインマンの変分法の 一般化である最適化摂動法による経路積分の計算を行って、トンネル現象の解析を行ったり、確率過程的理論を 用いて、回転緩和系に対する3次や5次スペクトルの計算を行う予定である。

# 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と化学反応の理論
- b) 溶液中の集団的密度揺らぎと非平衡化学過程
- c) 生体高分子の溶媒和構造の安定性に関する研究
- d) 電極の電子配列を考慮した電極-溶液界面の統計力学

## A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 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。われわれは以前に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) を提案している。1998年度におけるこの分野の主な成果は以下の諸点にまとめられる。
  - (i)非プロトン性溶媒中におけるフォルムアミドのケト エノール互変異性化反応の研究。この研究においてわれ われは異性化反応に対する溶媒効果が連続体モデルに基づく反作用場の式には従わず,むしろ,経験的な水素結 合パラメタを含む Taft の式に従うことを明らかにした。[J. Phys. Chem. B 102, 2045 (1998) に既報]
  - (ii)水の自己解離定数 ( pKw ) の温度依存性。水のイオン積は温度とともに減少することが知られているが , われ われは RISM-SCF 法に基づきこの実験結果を再現するとともに、それが主とし水酸イオンの電子状態が「柔らか い」ことに起因することを明らかにした。[J. Phys. Chem. A 102, 2603 (1998) に既報]
  - (iii)水溶液中の酢酸のシン / アンチ構造平衡。水溶液中では酢酸のアンチ異性体がシン異性体に比較してはるかに 強く安定化されるため、その自由エネルギー差が6.9 kcal/mol から1.7 kcal/mol に減少することを理論的に示した。 [J. Mol. Struct. (Theochem) in press]
  - (iv)メンシュトキン反応の自由エネルギー曲面の決定。水溶液中の反応 NH3 + CH3 NH3 + CH3 + CH3 + CH3 の反応座標 に沿った自由エネルギー曲面を決定した。得られた曲面の活性化障壁の高さや反応物 生成物間の自由エネルギー 差は実験結果および分子シミュレーションの結果と良好な一致を示した。また、活性化障壁の位置は反応物側に シフトしており, ハモンド則を満たしている。[Intnl. J. Quant. Chem. in press]
  - (v)アセチルアセトンのケト-エノール互変異性化反応に対する溶媒効果。この研究においてわれわれは水素結合 性,極性,および非極性溶媒の代表である水,DMSO,CCI4が異性化反応に対してどのような異なる溶媒効果を 示すかに着目して、電子状態および熱力学量の計算を行った。その結果、溶媒の極性が大きくなるに従って、ケ ト型の幾何形状がその双極子能率を増加させるように変化することを見い出した。また、その形状変化が水中で は溶媒和エンタルピーによって決定されているのに対して,DMSO中ではエントロピーによって支配されている ことを明らかにした。[J. Phys. Chem. in press]
- b) われわれは昨年までの研究において,液体の非平衡過程を記述する上で相互作用点モデルが有効であることを示 し,そのモデルによって液体中の集団的密度揺らぎ(集団励起)を取り出す方法を提案してきた。さらに,その 理論に基づき溶液内の化学種のダイナミックス(位置の移動,電子状態,構造変化)をそれらの変化に対する溶

媒の集団的密度揺らぎの応答として記述する理論を展開しつつある。この分野の研究成果は以下の諸点にまとめ られる。

(i)モードカップリング理論による記憶項の精密化。昨年までの理論では,一般化ランジェヴァン方程式の記憶項 を「速く減衰する項」だけで近似していたが,本年度はモードカップリング理論により「遅く減衰する」項を付 け加え,遅いダイナミックスにも適用可能とした。[Phys. Rev. E 58, 6188 (1998)]

- (ii)上記理論による時間相関関数の計算。(i)の理論に基づき,異核二原子分子よりなる極性液体中の動的構造因子, 速度相関関数,拡散係数など各種速度相関関数を求めた。これらの相関関数は集団的密度揺らぎの二つのモード (音響モードと光学モード)に対応して並進と回転の運動に分解された。特に,回転の速度相関関数と拡散係数を 統計力学の方法により求めたのは,これが,最初の仕事である。[Phys. Rev. E 58, 7296 (1998)]
- (iii)極性溶媒中のイオンのダイナミックス。極性溶媒中のイオンのダイナミックスはストークス アインシュタイ ン則に従わず、その摩擦抵抗はイオン半径の増加とともに、一旦、減少し、極小を通って増加に転じることが知 られている。摩擦抵抗のこの振るまいは電磁流体力学の範囲ではいわゆる誘電摩擦とストークス抵抗の拮抗関係 によって説明されてきた。われわれはモードカップリングの取り扱いにより、これら二つの摩擦抵抗がイオンの 運動に対する溶媒の二つのモード(音響モードと光学モード)の応答として説明できることを示した。この理論 は一切の経験的パラメタを含んでおらず,その意味で,極性溶媒中のイオンのダイナミックスに対する第一原理 に基づく最初の統計力学理論である。[J. Chem. Phys. 108, 7339 (1998)]
- c) 当グループは岡本グループおよび京都大学の木下氏と共同して、液体の RISM 理論とシミュレーションアルゴリ ズムを結合し,溶液中の蛋白質の巻き込みの第一原理理論を発展させつつある。この問題では昨年度の研究で,エ ンケファリンの溶液構造の決定に成功し,また,その研究において溶媒である水が単に蛋白質の安定性に本質的 役割を果たすだけでなく、巻き込みの経路の決定にも関わりを持っている可能性を示唆した。[J. Am. Chem. Soc. 120, 1855 (1998)]

本年度はこの解析をリボ核酸分解酵素から抜きだした C- ペプチド(10残基)に拡張した。C- ペプチドは適当な 条件下で約50パーセントの割合でアルファヘリックス構造を作ることがBaldwinらの実験によって明らかになっ ている。しかしながら ,われわれの計算ではアルファヘリックス構造が必ずしも最安定構造ではないという結果 が得られた。[J. Chem. Phys. in press]この実験との不一致にはいくつかの理由が考えられるが,その主要なものは おそらくシミュレーションで使用したポテンシャルパラメタの問題および実験とシミュレーションとの間の熱力 学条件の違いである。ポテンシャルパラメタに関して,これまで,Scheragaらによって開発されたECEPP系のパ ラメタを使用したきたが、もうひとつの代表的パラメタである AMBER 系のパラメタに変えるとアルファヘリッ クス構造をより安定化させるという予備的な結果が得られている。もうひとつの問題である熱力学条件はより本 質的な意味をもっている。われわれが主として行ってきたのは純水中のシミュレーションであるが実際の実験条 件には pH や溶解度のコントロールなどのため必ずイオンが含まれており,これらは蛋白質(ペプチド)の構造 に大きな影響を及ぼすことが知られている。蛋白質の構造は温度や圧力など他の条件も含めたすべての熱力学条 件によってかなりシャープに定義されている。したがって,蛋白質の安定性を理解するためにはこれらの条件を 変えたときの蛋白質の構造応答を調べる必要がある。この問題に関してわれわれは(i)ペプチドの構造安定性に及 ぼす塩効果 ,および(ii)圧力効果 ,を調べる理論的 ,技術的方法論の開発に着手した。[J. Comp. Chem. 19, 1724-1735 (1998); Chem. Phys. Lett. 297, 433 (1998); 高圧の科学と技術 8(2), 96 (1998)]

d) 電極表面での電子移動などいわゆる電極反応においては金属表面の構造(原子配列や電子状態)と溶液相の構造 (水の構造やイオンの分布など)が重要な役割を演じる。われわれは昨年度の研究において,金属表面と溶液相の 両方を原子レベルで取り扱う統計力学理論を提案し,その理論に基づき金属表面の電荷や原子配列を変化させて 表面の水の分布および配向を求めた結果 赤外反射分光法で得られた結果と基本的に一致する描像を得た。[J. Chem. Phys. 108, 4904 (1998)]この理論は電極表面の原子配列の周期性を利用したもので,本質的には溶媒分子の分布を 表面原子からの動径距離に一次元的に投影した描像を与える。本年度はRISM 理論を密度汎関数法と組み合わせ ることによって電極表面の電子状態を考慮する理論の開発に取り組んだ。このために,まず,電極表面における 溶媒分子の三次元的分布を記述できるよう RISM 理論そのものを書き換える必要があった。さらに積分方程式解 法の収斂を速めるために数値解析上のアルゴリズムの改良に取り組んだ。これらの成果は [Chem. Phys. Lett. 290, 237 (1998)] [J. Comp. Chem. 投稿中]に発表した。次ぎにこれらの成果をもとに電極表面の原子配列および電子状 態を考慮した理論を提案した。[J. Chem. Phys. in press]この理論に基づき表面電子の仕事関数に対する溶媒効果を 計算した結果,真空中と比べて0.5 eVの減少が見られた。この結果はParrinelloらによって第一原理分子動力学シ ミュレーションから得られた結果(0.6 eV)と良く一致している。また,表面における水分子の最安定位置は金 属原子の'on-top-site'ではなく'hollow-site'であること,および,水分子はその双極子の軸が表面と平行に近いよう な配向をとることがなど明らかになった。これらの結論は大沢らの実験結果と一致するものであり、一次元RISM に基づく先の研究の結果とも整合的なものであった。

#### B-1) 学術論文

- M. KINOSHITA, Y. OKAMOTO and F. HIRATA, "Solvation Structure and Stability of Peptides in Aqueous Solutions Analyzed by the Reference Interaction Site Model Theory," J. Chem. Phys. 107, 1586 (1997).
- T. ISHIDA, F. HIRATA, H. SATO and S. KATO, "Molecular Theory of Solvent Effect on keto-enol Tautomers of Formamide in Aprotic Solvents: RISM-SCF Approach," J. Phys. Chem. B 102, 2045 (1998).
- H. SATO, F. HIRATA and A. B. MYERS, "Theoretical Study of the Solvent Effect on Triiodie Ion in Solutions," J. Phys. Chem. A 102, 2065 (1998).
- H. SATO and F. HIRATA, "Theoretical Study for Autoionization of Liquid Water: Temperature Dependence of the Ionic Product (pKw)," J. Phys. Chem. A 102, 2603 (1998).
- M. KINOSHITA, Y. OKAMOTO and F. HIRATA, "First-Principle Determination of Peptide Conformations in Solvents: Combination of Monte Carlo Simulated Annealing and RISM Theory," J. Am. Chem. Soc. 120, 1855 (1998).
- S.-H. CHONG and F. HIRATA, "Interaction-site-model description of collective excitations in classical molecular fluids," Phys. Rev. E 57, 1691 (1998).
- S.-H. CHONG and F. HIRATA, "Dynamics of solvated ion in polar liquids: an interaction-site-model description," J. Chem. Phys. 108, 7339 (1998).
- S.-H. CHONG and F. HIRATA, "Interaction-site representation for collective excitations in diatomic dipolar liquid," J. Mol. Lig. 77, 105 (1998).
- S.-H. CHONG and F. HIRATA, "Effect of molecular symmetry on electrical potential fluctuations of solvent around solute in polar liquid," Chem. Phys. Lett. 293, 119 (1998).
- R. AKIYAMA and F. HIRATA, "Theoretical Study for Water Structure at Highly Ordered Surface: Effect of Surface Structure,"

J. Chem. Phys. 108, 4904 (1998).

A. F. KOVALENKO and F. HIRATA, "Three-dimensional density profiles of water in contact with a solute of arbitrary shape: a RISM approach," Chem. Phys. Lett. 290, 237 (1998).

S.-H. CHONG and F. HIRATA, "Mode-coupling theory for molecular liquids based on the interaction-site model," Phys. Rev. E 58, 6188 (1998).

S.-H. CHONG and F. HIRATA, "Time-correlation functions in molecular liquids studied by the mode-coupling theory based on the interaction-site model," Phys. Rev. E 58, 7296 (1998).

M. KINOSHITA, Y. OKAMOTO and F. HIRATA, "Calculation of solvation free energy for a peptide in salt solution using the RISM theory," J. Comp. Chem. 19, 1724 (1998).

M. KINOSHITA, Y. OKAMOTO and F. HIRATA, "Singular behavior of the reference interaction site model theory observed for peptide in salt solution," Chem. Phys. Lett. 297, 433 (1998).

T. KAKITANI, R. AKIYAMA, Y. HATANO, Y. IMAMOTO, Y. SHICHIDA, P. VERDEGEM and J. LUGTENBURG, "Deuterium Substitution Effect on the Excited-State Dynamics of Rhodopsin," J. Phys. Chem. B 102, 1334 (1998).

A. F.KOVALENKO and O. PIZIO, "The Structure and Adsorption of the Four Bonding Sites Model for Associating Fluids in Disordered Porous Media From Replica Ornstein-Zernike Integral Equation Theory," J. Chem. Phys. 108, 8651 (1998).

A. KOVALENKO, "Extended States of a Shallow Donor Located Near a Semiconductor-Insulator Interface," Internat. J. Ouant. Chem. 66, 435 (1998).

#### B-3) 総説、著書

F. HIRATA, "Chemical Processes in Solution Studied by an Integral EquationTheory of Molecular Liquids," Bull. Chem. Soc. Jpn. 71, 1483 (1998).

F. HIRATA, T. IMAI and M. IRISA, "Molecular Theory of Partial Molar Volume," 高圧の科学と技術 8(2), 96 (1998).

#### B-4) 招待講演

平田文男,「溶媒和の平衡,非平衡過程に関する液体論的研究」,日本分光学会装置部・理化学研究所合同シンポ ジウム, 理化学研究所, 1998年1月.

F. HIRATA, "Theoretical Syudy for Partial Molar Volume of Biomolecules in Aqueous Solutions: Amino Acids and Peptides," Kobe Workshop on Pressure and Protein Dynamics, Kobe (Japan), March 1998.

F. HIRATA, "Dynamical response of collective excitations in solvents to solute perturbation," The Okazaki COE conference on 'Molecular Science of Excited States and Nonadiabatic Transitions,' Okazaki (Japan), March 1998.

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」、日本化学会第74春季年会、同志社大学、1998 年3月.

平田文男、鄭 誠虎、「溶液中の集団的密度揺らぎと溶媒和イオンのダイナミックス」、電気化学会春期年会、東 京工業大学, 1998年4月.

F. HIRATA and T. IMAI, "Structure-Volume-Pressure Relationship of Aqueous Solutions," Kaihanna International Workshop 'Pressure effect on protein dynamics and folding,' Kyoto (Japan), August 1998.

F. HIRATA and A. KOVALENKO, "Three dimensional distribution of water near an ordered electrode-surface: A RISM approach," International Symposium on Electrochemistry of Ordered Interface, Sapporo (Japan), September 1998.

平田文男、「蛋白質立体構造の熱力学的安定性」、日本物理学会秋期年会シンポジウム「水と生体高分子が織り成 す生命の物理」、琉球大学、1998年9月.

平田文男、「溶液内化学反応の分子論」、合同研究会「分子物理化学の新展開」「化学動力学理論の新展開」、 岡崎, 1998年10月.

F. HIRATA, "Collective fluctuations in molecular liquids and their response to ion dynamics," International Conference on 'Chemistry of Small Manybody System,' Keio University, Tokyo (Japan), December 1998.

A. KOVALENKO and F. HIRATA, "Self-consistent, DFT and 3D-RISM description of an Interface between metal and molecular liquids," Symposium on Theory of Surface Reaction, Okazaki (Japan), December 1998.

佐藤啓文,「溶媒効果理論:連続誘電体モデルの理論と実践における利点と限界」,第8回有機素反応研究会,箕 面,1998年7月.

佐藤啓文,「溶液内分子の電子状態理論 -RISM-SCF/MCSCF 法によるアプローチ - 」,第9回理論化学シンポジウ ム,瀬戸,1998年8月.

佐藤啓文,「溶媒効果とMO計算」,第38回分子科学若手の会夏の学校(講師),京都,1998年8月.

#### B-6) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

溶液化学研究会運営委員(1994-).

## 学会の組織委員

第26回溶液化学国際会議組織委員(1999.7).

Keihanna International Workshop "Pressure Effect on Protein Dynamics and Folding" 組織委員(1998.8).

The 8th Korea-Japan Symposium on Molecular Science: Molecular Spectroscopy and Theoretical Chemistry 組織委員 (1998-).

#### 学会誌編集委員

物性研究各地編集委員(1996-).

## C) 研究活動の課題と展望

今後の研究活動の課題としては引き続き先にA-2)項に述べた四つの課題を追求する。同時に,溶液内化学反応の 速度に関する理論への取り組みを開始する。この理論は上記の四つの課題を結合して始めて達成し得るものであ る。その課題設定および展望を以下に述べる。反応速度に対する溶媒効果として,大別すると二つが考えられる。 ひとつは反応のエネルギープロファイルに及ぼす影響であり、これは RISM-SCF 法で反応系の溶媒和自由エネル ギーおよび電子エネルギーを含む自由エネルギー曲面を計算することにより求めることができる。 もうひとつの 効果は溶媒の動的揺らぎに関係しており、反応の駆動力としての溶媒のランダムな力と反応の進行を抑える「力」 としての抵抗力がその主な要素である。反応速度の問題はこれらの要素を含む確率微分方程式を反応経路に沿っ て解くことに他ならない。溶液内化学反応のこのような観点はクラマースによって確立されたものであるが,次 の2点において古典的クラマース理論やその単純な拡張と異なる。(i)クラマース理論では反応経路およびそれに

沿ったポテンシャルプロファイルを単純化し2次曲線の重ね合わせで表現するのに対して,われわれは反応の自 由エネルギー曲面を RISM-SCF 法により求め、その反応系から生成系に至る経路の中で自由エネルギーを極小と る経路を反応経路として選ぶ。(ii)クラマース理論では本質的に現象論的なSmoluchowski方程式に基づいて解析す るのに対して,われわれは反応座標を変数としてもつ一般化ランジェヴァン方程式を用いる。さらに,一般化ラ ンジェヴァン方程式における抵抗力と揺動力およびその関係(揺動散逸定理)は現象論的ではなく液体の統計力 学に基づく分子論的表現を導入する。われわれは平成10年度の課題研究において,溶液内化学反応に関する問題 に取り組みいくつかの重要な成果を発表した。そのひとつは溶液内の化学種の安定性および反応経路に関わるも のである。その中には溶液内メンシュトキン反応(SN2)の反応自由エネルギー曲面の決定,ケト-エノール互 変異性化反応への溶媒効果の研究などが含まれる。平成10年度の課題研究のもうひとつの成果は極性溶媒のダイ ナミックスおよびその中のイオンの運動に対する溶媒の摩擦抵抗に関わるものである。その中でわれわれは溶質 の化学変化に対する溶媒の動的な影響を溶媒の集団的な揺らぎの応答としてとらえる新しい概念を提案した。こ の概念は溶液内化学反応を「反応経路に沿った溶質のブラウン運動とみなす理論」を発展させる上で鍵となるも のである。

# 米 満 賢 治(助教授)

A-1) 専門領域:物性理論

#### A-2) 研究課題:

- a) 擬 1 次元有機導体における次元クロスオーバー
- b) フェルミ面に平坦な部分をもつ2次元電子系の異方的スケーリング
- c) 二量化が強い2次元電子系に2バンドがある場合の伝導性,磁性と次元性の効果
- d) 1次元 π-d 電子系の絶縁相での d 電子間反強磁性結合と 電子間斥力の協力効果
- e) 非縮退の基底状態をもつポリマーにおけるポーラロンとバイポーラロンの競合
- f) ハロゲン架橋複核白金錯体の電子状態
- g) 銅酸化物超伝導体の同位体効果と局所的反強磁性相関を伴うポーラロンの動力学
- h) ポリマーにおける光誘起分極反転

#### A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 擬 1 次元有機導体 (TMTTF)<sub>2</sub>X (TMTSF)<sub>2</sub>X は温度と圧力によって様々な電子状態を示し,分子性導体の中で最も 詳しく研究された系である。銅酸化物を契機として,異常な金属相の可能性が追求されて,金属相にも低圧側と 高圧側とで性質が異なることがわかってきた。これを次元クロスオーバーという観点から見直してみる。低圧側 は鎖間の重なり積分が小さく,高温では熱浴と接する1次元系とみなせる。温度を下げていくと,まず電荷が局 在し,さらに低温で磁気的な長距離秩序が生成する。つまり,1電子が横方向にコヒーレントに動けないまま,磁 気秩序が生まれる。高圧側は鎖間の重なり積分が大きく,異方的な3次元系として記述できる。温度を下げると, 1電子の横方向コヒーレンスが回復して,フェルミ面のネスティングにより磁気秩序が決まる。3次元性がある とすぐ壊れてしまう理想的な1次元金属,朝永ラティンジャー液体と比較すると,この有機導体は1/4というバ ンド充填率と二量化のために電荷ギャップがあき,低圧側でなかなか1電子コヒーレンスが回復しないことが重
- b) 超伝導転移温度より高温で波数に依存した擬ギャップが角度依存光電子スペクトルによってみえている Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>-CaCu<sub>2</sub>O<sub>8</sub> はフェルミ面に平坦な部分をもっている。平坦な部分では,1次元電子系と同様に粒子・粒子チャンネ ルと粒子・正孔チャンネルの効果の打ち消し合いが起こり、波数に依存したスケーリングが成り立つ。つまり、波 数に依存した準粒子ウェイトの繰り込みフローが現れる。実験では平坦な部分の中央から擬ギャップがあくが、繰 り込み群の計算でもそこで最も準粒子重みが小さくなり,実験結果と矛盾しないことがわかった。この計算は今 までと違い,繰り込み群方程式で次数を最低次に限らなかったために可能になった。
- c) 擬 2 次元金属錯体化合物(Et<sub>n</sub>Me<sub>4-n</sub>Z)[Pd(dmit)<sub>2</sub>]<sub>2</sub>は ,擬 2 次元有機導体であるκ-(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Xと同様に伝導面内の 分子が強く二量化していて,反強磁性,超伝導を含む複雑な相図を示す。後者の磁性と伝導性は圧力が高くなる と二量化が小さくなり有効相互作用も弱くなることで説明できた。ところが前者の場合,カチオンを小さくすれ ば(化学的圧力が高くなると)逆に伝導性は悪くなり,反強磁性転移温度は高くなる。この違いは前者が1次元 的なバンドと2次元的なバンドをもち,カチオンが小さいほど1次元的なバンドが効いてくるためであることが 拡張ヒュッケル計算で示唆されていた。絶縁相での磁気モーメントは大きいので電子相関が強いことが予想され

るので、強結合極限から摂動計算を行い、磁性と伝導性が矛盾なく説明できることを示した。

- d) 1次元π-d電子系, CoPc(AsF<sub>6</sub>)<sub>0.5</sub> は似た結晶構造をもつNiPc(AsF<sub>6</sub>)<sub>0.5</sub> と違って3/4フィルドバンドのπ電子が局在 d電子と強磁性的に結合するためにモット絶縁体になっている。同在スピンの反強磁性相関が静的とみなせる場合, 伝導電子間の次近接相互作用がどんなに弱くても絶縁体に導くことがわかった。現実には同在スピンが量子的に 揺らいでいるので,同在スピン間に異方的な交換相互作用を考えて,密度行列繰り込み群というもっとも数値的 に信頼できる方法で電荷ギャップを計算した。量子揺らぎがあると電荷ギャップはとても小さく,付加的な相互 作用か不純物効果が実際には効いているかもしれない。
- e) 非縮退の基底状態をもつポリマーに電子または正孔をドープするとポーラロンかバイポーラロンが形成される。どちらが形成されているかは光伝導度を理解するために重要であるが,実験からはまだわからない。電子相関と電子格子相互作用のもたらす強い非線型性のために,理論的にも困難な問題であったが,密度行列繰り込み群が決着をつけた。相互作用が短距離であれば,バイポーラロンは従来考えられていたのよりずっと安定である。これは,オンサイト斥力が強いとスピンパイエルス状態中のスピン欠陥とみなせるために,正孔がペアを組むことからで,梯子系で超伝導が起こる機構と似ている。
- f) MMX鎖として知られるハロゲン架橋複核白金錯体は単核錯体とことなって伝導性がとてもよく、磁性や格子歪みのパターンが配位子に強く依存するので興味を集めている。これも二量化した 1/4 フィルドの 1 次元電子系として理解できる。研究を始めるにあたって摂動論的な計算をしたところ、絶縁体の格子歪みは従来考えられたのとは異なるパターンがありえることがわかった。
- g) 反強磁性相関が強いと電子格子相互作用が弱くても準粒子が容易に自己局在してポーラロンを形成し、ポーラロンがd波のペアを組むことが,数値的厳密対角化と半古典的経路積分の組みあわせで明らかになっていた。多電子問題を少数ポーラロン問題に置き換えたときのハミルトニアンのパラメタを厳密に計算して、ポーラロンの有効質量やペア束縛エネルギーを求めた。実験では正孔密度を変化させたときの同位体効果が詳しく調べられている。正孔密度が高くなるとポーラロンの有効質量が軽くなるとして,同位体効果を予測すると実験結果と無撞着であることがわかった。また,正孔密度が低いときの擬ギャップ形成を説明する機構の一つの候補となっている。
- h) 磁性には強磁性と反強磁性があるのに,電荷の分極には反強磁性に相当するものがない。これは熱力学的安定性から説明される。しかし,分子をレーザーで励起した準安定状態であれば分極が反転することもありえる。ポリマーが非縮退の基底状態をもつと,励起子が束縛した状態が可能になり,非占有状態が占有状態のすぐ下に来るために実際に分極が反転しうることが理論的に示された。最近のフェムト秒スケールの時間分解分光で充分に観測できるほど寿命は長い。安定性は分子動力学計算で確認された。

## B-1) 学術論文

- N. KOBAYASHI, M. OGATA and K. YONEMITSU, "Coexistence of SDW and Purely Electronic CDW in Quarter-Filled Organic Conductors," *J. Phys. Soc. Jpn.* 67, 1098-1101 (1998).
- **J. KISHINE and K. YONEMITSU**, "Dimensional Crossovers in the Doped Ladder System: Spin Gap, Superconductivity and Interladder Coherent Band Motion," *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 1714-1731 (1998).
- **J. KISHINE and K. YONEMITSU**, "Antiferromagnetic Phase Transition and Crossover to Fermi Liquid Phase in a Weakly Coupled Half-Filled Chain System," *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 2590-2593 (1998).

X. SUN, X. H. XU, K. HU and K. YONEMITSU, "Effect of Electron Correlation on Competition between BOW and SDW in Polymer," Phys. Lett. A 239, 191-195 (1998).

X. H. XU, R. T. HU, K. HU, X. SUN and K. YONEMITSU, "Off-Diagonal Interactions and Spin-Density Waves in Polymers," Phys. Rev. B 58, 9039-9046 (1998).

Y. IMAMURA, S. TEN-NO, K. YONEMITSU and Y. TANIMURA, "Theoretical Study on Electron Correlation of 1-D (DCNQI)<sub>2</sub>M (M=Li, Ag) Salts," Chem. Phys. Lett. 298, 15-20 (1998).

#### B-2) 国際会議のプロシーディングス

J. KISHINE and K. YONEMITSU, "One-Particle vs Two-Particle Crossover in Weakly Coupled Hubbard Chains and Ladders: Perturbative Renormalization Group Approach," Proceedings of the 9th International Conference on Recent Progress in Many-Body Theories 1, 408-412 (1998).

K. YONEMITSU J. KISHINE and T. OGAWA, "Superconductivity and Magnetism in Quasi-One-Dimensional Two-Bamd Systems," Rev. High Pressure Sci. Technol. 7, 490-492 (1998).

H. KINO, T. MIYAZAKI, M. MORI and K. YONEMITSU, "On the Effects of On-Site Coulomb Interaction in Strongly Dimerized Two Band Systems," Proceedings of the JRCAT Conference (1998).

#### B-4) 招待講演

小川卓広,「1次元 π-d 電子系の磁性と伝導の理論」, 擬一次元鎖ハロゲン架橋白金系混合原子価錯体の化学と物 理,名古屋,1998年1月.

岸根順一郎,「低次元強相関系における次元クロスオーバー」,第2回物性物理の最前線若手研究会,岡崎,1998 年1月.

米満賢治,「擬1次元導体における電子相関と次元クロスオーバー」、筑波大学物質工学系セミナー、筑波大学、1998 年2月.

J. KISHINE, "Crossover from Antiferromagnetic Phase to Fermiology Regime in a Weakly Coupled Half-Filled Chain System," Mini-Workshop on Theories of Molecular Conductors, University of Tokyo (Japan), March 1998.

米満賢治,「分子性導体の多様な物性:次元性と電子相関」,第9回理論化学シンポジウム,定光寺,1998年8月.

K. YONEMITSU, "Competiton among Different Charge or Magnetic Orderings in Quarter-Filled Molecular Conductors," 6th Japan-China Joint Symposium on Conduction and Photo-conduction in Organic Solids and Related Phenomena, Okazaki (Japan), October 1998.

岸根順一郎、「低次元電子系における有限エネルギースケールでのクロスオーバー現象: 摂動論的繰り込み群によ る1次元の側からのアプローチ」,物性研上田研究室セミナー,東京大学,1998年10月.

岸根順一郎、「フェルミ面の平坦さによる特異性と準粒子ウェイトの異方的流れ」、「2次元電子系の非フェルミ 液体的挙動と有限エネルギースケールでのクロスオーバー」ワークショップ,東京大学,1998年10月.

米満賢治、「分子性導体における伝導性と磁性の複合物性」、理工総研シンポジウム「複合的機能を有するナノ構 造材料の創製と物性 有機・無機の壁をこえて」, 名古屋大学, 1998年12月.

J. KISHINE, "Phase Transitions from Incoherent Metal Phases in Weakly Coupled One-Dimensional Conductors: Perturbative

Renormalization Group Analysis," International Workshop on Theory of Strongly Correlated Electrons, Hamamatsu (Japan), December 1998.

M. MORI and K. YONEMITSU, "Metal-Insulator and Antiferromagnetic Transitions with Varying Dimensionality in Strongly Dimerized Two-Band Metal-Assembled Complexes, (Me<sub>4-n</sub>Et<sub>n</sub>Z)[Pd(dmit)<sub>2</sub>]<sub>2</sub>," International Workshop on Theory of Strongly Correlated Electrons, Hamamatsu (Japan), December 1998.

#### B-6) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本物理学会名古屋支部委員(1996-1997, 1998-).

学会誌編集委員

日本物理学会誌編集委員(1998-).

## B-7) 他大学での講義、客員

筑波大学大学院理工学研究科、「低次元分子性固体の物性理論」, 1998年2月23日・25日.

# C) 研究活動の課題と展望

電子輸送の次元性をかなり制御できる分子性導体は,次元性と電子相関が電子状態にどう関わるかを研究する上 で理想的な系である。1次元系と3次元系は理論的には全く異なる枠組みで理解されているが,それらの間を,温 度,圧力,元素置換などで移り変わる様子が系の幾何学的特性とどう関係するかを,高温側からの摂動論的方法 でかなり理解することができた。今後はバンド充填率と整合性や乱雑ポテンシャルの大きさによって次元クロス オーバーがどう変わるかを調べ、DCNQI塩の金属原子置換効果の理解を深める。現実はずっと複雑である。多様 な物質の多様な電子状態を理解するには上記とは反対のアプローチ,即ち低温側からの強結合展開や数値的手段 が必要で,個々の物質ごとに少しずつ明らかにする必要がある。これらの方法論をもっと充実させて,各種の実 験や第一原理計算の局所的なデータと比較できるようにしたい。この視点で MMX 鎖の研究を始めたばかりであ る。強結合展開で得られた局所的な電子相関が系の長距離にわたる性質にどう関わっていくかは,最も挑戦的な テーマであるが, Pd(dmit)2塩の研究はいまその段階にある。

# 3-3 分子構造研究系

# 分子構造学第一研究部門

# 斎藤修二(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) 分子雲の星間化学
- 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・サブミリ波分光法と分子構造

a-1)分子イオン D<sub>3</sub>O+ の反転回転スペクトルの観測と反転分裂および構造の決定

ヒドロニュウムイオン H<sub>3</sub>O+ は水溶液化学での主な構成イオンであり星間化学でも要となる分子である。また, H<sub>3</sub>O+はNH<sub>3</sub>と同電子構造をもち,NH<sub>3</sub>と同様,大きい反転運動を示すので分光学的にも重要な分子である。これ まで H<sub>3</sub>O+ は赤外, マイクロ波領域の分光の対象となり,詳細な結果が得られているが, D<sub>3</sub>O+ については 2 件の 赤外分光のみが報告されているに過ぎなかった。今回,我々は,D<sub>3</sub>O+の反転回転スペクトルをマイクロ波分光に より初めて明らかにし、振動基底状態での反転分裂を精密に決定したのみならず,多数のスペクトル線の詳細な 解析に基づき  $\Delta k = \pm 3n$  の高次項の存在を明らかにし、また、振動回転相互作用の詳しい解析に基づいて、零点 振動平均構造さらに平衡構造を決定した。

a-2)マイクロ波分光による新しい含りん短寿命分子の検出

これまでのりんを含んだ新しい短寿命分子  $H_2PO$ , HCCP,  $CH_2CP$ のマイクロ波スペクトルに加えて, 気相での存 在が知られていなかった不安定分子, H<sub>3</sub>POのマイクロ波スペクトルを初めて検出した。H<sub>3</sub>POの分子については これまで多くのレベルの高い量子化学計算がなされいて、H3POよりはH2POHの方がエネルギー的に安定である と結論されていたものである。D3POおよびH3P18Oのマイクロ波スペクトルも測定し、H3POの対称コマ分子構造 を決定した。その結果,H<sub>3</sub>PO の PO 結合は,HPO などの単純な PO 二重結合と異なり,H<sub>2</sub>PO ラジカルの場合と 同様単結合と三重結合の一次結合として解釈できることが分かった。

a-3)マイクロ波分光による新しい金属水酸化物 CuOH 不安定分子の検出

金属を含んだ水酸化化合物としては,これまでにNaOH,KOH,MgOH,CaOH,BaOH,BaOHなど含アルカリ金 属、アルカリ土類金属水酸化化合物がマイクロ波分光法の対象となり、いずれも直線型三原子分子と判明してい る。今回、いわゆる重金属を含んだ水酸化化合物CuOHのマイクロ波スペクトルを初めて検出した。同位体種CuOD および<sup>65</sup>CuOHのスペクトルも測定解析した結果、CuOHの分子構造が不等辺三角形であることを明らかにできた。 今回の結果は, CuO 結合は Cu+O のイオン結合であるにもかかわらず, 不等辺三角形に落ち着く理由, そのポテ

ンシャルを検討する重要な情報を与える。

#### c) 重水素化合物の星間化学-重水素濃縮と暗黒星雲コアの進化年齢の見積り

国立天文台 45 m 電波望遠鏡による暗黒星雲 TMC-1 でのラインサーベイの結果,シアノポリインピーク(TMC-1A) では DCCN, DC5N, HDCS, c-C3HDの4種の重水素化合物が検出された。このうち HDCS 以外の3種について は既に報告がある。とくにc-C3HDについては親分子種に対する相対濃度が高く,TMC-1Aで8%,アンモニアピー ク(TMC-1B)で12%, DCO+ピーク(TMC-1C)で16%の高濃度に達していると報告されている。また, DCO+のマッ ピング観測の結果によると DCO+ は TMC-1B から TMC-1C にかけて高濃度で存在する。一方, NH<sub>2</sub>D のサーベイ 観測の結果によると, TMC-1 では未検出である。以上の観測事実にたいして化学濃縮モデルを適用すれば,暗黒 星雲における重水素化合物の振る舞いを統一的にコアの進化として説明できるとの結論に到達した。例えば,c-C3HD の高濃縮度を最も良く再現している Howe&Millar (1993)の結果を適用すると, 各コアでの化学進化年齢は, TMC-1A で 4.9 × 10<sup>5</sup> 年, TMC-1B で 1.1 × 10<sup>6</sup> 年, TMC-1C で 3.2 × 10<sup>6</sup> 年となる。この重水素化合物を利用して コアの進化年齢を見積る新しい方法は,これまでの化合物の存在比を直接用いる方法よりは,複数の重水素化合 物を利用し、しかも、進化年齢に鋭敏な濃縮度変化を示す化合物を利用できることで、より信頼できるコアの進 化年齢の見積りを得ることができると考える。

#### d) サブミリ波望遠鏡の開拓

我が国最初のサブミリ波望遠鏡となる口径 1.2 m の電波望遠鏡を東京大学,国立天文台,分子科学研究所が共同 で開発している。我々のグループは望遠鏡のバックエンドとしての音響光学型分光計の開発を行った。本年度は、 野辺山宇宙電波観測所構内に仮設置していた望遠鏡を解体し,富士山頂に移設した。再組み立ての後,動作試験 を行い,346 GHz および492 GHz の両受信機が正常に動作すること,また,衛星通信を介して野辺山,東京,岡 崎の地上局から遠隔制御ができることを確認した。現在,主に492 GHz の受信器を用いて,いろいろな天体につ いて中性炭素のスペクトルを無人遠隔制御観測モードで行い,星間空間における中性炭素の存在形態について新 しい結果を得つつある。

#### B-1) 学術論文

S-H. CHO and S. SAITO, "Microwave Spectrum of a Silicon Monoxide Isotopomer: <sup>28</sup>Si<sup>18</sup>O," Astrophys. J. 493, L1-L3

M. ARAKI, H. OZEKI and S. SAITO, "Laboratory Measurement of the Pure Rotational Transitions of HCNH+ and its Isotopic Species," Astrophys. J. 496, L53-L55 (1998).

N. INADA, K. SAITO, M. HAYASHI, H. OZEKI and S. SAITO, "Microwave Spectrum of the CHF2 Radical in the <sup>2</sup>A' Ground Electronic State: Fluorine Hyperfine Structure Alternation in Inversion Levels," Chem. Phys. Lett. 281, 142-146

**K. KOBAYASHI and S. SAITO**, "The Microwave Spectrum of the NF Radical in the Second Electronically Excited ( $b^1\Sigma^+$ ) State: Potentials of Three Low-Lying States ( $X^3\Sigma^-$ ,  $a^1\Delta$ ,  $b^1\Sigma^+$ ), " J. Chem. Phys. 108, 6606-6610 (1998).

T. STEIMLE, M. TANIMOTO, K. NAMIKI and S. SAITO, "The Millimeter Wave Spectrum of Silver Monoxide, AgO," J. Chem. Phys. 108, 7616-7622 (1998).

A. NUMMELIN, P. BERGMAN, A. HJALMARSON, P. FRIBERG, W. M. IRVINE, T. J. MILLAR, M. OHISHI and S.

SAITO, "A Three-Position Spectral Line Survey of Sgr B2 between 218 and 263 GHz. I. The Observational Data," Astrophys. J. Suppl. 117, 427-529 (1998).

I. K. AHMAD, H. OZEKI, S. SAITO and P. BOTSCHWINA, "A New Phosphorus Bearing Derivative of the Methyl Radical, CH<sub>2</sub>CP, Studied by Microwave Spectroscopy and ab initio Calculation," J. Chem. Phys. 109, 4252-4257 (1998).

H. FUJIWARA, K. KOBAYASHI, H. OZEKI and S. SAITO, "Submillimeter-Wave Spectrum of the AsH2 Radical in the <sup>2</sup>B<sub>1</sub> Ground Electronic Sate," J. Chem. Phys. **109**, 5351-5355 (1998).

M. ARAKI, H. OZEKI and S. SAITO, "Experimental Determination of the Ground-State Inversion Splitting in D<sub>3</sub>O<sup>+</sup> by Microwave Spectroscopy," J. Chem. Phys. 109, 5707-5709 (1998).

**K. NAMIKI, S. SAITO, J. S. ROBINSON and T. C. STEIMLE**, "Pure Rotational Spectra of  $TiO(X^3\Delta)$  and  $TiN(X^2\Sigma^+)$ ," *J.* Mol. Spectrosc. 191, 176-182 (1998).

H. OZEKI and S. SAITO, "Far Infrared Sideband Spectroscopy of the NH<sub>2</sub> Radical," J. Mol. Spectrosc. 192, 183-190 (1998). M. ARAKI, H. OZEKI and S. SAITO, "Microwave Spectrum of the SD<sub>3</sub><sup>+</sup> Ion: Molecular Structure," J. Mol. Spectrosc. 192, 228-230 (1998).

H. FUJIWARA and S. SAITO, "Microwave Spectrum of the AsD<sub>2</sub>(X<sup>2</sup>B<sub>1</sub>) Radical: Harmonic Force Field and Molecular Structure," J. Mol. Spectrosc. 192, 399-405 (1998).

I. K. AHMAD, H. OZEKI and S. SAITO, "Microwave Spectroscopic Detection of a Transient Phosphorus-Bearing Molecule, H<sub>3</sub>PO," J. Chem. Phys. 110, 912-917 (1999).

# B-2) 総説

S. SAITO, "Sulfur-Bearing Carbon-Chain Molecules in Space and in the Laboratory," Sulfur Reports 21, 1-21 (1998).

# B-3) 招待講演

斎藤修二,「星間分子と星間化学ー現状と今後の展望」,日本宇宙フォーラム「サブミリ波セミナー」,宇宙開発 事業団筑波宇宙センター, つくば, 1998年11月.

## B-4) 受賞、表彰

斎藤修二,分子科学研究奨励森野基金(1985).

斎藤修二, 仁科記念賞(1991)

斎藤修二,東レ科学技術賞(1993)

#### B-5) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本分光学会東海支部幹事(1995-).

# 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(1979).

環太平洋国際化学会議組織委員(1989).

第 20 回フリーラジカル国際会議組織委員(1989).

第19回赤外・ミリ波国際会議組織委員(1994).

文部省、学術振興会等の役員等

文部省学術審議会専門委員(1990-1994).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員(1991,1992).

科学研究費の研究代表者、班長等

重点領域研究「星間物質」班長(1991-1994).

# 社会的活動

岡崎市民大学講師(1997).

# 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) 液体ヘリウム中の原子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、限られた低次の部分波のみでの衝突になること、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。本年度は、前年度に測定した衝突イオン化断面積の詳 しい理論解析を行った。衝突する原子が両方とも準安定3重項状態にいるとき3He 原子の断面積が4He 原子より も約3倍大きいことや,レーザー光の存在下ではその差が非常に小さくなることなどの理由を明らかにすること ができた。
- b) 液体ヘリウム中の原子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おり、その点で興味深い。本年度は、レーザーアブレーションによって液 体へリウム中に分布されたYb原子イオンの蛍光スペクトルおよびレーザー誘起蛍光スペクトルを観測することが でき、殻に閉じこめられた原子に特有な、励起スペクトルにおける大きな青方変位や、自由原子には見られない 励起スペクトルの分裂,励起状態における強い混合などが観測された。

# B-1) 学術論文

M. HORI, H. A. TORII, R. S. HAYANO, T. ISHIKAWA, F. E. MAAS, H. TAMURA, B. KETZER, F. J. HARTMANN, R. POHL, C. MAIERL, M. HASINOFF, T. von EGIDY, M. KUMAKURA, N. MORITA, I. SUGAI, D. HORVATH, E. WIDMANN, J. EADES and T. YAMAZAKI, "Laser Spectroscopic Studies of State-Dependent Collisional Quenching of the Lifetimes of Metastable Antiprotonic Helium Atoms," Phys. Rev. A 57, 1698 (1998).

B. KETZER, F. J. HARTMANN, T. von EGIDY, C. MAIERL, R. POHL, J. EADES, E. WIDMANN, T. YAMAZAKI, M. KUMAKURA, N. MORITA, R. S. HAYANO, M. HORI, T. ISHIKAWA, H. A. TORII, I. SUGAI and D. HORVATH, "Quenching of metastable states of antiprotonic helium atoms by collisions with H2 molecules," J. Chem. Phys. 109, 424 (1998).

F. J. HARTMANN, B. KETZER, C. MAIERL, R. POHL, T. von EGIDY, R. S. HAYANO, M. HORI, T. ISHIKAWA, H. TAMURA, H. A. TORII, M. KUMAKURA, N. MORITA, I. SUGAI, D. HORVATH, J. EADES, E. WIDMANN and T. YAMAZAKI, "Laser spectroscopy of metastable states in the v = 2 cascade of antiprotonic <sup>3</sup>He," Phys. Rev. A 58, 3604 (1998).

R. POHL, F. J. HARTMANN, B. KETZER, C. MAIERL, T. von EGIDY, J. EADES, E. WIDMANN, T. YAMAZAKI, M. KUMAKURA, N. MORITA, R. S. HAYANO, M. HORI, T. ISHIKAWA, H. A. TORII, I. SUGAI and D. HORVATH, "Influence of oxygen admixtures on the lifetime of metastable antiprotonic helium atoms," Phys. Rev. A 58, 4406 (1998).

#### B-5) 受賞、表彰

森田紀夫, 松尾学術賞 (1998).

# 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。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

# 北川镇三(教授)

A-1) 専門領域:振動分光学、生物物理化学

#### A-2) 研究課題

- a) 生体系における酸素活性化機構
- b) タンパク質高次構造による機能制御と紫外共鳴ラマン分光
- c) タンパク質高次構造及びそのダイナミックス
- d) ポルフィリン励起状態の構造及びそのダイナミックス
- e) 振動分光学の新テクニックの開発
- f) 呼吸系及び光合成反応中心における電子移動/プロトン輸送のカップリング機構
- g) NO レセプター蛋白の構造と機能

#### 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や振動緩和を解明して、反応あるいは機能との関係を明 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。 $O_2$   $H_2O$ を触媒するチトクロム酸化酵素, $O_2$   $H_2O$  + SO を触媒するチトクロ ム P-450, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> H<sub>2</sub>O 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<sup>IV</sup>=O 伸縮振動の検出等,この分野の国際的フロンティアをつくっている。小倉助手のチトクロム酸化酵素によ る O2 還元機構の研究は 1993 年の化学会進歩賞受賞の栄誉に輝いた。また総研大生でこの仕事をしていた廣田君 (現名大助手)は井上賞を受賞した。
- 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200 nm付近のレーザー光でラマン散乱を測定できる実験系を製作し,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,それが4次構造変化の際にどのように変化しているかを明らかにした。
- 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。フィトクロムの研究では水谷助手が井上賞を受賞した。光合成反応中心タンパク等も取り扱っている。昨年, 水谷助手のミオグロビンのピコ秒時間分解ラマンの研究成果が雑誌 Science に掲載された。
- d) 励起状態の構造及びそのダイナミックス。ポルフィリンの一重項,三重項励起状態をナノ秒ラマンで,金属ポル フィリンの(dd)励起状態の振動緩和をピコ秒ラマンで解明した。数ピコ秒で起こる振動エネルギー再分布にモー ド選択性があることをみつけた。
- e) 新しい原理を用いたフーリエ変換ラマン分光計の試作,及びCCDを用いたスキャニング・マルチチャンネルラマ ン分光器の試作,紫外共鳴ラマン用回転セル,酵素反応中間体測定用フローラマン装置の製作,ナノ秒温度ジャ

- ンプ装置の製作,ダイオードレーザーを光源とする高感度赤外分光法の開発。
- f) 有機溶媒中のキノン、及びその還元体の紫外共鳴ラマン分光とバクテリア光合成反応中心タンパク中のキノンA、Bの共鳴ラマンスペクトルの観測。キノンの中性形、電気還元したアニオン形のラマンスペクトルの溶媒依存性の解明、同位体ラベルユビキノンの解析に向かっている。キノンを電子供与体とする呼吸系未端酸化酵素であるチトクロム bo についても研究を進めている。
- g) ウシ肺から可溶性グアニレートシクラーゼを単離・精製し,その共鳴ラマンスペクトルを観測した。反応生成物のサイクリック GMP が NO の親和性を制御することを初めて指摘した。この研究を行った院生の富田氏は1997年度の総研大長倉賞,及び1998年度井上賞を受賞した。

#### B-1) 学術論文

- N. OKISHIO, R. FUKUDA, M. NAGAI, Y. NAGAI, S. NAGATOMO and T. KITAGAWA, "Tyrosine phosphorylation-induced changes in absorption and UV resonance Raman spectra of Src-peptides," *J. Raman Spectrosc.* **29**, 31 (1998).
- S. NAKASHIMA, T. KITAGAWA and J. S. OLSON, "Time-resolved resonance Raman study of intermediates generated after photodissociation of wild-type and mutant CO-myoglobins," *Chem. Phys.* **228**, 323 (1998).
- A. WADA, M. HARATA, K. HASEGAWA, K. JITSUKAWA, H. MASUDA, M. MUKAI, T. KITAGAWA and H. EINAGA, "Structural and spectroscopic characterization of a mononuclear hydroperoxo-copper(II) complex with tripodal pyridylamine ligands," *Angew. Chem. Int. Ed.* 57, 798 (1998).
- M. KODERA, Y. TACHI, S. HIROTA, K. KATAYAMA, H. SHIMAKOSHI, K. KANO, K. FUJISAWA, Y. MOROOKA, Y. NARUTA and T. KITAGAWA, "A superoxodicopper(II) complex oxidatively generated by a reaction of di-lhydroxodicopper(II) complex with hydrogen peroxide," *Chem. Lett.* 389 (1998).
- M. MUKAI, S. NAKASHIMA, J. S. OLSON and T. KITAGAWA, "Time-resolved UV resonance Raman detection of a transient open form of the ligand pathway in Tyr64(E7) myoglobin," *J. Phys. Chem.* **102**, 3624 (1998).
- **Y. UESUGI, Y. MIZUTANI and T. KITAGAWA**, "Photo-induced solvent ligation in nickel(II)-octaethylporphyrin probed by picosecond time-resolved resonance Raman spectroscopy," *J. Phys. Chem. A* **102**, 5809 (1998).
- Y. SASAKAWA, K. ONODERA, M. KARASAWA, S-C. IM, E. SUZUKI, F. YOSHIZAKI, Y. SUGIMURA, N. SHIBATA, T. INOUE, Y. KAI, S. NAGATOMO, T. KITAGAWA and T. KOUZUMA, "Spectroscopic characterization and kinetic studies of a novel plastocyanin from the green alga *Ulva Pertusa*," *Inorg. Chim. Acta* 283, 184 (1998).
- **X. ZHAO and T. KITAGAWA**,"Solvent effects of 1,4-benzoquinone and its anion radicals probed by resonance Raman and absorption spectra and their correlation with redox potentials," *J. Raman Spectrosc.* **29**, 773 (1998).

## B-3) 総説,著書

- **T. KITAGAWA and T. OGURA**, "Time-resolved resonance Raman investigation of oxygen reduction mechanism of bovine cytochrome *c* oxidase," *J. Bioenerg. Biomemb.* **30**, 71 (1998).
- **T. KITAGAWA and T. OGURA**, "Time-resolved resonance Raman study of dioxygen reduction by cytochrome *c* oxidase," *Pure Appl. Chem.* **70**, 881 (1998).

#### B-4) 招待講演

- T. KITAGAWA, "Resonance Raman spectra of QA and QB and their semiquinone radicals in photosynthetic reaction center from Rb. sphaeroides R26," US-Japan Symposium on Proton Coupled Electron Transfer, Kona Royal Resort, Kona (Hawaii) (1998).
- T. KITAGAWA, "Time-resolved resonance Raman characterization of reaction intermediates of bovine cytochrome c oxidase," 10th Europian Bioenergetics Conference, Goteborg (1998).
- T. KITAGAWA, "Mechanism of oxygen reduction by cytochrome c oxidase: Time-resolved resonance Raman study," 216th American Chemical Society Meeting Inorganic and Physical; Symposium on Multinuclear enzymes in oxygen metabolism, Boston (1998).
- T. KITAGAWA, "UV resonance Raman spectra of hemoglobin and myoglobin," International Conference on Oxygen Binding and Oxygen Activation/Sensing Heme Proteins, Asilomar (1998).
- T. KITAGAWA, "Picosecond resonance Raman study of excited state dynamics of Ni(II)-porphyrins in solutions," VIIIth International Conference on Spectroscopy and Chemistry of Porphyrins and Their Analogs, Minsk (1998).

北川禎三,「分子の振動緩和:熱平衡に至る過程」,基礎化学研究所10周年記念講演会(1998.10).

#### B-5) 受賞、表彰

北川禎三, 日本化学会学術賞 (1988).

北川禎三,日本分光学会学術賞 (1996).

小倉尚志, 日本化学会進歩賞 (1993).

水谷泰久, 井上研究奨励賞 (1995).

廣田 俊, 井上研究奨励賞 (1996).

富田 毅,総研大長倉賞 (1997).

富田 毅,井上研究奨励賞 (1998).

#### B-6) 学会および社会的活動

## 学協会役員、委員

IUPAC Associate Members of Commission on Biophysical Chemistry (1996.1-).

日本分光学会東海支部幹事(1986.4-1991.3).

日本分光学会評議員(1987-).

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).

日本化学会学会賞選考委員(1998).

日本生化学会評議員

#### 学会の組織委員

International Conference on Raman Spectroscopy, International Steering Committee (1988-1994).

International Conference on Time Resolved Vibrational Spectroscopy, International Organizing Committees (1989-).

11th International Conferens on Photobiology, Symposium organizer (1992).

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

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

Co-organization: US-Japan Symposium on "Ligand Binding to Myoglobin and Hemoglobin" Rice University, Houston, March 1-5 (1997).

Co-organization: US-Japan Symposium on "Proton Coupled Electron Transfer" Kona, Hawaii, November 11-15 (1998).

#### 文部省・学振等の委員会

文部省学術審議会科研費分科会理工系小委員会委員(1997-).

日本学術会議化学研究連絡委員会委員(1997-).

文部省学術審議会専門委員会科研費審查委員(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, 1996-1997, 1998-).

日本学術振興会日独科学協力委員会委員(1998-).

日本学術振興会未来開拓事業委員会複合領域専門委員(1998-).

科学技術庁研究開発局評価委員(1994).

#### 学術雑誌編集委員

Journal of Physical Chemistry, Advisory Board (1993-1997).

Chemical Physics, Advisory Board (1993-).

Journal of Molecular Liquids, Editorial Board (1993-).

Asian Journal of Physics, Advisory Board (1991-).

Biospectroscopy, Editional Board (1993-).

Journal of Raman Spectrocopy, Advisory Board (1995-).

Journal of Biological Inorganic Chemistry, Advisory Board (1995-1997).

## 科研費の班長、研究代表者等

重点研究「生物無機」班長(1991-1993).

総合研究(B)班長(1994, 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

大阪大学理学研究科集中講義,1998年6月.

東北大学理学研究科集中講義,1998年7月.

# C) 研究活動の課題と展望

- a) チトクロム酸化酵素における電子移動とプロトン輸送とのカップリング機構の解明
- b) 生体 NO の合成及び反応機構:時間分解赤外分光
- c) 鉄ポルフィリン及びヘムタンパク質の光還元機構:ピコ秒時間分解共鳴ラマン分光
- d) 光合成反応中心タンパク質のキノン B における電子移動 / プロトン輸送のカップリング:紫外共鳴ラマン分光
- e) タンパク質の速いダイナミ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: ピコ秒時間分解共鳴ラマン分光
- h) ナノ秒温度ジャンプ装置の制作とそれを用いた蛋白質フォールディング / アンフォールディングの追跡 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。
- i) タンパク質の高感度赤外分光

# 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。今年度はLaF3中にドープされたPr³+色中心を囲むLaの核四重極遷移の光ラマンビート検出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,入射レーザー光偏光面と配向方向の角度に依存した振動ラマン 強度を測定し,液晶分子の配向状態を調べた。
- c) フラーレン類のラジカルの分子分光学的研究: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,分子構造・電子構造に関する新しい情報を得た。特に,13Cの超微細構造解析を用いて,シミュレーションとENDOR測定からLa@Cg2の分子構造を決定した。

# B-1) 学術論文

T. KATO, T. AKASAKA, K. KOBAYASHI, S. NAGASE, K. KIKUCHI, Y. ACHIBA, T. SUZUKI and K. YAMAMOTO, "Chemical Reactivities of Endohedral Metallofullerens," *The Journal of Physics and Chemistry of Solids* **58**, (No.11), 1779-1783 (1997).

**T. KODAMA, M. KATO, K. MOGI, M. AOYAGI and T. KATO**, "ESR Measurements of C<sub>60</sub>- Anion Crystals," *Molecular Physics Report* **18/19**, 121-126 (1997).

**M. MATSUSHITA, A. MUTOH and T. KATO**, "Coherent Raman spectroscopy of nuclear quadrupole resonance of La around Pr<sup>3+</sup> in LaF<sub>3</sub>," *Physical Review B* **58**, 14372-14382 (1998).

#### B-2) 国際会議のプロシーディングス

**T. KATO, K. SATO, T. TAKUI, D. HURUM, R.W. KREILICK, S. OKUBO and T. AKASAKA**, "Determination of the Cage Structure of La@C<sub>82</sub>," *Proceedings of the Symposium on Recent Advances in the Chemistry and Physics of Fullerenes and Related Materials* **6**, 967-972 (1998).

# B-4) 招待講演

T. KATO, "Determination of the Cage Structure of La@C<sub>82</sub>," The Symposium on Recent Advances in the Chemistry and Physics of Fullerenes and Related Materials in the Electrochemical Society Meeting, San Diego, California (U.S.A.), May 1998.

# B-7) 他大学での講義、客員

名古屋大学理学部,「反応速度論」,1997年9月 - 1998年3月(半期講座)

# C) 研究活動の課題と展望

現在進行している ," 凝集系における分子運動のコヒーレンスの検出 "と" 光ラマンビート検出法による磁気共鳴 分光"は凝集系の動力学をエネルギースペクトルやスペクトル線形解析の立場から,研究している。実時間変化 を直接追跡する方法との整合性と,対照的な点をより明確にしていきたい。また新しい物質として我々が注目し ているフラーレン類についても、我々が進めている新しい分光学的手段の測定対象と捕らえていきたい。

# 3-4 電子構造研究系

# 基礎電子化学研究部門

# 松 本 吉 恭 (教授)\*)

A-1) 専門領域:表面科学

#### A-2) 研究課題:

- a) 固体表面上でのレーザー誘起反応ダイナミクス
- b) メタンの活性化
- c) パラジウムクラスター上でのメタンの光反応
- d) 清浄な半導体表面を用いた遠赤外領域の発光に関する研究
- e) 多光子光電子分光による表面電子状態の研究
- f) 表面活性酸素の反応性

#### A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 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。本研究グループは、これらの表面上の物理吸着種の光反応に注目して研究を行なっている。本年度は昨年度に引き続き、Si(100)表面に吸着した稀ガス(Xe,Kr)の光刺激脱離について研究を行なった。清浄表面においても、これらの吸着種が近赤外からから紫外に至る広い波長範囲の光の照射によってが脱離した。光反応断面積の波長依存性や脱離種の並進速度分布を測定し、その励起のメカニズムを考察した。その結果、基盤の光吸収によって生じた電子と空孔がバンド端まで緩和し、そこで表面状態を介して再結合する時に励起する表面フォノンが脱離を誘起しているのではないかというモデルを提唱した。
- b) 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。本研究では昨年度に引き続き,遷移金属表面上での表面光化学によリメタンを活性化し,励起メカニズムをより明らかにすることを試みた。特に,励起状態におけるメタンとの混成にどのような基盤の電子状態が関与しているのかを明らかにするために,貴金属である銅を基盤として実験を行ない,今まで行なってきた白金やパラジウムなどの遷移金属との比較を行なった。その結果,Cu(111)面でもメタンは193 nmの光で解離することが判明した。これは,基盤中のsp電子由来の電子状態が大きな役割を果たしている可能性を示している。
- c) NiAI(110)上に準備した平坦なアルミ酸化物の上にパラジウムクラスターを生成させ,これに吸着させたメタンの 光反応を観測した。パラジウム単結晶表面と同様にメタンは193 nmの光照射によって解離,脱離をするが,その 分岐比に明瞭なクラスターサイズ依存性があることを見出した。
- d) 最近,半導体結晶に極端パルス光を照射することにより,THz 領域のコヒーレントな光が発生することが明らかになった。しかし,これらの実験はすべて大気中,常温の雰囲気のもとで行なわれている。したがって,結晶の表面状態によりどのように遠赤外光の発生が影響を受けるかについてはまったく明らかにされてこなかった。本年度は,InAs(100)結晶表面を超高真空下で清浄化し,酸化された表面との差を実験的に確かめた。その結果,清

浄表面の方が発光は強くなり、また、結晶の温度を下げることにより、さらに光強度が増加することが判明した。 両方の要因により光強度は通常の条件に比べて20倍も増加することが観測された。この研究課題は猿倉グループ との共同研究で行なった。

- e) 表面光化学における励起メカニズムを明らかにする目的で,多光子光電子分光による吸着種の電子励起状態の研 究を行なっている。Pt(111)表面上のCOについて詳細な測定を行なった。その結果,COの非占有軌道に由来する と思われる状態からの光電子スペクトルを観測し、その状態の吸着サイト依存性について明らかにした。また、こ の分光法におけるプローブ光に用いるために、フェムト秒の真空紫外光発生装置を試作した。
- f) Si(100)表面上ではCO2 は単に弱く吸着するのみで反応はしない。しかし,N2Oと共吸着させることにより,両者 の間で極めて効率よく酸素交換反応が起きることを昨年度見出した。これは,この共吸着系において効率よく反 応中間体CO<sub>3</sub>が生成されることによると考えられる。今年度はさらにCO<sub>2</sub>と酸素との共吸着系での反応を研究し, 以前の結果と比較検討した。N2Oとの共吸着系のように一部CO2の解離片としてCOも脱離してくるが,酸素の 交換反応が低温ですでに起きていることを見出した。

#### B-1) 学術論文

Y. MATSUMOTO and K. WATANABE, "Comparative study of photochemistry of methane on Pt(111) and Pd(111) surfaces," Surface Science 390, 250 (1997).

H. KATO, K. WATANABE and Y. MATSUMOTO, "Effective carbonate formation induced by thermal dissociation of N<sub>2</sub>O on Si(100)," Surface Science Letters 398, L297 (1998).

M. SEI, K. NAGAYAMA, K. KAJIKAWA, H. ISHII, K. SEKI, K. KONDO, Y. MATSUMOTO and Y. OUCHI, "Phase determination of second-order surface susceptibility tensor of liquid crystal monolayer using ultra-thin film local oscillator," Jpn. J. Appl. Phys. 37, 1974 (1998).

T. ANAZAWA, I. KINOSHITA and Y. MATSUMOTO, "Two-Photon Photoemission Study of CO/Pt(111)," J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena 88-91, 585 (1998).

J. YOSHINOBU, M. KAWAI, S. TANAKA, K. WATANABE, Y. MATSUMOTO and M. KAMADA, "Electronic Structure in the valence region of chemisorbed and physisorbed species on Pd(110)," J. Electron Spectroscopy and Relaied Phenomena **88-91**, 665 (1998).

K. WATANABE, H.KATO and Y. MATSUMOTO, "Effective Conversion of CO2 to Carbonate in Surface Oxidation Processes at Si(100)," J. Phys. Chem. B 102, 8042 (1998).

## B-3) 総説・著書

松本吉恭,「表面吸着種の光化学と電子励起状態」, 真空 41,555 (1998).

#### B-4) 招待講演

K. WATANABE and Y. MATSUMOTO, "Surface Photochemistry and Dynamics of Weakly Bound Systems," SPIE Conference on "Laser Techniques for Surface Science III," San Jose, CA (U.S.A.), January 1998.

松本吉恭,「物理吸着種の光反応」,東京大学生産技術研究所セミナー,東京,1998年7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).

IMS International Conference 組織委員(1997).

分子構造総合討論会プログラム委員(1997).

Ninth International Conference on Vibrations at Surfaces 組織委員(1997).

科学研究費の研究代表者、班長等

グループ研究「光科学の新展開」研究代表(1997-)

#### B-7) 他大学での講義、客員

慶應義塾大学理工学部非常勤講師,1998年7月.

#### 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。更に,固体表面上に超薄膜やクラスターを形成し,このようなナノ構造物質上での反応,光誘起過程,電子 状態についての研究に発展させていく。

\*) 1998年4月1日総合研究大学院大学先導科学研究科光科学専攻教授

#### 信 之(教授)\*) 西

A-1) 専門領域:クラスター化学、電子構造論、物理化学

#### A-2) 研究課題:

- a) 液体中でのクラスター形成による局所構造の発生と "Micro Phase"の生成
- b) 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
- c) 分子クラスターイオンの構造と光誘起クラスター内電荷輸送

#### A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 水は、分子として大きな極性を持ち、それ故の高いクラスター構造発生能力を有する。この水の中には、様々な 親水性と言われる物質を1分子単位ではなく、クラスター単位で溶解することが明らかになってきた。これは、室 温の水自身が、クラスターとなっており、相互作用する相手が(運動の力学的要請から)同等の質量あるいは体 積をもつクラスター或いは高分子であるとき、はじめて安定となることによると考えられる。このことは、物理 学の分野で超音波吸収や誘電緩和の実験から度々示唆されていたことであるが、直接の証明は行なわれなかった。 我々は、低振動数ラマン散乱の実験からこれをアルコール類や酢酸などの幾つかの基本的な系で証明した。これ らの物質は、水の中でクラスターとして存在しており、" Micro Phase " を形成している。この " Micro Phase " の 存在は3成分以上の系でも、相互溶解形態に大きな影響を与える。このような系では、2成分系では見られなかっ た強い相互作用が期待され、分子の機能の発現という観点からは、様々の興味ある発見が期待される。
- b) 酢酸の純液体或いは水溶液中では、酢酸は環状の2量体として存在すると教科書にも書かれている。しかし、酢 酸のような大きな双極子を有する分子が、双極子を持たない構造で極性媒体中で本当に安定化するのであろうか と言う疑問が、少なからぬ学生の間から教師に投げ掛けられていたのではなかろうか。教壇に立った人間として 真面目に疑問に回答を与えねばならない。分子間振動スペクトルの解析以外に直接的な証拠は得られない。そこ で、酢酸の単結晶を徐々に融解させながら室温までの温度領域で低振動数ラマンスペクトルを観測した結果、振 動バンドの幅は融解とともに大きく広がるが、ピークの位置は一部を除いてほとんど変化しないことが明らかに なった。結晶構造にみられる酢酸のネットワーク水素結合構造を基本とする大きな双極子モーメントを有する酢 酸クラスターの理論計算によって、スペクトルが再現されることがしめされた。また、水溶液の中のクラスター の振動スペクトルは、メタノール中のスペクトルとほぼ一致し、これが大きな双極子を持つ酢酸2量体構造によ ることが理論計算によって明らかにされた。
- c) ベンゼン分子と1個の水酸基をもつフェノール分子の錯体から1個の電子を取り去ってカチオンとしたとき、ど のような構造をとるであろうか。面白いことに、イオンが高温(といっても 100-200 K)の時と、低温では、その 赤外・可視・紫外の振動および電子スペクトルは大きな違いを見せ、温度によって構造変化が起こることが明ら かになった。どのような構造変化が起こるかについてのスペクトルの解析等を現在進めている。
- d) ベンゼン トルエンなどの 2 成分混合クラスターイオンの電荷共鳴吸収スペクトルが複雑な構造を示し、これら がトルエンイオンの励起状態を含む4種の励起電荷共鳴状態であると帰属した。不純物としてトルエンを含む液 体ベンゼン中でのイオンの動的移動、あるいは電荷のホッピング機構の基礎として重要であり、フェムト秒レー ザーを用いた実験が進行中である。

# B-1) 学術論文

**K. EGASHIRA and N. NISHI**, "Low frequency Raman Spectroscopy of ethanol-water binary solutions: Evidence for self-association of solute and solvent molecules," *Journal of Physical Chemistry* **102**, 4054-4057 (1998).

**T. FUKUCHI, K. NISHI, S. SHIRAISHI, N. NISHI and H. SEKIYA**, "Hole-Burning Spectra of Jet-Cooled Tropolone and Tropolone-Kr1 van der Waals Complex," *Jpn. J. Deuterium Sci.* **7**, 15-23 (1998)

H. HAMABE, T. FUKUCHI, S. SHIRAISHI, K. NISHI, Y. NISHIMURA, T. TSUJI, N. NISHI and H. SEKIYA, "Fluorescence Excitation and Hole-Burning Spectra of Jet-Cooled Tropolon-M ( $M = N_2$ , CO) van der Waals Complexes: Structures and Proton Tunneling in the  $S_1$  State," *Journal of Physical Chemistry* **102**, 3880-3888 (1998).

**K. KOSUGI, T. NAKABAYASHI and N. NISHI**, "Low frequency Raman spectra of crystalline and liquid acetic acid and its mixture with water. Is the liquid dominated by hydrogen-bonded cyclic dimers?" *Chemical Physics Letters* **291**, 253-261 (1998).

**K.** OHASHI, M. NISHIGUCHI, Y. INOKUCHI, H. SEKIYA and N. NISHI, "Photodissociation spectrum of cyanobenzene dimer cation. Absence of intermolecular resonance interaction," *Res. Chem. Intermed.* **24**, 755-764 (1998).

**K. OHASHI and N. NISHI**, "Photodissociation dynamics of of  $(C_6H_6)_3^+$ : Role of the extra benzene molecule weakly bound to the dimer core," *J. Chem. Phys.* **109**, 3971-3982 (1998).

T. MATSUOKA, K. KOSUGI, K. HINO, M. NISHIGUCHI, K. OHASHI, N. NISHI and H. SEKIYA, "Electronic Spectra of Jet-Cooled Anthracence Dimer: Evidence of Two Isomers in the Electronic Ground State," *J. Phys. Chem.* **102**, 7598-7602 (1998).

#### B-3) 総説、著書

N. NISHI, "Size and Structure Effect" in *Functionality of Molecular Systems*, Springer-Verlag; Tokyo, pp. 262-283 (1998). 西信之、「水素結合性溶液のクラスター構造」、季刊 化学総説 38, 173-187 (1998).

#### B-4) 招待講演

西 信之、「水の中のクラスター」、精密工学研究会、大阪、1998年10月2日、

## B-5) 受賞、表彰

西 信之, 井上学術賞(1991).

西 信之,日本化学会学術賞(1997).

## B-6) 学会および社会的活動

文部省、学術振興会等の役員等

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員

## B-7) 他大学での講義、客員

福岡大学,「クラスター化学」,1998年1月.

# C) 研究活動の課題と展望

新たに 10 µm の赤外領域から 195 nm の真空紫外領域において連続的に任意のエネルギーを持つ 2 種のパルス光 を発生させる固体高出力ピコ秒レーザーと、これに同期して同じく赤外から真空紫外に至る波長領域の高出力フェ ムト秒レーザーのシステムが導入される。これによって、上記研究テーマの分光学的研究が飛躍的に発展すると 期待される。この装置を用いた新しい分光法の開発を進めている。

\* )1998年4月1日着任

# 電子状態動力学研究部門

# 藤 井 正 明(教授)

A-1) 専門領域:物理化学、分子分光学

## A-2) 研究課題:

- a) 赤外 紫外二重共鳴分光法による分子・クラスターの構造とその動的挙動
- b) イオン化検出赤外分光法による孤立分子・クラスターの高振動状態の研究
- c) パルス電場イオン化光電子分光法による分子カチオンの振動分光

## A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ナフトールの溶媒和クラスターは電子励起状態でプロトン移動活性となる事が知られているがクラスターの構造はS<sub>0</sub>,S<sub>1</sub>共に確定しておらず,構造と反応性の関係は明瞭ではない。そこで赤外 紫外二重共鳴分光法であるIR Dip 分光法を 1 ナフトール・水及び 1 ナフトール・アンモニアクラスターに適用し,基底状態 S<sub>0</sub> 及び電子励起状態 S<sub>1</sub> での赤外スペクトルの観測に成功した。振動スペクトル解析,及び ab initio MO 計算(東京都立大学・橋本健朗助教授との共同研究)との比較の結果,1 ナフトール・(水),クラスター(n=0-3)では,S<sub>0</sub>,S<sub>1</sub> どちらの状態でも水分子とナフトールが環状構造を形成することを明らかにした。これは,溶媒分子がナフタレン環を摂動しない配置ではプロトン移動反応が促進されない可能性を示唆する。これを確定するために溶媒分子数が4個で反応活性となる1-ナフトール・アンモニアクラスターに対しても同様の実験と解析を継続中である。
- b) イオン化検出赤外分光法は独自に開発した高感度赤外分光法であり波長可変赤外レーザーで生じる振動励起分子を紫外レーザーで選択的にイオン化して検出する二重共鳴分光法である。赤外遷移をイオン検出すること及びバックグラウンドフリーであることから極めて高い検出感度を有し,試料濃度が希薄な超音速ジェット中で吸収係数が極めて小さな高次倍音を明瞭に観測できる。この方法により孤立極低温フェノール分子のOH,CH伸縮振動を4量子準位まで観測することに成功した。さらにOH伸縮振動は高次倍音ほどバンド幅が狭くなる現象を見出した。これは熱浴の状態密度が急速に増大するにもかかわらず高次倍音で緩和が遅くなる可能性を示唆する。この機構を解明するために重置換フェノールのイオン化検出赤外スペクトルを測定したところ,OH倍音とは異なりOD伸縮振動は高次倍音になると線巾が広がることが判明した。さらに種々の重置換体のイオン化検出赤外スペクトルの測定から,OH伸縮モードとベンゼン環 CC,CH振動との特異的なカップリングが強く示唆された。簡単なモデルによる緩和機構の検討を行ない,高次倍音の緩和機構解明を試みている。
- c) パルス電場イオン化光電子分光法(PFI-ZEKE法)は高励起リュードベリ状態を電場イオン化して検出する高分解能光電子分光法であり、カチオンの振動分光を行う優れた手段である。我々は中性リュードベリ状態を検出する特性に着目して装置の大幅な簡易化・汎用化を実現し、従来の光電子分光では困難な大きな分子カチオンの振動分光を行ってきた。従来この方法を主としてメチル基内部回転など、分子内大振幅振動を有する分子に適用し、イオン化による変化から電子状態と大振幅振動の関係を論じてきた。本年度は分子間の大振幅振動となる分子間振動を中心に発展を試み、cis-、trans-体を有する1置換フェノール誘導体と水分子との水素結合クラスターのPFI-ZEKEスペクトルの観測に成功した。cis体クラスターとtrans体クラスターではカチオンでの分子間振動の際を

明らかにし,その原因を明らかにするべく重水素化効果,理論計算などで回転異性体クラスターカチオンの構造 と結合様式を検討している。

#### B-1) 学術論文

S. ISHIUCHI, H. SHITOMI, K. TAKAZAWA and M. FUJII, "Nonresonant Ionization Detected IR Spectrum of Jet-cooled Phenol - Ionization Mechanism and Its Application to Overtone Spectroscopy," Chem. Phys. Lett. 283, 243 (1998).

T. WATANABE, M. MIYATA, Y. IKETAKI and M. FUJII, "Soft X-Ray Microscope Imaging Using Photo-excitation Processes and Double Resonance Absorption Processes," J. Korean Phys. Soc. 32, 388 (1998).

R. YOSHINO, K. HASHIMOTO, T. OMI, S. ISHIUCHI and M. FUJII, "Structure of 1-Naphthol-Water Clusters Studied by IR Dip Spectroscopy and Ab Initio Molecular Orbital Calculation," J. Chem. Phys. 105, 10201 (1998).

#### B-3) 総説、著書

藤井正明,「ヤーン - テラー効果 ( Jahn-Teller effect )」, 化学 53(3), 48 (1998).

#### B-4) 招待講演

藤井正明,「イオンで計る赤外吸収 - 高感度赤外分光法の開発と分子・クラスターの振動分光 』平成10年度日本 分光学会東海支部講演会,分子科学研究所,1998年11月.

藤井正明、「分子線レーザー分光の立場から見た低温マトリックス単離法」、分子研研究会「低温マトリックス単 離法の新展開」, 1998年11月.

# B-5) 受賞、表彰

藤井正明, 日本化学会進歩賞受賞(1992).

藤井正明, 山下太郎学術奨励賞受賞(1992).

藤井正明, 分子科学奨励森野基金(1996).

## B-7) 他大学での講義、客員

早稲田大学理工学総合研究センター, 客員研究員.

通産省電子技術総合研究所流動研究員.

科学技術庁金属材料技術研究所研究課題中間評価委員.

## C) 研究活動の課題と展望

期せずして赤外 - 紫外二重共鳴分光もパルス電場イオン化分光もクラスターを研究対象とするように進展してい る。クラスターでも数個から数十個程度の集合体の構造と動的挙動の関係は明らかにされていないので,我々の 研究手段で解明したいと考えている。一方,多量体クラスターを生成するには大排気量の真空ポンプが必要にな るなど現有の真空装置では限界に達しつつある。この整備,改良が研究課題と密接に関係して問題になってきて いる。

# 鈴 木 俊 法(助教授)

A-1) 専門領域:化学反応動力学、分子分光学

#### A-2) 研究課題:

- a) 基本的分子のエネルギー緩和及び光化学反応素過程
- b) 分子の非弾性および反応性散乱動力学
- c) 化学反応の立体動力学,ベクトル相関
- d) 超強レーザー場中での分子動力学

#### A-3) 研究活動の槻略と主な成果

- a)  $C_2H_2$ 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,増感燐光励起等の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明らかにした。OCS の光解離によって生成する  $S(^1D, ^3P_3)$ 原子の散乱分布を画像観測法を用いて測定し,ab initio 曲面上での量子波束計算と比較することによって,変角振動方向での非断熱遷移の重要な役割を初めて明らかにした。 $CH_3CO$  ラジカルの時間分解画像観測によって,単分子解離速度を内部エネルギーの関数として初めて測定し,速度が RRKM 理論よりも 1 桁小さいことを見出した。また,ナノ秒画像観測法によって  $CH_3CO$  ラジカルの C-C 結合解離しきい値を正確に求めた。
- b) 化学反応によって生成する原子,分子の角運動量配向を記述する量子論,半古典論を定式化した。この理論を検証するため,2次元画像観測法によって, $NO_2$ の355 nm光解離によって生成するNOのベクトル相関を検出した。多極子展開の量子化軸を生成物の速度ベクトルにとる新しい記述と,Hundケース(a)と(b)の中間カップリングケースにおける二光子吸収強度を厳密に取り込んだ理論と比較し,ベクトル相関の画像が初めて検証された。
- c) NO-Arの衝突による回転非弾性散乱の状態選択微分散乱断面積を交差分子線法画像観測装置によって測定し,衝突エネルギー66 meV における回転虹散乱を初めて観測した。O(1D)の反応性散乱を研究するための酸素原子線源の開発を行った。
- d) 超強レーザー場中での分子解離によって生成する多価イオンの散乱分布を初めて画像し,各種の2原子分子,3 原子分子の分子構造や解離過程を明らかにした。

#### B-1) 学術論文

- **H. KATAYANAGI, N. YONEKURA and T. SUZUKI**, "C-Br bond rupture in 193 nm photodissociation of vinyl bromide," *Chem. Phys.* **231**, 345-353 (1998).
- Y. MO and T. SUZUKI, "Quantal and semiclassical analysis of vector correlation in molecular photodissociation," *J. Chem. Phys.* 108, 6780-6789 (1998).
- **T. SHIBATA, H. LI, H. KATAYANAGI and T. SUZUKI**, "Dissociation of metastable CH<sub>3</sub>CO radical observed by subpicosecond time-clocked photofragment imaging," *J. Phys. Chem.* **102**, 2643 (1998).
- **Y. SHI and T. SUZUKI**, "Formation of metastable triplet acetylene from the  $A(^{1}A_{u})$  state near the dissociation threshold," *J. Phys. Chem. A* **102**, 7414-7419 (1998).

Y. MO and T. SUZUKI, "Geometrical factors of two-photon absorption for the determination of alignment and orientation," J. Chem. Phys. 108, 4691-4692 (1998).

T. SUZUKI, H. KATAYANAGI, S. NANBU and M. AOYAGI, "Non-adiabatic bending dissociation in 16 valence electron system OCS," J. Chem. Phys. 109, 5778-5794 (1998).

# B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. SUZUKI, T. SHIBATA and H. LI, "Dissociation of metastable CH<sub>3</sub>CO radical studied by time-resolved photofragment imaging," Laser Techniques for State-Selceted and State-to-State Chemistry IV, SPIE, 3271, 2-6 (1998).

#### B-3) 総説、著書

Y. MO and T. SUZUKI, "Optical detection of angular momentum polarization and its application to photodissociation dynamics," Advances in Multiphoton Processes and Spectroscopy, S. H. Lin and Y. Fujimura, Eds., World Scientific.

#### B-4) 招待講演

T. SUZUKI, "Dissociation of metastable CH<sub>3</sub>CO radical studied by time-resolved photofragment imaging," Laser Techniques for State-Selceted and State-to-State Chemistry IV, SPIE, January 1998.

T. SUZUKI, "Photodissociation dynamics of polyatomic molecules studied by ion imaging," University of Perugia (Italy), June 1998.

T. SUZUKI, "C-C bond rupture in CH<sub>3</sub>CO radical studied by time-clocked photofragment imaging," European Conference on Dynamics of Molecular Collisions XII, Bristol (UK), September 1998.

鈴木俊法,「化学反応を観る」,分子科学研究所研究会「2010年の分子科学を語る」, 岡崎, 1998年 10月.

# B-5) 受賞、麦彰

鈴木俊法,分子科学奨励森野基金,(1993).

鈴木俊法,日本化学会進歩賞,(1994).

鈴木俊法, 日本分光学会論文賞, (1998).

## B-6) 学会及び社会的活動

## 学会の組織委員

第1回日本台湾分子動力学会議組織委員(1997).

分子構造総合討論会プログラム委員(1997).

化学反応討論会組織委員(1998).

第1回東アジア分子動力学会議組織委員(1998).

# C) 研究活動の課題と展望

1931年, HirshfelderらのH<sub>3</sub>LEPポテンシャル面上での核運動の古典軌道計算によって, 化学反応動力学の理論研 究が幕を開け,量子化学計算による電子運動の解析,量子力学的散乱計算による核運動の解析はたゆまぬ前進を 遂げてきた。一方,実験研究は,交差分子線法の開発によって,古典的な反応速度論から粒子散乱を直接観測す る精緻な動力学研究へと研究が進んできた。我々は,交差分子線,超高速レーザー分光,および画像観測法を用 いて, 化学反応によって分子の電子状態や核配置が変化する様子を可視化し, 反応の最も詳細な描像を明らかに する研究を進めている。一方,近年の成層圏オゾン層の破壊,オゾンホールの出現は,基礎的な化学反応の研究 が環境科学というグローバルな問題に深く関与していることを示した。フロンの使用はモントリオール議定書の 批准以来削減されてはいるが、地球大気の循環速度が遅いために、今後二十年間はオゾン層の破壊は進むと予測 されている。今後,各種新規化合物の規制を含む政策策定のために,化合物の迅速かつ詳細な反応研究が不可欠 であり、化学反応を画像化する研究は、このような分野にも資することを目指している。

# 3-5 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 電子・d 電子相互作用の研究
- b) 分光法を主とする分子性導体の研究

#### 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 電子・d電子相互作用の研究: フタロシアニン導体 ( NiPc(AsF<sub>6</sub>)<sub>0.5</sub> ) 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 軌道へ電荷移動を起こす。これに伴い,常圧 40 Kに観測される金属・絶縁体転移温度が加圧に伴い上昇する。この現象を圧力誘起電荷移動により発生するニッ ケル鎖上の乱雑ポテンシャルによって説明した。このほか今年度に新しく見出した現象は超格子の存在と40 Kに おける金属・絶縁体転移転における熱異常である。この両者を考慮にいれた金属・絶縁体転移の模型を考察する 必要がある。また均一な混晶  $Ni_{1-x}Co_xPc(AsF_6)_{0.5}$  ができる事を X 線回折 , 反射分光法 , ラマン分光法 , ESRにより 明らかにした。今後混晶の系統的な物性研究を通して $CoPc(AsF_6)_{0.5}$ における - d相互作用の役割を解明できる と考えている。
- b) 分光法を主とする分子性導体の研究: 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様々な 電子系導 体の物性を反射分光法とラマン分光法を用いて調べている。(1)電荷移動塩 DMTSA-X, DMTTA-X(X = BF4, CIO4)の物性を比較しながら電子状態を系統的に調べている。DMTTA-BF4はモット絶縁体で低温でスピンパイエ ルス転移を起こす。一方, DMTSA-BF4 は金属的であり, やはり低温でパイエルス転移を起こす。特に DMTSA-BF4では対称性が破れ構造が激しく変化する事が反射スペクトルより予想される。またラマンスペクトルのSe-Se 伸縮振動が相転移転移以下で二つの分かれる事から、低温ではDMTSA+1-6、DMTSA+1+6のような不均一な電荷状 態をとっている可能性がある。また DMTSA-BF₄ において 2 種類の電荷移動型遷移があることを理論的に明らか かにし,実験においても2種類の電子遷移が現れる事を証明した。(2)非平面分子(BEDT-ATD)2X(solvent)(X= PF6, AsF6, BF4; solvent = THF, DHF, DO) はほとんど同形の構造をとりながら, 金属絶縁体転移を起したり, 金属状態を低温まで保ったりと,微妙な構造の違いが基底状態を規定している。この物質が約0.2 eV という狭い バンド幅をもつ擬一次元的な金属である事を明らかにした。また狭いバンド幅と関係していると思うが,非常に 奇妙なσ(ω)スペクトルをもっている。 金属絶縁体転移に伴う対称性の破れを分光法とともに低温 X 線回折によっ ても明らかにした。(3)擬二次元的な金属を多数作るBDT-TTPの電荷移動塩のバンド構造を反射分光法によっ て調べている。実験的に移動積分の絶対値を見積り、従来用いられて来たフロンティア軌道の重なり積分から見 積もる方法と比較した。従来の方法では分子の横方向の移動積分を約2倍程度過大評価している事を明らかにし た。(BDT-TTP)<sub>2</sub>X (AsF<sub>6</sub>, SbF<sub>6</sub>, ClO<sub>4</sub>)と(ST-TTP)<sub>2</sub>AsF<sub>6</sub>などの同形の構造の物質について比較している。

# B-1) 学術論文

- Y. YONEHARA and K. YAKUSHI, "High-pressure study of one-dimensional phthalocyanine conductor, NiPc(AsF<sub>6</sub>)<sub>0.5</sub>," Synthetic Metals 94, 149-155 (1998).
- M. URUICHI, K. YAKUSHI, Y. YAMASHITA and J. QIN, "Charge-Transfer Salts of M(mnt)<sub>2</sub>, (M = Ni, Pd, Pt, Au) with BDNT: Ferromagnetic Interaction in Conductive (BDNT)<sub>2</sub>-[Ni(mnt)<sub>2</sub>]," J. Mater. Chem. 8, 141-146 (1998).
- I. L. KOGAN and K. YAKUSHI, "Electrochemical and spectroelectrochemical properties of a new stable composite film electrode. Platinum phthalocyanine-poly-bisphenol-A-carbonate," Electrochimica Acta 43, 2053-2060 (1998).
- J. DONG, K. YAKUSHI, K.TAKIMIYA and T. OTSUBO, "Metallic properties of 1:1 Charge-Transfer Salt, Dimethyltetraselenoanthracene-tetrafluoroborate (DMTSA-BF<sub>4</sub>)," J. Phys. Soc. Jpn. 67, 971-977 (1998).
- T. MANABE, M. YAMASHITA, T. KAWASHIMA, H. OKAMOTO, H. KITAGAWA, T. MITANI, K. TORIUMI, H. MIYAMAE, K. INOUE and K. YAKUSHI, "Competition between electron-correlation in Ni<sup>III</sup> states and electron-phonon interaction in Pd<sup>II</sup>-Pd<sup>IV</sup> mixed-valence states in quasi-one-dimensional halogen-bridged mixed-metal complexes, Ni<sub>1-x</sub>Pd<sub>x</sub>-(chxn)<sub>2</sub>Br<sub>3</sub>," Proceedings of SPIE **3145**, 106-115 (1998).
- J. OUYANG, K. YAKUSHI, Y. MISAKI and K. TANAKA, "Two-Dimensional Band Structure of Organic Metals (BDT-TTP<sub>2</sub>X (X = SbF<sub>6</sub>, AsF<sub>6</sub>) Studied by Polarized Reflection Spectroscopy," J. Phys. Soc. Jpn. 67, 3191-3198 (1998).
- S. HASEGAWA, T. MIYAMAE, K. YAKUSHI, H. INOKUCHI, K. SEKI and N. UENO, "Origin of the photoemission intensity oscillation of C60," Phys. Rev. B 58, 4927-4933 (1998).

## 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).
- 日本化学会職域代表(1995-).
- 日本分光学会東海支部幹事(1997-1998).

#### 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3,4,5,6回日中共同セミナー組織委員(第5回,6回は日本側代表)(1989,1992,1995,1998).

第5,6,7回日韓共同シンポジウム組織委員(第6回,7回は日本側代表)(1993,1995,1997).

#### その他の委員

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(1993-1996).

東京大学物性研究所 共同利用施設専門委員会委員(1997-).

東京大学物性研究所 物質設計評価施設運営委員会委員(1998-).

## C) 研究活動の課題と展望

課題としては「分子性導体」に新しい切り口を開き、この分野に新しい視点を導入することであるが、(1)従来の 電子系の中に遷移金属を導入した分子と(2)負の電子間反発力つまり電子間引力を持つ分子性物質に新しい方向を 見出せると考えて研究を推進している。

(1)については今や - d電子系という言葉が定着し、現在多くの人が様々な - d電子系物質の開発を行ってい る。金属フタロシアニン導体は バンドのフェルミ準位近傍に局在性の強い d バンドが存在するという 2 バンド 電子系という位置づけと,磁性金属を含むフタロシアニンのラジカル塩が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はらむという位置付けの二つの側面をもっている。特に後者で最も重要な役割を果たす 電子と d 電子の相互作用を非磁性分子のニッケルフタロシアニンと磁性分子のコバルトフタロシアニンの電荷 移動塩の混晶の物性を系統的に調べてゆく事によって解明できると考えている。

(2)はいまだに探査の途上にあり、細長い形状を持つ分子を中心にして様々な分子導体の物性を分光法を中心にし て調べている。DMTSA-X の系列では2:1の組成をもつ物質についても調べ,この特異な物質の全体像を掴む 事を計画している。BDT-TTP の電荷移動塩では -型の (BDT-TTP)2Cu(NCS)2 が構造相転移を起した後に不均一 な電荷状態(Wigner crystal?)をとるので、マーデルングエネルギーの計算などを通して最適な電荷分布を調べ るとともに高圧下の電子相を明らかにしたい。(BEDT-ATD)2X(solvent)の系については電子物性と構造との関係を すべての組合わせについて調べ、溶媒分子の秩序化と金属・絶縁体転移との関係を明らかにする。

反射分光法をもちいて分子性導体の電子励起スペクトルを研究する上で遠赤外領域の分光が極めて重要である。従 来試料の大きさが制約となってこの領域は限られた物質でしか研究が行われていないが,この問題を克服するの が重要な課題であると考えている。

# 中村敏和(助教授)\*)

A-1) 専門領域:物性物理学

#### A-2) 研究課題:

- a) BEDT-TTF 系伝導体における競合電子相の理解
- b) TMTTF 系反強磁性相の磁気構造の決定
- c) 分子性導体における新電子相の探索

- a) 1/4-filled 系有機導体(BEDT-TTF)2MZn(SCN)4 ( M = Cs, Rb ) の電子状態を,磁気的な手法(磁化率,EPR,NMR)により調べている。この系は二次元的な Fermi 面をもつと考えられているが,低温で金属・絶縁体転移を起こす。 Cs 塩の低温絶縁相で顕著な磁化率,NMR 緩和率の増大が観測され,新規な電荷秩序相が形成されていると考えられる。一方,Rb 塩では 190 K 近傍の冷却速度に依存した電子状態を取ることを見いだした。190 K で一次転移が存在し,試料を徐冷すると構造相転移が起こり室温で等価だった BEDT-TTF 分子が非等価になる。それに伴い明瞭な電荷の局在化が起こり,20 K以下でスピン一重項状態に転移する。試料を急冷すると室温構造が quench され,90 K以下で Cs 塩の低温相で見られたような異常常磁性相に転移する。また,不純物として BMDT-TTF を 2%以上ドープすると,190 K 転移が抑制され徐冷条件下でも室温高伝導相が安定化されることを見いだした。 0.5-1.0%のドープ量では,190 K 相転移は観測されるが,20 K スピン一重項転移が抑制されることがわかった( Synth. Metals に印刷中 )。現在,これらの電子相の電荷状態に関して NMR 吸収線形を調べている(学習院大学:高橋教授との共同研究 )。今後,この異常常磁性相の起源を理解するとともに,他の系についても調べる予定である。
- b) TMTCF系で提唱されている相図は,擬一次元電子系物理の基本的かつ重要な問題を含有しており,その電子状態を理解すべく,世界の数多くの研究者が実験的,理論的に研究を行っている。なかでも,整合反強磁性相と高温からみられる電荷局在状態との関連は,電荷局在のメカニズムや基底状態の起源に迫る上で重要な意味を持っている。反強磁性相での 1H-NMR 吸収曲線の解析から,反強磁性の磁気構造を調べた。常圧下と 2.2 kbar では,反強磁性相は整合な波数(1/2,1/4,0)をとるが,3.6 kbar 以上では不整合な波数を取ることがわかった。1H-NMR 吸収曲線は整合と不整合とで顕著に異なるが,波数および振幅は近い。また,3.6 kbar 以上での圧力領域での NMR 緩和率では,反強磁性相中にいわゆるsub-phase転移に伴う明瞭なピークが観測され,このことも系が不整合 SDWになっていることを意味している(Synth. Metals に印刷中)。さらに,同位体置換した試料による 13C-NMR 測定を計画しており,常磁性相における電荷局在状態について言及する予定である。
- c) 電荷移動錯体や金属錯体などでは,対称性を異にした複数のスピン自由度を持つものが存在し,複合物性,電子相の競合が期待される。これらの磁気的性質ならびに電子状態を調べている。一例として,電荷移動錯体(CPDT-STF)-(TCNQ)の磁性研究がある(京大工学部;御崎助教授との共同研究;Synth. Metals に印刷中)。この系は二次元的な相互作用をもつドナー層と,一次元的なカラム構造を為すアクセプター層が交互に積層した構造をとっている。金属的な伝導挙動を示すにもかかわらず,磁化率は局在スピン系的な振る舞いを示す。EPRのg-tensor主値解析により,CPDT-STFに起因する電子が伝導を担い,TCNQ上の電子が局在し,Curie的な磁性を示していることがわかった。Curie 定数見積もったスピン濃度は,電荷移動量から期待される量に比較して極端に少なく,新

しい電荷局在状態をとっている可能性がある。NMR測定を行うとともに,類似の電荷移動錯体で系統的な測定を 計画中である。

# B-4) 招待講演

中村敏和,「有機導体における電荷局在:磁気共鳴の観点から」,東大物性研 COE 研究会,神奈川,1998 年 3 月. 中村敏和,「磁気共鳴の観点による有機導体の電荷局在とスピン励起」,日本化学会秋季年会,愛媛,1998年9月.

# C) 研究活動の課題と展望

1998年6月に着任し,実験室の整備を中心に行っている。本グループでは,分子性導体の電子構造(磁性,電荷) を主に微視的な手法(NMR,ESR)により明らかにする。分子性導体は,これまでの精力的な研究により,その基本 的な性質は理解できつつあるが、いくつかの未解決な問題が浮上してきたのも事実である。この未解決な問題を 理解するとともに、一連の分子性導体の磁気的、電気的性質を調べ、分子性導体における新しい電子相、新機能 を持った物質群を探索する。

\*)1998年6月1日着任

# 分子集団動力学部門

# 小 林 速 男(教授)

A-1) 専門領域:固体化学

## A-2) 研究課題

- a) 超伝導 絶縁体転移, 超伝導 金属転移を示す有機超伝導体の物性評価
- b) 有機伝導体における対イオンの磁気秩序と超伝導の競合
- c) 新規分子性金属,特に純有機強磁性金属の開発
- d) 有機分子性結晶の超高圧下の電気伝導性と結晶構造
- e) 極低温,高圧下の X 線結晶構造研究

# A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 昨年,磁性イオンを含む有機超伝導体  $\lambda$ -BETS $_2$ Fe $_x$ Ga $_1$ - $_x$ Br $_y$ Cl $_4$ - $_y$  が超伝導 反強磁性絶縁相転移を見出したが,更に,超伝導 金属転移を行う系も存在することを事を発見した。また,超伝導状態はほぼ完全マイスナー状態にある事が判明した。従来,超伝導と強磁性の競合で超伝導が破れ,低温で金属状態が実現したケースは著名なシェブレル塩などで知られているが,この様なバルクな超伝導 絶縁体転移は有機伝導体は勿論,無機伝導体でも前例が無いものである。超伝導相が壊れたときに出現する絶縁相は $\pi$ -d 電子系がカップルした特異な反強磁性相であると予想している。この有機超伝導体では超伝導相と磁性対イオンの反強磁性秩序が競合していると考えている。主な成果の報告は今後の課題である。
- b) 最近 , 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が , 局在磁気モーメントと金属電子が低温まで共存する有機伝導体の実例は極めて少なく , 話題となってきた殆どの系は低温では導電性を失い , 単純な磁性絶縁体である。この様な観点から κ-, および λ-BETS<sub>2</sub>FeCl<sub>4</sub> は興味ある系である。最近 λ-型 BETS 伝導体において , 高圧下で反強磁性金属相の存在を発見した。磁気秩序と金属電子の共存は有機伝導体では初めてである。又 , 極く最近 κ-BETS<sub>2</sub>FeBr<sub>4</sub> が初めての常圧反強磁性金属となる事を発見し吟味を進めている。
- c) 純有機強磁性伝導体や新らしい構造形態を持つと予想される分子性伝導体の合成的研究を継続している。
- e) ダイヤモンドアンビルを用いた有機伝導体の4端子伝導度測定法の確立を目指している。既に当面の目標であった5万気圧を越え,10万気圧程度までの高圧下で実験が可能である事を確認した。具体的成果は今後の課題である。又,ダイヤモンドアンビル単結晶X線結晶構造解析を進めるべくセルの設計を行った。現在のセルでは10 kbarまでのX線回折強度デ-タ-が得られている。成果報告は今後の課題である。更に,イメージングプレート低温X線構造解析システムを用い低温,高圧のX線構造解析の検討を開始した。

## B-1) 学術論文

H. AKUTSU, K. KATO, E. OJIMA, H. KOBAYASHI, H. TANAKA, A. KOBAYASHI and P. CASSOUX, "Coupling of Metal-Insulator and Antiferromagnetic Transitions in the Highly Correlated Organic Conductor Incorporating Magnetic Anions, λ-(BETS)<sub>2</sub>FeBr<sub>x</sub>Cl<sub>4-x</sub>," *Phys. Rev. B* **58**, 9294-9302 (1998).

- L. BROSSARD, R. CERAC, C. COULON, M. TOKUMOTO, T. ZIMAN, D. K. PETROV, V. N. LAUKHIN, M. J. NAUGHTON, A. AUDOUARD, F. GOZE, A. KOBAYASHI, H. KOBAYASHI and P. CASSOUX, "Interplay between Chains of S = 5/2 Localised Spins and Two-dimensional Sheets of Organic Donors in the Synthetically Built Magnetic Multilayer λ-(BETS)<sub>2</sub>FeCl<sub>4</sub>," Eur. Phys. J. B 1, 439-452 (1998).
- H. TANAKA, A. KOBAYASHI and H. KOBAYASHI, "Synthesis and Crystal Structures of ET and BETS Salts Containing Bis(dithiosquarato)metalate Anions," Bull. Chem. Soc. Jpn. 70, 3137-3152 (1997).
- H. AKUTSU, K. KATO, E. ARAI, H. KOBAYASHI, A. KOBAYASHI, M. TOKUMOTO, L. BROSSARD and P. CASSOUX, "A Coupled Metal-Insulator and Antiferromagnetic Transition of λ-(BETS)<sub>2</sub>FeCl<sub>4</sub> under High-pressre and Magnetic Field (BETS = bis(ethylenedithio)tetraselenafulvalene]," Solid State Commun. 105, 485-489 (1998).
- A. SATO, E. OJIMA, H. AKUTSU, H. KOBAYASHI, A. KOBAYASHI and P. CASSOUX, "Temperature-composition Phase Diagram of the Organic Alloys,  $\lambda$ -(BETS)<sub>2</sub>(Fe<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>)Cl<sub>4</sub>, with Mixed Magnetic and Non-magnetic Anions," *Chem. Lett.* 673-674 (1998).
- A. KOBAYASHI, A. MIYAMOTO, R. KATO and H. KOBAYASHI, "Electrical and Structural Properties and Phase Diagram of a Molecular Superconductor,  $\beta$ -[(CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>N][Pd(dmit)<sub>2</sub>]<sub>2</sub>," Bull. Chem. Soc. Jpn. **71**, 997-1006 (1998).
- H. MORI, S. TANAKA, T. MORI, A. KOBAYASHI and H. KOBAYASHI, "Crystal Structure and Physical Properties of M=Rb and Tl salts of (BEDT-TTF)<sub>2</sub>MM'(SCN)<sub>4</sub> [M' = Co, Zn]," Bull. Chem. Soc. Jpn. 71, 797-806 (1998).
- E. ARAI, H. FUJIWARA, H. KOBAYASHI, A. KOBAYASHI, H. TAKIMIYA, T. OTSUBO and F. OGURA, "Novel Stable Metallic Salts Based on Donor Molecule Containing Peri-Ditellurium Bridges, TMTTeN," Inorg. Chem. 37, 2850-2851 (1998).
- H. FUJIWARA, E. OJIMA, H. KOBAYASHI, T. COURSET, I. MALFANT and P. CASSOUX, "Synthesis, Structure and Physical Properties of Tetraalkylammonium Bis(5,6-dihydro-1,4-dithiin-2,3-diselenolato)-nickelate, (R<sub>4</sub>N)[Ni(ddds)<sub>2</sub>] (R = Me, Et and n-Bu) and Neutral Complex [Ni(ddds)<sub>2</sub>]<sub>2</sub>," Eur. J. Inorg. Chem. 1631-1639 (1998).
- H. FUJIWARA, E. ARAI and H. KOBAYASHI, "Synthesis, Structure and Properties of a Novel Trisulfide Double-Bridged TTF Dimer," J. Mater. Chem. 8, 829-831 (1998).
- H. FUJIWARA, Y. MISAKI, T. YAMABE, T. MORI, H. MORI and S. TANAKA, "Selenium Analogues of DTEDT as Promising Donors for Organic Metals," Synth. Met. 86, 1813-1814 (1997).
- Y. MISAKI, M. TANIGUCHI, T. MIURA, H. FUJIWARA, T. YAMABE, T. KAWAMOTO and T. MORI, "Synthesis and Properties of MeDTDM Salts," Adv. Mater. 9, 633-635 (1997).
- Y. MISAKI, T. MIURA, M. TANIGUCHI, H. FUJIWARA, T. YAMABE, T. MORI, H. MORI and S. TANAKA, "Novel κ-Type Organic Metal Based on a Bis-Fused Tetrathiafulvalene Derivative," Adv. Mater. 9, 714-716 (1997).
- H. FUJIWARA, Y. MISAKI, M. TANIGUCHI, T. YAMABE, T. KAWAMOTO, T. MORI, H. MORI and S. Tanaka, "Preparation, Structures and Physical Properties of κ-Type Two-dimensional Conductors Based on Unsymmetrical Extended Tetrathiafulvalene: 2-Cyclopentanylidene-1,3-dithiolo[4,5-d]-4,5-ethylenedithiotetrathiafulvalene (CPDTET)," J. Mater. Chem. 8, 1711-717 (1998).

N. D. KUSHCH, O. A. DYACHENKO, V. V. GRITSENKO, P. CASSOUX, C. FAULMANN, A. KOBAYASHI and H. KOBAYASHI, "Two New Cation Radical Bis(ethylenedithio)tetraselenafulvalene (BETS) Salts, α-(BETS)<sub>6</sub>Bi<sub>3</sub>Cl<sub>12</sub>·PhCl and (BETS)<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub>Cl<sub>8</sub>: Synthesis, Structure and Conducting Properties. First Characterization of the New Trinuclear Anion [Bi<sub>3</sub>Cl<sub>12</sub>]<sub>3</sub>-," *J. Chem Soc. Dalton Trans.* 683 (1998).

B. Z. NARYMBETOV, N. D. KUSHCH, L. V. ZORINA, S. S. KHASANOV, R. P.SHIBAEVA, T. G. TOGONIDZE, A. E. KOVALEV, M. V. KARTSOVNIK, L. I. BURAVOV, E. B. YAGUBSKII, E. CANADELL, A. KOBAYASHI and H. KOBAYASHI, "A New Stable Organic Metal: κ-(BETS)<sub>2</sub>C(CN)<sub>3</sub>. The First κ-Type Radical Cation Salt with a Planar-Triangular Discrete Organic Anion," *Eur. Phys. J. B* 1, 179-185 (1998).

N. D. KUSHCH, L. I. BRAVOV, S. I. PESOTSKII, R. B. LYUBOVSKII, E. B. YAGUBSKII, M. G. KAPLUNOV, E. V. GOLUBEV, B. Zh. NARYMBETOV, S. S. KHASANOV, L. V. ZORINA, L. ROZENBERG, R. SIBAEVA, A. KOBAYASHI and H. KOBAYASHI, "A New Stable Organic Metal in the Well Known Family of Radical Cation α-Salts: α-(BETS)<sub>2</sub>TlHg(SeCN)<sub>4</sub>. Synthesis, Structure and properties," *J. Mater. Chem.* **8**, 897-901 (1998).

S. S. KHASANOV, B. Z. NARYMBETOV, L. V. ZORINA, L. P. ROZENBERG, R. P. SHIBAEVA, N. D. KUSHCH, E. B. YAGUBSKII, R. ROUSSEAU and E. CANADELL, "Concerning the First-order Phase Transition in the Low-dimensional Organic Superconductor (BEDO-TTF)<sub>2</sub>ReO<sub>4</sub>·H<sub>2</sub>O. Crystal and Electronic band Structures below the Phase Transition (T = 170 K)," *Eur.Phys. J. B* 1, 419-428 (1998).

R. P. SHIBAEVA, S. S. KHASANOV, B. Zh. NARYMBETOV, L. V. ZORINA, L. P. ROZENBERG, A. V. BAZHENOV, N. D. KUSHCH, E. B. YAGUBSKII, C. ROVIRA and E. CANADELL, "Low Temperature Crystal and Electronic Band Structure of the (BEDO-TTF)<sub>2</sub>Cl<sub>1.28</sub>(H<sub>3</sub>O)<sub>0.28</sub>·2.44H<sub>2</sub>O Stable Organic Metal," *J.Mater.Chem.* **8**, 1151-1156 (1998).

# B-3) 総説、著書

**P. CASSOUX and H. KOBAYASHI**, "Interplay of Conductivity and Magnetism in BETS-Derived Compounds," in *Supramolecular Engineering of Synthetic Metallic materials: Conductors and Magnets*, J. Veciana, C. Rovira and D. B. Amabilino, Eds., Kluwer Academic Publishers; Dordrecht, (1998).

小林速男、小林昭子、「分子性金属・超伝導体の結晶構造」、 化学総説 35, 105-114 (1998).

小林速男、加藤礼三,「分子性金属・超伝導体の物性」, 化学総説 35, 115-126 (1998).

## B-4) 招待講演

**H. KOBAYASHI**, "On the Low-temperature State of Highly Correlated BETS Conductors," International Conference on Science and Technology Synthetic Metals, Montpellier (France), July 1998.

**H. KOBAYASHI**, "A Novel Organic Superconductor with Insulating Magnetic Ground state," International Conference of Coordination Chemistry, Frienze (Italy), August 1998.

小林速男、「磁性イオンを含む強相関有機伝導体」、日本化学会秋季年会、愛媛大学、松山、1998年9月.

**H. KOBAYASHI**, "Electronic and Magnetic Properties of Highly Correlated Organic Conductors with Magnetic Anions, λ-BETS<sub>2</sub>Fe<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>Br<sub>y</sub>Cl<sub>4-y</sub>," The 6-th Japan-China Joint Symposium, Okazaki (Japan), October 1998.

小林速男, "Superconducting and/or Antiferromagnetic Transitions of Highly Correlated Organic Conductors with Magnetic Anions," 第 3 回物エシンポジウム「スピン・電荷・光・結合系の相制御」, 東京大学, 東京, 1998 年 12 月.

#### B-5) 受賞

小林速男,日本化学会学術賞(1997).

## B-6) 学会及び社会活動

#### 学術雑誌編集委員

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).

日本化学会欧文誌編集委員(1997-).

J. Mater. Chem. Advisory Editorial Board (1998-).

#### その他委員

日本化学会学術賞選考委員(1995).

東大物性研究所物質評価施設運営委員(1996-).

東大物性研究所協議会委員(1998-).

## B-7) 他大学での講義

名古屋大学工学系研究科物質制御工学専攻 物質制御工学特論 V(1997 年後期).

#### C) 研究活動の課題と展望

(1)最近 前例のない金属 - 超伝導 - 反強磁性絶縁相転移を示す有機伝導体を発見し、その物性評価を進めている。 又,初めての金属-超伝導相-金属相転移を示す磁性イオンを含む分子性伝導体をも発見した。更に,磁性対ア ニオンの反強磁性磁気秩序と 金属電子が共存する有機反強磁性金属を初めて発見した。近年,有機伝導体にお ける -d相互作用の研究は話題とはなってきたもののその名に値する実例のない状況が続いていたが、大きな前 進と言うことが出来るであろう。当事者としてはこれらの現象は数年以前に発見し得る状況にあったが,最近急 速に研究が進んだのは分子研のSQUID磁化率測定装置に負っているところが大きい。新たな系の開発には合成研 究の前進と同時に,測定設備の存在が不可欠である事を示している。今後,有機伝導体に取り込まれた局在スピ ン系の磁気秩序と 電子系の超伝導の競合の研究が進展していくものと思われる。又,新規伝導体の開発研究と しては有機安定ラジカルをスピン源とする純有機強磁性金属の合成が新らしい目標として急速に浮かび上がって きた。転移温度が頭打ちの状況にある有機強磁性体開発の新展開という観点からも注目される。(2)数年前までは困 難な実験技術と思われ,殆ど普及していなかった低温×線結晶構造解析は我々による簡便な低温×線システムの 立ち上げ等を契機として急速に普及し初め,低温 X 線構造解析に関する状況は大きく変わった。次の目標は超高 圧単結晶×線構造解析および低温・高圧単結晶×線構造解析であろう。既に先駆的な仕事がなされているが、一 般的な実験手段とするためにはかなりの改良が必要である。10万気圧以上の圧力領域での精密な電気伝導度測定 技術の開発は,超高圧単結晶 X 線構造解析と共に,分子物質の高圧固体化学の今後の発展を期する上で不可欠で あると思われる。

# 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) パルス磁場匂配 NMR 法の開発
- b) 液晶の相転移とダイナミクス
- c) アルカリ 水素 炭素系の電子物性
- d) 水素結合性固体の誘電物性

## A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 凝縮系における分子の並進運動を ,振動や回転の自由度から切り離して選択的に測定する手法としてパルス磁場 匂配 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の方法を開発し , 分光器を製作した。回転 4 極コイルによって生じる 12 Tm-1 の 2 次元磁 場匂配によって液晶の異方的な D テンソルを決定した。
- b) 液晶における反強誘電秩序の微視的起源を明らかにするために <sup>13</sup>C NMR による実験研究を行った。その結果,極性分子間の双極子相互作用による安定化を実現するうえで有利に作用する分子構造(いわゆる屈曲鎖モデル)が液晶状態で実現していることを立証した。また,回転系二重共鳴における過渡的磁化振動構造から,キラル中心近傍の分子内運動が誘電秩序形成と密接に関係していることを示した。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非対称性との関係など,乱れた系の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電子系を持つホスト格子 ,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 核の電場匂配テンソル , 及び各原子種の運動性などを定量的に明らかにした。
- d) 分子内水素結合による互変異性がもたらす固体誘電物性を研究した。特に9 ヒドロキシフェナレノン誘導体における重水素誘起不整合相と相転移の起源を極低温重水素 NMR によって解明した。水素体ではトンネル運動が系の基底状態を形成するのに対して,重水素体ではトンネリングが抑制される結果,水素体では隠れていた分子間双極子相互作用が顕在化し,重水素の反強誘電的秩序化を引き起こすこと,また,不整合構造の起源はこれとは別の自由度に基づくものであることを明らかにした。

# B-1) 学術論文

V. RAYSSAC, P. LESOT, J. P. BAYLE and S. MIYAJIMA, "Unusual Ordering of a Dioxyethylene Chain in a Dialkoxy Laterally Substituted Nematogen as Evidenced by <sup>13</sup>C NMR," *J. Chim. Phys.* **95**, 973-986 (1998).

- T. NISHIOKA, K. ISOBE, I. KINOSHITA, Y. OZAWA, A. V. DE MIGUEL, T. NAKAI and S. MIYAJIMA, "Formation and Dynamic Properties of the Triangular Rhodium  $\mu_3$ -Sulfido Complex  $[Rh_3Cp^*_3(\mu_3-\eta^2-\|-C_2H_2)(\mu_3-S)]^{2+}$   $(Cp^*=\eta^5-C_5Me_5)$ , Including an Acetylene Ligand Generated by the Coupling and Deprotonation of Two Bridging Methylene Units in a Dirhodium Complex," Organometallics 17, 1637 (1998).
- O. OISHI, S. YAMASHITA, E. NISHIMOTO, S. LEE, G. SUGIHARA and M. OHNO, "Conformations and Orientations of Aromatic Amino Acid Residues of Tachyplesin I in Phospholipid Membranes," Biochem. 36, 4352 (1997).
- P. BERDAGUE, J. P. BAYLE, H. FUJIMORI and S. MIYAJIMA, "Influence of Large Lateral Substituents on the Nematic Liquid Crystalline Properties Studied by <sup>13</sup>C NMR," New J. Chem. 1005-1012 (1998).
- V. RAYSSAC, P JUDEINSTEIN, J. P. BAYLE, D. KUWAHARA, H. OGATA and S. MIYAJIMA, "NMR Investigation of the Oxyethylene Unit Ordering in Some Related Dialkoxy Laterally Substituted Nematogens," Liq. Cryst. 25, 427-436 (1998).
- D. KUWAHARA, T. NAKAI and S. MIYAJIMA, "Two-Dimensional NMR Measurements of Heteronuclear Dipolar Powder Spectra Using the Chemical-Shift-Anisotropy Recovery Technique," Chem. Phys. Lett. 291, 244-248 (1998).
- O. OISHI, S. YAMASHITA, M. OHNO, S. LEE, G. SUGIHARA and N. NISHINO, "Peculiar Photophysical Properties of a Conformationally Proximal Pyrene-Pair," Chem. Phys. Lett. 269, 530-534 (1997).
- C. BENEDICT, U. LANGER, H. H. LIMBACH, H. OGATA and S. TAKEDA, "Observation of Thermal Tautomerism in Thermochromic Salicylideneaniline Derivatives in the Solid State by N-15 CPMAS NMR Down to Cryogenic Temperatures," Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 102, 335-339 (1998).

# B-2) 国際会議のプロシーディングス

H. OGATA, S. MIYAJIMA, K. IMAEDA and H. INOKUCHI, "NMR Study in Sodium-Hydrogen-C<sub>60</sub> Superconductor," Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 513, 419-420 (1998).

## B-3) 総説、著書

S. MIYAJIMA and O. OISHI, "Measurement of Anisotropic Self-Diffusion Coefficient Tensors by PGSE-NMR," DIM Newsletter 12, 16-20 (1998).

## B-4) 招待講演

宮島清一、「液晶における反強誘電性の発現機構 NMRによるアプローチ 」、第95回有機エレクトロニクス 材料研究会「見えてきた?液晶性の本質」,東京,1998年5月.

宮島清一、「液晶における反強誘電性の微視的起源を求めて」、高分子学会98-2NMR研究会、東京、1998年10月.

## 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(1995-1997).

日本物理学会分子性結晶,液晶,有機半導体分科 世話人(1987-88).

# 学術雑誌編集委員

日本液晶学会誌編集委員(1997-).

# B-7) 他大学での講義

「キラリティーと液晶」, 日本大学大学院総合基礎科学研究科, 1998年 11月.

# C) 研究活動の課題と展望

凝縮系におけるNMR分光学の新手法を開拓し、それをもとに物性研究の新展開を図ることを課題としている。回転4極コイルを用いた2次元パルス磁場匂配スピンエコーNMR装置を完成させたので、これを用いて、一見複雑に見える系の構造とダイナミクスの研究を展開する。高圧NMR装置の製作を進めている。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彩な物性を解明する。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と結びついた物性の研究を進める。

# 分子集団研究部門

# 長谷川 真 史(助手)

A-1) 専門領域:光電子分光、固体化学

#### A-2) 研究課題:

- a) 光電子スペクトル強度計算プログラムの開発
- b) 有機分子薄膜や高分子薄膜の表面官能基の定量的配向測定
- c) C60 で観測される特異な光電子スペクトル強度の入射光エネルギー依存性の研究
- d) 水素化したフラーレン(C60Hx)からの水素脱離の研究
- e) 非晶質氷包埋による変性のない生体関連分子の電子状態測定手法の開発

- a) 有機分子超薄膜の表面 1 層の分子配向を低損傷かつ定量的に測定するのは容易でない。しかし,我々が開発した 有機薄膜光電子強度計算プログラム(IAC31)を用い,精度の良い始状態とsingle-scattering近似による終状態,固 体中での非弾性散乱による脱出深さを考慮してスペクトル強度を定量的に計算することによって、その測定が可 能になった。本年度は,計算に使用する2s原子軌道のradial integral とphase shift が光電子エネルギーの低い場合 (約30eV以下)に異常値を示すバグについて,その改良方法を検討している。
- b) 分子末端にピロール環を有するアルカンチオールの自己組織化単分子膜(self-assembled Monolayer's: SAM's )につ いて,角度分解紫外光電子スペクトル(ARUPS)測定とそのスペクトル強度計算を行ない,膜表面に存在するピ ロール環の配向に関する知見を得た。また,高分子(ポリナフタレン,poly(1,10-phenanthroline-3,8-diyl))や,オ リゴマー (tetratetracontane) についても, ARUPS のスペクトル強度計算による研究成果を得た。
- c) シンクロトロン放射光で励起した C60 の紫外光電子スペクトルでは, 価電子帯の バンド強度が特異な入射光エ ネルギー hv 依存性を示すことが知られている。その原因を明らかにするために,実測した ARUPS スペクトルを いろいろな近似レベルにおける強度計算によって調べた。終状態を光電子の1回散乱(single-scattering)で近似し た場合と平面波で近似した場合との比較から,入射光エネルギーhv依存性は終状態に原因があるのでなく,始状 態の各原子から放出される光電子の干渉によることが分かった。また,始状態を簡単な球殻軌道で近似した場合 の解析的な光電子放出強度計算式を考案して, hv 依存性の原因が Cm 分子の球殻形状と比較的大きな球殻径にあ ることを明らかにした。
- d)  $C_{60}H_x$  からの水素脱離がアルカリ金属  $C_8$  の共存によって促進されることを,放射光を用いた ARUPS によって実 験的に確認した。水素はグラファイトのように層間にトラップされるものでなく, C-H の化学結合によって分子 に固定されていると考えられるので,その脱離温度(約215)は異常に低い。その脱離機構を明らかにするため に,様々なモデル系における分子動力学計算を試みている。
- e) 研究のポイントは,液体エタンによる急速凍結を用いた生体関連分子の非晶質氷包埋と,これを冷却したまま超 高真空の測定チャンバー内に移送する機能を有する,試料調製チャンバーの製作にある。現在は,試料調製チャ ンバーの主要部分である (1)内部バルブ方式による高真空 - 低真空間の分離機構と (2)液体エタン / 低温金属圧着 - ハイブリッド型急速凍結機構,の設計を終え,チャンバー全体の製作に入った状況にある。

# B-1) 学術論文

S. HASEGAWA, T. MIYAMAE, K. YAKUSHI, H. INOKUCHI, K. SEKI and N. UENO, "Origin of the photoemission intensity oscillation of C<sub>60</sub>," Phys. Rev. B **58**, 4927-4933 (1998).

K. K. OKUDAIRA, S. HASEGAWA, P. T. SPRUNGER, E. MORIKAWA, V. SAILE, K. SEKI, Y. HARADA and N. UENO, "Photoemission study of pristine and photodegraded poly(methylmethacrylate)," J. Applied Phys. 83, 4292-4298 (1998).

## B-2) 国際会議のプロシーディングス

S. HASEGAWA, T. MIYAMAE, K. YAKUSHI, H. INOKUCHI, K. SEKI, and N. UENO, "Comparison between calculated and measured photoemission spectra of C<sub>60</sub> thin films," J. Electr. Spectrosc. and Relat. Phen. 88-91, 891-895 (1998).

K. K. OKUDAIRA, S. HASEGAWA, E. MORIKAWA, V. SAILE, K. SEKI, Y. HARADA and N. UENO, "Photodegradation of poly(methylmethacrylate) measured by ARUPS," J. Electr. Spectrosc. and Relat. Phen. 88-91, 913-917 (1998).

D. YOSHIMURA, H. ISHII, Y. OUCHI, E. ITO, T. MIYAMAE, S. HASEGAWA, N. UENO and K. SEKI, "Angle resolved UPS study and simulation with IAC approximation for oriented monolayer of tetratetracontane n C<sub>44</sub>H<sub>99</sub>) on Cu(100)," J. Electr. Spectrosc. and Relat. Phen. 88-91, 875-879 (1998).

#### C) 研究活動の課題と展望

センサーや有機分子素子等, 有機薄膜材料の物性を研究する上で, 薄膜最表面の分子や官能基の構造に関する詳 細な情報は不可欠である。その際 ARUPSによる分子配向の低損傷かつ定量的測定は非常に有用な知見を与える。 有機薄膜光電子強度計算プログラム(IAC31)は、光電子の一回散乱近似のもとでARUPSを定量的にシミュレー ションでき,他大学の研究者にも利用されている。IAC31は実用上十分な精度をもつ道具としての利用を目的と したプログラムであり、測定したARUPSスペクトルと計算スペクトルを実際に比較検討し、計算の実効性やその 範囲を明らかにしながらプログラムの改良を継続する。また,現在は計算対象を有機分子に限っているが,他の 化合物にも適用できるよう展開する。

シンクロトロン放射光を用いた構造生物学の発展は目覚しく, X 線結晶構造解析やX-ray Absorption Fine Structure 等によって、多くの生体関連分子の構造が明らかになっている。しかし、その電子状態を直接測定する研究はほ とんど行われていない。生体関連分子の電子状態を光電子スペクトルによって直接測定しようとする場合,光電 子放出に伴う表面チャージアップを防ぐための試料の薄膜化が困難であること,生体関連分子の構造と機能に大 きく係わる水の存在が超高真空チャンバー内でのスペクトル測定に不向きなこと等,困難な問題がある。それら に対処した新しい試料調製技術を確立することによって,変性のない状態での生体関連分子の光電子スペクトル 測定を行う。また、この手法は一般的な超高真空チャンバーで汎用的に使用できるものであり、光電子スペクト ルだけでなくいろいろなスペクトロスコピーによる生体関連分子研究を可能にする。

# 3-6 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ヘム酵素および鉄ポルフィリン錯体による基質酸化の分子機構
- b) へ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) 人工ペルオキシゲナーゼの分子設計
- d) 非ヘム酸化酵素のモデル系構築および不安定酸化活性種のキャラクタリゼーション
- e) 水溶液中での金属 ハイドライド錯体の合成と基質還元反応の開拓

- a) ペルオキシダーゼやシトクロームP450などの酸化反応を行うへム酵素は,スルフィド類の酸化反応を高効率で触 媒する。本研究では,低温ストップトフロー法を用いることで反応素過程の直接観測を行い,1)上記反応過程が 鉄に配位したオキソ酸素の基質への直接添加の場合と,2)初期過程に一電子移動が含まれる場合の二種が存在す ることを初めて明らかにした。
- 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、最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。それに対し、ミオグロビンをヘム酸化酵素のモデル蛋白質としてとらえ、反応 部位を構成するアミノ酸の部位特異的変換によって,酵素類似反応場を蛋白内に導入することに成功した。さら に,反応部位の制御が部位特異的なミューテーションによって可能なことを示した。
- c) ヘムタンパク質は,補欠分子属としてヘム(鉄ポルフィリン錯体)を有する蛋白の総称であるが,実に多様な機 能を分担しあっている。本研究では,ペルオキシダーゼの活性中心の構造と機能に着目し,ミオグロビンをヘム タンパク質全般のビルディングブロックとして利用して、ペルオキシダーゼ活性の発現に必須と考えられるヒス チジンを適切な位置に導入することで、高原子価状態(O=Fe(IV)ポルフィリン カチオンラジカル 通常compound Iと呼ばれる)の初めての観測に成功した。得られた高原子価状態ミオグロビンは,P450様の一酸素添加反応を 行い,詳細な反応機構を現在検討中である。
- d) ヘム酵素と同じ機能をヘム以外の鉄や銅錯体を利用して行う酵素を非ヘム酵素と呼ぶ。本研究では,非ヘム酵素 の活性中心モデルの構築を行い,酸素分子活性化機構解明を目的とした研究を行っている。現在,鉄(単核およ び複核 ) - パーオキサイド付加体の合成とキャラクタリゼーションに成功し ,その反応性の検討を行っている。特 に「パーオキサイド付加体が基質酸化能をどの程度有しているのか」,さらに「酸素・酸素結合の解裂によって 高原子価状態を作り出すことが可能か」など酵素系では詳しい検討ができない点を明らかとしたい。
- e) 水溶液中で種々の化学反応を触媒的に進行させることは ,環境調和型のプロセスとして重要と考えられる。本研 究では,水溶液中で安定な金属-ハイドライド錯体の合成と,有機化合物のハイドライド還元への展開を目指し

## B-1) 学術論文

S. OZAKI, Y. INADA and Y. WATANABE, "Characterization of Polyethylene Glycolated Horseradish Peroxidase in Organic Solvents: Generation and Stablization of Transient Catalytic Intermediates at Low Temperature," *J. Am. Chem. Soc.* 120, 8020-8025 (1998).

**Y. GOTO, Y. WATANABE, S. FUKUZUMI, J. P. JONES and J. P. DINNOCENZO**, "The Mechanisms of *N*-Demethylation Catalyzed by Heme Enzymes: Direct Observation of *N*-Demethylation by Compound I of Horseradish Peroxidase and Its Model Complex," *J. Am. Chem. Soc.* **120**, 10762-10763 (1998).

Y. GOTO, S. WADA, I. MORISHIMA and Y.WATANABE, "Reactivity of Peroxoiron(III) Porphyrin Complexes: Models for Deformylation Reactions Catalyzed by Cytochrome P-450," *J. Inorg. Biochem.* **69**, 241-2476 (1998).

S. OGO, S. WADA, Y. WATANABE, M. IWASE, A. WADA, M. HARATA, K. JITSUKAWA, H. MASUDA and H. EINAGA, "Synthesis, Structure, and Spectroscopic Properties of [Fe<sup>III</sup>(TNPA)(OH)(PhCOO)]ClO<sub>4</sub>: A Model Complex for an Active Forms of Soybean Lipoxygenase-1," *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 37, 2102-2104 (1998).

**T. MURAKAMI, I. MORISHIMA, T. MATSUI, S. OZAKI and Y. WATANABE**, "Effects of the Arrangement of a Distal Histidine on Regioselectivity of the Coupled Oxidation of Sperm Whale Myoglobin Mutants," *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* 773-774 (1998).

**T. MURAKAMI, Y. WATANABE and I. MORISHIMA**, "A Novel *Meso*-Oxygenation of an Iron Porphyrin Complex Relataed to *Meso*-Hydroxylation Catalyzed by Heme Oxygenase," *Chem. Lett.* 27-28 (1998).

T. MURAKAMI, K. YAMAGUCHI, Y. WATANABE, and I. MORISHIMA, "A New Active Intermediate in Monooxygenations Catalyzed by Iron Porphyrin Complexes," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 71, 1343-1353 (1998).

S. OGO, S. NAKAMURA, H. CHEN, K. ISOBE, Y. WATANABE and R. H. FISH, "A New, Aqueous <sup>1</sup>H NMR Shift Reagent Based on Host-Guest Molecular Recognition Principles for organic Compound Structural Analysis: Non-Covalent  $\pi$ - $\pi$  and Hydrophobic Interactions Using a Supramolecular Host, [Cp\*Rh(2'-deoxyadenosine)]<sub>3</sub>(OTf)<sub>3</sub>," *J. Org. Chem.* **63**, 7151-7156 (1998).

# B-3) 総説、著書

渡辺芳人,「人工ペルオキシゲナーゼの分子設計」,ポルフィリン7,33-38 (1998).

# B-4) 招待講演

渡辺芳人、「ミオグロビンの改変によるペルオキシゲナーゼの構築」、分子科学研究所研究会「複雑系複合生体金属場の構造・機能とアプローチの新展開」、岡崎、1998年1月.

渡辺芳人、「部位特異的アミノ酸置換による人工へムの構築」、第14回機能性ホスト・ゲスト化学研究会、大阪、1998年3月.

渡辺芳人,「人工ペルオキシゲナーゼの分子設計」,第 25 回ポルフィリンシンポジウム,東京,1998 年 5 月.渡辺芳人,「ミオグロビンをビルディングブロックとする人工ペルオキシゲナーゼの分子設計」,日本化学会第75秋季年会,松山,1998 年 9 月.

渡辺芳人、「生体反応場の有効利用 - ヘムタンパク質の場合 - 」,第 48 回錯体化学討論会,高知,1998 年 9 月. 渡辺芳人,「人工ペルオキシゲナーゼの分子設計」, 98-1 バイオ・高分子研究会, 三重, 1998 年 10 月. 渡辺芳人,「酸化反応を触媒するヘム酵素の分子設計・分子論的アプローチ」, 触媒学会高難度選択酸化反応研究 会,東京,1998年11月.

# B-6) 学会および社会的活動

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-).

日本化学会生体機能関連化学部会幹事(1997-).

# B-7) 他大学での講義

富山大学工学部,1998年1月.

新潟大学理学部自然環境科学科,1998年2月.

## C) 研究活動の課題と展望

酸化反応を触媒するへム酵素の反応機構に関する基礎研究から、活性中心を構成するアミノ酸の役割を分子レベ ルで明らかとしてきた。こうした研究成果に基づいて,人工的なヘム酵素の構築を現在目指している。具体的に は,ミオグロビンを人工酵素構築のためのビルディングブロックとして利用し,酵素活性発現に必要なアミノ酸 を適切に配置することによって,目的とするヘム酵素を合成する試みを行っている。現時点では,高い光学選択 制を有するペルオキシゲナーゼの構築に成功しているが,反応の多様性,非天然型補欠分子族導入による生体系 にはない化学反応を触媒する人工酵素への展開を現在の目標としている。一昨年から、非ヘム酸化酵素の分子レ ベルでの機構解明のためのモデル系による研究を開始したが,ヘムと非ヘム酵素の本質的な差異と生体における 酸素活性化戦略の総合的な解明を行いたい。

# 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 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
- c) 有機ラジカル結晶の磁気構造解明研究

# A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 高スピン 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,三次元磁性体については磁気異方性および磁気構造に関する詳細な知見を得ることができた。また不斉なラジカルを配位子として用いた場合,不斉な分子磁石の構築することができる。不斉分子磁性体の磁気光学効果についても研究を進める。
- 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。またフェニル骨格に置換基を導入することによりラジカル置換基との角度を変化させ,スピン間相互作用の大きさとスピンの非局在化との関係解明を進めている。
- c) 有機ラジカル結晶の磁気構造解明研究: 低次元ハイゼンベルグ反強磁性体, いわゆる量子スピン系のエキゾチックな磁性解明を目指し, 理想的なハイゼンベルグスピンである有機ラジカルを構成単位とし, 強磁性および反強 磁性相互作用を一次元あるいは二次元的に配置した種々のスピン系の構築および磁性測定を行っている。 S = 1を 形成するビラジカルのラジカル対の一方のみを反強磁性的に結合させた半梯子格子など新しい格子系を作成している。

## B-1) 学術論文

A. S. MARKOSYAN, T. HAYAMIZU, H. IWAMURA and K. INOUE, "Study of Magnetization and Magnetic Anisotropy of the Organometallic Complex Between the Trinitroxide Radical and Bis(Hexafluoroacetylacetonato)Manganese(II)," *J. Phys.*, *Condens Matter* 10, 2323 (1998).

Y. HOSOKOSHI, K. TAKIZAWA, H. NAKANO, T. GOTO, M. TAKAHASHI and K. INOUE, "Construction of spin-1/2 Heisenberg ferromagnetic-antiferromagnetic alternating chains with various exchange couplings," *J. Mag Mag. Mater.* 177-181, 634 (1998).

Y. HOSOKOSHI, M. TAKAHASHI, T. GOTO and K. INOUE, "Magnetic Properties of Pure Galvinoxyl under Pressure-Suppression of the Structual Change and Observation of the Magnetic Ordering," Rev. High Pressure Sci. Tech. 7, 620 (1998). Y. HOSOKOSHI, M. MITO, M. TAMURA, K, TAKEDA, M. KINOSHITA and K. INOUE, "Magnetic properties of spin-1/2 Heisenberg honeycomb lattice with ferromagnetic and antiferromagnetic interactions," J. Mag Mag. Mater. 177-181, 713 (1998).

H. IWAMURA, K. INOUE and N. KOGA, "Tacticity vs. Dimension of the Extended Structures in the Crystals of Heterospin Magnets Made of Transition Metal Complexes with Poly(aminoxyl) Radical," New J. Chem. 22, 201 (1998).

K. INOUE, F. IWAHORI and H. IWAMURA, "Magnetic Properties of Polymeric Chain Complex made by 5-Bromo-1,3-Bis(N-tert-butyl-N-oxy-amino)benzene and Cu(II)(hfac)2," Chem. Lett. 737 (1998).

S. HAYAMI, K. INOUE, S. OSAKI and Y. MAEDA, "Synthesis and Magnetic Properties of Binuclear Iron(III) Complex Containing Photoisomerization Ligand," Chem. Lett. 937 (1998).

## B-4) 招待講演

井上克也,「有機・無機ハイブリッド分子磁性体の構築と磁性」,物性研研究会,東京,1988年3月.

## B-5) 受賞、表彰

井上克也, 井上研究奨励賞(1995). 井上克也, 分子科学研究奨励森野基金(1997).

# 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委員(1997-).

## 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。同時に,配位子となる高スピ ン有機ラジカル単体についても詳細な検討を行う。量子スピン系としての性質を明らかにする基礎物性研究は 遷 移金属錯体におけるラジカルを介したスピン間磁気相互作用伝達機構の解明にもつながり,磁気転移温度の高温 化に一つの指針を与えるだろう。また,外場応答性分子として加圧下の磁性測定も進行中である。

# 分子クラスター研究部門(流動研究部門)

# 三 好 永 作(教授)\*)

A-1) 専門領域:理論化学

# A-2) 研究課題:

- a) 高精度のモデル内殻ポテンシャルの開発
- b) ファンデルワールス分子のポテンシャル曲面
- c) 芳香族分子の2量体カチオンの電子状態
- d) 液体水銀に対する分子動力学計算

- a) 全電子を対象とする ab initio分子軌道法(MO)計算では内殻電子をもあらわに考慮して計算を行なうが、しかし、これらの電子は化学的に不活性で普通の化学反応中にはほとんど変化しない。これらの内殻電子の取り扱いを簡単化するために有効内殻ポテンシャル法があるが、われわれのモデル内殻ポテンシャル法もその1つである。すべての元素に対して高精度のモデル内殻ポテンシャルを酒井グループ(九州大学)とともに開発している。多くの有効内殻ポテンシャル法では、取り扱う原子価軌道は本来持つべき節(node)を持たず、このことが電子反発積分を大きめに見積るなどの欠点の原因となる。しかし、われわれの方法では、内殻軌道空間に対するシフト演算子を用いることで原子価軌道は節を持つことができる。そのため高次の電子相関エネルギーまでを必要とするファンデルワールス分子のポテンシャル曲面の計算などで高精度の結果を得るものと期待される。今年度は、内殻に(n-1)d電子をもつ典型元素に対する高精度のモデルポテンシャル(dsp-MCP)を開発するとともに(J. Mol. Struct. (Theochem) 451, 73-79 (1998))、ランタニド元素に対してもモデルポテンシャル(sp(d)fs-MCP)を開発した(J. Mol. Struct. (Theochem) 451, 143-150 (1998))。
- b) ArI2, HgN2, ArHCN, ArHC などの基底状態や励起状態のポテンシャル曲面を精度良く求めることは,現在でも難しいことの一つである。一つには重原子を含む系では相対論効果を取り入れなければならないし,また,電子相関を十分に取り込むために一電子軌道空間や全電子関数空間の取り方に気を配る必要があるからである。相対論的なモデル内殻ポテンシャルを使い,電子相関を記述するするために適した軌道を用いて多参照配置からの多電子励起の効果を含めた計算を行なうことで,これらのファンデルワールス分子のポテンシャル曲面を計算している。Ar-I2についてのポテンシャル曲面が以上のような計算で精度良く求めることが出来ることを示した(J. Mol. Struct. (Theochem) in press )。なお,ArHCN については,分子クラスター部門田中グループが精度の良い実験を行なっており,比較しながら研究を進めている。また,木村克美先生のグループがアントラセンとアルゴンでつくる様々なファンデルワールス分子のイオン化エネルギーの正確な測定値があり,これらについての計算も計画している。
- c) 西グループはベンゼン 2 量体カチオンの安定構造に関して精力的な実験的研究を行ない,サンドウィッチずれ構造であることを示唆し,観測された p-p\* 状態の分裂はこの対称性の破れに起因すると考えた。しかしその理論的裏付けがなかった。われわれは,ベンゼン 2 量体カチオンの様々な構造に対して *ab initio* 計算を行ない,サンドウィッチずれ構造が最も安定な構造であることを示した(*Chem. Phys. Lett.* 275, 404 (1997))。ベンゼン 2 量体カ

チオンの他にも, 西グループは, フェノール2量体カチオンやベンゼンとフェノールの混合2量体カチオンさら にはベンゼンとナフタレンの混合2量体カチオンなどの振動状態や電子状態に対する実験を行なっており,これ らの2量体カチオンの最安定構造と低い励起状態に対する ab initio 計算を行ない実験で得られたデータと比較し ながら研究を行なっている。

d) ここ数年来,第一原理からのアプローチに基づき,液体水銀の動的性質や熱力学的性質に対する研究を行なって きている。まず, 二体ポテンシャルを高精度の分子軌道法から求め, 二体加法近似のもとで分子動力学計算を行 なった。粘性率の実験データから決められたレナードジョーンズ型ポテンシャルを使った分子動力学計算では再 現出来ない液体金属特有の集団減衰運動を,この計算で再現することを示した(Phys. Rev. B 57, 914-918 (1998))。 また,同様の計算で,金属-非金属転移を含む密度領域でX線散乱実験から得られている構造因子や二体分布関 数をよく説明する結果を得,さらに,実測の熱力学的物理量(熱圧力定数や内部圧力)の体積依存性を定性的に 説明することが出来た(Phys. Rev. B 59, in press)。しかし,高密度の金属領域で,定量性にはこれらの熱力学的 物理量を過小評価している。この結果は,三体力以上の多体力がこの領域で重要になっていることを示しており, 次のステップとして, 三体力を考慮した動力学シミュレーションを計画している。

#### B-1) 学術論文

T SUMI, E. MIYOSHI, Y. SAKAI and O. MATSUOKA, "Molecular Orbital and Molecular Dynamics Study of Mercury," Phys. Rev. B 57, 914-918 (1998).

**N. HONJOU and E. MIYOSHI**, "Ab Initio Study on the Electronic Structure of the  $3^{2}\Sigma_{u}^{+}$ ,  $3^{2}\Sigma_{g}^{+}$ , and  $4^{2}\Sigma_{g}^{+}$  States of  $N_{2}^{+}$ ," J. Mol. Struct. (Theochem) 451, 41-49 (1998).

E. MIYOSHI, Y. SAKAI, K. TANAKA and M. MASAMURA, "Relativistic dsp-Model Core Potentials for Main Group Elements in the Fourth, Fifth, and Sixth-Row and their Applications," J. Mol. Struct. (Theochem) 451, 73-79 (1998).

E. MIYOSHI, Y. MIYAKE, Y. SAKAI and S. KATSUKI, "Theoretical study on the electronic structures of various F centers in MgO crystals," J. Mol. Struct. (Theochem) 451, 81-88 (1998).

Y. SAKAI, E. MIYOSHI and H. TATEWAKI, "Model Core Potentials for the Lanthanides," J. Mol. Struct. (Theochem) 451, 143-150 (1998).

S. A. DECKER, M. KLOBUKOWSKI, Y. SAKAI and E. MIYOSHI, "Calibration and Benchmarking of Model Core Potentials: Applications to Systems containing Main-Group Elements," J. Mol. Struct. (Theochem) 451, 215-226 (1998).

## B-6) 学会および社会的活動

# 学会の組織委員

Fukuoka Symposium on Theoretical Chemistry "From Atoms to Clusters," Kyushu University, 3-5 November 1997.

Symposium on Theory of Surface Reactions, Okazaki Conference Center, 9-10 December 1998.

第9回理論化学シンポジウム「21世紀の化学物理への展望」,瀬戸市,1998年8月2-5日.

# B-7) 他大学での講義、客員

九州大学,「総合科目核を考える」,1998年11月.

# C)研究活動の課題と展望

基本的な課題は,モデル内殻ポテンシャルの開発とその応用であるが,A-3(研究活動の概略と主な成果)で示し たように各研究テーマ a) ~ d)に対する今後の研究計画を精力的に進める。a)については,すべての元素に対して 非相対論的モデル内殻ポテンシャルと相対論的モデル内殻ポテンシャルをいくつかのレベルで作成し,それらの 有用性を示していく。また,d)の液体水銀の研究では,三体力をAxilrod-Teller型の分散力で表現するのがよくな い可能性が高いので,力を求める計算だけで膨大な計算時間を要するが,三体力も ab initio 計算から求めること で、それらを使った分子動力学計算が必要であると予想している。これら以外の応用研究として、表面電子状態 や固体中の不純物準位さらには金属錯体の電子状態に対する理論研究にも取り組んでいく予定である。

\* )1998年4月1日着任

# 田 中 桂 一(助教授)<sup>\*)</sup>

A-1) 専門領域:分子分光学、クラスター化学、物理化学

## A-2) 研究課題:

- a) 分子クラスターの構造と物性の分光学的研究
- b) 短寿命不安定分子の生成と電子,幾何構造の分光学的研究
- c) 分子内大振幅振動,プロトン移動運動の分光学的研究
- d) 芳香族有機分子クラスターの超音速ジェット高分解能赤外分光法の開発

- a) サブミリ波(3-30 cm-1) 超音速分子線分光装置を製作し,アルゴンシアン化水素(ArHCN) クラスターの分子 間 (vdW) 変角振動遷移を観測した。ArHCN および ArDCN クラスターの vdW 変角振動遷移の基本音 (j = 1 - 0) および倍音 (j=2-1) の多数の振動回転遷移を観測した。この解析により,ArHCN クラスターは基底状態 (j= 0) で直線型,変角振動の第一励起状態 (j=1) ではT型,第二励起状態 (j=2) ではHCN が自由回転に近い構 造を持ち、変角振動の励起にともない会合状態を劇的に変化する事、また極めて大きなクラスター内大振幅振動 を持つことが分かった。これはArHCNクラスターが結合エネルギーが小さく,かつ特異な二極ポテンシャルを持 ち,直線型とT型のエネルギーが極めて近いためである。
- b) 鉄カルボニル  $Fe(CO)_5$  の紫外光解離により超音速ジェット中に生成する鉄カルボニルラジカル  $Fe(CO)_n$  (n=1-3)をサブミリ波分光法および赤外ダイオードレーザー分光法により検出し,それらの電子状態および分子構造を 解明した。たとえば、FeCO ラジカルの電子基底状態の対称性は3 であるが、近接する多くの電子状態とのス ピン・軌道相互作用により,大きなスピン・スピンおよびスピン・回転相互作用定数を持つ事が分かった。また 変角振動の第一励起状態は,近接する<sup>3</sup> 電子状態との振電相互作用により,電子状態は<sup>3</sup>であるが実効的な 軌道角運動量を持ち,さらに大きな 型二重項を示す事が分かった。これらは,近接する電子準位を多く持つ遷 移金属ラジカルに特有な性質である。
- c) マロンアルデヒトの水酸基のプロトンは分子内の2つの酸素原子の間を容易に移動する。このプロトンの運動は 2極小ポテンシャルにより支配され,基底状態はトンネル効果により2重に分裂している。トンネリング二重項 間は、電気双極子遷移が可能であり、この遷移の観測は分子内プロトン移動の機構を解明する上で極めて重要で ある。マロンアルデヒトのトンネリング二重項間遷移をサブミリ波分光法により観測し分裂幅を決定した。同様 に、トロポロンのトンネリング二重項間遷移を超音速ジェットフーリエ変換マイクロ波分光法により観測し分裂 幅を決定した。これらの解析より、マロンアルデヒトおよびトロポロン分子の分子内プロトン移動のポテンシャ ルを解明した。
- d) 最近の紫外赤外二重共鳴分光の発展により,芳香族分子クラスターの会合状態が解明されつつある。しかしこの 方法は本質的に振動分光法であり,会合状態をその分子内運動まで含めて解明するには充分な分解能を持ってい ない。この解明には回転構造が充分に分解された高感度な分光法の開発が不可欠であり、カラーセンター赤外レー ザーを用いた分子線分光法の開発を進めている。超音速ジェット分光法により,ジェット冷却されたベンゼン,フ ロロベンゼン,ピラジン,およびチオフェン分子の3μ帯の高分解能赤外スペクトルを観測した。基本音の他に,

フェルミ相互作用により強度を獲得した多数の結合音を観測し,その出現の機構を解明した。これらの結果は時 間領域での分子内振動再分布(IVR)に関する重要な情報を与える。

## B-1) 学術論文

K. TANAKA, K. SAKAGUCHI and T. TANAKA, "Time-resolved Infrared Diode Laser Spectroscopy of the v1 Band of the Iron Carbonyl Radical (FeCO) Produced by the Ultraviolet Photolysis of Fe(CO)<sub>5</sub>," J. Chem. Phys. 106, 2118-2128 (1997).

K. TANAKA, M. SHIRASAKA and T. TANAKA, "Millimeter-wave Spectroscopy of the Iron Carbonyl Radical (FeCO)," J. Chem. Phys. 106, 6820-6824 (1997).

K. TANAKA, Y. SUMIYOSHI, Y. OHSHIMA, Y. ENDO and K. KAWAGUCHI, "Pulsed Discharge Nozzle Fourier Transform Microwave Spectroscopy of the Propargyl Radical (H<sub>2</sub>CCCH)," J. Chem. Phys. 107, 2728-2733 (1997).

T. IMAJO, S. INUI, K. TANAKA and T. TANAKA, "Interferogram Amplitude Modulation Technique for Selective Detection of Transient Species with a Continuous-scan Fourier-transform Spectrometer," Chem. Phys. Lett. 274, 99-105 (1997).

T. TANAKA, M. TAMURA and K. TANAKA, "Infrared Diode Laser Spectroscopy of the SiF Radical. Analysis of Hot Band up to v = 9 - 8," *J. Mol. Spectrosc.* **413/414**, 153-166 (1997).

M. SHIRASAKA and K. TANAKA, "Millimeter-wave Spectra of ArDCN Observed with Pulsed-Jet Expansion Technique," J. Mol. Spectrosc. 185, 189-190 (1997).

K. TANAKA, Y. TACHIKAWA and T. TANAKA, "Time-resolved Infrared Diode Laser Spectroscopy of Jet-Cooled FeCO and Fe(CO)<sub>2</sub> Produced by the Ultraviolet Photolysis of Fe(CO)<sub>5</sub>," Chem. Phys. Letters 281, 285-291 (1997).

S. CIVIS, Z. ZELINGER and K. TANAKA, "The Infrared Diode Laser Spectroscopy of the  $v_2 + v_5 - v_2$  Hot Band of Acetylene," J. Mol. Spectrosc. 187, 82-88 (1998).

#### B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. TANAKA, I. OGAWA and M. SHIRASAKA, "Direct Absorption Observation of the van der Waals Bending Band of ArDCN by Millimeter-wave Spectroscopy Combined with Pulsed-Jet Expansion Technique," The 52nd International Symposium on Molecular Spectroscopy WI05, 178 (1997).

K. TANAKA, M. SHIRASAKA and T. TANAKA, "Millimeter-wave Spectroscopy of the Iron Carbonyl Radical (FeCO)," The 52nd International Symposium on Molecular Spectroscopy MH03, 90 (1997).

**K.** TANAKA and Y. TACHIKAWA, "Time-resolved Diode Laser Spectroscopy of jet-cooled (FeCO) $_x$  (x = 1, 2) Radicals Produced by the UV Laser Photolysis," The 52nd International Symposium on Molecular Spectroscopy RH05, 222 (1997).

K. HARADA, M. ISHIGURO, M. SHIRASAKA, K. TANAKA and T. TANAKA, "Color-center Laser Spectroscopy of the v<sub>1</sub> Band of DCN-HCN Generated in a Pulsed Supersonic Jet Expansion," The 52nd International Symposium on Molecular Spectroscopy **TI10**, 153 (1997).

M. ISHIGURO, T. IMAJO, K. HARADA, K. TANAKA and T. TANAKA, "Discharge Modulation Technique for Detection of Transient Species Produced in Pulsed Supersonic Jet by Color-center Laser Spectroscopy," The 52nd International Symposium on Molecular Spectroscopy RH04, 221 (1997).

## B-3) 総説、著書

原田賢介、田中桂一,「イオンクラスターの振動前期解離高分解能赤外分光」, 分光研究 46, 209-210 (1997).

## B-4) 招待講演

K. TANAKA, "Direct Absorption of the van der Waals Bending Band of ArDCN by Millimeter-wave Spectroscopy Combined with Pulsed-Jet Expansion Technique," NAIR Workshop '97 on Cluster Science, Tsukuba, March 1997.

## B-6) 学会および社会的活動

## 学協会役員、委員

国際分子分光学会評議員(International Symposium on Molecular Spectroscopy, International Advisory Committee) 学会誌編集委員

日本分光学会会誌分光研究編集委員

#### その他

九州大学電離気体実験施設運営委員会委員 九州大学ベンチャービジネスラボラトリー運営委員会委員

#### B-7) 他大学での講義、客員

九州大学理学部化学科助教授(併任)1998年4月-1999年3月.

九州大学,「分子構造論」,1998年4-10月.

九州大学,「量子化学特論」,1998年4月-1999年3月.

九州大学,「量子化学講究」,1998年4月-1999年3月.

# C) 研究活動の課題と展望

- a) 測定領域を現在の 440 GHz (15 cm-1) から後進行波管 (BWO) を用いて 1000 GHz (33 cm-1) の THz 領域まで拡 大する。これにより、水素結合を含む分子クラスターの分子間振動遷移へと測定対象を拡大して、水ベンゼン等 の興味あるクラスターを測定しその会合状態を解明する。また紫外光解離および低速電子線衝撃法と超音速ジェッ トノズルを組み合わせた装置を開発して,不対電子や電荷を持ったラジカルやイオンクラスターを生成し,不対 電子や電荷がクラスター内にどの様に再配置されるかを解明する。
- b) レーザー誘起蛍光法とサブミリ波分光法を組み合わせた二重共鳴分光法を開発して,ラジカルクラスターやイオ ンクラスターの分子間振動遷移を蛍光のデップとして観測する。この方法により検出感度の向上を図る。
- c) 連続分子線赤外レーザー励起熱感知分光装置を開発して , 芳香族分子クラスターの高分解能高感度分光を行う。こ れにより複雑な芳香族分子クラスターの会合状態をクラスター内の大振幅振動を含めて解明する。

# \*)1998年4月1日着任

# 長門研吉(助教授)\*)

A-1) 専門領域:大気化学、大気電気学

## A-2) 研究課題:

- a) 大気イオンクラスターの移動度分布測定
- b) 対流圏大気中におけるイオン 分子反応
- c) イオン移動度/質量分析システムの開発

#### A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ドリフトチューブ型イオン移動度計を用いて地上付近の大気が電離されて生成する正・負イオンクラスターの移動度分布を測定しその微細構造を観察した。正イオンの移動度分布は負イオンに較べ範囲が広く,少なくとも10本のピークから構成されることが明らかになった。一方負イオンは移動度分布には6本のピークが存在しこれらはいずれも比較的高移動度の領域に現れ,正イオンに較べて負イオンクラスターはサイズが小さいことを示唆している。正イオンの移動度分布は大気中における反応時間とともに移動度の小さい方にシフトしていき,電離後数秒で移動度が1-1.25 cm²V⁻¹s⁻¹を中心とした分布を形成し,その質量数は400 amu 以上と推定された。
- b) 対流圏大気中におけるイオン 分子反応の様子を観測するために ,大気を電離して生成した正イオンの移動度スペクトルと質量スペクトルの野外同時測定を行った。その結果 ,移動度の小さな正イオン (<1.5 cm²V⁻¹s⁻¹)の割合は気温とともに増加する傾向があることを見出し ,大気中で形成される大きな正イオンの親成分の発生源が土壌あるいは植物であることの間接的な証拠を得た。同時に測定した正イオンの質量スペクトルでも ,質量数 200-450 amu のイオンの割合が気温とよい相関を示すことが明らかになり ,移動度スペクトルに現れた傾向と一致した。以上の観測結果より ,大気中の大きな正イオンクラスターの形成には BVOC (Biogenic Volatile Organic Compound )が関与していると考えられ ,BVOCの大気中における反応の研究や濃度の測定に大気イオンの測定が利用できる可能性を見出した。(*J. Geophys. Res.* in press )
- c) 大気中のイオンクラスターの性質を明らかにするためには、イオンクラスターの大きさ、質量および化学組成に関する情報が重要である。これらの情報を同時に得るためにドリフトチュープ型イオン移動度計と四重極型質量分析計を組み合わせたイオン移動度/質量分析システムの開発を行った。

## B-1) 学術論文

**K. NAGATO and T. OGAWA**, "Evolution of Tropospheric Ions Observed by an Ion Mobility Spectrometer with a Drift Tube," *J. Geophys. Res.* **103**, 13917-13925 (1998).

## C) 研究活動の課題と展望

大気中のイオンクラスターは大気の電気的性質を決める重要な要素であるだけでなく,エアロゾルの生成に関与して地球の温暖化へ影響を与えている可能性がある。大気中におけるイオンクラスターの生成メカニズムの解明を目指した研究を引き続き進め、最終的にはエアロゾル粒子の生成(イオン誘発核生成)の領域まで拡張したい。また最近新たに可能性が指摘された大気中におけるイオン再結合によるエアロゾル粒子の生成メカニズムについて

も,ドリフトチューブ型のイオン再結合チャンバーと凝縮核型微粒子測定機を組み合わせた実験装置を新たに開 発し,検証を試みる予定である。

大気中のイオン - 分子反応を利用した大気微量成分の測定は近年ますます活発になりつつある。我々がこれまで に蓄積したドリフトチューブによるイオン移動度スペクトル測定のノウハウを応用して,コンパクトで可搬性が 高く、高感度で多成分をほぼリアルタイムで「その場」測定できる大気微量成分測定装置の開発を目指す。

\*)1998年4月1日着任

# 3-7 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(1) 偏光吸収
- b) 軟 X 線分光による内殻電子の光物性研究(2) 共鳴光電子
- c) 内殻励起分子の振動分光と解離ダイナミクスの研究

- a) 軟 X線分光による内殻電子の光物性研究(1)偏光吸収: 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,他の放射光施設では分光器や光電子測定装置の制約で質の高い測定がほとんど行われていないエネルギー領域の光(ニッケルや銅などの2p 内殻を励起できる光)を使って固体物性の研究を展開している。これまで,中心金属としてニッケルを含む分子錯体の単結晶試料に対して,放射光の直線偏光性を利用した偏光吸収スペクトルを測定し,金属2p 内殻から配位子 $\pi^*$ 空軌道への MLCT帯が強く観測されることを見いだした。 $\pi$ -MLCT帯の解析から, $\pi$ 逆供与の大きさが半定量的に評価でき,また,異なる対称性の $\pi$ 逆供与を分離して議論できることを示した。さらに,高酸化状態でのホールの分布(金属上対配位子上)を2p-3d 偏光吸収の強度から評価できることも示した。現在,硬X線による偏光1s 内殻吸収についても研究を進めている。
- b) 軟 X 線分光による内殻電子の光物性研究(2)共鳴光電子: 内殻吸収が起きる光エネルギーでの共鳴光電子放出過程(無放射遷移の2次光学過程)を詳細に研究している。内殻電子領域では非共鳴条件では観測されない禁制の電子励起状態が共鳴吸収状態に依存して離散的に次々と観測された。放出電子のエネルギーは 励起光エネルギーを増加させると減少し 最終的に元素固有のオージェ電子のエネルギーに収束していくという奇妙な挙動を示す。その勾配は分子間相互作用の強さに依存し,孤立性が高いと勾配は-1で,相互作用が強く金属的になると勾配はゼロに近づくことがわかった。現在,このような無放射遷移の2次光学過程に加えて,放射遷移の2次光学過程であるX線共鳴ラマン遷移の研究を始めている。
- c) 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 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,脱励起後にクーロン爆発的に放出される解離イオンの角度の偏光方向に対する異方性・等方性,イオン間の角度相関,運動エネルギー依存性などから内殻励起状態において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ことを解明した。

## B-1) 学術論文

- J. ADACHI, Y. TAKATA, N. KOSUGI, E. SHIGEMASA, A. YAGISHITA and Y. KITAJIMA, "Kinetic energy dependence of anisotropic yields of ionic fragmentations following S 1s excitations of SO<sub>2</sub>," Chem. Phys. Lett. 294, 559 (1998).
- E. SHIGEMASA, J. ADACHI, K. SOEJIMA, N. WATANABE, A. YAGISHITA and N. A. CHEREPKOV, "Direct determination of partial wave contributions in the σ\* shape resonance of CO molecules," Phys. Rev. Lett. 80, 1622 (1998).
- T. HATSUI, Y. TAKATA and N. KOSUGI, "Strong metal-to-ligand charge transfer bands in Ni 2p photoabsorption of K<sub>2</sub>Ni(CN)<sub>4</sub>·H<sub>2</sub>O," Chem. Phys. Lett. **284**, 320 (1998).
- Y. TAKATA, M. NAKAMURA and N. KOSUGI, "Resonant behavior of satellite photoelectrons in the Ni 3p and 3s region at the Ni 2p excitation of K2Ni(CN)4," Chem. Phys. Lett. 287, 35 (1998).
- Y. TAKATA, T. HATSUI and N. KOSUGI, "Resonant behavior in Ni 3d, 3p and 3s photoelectron spectra at the Ni 2p excitation of planar molecular complex, nickel dimethylglyoxime," J. Electron Spectrosc. 93, 109 (1998).
- Y. TAKATA, T. HATSUI and N. KOSUGI, "Ni 2p resonant photoelectron spectra of some planar nickel complexes," J. Electron Spectrosc. 88-91, 235 (1998).
- T. HATSUI, Y. TAKATA, N. KOSUGI, K. YAMAMOTO, T. YOKOYAMA and T. OHTA, "Ni 2p excitation spectra of some planar Ni complexes," J. Electron Spectrosc. 88-91, 405 (1998).
- N. KOSUGI, "Molecular inner-shell spectroscopy of planar Ni complexes," J. Electron Spectrosc. 92, 151 (1998).
- S. HOSOKAWA, Y. HARI, T. KOUCHI, I. ONO, H. SATO, M. TANIGUCHI, A. HIRAYA, Y. TAKATA, N. KOSUGI and M. WATANABE, "Electronic structures and local atomic configurations in amorphous GeSe and GeTe," J. Phys. Condens. Matter 10, 1931 (1997).

# B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. KINOSHITA, Y. TAKATA, T. MATSUKAWA, H. ARITANI, S. MATSUO, T. YAMAMOTO, M. TAKAHASHI, H. YOSHIDA, T. YOSHIDA, Y. UFUKTEPE, K. G. NATH, S. KIMURA and Y. KITAJIMA, "Performance of the YB66 soft X-ray monochromator crystal at the wiggler beamline of the UVSOR facility," J. Synchrotron Rad. 5, 726 (1998).

M. KAMADA, H. HAMA, T. KINOSHITA and N. KOSUGI, "Present status of the UVSOR facility — 1997," J. Synchrotron Rad. 5, 1166 (1998).

## B-4) 招待講演

- N. KOSUGI, "Polarization Dependence of Gas- and Solid-phase Molecular Inner-shell Spectra," Uppsala University, Sweden, August 8th, 1998.
- N. KOSUGI, "Polarized NEXAFS Spectra of Free Molecules and Molecular Crystals," Linköping University, Sweden, August 8th, 1998.
- N. KOSUGI, "Molecular Inner-shell Spectroscopy of Transition Metal Complexes," Groningen University, The Netherlands, September 1st, 1998.
- N. KOSUGI, "Molecular Inner-shell Spectroscopy of Simple Molecules and Transition Metal Compounds," LURE, France, September 4th, 1998.

## B-5) 受賞、表彰

小杉信博,分子科学研究奨励森野基金研究助成(1987).

## 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, 1998-).
- 日本放射光学会庶務幹事(1994).
- 日本分光学会東海支部幹事(1993-1997).

## 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).

第11回 X 線吸収微細構造国際会議組織委員,プログラム委員(1998-).

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(1996-1997).

第12回真空紫外光物理国際会議プログラム委員(1997-1998).

第2回シンクロトロン放射と材料科学国際会議組織委員(1997-1998).

#### 文部省,学振等の委員会委員

新技術開発事業団創造科学技術推進事業 研究推進委員(1985-1990).

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-).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光共同利用実験審査委員会委員(1997-).

広島大学放射光科学研究センター顧問(1996-).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員(1997-).

# B-7) 他大学での講義等

名古屋大学理学研究科物質理学専攻、「X線分光学の基礎と応用」、1998年12月8-9日.

# C) 研究活動の課題と展望

これまで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が大きく,ほとんどの研究者は分子振動を研究することを諦めていたが,小さな孤立分子に限れば分解能を上げれば分子振動の分離は可能である。それによって内殻励起の電子状態が分子振動と結合する様子や解離過程と脱励起過程の競争など内殻励起状態動力学を学ぶこともできる。また,固体ではバンドを形成しているので,分解能を上げても内殻励起状態の微細構造はあまり観測できないと考えられてきたが,分子錯体など孤立分子が相互作用して固体状態になっている系などでは孤立分子の性格の強い微細構造が観測でき,微細構造の挙動から分子間相互作用による摂動を解明することができる。

内殻電子が絡む研究は放射光の利用でますます広がりを見せているが,内殻励起特有の新しい現象の発見・理解 やそれらの研究のための実験的・理論的方法論の開拓という観点から見直すとまだ多くの課題が残されている。 我々は分子系(気体と固体)を対象に内殻励起とその脱励起過程の基礎を着実に固めていく目的で研究を続けて おり, 価電子励起とは違った内殻励起ならではの現象を追っている。これまで測定装置上の制約を解決すること で、幸いにしていくつか新しい現象を見つけ、理論的にもその現象の本質を理解してきた。現在、測定装置の制 約についてはほとんどなくなってきており,次に新しい展開を図るには光源の制約を解決しなければならない段 階になっている。すなわち、励起光の強度を落とさずに分解能をさらに向上させることが必要であり、所外の大 型施設での高輝度な光源の利用が必須となる。そのため、現在、国内外の施設との協力体制を築いているところ である。

# 田原太平(助教授)

A-1) 専門領域:光化学、分子分光

## A-2) 研究課題:

- a) フェムト秒時間分解分光による分子ダイナミクスの研究
- b) ピコ秒時間分解分光による光化学反応の研究
- c) 時間分解分光法における実験手法の開発

## A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a-1) フェムト秒時間分解蛍光分光を用いて、7-アザインドール二量体の光プロトン移動反応を研究した。プロトン移動の前駆体である二量体励起状態からの蛍光を観測することに成功し、さらに蛍光偏光異方性の測定により光励起直後の電子状態の緩和過程を明らかにした。これらにより代表的光プロトン移動反応であるこの反応のダイナミクスの全貌が明らかになった。レチナールの研究にはじまる一連のフェムト秒時間分解蛍光分光による研究過程から、フェムト秒領域ではS1 状態からの蛍光のみならず、高い電子励起状態(Sn 状態)からの蛍光も一般的に観測されるとの理解にいたった。この理解にもとづき、ポリアセンに対するフェムト秒蛍光測定を行い、Sn 、S1 状態両方からの蛍光をそれぞれ時間分解測定することに成功した。また、東京大学のグループと共同でビフェニル・四塩化炭素系について、二体反応におけるフェムト秒領域の拡散過程について研究した。
- a-2) フェムト秒時間吸収分光を用いて,水溶性ポルフィリン Cu(II)(TMpy-P4)の光励起後の緩和過程を研究した。単一波長に対する測定ではなく,多波長におけるマルチチャンネル測定を,レーザー強度依存性を注意深く調べつつ行うことにより,信頼性のあるフェムト秒~ピコ秒領域の時間分解吸収スペクトルをはじめて測定することに成功した。
- b) ピコ秒時間分解ラマン分光により、レチナールの光異性化反応の研究を行った。従来考えられていたのとは異なり、シス体からトランス体への異性化機構が回転する二重結合の位置に大きく依存し、特に 13- シス体では電子励起一重項状態で異性化が進行していることを初めて明らかにした。これによりレチナール分子のシス・トランス光異性化反応機構の全体像が明らかになった。また、アゾベンゼンの光異性化反応を研究し、寿命数ピコ秒の電子励起状態のラマンスペクトルを測定することに成功した。
- c) 光パラメトリック増幅(OPA)および差周波発生を用いて,フェムト秒赤外光を発生させる装置を製作した。また,前年度放射光施設(UVSOR)において製作した,ピコ秒レーザーと放射光の同期にもとづく時間分解測定システムを用いて,有機固体試料について時間分解遠赤外スペクトルの測定を試みた。

# B-1) 学術論文

**S. TAKEUCHI and T. TAHARA**, "Femtosecond Ultraviolet-Visible Fluorescence Study of the Excited-State Proton-Transfer Reaction of 7-Azaindole Dimer," *J. Phys. Chem. A* **102**, 7740-7753 (1998).

# B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. TAHARA and A. SHIMOJIMA, "Picosecond Time-resolved Resonance Raman Study on Photoisomerization of Retinal," Proceedings of XVIth International Conference on Raman Spectroscopy 132-133 (1998).

#### B-3) 総説、著書

田原太平,「ピコ秒,フェムト秒コヒーレントラマン分光の新しい手法」, ラマン分光法, 尾崎幸洋編, 263-279 (1998). 田原太平,「超高速振動コヒーレント分光」, 分光研究 47, 37-50 (1998).

## B-4) 招待講演

T. TAHARA and A. SHIMOJIMA, "Picosecond Time-resolved Resonance Raman Study on Photoisomerization of Retinal," XVIth International Conference on Raman Spectroscopy, Cape Town (South Africa), September 1998.

田原太平,「フェムト秒領域の振動分光と蛍光分光:コヒーレンス・緩和・光化学」,近畿物理化学セミナー,京 都大学,京都,1998年9月.

田原太平,「僕らが最近やったこと・わかったこと」,東京大学,東京,1998年10月.

田原太平,「時間分解分光の今とこれから」,分子科学研究所研究会「2010年の分子科学を語る」,分子科学研究 所, 岡崎, 1998年10月.

T. TAHARA, "Ultrafast Dynamics Studied by Femtosecond Raman and Fluorescence Spectroscopy," Pennsylvania State University, University Park, Pennsylvania (U.S.A.), November 1998.

田原太平,「時間分解ラマン分光:ピコ秒領域の分子の変化を追う」,早稲田大学,東京,1998年11月.

# B-5) 受賞、表彰

田原太平,光科学技術研究振興財団研究表彰(1995).

#### B-7) 他大学での講義、客員

科学技術庁金属材料研究所客員研究官(1995-1997).

# C) 研究活動の課題と展望

本研究グループでは超高速時間分解分光を駆使し,主として凝縮相の光化学反応を研究する。特にフェムト秒か らピコ秒時間領域における分子ダイナミクスの解明に力点をおく。フェムト秒時間領域においては分子の核運動 のコヒーレンス(波束)を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。このことを念頭におき,電子に対する分光と核運動(振動)に対する分光の両面から さらに研究をすすめるため,測定の時間分解能と分光のエネルギー領域の拡張を行う。これらの研究を行う過程 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の開発を行うことをめざしている。

# 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) 放射光励起反応によるナノ構造形成技術と分子科学新領域の開拓
- b) SR 光反応用分光技術の開発
- c) 高感度 FTIR 技術の開拓と反応機構の解明
- 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) STM による放射光光反応のその場観察

- a) 放射光励起反応の高い空間分解能,低損傷性,を利用した新しい(任意の形状で,任意の位置に大量につくれる) ナノ構造形成技術を開拓し,人工原子,分子の製作とその性質の解明をめざす。1998年はInP基板上のSiO2薄膜のエッチング特性の測定,量子ドット配列制御のためのパタン形成実験などを進めた。また,AI量子ドット製作のための準備として,AI内殻電子の共鳴励起によるジメチルアルミニウムハイドライド低温凝集層を用いたAI膜堆積を行った。
- b) 多層膜ミラー分光器ビームラインを完成し,特性評価の一環として,出力光による Ta 薄膜の光電子分光を行い, 単色性,強度などが,ほぼ設計どおりであることを確認した。さらに,この単色光を用い,ジメチルアルミニウムハイドライドによる AI 薄膜堆積を行った。膜中の C 組成に励起エネルギー依存性があることを見いだした。
- c) 半導体表面反応のその場観察手法として,埋め込み金属層(BML)基板による赤外反射吸収分光法の開発を進めている。Si(100)BML基板については,すでに応用実験として,Si(100)表面の水素の熱および放射光照射反応を調べ,放射光照射によりSiH2がエッチングされることを見いだした。さらにSi(111)のBML基板の開発に着手した。
- d) 表面研究用の電子 イオン・コインシデンス分光装置の改良と整備を進め,シグナル/バックグラウンド比や操作性を大幅に改善した。オージェ電子 光イオン・コインシデンス分光法を用いて表面分子の内殻電子励起に由来するイオン脱離機構を研究し,ノーマルオージェ刺激イオン脱離機構,超高速イオン脱離機構,スペクテーターオージェ刺激イオン脱離機構など多種のイオン脱離機構を確認した。光電子 光イオン・コインシデンス分光法を用いて表面分子の内殻電子励起に由来するサイト選択的イオン脱離を研究し,サイト選択性がオージェ刺激イオン脱離機構に由来すること,サイト間距離が5A離れると明瞭なサイト選択性が観測されること,などを見出した。
- e) 表面反応が不均一系であること,また。ナノ構造形成においては,一原子レベルで反応を評価することの必要性から,STMによる反応表面のその場観察を1997年より開始した。1998年は,Si(111)上SiO<sub>2</sub>の放射光脱離後の原子像観察に始めて成功した。熱脱離反応の場合,表面にボイドと呼ばれる凹凸が発生するのにたいし,放射光脱離の場合,原子レベルで平坦な7×7構造が得られることがわかった。脱離機構を解析した。

## B-1) 学術論文

- A. YOSHIGOE, S. HIRANO and T. URISU, "Surface Hydrogen and Growth Mechanisms of Synchrotron Radiation-Assisted Silicon Gas Source Molecular Beam Epitaxy Using Disilane," Applied Organometallic Chemistry 12, 253-256. (1998).
- S. GHEYAS, T.URISU, S.HIRANO, H. WATANABE, S. IWATA, M. AOYAGI, M.NISHIO and H. OGAWA, "Chemisorption of Deuterium on an Ultrathin Ge Film Deposited Over Si(100)-2×1: Existence of a Dideuteride Phase," Phys. Rev. B 58, 9949-9954 (1998).
- H. MEKARU, T. URISU, Y. TSUSAKA, S. MASUI, E. TOYOTA and H.TAKENAKA, "Design and Performance of a Multilayered Mirror Monochromator in the Low Energy Region of the VUV" Journal of Synchrotron Radiation 5, 714 (1998). S. NAGAOKA, K. MASE, M. NAGASONO, S. TANAKA, T.URISU and J. OHSHITA, "Site-Specific Fragmentation Following Si:2p Core-level Photoionization of F<sub>3</sub>SiCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>Si(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub> condensed on Au surface," J. Chem. Phys. 107, 10751-10755 (1997).
- K. MASE, M. NAGASONO, S.TANAKA, T. URISU, E. IKENAGA, T. SEKITANI and K. TANAKA, "Study of Ion Desorption Induced by a Resonant Core-level Excitation of Condensed H<sub>2</sub>O by Using Auger Electron Photoion Coincidence (AEPICO) Spectroscopy Combined with Synchrotron Radiation," Surface Sci. 390, 97-101 (1997).
- M. NAGASONO, K. MASE, S.TANAKA and T. URISU, "Study of Ion Desorption Induced by a Resonant Core-level Excitation of Condensed NH3 using Auger Electron Photoion Coincidence (AEPICO) Spectroscopy Combined with Synchrotron Radiation," Surface Sci. 390, 102-106 (1997).
- T. SEKITANI, E. IKENAGA, K. TANAKA, K. MASE, M. NAGASONO, S.TANAKA and T. URISU, "Auger-electron — Ion Coincidence Study of Photon Stimulated ion Desorption for Condensed Acetonitrile," Surface Sci. 390, 107-111 (1997). T. SEKITANI, E. IKENAGA, H. MATSUO, S. TANAKA, K. MASE and K. TANAKA, "Photon stimulated ion desorption of condensed acetonitrile molecules induced by core excitation," J. Electron Spectros. Relat. Phenom. 88-91, 831-836 (1998). S. TANAKA, K. MASE, M. NAGASONO and M. KAMADA, "Desorption of the H ions From Water Chemisorbed on Si(100) by the O-1s Excitation-Auger-Electron Photoion Coincidence Study," Surface Sci. 390, 204-208 (1997).
- T. MIYAMAE, D. YOSHIMURA, H. ISHII, Y. OUCHI, T. MIYAZAKI, T. KOIDE, T. YAMAMOTO, Y. MURAMATSU, H. ETORI, T. MARUYAMA and K. SEKI, "Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy of n-type Conducting Polymers," Synthetic Metals 84, 2227 (1997).
- T. MIYAMAE, M. AOKI, H. ETORI, Y. MURAMATASU, Y. SAITO, T. YAMAMOTO, Y. SAKURAI, K. SEKI and N. UENO, "Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy of Poly(anthraquinone)s and Poly(1,10-phenanthroline-3,8-diyl); Their Electronic Structure and K-doped States," Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena 88-91, 905 (1998).
- H. NODA, H. NAGAI, M. SHIMAKURA, M. HIRAMATSU and M. NAWATA, "Synthesis of Diamond Using a Low Pressure, Radio Frequency, Inductively Coupled Plasma," J. of Vac. Sci. & Tech. A 16, 3170-3174 (1998).

## B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. URISU, "Synchrotron Radiation Process and in-situ observation technique: infrared reflection absorption spectroscopy," Proceedings of SPIE 3331 (1998).

## B-3) 総説、著書

銘苅春隆、宮前孝行、宇理須恆雄,「放射光励起プロセス研究用多層膜ミラービームライン」,電気学会研究会資料,光・デバイス研究会,OQD-98-1 ~ 6,17-21 (1998).

宇理須恆雄,「放射光励起プロセスの現状と将来展望」, レーザ研究 26(6) (1998).

**S. NAGAOKA, K. MASE and I. KOYANO**, "Fragmentation following core-level photoexcitation of organosilicon molecules in the vapor phase and on the solid surface," *Trends in Chemical Physics* **6**, 1-30 (1997).

間瀬一彦、永園 充、田中慎一郎、長岡伸一,「電子 - イオン・コインシデンス分光法を用いた表面分子の内殻電子励起に由来するイオン脱離の研究」, 放射光 10, 375-391 (1997).

## B-4) 招待講演

宇理須恆雄,「放射光励起半導体プロセスと凝集系内殻電子励起反応」,第7回超小型放射光シンポジウム,名古屋,1997年6月5日.

宇理須恆雄,「放射光による21世紀の技術革新」,シンクロトロン光応用研究会第3回新素材応用部会,福岡,1997年9月22日.

宇理須恆雄,「夢の光放射光の表面科学反応と半導体プロセス」,名城大学理工談話会,名古屋,1997年11月8日. 宇理須恆雄,「放射光励起プロセスと反応機構」,SPring8利用推進協議会,放射光による電子励起新物質創製研究会,大阪,1998年7月24日.

宇理須恆雄,「放射光による物質創製とナノ加工」,第 18 回放射光産業利用技術懇談会,大阪,1998 年 9 月 11 日. 宇理須恆雄,「放射光による新物質創製とナノ加工」,第 2 回 VBL シンポジウム,名古屋,1998 年 10 月 26 日.

**T. URISU**, "Syunchrotron Radiation Stimulated Process and Reaction Mechanisms," Emory Univ. Freiday Seminar, Atranta, February 19, 1998.

**T. URISU**, "Synchrotron Radiation Nanoprocess and in-situ Monitoring," Rochester Univ. Seminar, Rochester, February 23, 1998.

K. MASE, "Ion Desorption Induced by Core-Electron Excitations of Surface," The first Harima Conference-Frontiers in Surface Science, 播磨科学公園都市, 1998 年 12 月.

間瀬一彦, 「内殻電子励起によるイオン脱離」, 平成10年度科研費基盤研究(C)企画調査第2回研究会, 箱根, 1998年11月.

間瀬一彦,「電子 - イオン・コインシデンス研究の現状と将来」, 広島大学第3回光化学セミナー, 西条, 1998年 11月.

**K. MASE**, "Mechanism of Ion Desorption Induced by Core-electron Excitations of Surface Molecules Studied by Electron Ion Coincidence Spectroscopy," The second International Conference on Synchrotron Radiation in Materials Science (SRMS-2), Kobe, October 31-November 3, 1998.

**K. MASE**, "Mechanism of Ion Desorption Induced by Core-electron Excitations of Condensed Molecules and Adsorbates Studied by Electron-Ion Coincidence Spectroscopy," The Twelfth International Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics (VUV-XII), San Francisco, August 3-7,1998.

間瀬一彦、永園 充、田中慎一郎、宇理須恆雄、「表面に吸着した水の電子励起に由来する脱離」、日本真空協会 6月例会、東京、1998年6月. 間瀬一彦、田中慎一郎、永園 充,「電子・イオン・コインシデンス分光法を用いた内殻電子励起に由来するイ オン脱離機構の研究」、習志野市、1998年4月.

間瀬一彦,「電子-イオン・コインシデンス分光法による内殻電子励起に由来するイオン脱離機構の研究」,日本 化学会中国四国支部愛媛地区化学講演会,松山,1997年12月.

# B-6) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

レーザー学会評議員(1983-1985).

日本放射光学会評議員(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(1994-1997).

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研究評価委員(1995).

日本工業技術振興協会,放射光の半導体への応用技術研究委員会顧問委員(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(1996-1998).

日本放射光学会評議員(1997-).

近畿通産局,超次世代原子デバイスの自己形成技術に関する調査委員会委員(1997-1998).

電気学会,放射光(自由電子レーザプロセス技術調査専門委員会委員(1997-1999).

放射線利用振興協会,放射線利用技術指導研究員(1997.11.18-20).

日本原子力研究所,研究嘱託(1998.4-1999.3).

科学技術庁 「顕微光電子分光法による材料 ,デバイスの高度分析評価技術に関する調査」調査推進委員会委員 (1998-1999).

東北大学電気通信研究所,外部評価委員(1998).

日本原子力研究所,博士研究員研究業績評価委員(1998-1999).

## 学会の組織委員

第 5-12 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線リソグラフィ及び極端紫外光リソグラフィ国際ワークショプ顧問委員(1995).

1997 年 X 線リソグラフィ及び極端紫外光リソグラフィ国際ワークショプ顧問委員(1997).

1998 年 X 線リソグラフィ及び極端紫外光リソグラフィ国際ワークショプ顧問委員(1998).

SRI97 組織委員会プログラム委員会委員(1995-1997).

SPIE's 23rd Annual International Symposium on Microlithography, 論文委員(1997).

SPIE's 24th Annual International Symposium on Microlithography, 論文委員(1998).

レーザ学会第 19 回年次大会プログラム委員(1998-1999).

# 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).

JJAP 特集論文特別編集委員(1998).

# B-7) 他大学での講義、客員

宇理須恆雄,名古屋大学大学院工学研究科,「夢の光放射光と半導体 - 放射光励起半導体プロセス,表面反応モニター,反応基礎課程 - 」,1997年5月28日.

宇理須恆雄,東京理科大学,「放射光励起プロセスとナノ加工」,1997年12月16日.

# C) 研究活動の課題と展望

放射光励起表面反応による半導体や絶縁物表面へのナノ構造形成を積極的に進める。物質をナノレベルで微細に加工することにより,新しい物性の発現が期待されるほか,多くの生体物質と同程度の寸法となるため,生命科学分野への応用も期待される。実用性の高い加工技術とするためには,表面反応の原子レベルでの評価と制御が重要である。この問題については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い,特に反応の材料選択性やサイト選択性の機構を解明する。また,内殻電子励起については励起後のオージェ緩和の素過程について不明の点が多いので,この問題について電子・イオンコインシデンス法により調べる。

# 見 附 孝一郎(助教授)

A-1) 専門領域:化学反応素過程、軌道放射分子科学

# A-2) 研究課題

- a) 真空紫外超励起状態の分光学と動力学
- b) 粒子同時計測法の開発とそれを用いた原子・分子・クラスターの光イオン化過程の研究
- c) レーザーと軌道放射のポンプ・プローブまたは2重共鳴分光
- d) 偏極励起原子の光イオン化ダイナミックス

# A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 軌道放射光施設に分子線光解離装置を製作し,2酸化炭素,2酸化硫黄,ハロゲン化メチル,フロンなど20種余 の分子についてイオン対を生成する過程を初めて見いだした。また,同施設の直入射分光器ラインに2次元掃引 光電子分光装置を建設した。得られた負イオン解離効率曲線や2次元光電子スペクトル等から,超励起状態のポ テンシャルエネルギー曲面を計算しイオン化状態との電子的結合を評価した。これらに基づいて自動イオン化や 前期解離のダイナミックス,分子の2電子励起状態の特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,イオンの前期解離ダイナミックスなどに関する研究を行った。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500 ps の時間分解ポンププローブ測定が可能となった。また,レーザー 誘起蛍光励起分光やレーザー多光子イオン化分光を起用することによって、超励起状態から解離生成したイオン または中性フラグメントの内部状態の観測を初めて可能とした。将来的には,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している。
- d) 直線偏光した放射光を用いて,基底状態原子をそのイオン化ポテンシャルより低いリュドベリ状態へ共鳴遷移さ せ,放射光の偏光方向に偏極した特定量子状態の励起原子を高密度で生成させる。この偏極原子(始状態)を, 直線偏光した高出力レーザーによってイオンと電子へイオン化させる(終状態)、光電子角度分布の解析と理論 計算を併用して,選択則で許される複数の終状態チャネルの双極子遷移モーメントの振幅と位相差をすべて決定 し,光電子のスピン偏極やイオンの整列度を予測した。究極的には,希ガス偏極原子の光イオン化に関する「量 子力学的完全実験」を目指している。

# B-1) 学術論文

E. V. SAVCHENKO, T. HIRAYAMA, A. HAYAMA, T. KOIKE, T. KUNINOBU, I. ARAKAWA, K. MITSUKE and M. SAKURAI, "Long life-time emission of the excited species ejected from the surface of solid Ne," Surf. Sci. 390, 261-265 (1997).

T. HIRAYAMA, A. HAYAMA, T. KOIKE, T. KUNINOBU, I. ARAKAWA, K. MITSUKE, M. SAKURAI and E. V.

**SAVCHENKO**, "Absolute desorption yields of metastable atoms from the surface of solid rare gases induced by exciton creation," *Surf. Sci.* **390**, 266-271 (1997).

**H. YOSHIDA and K. MITSUKE**, "Design of an 18 m spherical-grating monochromator at UVSOR," *J. Synchrotron Rad.* **5**, 774-776 (1998).

**M. MIZUTANI, H. NIIKURA, A. HIRAYA and K. MITSUKE**, "Laser-induced fluorescence excitation spectroscopy of  $N_2^+$  produced by VUV photoionization of  $N_2$  and  $N_2O$ ," *J. Synchrotron Rad.* **5**, 1069-1071 (1998).

**K. MITSUKE, M. MIZUTANI, H. NIIKURA and K. IWASAKI**, "Pump-probe spectroscopy of N<sub>2</sub> and N<sub>2</sub>O by using a laser-synchrotron radiation combination technique," *Rev. Laser Engin.* **26**, 458-462 (1998).

# B-4) 招待講演

見附孝一郎,「真空紫外・軟 X 線放射光によるイオン化と超励起」,分子科学研究所研究会「2010年の分子科学を語る」,分子科学研究所, 岡崎,1998年 10月.

# B-6) 学会および社会的活動:

学協会役員、委員

原子衝突研究協会役員(1987).

原子衝突研究協会企画委員(1996-).

原子衝突研究協会委員会補充委員(1998-).

# 学会等の組織委員

質量分析連合討論会実行委員(1993).

第9回日本放射光学会年会実行委員(1995-1996).

第 12 回日本放射光学会年会組織委員およびプログラム委員(1998-).

第 15 回化学反応討論会プログラム委員および実行委員長(1998-).

International Symposium on Photo-Dynamics and Reaction Dynamics of Molecules, Cochair (1998-).

# その他の委員

東京大学物性研究所高輝度光源計画推進委員会測定系小委員会委員

# C) 研究活動の課題と展望

光電子分光, 蛍光分光, 質量分析, 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。また, 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。近い将来の目標としては, 軌道放射と各種レーザーを組み合わせて,(1)励起分子や解離フラグメント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ポンプ・プローブ法や2重共鳴法で追跡すること,(2)偏極原子の光イオン化ダイナミックスを角度分解光電子分光法で研究し,放出電子とイオン殻内の電子との相互作用の本質を理解すること,の2つが挙げられる。

# 界面分子科学研究部門

# 上 野 信 雄(教授)

A-1) 専門領域:有機薄膜物性,電子分光

# A-2) 研究課題:

- a) 電子分光法による有機超薄膜の構造と電子状態
- b) 内殻励起による有機固体の位置選択的光化学反応

#### A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a)機能性有機超薄膜の物性/電子状態は分子の配列・配向に大きく依存するが,この分子配向・配列は基板表面第 1分子層中の分子配向・配列に支配される。本研究の結果,シンクロトロン放射光励起による光電子角度分布の 定量的解析から,清浄結晶表面の有機超薄膜中の分子の3次元配向を実験的に決定できるようになった。この方 法を用い,有機エピタキシャル薄膜などの高秩序有機薄膜の分子配向に加え,秩序性の乏しい高分子薄膜表面で の側鎖の配向も決定することが可能になった。
- b) 内殻電子を励起することにより位置を選択して 化学結合切断が生じることが期待されている。本研究では,放射 光の波長連続性を利用して,有機固体の特定の励起状態を選択的に励起し,励起位置と結合切断位置の相関,結 合切断の素過程を研究することを目的としている。種々の高分子薄膜表面において、1s-σ\*励起により顕著な位置 選択的結合切断が生じ,2次電子効果などの固体に特徴的な影響に打ち勝って,位置選択的反応が実現できるこ とが見出された。

#### B-1) 学術論文

Y. AZUMA, T. HASEBE, T. MIYAMAE, K. K. OKUDAIRA, Y. HARADA, K. SEKI, E. MORIKAWA, V. SAILE and N. UENO, "Angle-Resolved UV Photoelectron Spectra (UPS) of Thin Films of Perylene-3,4,9,10-Tetracarboxylic Dianhydride on Mos<sub>2</sub>," J. Synchrotron Radiation 5, 1044-1046 (1998).

Y. AZUMA, M.TSUTSUI, S. KERA, M. AOKI, T. MIYAMAE, K. OKUDAIRA, Y. HARADA and N.UENO, "Temperature Dependence of Photoelectron Angular Distribution from Thin Films of Chloroalminum Phthalocyanine on Mos<sub>2</sub>," J. Synchrotron Radiation 5, 1047-1049 (1998).

K. K. OKUDAIRA, E. MORIKAWA, S. HASEGAWA, P. T. SPRUNGER, V. SAILE, K. SEKI, Y. HARADA and N. UENO, "Radiation Damage of Poly(Metylmethacrylate) Thin Films Analyzed by UPS," J. Electron Spectr. & Related Phenom. **88-91**, 913-917 (1998).

S. KERA, A. ABDUAINI, M. AOKI, K. OKUDAIRA, N. UENO, Y. HARADA, Y.SHIROTA and T. TSUZUKI, "Penning Ionization Electron Spectroscopy of Titanyl Phthalocyanine Ultrathin Films: Electronic State and Molecular Orientation," J. Electron Spectr. & Related Phenom. 88-91, 885-890 (1998).

A. ABDUAINI, S. KERA, M. AOKI, K.OKUDAIRA, N. UENO and Y. HARADA, "Characterization of Self-Assembled Monolayer of Thiophenol on Gold by Penning Ionization Electron Spectroscopy," J. Electron Spectr. & Related Phenom. 88-91, 849-854 (1998).

- H. OZAKI, M. KASUGA, S. KERA, M.AOKI, H.TSUKADA, R.SUZUKI, N. UENO, Y. HARADA and S. MASUDA,
- "Penning Ionization Electron Spectroscopy of atomic Tape: Extrathin Superstructure Constructed by Intramonolayer Hydrogen Bonds on A Solid Surface," *J. Electron Spectr. & Related Phenom.* **88-91**, 933-938 (1998).
- Y. AZUMA, T. YOKOTA, S. KERA, M. AOKI, K. OKUDAIRA, Y. HARADA and N. UENO, "High-Resolution Electron Energy Loss Spectroscopy of Chloroalminum Phthalocyanine Ultra Thin Films," *J. Electron Spectr. & Related Phenom.* 88-91, 881-884 (1998).
- **D. YOSHIMURA, H. ISHII, Y. OUCHI, E. ITO, T. MIYAMAE, S. HASEGAWA, N. UENO and K. SEKI**, "Angle-Resolved UPS Study and Simulation with IAC Approximation For Oriented Monolayer of Tetratetracontane (N-C<sub>44</sub>H<sub>90</sub>) on Cu (100)," *J. Electron Spectr. & Related Phenom.* **88-91**, 875-880 (1998).
- S. HASEGAWA, T. MIYAMAE, K. YAKUSHI, H. INOKUCHI, K. SEKI and N. UENO, "Comparison Between Calculated and Measured Photoemission Spectra of C<sub>60</sub> Thin Films," *J. Electron Spectr. & Related Phenom.* **88-91**, 891-896 (1998).
- T. MIYAMAE, M. AOKI, H. ETORI, Y. MURAMATSU, Y. SAITO, T. YAMAMOTO, Y. SAKURAI, K. SEKI and N. UENO, "Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy of Poly(Anthraquinone)S and Poly(1,10-Phenanthroline-3,8-Diyl); Their Electronic Structure and K-Doped States," *J. Electron Spectr. & Related Phenom.* 88-91, 905-912 (1998).
- K. FUJII, T. SEKITANI, K. TANAKA, S. YAMAMOTO, K. K. OKUDAIRA, Y. HARADA and N. UENO, "Photon Stimulated Ion Desorption of Deuterated Polystyrene Thin Films Induced by Core Excitation," *J. Electron Spectr. & Related Phenom.* 88-91, 837-842 (1998).
- K. K. OKUDAIRA, S. HASEGAWA, P. T. SPRUNGER, E.MORIKAWA, V. SAILE, K. SEKI, Y. HARADA and N. UENO, "Photoemission Study of Pristine and Photodegraded Poly(Methyl Methacrylate)," *J. Appl. Phys.* **83**(8), 4292-4298 (1998).
- **S. HASEGAWA, T. MIYAMAE, K. YAKUSHI, H. INOKUCHI, K. SEKI and N. UENO**, "Origin of Photoemission Intensity Oscillation of C<sub>60</sub>," *Phys. Rev. B* **58**(8), 4927-4933 (1998).
- N. UENO, Y. AZUMA, M. TSUTSUI, K. K. OKUDAIRA and Y. HARADA, "Thickness Dependent Orientation of Pendant Phenyl Group at The Surface of Polystyrene Thin Films," *Jpn. J. Appl. Phys.* **37**(9A), 4979-4982 (1998).

# B-3) 総説、著書

上野信雄,「有機超薄膜の成長と分子配向を見てみよう - 種々の電子分光法による研究紹介;有機半導体から高分子まで - 」,表面 36(6), 321-334 (1998).

上野信雄,「複雑系の放射光励起角度分解 UPS - 有機エピタキシャル薄膜から高分子薄膜まで - 」, M&BE 9(3), 118-123 (1998).

S. MASUDA, N. UENO and J. J. PIREAUX, "Proceeding of The Seventh International Conference on Electron Spectroscopy," Elsevier Science; Amsterdam, total pages=1064 (1998).

# B-4) 招待講演

上野信雄,「高分子の内殻電子励起による局所結合切断 - 分子メスの可能性を探る - 」,第 122 回 ST スクエアー(ハードフォトン利用技術の展開),つくば,1998 年 4 月.

上野信雄,「放射光による複雑系の光電子分光分析」, SPring-8 利用促進協議会研究会, 東京, 1998 年 7 月.

上野信雄,「複雑系の放射光励起角度分解UPS- 有機エピタキシャル薄膜から高分子薄膜まで-」,応用物理学 会 M&BE 研究会, 東京, 1998 年 9 月.

上野信雄,「放射光を利用した紫外光電子分光(UPS)による複雑系の表面構造分析」,先端技術国際シンポジウ ム,千葉,1998年9月.

N. UENO, "Angle-Resolved UPS Studies of Organic Ultrathin Films," SRMS-2, Kobe, October 1998.

N. UENO, "Low-Energy Electron Transmission Through Functional Organic Thin Films," The Workshop on Electron Transmission through Molecules and Molecular Interfaces, Maagan (Israel), December 1998.

# B-6) 学会および社会的活動

第7回電子分光国際会議プロシーデイング編集委員(1997-1998).

国際学術研究「放射光の特徴を利用した有機薄膜の定量的紫外光電子分光」研究代表者(1997-1998).

基盤研究(B)「角度分解光電子分光法による機能性有機薄膜の分子配向・配列の定量的決定」研究代表者(1996-1998).

# B-7) 他大学での講義、客員

千葉大学工学部,1998年4月-7月.

同自然科学研究科,1998年9月.

# C) 研究活動の課題と展望

機能性有機超薄膜の物性や表面の化学的性質は分子の配列・配向に大きく依存するがこの分子配向・配列は基板 表面第1分子層中の分子配向・配列に支配される。有機薄膜の物性を解明し、制御するためにはこれらに関する 正確な情報と電子構造を知ることが不可欠である。本研究では、シンクロトロン放射光の直線偏光特性と、波長 可変性を積極的に利用した放射光励起角度分解紫外光電子分光法により、有機超薄膜中の分子配向・配列に関す る定量的知見を得ると同時に,超薄膜や有機/無機界面に特徴的な電子状態を研究する。また本実験法を用いて, 高分子表面での側鎖の配向決定など,準不規則系表面における化学種の配向研究も行えるので,このような系に ついて研究する道を開拓したい。

# 櫻 井 誠(助教授)

A-1) 専門領域:表面物理学、原子物理学

# A-2) 研究課題:

- a) 低温分子吸着表面の構造解析および振動分光
- b) 多価イオンと表面の相互作用に関する研究

# A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 低速電子線回折(LEED)の動力学的解析により,低温の固体表面上に吸着した分子が形成する結晶構造を精密に解析する手法を開発した。実験的には,冷却CCDを用いて微弱な電子電流でLEED観測ができるシステムを完成させ,表面上に2次元凝縮したXe単分子層を対象に,LEEDによる構造解析を適用した。これと並行して赤外反射吸収分光法(IRAS)と高分解能電子エネルギー損失分光法(HREELS)の2種類の測定をその場で行える実験装置を製作した。
- b) 本課題では、電子ビーム型イオン源(EBIS)で生成される多価イオンを固体表面に照射したときの、放出される 2 次粒子や放射を観測するとともに照射後の表面構造の変化をSTM・AFMなどで観察し、多価イオンがもつ大き な内部エネルギーが固体表面で解放される際の諸過程を探究する。今年度は、イオン源で生成し得るイオン主の 範囲を広げる目的で、イオン化したい物質(主に金属)のプローブを僅かに電子ビームに接触させ、蒸発させる ことによって種イオンを供給する手法について、必要な装置の製作、および動作テストを行い、最終的にトリウムの超多価イオンを生成することに成功した。(電気通信大学との共同研究)

# B-1) 学術論文

N. NAKAMURA, J. ASADA, F.J. CURRELL, T. FUKAMI, T. HIRAYAMA, D. KATO, K. MOTOHASHI, E. NOJIKAWA, S. OHTANI, K. OKAZAKI, M. SAKURAI, H. SHIMIZU, N. TADA, S. TSURUBUCHI and H. WATANABE, "The present status of the Tokyo electron beam ion trap," *Rev. Sci. Instrum.* **69**, 694-696 (1998).

M. SAKURAI, H. OKAMURA, M. WATANABE, T. NANBA, S. KIMURA and M. KAMADA, "Upgraded Infrared Beamline at UVSOR," *J. Synchrotron Rad.* **5**, 578-580 (1998).

# B-6) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本真空協会規格標準部会第3小委員会委員

科学研究費の研究代表者

基盤研究(B)一般 代表者(1996-1998).

基盤研究(B)展開研究 代表者(1998-2000).

# B-7) 他大学での講義

神戸大学理学部,「原子分子物理学」,1998年4月10日-9月30日.

# C) 研究活動の課題と展望

低温の表面上に物理吸着あるいは凝縮した分子層(凝縮分子相)は,電子と分子の弾性,非弾性散乱過程を詳細 に研究するうえで,気相と化学吸着相の間の中間的状態という意味で,興味深い対象である。この中間的状態の 特徴は共鳴散乱において顕著にみられる。また,凝縮分子相では特定の条件下で2次元凝縮相を示す場合が少な くない。2次元凝縮相自体の物性も興味深い研究対象であるが,この系は規則正しく配向した分子を標的とした 電子 - 分子散乱実験を可能にする。電子 - 分子散乱過程を凝縮分子相という新しい対象について研究すること 吸 着分子と基盤表面との間に働く弱い力が,吸着相の構造や振動スペクトルにどのように現れるかを低速電子線回 折およびエネルギー損失分光法により明らかにすることが当面の課題の一つである。

# 松 本 益 明(助手)

A-1) 専門領域:表面物理

# A-2) 研究課題:

- a) 低温金属表面上に吸着した気体の振動分光と電子回折
- b) 低温金属表面の走査トンネル顕微鏡観察

# A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 一酸化窒素(NO)の分子は,自動車の排気ガスの主成分である NOx との関連や,非常に広く研究されている一酸 化炭素(CO)との類似点,相違点の比較などの面から研究がなされてきた。特に白金は NOx 触媒の主成分として 広く用いられているため多くの研究がなされてきたが,白金表面上の NO の吸着構造についてはこれまでの研究 結果に矛盾が有り,未だに決定されたとはいえない。我々は現在,低温において Pt(111)表面上に NO 分子を吸着 させたときの吸着構造について,振動分光法や低速電子回折法(LEED)を用いて研究を行っている。反射吸収赤外分光法(RAIRS)を用いて,NO の吸着量を変えながら N-O 間の伸縮振動数を測定し,同時に LEED パターンを 測定することにより,同じ表面周期構造を持ち,異なる伸縮振動数を持つ2種類の吸着分子が存在していること がわかった。さらに NO の同位体を用いることにより,これまで考えられてきたような,吸着位置が変化すると いうモデルでは説明のつかない現象が存在することがわかった。
- b) Pt(111)表面上の NO の吸着構造を走査トンネル顕微鏡(STM)を用いて始めて観察した。低温(10 K と 70 K)において吸着量を変化させたときの STM 像の変化および低温(70 K)において吸着した後,高温(100-200 K)に加熱した場合の STM 像の変化を測定し,NO 分子による 2 × 2 構造の形成とその成長の様子,高被覆率における3次元島状構造の形成,加熱による広範囲の秩序構造の形成を観察した。これらの STM 像と過去において測定された振動分光において観測された2種類の N-O 伸縮振動を有する NO 分子の吸着位置の同定をおこない,これまで提唱されてきたモデルとは全く異なるモデルを提案した。

# B-1) 学術論文

M. MATSUMOTO, N. TATSUMI, K. FUKUTANI and T. OKANO, "Low Energy Electron Diffraction Measurement of NO/Pt(111)," *J. Vac. Soc. Jpn.* **41**, 400 (1998).

K. FUKUTANI, T. T. MAGKOEV, Y. MURATA, M. MATSUMOTO, T. KAWAUCHI, T. MAGOME, Y. TEZUKA and S. SHIN, "Electronic structure of a Pt(111)-Ge surface alloy and adsorbed CO," *J. Electr. Spectrosc. Relat. Phenom.* 88-91, 597-601 (1998).

# B-7) 他大学での客員

東京大学生産技術研究所,協力研究員,1997年4月1日 - .

# C) 研究活動の課題と展望

現在までは、主に、低温表面上の一酸化窒素分子の吸着構造について、振動分光法、走査トンネル顕微鏡法、低 速電子回折法等を用いて研究を行い、これまでに考えられていたものとはまったく異なる構造が存在することを 発見した。しかしながら,現在考えているモデルには,まだ一部実験事実をうまく説明できない点が存在してお り,その解明に向かってさらに研究を進めているところである。さらに,他の遷移金属の表面においても,同様 の構造が存在する可能性が有り,今後これについても上記の手法を用いて構造解析を行うことにより,これまで 未解決であった点の解明が可能となると考えている。また、これと平行して、光や電子と表面分子の反応につい ても研究を行うことによって、金属表面における窒素酸化物の反応機構の詳細な知識を得られることが期待され、 さらにこれらの知識を元にして自動車などの排気ガスの触媒作用に関しても,これまでより詳細な知見が得られ ることも期待できる。

# 3-8 錯体化学実験施設

錯体化学実験施設は1984年に専任教授と流動部門(錯体合成)より始まり,次第に拡大してきた。現在の研究活動としては,専任部門の錯体触媒研究部門では,生物に見られる高次の構造・機能を発想の原点として,あらゆる元素の特性を活かした新しい機能性分子(触媒,医薬品,多段階反応)の構築を目指した研究を行っている。錯体物性研究部門では,金属錯体による二酸化炭素の活性化とプロトン濃度勾配を駆動力とするエネルギー変換反応の開発を調べているほか,生体構造の形成にも見られる自己組織化のしくみを参考にして,複数個の金属イオンと架橋配位子を配位結合により一義的に集合させて(自己集合性分子システム),環状,連結環状,かご状等の高次な構造や機能を持った精密分子構造体を作ることを研究している。

流動部門の錯体合成研究部門では、金属錯体による酸素分子の活性化の機構をこれまでにない新しい思想のもとで解明し、その結果を生体中での自由鉄イオンによる病気、特に脳における神経性疾患との関連性を明らかにする目的で研究を行っている。客員部門として配位結合研究部門があり、希土類元素化学と金属クラスターの化学を研究している。

これらの現在の研究体制に将来新たに専任部門などを加えてさらに完成した錯体研究の世界的拠点となるべく計画を進めている。

# 錯体合成研究部門

# 芳 賀 正 明(教授)\*)

A-1) 専門領域:錯体化学(錯体電気化学、表面錯体化学)

# 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) プロトン共役電子移動系を形成する表面錯体の化学およびその応用
- 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
- e) 錯体の電気化学的挙動の解明とその酸化還元触媒への応用

#### 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: テトラ(2 ベンズイミダゾリル)-4,4-ジピリジンを有する架橋三座配位子をもつルテニウム二核錯体を新たに合成し,その酸化電位のpH依存性から金属間相互作用が脱プロトン化により増大することを見いだした。
- b) プロトン共役電子移動系を形成する表面錯体化学: ビス(2 ベンズイミダゾリル)ピリジンをもつRu 錯体を金電極上に自己組織化(SAM)膜として固定化した。この SAM 膜では,ボルタモグラムの形は錯体間の相互作用に大きく依存する。酸化電位のpH 依存性からプロトン共役電子移動系であることが明らかになった。SAM 膜上での錯体のpKa は表面錯体濃度に依存することが明らかになった。この結果からこの錯体膜は表面のpKa プローブとなることが明らかになった。

- 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,長鎖アルキル基をもつ三座配位子ビス(ベンズイミダゾリル)ピリジルを 有する一連の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ラングミュアブロジェット単分子膜 として安定であり、種々の固体基板上に固定化することができる。また、金属イオンに配位可能な第二配位子を 有する両親媒性錯体では水面上で錯形成することが明らかになった。両親媒性ルテニウム錯体の第二配位子の疎 水性を変化させると,錯体だけの場合と錯形成後とで錯体の気水界面での配向が界面に対して傾いた配向から垂 直配向に変化することが in situ UV スペクトルの測定から初めて明らかになった。
- 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: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,液体膜から凝縮膜 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。さらに,長鎖アルキル基をもつ三座配位子ビス(ベンズイミダゾリル)ピ リジルが配位したルテニウム錯体のLB膜ではドメイン形成をしていることを原子間力顕微鏡から明らかにした。 さらに,高感度反射 FTIR から固体上に写し取った LB 膜のアルキル基の配向についても考察した。
- e) 錯体の電気化学的挙動の解明とその酸化還元触媒への応用:両親媒性二核錯体を電極上に写し取り,その電極反 応により混合原子価錯体が固体表面上で生成していることを明らかにした。また,新規ルテニウム二核および三 核有機金属錯体の酸化還元挙動では酸化に伴う構造変化があることがわかった。

# B-1) 学術論文

M. HAGA, M. M. ALI, H. SATO, H. MOJUSHIRO, K. NOZAKI and K. KANO, "Spectroelectrochemical Analysis of the Intervalence Band in Mixed-Valence Di- and Tetranuclear Ru Complexes by the Flow-Through Method," Inorg. Chem. 37, 2320-2324 (1998).

K. MASHIMA, H. FUKUMOTO, K. TANI, M. HAGA and A. NAKAMURA, "1,8-Diphenylocta-1,3,5,7-tetraene Complexes of Ruthenium(II)," Organometallics 17, 410-414 (1998).

M. HAGA, N. KATO, H. MONJUSHIRO, K. WANG and M. D. HOSSAIN, "Metal coordination to amphiphilic Ru complexes at the air-water interface," Supramol. Sci. 5, 337-342 (1998).

M. M. ALI, H. SATO, T. MIZUKAWA, K. TSUGE, M. HAGA and K. TANAKA, "Selective formation of HCO<sub>2</sub>- and C<sub>2</sub>O<sub>4</sub><sup>2-</sup> in electrochemical reduction of CO<sub>2</sub> catalyzed by mono- and di-nuclear ruthenium complexes," Chem. Commun. 249-250 (1998).

M. M. ALI, H. SATO, M. HAGA, K. TANAKA, A. YOSHIMURA and T. OHNO, "Two-Electron Reduction of [{(bpy)<sub>2</sub>Ru(dmbbbpy)}<sub>3</sub>Ru]<sup>8+</sup> from (BNA)<sub>2</sub> via Photoinduced Electron Transfer," *Inorg. Chem.* 6176-6180 (1998).

K. HAYASHI, N. NAGAO, K. HARADA, M. HAGA and Y. FUKUDA, "Formation and Structure of Mixed Quaternary Chelates with Late-Lanthanide Metal Ions," Chem. Lett. 1173 (1998).

# B-2) 国際会議のプロシーディングス

M. HAGA, H. MONJUSHIRO, M. D. HOSSAIN and H.-G. HONG, "Molecular Assembly of Ru Complexes at the Interfaces Towards Molecular Protonic Devices," Proceeding of XXXIII International Conference on Coordination Chemistry 71 (1998). M. HAGA and K. WANG, "Molecular Assembly of Metal Complexes Towards Molecular Electronic Devices," Proceeding

of 5th International SPACC Symposium 11 (1998).

M. HAGA, K. WANG, H. MONJUSHIRO and N. KATO, "Ru Complex Langmuir-Blodgett Films Towards Molecular Protonic Devices," *Proceeding of the 2nd Asian Symposium on OrganizedMolecular Films for Electronics and Photonics* 90 (1998).

**K. WANG, M. HAGA, H. MONJUSHIRO and M. D. HOSSAIN**, "A Novel Amphiphilic Ru(II) Complex as a Ligand at Air-water Interface and in Langmuir-Blodgett Films: Towards Superlattic Thin Film Materials of Functional Metal Complexes," *Proceeding of the 2nd Asian Symposium on Organized Molecular Films for Electronics and Photonics* 120 (1998).

M. HAGA, H. MONJUSHIRO, H. -G. HONG and Y. KAWATA, "Electrochemical Proton Generator Based on Self-Assembled Monolayer of Ru Complexes on Gold Surface," *Proceeding of International Society of Electrochemistry, 49th Annual Meeting* 144 (1998).

# B-3) 総説,著書

芳賀正明,「酸化還元活性な金属錯体をモジュールとする集積体の構築」, 化学と工業 1428-1431 (1998).

# B-4) 招待講演

M. HAGA, "Molecular Assembly of Ru Complexes at the Interfaces Towards Molecular Protonic Devices," XXXIII International Conference on Coordination Chemistry, Florence (Italy), September 1998.

# 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(1995.11-1997.10).

基礎錯体工学会運営委員(1994.10-).

日本ポーラログラフ学会評議員(1997.10-).

#### 学会誌編集委員

日本化学会トピックス編集委員(1990.4-1992.3).

# 学会の組織委員

5th International SPACC Symposium 組織委員.

# B-7) 他大学での講義

山形大学理学研究科,「無機化学特論」,1998年10月-1999年3月.

# C) 研究活動の課題と展望

界面錯体化学に対する基礎的な知見をうるために、界面における錯体の分子配向および錯形成に力を入れて研究を進めてきた。本年の研究から表面でのpKaは錯体の電荷密度に大きく依存することならびに基板と錯体あるいは配位子との相互作用の強さおよび配向が次の層の構築には重要であることを明らかにした。また単分子層レベルとの化学反応により次の層をつくる実験も種々の官能基を表面錯体に導入することにより行った。次の課題としては表面錯体と基板との間の結合の強さを定量的にはかることにより基板がどのような官能基に対して選択的

に結合するかの尺度を出したい。

界面での錯体膜の酸化に伴うプロトン共役電子移動に関する知見は今年の研究から得られた。これを如何にプロ トンポンプの構築に結びつけていくか,プロトン勾配を如何に隔離するかなど解決すべき課題,さらに如何に組 織化してシステムとして組み上げるかなどの大きな課題が残っている。また,表面錯体の薄膜構造を調べる手段 としてAFM測定を行ってきたが、今後分子像までの解像度を得ることにより界面構造の解明を行いたい。放射光 を用いたX線反射率測定など新しい界面構造の解明の手法を取り入れることが今後の研究の進展のキーとなる。

\*)1998年4月1日中央大学理工学部教授

# 西 田 雄 三(教授)\*)

A-1) 専門領域:生体無機化学

# A-2) 研究課題:

- a) 金属錯体 / 過酸化水素存在下でのアルカン類の酸素化反応とその機構
- b) 金属錯体触媒による DNA, RNA の切断反応とその機構解明
- c) 神経性疾患と関連する蛋白質の金属錯体による変形反応とその機構

# A-3) 研究活動の概要と主な成果

- a) アルコキソ架橋二核鉄(III)錯体が過酸化水素の存在下,アルカン類,長鎖アルカンと反応して,特異的にペルオキシド誘導体を与えることを見い出し,その機構を解明した。それは化学的な意義のほかに,タンカー事故で汚された海岸のオイル駆除にも役に立つと期待される。
- b) 鉄(III)- ブレオマイシンによる DNA 切断は,制癌剤の作用としても重要であるが,その機構はこれまでも多くの研究にもかかわらず,解明されていなかった。最近われわれは酸素分子の活性化に関する新しい説を提案し,それによって初めて DNA 切断挙動が化学的に解明された。この結果は,今後新しい制癌剤を開発する上で,非常に重要であると思われる。
- c) 現在,アルツハイマー病,パーキンソン氏病は神経性の疾患で注目されているが,その原因となると非常に難しく,また特定の因子だけにしぼることも難しいようにも見える。われわれは,因子として蛋白質の異常切断の可能性を求めて実験室系での金属錯体による蛋白質の切断反応を検討し,興味深い結果を得ている。

# B-1) 学術論文

T. KOBAYASHI, T. OKUNO, T. SUZUKI, M. KUNITA, S. OHBA and Y. NISHIDA, "DNA degradation by the copper(II) complex with tripodal-ligands containing peptide group," *Polyhedron* 17, 1553 (1998).

Y. SASAKI, T. AKAMATSU, K. TSUCHIYA, S. OHBA, M. SAKAMOTO and Y. NISHIDA, "Solvent and structural effects on catalase-like function of binuclear manganese(II) compounds with μ-phenoxide bridge," *Polyhedron* 17, 235 (1998).

S. ITO, S. NISHINO, H. ITOH, S. OHBA and Y. NISHIDA, "Copper(II) compound with long Cu(II)-phenolic oxygen atom bonding as galactose oxidase model," *Polyhedron* 17, 1637 (1998).

Y. ISHIKAWA, S. ITO, S. NISHINO, S. OHBA and Y. NISHIDA, "Contribution of a peroxide adduct of copper(II)-peptide complex to modify the secondary structure of Albumin," *Z. Naturforsch.* **53C**, 378 (1998).

T. KOBAYASHI, L. L. GUO and Y. NISHIDA, "Mechanism of Double-strand DNA cleavage effected by iron-bleomycin," Z. Naturforsch. 53C, 867 (1998).

# B-3) 総説

西田雄三、「酸素添加酵素における酸素分子の活性化に及ぼす基質の役割」、 日本化学雑誌 794 (1998).

# B-7) 他大学での講義

山形大学理学部,「生体無機化学」,1998年4-9月.

# C) 研究活動の課題と展望

金属錯体による酸素分子の活性化の機構の解明に全力をいれ,努力してきた。その結果,従来にない新しい機構 を提案できた。これに基づいて研究を進めているが、その過程で反応生成物の同定に必要な装置が無いことがネッ クとなっている。なんとかしてその装置を手にいれ、研究の発展を期したいと思っている。

\* )1998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、生物物理学

# 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 リダクダーゼの分子構造と機能

# 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の三核銅クラスターにおける酸素の4電子還元機構を明らかにすることを目的として,還元型酵素と酸素の反応過程を分光学的かつ速度論的に検討した。酸素の3電子還元体に相当するオキシルラジカルおよびヒドロキシルラジカルを,ストップトフロー,EPRによって検出することに成功し SQUID測定によってキャラクタライズした。この中間体は1対のタイプ3銅と3スピン系を形成しており,プロトン移動とカップルしたタイプ2銅からの電子移動によって消失することを明らかにした。これら一連の研究によって,酸素の4電子還元機構を提唱するに至った。また,ビリルビンオキシダーゼの有する全てのタイプの銅への配位グループに対するミューテーションを行い,初めてマルチ銅オキシダーゼのミュータント作成に成功するとともに,各銅結合部位の役割を明らかにした。
- b) 様々の非共有的相互作用しうるグループを有した光学活性 Ru 錯体を分子設計し,アズリンとの電子移動反応を行った。アズリンのレドックスカップル認識機構について検討するとともに,不斉選択的な分子間相互作用に基づく電子移動を実現し,人工的な系でも高度の選択性を発現できることを示した。
- c) 脱室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し,そのキャラクタリゼーションを行った。この酵素は膜結合性コンプレックスであり,低スピンへムc,低スピンへムb,高スピンへムbと非へム鉄を有していることを明らかにした。前者2つの鉄中心は電子伝達部位であり,後者2つの鉄中心は複核構造を取っており,反応中心であることがわかった。ゲノミッククローニングを行い構造遺伝子配列を決定し,本酵素がチトクロムオキシダーゼの先祖酵素であることを確認した。また,反応プロトン輸送経路を特定し,分子進化に伴う活性中心の構造と機能変化を提唱した。

# B-1) 学術論文

N. SAKURAI and T. SAKURAI, "Isolation and Characterization of Nitric Oxide Reductase from *Paracoccus halodenitrificans*," *Biochemistry* **36**, 13809 (1997).

N. SAKURAI, H. KUMITA, T. SAKURAI and H. MASUDA, "Spectral Properties of Cytochrome  $c_{553}$  and a Membrane-Bound Cytochrome b from Alcaligenes xylosoxidans GIFU 1051," Bull. Chem. Soc. Jpn. 71, 135 (1998).

N. SAKURAI and T. SAKURAI, "Genomic DNA Cloning of the Region Encoding Nitric Oxide Reductase in *Paracoccus halodenitrificans* and a Structure Model Relevant to Cytochrome Oxidase," *Biochem. Biophys. Res. Commun.* 243, 400 (1998).

S. HIROTA, H. MATSUMOTO, H. HUANG, T. SAKURAI, T. KITAGAWA and O. YAMAUCHI, "Observation of Cu-

N<sub>3</sub>- Streching and N<sub>3</sub>- Asymmetric Streching Bands for mono-Azide Adduct of *Rhus vernicifera* Laccase," *Biochem. Biophys.* Res. Commun. 243, 435 (1998).

H. HUANG, T. SAKURAI, H. MOMJUSHIRO and S. TAKEDA, "Magnetic Studies of the Trinuclear Center in Laccase and Ascorbate Oxidase Approached by EPR Spectroscopy and Magnetic Susceptibility Measurements," Biochim. Biophys. Acta. 1384, 160 (1998).

S. SUZUKI, DELIGEER, K. YAMAGUCHI, K. KATAOKA, S. SHIDARA, H. IWASAKI and T. SAKURAI, "Spectroscopic Distinction between Two Co(II) Ions Substituted for Types 1 and 2 Cu in Nitrite Reductase," Inorg. Chim. Acta 275-276, 289 (1998).

T. SAKURAI, N. SAKURAI, H. MATSUMOTO, S. HIROTA and O YAMAUCHI, "Roles of Four Iron Centers in Paracoccus halodenitrificans Nitric Oxide Reductase," Biochem. Biophys. Res. Commun. 251, 248 (1998).

# 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 - 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かった。われわれは,酸素の4電子還元中間体の一つを初めて検出することに成 功し、キャラクタライズした。この成果によって、さらに前段階の反応中間体の構造を推定できるようになり、こ れを実証することが今後の課題であるが、末端酸化酵素とは異なり銅イオンのみによって酸素を4電子権限する 機構の全貌解明への道が開拓された。また、ビリルビンオキシダーゼの全ての銅結合部位へのミューテーション を実現し、いくつかのミュータントが酵素活性を保持していることを発見したことにより、今後の構造・機能相 関解明に弾みがつくものと期待される。電子移動タンパクと低分子化合物との研究例は多くあるが,様々の非共 有的相互作用が可能なレドックスカップルとの一連の反応は検討されておらず,生体系における極めて高度の分 子認識メカニズムの解明に光明を与えるものである。単離することに苦労したNOリダクターゼに関する研究は、 ひととおりのキャラクタリゼーションを終了したことで一段落し,今後は分子進化という観点から,研究を展開 する段階に来ており、スケールの大きなテーマとして発展できる可能性を秘めている。

\*) 1998年4月1日金沢大学大学院自然科学研究科助教授

# 辻 康 之(助教授)<sup>\*)</sup>

A-1) 専門領域: 錯体触媒化学

# A-2) 研究課題:

- a) 遷移金属シリルおよびスタニル錯体の構造とそのフラクショナルな挙動に関する研究
- b) 有機ケイ素化合物の特性を活かした新規触媒反応の開発

# A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 我々は以前にビス(スタニル)ビス(ホスフィン)白金錯体がねじれた平面4配位構造を有し,分子内回転をその原因とするフラクショナルな挙動を示すことを明らかにした。その後,我々はこのフラクショナルな挙動がビス(シリル)ビス(ホスフィン)白金錯体,さらにビス(スタニル)ビス(ホスフィン)パラジウム錯体に対しても認められることを明らかにした。
- b) 我々はこれまでにケイ素の酸素親和性を活かした新規錯体触媒反応を開発してきた。今回,トリメチルシリルシアニドをシアノ化試剤として用いるアリルエステル類のシアノ化反応とその反応機構を明らかにした。反応の選択性は極めて高く,中間体の アリル種を触媒中心金属上のシアノ基が触媒金属側から攻撃することを明らかにした。

# B-1) 学術論文

Y. TSUJI, T. KUSUI, T. KOJIMA, Y. SUGIURA, N. YAMADA, S. TANAKA, M. EBIHARA and T. KAWAMURA, "Palladium-Complex-Catalyzed Cyanation of Allylic Carbonates and Acetates Using Trimethylsilyl Cyanide," *Organometallics* 17, 4835-4841 (1998).

Y. TSUJI, K. NISHIYAMA, S. HORI, M. EBIHARA and T. KAWAMURA, "Structure and Facile Unimolecular Twist-Rotation of *cis*-Bis(silyl)bis(phosphine)platinum and *cis*-Bis(stannyl)bis(phosphine)palladium Complexes," *Organometallics* 17, 507-512 (1998).

#### B-4) 招待講演

辻 康之,「ジスタニルおよびジシリル遷移金属ホスフィン錯体の構造とフラクショナルな挙動」,第16回有機 合成化学夏季大学,岐阜,1998年7月.

# B-6) 学会および社会活動

触媒学会関西地区幹事(1997.1-).

# C) 研究活動の課題と展望

遷移金属シリルおよびスタニル錯体の構造とそのフラクショナルな挙動に関する研究に関しては,理論的な考察 が必要であり現在進行中である。また,実際の触媒反応との関連を明らかにしてゆく必要がある。また,有機ケ イ素化合物の特性を活かした新規触媒反応の開発に関しては、トリメチルシリルシアニド以外の試剤を用いる反 応についての展開を計画している。

\* ) 1998 年 4 月 1 日着任 , 1998 年 10 月 16 日北海道大学触媒化学研究センター教授

# 錯体触媒研究部

# 塩 谷 光 彦(教授)

A-1) 専門領域:生体分子科学

# A-2) 研究課題:

- a) 生体高分子の再構築:金属錯生成により塩基対を形成する人工 DNA (DNA のアルファベット拡張化による遺伝 子発現制御)
- b) 生体高分子の再構築:生体分子認識素子を担持した大環状ペプチド金属錯体
- c) DNA 上に集積する自己集合型金属錯体:金属アンチセンスによる遺伝子発現制御, DNA を取り囲む自己集合型 大環状金属錯体,鋳型 DNA の情報転写・複製システム
- d) 金属酵素モデル: DNA ポリメラーゼ様活性をもつ多核金属錯体の構築
- e) 金属錯体を用いた抗ウイルス活性化合物の開発

#### A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 生体高分子の再構築(金属錯生成により塩基対を形成する人工 DNA): DNA は核酸塩基間の相補的な水素結合により二本の鎖が特異的に会合し,塩基対間のスタッキングにより二重らせん構造を形成する。この水素結合による会合力を他の力に置き換えることにより,どのような機能の発現が期待できるだろうか。本研究では,DNAのアルファベットを拡張することによる遺伝子コントロールを目指し,金属錯生成により塩基対を形成する人工DNAを設計,合成した。この人工DNAでは,天然の核酸塩基に代わり,金属イオンと錯体を形成するのphenylenediamine,catechol,o-aminophenolなどを導入することにより,水素結合ではなく金属錯生成により塩基対を形成する。よって,金属イオンの種類,酸化数,濃度などによって,DNA二重らせん構造の安定性や高次構造が大きく変化すると考えられ,遺伝子発現制御への応用が期待される。今年度は,上記3種の配位子型ヌクレオシドの合成ルートを確立し,アミダイト法およびトリエステル法によるオリゴヌクレオチドの合成を検討中である。
- b) 生体高分子の再構築(生体分子認識素子を担持した大環状ペプチド金属錯体): 環状ペプチドは,これまで主に生理活性物質(イオノフォア等)として注目され,その構造・機能相関に興味が持たれてきたが,合成的な観点からみると,一般的に環化反応の収率が低いため,環状ペプチドを用いる生体機能の制御あるいは機能性分子の創製は立ち遅れていた。本研究では,金属キレート能を有するシステインと,グリシンの繰り返し配列を持った直鎖状および環状ペプチドを非常に高い収率で合成することに成功した。本手法が,金属錯体の種類やアミノ酸の種類に関わらず適用できる手法であれば,様々の環状ペプチド金属錯体の合成が可能となる。本研究で合成された環状ペプチド金属錯体は,環状ペプチド構造に加え,正電荷を帯びた金属錯体部分をもつので,水素結合や電荷相互作用により,アニオン種の認識が可能であると期待された。実際,円二色性スペクトルにおいて,様々なアニオン種(無機イオン,有機アニオン,DNA)の存在下で強いシグナルが誘起された。これは,アニオン捕捉によるホスト分子の大きな構造変化に伴うものであり,ダイナミックなアニオンセンシングに適用できるであろう。

- c) DNA 上に集積する自己集合型金属錯体: 標的の基質の形, サイズ, 電荷に応じた2方向に金属配位部分をもつ適 当な配位子を設計・合成することにより、金属イオンの存在下、その基質を囲むような集合体を得ることが可能 である。本研究では,金属の存在下で,DNAの周囲に集積化するロタキサン化合物を開発している。今回合成し た化合物は、鋳型がない場合は、金属イオンと錯生成しジグザク型の無限構造を形成することが予想されるが、 DNAのように周囲が負の電荷を帯びている分子が共存すると、正の電荷をもっているこれらの金属錯体は、DNA の周囲の負の電荷と静電的に相互作用することによりDNAを取り巻くような構造をとりやすくなることが期待さ れる。配位子の合成が終了し,現在,二重鎖 DNA や環状プラスミド等との相互作用を検討中である。本研究で 合成する DNA ロタキサンは,金属錯体と DNA の全く新しい相互作用様式であり,遺伝子発現制御,遺伝子工学, 遺伝子診断に適用できる可能性がある。この他に, DNAの主鎖を形成するリン酸ジエステル結合の代わりに金属 錯形成によりモノマー核酸がテンプレートDNA上に自発的に集合し ,二重らせん構造を形成する人工核酸の創製 にも着手し,合成方法を確立した。
- d) 金属酵素モデル(DNA ポリメラーゼ様活性をもつ多核金属錯体の構築): DNA ポリメラーゼ活性中心では二つの 金属イオンが四つのカルボキシル酸素により架橋されている。DNAポリメラーゼはヌクレオシド三リン酸を原料 として DNA を伸長しているが、プライマー末端の3' 水酸基はヌクレオシド三リン酸の 位のリン酸基を攻撃す ることによりDNAを伸長し、ピロリン酸を副生成物として生成するという反応機構が提唱されている。本研究で は,ヌクレオシド三リン酸とプライマー末端の3'水酸基を捕捉・活性化を行う多核金属錯体を設計し,その合成 を進めている。
- e) 金属錯体を用いた抗ウイルス活性化合物の開発:これまでに,種々の大環状ポリアミン亜鉛錯体が抗エイズ活性 をもつことを見出し,構造活性相関を検討してきた。その結果,単核の亜鉛錯体の Selectivity Index は10程度で あるが,これを芳香族化合物をスペーサーとする二量体にすることにより,数万のオーダーまで上昇することが わかった。これらは,正常T細胞とエイズウイルスの吸着を阻害することが明らかになりつつある。最近,亜鉛 錯体とアジドチミジンを併用することにより抗エイズ活性が協同的に増強されること,また大環状ポリアミンコ バルト錯体が抗サイトメガロウイルス活性を有することも見出している。T細胞とウイルスの吸着阻害を示す上 記のような薬剤はほとんど例がなく、このような作用機序の場合、他剤の併用による協同効果が期待できる。

# B-1) 学術論文

E. KIMURA, T. IKEDA, S. AOKI and M. SHIONOYA, "Macrocyclic Zinc(II) Complexes for Selective Recognition of Nucleobases in Single- and Double-Stranded Polynucleotides," J. Bioinorg. Chem. 3, 259-267 (1998).

A. HATANO, H. MORISHITA, K. TANAKA and M. SHIONOYA, "Metal-Assisted Formation of Artifitial Nucleic Acids," Nucleic Acids Res., Symp. Ser. 39, 93-94 (1998).

K. TANAKA, H. CAO and M. SHIONOYA, "Double Strands Formation of Artificial DNAs Induced by Metal Complexation," Nucleic Acids Res., Symp. Ser. 39, 171-172 (1998).

Y. OKAHATA, T. KOBAYASHI, K. TANAKA and K. SHIMOMURA, "Anisotropic Electric Conductivity in an Aligned DNA Cast Film," J. Am. Chem. Soc. 120, 6165-6166 (1998).

# B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. TANAKA, H. CAO and M. SHIONOYA, "Supramolecular Structures of Artificial DNAs," Proceedings of the XXIII International Symposium on Macrocyclilc Chemistry (1998).

**K. SHIGEMORI, K. TANAKA and M. SHIONOYA**, "An Efficient Strategy for the Liquid-Phase Synthesis of Cyclic Metallopeptides," *Proceedings of the International Congress on Recent Development and Future Prospects on Metal-Assembled and Cluster Compounds* (1998).

#### B-4) 招待講演

塩谷光彦,「金属錯体によるDNAの機能制御」,第3回生物分子化学研究会,徳島大学,1998年1月.

塩谷光彦、「抗エイズウイルス活性をもつ大環状ポリアミン化合物の分子設計」、国立名古屋病院セミナー、名古屋、1998年3月.

M. SHIONOYA, "Supramolecular Structure of Artificial DNAs," XXIII International Symposium on Macrocyclile Chemistry, Hawaii, June 1998.

塩谷光彦,「人工DNAの合成と機能化」,日本物理学会1998年秋の分科会,琉球大学,1998年9月.

# B-6) 学会および社会的活動

# 学協会役員、委員

日本化学会生体機能関連化学部会若手の会中国四国支部幹事(1993-1995).

日本化学会生体機能関連化学部会幹事(1995-).

錯体化学研究会運営委員(1997-).

日本化学会生命化学研究会理事(1998-).

#### 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).

Coordination Chemistry Reviews, Guest Editor (1998-).

#### 学会の組織委員

日本化学会生体機能関連化学講習会実行委員長(1996).

The 8th Pre-ICBIC Okazaki Symposium 組織委員(1997).

Asian Academy Seminar 組織委員会事務局(1997).

第1回日本化学会生命化学研究会シンポジウム実行委員長(1998-1999).

# B-7) 他大学での講義、客員

京都大学薬学部,「創薬科学特論 III」,1998年7月13日.

# C) 研究活動の課題と展望

生物は最も高次の機能をもつ分子の集合体であり、原子・分子のレベルからマクロな組織に至る構造の階層性と機能の階層性が極めて密接に対応している。当研究室では、生物に見られる高次の構造・機能を発想の原点とする、あらゆる元素の特性を生かした機能分子(生体酵素様触媒、医薬品、バイオマテリアル)、およびそれらが有機的に連携した機能分子システム(情報転写、自己複製、多段階反応)の創製を目指している。新しい生体様機能分子システムの世界を切り拓くためには、複数の原子や分子を結びつけたり電子やエネルギーを受け渡す機能をもつ金属イオンを含め、あらゆる元素を組み合わせた自由度の大きい分子設計が必要である。

# 錯体物性研究部門

#### 中 晃 二(教授) 田

A-1) 専門領域: 錯体化学

# A-2) 研究課題:

- a) 二酸化炭素由来の金属 CO 結合の還元的活性化による CO<sub>2</sub> の多電子還元反応
- b) プロトン濃度勾配からの自由エネルギー変換反応の開発

#### A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 二酸化炭素と4級アルキルアンモニウム塩を出発原料とする選択的ケトン合成法の確立
- b) 二酸化炭素由来のアシル基のカップリング反応による30の炭素-炭素結合生成を伴う二酸化炭素還元反応の開
- c) チオレン配位子の電子受容性を利用した硫黄上での酸素分子の活性化
- c) アコ金属錯体のプロトン解離平衡と共役した金属錯体の酸化還元反応による新規反応活性種の創成

# B-1) 学術論文

- H. NAKAJIMA, K. TSUGE and K. TANAKA, "Oxide Transfer Reaction from Carbonate to Metal-CO Complex, Affording Metal-η¹-CO<sub>2</sub> Complex and Carbon Dioxide," *Chem. Lett.* 485 (1997).
- M. M. ALI, H. SATO, T. MIZUKAWA, K. TSUGE, M. HAGA and K. TANAKA, "Selective formation of HCO<sub>2</sub>" and C<sub>2</sub>O<sub>4</sub><sup>2-</sup> in electrochemical reduction of CO<sub>2</sub> catalyzed by mono- and di-nuclear ruthenium complexes," *J. Chem. Soc. Chem.* Commun. 249 (1998).
- K. TANAKA, Y. KUSHI, K. TSUGE, K. TOYOHARA, T. NISHIOKA and K. ISOBE, "Catalytic Generation of Oxalate through Activation of Two CO<sub>2</sub> Molecules on [(IrCp\*)<sub>2</sub>(Ir- $\eta^4$ -Cp\*CH<sub>2</sub>CN)( $\mu_3$ -S)<sub>2</sub>]," *Inorg. Chem.* 37, 120 (1998).
- H. NAKAJIMA, K. TSUGE, K. TOYOHARA and K. TANAKA, "Stabilization of  $[Ru(bpy)_2(CO)(\eta^1-CO_2)]$  and Unprecedented Reversible Oxide Transfer Reactions from  $CO_3^{2-}$  to  $[Ru(bpy)_2(CO)_2]^{2+}$  and from  $[Ru(bpy)_2(CO)(\eta^1-CO_2)]$  to CO<sub>2</sub>," J. Organometallic Chem. (Invited paper) **569**, 61-69 (1998).
- M. KURIHARA, S. DANIELE, M. TSUGE, H. SUGIMOTO and K. TANAKA, "Synthesis and Characterization of Ruthenium Terpyridine Dioxolene Complexes: Resonance Equilibrium between Ru<sup>III</sup>-catechol and Ru<sup>II</sup>-semiquinone Forms," Bull. Chem. Soc. Jap. 71, 867-875 (1998).
- H. SUGIMOTO, K. TSUGE and K. TANAKA, "Novel Intramolecular Rearrangement of Hepta-Coordiante Rhenium(V) Complex with Catecholato and Terpyridine Ligands," Chem. Lett. 719-720 (1998).
- K. TSUGE and K. TANAKA, "First Artificial Energy Conversion from Proton Gradient to Electricity," Chem. Lett. 1069 (1998).
- M. M. ALI, H. SATO, K. TANAKA, M. HAGA, A. YOSHIMURA and T. OHNO, "Two-electron reduction of  $[\{(bpy)_2Ru(dmbbbpy)\}_3Ru]^{8+}$  from  $(BNA)_2$  via photoinduced electron transfer [dmbbbpy = 2,2]-Bis(N-methylbenzimidazole-1)2-yl)-4,4'-bipyridine]," Inorg. Chem. 37, 6176 (1998).

# B-3) 総説、著書

K. TANAKA, "Reduction of CO<sub>2</sub> Directed toward Carbon-Carbon Bond Formation," Bull. Chem. Soc. Jpn. (Accounts) 71, 17-29 (1998).

田中晃二,「金属錯体利用による二酸炭素の変換 - 二酸化炭素の還元 - 」, 化学と工業 51(9), 1424-1427 (1998).

# B-4) 招待講演

K. TANAKA, "Activation of CO<sub>2</sub> Directed toward Highly Reduced Products and C2 Compounds," 5th China-Japan Bilateral Sympojium on Effective Utilization of Carbon Resources (EUCR-V), Chengdu (China), September 1997.

K. TANAKA, "Carbon-Carbon Bond Formation in Electrochemical Reduction of CO2 Catalyzed by Metal Complexes," Symposium on Chemical Fixation of Carbon Dioxide: Catalytic, Electrocatalytic and Photocatalytic, Spring ACS National Meeting, Dallas, Texas, March 1998.

K. TANAKA, "Selectrive FormatiOn of Ketones by electrochemical Reduction of CO<sub>2</sub> Catalyzed by Metal Complexes," International Symposium on Inorganic and Organometallic Chemistry, Chuncheon (Korea), September 1998.

# 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・学振等の委員会委員

学術審議会専門委員(科学研究費分科会)(1992-94).

文部省重点領域研究「生物無機化学」班長(1992-94).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員(1996-).

次世代研究探索研究会・物質科学系委員会委員(1997-).

# C) 研究活動の課題と展望

二酸化炭素は配位的不飽和な低原子価金属錯体と速やかに反応して付加体を形成する。特に,金属 - η 1 - CO2錯 体では C-O 結合の一つは酸素へのプロトン付加あるいは  $CO_2$ への  $O^2$ ・移動反応(還元的不均化反応)により容易 に切断されて金属 - CO 錯体に変換される。したがって、金属錯体による CO2 の多電子還元反応では、CO 発生を 伴わずに金属 - CO 結合の還元的活性化を行い,カルボニル炭素の反応性を高めることが必要である。このよう な反応系では金属 - CO 錯体の熱反応とは異なり求核試薬がカルボニル炭素と反応することから CO₂を原料とす る新たな反応系の開発が期待される。また,アコ金属錯体からのプロトン解離平衡と配位子の酸化還元反応を共 役させると溶液のプロトン濃度により金属錯体の電子状態の制御が可能となり,プロトン濃度勾配を利用した金 属錯体の活性化ならびにエネルギー変換素子の開発を行う。

#### ⊞ 誠(助教授)

A-1) 専門領域:錯体化学、有機化学

#### A-2) 研究課題

- a) 遷移金属を活用した自己集合性分子システム:孤立空間の構築
- b) 遷移金属を活用した自己集合性分子システム: 孤立空間における新現象
- c) 配位結合性高分子の構築と機能発現

#### A-3) 研究活動の概略と主な成果

分子が自発的に集合することによって,もともと個々の分子が持っていなかった性質や機能を発現する系は,ミ セル,二分子膜,液晶物質等々数多くの例が報告されてきた。このような分子集合を実現するための駆動力とし ては多くの場合、弱い分子間力や水素結合が利用されてきた。これに対し、我々は、より強い結合性を有し、か つ結合形成に明確な方向性を持つ配位結合に着目し ,境界の定まった分子集合体がこれまでにない安定性と精密 さをもって自発的かつ定量的に自己集合することを明らかにしてきた。今年度はこのような概念に基づき,主に 以下に示す成果を得た。

- a) シス位を保護したPd(II)錯体へのポリピリジル配位子の架橋配位を利用してナノメートルスケールに到達するボウ ル型三環構造の六核錯体が定量的に自己集合することを見い出した。また,三次元的に閉じた構造も種々構築し た。すなわち (1)3種10成分から三次元かご構造が内部連結したカテナン型三次元錯体が効率良く自己集合する ことを見出した。(2)平面的な三座配位子を用い ,M<sub>6</sub>L<sub>4</sub>型の三次元かご型Pt(II)六核錯体を高収率で得た。(3)約20 の長さを持つチューブ構造の自己集合に成功した。(4)三次元的に完全に密閉されたカプセル型分子を24成分から 定量的に自己集合させた。
- b) M<sub>6</sub>L<sub>4</sub>型三次元錯体の内部空孔を利用して,分子の新現象を探索した。この錯体はカルボラン(直径約8) )やア ダマンタン等の球状分子を4分子包接することを見い出した。また,三次元空孔の入口より大きい基質を空孔内 に閉じ込めることに成功した。アゾベンゼンの錯形成では空孔内にシス体のみが選択的に2分子取り込まれ,取 り込まれたシス体は空孔内で一週間以上安定に立体化学を保持することが明らかになった。同様に,4,4'-ジメチ ルスチルベンの場合にもシス体が2分子取り込まれ,そのNOE差スペクトルから,これらの基質はテニスボール 型に集合していることが示された。さらに,三次元錯体の内部空孔ではDiels-Alder付加体が促進されることがわ かった。また、シクロヘキサジエンの不均化やアリルベンゼンの異性化を定量的に触媒するすることがわかった。
- c) 一方, 自己集合で得られる精密ナノ構造の機能発現を目的として, 得られた構造体の自己集積化についても研究 を行った。Pd(II)大環状四核錯体の四隅に配置した遷移金属に対し、Pt(IV)錯体を反応させ、四核錯体が集積化し た混合原子価錯体が得られることを明らかにした。また,Cd(NO3)2とフッ素を含む柔軟な配位子から,ゲストの 大きさに対応して自在に伸縮する柔軟な二次元網目状包接錯体が自己集積した。この錯体では比較的広範なゲス トに対してオーダーメイドで包接錯体がつくることがわかった。

# B-1) 学術論文

M. FUJITA, M. AOYAGI, F. IBUKURO and K. OGURA, "Made-to-Order Assembling of [2] Catenanes from Palladium(II)-

Linked Rectangular Molecular Boxes," J. Am. Chem. Soc. 120, 611-612 (1998).

M. FUJITA, O. SASAKI and K. OGURA, "Self-assembled Molecular Ladders," New. J. Chem. 189-191 (1998).

M. FUJITA, M. AOYAGI and K. OGURA, "Coordination Polymers Self-Assembling from Cadmium(II) Ions and Flexibile Pyridine-based- Bridging Ligands," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 71, 1799-1804 (1998).

M. FUJITA, S.-Y. YU, T. KUSUKAWA, H. FUNAKI, K. OGURA and K. YAMAGUCHI, "Nanometer-sized Macrotricyclic Complexes Self-assembled from Ten Small Component Moleules," *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* 37, 2082-2085 (1998).

**F. IBUKURO, T. KUSUKAWA and M. FUJITA**, "A Thermally Switchable Molecular Lock. The Guest-Templated Synthesis of a Kinetically Stable Nano-Sized Cage," *J. Am. Chem. Soc.* **120**, 8561-8562 (1998).

# B-4) 招待講演

藤田 誠,「Pd(II)およびPt(II)大環状四核錯体からの混合原子価錯体の形成」,研究会「擬一次元鎖ハロゲン架橋白金系混合原子価錯体の化学と物理」,名古屋大学,1998年1月.

藤田 誠,「錯体化学を基盤とする自己組織性集合分子系の構築」,九州大学機能物質科学研究所講演会,九州大学機能物質科学研究所,1998年1月.

藤田 誠,「自己集積するポリマー:配位結合高分子」,第9回精密重合フォーラム討論会「精密重合錯体を生み 出す宝庫:有機金属化学」,日本化学会化学会館,1998年1月.

藤田 誠,「自己集合による三次元超分子の構築」,日本化学会第74春季年会特別企画,同志社大学,1998年3月.

藤田 誠,「錯体化学を基盤とする自己組織性集合分子系の構築」,有機合成夏季大学,岐阜市県民文化ホール「未 来会館」,1998年7月.

藤田 誠,「遷移金属を活用した自己集合性分子システム:ナノ構造の組織化と機能化」,東海ミニシンポジウム, 愛知厚生年金会館,1998年8月.

藤田 誠,「遷移金属を活用した自己集合性分子システム:ナノ構造の組織化と機能化」,錯体化学若手の会中部 東海地区勉強会,岡崎コンファレンスセンター,1998年10月.

藤田 誠,「自己集合を利用するナノスケール構造の構築」,合同研究会「分子物理化学の新展開」「化学動力学理論の新展開」, 岡崎コンファレンスセンター, 1998 年 10 月.

藤田 誠,「自己集合による孤立空間の構築と機能発現」,東京大学工学系研究科化学生命系講演会,東京大学, 1998 年 11 月.

**M. FUJITA**, "Metal-directed Organization of Nanostructures," The Taniguchi Conference on Polymer Science Towards the 21st Century, Kyoto, May 1998.

M. FUJITA, "Metal-directed Organization of Three-Dimensional Synthetic Receptors," The Eight Japan-Corea Joint Symposium on Organometallic and Coordination Chemistry, Kyoto, May 1998.

M. FUJITA, "Self-Assembly of Catenanes and Cages Through Coordination," 1998 Goron Research Conference in Inorganic Chemistry, Rhode Island (U.S.A.), July 1998.

**M. FUJITA**, "Metal-mediated self-assembly of functional nanostructures," 33rd International Conference on Coordination Chemistry, Florence (Italy), August 1998.

**M. FUJITA**, "Self-Assembly of Functional Nanostructures Possessing Transition Metals in Their Backbones," 1998 Gordon Conference on Organic Structures and Properties, Fukuoka, September 1998.

M. FUJITA, "Metal-mediated self-assembly of functional nanostructures," The 4th Europian Research Conference on Supramolecular Chemistry, Rolduc (Netherland), September 1998.

M. FUJITA, "Metal-mediated organization of three-dimensional nanostructures," 1st International Symposium on Design and Control of Advanced Molecular Assembly System, Fukuoka, November 1998.

# B-6) 学会および社会的活動

# 学会の組織委員

第62回岡崎コンファレンス実行委員(1999).

# 学会誌編集委員

Crystal Engineering (Elsevier)編集委員

科学研究費の研究代表者、班長等

科学技術振興事業団「単一分子・原子レベルの反応制御」領域 研究代表者

#### C) 研究活動の課題と展望

ナノスケールやメゾスケールからミクロスケールにいたるまでの構造を精密制御し,特異な機能や物性をもった 物質群を創製することは、次世代物質科学における重要な課題の一つである。既存の合成化学的手法では、この ような構造の精密制御は困難で,ブレイクスルー的な物質構築原理の創出が必要である。一方,自然界では小分 子に始まる構造的階層(たとえばアミノ酸 タンパク 集合体 細胞 組織……)によりこの領域が制覇され,究 極的な機能を持つ生体構造がつくられている。我々が生体分子にも匹敵する機能を持った分子を構築するために は,自然界に学び,このような階層的な物質構築を巧みに人工的な系に組み込むことが重要であると考えられる。 このような点に着目し、分子構造を基盤としたナノ構造、メゾ構造、ミクロ構造に焦点をあて、これらの階層的 構造体を構築する新概念や新手法、さらには従来の小分子には見られない、ナノ・メゾ・ミクロ構造体ならでは の機能を中心に研究を展開したい。

# 3-9 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、計算化学

#### A-2) 研究課題:

- a) 高振動励起状態の理論的研究
- b) 大気環境化学に関連する素反応のポテンシャル面とダイナミックス
- 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) CH<sub>3</sub>CO ラジカルの解離速度定数 k(E)は RRKM 理論からの予想より一桁以上小さいことが鈴木(分子研)らの実験で示されている。実験結果と RRKM 理論の不一致の原因として,実際の解離障壁がこれまでの ab-inito 計算より高いこと,RRKM による見積りでポテンシャル面の非調和性が十分に考慮されなかったこと,あるいは,反応で生成される CH<sub>3</sub>CO ラジカルの過剰エネルギーの分布が偏っていることなどが示唆される。我々は,Valence Bond型のモデル電子ハミルトニアンをトラジェクトリーの各ステップで対角化して得られたポテンシャル面上において,IVR,解離反応動力学を解析することで原因を考察している。

HCP分子の電子励起状態における振動前期解離反応の動力学的研究を行った。実験的には,東北大学の三上教授グループが,電子励起状態  $1^1\Delta$  における回転線の中に長寿命のものと短寿命のものが混在していることを見出している。そこで,波束動力学計算を行うためのポテンシャル曲面を作成し,Renner-Teller 結合を考慮した前期解離過程の動力学計算を行っている。

b) 昨年より OCS の電子励起状態のポテンシャルエネルギー曲面と紫外光解離ダイナミックスの研究を行っている。 非経験的分子軌道計算により励起状態のポテンシャルエネルギー面を求め,得られたポテンシャル曲面上で量子 波束計算を行った。その結果,A'(1¹Δ)状態を経た解離過程では基底状態との非断熱遷移が,解離生成物(CO)の 回転分布を説明する上で重要な役割を果たしていることを見出した。しかしながら,実験的にブロードな吸収が 得られている吸収帯に対応する理論計算は吸収スペクトルに鋭い構造を予測した。振動励起した初期状態からの 光解離過程について新たに波束計算を行った結果,零点振動準位(0,0°)からの吸収よりも強い吸収強度を示すこ とがわかった。

化学反応の量子動力学は反応確率N(E)に反映されており、理論的にN(E)を求める事ができれば、直接反応のミクロカノニカルな速度定数 k(E),あるいは温度依存性(k(T))も導出できる。我々は、Seideman、Millerらの probability operator の方法を現実の 4 原子分子以上の化学反応に応用し、多原子系の反応確率を求めるために、Green 関数そのものを評価するのではなく、状態ベクルトルへの作用を大次元連立方程式の反復解法によって評価する方法を提案した。我々の方法は Preconditioner を用いて反復的に Green 関数を評価する Born 展開に類似しており、Preconditioner が G(E)に近いほど、GMRES、Davidson 法などの Krylov 部分空間法の収束は加速される。これまでに、行列サイズの数パーセントの幅の帯行列でも収束が得られ、逆行列として作用させるために必要な演算量を

激減させることを示した。

c) C<sub>84</sub> はC<sub>76</sub>についで大量に得られている高次フラーレンであり,24個の構造異性体が存在するが,実験的に全ての 異性体の構造を予測することは困難である。本研究では非経験的分子軌道法による大規模な理論計算を行い,C84  $(C_2, D_2, D_{2d})$ 異性体の赤外スペクトル及びRamanスペクトルにおける振動構造を理論的に求め,異性体の同定にお ける指針を得た。基底関数にはSTO-3G,3-21G及び,D95V基底を用い,それぞれの対称性において,制限付き HF 計算による構造の最適化と調和振動解析を行った結果,赤外及び Raman スペクトルにおいて,異性体に固有 の幾つかの特徴を見いだした。D2異性体間では,650,1670,1850 cm<sup>-1</sup>付近のピークが,C2異性体間では900 cm<sup>-1</sup> 以下の振動領域と1300,1610,1980 cm<sup>-1</sup>付近のピークが,それぞれ各異性体を同定する「指紋」となることがわ かった。また , 1300 cm<sup>-1</sup> 以上の振動モードは  $C_{84}$  分子の炭素ケージに沿った面内の振動モードであり , 1000 cm<sup>-1</sup> 以下の振動モードは  $C_{84}$  分子の炭素ケージの面に垂直な方向に炭素原子が運動するいわゆる, breathing であるこ とを明らかにした。また,1000-1200 cm-1の領域に赤外吸収スペクトルの窓領域が存在することがわかった。

# B-1) 学術論文

T. SUZUKI, H. KATAYANAGI, S. NANBU and M. AOYAGI, "Nonadiabatic Bending Dissociation in 16 Valence Electron System OCS," J. Chem. Phys. 109, 5778 (1998).

S. I. GHEYAS, T. URIS, S. HIRANO, H. WATANABE, S. IWATA, M. AOYAGI, M. NISHINO and H. OGAWA, "Chemisorption of Deuterium on an Ultrathin Ge Film Deposited over Si(100)-2×1: Existence of a Dideuteride Phase," Phys. Rev. B 58, 9949-9954 (1998).

# C) 研究活動の課題と展望

大気化学反応,燃焼反応等の化学反応素過程を理解する上で重要な,分子内エネルギー移動と反応の統計性・選 択性,非断熱遷移過程,を主な研究課題としている。今後,具体的な研究対象を表面反応,生体内化学反応等,化 学的に興味のある大規模系へ拡大してゆく上で必要な,電子状態計算手法の開発や,多自由度系の動力学計算手 法について研究を進める。ここでは , 大規模系の電子状態直接計算と動力学計算を融合した全自由度を陽に取り 扱う方法論の他に,分子内エネルギー移動と反応の統計性・選択性に基礎を置いた自由度の分離が可能な方法論 の開発を目指す。

# 分子制御レーザー開発研究センター

# 佐 藤 信一郎(助教授)

A-1) 専門領域:レーザー分光学、光化学

# A-2) 研究課題:

- a) 巨大超高リュードベリ分子の緩和ダイナミクス
- b) ファンデルワールス錯体カチオン内の分子間相互作用
- c) 位相・波形の制御された極短パルス光源の開発と化学反応制御への応用

# A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 気相・分子線中の分子をイオン化ポテンシャルより僅かに低エネルギー側(数cm-1)にレーザー光励起すると,主量子数(n)の非常に大きい(n>100)超高リュードベリ状態を比較的安定に生成することが出来る。この状態にある分子は非常に大きな電子軌道半径(サブμm)を持ち,巨大超高リュードベリ分子と呼ばれ,理論・実験の両面から研究が進められている。通常,分子は電子の動きにくらべ核の動きが遅い,いわゆるボルンオッペンハイマー近似が成り立っているが,巨大超高リュードベリ分子においては,電子の周回運動のほうが核の運動より遅い逆ボルンオッペンハイマー近似が成り立つと予想され,通常とは全く異なる振動回転-電子相互作用が期待される。これらの相互作用は分子サイズ(回転)や振動回転相互作用の大きさ等により変化すると考えれるが,簡単な2原子分子と多原子分子(ベンゼン等)では,明らかに多原子分子において振動回転-電子相互作用によるリュードベリ系列間遷移が顕著に起きることをみいだした。
- b) 分子間力の研究手段として,超音速ジェット中に生成するクラスター分子を研究対象とすることはもはや定番となりつつあるが,我々はZEKE光電子分光法の特長を生かして,中性-カチオン間の分子間力の変化に着目して研究している。中性芳香族-希ガスvdW錯体では主たる分子間力は分散力であり,イオン化すると電荷-電荷誘起双極子(CCID)相互作用が新たに加わる。ZEKE光電子分光法によりCCID相互作用のエネルギーや,分子間振動,ジオメトリー変化,立体障害の影響等について新たな知見が得られている。
- c) 光解離や光異性化等の光化学反応において,光励起された波束は,個々の反応座標のポテンシャル局面によって 決まる量子準位に即した運動をする。同一波長の極短パルス光による多光子励起では,この波束の運動を反応生 成物の基底状態へむけて最適に誘導することは出来ない。最適に誘導するためには,ポテンシャルの非調和性に 即した多波長の極短パルス列を,波束の時間発展に合致したタイミングで用意しなければならない。このための 位相・波形の制御されたレーザー光源の開発を進めている段階である。即ち,チタンサファイアレーザーの出力 をグレーティングペアとコンピューター制御された液晶空間マスクにより波形加工し再生増幅により多光子励起 に充分な出力を得た後,OPG・Aにより波長変換するシステムである。

# B-1) 学術論文

**H. INOUE, S. SATO and K. KIMURA**, "Observation of van der Waals Vibrations in Zero Kinetic energy (ZEKE) Photoelectron Spectra of Toluene-Ar van der Waals Complex," *J. Electron Spectrosc.* **88-91**, 125-130 (1998).

- H. SHINOHARA, S. SATO and K. KIMURA, "Zero Kinetic Energy (ZEKE) Photoelectron Study of the Benzen-N2 and Fluorobenzene-N2 van der Waals Complexes," J. Electron Spectrosc. 88-91, 131-136 (1998).
- S. SATO, K. IKEDA and K. KIMURA, "ZEKE Photoelectron Spectroscopy and Ab Initio Force-Field Calculation of 1,2,4,5-Tetraflluorobenzene," J. Electron Spectrosc. 88-91, 137-142 (1998).
- T. VONDRAK, S. SATO and K. KIMURA, "Cation Vibrational Spectra of Indole and Indole-Argon van der Waals Complex. A Zero Kinetic Energy Photoelectron Study," J. Phys. Chem. A 101, 2384-2389 (1997).
- S. SATO and K. KIMURA, "One- and Two-Pulsed Field Ionization Spectra of NO. High-Lying Rydberg States near Ionization Threshold," J. Chem. Phys. 107, 3376-3381 (1997).
- H. SHINOHARA, S. SATO and K. KIMURA, "Zero Kinetic Energy (ZEKE) Photoelectron Study of Fluorobenzene-Argon van der Waals Complexes," J. Phys. Chem. A 101, 6736-6740 (1997).

# C) 研究活動の課題と展望

フェムト・ピコ秒レーザーシステムの導入立ち上げにともない,極短パルスの波形制御技術の開発と化学反応制 御の研究に研究室の力点をおいていきたい。また巨大超高リュードベリ分子についても、これまでナノ秒レーザー とパルス電場検出の組み合わせで研究してきたが、これからはフェムト・ピコ秒レーザーと光誘起リュードベリ イオン化検出の組み合わせで,より早い時間領域でのダイナミクスに迫っていきたい。

# 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) 青色半導体レーザー
- e) 超高速分光
- f) 新真空紫外域光学窓材

#### A-3) 研究活動の概要と主な成果

- a) 遠赤外超短パルスレーザー:今までレーザーが存在していなかった遠赤外領域において,世界で初めて,強磁場を印加した半導体から,平均出力がサブミリワットの遠赤外放射(テラヘルツ放射)を得ることに成功した。このテラヘルツ放射の偏光が,磁場によって大きく変化することも発見した。また,昨年度にテラヘルツ放射の実験に用いた半導体非線形ミラーに磁場を印加することにより,テラヘルツ放射の増強を実現した。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できることができるため非常に重要であるだけでなく,工業的応用においてもイメージングやセンシングなどの新たなる手法となるため,世界的にも大いに注目されている。
- b) 紫外波長可変固体レーザー:紫外,および深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10 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。この紫外,深紫外波長領域は様々な分子物質の分子科学の研究,特にオゾン層問題の研究や青色半導体レーザーの研究において必要不可欠と考えられる波長領域である。
- 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) 青色半導体レーザー: 青色で発光する窒化ガリウム系の半導体素子において精密な分光を行い,未解明の分野である発光メカニズムについて様々な知見を得た。窒化ガリウム系の半導体素子は,近年,青色半導体レーザー材料として急速に注目されてきている物質である。青色半導体レーザーにおいては,室温連続発振青紫色レーザーダイオードの寿命が1万時間を超えて製品化が間近になっているにもかかわらずその発振機構の解明には至っておらず,原点に戻って,InGaN系発光ダイオードの発光機構について,研究を進める予定である。
- e) 超高速分光:a)で述べたような強力な遠赤外放射光を用いて,様々な分子物質の超高速過渡分光を行う。現在,化 合物半導体であるInAsにおいて,清浄表面からのテラヘルツ電磁波放射の研究を,総合研究大学院大学光先導学 科松本教授と行っており,表面とテラヘルツ電磁波に関連する多くの情報を得ている。また,神戸大学富永助教授,千葉大学西川教授と溶液,及び気体に関する超高速遠赤外分光の実験を行っており,成果をあげている。
- f) 新真空紫外域光学窓材:紫外,および深紫外波長領域におけるレーザー結晶に関するノウハウを用いて,放射光に用いることが可能な新しい真空紫外領域の窓材の研究を課題研究として行っており,いくつかの新結晶の開発に成功している。

# B-1) 学術論文

Z. LIU, N. SARUKURA, M. A. DUBINSKII, R. Y. ABDULSABIROV, S. L. KORABLEVA, A. K. NAUMOV and V. V. SEMASHKO, "Tunable ultraviolet short-pulse generation from a Ce:LiCAF laser amplifier system and its sum-frequency mixing with an Nd:YAG laser," Jpn. J. Appl. Phys. 37(1A/B), L36-L38 (1998).

N. SARUKURA, H. OHTAKE, Z. LIU, T. ITATANI, T. SUGAYA, T. NAKAGAWA and Y. SUGIYAMA, "THz-radiation generation from an intracavity saturable Bragg reflector in a magnetic field," Jpn. J. Appl. Phys. 37(2A), L125-L126 (1998). Z. LIU, H. OHTAKE, N. SARUKURA, M. A. DUBINSKII, R. Y. ABDULSABIROV and S. L. KORABLEVA, "Allsolid-state tunable ultraviolet picosecond Ce<sup>3+</sup>:LiLuF<sub>4</sub> laser with direct pumping by the fifth harmonic of a Nd:YAG laser," OSA TOPS Advanced Solid-State Lasers 19, 13-15 (1998).

Z. LIU, H. OHTAKE, S. IZUMIDA, S. ONO and N. SARUKURA, "Sub-mW, short-pulse THz-radiation from femtosecondlaser irradiated InAs and its polarization and spatial properties," OSA TOPS Advanced Solid-State Lasers 19, 370-373 (1998). H. OHTAKE, Z. LIU, S. IZUMIDA, S. ONO, N. SARUKURA, T. ITATANI, T. SUGAYA, T. NAKAGAWA and Y. SUGIYAMA," All-solid-state, THz-radiation source using a femtosecond mode-locked laser with a saturable Bragg reflector in a magnetic field," OSA TOPS Advanced Solid-State Lasers 19, 367-369 (1998).

N. SARUKURA, H. OHTAKE, S. IZUMIDA and Z.LIU, "High average-power THz-radiation from femtosecond laserirradiated InAs in a magnetic field and its elliptical polarization characteristics," J. Appl. Phys. 84, 654-656 (1998).

N. SARUKURA, Z. LIU, S. IZUMIDA, M. A. DUBINSKII, R. Y. ABDULSABIROV and S. L. KORABLEVA, "Allsolid-state tunable ultraviolet sub-nanosecond laser with direct pumping by the fifth harmonic of an Nd: YAG laser," Appl. Opt. 37, 6446-6448 (1998).

Z. LIU, S. IZUMIDA, H. OHTAKE, N. SARUKURA, K. SHIMAMURA, N. MUJILATU, S. L. BALDOCHI and T. FUKUDA, "High-pulse-energy, all-solid-state, ultraviolet laser oscillator using large Czochralski-grown Ce:LiCAF crystal," Jpn. J. Appl. Phys. 37, (1998).

T. DEGUCHI, T. AZUHATA, T. SOTA, S. CHICHIBU, N. SARUKURA, H. OHTAKE, T. YAMANAKA and S. NAKAMURA, "Nanosecond pump-and-probe study of wurtzite GaN," Material Science and Engineering B 50, 180-182 (1997).

和泉田真司、小野晋吾、大竹秀幸、劉 振林、猿倉信彦、「短パルステラヘルツ電磁波集光特性の測定」、レーザー 研究 26, 551-553 (1998).

# B-2) 国際会議のプロシーディングス

N. SARUKURA, H. OHTAKE, S. IZUMIDA, Z. Liu, S. ONO and T. YAMANAKA, "Sub-mW, short-pulse THz-radiation from femtosecond-laser irradiated InAs and its polarization and spatial properties," ASSL '98, paper AMB11.

N. SARUKURA, H. OHTAKE, Z. LIU, S. IZUMIDA, S. ONO, T. YAMANAKA, T. ITATANI, T. SUGAYA, T. NAKAGAWA and Y. SUGIYAMA, "All-solid-state, THz-radiation source using a femtosecond mode-locked laser with a saturable Bragg reflector in a magnetic field," ASSL '98, paper AWB6.

N. SARUKURA, Z. LIU, H. OHTAKE, M. A. DUBINSKII, R. Y. ABDULSABIROV and S. L. KORABLEVA, "Allsolid-state tunable ultraviolet picosecond Ce<sup>3+</sup>:LiLuF<sub>4</sub> laser with direct pumping by the fifth harmonic of a Nd:YAG laser," ASSL '98, paper PD12.

- H. OHTAKE, S. IZUMIDA, Z. LIU, S.ONO and N. SARUKURA, "Intense THz radiation from femtosecond laser irradiated InAs under a high magnetic field and its polarization and spatial properties," Radiative Processes and Dephasing in Semiconductors '98, paper RTuD7.
- H. OHTAKE, Z. LIU, S. IZUMIDA, N. SARUKURA, Y. SEGAWA, T. ITATANI, T. SUGAYA, T. NAKAGAWA and Y. SUGIYAMA, "Intense THz-radiation generation from an intracavity saturable Bragg reflector in a magnetic field," Conference on Lasers and Electro-Optics '98, (Optical Society of America, Washington, D.C.,1998), paper CWF49.
- N. SARUKURA, H. OHTAKE, S. IZUMIDA, Z. LIU, S. ONO and T. YAMANAKA, "Sub-mW, short-pulse THz-radiation from femtosecond-laser irradiated InAs in a magnetic field," Conference on Lasers and Electro-Optics '98, (Optical Society of America, Washington, D.C., 1998), paper CTuB5.
- Z. LIU, H. OHTAKE, S. IZUMIDA, T. YAMANAKA, N. SARUKURA, M. A. DUBINSKII, R. Y. ABDULSABIROV and S. L. KORABLEVA," All-solid-state UV tunable picosecond Ce<sup>3+</sup>:LiLuF<sub>4</sub> laser pumped at 213 nm," Conference on Lasers and Electro-Optics '98, (Optical Society of America, Washington, D.C., 1998), paper CWF40.
- Z. LIU, H. OHTAKE, S. IZUMIDA, T. YAMANAKA, N. SARUKURA, M. A. DUBINSKII, R. Y. ABDULSABIROV and S. L. KORABLEVA, "All-solid-state tunable ultraviolet Ce activated fluoride laser systems directly pumped by the fourth and fifth harmonic of Nd:YAG lasers," Nonlinear Optics (IEEE/LEOS), Hawaii, August 10-14, 1998, paper ThC7.
- H. OHTAKE, Z. LIU, S. IZUMIDA, S. ONO and N. SARUKURA, "Spectrum control of intense THz radiation from InAs under magnetic field irradiated with stretched femtosecond laser pulses," Nonlinear Optics (IEEE/LEOS), Hawaii, August 10-14, 1998, paper WD4.
- Z. LIU, S. IZUMIDA, S. ONO, H. OHTAKE, N. SARUKURA, K. SHIMAMURA, N. MUJILATU, S. L. BALDOCHI and T. FUKUDA, "30-mJ pulse from ultraviolet laser oscillator using large Czochralski-grown Ce:LiCAF crystal," OSA Annual Meeting 1998, paper PD11.
- S. IZUMIDA, S. ONO, Z. LIU, H. OHTAKE and N. SARUKURA, "Spectrum control of THz-radiation from InAs under magnetic field irradiated with chirped pulses," OSA Annual Meeting 1998, paper PD19.
- Z. LIU, H. OHTAKE, S. IZUMIDA, T. YAMANAKA, N. SARUKURA, M. A. DUBINSKII and R. Y. ABDULSABIROV, "All-solid-state tunable ultravolet picosecond Ce:LuLiF<sub>4</sub> laser," fifth International Workshop on Femtosecond Technology, 1998, p.92.
- Z. LIU, H. OHTAKE, N. SARUKURA, M. A. DUBINSKII and R. Y. ABDULSABIROV, "Tunable Ultraviolet Short-Pulse Generation from a Ce:LiCAF master oscillator and power amplifier system," fifth International Workshop on Femtosecond Technology, 1998, p.93.
- T. ITATANI, T. IMAOKA, T. NAKAGAWA, K. MATSUMOTO, M. WAKAKI, H. OHTAKE and N. SARUKURA, "Photoconductive Switches with Antena Structures Fabricated by Using an Atomic Force Microscope," fifth International Workshop on Femtosecond Technology, 1998, p.135.
- H. OHTAKE, Z. LIU, S. IZUMIDA, T. YAMANAKA and N. SARUKURA, "High average power THz-radiation from femtosecond laser irradiated InAs under the magnetic field," fifth International Workshop on Femtosecond Technology, 1998, p.136.
- H. OHTAKE, Z. LIU, S. IZUMIDA and N. SARUKURA, "Intense THz-radiation generation from an intracavity saturable Bragg reflectior in a magnetic field," fifth International Workshop on Femtosecond Technology, 1998, p.137.

Z. LIU, H. OHTAKE and N. SARUKURA, "All-solid-state tunable ultraviolet Ce activated fluoride laser systems directly pumped by the fourth and fifth harmonic of Nd:YAG lasaer," 1998 International Photonics Conference, paper F-PO29.

H. OHTAKE, Z. LIU, S. IZUMIDA, S. ONO and N. SARUKURA, "THz radiation from InAs under magnetic field and its spectrum control," IEEE International conference on teraheltz electronics, 1998, pp. 201-203.

H. OHTAKE, Z. LIU, S. IZUMIDA, S. ONO and N. SARUKURA, "THz radiation from InAs under magnetic field and its spectrum control," The 194 th meeting of the electrochemical society, 1998, p. 999.

#### B-3) 総説、著書

猿倉信彦,講演会報告「THz電磁波の発生とその応用」,応用物理 67,728 (1998).

緑川克美、中田芳樹、藤田雅之、伊沢孝男、斉藤徳人、小山二三夫、吉村政志、森 勇介、山川考一、猿倉信彦、 玉木祐介、迫田和彰,「CLEO/IQEC'98 報告」, レーザー研究 26, 631-651 (1998).

猿倉信彦,「Ultrafast Phenomina'98 報告」, レーザー研究 26, 759-761 (1998).

大竹秀幸、猿倉信彦,「磁場による半導体からのテラヘルツ電磁波放射の増強」, レーザー研究 26, 527-530 (1998).

# B-4) 招待講演

N. SARUKURA, H. OHTAKE, Z. LIU, S. IZUMIDA and S. ONO, "Spectrum control of intense THz-radiation from InAs under magnetic field irradiated with streatched femto-second laser pulses," 1998 International Photonics Conference, December 1998.

H. OHTAKE, "Spectrum control of intense THz-radiation from InAs under magnetic field irradiated with stretched femtosecond laser pulses," International Workshop on Current Topics of Laser Technology, March 1998.

N. SARUKURA and Z. LIU, "Ultraviolet short pulse generation from an all-solid-state Ce acivated laser system," fifth International Workshop on Femtosecond Technology, February 1998.

N. SARUKURA, Z. L. LIU and H. OHTAKE, "Tunable Ultraviolet Sub-Nanosecond Pulses from All-Solid-State Laser Systems Based on Ce-ActivatedFluorides," International Conference on Lasers '98, December 1998.

猿倉信彦,「磁場による半導体からのテラヘルツ電磁波放射の増強」, FEL 研究会, 関西学院大学, 1998 年 1 月.

猿倉信彦, 「Advanced Solid State Laser'98 国際学会報告」, 第 4 回光学材料・デバイス研究会, 1998 年 3 月.

猿倉信彦,「磁場を用いた THz 電磁波の増強」, テラヘルツ電磁波放射に関する研究会, 大阪大学, 1998 年 3 月.

猿倉信彦、「磁場を用いた THz 電磁波の増強」、応用物理学会 THz 電磁波の発生とその応用」シンポジウム、1998 年3月.

猿倉信彦, 「新波長領域での極短パルスレーザーの可能性」, 平成 10 年度 KAST 研究報告会, 1998 年 6 月.

猿倉信彦,「CLEO/IQEC'98 会議報告」, 光エレクトロニクス第 130 委員会, 1998 年 6 月.

猿倉信彦, 「新波長領域での極短パルスレーザーの可能性」, 第2回光量子源専門部会, 1998年7月.

猿倉信彦, 「磁場による THz 電磁波の高出力化」, 第 1 回テラフォトニクス研究会, 1998 年 8 月 .

猿倉信彦、「新波長領域での極短パルスレーザーの可能性」、理研フォーラム、1998年8月.

猿倉信彦、「テラヘルツ電磁波の発生と医学応用」、レーザー医学会、1998年9月.

猿倉信彦、「高出力遠赤外光発生装置」,新技術フェア、1998年10月.

猿倉信彦、「磁場による半導体からのテラヘルツ電磁波放射の増強」、レーザ・量子エレクトロニクス研究会(電子情報通信学会)、1998年10月.

猿倉信彦,「新紫外波長可変固体レーザー」,第2回テラフォトニクス研究会,1998年11月.

#### B-5) 受賞、表彰

猿倉信彦, 電気学会論文発表賞(1994).

猿倉信彦, レーザー研究論文賞(1998).

和泉田真司,大幸財団学芸奨励生(1998).

劉 振林,レーザー学会優秀論文発表賞(1998).

## B-6) 学会および社会的活動

## 学会の組織委員

FST'99 実行委員会(1998-).

Ultrafast Phenomena プログラム委員(1997-).

GORDON CONFERENCE '99 INTERNATIONAL COMMITTEE(1998-).

応用物理学会プログラム委員(1997-).

電気学会光量子デバイス技術委員(1998-).

レーザー学会年次大会実行委員(1998-).

レーザー学会中部支部組織委員(1998-).

#### 学術雑誌編集委員

レーザー学会編集委員(1997-).

## B-7) 他大学での講義、客員

東京大学物性研究所客員助教授(1998.4-1998.9).

宮崎大学工学部非常勤講師(1998.10-1999.3).

理化学研究所非常勤フロンティア研究員(1996.4-).

工業技術院電子技術総合研究所非常勤研究員(1994.4-1995.3, 1998.7-1998.9).

財団法人神奈川科学技術アカデミー非常勤研究員(1998.5-).

## C) 研究活動の課題と展望

遠赤外超短パルスレーザーにおいては、その実用という点において、ミリワット級のアベレージパワーを持つテラヘルツ放射光源の開発が課題となる。現在、我々のグループでは、強磁場印加すのもとで、平均出力でサブミリワット級のテラヘルツ電磁波光源の開発に成功している。この光源を用いて、今まで非常に難しいとされていたテラヘルツ領域の時間分解分光も容易に行っており、様々な興味深い現象を発見してきているため、光による物性制御などの実現が現実味を帯びてきている。また、新たなテラヘルツ光源として、有機物結晶や磁性半導体にも探索の範囲を広げる方針である。

深紫外波長可変全固体レーザーにおいては大出力化と短波長化が当面の課題である。大出力化は励起配置や増幅 光学系に特殊構造をもたせることによって大きな進歩が見込まれ,短波長化は新たなるレーザー結晶を用いるこ とにより具現化できる。現在,ロシア,東北大学との共同研究による Ce:LiCAF 結晶を用いて,大出力紫外レー ザーの開発を行っている。この共同研究により,200 nmより短波長での大出力深紫外波長可変全固体レーザーの 実用化は,比較的早期に達成し得ると考えられている。

# 平 等 拓 範(助教授)\*)

A-1) 専門領域:量子エレクトロニクス、光エレクトロニクス、レーザー物理、非線形光学

#### A-2) 研究課題:

- a) 半導体レーザー励起マイクロチップ固体レーザーの開発研究
- b) 新型固体レーザー材料の開発研究
- c) 新しい非線形光学波長変換方式と応用の開発研究

#### A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 90 年代に入り、Yb:YAG は、レーザー励起により高性能なレーザーとなり得ることが見出された。以来、当研究室は先導的な研究を行ってきている。Yb:YAG は高出力、高効率発振が可能と言われながらも準四準位レーザーであるため、励起状態に敏感であり、高密度励起が実現されない場合は、発振効率が大きく損なわれる欠点を有する。全固体レーザーの励起光源として有用な半導体レーザーは、ビーム品質が劣悪であるため、その高密度励起光学系の設計を困難にしていた。そこでモード品質を示す量として導入されつつあるM²因子を半導体レーザー励起固体レーザーの設計に利用し最適化を図った。現在、長さ 400 μm の Yb:YAG マイクロチップ結晶から、常温で、スロープ効率 60%、CW で 3W の出力を確認している。また、蛍光幅が、10 nm と従来の Nd:YAG に比べ10 倍以上広いばかりでなく、アップコンバージョン損失が無いため上記構成で 30 nm に及ぶ広帯域波長可変動作を確認した。このことは、高平均出力の超短パルスレーザーとしての可能性を示唆するものと考えている。
- b) 日本に伝統的なセラミックスのフレキシブルな材料設計の可能性を利用した新型固体レーザー材料について開発研究を行っている。YAG単結晶では不可能であった、4 at.%以上のNd高濃度添加YAGセラミックスを開発した。さらにマイクロチップレーザーに適用し、従来のNd:YAG単結晶の4倍の出力を得ることに成功した。一方、固体レーザーの励起に伴う発熱は、材料の機械的な歪みを引き起こし、破壊に至るばかりでなく、それ以前に熱複屈効果や熱レンズ効果によるビーム品質の劣化や出力低下が生ずるためレーザー出力を制限してきた。最近、熱効果を緩和できる複合材料によるレーザーの高性能化をYb:YAGやEr:ガラスレーザーにおいて実証してきたが、光学接着剤を用いていたため制約があった。今回は、セラミックスのフレキシブルな特性を用いることにより原子レベルでの材料の複合化に成功した。今後、この新材料の特性を詳細に調ベレーザー共振器に適用する予定である。
- c) 今回開発した共振器内部 SHG型 Yb:YAGマイクロチップレーザーでは,数100 mW 級の単一周波数青緑色発生が得られる。また,514.8 ~ 525.7 nm と 10.9 nm (12.4 THz) にわたる波長可変特性も確認した。この応用として,Fe:LiNbO3結晶のフォトリフラクティブ効果を用いた全固体型光メモリ方式を検討し,波長多重記録に成功した。同一空間への多重記録が可能な波長多重型ホログラフィック体積メモリは,次世代の超高密度光メモリとして,その研究,開発が精力的に進められている。また,上記手法では,バルク光学結晶による非線形波長変換を試みたが,これには幾つかの致命的な制限がある。近年開発された擬似位相整合法では,位相整合が不可能とされていた材料においても非線形波長変換を可能にする。例えば天然に豊富に存在する水晶は,安定で堅牢であるだけでなく200 nm 以下の短波長領域までの透過特性を有する。しかし,位相整合が不可能であっただけでなく,自発分極を持たないため擬似位相整合LiNbO3などで行われてきた電界ポーリングも不可能である。これに対し,応力に

よる擬似位相整合法を検討し、その可能性を見出した。今後も、従来は発生が不可能または困難とされてきた紫 外域や中・遠赤外域光の高効率発生や CW 発生法を目指した新しい非線形波長変換方式を検討する予定である。

## B-1) 学術論文

- T. TAIRA, J. SAIKAWA, T. KOBAYASHI and R. L. BYER, "Modeling of end-pumped quasi-three-level lasers by using a M<sup>2</sup> factor and cw operation of tunable Yb:YAG miniatur lasers," OSA TOPS on Advanced Solid-State Lasers 10, 189-191 (1997).
- T. TAIRA, W. M. TULLOCH and R. L. BYER, "Modeling of quasi-three-level lasers and operation of CW Yb:YAG lasers," Appl. Opt. 36, 1867-1874 (1997).
- T. TAIRA, J. SAIKAWA, T. KOBAYASHI and R. L. BYER, "Diode-pumped tunable Yb:YAG laser at room temperature: Modeling and experiment," IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electrons 3, 100-104 (1997).
- T. ITO, T. TAIRA and T. KOBAYASHI, "Q-switching and mode selection of coupled-cavity Er, Yb:glass lasers," IJpn. J. Appl. Phys. 36, L206-L208 (1997).
- Y. YAMAMOTO, T. Ashida, S. KURIMURA and Y. UESU, "Two-dimensional observation of the Maker fringe and its application to the poling state evaluation of ferroelectric domains," Appl. Opt. 36, 602-605 (1997).
- S. KURIMURA and Y. UESU, "Application of the second harmonic generation microscope to nondestructive observation of periodically-poled ferroelectric domaines in quasi-phase-matched wavelength converters," J. Appl. Phys. 81, 369-375 (1997).
- Y. UESU, S. KURIMURA and Y. YAMAMOTO, "Non destructive observations of the 180° ferroelectric domain using the nonlinear optical microscope," Ferroelectronics 191, 135-140 (1997).
- 栗村、上江洲、「分極反転光素子の光第二高調波による非破壊観察」, 光学 26, 437-443 (1997).
- T. ITO, T. TAIRA and T. KOBAYASHI, "Output characteristics of coupled-cavity Q-switched Er,Yb:Glass lasers," The Review of Laser Engineering 26, 272-276 (1998).
- T. TAIRA, J. SAIKAWA, E. YAMAGUCHI, T. KOBAYASHI and R. L. BYER, "Intracavity frequency doubled Yb:YAG minature laser," OSA TOPS on Advanced Solid-State Lasers 19, 119-121 (1998).
- T. TAIRA, N. PAVEL, M. FURUHATA, M. OHTAKA, T. KOBAYASHI and H. ITO, "Design of longitudinally-pumped solid-state lasers by using M<sup>2</sup> pump-beam factor," OSA TOPS on Advanced Solid-State Lasers 19, 411-414 (1998).
- T. TAIRA, A. IKESUE and K. YOSHIDA, "Diode-pumped Nd: YAG ceramic lasers," OSA TOPS on Advanced Solid-State Lasers 19, 430-432 (1998).
- N. PAVEL M. FURUHATA and T. TAIRA, "High-efficiency longitudinally-pumped miniature Nd:YVO4 laser," Optics & Laser Tech. 30, 275-280 (1998).
- S. KURIMURA, R. BATCHKO, J. MANSELL, R. ROUTE, M. FEJER and R. BYER, "Twinned quartz for quasiphasematched ultraviolet generation," CNOM Annual Report A4 (1998).

# B-2) 国際会議のプロシーディングス

- T. TAIRA, J. SAIKAWA, T. KOBAYASHI and R. L. BYER, "Diode-pumped tunable Yb: YAG miniature lasers at room temperature," OSA Topical meeting on Advanced Solid-State Lasers '97 TuC3, 174-176 (1997).
- T. ITOH, T.TAIRA and T. KOBAYASHI, "Diode-pumped coupled-cavity Q-switched Er,Yb:glass microchip lasers,"

Conference on Lasers and Electro-Optics CLEO '97 CThL24, 371 (1997).

T. TAIRA, N. PAVEL, M. FURUHATA, M. OHTAKA, T. KOBAYASHI and H. ITO, "M<sup>2</sup> factor method for design of longitudinally pumped solid-state lasers," OSA Topical meeting on Advanced Solid-State Lasers '98, Coeur d'Alene, Idaho, USA, 2-4 Febrary 1998 AMB13, 62-64 (1998).

T. TAIRA, J. SAIKAWA, E. YAMAGUCHI, T. KOBAYASHI and R. L. BYER, "Single longitudinal mode oscillation in the frequency doubled Yb:YAG miniature laser," OSA Topical meeting on Advanced Solid-State Lasers '98, Coeur d'Alene, Idaho, USA, 2-4 Febrary 1998 AME14, 151-153 (1998).

T. TAIRA, A. IKESUE and K. YOSHIDA, "Diode-pumped tunable Yb: YAG miniature lasers at room temperature," OSA Topical meeting on Advanced Solid-State Lasers '98, Coeur d'Alene, Idaho, USA, 2-4 Febrary 1998 AWB7, 290-292 (1998).

K. YOSHIDA, T. TAIRA and A. IKESUE, "Continuous-wave diode-pumped Nd3+:YAG ceramics laser" CLEO/EUROPE-EQEC'98, Glasgow, Scotland, UK, 14-18 September 1998 CWF17, 167 (1998).

T. TAIRA, M. FURUHATA, T. KOBAYASHI, A. YOKOO and T. KOMATSU, "Miniature parametric oscillators for Qswitched microchip lasers," 4 th International Conference on Organic Nonlinear Optics, Chitose, Japan, 12-15 October 1998 P-109, 292-295 (1998).

## B-3) 総説、著書

平等拓範他、「固体レーザー」、小林喬郎編、学会出版センター社、pp. 11-52 (1997)。

栗村 直他,「光デバイス精密加工ハンドブック」,板生清 他編,オプトロニクス社,pp. 490-496 (1998).

栗村 直他,「光サイエンス辞典」,オプトロニクス社,pp. 18-19,66,74,81-82,105,175-176,217,233-234,337 (1998).

和田智之、増田 久、平等拓範,「第 12 回 Advanced Solid State Lasers トピカルミーティング報告」,レーザー研 **究 25**, 247-253 (1997).

浅井和弘、平等拓範,「Advanced Solid-State Lasers Twelfth Topical Meeting」, オプトニューズ 2, 25-26 (1997).

平等拓範,「半導体レーザ励起 Yb: YAG レーザ」, 光技術コンタクト 35, 682-690 (1997).

平等拓範、小林喬郎,「マイクロチップレーザー」,オプトロニクス 193, 63-70 (1998).

平等拓範,「レーザービーム品質測定の基礎」, レーザー研究 26, 723-729 (1998).

平等拓範,「マイクロチップ固体レーザー」, レーザー研究 26, 847-854 (1998).

## B-4) 招待講演

S. KURIMURA, "QPM visible light generation," CNOM meeting, Stanford (USA), September 1997.

平等拓範、「LD 励起ミニチュア Yb:YAG レーザーの高機能化」, レーザー学会研究会, 東京, 1997 年 12 月.

平等拓範,「Advanced Solid-State Laser Conference 会議報告」, レーザー学会研究会, 大阪, 1998 年 3 月.

平等拓範,「環境計測ライダーのための固体レーザー」, 微小光学研究会, 東京, 1998年7月.

平等拓範、「小型高輝度固体レーザー」、理研フォトダイナミクス公開フォーラム、仙台、1998年8月.

平等拓範, 「セラミック Nd: YAG レーザー」, テラフォトニクス研究会, 仙台, 1998 年 10 月.

## B-5) 受賞、表彰

栗村 直, レーザー顕微鏡研究会優秀賞(1996).

斎川次郎他, 応用物理学会北陸支部発表奨励賞(1998).

## B-6) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

平等拓範,レーザー学会レーザー素子機能性向上に関する専門委員会幹事(1997-).

平等拓範,電気学会高機能全固体レーザと産業応用調査専門委員会幹事(1998-)

栗村 直,日本光学会論文抄録委員会委員(1997-1998)

栗村 直,応用科学会常任評議委員(1997-)

栗村 直,科学技術庁振興調整費自己組織化作業分科会委員(1997-)

科学研究費の研究代表者、班長等

平等拓範,基盤 B (2) 展開研究 (No. 10555016) 研究代表者(1998-).

## C) 研究活動の課題と展望

結晶長が1mm以下のマイクロチップ固体レーザーの高出力化,高輝度化,多機能化と高性能な非線形波長変換 方式の開発により従来のレーザーでは困難であった、いわゆる特殊な波長領域を開拓することを目指している。こ のため新レーザー材料の開発,新レーザー共振器の開発を行う。さらに,マイクロチップ構造に適した発振周波 数の単一化,波長可変化,さらに短パルス化についても検討したい。この様なレーザーは多様な非線形波長変換 を可能にする。今後,従来のバルク結晶を用いた波長変換の限界を検討するとともに,複屈折性を用いた位相整 合法では不可能であった材料に非線形位相整合を発現できる擬似位相整合法による非線形波長変換の研究開発を 進めたい。近い将来,高性能の新型マイクロチップ固体レーザーや新しい非線形波長変換方式の開発により,中・ 遠赤外域や紫外域光の高効率発生や CW 発生などが実現されるものと期待される。

\*)1998年2月16日着任

## 分子物質開発研究センター

# 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ブ有機ポリマーの開発
- e) 単一分子導線の設計
- f) 有機電子移動反応の研究

## A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 新しいドナーおよびアクセプター分子の合成:1,2,5-チアジアゾール,1,3-ジチオールなどのヘテロ環を有する新規なドナーおよびアクセプター分子を合成した。これらの中にはヘテロ原子の相互作用で特異な分子集合体を形成するものや,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- アクセプター系分子を設計合成し, 単一成分での高い電導性やホール効果等の興味ある物性を見つけた。
- d) 小さなバンドギャップ有機ポリマーの開発: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) 単一分子導線の設計:低エネルギーギャップ型の分子導線の創出を目指し,主鎖構造の剛直化,絶縁化および構造ユニットの可溶化を行っている。
- f) 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-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. URUICHI, K. YAKUSHI, Y. YAMASHITA and J. QIN, "Charge-transfer Salts of M(mnt)<sub>2</sub>(M=Ni, Pd, Pt, Au) with BDNT: Ferromagnetic Interactions in Conductive (BDNT)<sub>2</sub>-[Ni(mnt)<sub>2</sub>]," *J. Mater. Chem.* **8**, 141-146 (1998).
- **K. ONO, A. ADACHI, K. OKITA, M. GOTO and Y. YAMASHITA**, "Terphenyl and Poly(p-phenylene) Derivatives Containing Fused 1,2,5-Thiadiazole Units," *Chem. Lett.* 545-548 (1998).
- **K. SUZUKI, M. TOMURA and Y. YAMASHITA**, "New Electron Acceptors Containing Thieno[3,4-b]pyrazine Units," *J. Mater. Chem.* **8**, 1117-1119 (1998).
- Y. YAMASHITA, M. TOMURA, M. B. ZAMAN and K. IMAEDA, "Synthesis and Properties of Novel Tetrathiafulvalene Vinylogues," *Chem. Commun.* 1657-1658 (1998).

## B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. YAMASHITA, S. TANAKA and M. TOMURA, "Novel Donor-Acceptor Compounds Showing Small HOMO-LUMO Gaps," Proceeding of the 9th International Symposium on Novel Aromatic Compounds, 33 (1998).

M. TOMURA, S. TANAKA and Y. YAMASHITA, "Control of Structure and Physical Properties in Novel TTF Vinylogufes," Proceeding of the 9th International Symposium on Novel Aromatic Compounds, 56 (1998).

#### B-3) 総説、著書

Y. YAMASHITA and M. TOMURA, "Highly Polarized Electron Donors, Acceptors and Donor-Acceptor Compounds for Organic Conductors," J. Mater. Chem. 8, 1933-1944 (1998).

## B-4) 招待講演

山下敬郎,「分極構造を有するドナー,アクセプターおよびドナー-アクセプター型分子」,構造有機化学夏の学 校,福山,1998年8月.

山下敬郎,「新規な拡張共役系ドナーおよびアクセプター分子の開発」,日本化学会秋季年会,松山,1998年9月. Y. YAMASHITA, "Preparation and Properties of Novel TTF Vinylogues," The 6th Japan-China Joint Symposium, Okazaki (Japan), October 1998.

山下敬郎、「新規なドナーおよびアクセプター分子に基づく有機導電体の開発」、日本化学会東海支部愛知地区講 演会, 名古屋, 1997年11月.

## B-5) 受賞、表彰

山下敬郎, 有機合成化学奨励賞(1988).

# 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).

有機合成化学協会東海支部幹事(1995-).

# 学術雑誌編集委員

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

## B-7) 他大学での講義、客員

岡山大学理学部,「有機機能化学」,1998年10月26日 - 27日.

## 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。

#### 浩(助教授)<sup>\*)</sup> 藤井

A-1) 専門領域:生物無機化学、物理化学

#### A-2) 研究課題:

- a) ヘム酵素高原子価反応中間体の電子構造と反応性の研究
- b) 金属イオンで活性化された小分子の電子構造と反応性の研究
- c) ヘムオキシゲナーゼによる酸素活性化およびヘム代謝機構の研究

#### A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ペルオキシダーゼ,カタラーゼ,チトクロームP-450などのへム酵素はその反応中にCompoundIと呼ばれる 反応中間体を生成する。Compound I はこれら酵素の共通の反応中間体であるにもかかわらず、その反応性は多様 である。我々は、Compound I の電子構造と反応性の関わりを解明するため、低温で安定に生成するモデル錯体の 構築を行った。これまで酵素由来の配位子をもつモデル錯体は,配位子の還元力のため合成されていなかった。 我々は,酸化剤やアニオンの種類を工夫することにより,還元をおさえ,ペルオキシダーゼ,カタラーゼの Compound Iのモデル錯体を初めて合成した。合成された錯体は - 80度以下で安定に存在し、その電子構造をNMR により解明することに成功した。
- b) 金属イオンに配位した小分子(酸素,窒素など)は,配位する金属イオンの種類,配位子,構造によりその反応 性を大きく変化させる。このような多様な反応性を支配する電子構造因子がなにかを解明するため,磁気共鳴法 により研究を行った。とりわけ金属イオンやそれに配位した小分子を磁気共鳴法により直接観測して,電子構造 と反応性の関わりを検討した。銅一酸化炭素錯体の63Cu-NMRの測定を行った結果,極めてシャープなシグナル を観測することができた。その化学シフトは,銅イオンから一酸化炭素への電子の流れ込みを反映することがわ かり, 化学シフトから小分子の活性化を測定できることを示した。また, ヘム酵素シアン体の13C-NMR を測定し た結果,はじめてへム酵素由来のシアンの13C-NMRシグナルの観測に成功した。化学シフトを検討した結果,酵 素が作る反応場を解析する手法になることがわかった。
- c) ヘムオキシゲナーゼは,肝臓,脾臓,脳などに多く存在し,ヘムを代謝する酵素である。肝臓,脾臓の本酵素は, 胆汁色素合成に関与し、脳に存在する本酵素は情報伝達に関与していると考えられている。本酵素の研究は、こ れら臓器から単離される酵素量が少なく,その構造,反応など不明な点を多く残している。最近,本酵素は大腸 菌により大量発現することができるようになり,種々の物理化学的測定が可能になった。本研究では,大腸菌発 現の可溶化酵素と化学的に合成したヘム代謝中間体を用いて本酵素による酸素の活性化およびヘムの代謝機構の 研究を行っている。ヘムをコバルトポルフィリンに置換した酵素複合体のEPRスペクトルから,本酵素の活性中 心では配位した酸素がタンパク質の交換性プロトンと水素結合を形成していることを明らかにした。また,本酵 素と酸素,一酸化炭素との結合過程を研究した結果,本酵素はヘモグロビンやミオグロビンと異なり,酸素に対 する親和性が特に高いことが明らかとなった。

## B-1) 学術論文

H. FUJII, T. YOSHIMURA and H. KAMADA, "Imidazole and p-Nitrophenolate Complexes of Oxo Iron(IV) Porphyrin  $\pi$ -Cation Radical as Models for Compounds I of Peroxidases and Catalases," Inorg. Chem. 36, 6142 (1997).

C. T. MIGITA, K. M. MATERA, M. IKEDA-SAITO, J. S. OLSON, H. FUJII, T.YOSHIMURA, H. ZHOU and T. YOSHIDA, "The Oxygen and Carbon Monoxide Reactions of Heme Oxygenase," J. Biol. Chem. 273, 945 (1998).

K. ISHIKAWA, K. M. MATERA, H. ZHOU, H. FUJII, M. SATO, T. YOSHIMURA, M. IKEDA-SAITO and T. YOSHIDA, "Idenfication that Histidine 45 is the Axial Heme Iron Ligand of Heme Oxygenase-2," J. Biol. Chem. 273, 4317 (1998).

M. NAKAMURA, T. IKEUE, H. FUJII, T. YOSHIMURA and K. TAJIMA, "Electron Configuration and Spin Distribution in Low-Spin (meso-Tetraalkylporphyrinate)iron(III) Complexes Carrying One or Two Orientaionally Fixed Imidazole Ligands," Inorg. Chem. 37, 2405 (1998).

S. IMAI, K. FUJISAWA, T. KOBAYASHI, N. SHIRASAWA, H. FUJII, T. YOSHIMURA, N. KITAJIMA and Y. MORO-OKA, "63Cu-NMR Study of Copper(I)-Carbonyl Complexes with Various Hydrotris(pyrazolyl)borates: Correlation between <sup>63</sup>Cu Chemical Shifts and CO Stretching Vibrations," *Inorg. Chem.* 37, 3066 (1998).

E. C. WILKINSON, Y. DONG, Y. ZANG, H. FUJII, R. FRACZKIEWICZ, G. FRACZKIWICZ, R. S. CZERNUSZEWICZ and L. QUE, JR., "Raman Signature of the Fe<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 'Diamond' Core," J. Am. Chem. Soc. 120, 955 (1998).

H. FUJII, Y. DOU, H. ZHOU, T. YOSHIDA and M. IKEDA-SAITO, "Cobalt Porphyrin Heme Oxygenase Complex. EPR Evidences for the Distal Heme Pocket Hydrogen Bonding," J. Am. Chem. Soc. 120, 8251 (1998).

## B-4) 招待講演

藤井 浩,「Heme Oxygenase の構造と反応機構」,第4回東京酸素フォーラム,慶應義塾大学,東京,1998年3月.

## C) 研究活動の課題と展望

これまで生体内の金属酵素の構造と機能の関わりを,酵素反応中間体の電子構造から研究したきた。金属酵素の 機能をより深く理解するためには、反応中間体の電子状態だけでなく、それを取り囲むタンパク質の反応場の機 能を解明することも重要であると考える。これまでの基礎研究で取得した知見や手法を活用し、酵素タンパクの つくる反応場の特質と反応性の関係を解明していきたいと考える。さらにこれらの研究成果を基礎に,遺伝子組 み替えによるアミノ酸置換の手法を用いて,金属酵素の機能変換および新規金属酵素の開発を行いたい。

\* )1998年3月1日着任

# 永 田 央(助教授)<sup>\*)</sup>

A-1) 専門領域:有機化学、錯体化学

## A-2) 研究課題:

- a) 金属錯体およびポルフィリンを用いた光合成モデル化合物の合成
- b) 電子移動・プロトン移動を利用した触媒反応の開発

## A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 光合成酸素発生部位のモデル化合物としてのマンガン二核錯体の合成を行った。2 つのマンガンイオンを適切な 距離をおいて固定する目的で,二核化配位子をいくつか合成して錯体生成を試み,ターピリジン誘導体を用いた 場合に安定で結晶性に優れた錯体が得られることがわかった。二核化配位子と塩化物イオンが配位したマンガン 二核錯体についてX線構造を得た。
- b) ターピリジンとカテコールを分子内で結んだ新しい配位子を設計・合成し,その金属錯体の合成を行った。

## B-1) 学術論文

**H. IIKURA and T. NAGATA**, "Structural Variation in Manganese Complexes: Synthesis and Characterization of Manganese Complexes from Carboxylate-containing Chelating Ligands," *Inorg. Chem.* **37**, 4702-4711 (1998).

## C) 研究活動の課題と展望

これまで光励起電子移動の制御を目標にしてきた光合成モデル化合物の研究は今や新しい時代を迎え,今後は電子移動を用いた化学反応への展開が重要な目標となろう。我々の研究グループでは,光励起電子移動と化学反応を効率よく結び付けるために必要な分子設計・反応制御について今後取り組んでいく予定である。この中に含まれる研究課題としては,光励起電子移動それ自体の研究に加えて,電子移動によって駆動される触媒反応の開発・複数の酸化還元系を分子レベルで組み合わせるための設計指針の確立・電子の流れとプロトンの流れの分子レベルでの制御,などが挙げられる。有機合成を用いた複雑分子の合成を主要な武器にして,これらの困難な課題の解決に取り組んでゆきたい。

\*)1998年3月16日着任

# 鈴 木 敏 泰(助教授)<sup>\*)</sup>

A-1) 専門領域:有機合成化学

## A-2) 研究課題:

- a) テルル原子を含有した新規有機伝導体の開発
- b) 新規フラーレン化合物の開発
- c) アモルファス性有機電子輸送材料の開発

#### A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) これまでの分子伝導体の開発では,伝導電子を発生させるために複数の分子あるいはイオン間の電荷移動現象を 用いている。したがって、金、銅、アルカリ金属等に相当する単一組成の分子性金属は未だ存在しておらず、単 一中性分子の結晶で金属状態を実現することは長い間化学者の大きな目標であった。本研究の目標は中性分子の 金属結晶の実現である。今年度は,テルル原子を含有した新規電子供与体を設計し,その前駆体である臭素化合 物の合成を行った。テルルはイオウやセレンに比べサイズが大きく ,Te-Te間の強い分子間相互作用により ,無機 物と有機物の中間的な電子物性が期待される。
- b) C60 は様々な反応剤による付加反応が可能であり、その表面上に任意の官能基を導入することができる。中でも興 味深いのは,付加した官能基に不飽和結合が含まれ,その 電子がC60の 電子系と相互作用する場合である。こ れらの例の中で,光による分子内転移反応を起こすものが幾つか知られている。我々は,C60上に不飽和結合を導 入するために,アセチレン類と $C_{60}$ の反応を試みている。アセチレンジカルボン酸ジメチルより合成された $Pd[C_4]$  $(COOCH_3)_4]$ は $C_{60}$ と反応し [4+2]型の付加体 $C_{60}[C_4(COOCH_3)_4]$ を与えた。このものは光照射によりビスフレロイ ド体へ異性化し, さらに, 酸素との反応によりジケトン体  $C_{60}O_2[C_4(COOCH_3)_4]$ に変換した。また, X 線構造解析 を目的として,ジケトン体の遷移金属錯体(Pd,Pt,Ir)の合成も行った。
- c) 有機エレクトロルミネッセンス素子は,液晶に続く次世代のフラットディスプレーとして注目されている。これ らを構成するホール輸送材料や発光材料に関しては,すでに多くの高性能な分子材料が知られている。一方,金 属電極から発光層への電子移動を滑らかにする役割の電子輸送材料は、ほとんど選択の余地がないほどに少ない。 このため, 我々はデンドリマー構造を持つフッ化フェニレン化合物を設計し, そのうち  $C_{36}F_{26}$  および  $C_{60}F_{42}$  の合 成を行った。これらの分子は平面性が悪く,昇華性に優れているため, $C_{60}F_{42}$ (分子量:1518)のような比較的大き な分子の真空蒸着も可能であった。これらを電子輸送層として用いた素子では,フッ素の電子吸引性により分子 の電子親和力が大きくなり、金属電極からの電子の注入障壁が低くなった。これにより素子の駆動電圧の低下と 発光効率の上昇が見られた。特に $C_{60}F_{42}$ は,最も頻繁に使用されているアルミニウムキノリン錯体(Alq)に匹敵 する優れた電子輸送性を備えていることがわかった。

## C) 研究活動の課題と展望

次世代の有機電子材料として、「単一分子素子」や「ナノワイヤー」等のキーワードで表される分野に注目が集まり 始めている。SPM 技術の急速な発展により,単一分子メモリ,単一分子発光素子,単一分子ダイオード,単一分 子トランジスタなどの基礎研究が現実的なものになってきた。一個の分子に機能をもたせるためには,従来のバ ルクによる素子とは異なった分子設計が必要である。計測グループとの密接な共同研究により,この新しい分野 に合成化学者として貢献していきたい。現在行っている有機EL素子のための電子輸送材料開発は、単一分子素子 研究の基礎知識として役立つものと信じている。

\*)1998年1月1日着任

# 桑原大介(助手)

A-1) 専門領域:核磁気共鳴

## A-2) 研究課題:

a) マジック角試料回転下で双極子相互作用を測定する

## A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 固体状態の試料をマジック角(MAS)で回転させながら NMR 測定を行うと、溶液のスペクトルのような高分解 能スペクトルが得られるが、その代償として、固体物質のミクロな情報に関する貴重な情報を与える化学シフト 異方性や磁気双極子相互作用が失われてしまう。我々は、MAS条件下で失われた双極子相互作用を「MAS のも とで高分解能スペクトルとともに」測定する新しい手法を開発した。それを用いることにより、蛋白質中の炭素 窒素核間距離の測定が、窒素の同位体置換を行わなくても可能となった。

## B-1) 学術論文

D. KUWAHARA, T. NAKAI and S. MIYAJIMA, "Two-Dimensional NMR measurements of heteronuclear dipolar powder spectra using the chemical-shift-anisotropy recovery technique," Chem. Phys. Letts. 291, 244-248 (1998).

## C) 研究活動の課題と展望

NMR の発展は次々と発表される新手法によってもたらされた。そして、今までに開発されたほとんどの手法は、 スピン系のハミルトニアンを構成する2つの部分、スピンパートと空間パートのどちらかを manipulate するもの であった。我々は、その両方のパートを同時に manipulate して自分達の望むハミルトニアンを生み出すことので きる "Hybrid NMR" の完成を究極の目標としている。

# 装置開発室

# 渡 辺 三千雄(助教授)

A-1) 専門領域:装置開発

# A-2) 研究課題:

- a) 超高真空技術
- b) セラミックスの精密加工技術

## A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 多目的超高真空試験装置および超高真空摩擦試験機の試作により,装置開発室の超高真空技術力は向上した。超高真空摩擦試験により各種の超高真空用潤滑膜の特徴を評価した。
- b) 装置開発室でセラミックスの精密加工を可能とするため,設備・文献等の調査を実施した。今後,加工体制を作り上げる予定。
- 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:量子エレクトロニス、レーザー分光

## A-2) 研究課題:

- a) 短波長域フェムト秒フォトンエコー
- b) 放射光とレーザーを組み合わせた2光子分光
- c) レーザー蒸発法によるカーボンナノチューブの生成

## A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 紫外~真空紫外波長域に共鳴準位のある物質においてフェムト秒領域の位相緩和時間を測定するシステムを構築 中である。
- b) 放射光およびそれと同期したパルスレーザー光を同時に用い ,BaF2などアルカリハライドにおいて2光子分光を 行った。そのための高感度測定システムの開発も行った。
- c) 金属添加グラファイト原料へのパルス Nd:YAG レーザー光の照射により, 単層カーボンナノチューブの効率的な 生成を行った。その生成条件および各種物性を明らかにした。

#### B-1) 学術論文

- S. ASAKA, S. NAKANISHI, H. ITOH, M. KAMADA, M. WATANABE, O. ARIMOTO, S. FUJIWARA, T. TSUJIBAYASHI and M. ITOH, "Time-Gated Photon Counting Method for Two-Photon Spectroscopy Using Synchrotron Radiation and Laser," Rev. Sci. Instrum. 69, 1931-1933 (1998).
- S. BANDOW, S. ASAKA, Y. SAITO, A. M. RAO, L. GRIGORIAN, E. RICHTER and P. C. EKLUND, "Effect of the Growth Temperature on Diameter Distribution and Chirality of Single-Wall Carbon Nanotubes," Phys. Rev. Lett. 80, 3779-3782 (1998).
- S. BANDOW, S. ASAKA, X. ZHAO and Y. ANDO, "Purification and Magnetic Properties of Carbon Nanotubes," Appl. Phys. A 67, 23-27 (1998).

## B-2) 国際会議のプロシーディングス

- O. ARIMOTO, S. FUJIWARA, T. TSUJIBAYASHI, M. WATANABE, M. ITOH, S. NAKANISHI, H. ITOH, S. ASAKA and M. KAMADA, "Combination of Synchrotron Radiation and Laser for Two-Photon Spectroscopy of BaF2," J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 92, 219-223 (1998).
- M. KAMADA, S. HIROSE, S. ASAKA, T. TSUJIBAYASHI, M. WATANABE, O. ARIMOTO, S. FUJIWARA, H. ITOH, S. NAKANISHI and M. ITOH, "Combined System of SR and Laser for Solid-State Researches," J. Synchrotron Radiation **5**, 1035-1037 (1998).

## C) 研究活動の課題と展望

a)については位相ロック型干渉計を構築し、高精度測定を目指す予定である。b)については2光子分光以外の分光 手法を用いて結晶内の動的過程を明らかにしうる手法を開発予定である。

# 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) 放射光科学のための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,研究をおこなっている。
  - 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。Ba ハライドや Cs ハライドについて,光電子分光と発光分光の同時測定により,その遷移の帰属を確認し,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目指して研究をおこなっている。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出した。
- 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O2/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出した。
  - また,低温での高分解能光電子分光装置を立ち上げ,半導体表面上の分子吸着状態を調べるとともに,光電子とイオンの同時計測により,内殼励起に伴うイオン脱離機構を解明した。
- d) 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,接続した時には,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,レーザーと放射光の組み合わせによる2光子実験をBaF2結晶で成功させ,励起状態の構造の詳細を明らか にした。

#### B-1) 学術論文

M. ITOH, M. KAMADA and N. OHNO, "Temperature Dependence of Auger-Free Luminescence in Akai and Alkaline-Earth Halides," J. Phys. Soc. Jpn. 66, 2502-2512 (1997).

E. FELDBACH, M. KAMADA, M. KIRM, A. LUSHCHIK, CH. LUSHCHIK and I. MARTINSON, "Direct excitation of Tl<sup>+</sup> impurity ions by hot photoelectrons in wide-gap crystals," Phys. Rev. B 56, 13908-13915 (1997).

N. TAKAHASHI, S. TANAKA, M. ICHIKAWA, Y. Q. CAI and M. KAMADA, "Photoelectron spectroscopic study of coadsorbed states of Cs and O on GaAs(100)," J. Phys. Soc. Jpn. 66, 2798-2804 (1997).

K. MASE, M. NAGASONO, S. TANAKA, M. KAMADA, T. URISU and Y. MURATA, "Development of electron-ion coincidence spectroscopy for the study of surface dynamics combined with synchrotron radiation," Rev. Sci. Instrum. 68, 1703-1707 (1997).

J.-W. KIM, S. KIM, J.-M. SEO, S. TANAKA and M. KAMADA, "Surface core-level shift of InSb(111)-2×2," Phys. Rev. B 54, 4476-4480 (1996).

J.-W. KIM, S. KIM, J.-M. SEO, S. TANAKA and M. KAMADA, "Angle-resolved photoemission of InSb(111)-2×2," J. Phys. Condensed Matter 8, 4189-4193 (1996)

N. TAKAHASHI, S. TANAKA, M. ICHIKAWA, S. OHARA, Y. FUJII, K. NAKANISHI and M. KAMADA, "Construction of a compact spin- and angle-resolved photoelectron spectrometer," J. Jpn. Appl. Phys. 35, 6314-6321 (1996).

S. ASAKA, S. NAKANISHI, H. ITOH, M. KAMADA, M. WATANABE, O. ARIMOTO, S. FUJIWARA, T. TSUJIBAYASHI and M. ITOH, "Time-gated photon counting method for two-photon spectroscopy using synchrotron radiation and laser," Rev. Sci. Intrum. 69, 1931-1933 (1998).

M. ITOH, T. SHIOKAWA, K. SAWADA and M. KAMADA, "Ultraviolet Photoemission Studies of Valence Bands in Lead Halides," J. Phys. Soc. Jpn. 67, 2140-2141 (1998).

M. ITOH, M. KAMADA and N. OHNO, "Temperature Dependence of Auger-Free Luminescence in Alkali and Alkaline-Earth Halides," J. Phys. Soc. Jpn. 66, 2502-2512 (1997).

E. FELDBACH, M. KAMADA, M. KIRM, A. LUSHCHIK, CH. LUSHCHIK and I. MARTINSON, "Direct excitation of Tl<sup>+</sup> impurity ions by hot photoelectrons in wide-gap crystals," Phys. Rev. B 56, 13908-13915 (1997).

## B-2) 国際会議のプロシーデイングス

M. ITOH, K. SAWADA, H. HARA, N. OHNO and M. KAMADA, "Phonon broadening of line widths of Auger-free luminescence in wide-gap ionic crystals," J. Luminescence 72-74, 762-764 (1997).

M. KAMADA and S. HIROSE, "Laser-Induced Fluorescence Study of Fast Desorption of Ground-State K Atoms from Potassium Halides Excited by Synchrotron Radiation," Surface Science 390, 194-198 (1997).

S. TANAKA, K. MASE, M. NAGASONO and M. KAMADA, "Desorption of H ions from water chemisorbed on Si(100) by O 1s excitation — an Auger electron-photoion coincidence spectroscopy study," Surface Science 390, 204-208 (1997).

- S. HIROSE and M. KAMADA, "Time and Temperature Dependence of Photo-Stimulated Desorption of Alkali Atoms from Alkali Halides," J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena 92, 109-113 (1998).
- S. TANAKA, M. MASE, M. NAGASONO and M. KAMADA, "Study of ion desorption induced by the core-level excitation on the CaF<sub>2</sub>(111) surface," J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena 92, 119-122 (1998).
- O. ARIMOTO, S. FUJIWARA, T. TSUJIBAYASHI, M. WATANABE, M. ITOH, S. NAKANISHI, H. ITOH, S. ASAKA and M. KAMADA, "Combinational Use of Synchrotron Radiation and Laser for Two-Photon Spectroscopy of BaF2," J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena 72, 219-223 (1998).
- M. SAKURAI, H. OKAMOTO, M. WATANABE, T. NAMBA, S. KIMURA and M. KAMADA, "Upgraded IR beamline at UVSOR," J. Synchrotron Radiation 5, 578-580 (1998).
- M. KAMADA, H. HAMA, T. KINOSHITA and N. KOSUGI, "Present status of the UVSOR facility -1997-," J. Synchrotron Radiation 5, 1166-1169 (1998).
- M. KAMADA, M. HASUMOTO, N. MIZUTANI, T. HORIGOME, S. KIMURA, S. TANAKA, K. FUKUI and K. SAKAI, "Construction and performance test of SGM-TRAIN at UVSOR," J. Synchrotron Radiation 5, 766-768 (1998).
- S. NAKANISHI, H. ITOH, T. FUJI, T. KASHIWAGI, N. TSURUMACHI, M. FURUICHI, H. NAKATSUKA and M. KAMADA, "Application of SR to ultrafast spectroscopy," J. Synchrotron Radiation 5, 1072-1074 (1998).
- M. KAMADA, S. HIROSE, S. ASAKA, T. TSUJIBAYASHI, M. WATANABE, O. ARIMOTO, S. FUJIWARA, H. ITOH, S. NAKANISHI and M. ITOH, "Combined systems of SR and Laser for solid-state researches," J. Synchrotron Radiation 5, 1035-1037 (1998).
- S. KIMURA, M. KAMADA, H. HAMA, K. KIMURA, M. HOSAKA, J. YAMAZAKI, X. MARECHAL, T. TANAKA and H. KITAMURA, "Performance of a helical undulator of UVSOR," J. Synchrotron Radiation 5, 453-455 (1998).
- S. TANAKA and M. KAMADA, "Observation of the Surface States on the CuCl(100) Surface," J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena 88-91, 689-693 (1998).
- M. KAMADA, Y. Q. CAI, N. TAKAHASHI, S. TANAKA and D. A. WOOLF, "Circular Dichroism in Angular Distribution of Core-Level Photoelectrons from GaAs(111)," J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena 88-91, 219-223 (1998).
- J. YOSHINOBU, M. KAWAI, S. TANAKA, K. WATANABE, Y. MATSUMOTO and M. KAMADA, "Electronic Structure in the Valence Region of Chemisorbed and Physisorbed Species on Pd(110)," J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena **88-91**, 665-669 (1998).
- M. KAMADA, S. FUJIWARA, O. ARIMOTO, Y. FUJII and S. TANAKA, "Simultaneous Measurements of Photoelectron and Luminescence of Barium Halides," J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena 88-91, 297-301 (1998).
- J. YOSHINOBU, M. KAWAI, I. IMAMURA, F. MARUMO, R. SUZUKI, H. OZAKI, M. AOKI, S. MASUDA, S. TANAKA, M. KAMADA and M. AIDA, "Electronic Structure Near the Fermi Level and STM Images of the Pd(110)c(4×2)-Benzene Surface," J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena 88-91, 997-1002 (1998).
- M. A. TEREKHIN, N. YU. SVECHNIKOV, S. TANAKA, S. HIROSE and M. KAMADA, "High-density effects due to interaction of self-trapped exciton with (Ba,5p) core hole in BaF2 at low temperature," Low Temp. Phys. 23, 349-350 (1997).
- I. AKIMOTO, K. KAN'NO, M. SHIRAI, F. OKINO, H. TOUHARA, M. KAMADA and V. G. STANKEVITCH, "Photoluminescence from fluorinated fullerene  $C_{60}F_x(x<48)$  thin films," J. Luminescence 72, 503-504 (1997).
- M. KAMADA and S. HIROSE, "Laser-Induced Fluorescence Study of Fast Desorption of Ground-State K Atoms from

Potassium Halides Excited by Synchrotron Radiation," Surface Science 390, 194-198 (1997).

S. TANAKA, K. MASE, M. NAGASONO and M. KAMADA, "Desorption of H ions from water chemisorbed on Si(100) by O 1s excitation — an Auger electron-photoion coincidence spectroscopy study," Surface Science 390, 204-208 (1997).

#### 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(1995.4-1996.12).

日本物理学会イオン結晶光物性分科世話人(1998.11-).

## 学術雑誌編集委員

Synchrotron Radiation News, Correspondent (1993.4-).

## B-7) 他大学での講義、客員

宮崎大学工学部,「X線光学」,1997年1月7日-10日. 京都大学大学院理学研究科併任助教授,1997年4月1日 - .

## C) 研究活動の課題と展望

放射光とレーザーを組み合わせた実験が萌芽的な第一段階から、有用な情報が得られる第二段階に入り、短パル スレーザー関係の整備を行った。また、レーザーによる光誘起現象の放射光プローブ光電子分光に成功した。ま た,光エネルギー蓄積物質の光物性や2光子内殻分光などの実験を行った。さらに,光電子とイオンのコインシ デンス分光を用いた表面からの脱離ダイナミックスの研究も順調に進行した。また,新型高分解能分光器と光電 子分光装置の組み合わせによる実験が漸く可能になり、半導体表面の電荷移動についての研究を進行中である。今 後は、一層強力なレーザーシステムを導入し、光誘起現象の放射光利用研究を軸に研究展開を行う。

# 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 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(240 nm)のレーザー発振に成功した。
- b) 円形加速器を周回する電子バンチが真空ダクトなどの環境にあるインピーダンスと相互作用してその縦方向形状を変化させる様子を種々の条件下で精度良く調べ,非線形な振る舞いを定量的に理論計算と比較した。
- 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 線発生を実験的に調べた。この 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。

## 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( , )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 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) 磁気線2色性の光電子分光における観察や,スピン偏極光電子分光などを行っている。内殻電子の2色性や,ス ピン偏極度の角度依存性については、atomic なモデルでは説明がつかず、固体構造による光電子の回折効果を考 えることが重要であることを示した。
- a-2) 重希土類化合物の電子状態を赤外分光,共鳴光電子分光などの手法を用いて調べた。他の放射光施設では行う ことの難しい, 重希土類化合物の3d-4f 共鳴光電子分光なども, 高性能電子分析器を用いて研究を行っている。4f 電子状態のみならず,内殻状態の測定も行って,理論との比較検討から正孔-電子相互作用に関する情報を得た。
- a-3) ペロブスカイト構造を持つ遷移金属酸化物SrTiO<sub>3</sub>(111)の電子状態および表面構造を光電子分光,低速電子線回 折を用いて調べた。800 で加熱した表面に対して金属的なフェルミ端を観測したのに対し、1200 で加熱した表 面に対しては、フェルミ端が消失することを観測した。これらの加熱温度による差違は表面構造の違いに関係し ていることを示し (110)面との類似性から電子状態と表面構造の関係について議論した。
- a-4) フェルミ面等の詳細な電子状態の解明のために,低温に冷却可能で高エネルギー分解能を持つ角度走査光電子 分光装置の開発を行った。この装置の開発に必要な要点を述べ、一例として、高温超伝導体  $Bi_2 \ Sr_1 \ gCaCu_2 \ O_{B+d}$  の フェルミ面のマッピングやフェルミ準位近傍のバンド構造について議論した。
- 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。磁性薄膜の研究の他、鹿野田グルー プと共同で微小有機伝導体の一つである(DI-DCNQI) $_2$ -M(M = Ag, Cu)の研究を行った。また,現在は薬師グルー プと共同で,同じく微小な結晶である(DMTSA-BF4)の研究を行っている。
- c) 真空紫外光用高分解能分光器の建設: UVSOR の BL7B に設置されていた瀬谷-波岡型分光器は,300~6000 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,福井大学,神戸大学のグループ と協力し,直入射型の高分解能分光器の建設を行った。500~10000 の波長範囲をカバーし,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。1999 年度より共同利用に公開される予定である。
- 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 1.7 keV 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ブ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。1997 - 98 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し、その調整を進めている。

## B-1) 学術論文

- H. B. ROSE, T. KINOSHITA, Ch. ROTH, F. U. HILLEBRECHT and E. KISKER, "Influence of Photoelectron Diffraction on Magnetic Linear Dichroism," *Surf. Rev. Lett.* **4**, 915-918 (1997).
- Ch. ROTH, T. KINOSHITA, H.B. ROSE, F. U. HILLEBRECHT and E. KISKER, "Diffraction of Spin-Polarized Cu 3p Photoelectrons," *Surf. Rev. Lett.* **4**, 911-914 (1997).
- S. KIMURA, Y. UFUKTEPE, K. G. NATH, T. KINOSHITA, H. KUMIGASHIRA, T. TAKAHASHI, T. MATSUMURA, T. SUZUKI and H. OGASAWARA, "4*d*-4*f* and 3*d*-4*f* Resonant Photoemission of TmX (X = S, Se, Te)," *J. Magn. Magn. Mater.* 177-181, 349-350 (1998).
- K. G. NATH, Y. UFUKTEPE, S. KIMURA, T. KINOSHITA, H. KUMIGASHIRA, T. TAKAHASHI, T. MATSUMURA, T. SUZUKI, H. OGASAWARA and A. KOTANI, "4d Core Level Resonant Photoemission Spectroscopy of Tm Monochalcogenides around Tm 3d Threshold," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 88-91, 369-375 (1998).
- T. KINOSHITA, Y. UFUKTEPE, K. G. NATH, S. KIMURA, H. KUMIGASHIRA, T. TAKAHASHI, T. MATSUMURA, T. SUZUKI, H. OGASAWARA and A. KOTANI, "Resonant Photoemission Studies of Thulium Monochalcogenides around the Tm 3d Threshold," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 88-91, 377-384 (1998).
- Y. HARUYAMA, Y. AIURA, H. BANDO, Y. NISHIHARA, H. KATO, "Annealing Temperature Dependence on the Electronic Structure of the Reduced SrTiO<sub>3</sub> (111) Surface," *J. Electron Spectrosc. Related Phenom.* **88-91**, 695-699 (1998).
- T. KINOSHITA, K. G. NATH, M. WATANABE, S. YAGI, S. KIMURA and A. FANELSA, "Photoelectron Spectromicroscopy Experiments at the UVSOR Facility," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **921**, 165-169 (1998).
- Y. UFUKTEPE, S. KIMURA, T. KINOSHITA, K. G. NATH, H. KUMIGASHIRA, T. TAKAHASHI, T. MATSUMURA, T. SUZUKI, H. OGASAWARA and A. KOTANI, "Resonant Photoemission Studies of Thulium Monochalcogenides around the Tm 4d Threshold," *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 2018-2026 (1998).
- T. KINOSHITA, Y. TAKATA, T. MATSUKAWA, H. ARITANI, S. MATSUO, T. YAMAMOTO, M. TAKAHASHI, H. YOSHIDA, T. YOSHIDA, K. G. NATH, Y. UFUKTEPE, S. KIMURA and Y. KITAJIMA, "Performance of YB<sub>66</sub> Soft X-ray Monochromator Crystal at the Wiggler Beamline of the UVSOR Facility," *J. Synchrotron Rad.* 5, 726-728 (1998).

K. FUKUI, H. NAKAGAWA, I. SHIMOYAMA, K. NAKAGAWA, H. OKAMURA, T. NANBA, M. HASUMOTO and

T. KINOSHITA, "Reconstruction of BL7B for UV, VIS and IR Spectroscopy with a 3m Normal Incidence Monochromator," J. Synchrotron Rad. 5, 836-838 (1998).

M. KAMADA, H. HAMA, T. KINOSHITA and N. KOSUGI, "Present Status of the UVSOR Facility -1997-," J. Synchrotron Rad. 5, 1166-1169 (1998).

#### B-3) 総説、著書

相浦義弘、阪東 寛、春山雄一、上野智行、西原美一、「角度走査光電子分光装置の開発」、電子技術総合研究所 彙報 61, 479-494 (1997).

## 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 Committee (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 電子顕微鏡装置を立ち上げ、それを使った研究をすすめている。光電子顕微鏡では昨年取り付けたサンプル準備 室や温度可変の測定を行うマニピュレーターやレーザーアニール装置を用いて、様々なサンプル、温度条件下で の研究をすすめている。高性能のアナライザーの特徴を生かし,強磁性薄膜,微小サンプル(有機伝導体など), 1 keV-2 keV領域での共鳴光電子分光などの実験が進行中である。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行っている。

また, UVSOR施設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,その作業も進行中である。BL7Bの分光器を高性能直入射のものに置き換える作業はほぼ完了し,1999年 度から共同利用にオープンされる。BL7Aの軟X線2結晶分光器では集光機能を備え付けたり,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おり,性能の向上が認められた。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。

研究グループの各メンバーは,1999年度より国内の他の放射光施設に活動の拠点を移すことになるが,それぞれ の場で放射光科学の発展に寄与したいと考えている。

\*)1998年11月1日東京大学物性研究所助教授,分子科学研究所併任

# 木 村 真 一(助手)\*)

#### A-1) 専門領域:固体物性、放射光科学

## A-2) 研究課題

- a) 強相関伝導系の電子状態の光学的・光電的分光による研究
- b) 赤外磁気光学による磁気相転移の電子状態の研究
- c) 放射光挿入光源・赤外放射光ビームライン・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電子状態の光学的・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キャリアと同在モーメントの相互作用により生じた電子状態が物性を支配している。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。今年度は 昨年度に引き続き 温度及び磁場で価数転移をするEuNi<sub>2</sub> (Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>)<sub>2</sub>の電子状態を 光反射 共鳴光電子により調べ 電子状態の温度依存性の情報を得た。また 近藤半導体YbB<sub>12</sub>とその希釈系Yb<sub>1-x</sub>Lu<sub>x</sub>B<sub>1-2</sub>のエネルギーギャップの起源を含む電子状態を調べている。
- b) 赤外磁気光学による磁気相転移の電子状態の研究:円偏光赤外放射光と超伝導マグネットを用いた赤外領域での高磁場下での磁気円偏光二色性測定装置を昨年度までに建設した。この装置を使うことによって、光のエネルギー範囲:1 meV ~ 2 eV 温度範囲:6~300 K 磁場範囲:0~8 Tの各パラメータを3次元的に変え、円偏光放射光を使って、磁気モーメントを分離した分光測定が可能である。今年度から本格的な実験がスタートした。まず、セリウム・モノプニクタイド(CeX; X=P, As, Sb, Bi)の複雑な磁気構造の起源を明らかにすることを目的として、CeSbとCeBiについて各磁気相での光反射スペクトル及び磁気円偏光二色性を測定した。その結果、磁気相転移に伴って、非占有Ce5dバンドが大きく変化していることが明らかになった。
- c) 放射光挿入光源・赤外放射光ビームライン・真空紫外分光器の開発:西播磨の大型放射光SPring-8に建設予定の赤外ビームラインの設計を行った。その際 水平方向の広い取り込み角を実現するため magic mirrorの導入を検討している。また , 次世代放射光の赤外・可視・紫外用の挿入光源として 偏光方向を変調した赤外円偏光ウィグラーを提案しており 来年度 にプロトタイプを制作し 実験を行う計画である。

## B-1) 学術論文

- H. OKAMURA, S. KIMURA, H. SHINOZAKI, T. NANBA, F. IGA, N. SHIMIZU and T. TAKABATAKE, "Optical conductivity of the Kondo insulator YbB<sub>12</sub>: Gap formation and low-energy excitations," *Phys. Rev. B* **58**, R7496 (1998).
- Y. UFUKTEPE, S. KIMURA, T. KINOSHITA, K. G. NATH, H. KUMIGASHIRA, T. TAKAHASHI, T. MATSUMURA, T. SUZUKI, H. OGASAWARA and A. KOTANI, "Resonant photoemission studies of thulium monochalcogenides around the Tm 4d threshold," *J. Phys. Soc. Japan* 67, 2018 (1998).
- **F. ARAI, S. KIMURA and M. IKEZAWA**, "Resonant Photoemission Study of Electronic Structure of Rare-Earth Sesquioxides," *J. Phys. Soc. Japan* **67**, 225 (1996).

## B-2) 国際会議のプロシーデイングス

- S. KIMURA, D. X. LI, Y. HAGA and T. SUZUKI, "Magnetic field dependence of low energy excitation of GdAs," J. Magn. Magn. Mater. 177-181, 351 (1998).
- S. KIMURA, Y. UFUKTEPE, K. G. NATH, T. KINOSHITA, H. KUMIGASHIRA, T. TAKAHASHI, T. MATSUMURA, T. SUZUKI, H. OGASAWARA and A. KOTANI, "4d-4f and 3d-4f resonant photoemission of TmX (X = S, Se, Te)," J. Magn. Magn. Mater. 177-181, 349 (1998).
- S. KIMURA, M. KAMADA, H. HAMA, K. KIMURA, M. HOSAKA, J. YAMAZAKI, X. MARECHAL, T. TANAKA and H. KITAMURA, "Performance of a helical undulator of the UVSOR," J. Synchrotron Rad. 5, 453 (1998).
- T. KINOSHITA, Y. TAKATA, T. MATSUKAWA, H. ARITANI, S. MATSUO, T. YAMAMOTO, M. TAKAHASHI, H. YOSHIDA, T. YOSHIDA, Y. UFUKTEPE, K. G. NATH, S. KIMURA and Y. KITAJIMA, "Performance of the YB, soft x-ray monochromator crystal at the wiggler beamline of the UVSOR Facility," J. Synchrotron Rad. 5, 726 (1998).
- A. HIRAYA, K. YOSHIDA, S. YAGI, M. TANIGUCHI, S. KIMURA, H. HAMA, T. TAKAYAMA and D. AMANO, "Undulators at HiSOR — a compact racetrack type ring," J. Synchrotron Rad. 5, 445 (1998).
- M. SAKURAI, H. OKAMURA, M. WATANABE, T. NANBA, S. KIMURA and M. KAMADA, "Upgraded IR beamline at UVSOR," J. Synchrotron Rad. 5, 578 (1998).
- M. KAMADA, M. HASUMOTO, N. MIZUTANI, T. HORIGOME, S. KIMURA, S. TANAKA, K. SAKAI and K. FUKUI, "Construction and performance test of SGM-TRAIN at UVSOR," J. Synchrotron Rad. 5, 766 (1998).
- T. KINOSHITA, K. G. NATH, Y. HARUYAMA, M. WATANABE, S. YAGI, S.KIMURA and A. FANELSA, "Photoelectron spectro-microscopy experiments at the UVSOR Facility," J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 92, 165 (1999).
- K. G. NATH, Y. UFUKTEPE, S. KIMURA, T. KINOSHITA, H. KUMIGASHIRA, T. TAKAHASHI, H. MATSUMURA, T. SUZUKI, H. OGASAWARA and A.KOTANI, "4d Core level photoemission spectroscopy and the resonance behavior of mixed-valence Tm monochalcogenides," J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 88-91, 369 (1998).
- T. KINOSHITA, Y. UFUKTEPE, K. G. NATH, S. KIMURA, H. KUMIGASHIRA, T. TAKAHASHI, T. MATSUMURA, T. SUZUKI, H. OGASAWARA and A. KOTANI, "Resonant photoemission studies of Thulium monochalcogenides around the Tm 3d threshold," J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 88-91, 377 (1998).

## C) 研究活動の課題と展望

強相関伝導系では、キャリアと局在モーメントとの相互作用により、広いエネルギー範囲に電子状態が広がっている。そのた め、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。通常の反射・吸収の測定と共鳴光電子分光では、電荷の移動を観測できるが、磁気光学効 果等を使って 磁気モーメントを選択して励起した吸収を観測していくことが 強相関伝導系の物性の全体像を観測するの に不可欠である。1eV以下の低エネルギー領域では、最近開発した赤外磁気光学装置を使うとそのような測定が可能であ る。またこの装置は 赤外放射光の特徴の1つである円偏光性を世界で最初に使ったものであり 赤外放射光の新しい測定 手段として、今後も発展させていきたい。

\* )1998年4月1日神戸大学大学院自然科学研究科助教授

# 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) オゾンの光イオン化解離ダイナミクスの研究
- b) 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
- c) レーザーとSOR光のパンプ・プローブ実験手法の開発
- d) 新型分光器の開発

## A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) フロンなどによる成層圏でのオゾン破壊によりオゾンの電子状態の研究が注目を集めている。しかし軟 X 線領域の高エネルギーでは ,その取り扱いの難しさからオゾンの電子状態に関する情報はほとんど得られていない。我々は UVSOR の BL8B1 にオゾン生成装置と処理装置を設置し , K -edge 付近 (525-540 eV) の光解離フラグメントの飛行時間スペクトルと異方性の測定実験を行い , そこからオゾンの光解離ダイナミクスの考察を行った。その結果 , 2 つの 1s- \* 遷移 (真ん中の酸素と両側の酸素の 1s 状態) から生成する酸素イオンと酸素分子イオンフラグメントが異なる解離異方性をもつことがわかった。

また同様に電子イオンイオンコインシデンス (PEPIPICO)法による測定を行い,イオンフラグメント間の並進エネルギー分布も,2つの違った1s-\*遷移により明確に区別できることがわかった。

- b) 二次元画像観測法は,光解離時に放出されるイオンのフラグメントの運動量ベクトルを二次元面に射影する観測法であり,我々はイオン化解離ダイナミクスの新たな測定方法として,この観測法を利用したコインシデンス測定装置の開発を行っている。今年度はビームスキマー, Position Sensitive Detector,多段のイオン加速装置などを用いた二次元画像観測装置を製作し,実際にBL3A2において窒素の価電子帯での光解離の測定を行った。現在システムにノイズやクロストークなどの問題があり改良中である。
- c) Xeは励起状態( Xe\*5p 5 5d )を経由して自動イオン化させた場合 ,直接吸収とは大きく異なる吸収スペクトル( Fano プロファイル ) を示す。これはイオン化過程のダイナミクスの違いによるものと考えられるが , その理由はまだよくわかっていない。我々はピコ秒レーザシステムをSOR光に同期させ , 中間状態 ( Xe\*5p 5 5d ) 経由で Xe をイオン化し , 2 つの光の偏光関係 , 時間間隔などがこのイオン化ダイナミクスにどのような影響を及ぼすかを観測している。

また同様の手法を駆使し, $N_2O$  の内殻励起状態から生成する  $N_2^+(X_2\Sigma_g)$  振動回転状態を, $N_2^+$  の A-X 遷移を利用したLIF スペクトルにより測定している。

d) 新 BL4B のビームライン分光器として,不等間隔グレーティングを用いた高分解能かつ高スループットの軟 X 線用分光器の設計を行っている。約 600 eV で,入射スリットスループットほぼ 100% の場合,分解能(E/E) 1500 が可能であることがわかった。

## 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。オゾンは大気化学的に非常に重要な分子であるが,それに加え,等殻三原子分子という特異性 を持っており、その解離ダイナミクスには大きな興味がもたれている。今後はPIPICO等の測定により、オゾンの 二価イオン解離過程のダイナミクス,リュードベルグ状態のスペクトル測定などを行っていく。

またこれと並行して,レーザーとSR光のパンプ・プローブ実験,二次元画像法を利用した電子とイオンの解離異 方性のコインシデンス測定などの技術にも取り組んでいく予定である。これらの技術は未開発な部分を多く含ん でおり,新技術という点でも興味深い。さらに将来的には,第三世代シンクロトロン放射光のための実験装置,た とえばシングルバンチでの電子の飛行時間測定による光電子エネルギー分布測定装置の開発などにも着手してい きたいと考えている。

# 4.分子研研究会「2010年の分子科学を語る」

# 4-1 挨拶;分子研所長 伊藤光男

我が国における分子科学の研究のはじまりが何時であったかは色々と意見の別れるところですが、かなり象徴的なものは1930年代の水島、森野の回転異性体の研究ではないかと思います。その後、水島門下による多彩な研究が展開され、島内、坪井等による振動状態、長倉、馬場、田中等による電子状態の研究、はては生体関連分野まで大きな拡がりを示しました。一方、赤松、井口による有機半導体の研究に端を発し物性化学の研究が大きく花開き、また福井によるフロンティア電子理論の創出により日本の分子科学の理論研究はノーベル賞で象徴されるように一躍世界の桧舞台におどりでました。

戦後の極めて困難な時代に、現在の分子科学の基礎となった上述の研究が芽をふき、分子科学研究の洋々たる将来に大きく胸をふくらませたことは当時を知るものとして忘れるこ



とはできません。このような燃えるような情熱を背景に、我々の先輩が血と汗をふりしぼり分子科学研究の飛躍的発展を期して分子科学研究所を設立されました。分子科学という言葉自体も研究所設立にあたってはじめて用いられたもので、現在では世界に広まっています。分子研設立以来23年が経過しました。燃えるような理想と情熱、さらに恵まれた研究環境のもとで分子研発足後の10年は分子科学の研究に新風を吹きこみ、短日月のうちに分子科学研究の世界的中核拠点としての地位を確保するに至りました。その後は安定、成長期を迎え、分子科学の分野の拡がりとともに、分子研でカバーする分野も拡がりを見せ、現在では創設時の約2倍の規模になっています。分子研のみならず、日本における分子科学研究は分子構造総合討論会で示されるように肥大化しています。これは時代の趨勢で致し方ないことでしょうが、この間、果たして真に独創的な研究が生まれたかどうかについては大いに疑問を感じざるを得ません。現在では大学の研究環境も、分子研の特殊装置等を必要としないところまで改善しています。色々問題はありますが、研究費もある所にはバブル的な状態にもなっています。一昔前は研究費不足が言い訳になっていましたが、今はそれも許されなくなりました。このような状況のもとで、分子科学の研究というものを皆でもう一度改めて考えてみたいということで企画したのがこの会であります。

我々は目前に迫った21世紀に分子科学研究の飛躍的発展を切に願っています。とりあえず約10年後の2010年の分子科学を展望したいと思います。これは当然のことながら2010年に分子科学研究を中心となって支えるであろう現在の若い人達が何を考えているかにかかっています。それでこの会の前半は若い人にそれぞれの夢を語っていただくことにしました。この会は語るのが目的ですので、一方的な発表ではなく皆と自由にきたんのない意見を述べあう会にしたいと思います。脱線は大いに歓迎します。また今晩は皆さんに分子研の今後の在り方について討論していただきたいと思っています。日頃分子研について思っていることをさらけだしていただき、大いに活を入れてください。

会の後半は分子科学のいわゆる境界領域について、それぞれの立場からお話をしていただきます。境界領域といい ますが、現在では分子科学の中核が果たして何であるか非常にあいまいになっています。分子研設立当時に考えてい た中核は時代とともに大きく変わってきました。今回境界領域としてお話いただくいくつか分野は、現在では分子科学の中核といってよいかと思います。分子科学の今後の発展を考える上で、大変貴重なお話が聞けるものと楽しみにしています。

最後に、この会の企画から実施まで中心的な役割を果たしていただきました北川教授に心から感謝申しあげます。また、管理局、技術課の職員の方々、および分子構造研究系の多く方々に大変なお世話になりました。この場をかりて厚くお礼申し上げます。

# 4-2 プログラム

日時:10月19日(月)13:00~21日(水)12:30

場所:岡崎コンファレンスセンター 大会議室

10月19日(月)

講演会「分子科学 これからの10年」

13:00~13:10 挨拶 伊藤 光男 所長

【座長】藤井 正明

13:10~13:40 百瀬 孝昌(京大院理) 「水素の分子科学」

13:40~14:10 田原 太平(分子研) 「時間分解分光の今とこれから」

14:10~14:40 中嶋 敦(慶大理工) 「気相化学反応を用いた物質科学の新展開」

14:40~15:10 鈴木 俊法(分子研) 「反応する分子を観る」

休憩

【座長】藥師 久彌

15:40~16:10 大島 康裕(京大院理) 「有限分子集団に分子科学の前哨を求めて」

16:10~16:40 見附孝一郎(分子研) 「真空紫外・軟 X 線放射光によるイオン化と超励起」

16:40~17:10 田村 雅史(東邦大理) 「化学結合の量子性から見る物質の機能性」

17:10~17:40 井上 克也(分子研) 「複合物性を有する分子性固体の展開」

夕食

19:30~21:30 討論会 「分子研の今後のあり方について」

(岡崎コンファレンスセンター 小会議室にて) インフォーマルミーティング

## 10月20日(火)

## 【座長】塩谷 光彦

9:30~10:00 小倉 尚志(東大院総文)「生体分子科学」

10:00~10:30 神取 秀樹(京大院理) 「2010年の生体分子光科学」

休憩

## 【座長】平田 文男

11:00~11:30 寺嶋 正秀(京大院理) 「エネルギーと分子の流れを観る」

11:30~12:00 斉藤 真司(名大院理) 「溶液のダイナミクスの理解に向けて」

12:00~12:30 佐藤 文俊(九工大情報工)量子生物学の夢を語る」

昼食

## 講演会「分子科学の境界領域」

## 【座長】小杉 信博

13:50~14:30 秋元 肇(東大先端科技)大気科学と分子科学の対抗軸」

14:30~15:10 山本 智(東大院理) 「暗黒星雲の化学組成と進化」

休憩

## 【座長】渡辺 芳人

15:40~16:20 永山 國昭(生理研) 「複素電子顕微鏡-1分子の蛋白質・核酸構造決定は可能か?」

16:20~17:00 諸橋憲一郎(基生研) 「性分化機構」

17:00~17:40 柳田 敏雄(阪大医) 「1分子計測でみた生物分子機械のやわらかさ」

18:00~ 懇親会 (岡崎コンファレンスセンター 中会議室にて)

司会:西信之

## 10月21日(水)

## 【座長】宇理須恒雄

9:30~10:10 福山 秀敏(東大院理) 「物質科学:分子と結晶」

10:10~10:50 川合 知二(阪大産研) 「ひとつひとつの原子・分子をあやつる科学 - 新機能調和物質の創成へ - 」

休憩

## 【座長】田中 晃二

11:10~11:50 相田 卓三(東大院工) 「人工樹木による光エネルギー変換」

11:50~12:30 藤嶋 昭(東大院工) 「光機能界面の働き」

# 4-3 予稿と点描

## 水素の分子科学

# 京都大学大学院理学研究科 百瀬 孝昌

今後の分子科学の進むべき方向の一つは、だいぶ手垢の付いたテーマに聞こえるかもしれないが、分子集合体の研究であると思う。ここでいう集合体とは、アボガドロ数までには至らないまでも十分多数の原子を含む原子・分子集合体を意味する。もちろん、すでに多くの研究がなされている有限サイズのクラスターや、タンパク質のような巨大単分子も含まれる。

有限集合体の研究は、量子力学と統計力学の間のギャップを埋めるものである。そこでは、例えば、境界の存在が 意味を持つような系の物性研究が意味をもつ。一方で、集合体を構成することによって個々の原子・分子からは想像 もつかない新しい"機能"が発生することは既知の事実であるが、その根本的な理解は得られていない。

集合体の研究の重要性は何十年も前から叫ばれ、多くの実験が行われてきた。しかし、上記のような問題意識にたったとき明快な解答が得られつつあるとはいえないのが現状である。その一つの原因として、実験研究の取り組み方に問題があると感じている。集合体の研究は数多くあるが、高度な分光学的実験に基づいて信頼できる定量的なデーターが提供された例は少なく、たいていは粒子数の多さを理由に曖昧で中途半端な議論で終わっている。

我々のグループは、水素の集合体である固体水素の研究を5年ほど前から行っている。水素分子が関与する研究は 自然科学の発展の歴史の中でしばしば重要な役割を果たしてきた。その理由は水素分子が最も簡単でかつ基本的な分 子であるためである。

我々は集合体の研究でも、水素分子が重要な役割を果たすと考えている。その理由は構成粒子である水素分子の性質がほぼ完全に理解されているため、集合体固有の問題を明確に浮き彫りにできるからである。固体水素の分光研究を進めていると、定性的にも全く説明できない結果が得られることがしばしばある。その一例として、固体パラ水素の純振動状態の誘導ラマン散乱の偏光依存性があげられる。純粋なパラ水素の誘導ラマン散乱は非常に理想的なスペクトルを示すが、不純物となるオルト水素をわずかに加えると予期しない偏光成分が強く検出される。これは励起子の散乱問題に関連しているが、水素分子個々の性質によるものではなく、集団になって初めて生じる効果としか考えられない(詳しくは、百瀬、岡,応用物理65,902(1996)を参照)。このような未解決の実験事実の中には、集合体の本質を解く鍵が隠されているものがあると考えている。ここで重要なことは、対象が水素分子の固体であるため、構成



粒子に関する曖昧さが最小限に押さえられていることである。従って、統計力学や固体物理のようなマクロな理論だけではなく、量子力学を基礎にして厳密に取り組むことができる可能性があることである。これが水素分子の研究を続ける最大の意義と考えている。

実験家の役割としてもっとも重要なことは、既存の理論を裏付ける(あるいはその拡張で説明が付く)結果を出すことではなく、これまでの考え方では説明できない現象を見つけ、それを明快なかたちで提示することだと思う。その意味で、水素分子集合体の研究は、集合体固有の現象の発見と解明のための有望な研究対象として、しばらくは続ける価値があると考えている。

# 時間分解分光の今とこれから

分子科学研究所 田原 太平

1940年代末からの Porter、Norrish および Eigen の研究にその源を発する高速反応の研究は、レーザーの発明・進歩を経て今にいたるまできわめて長足の発展を遂げている。測定の時間分解能は現在ではフェムト(10<sup>-15</sup>)秒にまでいたり、分子のコヒーレンス(波束ダイナミクス)さえもが実時間観測されるようになってきている。分子の反応、およびそれによって発現する機能の本質は「変化」であるから、それを実時間で観測しようとする時間分解分光が、今後も多くの分野において基本的研究手法としてさらに浸透していくことには疑いがない。超高速分光の分野における最近の最も大きな出来事は、チタン



サファイアレーザーに代表される極めて安定に発振するフェムト秒・ピコ秒レーザーの出現であろう。これによって、かつては高度な(レーザー開発を含む)技術が必要とされ一部の研究者にしか可能ではなかった超高速分光による研究が、今では多くの研究者にとって身近なものとなった。このことを背景に超高速分光は現在爆発的な広がりを見せようとしており、いわば「ビックバン」を迎えているといえる。この新しい局面下で、分野の今後を予想することはきわめて困難であるが、それでも、2010年に向けて現時点での研究の初期ベクトルについて議論することにはそれなりの意味があろう。そこで、最も高速な分光測定が行われている電子遷移と振動遷移に対するフェムト秒・ピコ秒時間分解分光研究の現状について述べたのち、(1)時間分解能、(2)エネルギー領域、(3)研究対象、の3つの点を中心に今後の方向について議論する。

# 気相化学反応を用いた物質科学の新展開 慶應義塾大学理工学部 中嶋 敦

気相中で原子が数個から数千個程度凝集してできたnmオーダーの大きさのクラスター(以下では、ナノクラスター)は、新規触媒や機能材料として高い注目を集めている。これは、ナノクラスターが必要な機能や特殊な働きを有する材料の最小単位であると考えられためであり、また、バルク表面に見られる厳密な周期性に乏しく、5回対称性など固体には存在しない構造が可能なためである。このため、ナノクラスターは高い表面活性を有するばかりでなく、その構造ゆらぎにより電子構造が原子数の変化に伴なって不連続に変化し、特異的に新奇な合金や酸化物形成も可能となる。さらに、異種元素の混合による新奇な物性の発現は、高機能電子材料や高選択的光触媒の創製を可能にするものと期待される。

ナノクラスターの気相合成は、溶媒などの環境因子がない直接的な物質創製であり、生成過程での温度変化を短時間にかつ局所的に大きくできる特徴から、バルクとは異なる生成物を与える。また、この気相合成法は分子ビーム法、質量分析法や種々の分光法の利用によって、ナノクラスターのサイズ組成が制御できる特性をもつ。気相有機金属ナノクラスターの物性研究は、ナノクラスターを骨格とする材料への展開を計る上で極めて重要である。従来より研究されてきた単一組成のナノクラスターに金属原子など加えて複合化して、たとえば有機金属ナノクラスターを生成させると、金属原子の置換や組成比によってその物性を最適化するパラメーターを新たに得ることができ、電気伝導性、



磁性、光吸収などの物性を修飾や一部置換によって 改変して、電子材料などへの適合を計ることができ る。有機金属ナノクラスターは、複合化によってナ ノクラスターの特性を最適化することを可能にする とともに、金属原子の機能を原子レベルで最大限に 活用可能にすると期待できる。そして、レーザー蒸 発による気相有機金属ナノクラスターの生成では、 遷移金属から希土類元素に至るほとんど全ての金属 を任意の濃度で蒸発できるとともに、分子線法と組 み合わせることによって、種々のスピン状態、電子 励起状態の金属原子を温度制御しながら有機分子と

反応させることができる。実際、レーザー蒸発法による金属原子と有機分子によって有機金属ナノクラスターを気相中合成すると、極めて特異的な多層サンドイッチ型ナノクラスターが効率的に生成できることを見い出している。これまでに気相反応で見い出した有機金属ナノクラスターを紹介しながら、今後の進展を展望する。

# 反応する分子を観る

# 分子科学研究所 鈴木 俊法

多彩な反応を駆使し、望みの物質を作り上げる化学は無限の可能性を秘めている。その多様な化学反応も、一つ一つの素反応の組み合わせであり、これら素反応の理解こそが化学の礎である。しかし、原子分子の動力学は微視的で観測困難であるため、その観測は常に間接的であった。

我々は、化学反応の生の姿をより直接的に描き出したいと考える。それは、このような高度な実験が、最先端の化学反応理論や量子化学計算を厳密に検証し、化学反応理論の構築に貢献できるだけでなく、全ての人に最も明確な分子科学の姿や概念を(ビジュアルに)与えられるからである。ここでは、学問的興味と科学的遊び心は一体である。

化学反応には単分子反応と二分子反応があり、研究手法は異なる。原子分子衝突によって起こる二分子反応は、交

差分子線法によって研究される。1955年に Taylor と Datz が初めて交差分子線実験を行った時には、反応生成物の散乱角度分布が測定できただけであった。しかし、Woodward-Hoffmann 則に代表されるような、美しい立体化学の描像にも迫るためには、化学反応生成物がどのように振動回転しながら、どのような姿勢で反応中心から離脱するかを全て観測しなければならない。我々は、共鳴多光子イオン化と画像観測法を組み合わせた手法で、このような実験を可能にしつつある。

単分子反応(異性化、解離等)は光によって開始できるため、超短パルスレーザーを用いたpump-probe法を使えば、反応を実時間撮影できる(はずである)。近年、分子の回転周期より短いパルスが得られるように



なったことで、これは現実味を帯びてきた。我々は、反応途中の各時刻での原子核の位置を観測する手段として、解離性電離や光電子画像化の開発を進めている。

反応を画像化する研究は開発途上にあるが、既に、大気環境化学や星間化学の反応素過程の解析においては、最も 強力な研究手段となっている。21世紀には、構造化学、分析化学、溶液反応の分子論的研究への大きな展開が期待される。

## 文献

- 1)「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).
- 2)「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).
- 3) "Dissociation of metastable CH<sub>3</sub>CO radical observed by subpicosecond time-clocked photofragment imaging," *J. Phys. Chem. A* 102, 3643 (1998).
- 4) "Quantal and semiclassical analysis of vector correlation in molecular photodissociation, "J. Chem. Phys. 108, 6780 (1998).
- 5) "Nonadiabatic bending dissociation in 16 valence electron system OCS, "J. Chem. Phys. 109, 5778 (1998).



# 有限分子集団に分子科学の前哨を求めて 京都大学大学院理学研究科 大島 康裕

科学を推進してきた源泉は、未知の現象を目前にしたとき湧き起こる驚き(Sense of Wonder, SOW)と、その現象を理解したいという衝動であろう。宇宙・素粒子・生命などは、人が好奇心を持つ存在である以上、当然、驚きと衝動を引き起こす。では、「未知」とは、これらのいわば究極的事象のみに存在するのだろうか? 分子科学や化学は、われわれの周辺を取り巻く物質を取り扱う。これらのごく身近なものにも、未知なる事象は隠されていないだろうか。「水が沸騰する」「熱が伝わる」「塩や砂糖が水に溶ける」等々の現象も、そこには膨大な数の分子が存在し、それらが時々刻々と動き回り変化していることを思えば、SOWに満ち溢れていると言えないだろうか?

身近な SOW が引き起こす最も根源的な衝動は、「動き回り変化する分子達を見てみたい!」というものである。気相クラスターに代表される「有限分子集団」の研究は、「分子が少しだったら詳しく見えるハズ」という素朴な信念をもとに、この衝動に答えようとする。現在までの実験ならびに理論的研究の発展は、分子集団の静的なネットワーク

については、かなり詳細な描像を与えてくれるようになった。これからの10年は、集団の中で分子が動きまわる様を「見る」ことが最重要課題となると考える。分子の動きを追えるだけの時間分解能(≈ps)を持つ測定は、現在までのところ分光学的手法に限られている。新しい原理・アイデアに基いた、分子の運動をより直接的に観測する手法の開発が望まれる。特に、定量性では劣っても大きな分子集団に適用しうることが重要となる。また、能動的に分子を動かすこと、さらに、その動きをもとに変化を引き起こすことも、新たな挑戦の1つである。



SOW が引き起こす衝動には、実は、前述の「分子を見てみたい!」とは異なる方向へとわれわれを導く、もう1つの大きな流れが存在する。つまり、「分子(その形、動き、働き)の理由が知りたい!」である。前者は、個別を見つめ、具体的であり、多様な物質のあり方を認識する。後者は、関係に注目し、抽象化し、物質を超えた普遍的原理を希求する。有限分子集団は、これら2つの衝動の共同と対立が、最も明らかな形で顕れる場でもある。クラスター研究における上記の素朴な信念には、同時に、マクロな集団としての挙動を解き明かす「原理」への指向が内在している。しかし、現状では「個別に見ること」から「全体を知ること」への隔たりは大きい。クラスターの研究で獲得される(はずの)「分子」の具体的な描像を保持したまま、マクロへの変換を行うことが可能か否かは、本質的な問題である。つまり、無限個の分子集団の挙動を目で見るように完全に描写すること、さらに、その表現自体が抽象化された法則の記述となることは、果たして可能なのであろうか?

「見ること」と「知ること」の2つの衝動に対して統一的な解答を与えることは、「見果てぬ夢」と言えるかもしれない。しかし、個別の関係を通して全体に迫ろうとし続けることが、有限分子集団などの「人為的」研究対象を身近な SOW と結び付け、(分子)科学における前哨として留まり続けさせると考える。

## 真空紫外・軟X線放射光によるイオン化と超励起 分子科学研究所 見附孝一郎

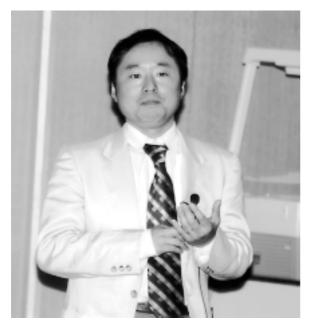
加速器で初めて放射光が観測されてから50年、最初、分光学に放射光が利用されてから35年が経過した。放射光科学の研究分野は、この20年間で科学と技術の全域に展開し、目を見張るような速度で急速に膨張しつつある。携わっている研究者は、これまで地上で発生させることができなかった波長領域の光を手に入れたことで、未開拓の世界へ踏み出せるというまるで大航海時代の探検家のように熱に浮かされたような状態にあるのかもしれない。

放射光科学の進歩に並行して、放射光源(加速器)の技術水準も大きな発展の道をたどっている。例えば、UVSORの輝度は、蓄積電流 100 mA の条件で 100 eV 付近で約 10<sup>13</sup> photons/sec/mm²/mrad²/0.1%bw である。現在のペースで技術革新が進めば2010年には10<sup>25</sup> photons/sec/mm²/mrad²/0.1%bw を越える放射光源が建設・供用化されると予想される。また、低エミッタンス化によってボーズ縮重度が1より著しく大きいコヒーレントな放射光が得られる時代が到来するであろう。このような光の作る非常に強い電場は原子分子中の電子の感じるポテンシャルに大きな歪みを与え、エネルギー準位そのものを変化させる。これは強い可視紫外レーザー光照射で研究されているいわゆるdressed state に対応するが、内殻領域では強い電場勾配によって電子がトンネル効果で系外へ抜けるために、特に歪みの効果が顕著に現れると想像されている。

このようにこれまでの常識を覆すような新しい現象が観測されることは非常に興味深い。ただし、高輝度放射光源で実行可能になるであろう研究は、実は今でも予測できるものがその大部分を占める。裏返せば、強度・単色性・指向性・時間特性などにおける現状の光源性能のもとでは、実現が困難な問題が多く存在する。基本的な課題としては、分子のイオン化や超励起を定量的に取り扱うのに必要なデータを蓄積することが挙げられる。分子の光学的振動子強度は真空紫外から軟×線領域に集中しており、したがって分子の光吸収と引き続いて起こる反応の全容を明らかにするためには、この領域での光吸収、光イオン化、中性解離の全断面積・部分断面積・微分断面積を測定することが重要である。そのためには、各種断面積の絶対測定を行い、さらに波長掃引光電子分光・波長掃引発光分光、多重同時計測法などを駆使して超励起状態の自動イオン化や解離反応などの可能な道筋すべてについて量子収率を求める必要がある。おそらく、最も困難な作業は光も電子も放出しない安定な中性フラグメントを生成する割合をどのように見積もるかということであろう。この問題の解決に向けて、我々のグループは放射光とレーザーを組み合わせたポンププローブ分光の実験を開始している。

超励起状態の吸収線幅と各崩壊過程の量子収率がわかれば、原理的には自動イオン化や前期解離に対する寿命が推定できる。しかし、直接それを求めるためには、時間分解実験を行う必要がある。放射光のパルス幅が現状より2桁短くなり、かつ時間同期が取れたレーザーや自由電子レーザーを組み合わせることができれば、ピコ秒からサブピコ秒の高速分光が可能となり、その結果、自動イオン化や解離のダイナミクスを詳細に議論することができるようになるであろう。このような実験が近く実現されるためには、光源や測定器系の研究者のいっそうの創意と互いの協力が要求される。

最近の放射光を用いた原子分子の研究は、精密化の段階に入りつつあることは明らかである。その代表例が、量子力学的完全実験を目標とした偏極原子や配向分子の光イオン化の研究である。これまではランダムな原子や分子の向きについて平均した物理量の測定にとどまっていた。今後は全角運動量が整列(aligned)または配向(oriented)された原子分子もしくは分子軸方向が空間に仮想的に固定された分子の光イオン化ダイナミクスを実験・理論の両面から取り扱わなければならない。偏極原子の場合、その光電子の角度分布測定から選択則で許される複数の終状態チャネルの双極子遷移モーメントの振幅と位相シフト差をすべて決定することが可能である。これによって、イオンコアによる終状態電子波の散乱の影響を解明できる。こういった研究は、円偏光放射光の高輝度化によってますます本格的



に推進されるようになるだろうと思われる。

放射光科学の他の分野と最も異なる特質は、いわゆるスモールサイエンスに属する観測系の放射光利用者が、加速器という大規模科学技術および真空紫外・軟X線分光器という中規模科学技術に強く依存しているという点である。しかし、利用者が出来合いの加速器・分光器にぶら下がったままの受動的立場にだけ甘んじていては、近いうちにこの分野全体が閉塞状態に陥ることは想像に難くない。高輝度化に向けて突き進む真空紫外・軟X線放射光源を用いてどのような研究を行いたいのか、そしてその目的のためには既存の光源にどのような新概念や着想を持ち込むべきなのかを、利用者側から積極的に光源および分光器研究者に提案し、密接な協力体制を築いていくことが放射光科学の今後の発展に不可欠である。

#### 化学結合の量子性から見る物質の機能性

## 東邦大学理学部 田村 雅史

物性科学にとって80年代・90年代は実り多い時代であったといえる。量子ホール効果・重い電子系・高温超伝導・量子スピン系・メゾスコピック系など、多くの物性研究者の興味を今も惹いているトピックスがこの間に登場した。これらにほぼ共通しているのは、比較的電子相関が強い低次元(特に二次元)の系で、量子性(系全体での位相コヒーレンスやスピンの交換トンネル)がマクロな電磁現象、特に磁場効果や磁性として発現することである。

分子性物質についてみると,超伝導(1980年)や強磁性(1991年)の発見を経て,有機分子や金属錯体のつくる系が,原子からなる従来系に匹敵する精密な固体物性の研究対象として確立され,さらに角度依存磁気抵抗振動(1988年),磁場誘起スピン密度波(1981年)など新しいトピックスを提供し,物質や測定手段の多様性も大きく拡大した. 反面,超伝導や強磁性などの達成後の目標が見えない,分子の個性が電子系の舞台装置にとどまっていてまだ主役になっていない,実用面との結びつきが希薄すぎる,という批判もありうる.

物性科学のキーワードの1つが量子性であると述べたが,分子科学の世界ではむしろ量子性は当然で平凡なことである。電子移動や化学反応は分子軌道の位相干渉で起き,分子の磁性は量子スピンー重項のトポロジカルな配列で決定される。分子科学者が普通に安定化合物の構造を考えるとき,量子性は無意識に考慮される(化学結合の量子性).問題はそれをマクロな機能や新物性にどう結びつけるかである。従来系では,キャリア注入可能な少数キャリア系や電子相関による局在で量子力学的対称性がひとまず部分的に破られた系で,温度を下げて量子性を発現させている。系のサイズが比較的大きいので,磁場による電子運動の量子化という要素も加わる。機能性は系の性格が古典的なものから量子的なもの(またはその逆)に切り替わるところで出てくる。

もともと量子性の強い分子系では,逆に分子レベルでの古典化(結合の量子性の抑制,量子力学的対称性の破れの導入)が今後のポイントになるのではないだろうか.もう少し具体的にいうと,熱エネルギーで擾乱される程度のごく弱い(非結合性)化学結合で基本電子ユニットをつなげた分子を考えるということである.いわゆる超分子 = メゾスコピック系分子の電子物性を考えることでもある.これは分子に(近似的)縮重状態あるいは互変異性をつくることと同等である.縮重準位を"スピン"と見なせば,磁場以外にも種々の外力で物性が敏感に変化する系の構築が考えられる.スピンに換えて超分子内で考える自由度としては分子の個性に応じて,電荷位置・ヤーン・テラー歪・分子内回転などいろいろ設計可能で,それに応じて電場・光・機械的力・物質濃度などいろいろな外力で電子物性が変調されるようになると,分子科学者にとっていっそう魅力的になってくる.また超分子のサイズがある程度大きくな



れば、分子内の電子状態が磁場で量子化される可能性 も出てくる 弱い結合とは一見消極的な戦略という印 象を与えるかもしれないが、そうではない。弱い結合 でユニットの配列をうまく制御して超分子系を構築す るには、分子科学上の高度な知識が要求される。その 意味でこれは分子科学の最先端の研究課題である。

以上の話題を軸として, さらに今後重要になりそうなポイントとして,少数キャリア系の魅力,へテロ構造(無機金属/分子性物質,異種の分子性物質どうし, さらに分子と外部との界面や接合), 高温ないし励起状態の物性,などを挙げて,分子性物質の電子物性研究の将来を考えてみたい.

## 複合物性を有する分子性固体の展開

## 分子科学研究所 井上 克也

巨視的物性である伝導性や強磁性は20世紀前半まで、金属とその酸化物の性質と考えられていた。後半に入りそれ らの物性を分子で実現する試みが始まり、現在では転移温度が低い等、一部の問題は残っているものの有機伝導体、有

物性 材料	電気	磁気	光	熱	力学的	複合物性材料	電 : 磁	電気 - 光	磁気 - 光
無機物						無機物			
金属						金属			
分子性物質						分子性物質			

機超伝導体、分子強磁性体等が現実のものとなっている。 その結果、ほぼ全ての単純な物性は、分子性物質で実現 されたことになる。今後は分子性物質でのみ実現可能な、 複合物性を持つ固体の構築研究が次のターゲットになる であろう。現在ターゲットになっている複合物性は、磁 性金属、巨大磁気抵抗体、光応答性強磁性体、不斉磁石 等がある。この中で特に光に対して透明な不斉磁石は、 分子性物質でのみ実現可能である。不斉磁石では、不斉 分子による光学活性と、磁性体による磁気光学効果、 ファラデー効果の単なる足し合わせの物性以外に磁気不 斉光学効果と呼ばれる全く新しい、特異な効果が現れる と理論的に予想されている。このような新しい物性を持 つと考えられる不斉分子磁石は現在では実現しつつある。 本研究会では、これらの新しい複合物性について考えて みたい。





#### 生体分子科学

生体系には、たくさんの不思議な反応がある。本来、電気を通さないタンパク質中を電子がびゅんびゅん移動してみたり、イオンや分子がタンパク質によって一方向に輸送されてみたりする。これらの反応はエネルギー変換のために重要だ。筋肉だって不思議だし、視覚だってそうだ。こういう反応もタンパク質によって担われている。いくつかのタンパク質は、X線結晶構造解析によって3次元立体構造が判明している。中には分子量が100万に達するものもある。その静的構造と機能とのあいだの橋渡しをするのが動的構造変化であり、これをもとに反応のしくみを明らかにするのが、ぼくらの興味を持っている生体分子科学の主要な部分だ。

## 東京大学大学院総合文化研究科 小倉 尚志



これまでにぼくらは、ヒトが生きていくために欠くことのできない酸素分子の、体内での運命を振動分光法によってつきとめた。ぼくらの必要とする測定は、市販の装置を買ってくるだけではすまされない。特定の系に合った独特の装置をつくることは、ぼくらの楽しみだ。そんな装置が、もしたった1種類のタンパク質にしか応用できなくてもかまわない。ぼくらはそのタンパク質の生理的重要性を充分わかっているから。

こんなやりかたで2010年にはタンパク質によるイオンポンプ、電子移動、ATP 合成、分子モーター、情報伝達など 重要な問題が解決に近づいていると思う。

## 2010年の生体分子光科学

京都大学大学院理学研究科 神取 秀樹

「生体分子光科学」とは?

"夢を語って欲しい"という「分子科学 これからの10年」講演会のタイトルを考えたときにうかんできたタイトルである。要は「分子科学」に、来世紀のキーワードである「生体」と「光」を挿入しただけのものであるが、私自身は分子科学の近未来を考える上で重要なものと位置付けている。それは光受容蛋白質の構造が原子レベルで次々と与えられており、反応における対称性や方向性といった問題を取り扱うことができるからである。

その代表が、有名な光合成反応中心である。1984年にはじめての膜蛋白質として決定された紅色細菌光合成反応中心の立体構造は、反応と結びついた興味深い問題を喚起することになった。それは「構造的には対称的な2つの電子移動経路がありながら、実際には片方しか使っていない」という点である。その後、理論的、実験的手法を用いた様々なアプローチが行われ、初期電子移動に関する詳細な描像が得られてきたにも関わらず、方向性の起源は(私の理解では)解決していない問題である。非常に美しい対称構造とそこで生まれる非対称の反応が、生体系の反応効率や選択性に寄与していることは当然予想されることである。

最近になって電荷移動ではなく、シストランス異性化を初期反応とする分子においても同様のことが問題になっている。すなわち、光駆動プロトンポンプとして光合成を行うバクテリオロドプシンの立体構造が決定されたのであるが、その構造によるとプロトン移動のプロトン供与体(レチナールのプロトン化シッフ塩基)から、1個の水分子を挟んで対称的な位置に2つの解離したアスパラギン酸(Asp85と Asp212)が存在することがわかった。にも関わらず、

プロトンは必ず決まったアスパラギン酸にしか移動しない。どうしてプロトンは等距離にある受容体の内で片方しか選ばないのであろうか? この問いに関する魅力的な答えは、レチナールの異性化が一方向にしか起こらない、というものである。非対称的な異性化反応は、蛋白質場での速度、効率や選択性をもうまく説明する可能性がある。

このような「生体分子光科学」が21世紀に与えた課題をクリアするためには、理論は絶対に必要である。ただし原子構造があるといっても、理論だけでは十分ではなく、ダイナミクス及びそれに伴う構造の解析をともに進めていくことが不可欠であろう。以下に私が、「化学と工業」誌、化学のフロンティア(1995年)に寄稿した文章を紹介する。これは『生物の中で起こる化学反応をフェムト秒の光で観測する』というタイトルのもと、超高速分光を用いた実験例を紹介したものであるが、その最後にふれた部分こそ「2010年の生体分子光科学」にとっての課題であり、指針と

なるものと考えている。

おわりに:蛋白質場の面白み

ここに紹介した通り、光受容蛋白質における超高速現象の研究は新たな局面に入っている。これまでのフェムト秒パルスを用いた実験により、光合成反応中心では10<sup>-12</sup>秒、フィトクロムでは10<sup>-11</sup>秒、レチナール蛋白質では10<sup>-13</sup> (or 10<sup>-14</sup>) 秒オーダーの時定数の反応が起こっていることが明らかになった。今後、解決されるべき疑問は、「なぜ、そんなに速い?」、「蛋白質は何をしている?」といったものであろう。解答を与えるためには、蛋白質の構造解析、変異蛋白質の合成、モデル物質の構築、理論的

アプローチや超高速分光では吸収、発光以外の分光法の適用など、様々な分野にまたがった努力が必要であろう。10 億年以上かけて最適化してきた超高速反応の環境としての蛋白質場の理解は、まだ始まったばかりである。



## エネルギーと分子の流れを観る

## 京都大学大学院理学研究科 寺嶋 正秀

溶液中での光の関与する分子科学を考えるとき、その分子運動とエネルギーの流れの複雑さに驚かされる。現在まで種々の分光法や理論を用いて、その全体像を掴むための努力が多くの研究者によりなされてきているが、まだまだ未知の部分が多い。こうしたまだ見えていない部分を明らかにしようとすると、既存のデーターを新たな視点で見直す努力と共に、新しい分光法の開発が不可欠であろう。例えば、我々はこれまでの分光法では明らかにされていなかった新しい面を、過渡回折格子(TG)法を用いることで観ることができることを、以下のように示してきた。

- 1. 分子の受け取った光子エネルギーのほとんどは無輻射遷移により放出される為、生じる熱を検出することで、非常に一般的に励起状態ダイナミックスの研究が可能となる。TG法の時間分解熱検出を用い、これまで多くの研
  - 究者に興味が持たれつつ励起状態の性質の不明で あった分子の励起状態ダイナミックスを明らかにす ることに成功した。
- 2 . 光励起後の分子間エネルギーの流れの素過程を解明することは、物理化学の一つの大きい目標である。これに対し、新しい熱由来の非線形光学効果を見い出して、初めて熱検出として1~3ピコの時間分解能を得ることに成功した。その結果、熱放出に関して多くの研究者がこれまで予想していたのとは異なった描像が明らかとなってきた。
- 3. TG法を用いることで、化学的に活性な過渡分子の Dを測定することに初めて成功した。その結果、そ のダイナミックスはこれまで知られていた通常の分 子の運動とはかなり異なっていることが明らかに



- なった。こうした結果は、従来観測されていなかった溶媒とラジカルとの間の分子間相互作用を反映している。
- 4. 過渡回折格子法に基づいた新しい手法を開発し、光化学反応のエンタルピーや分子体積変化を正確に測定することに成功した。多くの反応に一般的に用いることのできる分光学的手法は、現在のところ唯一この手法のみであり、これまで不確かなエネルギーや分子体積の測定で話の進んでいた分子科学の分野に貢献できると思われる。更に、この手法の時間分解蛋白質構造変化検出への発展も進めている。
- 5. 円二色性は、高次構造を解明するために有力な手法であるが、多くの分光法のなかでほぼ唯一速い時間分解測定が困難な(事実上不可能な)手法であった。この検出法に対し、過渡回折格子法を持ちいることで、高感度に時間分解測定が可能であることを理論的に示し、実際に検出を確認した。これにより、反応中間状態での構造とそのダイナミックスが追跡できる可能性が開けてきた。

いずれも、TG法を分子科学へ応用する以前には考えられなかった測定及び結果といえる。2010年という将来、溶液内での分子科学は、どこまで進み、どのような展開を見せるであろうか。こうした研究での困難さは、分子レベルで詳細に研究しようとすると、ともすれば気相あるいは固相の分子科学になってしまうことにあると思う。エネルギーと分子の流れを観るという観点から考えてみると、乱雑な分子運動をそのままにしておいて溶液中での空間的に制限された領域でのダイナミックスが観測されれば、溶液内の分子科学に新しい局面が開かれると思われる。こうした方向での、予想あるいは希望される発展をもう少し具体的に考えてみたい。

## 溶液のダイナミクスの理解に向けて

近年の実験技術の進歩により、サブピコ秒で進行する 溶液や生体内の化学反応や溶媒運動を時間領域で観測でき るようになってきた。分子間運動の中でも、水の分子間運 動は特に速く、100 fs以下の溶媒和ダイナミクスが見られ ている。<sup>1)</sup> また、水のもう一つの特徴として、水素結合 による(フラストレーションのある)ネットワーク系で間 欠的ダイナミクスを示すということが挙げられる。<sup>2)</sup>

我々は、誘電緩和、ラマン、中性子散乱等の観測量、基準振動や化学反応に水のダイナミクスがどのように現れているか解析を進めてきた。 $^{3)}$  その結果の一例として、 $CCl_4$ 等の低振動数ラマン散乱強度の振動数 (f) 依存性が $1/f^{\alpha}$  ( $\alpha$  = 2) で表されるのに対し、水の場合には  $1/f^{\alpha}$  ( $\alpha$  = 1.3)となることが実験的に知られているが、熱振動を取

#### 名古屋大学大学院理学研究科 斉藤 真司



り除いた基本構造の変化からも同様な振動数依存性が得られ、水のラマンに見られる振動数依存性は間欠的な水素結合構造の変化を反映していることが分かった。また、谷村により提案された5次非線形分光法である2次元ラマン分光法<sup>4)</sup>では、低次分光法では見ることのできない位相空間ダイナミクスの情報が含まれていること、モード間結合の情報が得られること<sup>3,5)</sup>等が明らかになり、溶液ダイナミクスや化学反応の解析等への応用が期待される。

さらに現在は、分子性液体(例えば、温度を下げると容易に氷(結晶)になる水)の結晶化過程の分子論的メカニズム、水素結合構造の変化と関係づけられる1/f的なダイナミクスを与える力学的起源の解析など、比較的遅いダイナミクスの解析を進めている。また、高次非線形分光法は、上に述べた複雑なダイナミクスの実験的解析手段であるばかりでなく、位相空間ダイナミクスの情報を有しており、非線形力学の面からも今後の発展に興味が持たれる。

- 1) R. Jimenez et al., Nature 369, 471 (1994).
- 2) I. Ohmine and H. Tanaka, Chem. Rev. 93, 2545 (1993).
- 3) M. Cho et al., J. Chem. Phys. 100, 6672 (1994); S. Saito and I. Ohmine, ibid. 101, 6063 (1994); ibid. 102, 3566 (1995); ibid. 106, 4889 (1997); ibid. 108, 240 (1998); C. Kobayashi et al., ibid. 105, 6358 (1996).
- 4) Y. Tanimura and S. Mukamel, J. Chem. Phys. 99, 9496 (1993).
- 5) K. Okumura and Y. Tanimura, Chem. Phys. Lett. 278, 175 (1997).

# 量子生物学の夢を語る~生体分子科学の量子力学的基礎づけはどこまで可能か~ 九州工業大学情報工学部 佐藤 文俊

量子力学を用いて生物の営みを理解するという夢を初めて語った文献として、1944年のSchrödingerの小冊子『生命とは何か』[1] が有名である。我が国でも1967年福井らによって『生体量子化学』[2] が編集され、タンパク質や核酸などの生体分子の電子状態を分子軌道法によって明らかにしようとする試みがなされた。特に後者では、生体内の化学物質ならびにそれらの関与する諸現象を量子力学的に取り扱う必要があることをはっきりと説いている。

タンパク質や核酸の量子力学的基礎づけは、通常の量子化学の方法と原理的には異ならない。ただし、あまりにも

複雑な構造を持つため、やむを得ずモデルや計算の簡略化が行われるのが普通で、生物学的に意味のあるモデルとなるかどうかは定かではない。本発表者らは生体分子の電子状態を本来持っている構造をなるべく簡略化せずに理解することを目的に、大型分子や金属錯体の電子状態計算に有効な密度汎関数法に基づく分子軌道法プログラムを作成・発展させてきた。これを用いて近々小タンパク質の全電子計算が行える予定である。

計算対象が生体分子と言えども、計算自体に本質的な制限はほとんどない。一回の計算が実用的なコンピュータを使用して現実的な時間内で実行可能かどうかが、計算上限の目安を与える。現在のところコンピュータのCPU能力、メモリ・ディスク量の変遷は1.5~2.0倍/年である。したがって、2010年までに現在我々が使用しているものの10<sup>3</sup>~10<sup>4</sup>倍の能力をもつコンピュータが登場することが十分予測される。この倍率が個人所有からスーパーコンピュータまでスケーラブルであると仮定すれば、パソコンが現在の分子研大型計算機なみに、大型計算機はP(ペタ)Flopsの時代に突入する。これらの値から外挿すると、2010年にはパソコンで小タンパク質の全電子計算が実行できる。スーパー



コンピュータを用いれば数千残基のタンパク質集合体の 全電子計算が実行できるようになり、小タンパク質なら ば実質的な反応ポテンシャル面が描けるようになると正 に夢のような予想ができる。

しかし、重要な問題が幾つか残されている。膨大な計算結果をどのように解析し、理解するのか。軌道数の増加に伴う、特にペプチド結合のような繰り返しの構造からくる、擬似縮退が収束に与える悪い影響をどのように取り除くのか。また計算精度がもはや十分とは限らないかもしれない、等である。常にコンピュータの最大限の能力を引き出した研究を続けるためには、これらの問題を解決していかなければならないと考えている。

[1] 日本語訳: E. Schrödinger, 生命とは何か 岡・鎮目訳, 岩波新書, 1951.

[2] 福井編, 生体量子化学 共立出版, 1967.



## 大気科学と分子科学の対抗軸



## 東京大学先端科学技術研究所 秋元 肇

私はかっては分子科学の一分野である気相光化学・ラジカル分光などの研究に従事し、光化学大気汚染の研究という環境科学との二足の草鞋をはき続けた時代を経て、最近の10年余りは大気科学の一分野である「大気化学」研究に従事している研究者である。これまでの30数年にわたる私の研究者人生を通して、科学が20世紀の科学から21世紀の科学へと100年スケールでの変遷をとげつつあるという景観が見えてきたように思われる。20世紀の科学の特質は、これまでの分子科学に代表されるように、たとえば物質を原子・分子に分割した時に見えてくる究極の純粋な姿にこそ科学の本質があり、我々が日常目にする現実の自然現象はその組み合わせで理解されるはずだという認識に貫

かれている点である。この認識の帰結として、例えば大気の現象に取り組む科学は「応用科学」であり、そこにはなんら本質的に新しいことはないと見る認識が生まれてくる。そこでは分子科学の方が大気科学より本質的でありより深く、したがって優れた研究者にとって、そのほうが研究としてよりおもしろいとする感覚が培われてきた。

しかしながらこの感覚は20世紀も終わりを迎えようとしている今、明らかに変わりつつある。これまでの100年間に近い研究を通じて、分子の姿に代表される要素科学の原理はほぼ確立されたように思われる。そうなると研究者の興味は、人間を含めた生命現象の本質、地球上の生命と環境の相関、地球環境を含めた現代文明の行き着く先といった、相互作用のより複雑なトータルな現象そのものに向かうことになる。いわば「人間とは何か、何処から来て何処へ行くのか」という人間の基本的な問いかけに答える科学が最も興味の持たれる科学として浮上してきたといえる。こうした問いかけは何も今に始まったことではなく100年前から、おそらくもっとずっと以前から抱かれていたものである。しかしこうした問いに科学が答えるには、分子科学を初めとするこれまでの要素科学の発展を待たなければならなかった。21世紀を迎える今になってようやくその準備が整ったと言えよう。

現在、大気化学は「応用科学」としてよりも、化学、物理学、生物・生態学を包括するトランスディシプリナリーな新しい基礎科学分野としてとらえられている。21世紀には多かれ少なかれこうしたフィードバックを含む複雑な系そのものを直接に扱う科学が、より自然の本質に迫るものであると言う感覚が生まれ、多くの優れた研究者が物質、生命、環境に関わるこうした科学をより面白いと感ずるようになるであろう。

#### 暗黒星雲の化学組成と進化

#### 東京大学大学院理学研究科 山本 智

1960年代後半に始まる星間分子の発見ラッシュは、分子科学と天文学の間に新しい境界領域、「星間化学」、を生みだした。星間分子雲は、温度が10-100 K、分子個数密度が1立方センチ当たり100から100万程度という、実験室から見ると低温、低密度の極限的環境にある。そこでの分子の同定や生成過程の理解は、分子構造、分子分光学や、気相反応/表面反応ダイナミクスなどの分子科学の実験、理論と深く関係しており、相互の交流を通して分子科学、天文学の両面における発展がなされてきた。

ここでは、その一例として、太陽質量程度の星の生成場所である暗黒星雲の高密度コアについて、その化学組成の



特徴とそこでの分子生成機構について概観する。そして、そのような高密度コアが重力収縮によって星を生む過程で、化学組成がどのように変化するかについて、電波望遠鏡による観測と化学モデルの両面から議論する。そして、この分野において今後10年の間に予想される展開と、計画されている望遠鏡プロジェクトについて紹介したい。

## 複素電子顕微鏡 - 1分子の蛋白質・核酸構造決定は可能か? 生理学研究所 永山 國昭

現在の電子顕微鏡は光学顕微鏡に比べ、本来の性能を出し切れていない。光学顕微鏡では分解能が極限的に実現しており、分解能限界は波長の約1/3である。一方電子顕微鏡では、たとえば100 kVの装置の場合、物質波としての波長は0.0037 nmだが、現在の到達分解能は約0.3 nmで、分解能限界から考えられる0.001 nmに比べ、性能が1/100以下に落ちている。この原因は電子顕微鏡レンズの収差のためである。さらに正確に言えば、収差がもたらす伝達関数(CTF)による画像変調のためである。この積年の電子顕微鏡の病根は正しい復調法がわかり、CTFを像関数から除ければ退治できる。



分解能限界の原因である収差が、像形成におい

て、どのように作用するかを紹介し、過去の収差補正研究の努力をふりかえる。その上で変調 - 復調問題の本質を議論し、現行の電子顕微鏡の分解能限界を1ケタ(~0.03 nm)改善する新しい方法を提案する。 複素電子顕微鏡

1回の撮像で得られる像は、像関数の強度像という実数像 ( $|Z|^2$ )である。しかしこれを用いたのでは CTF の変調を補正できない。複素数の空間関数である Z(r) そのものを像として取り出す必要がある。そのために同一試料に対し実数部分と虚数部分を独立に観測する必要がある。従って次のような方法を採用した。

- 1) Z(r) の線形項 (実または虚)を取り出すため、明視野法を適用する。
- 2) 通常電顕の $|1+Z|^2$ より実数像を、位相差電顕の $|i+Z|^2$ より虚数像を取り出し、両者を組み合わせ、Z(r)を得る。
- 3) Z(r) をフーリエ変換し、k空間で数値的に CTF を求め、CTF の逆フィルタを掛けて収差を除く。
- 4) 補正後もう1度フーリエ変換し、実空間の無収差複素像を得る。

この顕微鏡の応用として蛋白質、核酸分子 1 個の構造解析を考える。電子線ダメージの問題、コントラストの問題、 データ処理の問題と共に2010年の電子顕微鏡像を包括的に語る。

## 性分化機構

## 基礎生物学研究所 諸橋憲一郎

遺伝子発現をとおして細胞や組織の分化を解明しようという試みは、転写調節に必要な遺伝子上の配列やそれに結合するタンパク質因子の同定が可能になったことで、ここ10年の間に大きな進展を見せている。こういった目的で解析される遺伝子には組織特異的発現を示すものが多く含まれるが、理由は単純である。ある組織特異的に発現する遺伝子は「その組織」に、ある種の特徴を与えることによって「その組織」を「その組織」たらしめる。従って、ある組織特異的遺伝子の転写調節機構を解明することが、「その組織」の分化の機構を解明することと同様の意味を持つものであると考えられる。このときに重要な点は「その組織」に特異的発現を示す遺伝子が如何にして「その組織」特異的な発現機構を獲得するかということである。よって、ある組織特異的な遺伝子の転写調節を調べるときには、その遺伝子の組織特異的な転写を可能にする遺伝子上の配列と、そこに結合する組織特異的な転写因子に注目すればよいことになる。組織の分化を念頭に置きながらこのようなアプローチを採用する場合、次に行なうことは"その組織"特異的な転写因子をコードする遺伝子の発現調節機構の解析である。当然のことであるが、ある組織特異的な遺伝子

発現が認められる以前に、それを制御する組織特異的転写因子は発現していなければならず、その転写因子の遺伝子を調節する因子は更にそれ以前に発現していることになる。すなわち、このアプローチは必然的に時間軸に添った細胞分化の過程を逆行して行くものと考えられる。我々はステロイドホルモン産生組織特異的な発現を示す P450 遺伝子を用い、このアプローチに従ってステロイドホルモン産生組織の分化の過程を調べてきた。本講演ではこの研究で得られた結果を中心に哺乳動物における性決定機構に関する研究の現状を紹介する。



## 1分子計測でみた生物分子機械のやわらかさ

## 大阪大学医学部 柳田 敏雄

我々の研究の目的は、生体システムの"やわらかさ"に、それを構成するタンパク質分子機械がどのように関わっているのか、"なぜ生物素子はタンパク質でできているのか"を明らかにすることである。そのために、これまで生体分子1個を、観る、操るそして計る技術、すなわち1分子計測技術を開発してきた。さらに、化学反応(ATPase反応)の1分子イメージング技術の開発にも成功した。

これらの技術を使って、分子機械の典型である生物分子モーター1個のATPase反応と力学反応を同時に測定すること、すなわち、入出力応答を直接同時に観測することに最近成功した。そして、モーター分子はATPase反応と固く結びついて力学反応を起こすのではなく、履歴(記憶)作用を有して、タイミングを計りながら出力応答することがで



きることが解った。また、ATPase反応と力学反応は1:1に結合しておらず、条件に応じて1ATP分解中におこる力学反応の回数は変化することが証明された。これらの結果は、タンパク質分子は、従来考えれれていたような鍵と鍵穴式の単純な反応をしているのではないことを示している。

なぜ、タンパク質はこのような多様応答が可能なのか?の問いに答えるために、1分子分光、FRET法でタンパク質1分子の構造変化を実時間追跡した。結果、秒のオーダーでゆっくりと自発的に変化していることが示唆された。すなわち、タンパク質分子は複数の準安定な構造をとり、その間をゆっくりと遷移しているらしい。これにより、エネルギーや情報を貯めタイミングをとって出力(応答)したり、小出しに出力したりできると考えられる。

熱ノイズ程度のエネルギーで自発的に状態を変えることができることが、タンパク質の状態が外部環境にも強く影響を受け、同じ入力シグナルでも出力応答が状況に応じて変調をうけることを意味している。このようなタンパク質の性質は、集合体の中でダイナミックな分子ネットワークを可能にし、その結果システムのやわらかさが生まれると考えられる。生物システムのやわらかさは、タンパク質分子機械の性質に大きく起因していると思われる。



## 物質科学:分子と結晶

## 東京大学大学院理学系研究科 福山 秀敏

物質が持つ性質(物性)の多様性はそれを構成する原子の種類およびその空間的配置の多様性の反映である。より 具体的には個々の物質中の電子の運動の違いが物性を決定する。物質の中でも最も典型的な形態は固体であるが、通 常、そのサイズは、原子の大きさに比べれば桁違いに大きく原子がぎっしりつまっている状況にあり、そのため凝縮 系ともよばれる。このような凝縮系の性質が、1コの水素原子のスペクトルと同様に量子力学によって明快に記述さ れる。それはバンド理論に基づいた固体電子論である。

バンド理論は固体中の電子の波動性に基礎を置いたもので、電子は波数 (k) で正しく特徴づけられている。この波数による状態の分類と電子がフェルミの排他統計に従う粒子であることを基礎にして、固体の持つ性質の激しい違いである金属と絶縁体を見事に説明する。このバンド理論は電子・正孔という概念を自然に導入し金属・絶縁体の違いばかりでなく、その中間の状態と言うべき半導体・半金属という概念も明らかにした。とりわけ、半導体はバンド理論に於ける絶縁体、即ちバンド絶縁体、にキャリア (電子或いは正孔)が添加 (ドープ)された系と位置づけられ、その少数のキャリアが (その少数さの故に)電圧(ゲード電圧)などの外部パラメーターによって容易に制御されることとなる。半導体に対するこの概念の正しさが、今日の高度情報社会の根幹にある半導体テクノロジーを支えている。

この関係を概念的に端的に言えば、「バンド理論が情報社会の基盤を支えている」。

このように大きな成功を収めているバンド理論 も万能ではなく根本的に破綻する状況がある。 「モット絶縁体」である。それは、電子と格子点 の数が丁度等しく、且つ、電子間のクーロン相互 作用が強いとき(強相関系)に実現する。このモッ ト絶縁体状態はバンド絶縁体とは異なり、必ず電 子のスピンが各格子に生き残り磁性体となる。 様々な磁石は基本的にはこのようにして出現す る。このモット絶縁体にキャリアを注入すると、 当然電気伝導が出現する。このドープされたモッ ト絶縁体は絶縁体にキャリアが注入されたという 点では半導体と共通であるが、半導体とは本質的 な違いがある。それはキャリアが注入される前の



物質、母物質、の状態が全く異なるという点である。バンド絶縁体は結晶の周期ポテンシャルの干渉によって生じた バンドギャップに起因し磁気的には不活発な世界であるが、モット絶縁体はクーロン相互作用に起因し磁気的には活 性である。この差異は注入されたキャリアの運動形態に本質的な影響を与えるはずであるし実際その通りである。ドー プされたモット絶縁体では電気伝導の様相が磁気的な状態と不可分なのである。銅酸化物に於ける高温超伝導の出現 はまさにこの、ドープされたモット絶縁体の基底状態と考えることが出来る。更に高温超伝導ばかりでなく、大きな 磁気抵抗(磁場による電気抵抗の変化)の出現はここに起源を持つ。

現在の基礎物性物理の最前線はこの強相関系にある。この背後にある基本的潮流は、波数でよく記述されるバンド電子が強いクーロン相互作用のもとでどのように実空間で粒子として局在する傾向を持つかの追究である。これは、量子力学的粒子の持つ宿命である波動性と粒子性の拮抗の様子をいかに理解するかの問題そのものなのである。

実はこの波数空間対実空間の融合という問題は物質科学全体に遍在する命題でもある。物性物理は k 空間をもとに強相関効果の理解を目指しているのに対して、化学はむしろ逆に空間に局在した分子(それは強相関の世界であるが)を基礎に分子集合体を志向する。この分子集合体の典型例は分子で構成された結晶、即ち分子性結晶であり、分子性導体(有機導体)の研究は物理・化学が見事に融合している分野である。このような物性物理と化学が融合した研究領域には基礎科学としての大きな可能性が期待される。ここには、物性の開拓の果てしない夢がある。現時点では、この融合領域に対する研究は個々の分子と結晶というように関与する原子ないし分子の数の間に大きな隔たりがある。し

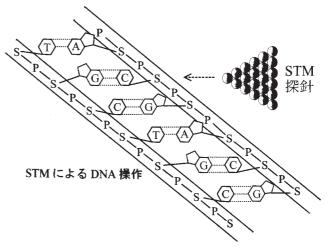
かし、21世紀には多くの分子の集合体でありながら固体のような巨大な数の集合ではないその中間の領域へと研究の目標が拡がっていこう。高分子・蛋白質や遺伝子の構造とその機能の解明という問題はこのように物質科学の中にはっきり位置づけられるであろう。

## ひとつひとつの原子・分子をあやつる科学 - 新機能調和物質の創成へ -

大阪大学産業科学研究所 川合 知二

化学の教科書には、通常 1 個の分子の構造やその反応 式が描かれています。固体化学の教科書にも 1 単位格子 の構造図が描かれています。しかし、実際に結晶を作っ たり、有機分子を反応させるには、10<sup>23</sup> 個(アボガドロ 数)の原子や分子が集まった状態で研究するのが普通で す。

本講演では、1個1個の原子や分子を SPM (走査プローブ顕微鏡)の針先で観察しながらあやつる研究の現状と今後の展望について話をします。また、レーザーを用いて1層づつ原子分子層を積み上げ、今まで無かった

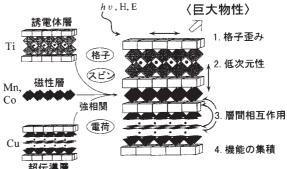


巨大な機能を持つ人工的な結晶を創り出す話もします。この様な、1原子・分子の化学によって、DNA分子を直接観たり、動かしたり、反応させたり、また、磁性/誘電性/超伝導機能が融合した全く新しい"機能調和材料"を生み出すことができます。この1原子・分子化学の原理的な説明からはじめて、現状を紹介しながら、今後どの様に発展



するか、また、どの様な目標に向かって研究を進めるべ きかを展望してみたいと思います。

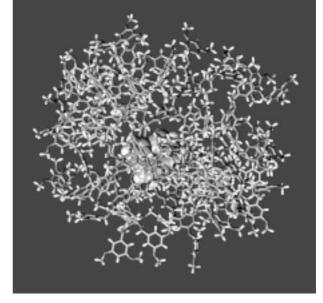
# 機能調和人工格子



## 人工樹木による光エネルギー変換 東京大学大学院工学研究科 相田 卓三

光エネルギーの捕集と貯蔵の実現は、21世紀の科学者に課せられた極めて重要な課題であり、光合成をお手本にし た様々な可能性が検討されている。

さて、樹木は、太陽光を効率よく捕集し、そのエネルギー を貯蔵している。我々は、樹木によく似たナノスケールの 球状高分子(デンドリマー)が、多数の光子を捕集し、そ のエネルギーを分子内に物理的なエネルギーとして貯蔵す るという全く新しい現象を見出した。この原理を利用する と、光子一個あたりのエネルギーが小さく、通常化学反応 を誘起できない赤外線領域の光で、ある種の化学反応を引 き起こすことができる。赤外レーザーが発明されたとき、 多くの科学者が、ある特定の結合を赤外レーザーで振動励 起すると、モードセレクティブな多光子過程によりその結 合を切断できるに違いない、と期待した。しかし、エネル ギーの高速な散逸(再分配)過程の存在が明らかにされ、



この夢はやがて否定された。つまり、赤外レーザーはここでは高価なブンゼンバーナーにすぎない。これとは対照的 に、巨大な球状デンドリマーの内部では、わずか数万円で買えるグローバーランプからの赤外光で化学反応が起こる。 しかも、反応は結合特異的(モードセレクティブ)に起こる。面白いことに、枝の一部が欠損したデンドリマーでは、 そのような光化学反応は起こらない。なんとも贅沢な要求である。もう一つの「不思議」は、赤外線により熱的には 起こらない反応が誘起できる、ということである。すなわち、巨大な球状デンドリマーは、自分の励起状態が熱で誘 起されたのか、赤外線で誘起されたのかを感知していることになり、「振動励起=熱」という従来の図式を当てはめる ことのできない異常性がある。

この異常な現象の本質に迫るには、化学、物理、理論の研究者が三位一体となって研究を行う必要があることは言



うまでもない。2010年の科学・技術は、このような分野を 越えた研究形態によって発展して行くものと考えられ、大 学での教育を含め、分野の意識を持たない若手研究者の育 成や研究組織の再編が望まれる。最後に一言:生体系には、 科学者の想像力をかき立てる様々なモチーフが存在してい る。一方、合成化学者の手には、必然性の如何に関わらず 生み出された人工物の無限のライブラリーがある。研究分 野間の垣根が取り払われることにより、それらの中から 「生命を越える新機能物質」が発掘される可能性は高い。

## 光機能界面の働き



## 東京大学大学院工学研究科 藤嶋 昭

光電気化学は、電気化学系に適当な波長の光を照射することにより、励起状態の関与する電気化学反応が実現できるという概念が基となり、世界的に活発な研究が実施されている。この端緒となったのが、1960年代後半に酸化チタン電極を用いて行った半導体光電極反応であり、種々の固液界面、固気界面における光化学反応へと発展してきている。光界面現象の代表例と言うことができよう。

光電気化学の研究の中でも、基礎・応用の両面において重要なのは、微弱光下における酸化物半導体を用いる光触媒に関する研究である。吸着分子数と吸収される光子数との関係の定量的考察から、光触媒反応の特徴が、微弱光を用いたときにより顕著に現れるとの考察をもとに、それが今までにな

かった室内光程度の微弱光を利用した、光触媒薄膜コーティング材料の提案につながってきている。現在、光触媒反応を利用した抗菌・セルフクリーニング・空気浄化材料、新機能建材などとして実用展開が進められている。

また最近、酸化チタンなどの酸化物半導体表面が光照射により、水および油の両方に対して非常に濡れ性が良くなることが見いだされた。このような高い両親媒性は従来の材料には見られないものである。この現象は、光照射による酸化物半導体上の微小で規則的な親水性・親油性構造の出現に起因している。この新規な表面光化学反応は、今後の大きな進展が期待されている。

他にも、光化学と電気化学の組み合わせにより、超高密度情報記録素子への応用が可能なLB膜、可視光で繰り返し書き込み・消去が可能な新しい光表示素子も提案された。また、ダイヤモンド薄膜やホログラム材料においても、光化学と電気化学の組み合わせにより新しい領域が切り開かれようとしている。さらに、コロイド状酸化チタン微粒子を用いた悪性腫瘍の治療方法の開発、半導体光電極反応に基づく炭酸ガスの資源化の試みなども注目すべきテーマである。

また、上述の様々な反応過程の解析を行うために、各種表面分析法の提案や開発が必要である。光音響分光法(PAS) Time Domain 分光法、カラーインピーダンス法、第二高調波の干渉法、光導波路法(OWG)、光ポテンシャル法など、新しい in situ 測定法の開発もおこなわれてきた。これらの測定法に加え、走査プローブ顕微鏡や微小電極なども用い、光電気化学反応の基礎的理解を深めてゆくことの必要性が、ますます大きくなってきている。

# 4-4 インフォーマルミーティング「分子研の今後のあり方について」

インフォーマルミーティング10月19日19:30~21:30に約70人の出席のもとに開催された。その記録を以下に記すが、文中"講演"というのは同日の13:00~17:40に行われた講演会「分子科学 これからの10年」の講演をさす。また発言者の名前と所属は文末に記した。

北川: この会議は分子研の点検評価の作業の一環として行うもので、今日の会議で何等かの結論を引きだそうというものではない。懇親会で話されるようなインフォーマルな気分で思うままを語っていただきたい。分子研の教官にとっては、ブレーンストーミングの場であり、外部の広い視野から見た分子研観を聞いて、今後の方針の設定の際



に役立てばありがたいと願っている。まずこの会を開催するに到った理由を説明させていただきたい。

分子研の創立以来23年がたち、分子科学の内容は大きく変化している。例えばこの分野の中心学会である分子構造総合討論会も大きく様変わりし、この学会のあり方について現在検討されている。しかし分子研は創立以来、研究系の構成は1つ増えたこと以外変わっていない。系の名前を変えることはさておいて、実質的には設立当初に意図された系の主題は成熟期に入っているものがあるのに対し、学際領域に新しい重要な研究課題が出てきている。分子研ではこれから3年間に4人の教授が停年退官するので、分子研を変えていくには今がよい時期である。また岡崎機構全体として、分子生命体科学研究センターをつくって新しいサイエンスを展開しようという話が進んでいる。その是非も含めて、この際分子研のあり方について原点に立ち返って考え直し、新しい出発の時にしてはどうかという事が本会を開催するに到った主な理由である。

具体的には4つの課題に分けて討論して頂きたいと願っている。

第一は『分子研がカバーするべき学問分野』で、設立当初に考えられた分子科学のコアと呼ばれている分野と、その周辺で発展している基礎科学分野とのバランスをどのように考えるかということである。社会的ニーズというものは応用分子科学の方に大きいし、政府の研究予算もそちらにより大きく配分されている。現在分子研の予算は縮小されつつある。コアの分子科学は重要であるが、全部をコアの部分で固めるべきではないであろう。コアであれ周辺分野であれ、教科書の一部を書替えるような big results を出せる研究所でないといけないと考えている。本年の「大学と科学」のテーマに化学中心のものは無いということ等は、我々化学者は真剣に考えるべきことで、「化学」に研究費がどれだけ配分されるかに影響する。

第二は『研究所と大学の違い』をどう認識して、どこに研究所の特色を発揮するかにある。大学は教育が第一義で、中教審による中、高等学校の教育改訂案で見ていると化学担当の大学教官の教育負担は今後益々大きくなると思われる。そういう時に、分子研は大学と同じテーマを競争する形でやっている今の形態でよいかどうか検討すべきことで、例えば客員や流動教官制度を利用して時限付プロジェクト研究を実施するのが研究所で、

そのリーダーが研究所に居るというのも1つの考え方である。

第三は『大学共同利用機関という名において、どういう活動が望まれるか』である。設立当初は日本の経済事情が悪かったため高価な設備を分子研において、それを全国の人が利用するという考え方が強かったが、今はコンピューターとシンクロトロン以外はそのカテゴリーにはいる設備は無くなった。コンピューターもワークステーションの発展があり、シンクロトロンもSPring-8など強力なものが他にでてきて、共同利用設備としての存在価値は下がりつつあるように思う。研究会もこの頃は科研費の会合が多くなり、研究会が多すぎるくらいで、分子研研究会の意義についても検討の必要がある。共同利用という概念をどのように使っていくと分子科学全体に役立つのか、外部の先生の意見を聞きたいところである。

第四は『分子研の研究体制』である。分子研は多数の優れた助教授を育て、その人達が各大学で教授として活躍しておられる。その実績は胸を張っていえるところである。しかし COE として世の中に誇れる成果を出してきたかどうかについて、少なくとも現在については頭を傾げる。所の研究費の配分は所長が決める仕組みで、それ相応の成果が得られているかどうかは、年 1 回所全体のヒアリングで全員が聞くが、これで目的を達しているかどうか。研究グループは、教授(或は助教授)と助手及び技官(あるいは IMS フェロー)3 人が研究の基本チームで、平等という事が第一原則になっている。これでは大学の大きな講座並の成果も出せない可能性がある。大きな結果を出すためにはどういう制度を実施していくべきか、大いに反省し新しい施策を実行しないと、今のままでは big results は出にくいので、そのため研究所の存在価値が無くなっていくと危惧する。"人を育てるところ"と"成果を出すところ"のウェイトの置き方を考えていくことが大事で、研究所の評価としては最も重要なところであり、所長の運営方針に対する点検評価ともなる。

以上四点を今から2時間で自由に討論していただきたい。

伊藤所長: 自由な雰囲気で自由に発言ください。まず乾杯いたしましょう。

#### 「学問分野」

川副: みなさんをリラックスさせられる発言をいたします。分子研の専門分野は、私の印象では孤立分子・電子系、またはそれで定義できる系の集合体の研究ではないでしょうか? それを越えた集合体、例えば半導体のようなものもカバーする事を考えてはどうでしょう。

関: 本日の田村さんのご講演に対する質疑応答の中で、まだ余り開拓されていない分野として、無機物と有機物の 界面の問題が指摘されました。これは大変面白い分野で、実は写真や有機電界発光素子などの、実用に結びつ いたり、結びつこうとしている分野で既に大いに研究されています。この例からも分かるように、いわばクラ シックな有機半導体・有機固体の分野と、純粋科学として発展した有機伝導体・超伝導体等の分野が余りに分 化してしまい、交流が不十分になってしまっているのではないでしょうか。分子研でも、このような交流に意 を用いて戴ければと思います。歴史的には半導体による光電気化学の研究をされていた坂田グループの例もあ り、研究が実用的なものであっても、分子研のスコープに入れるべきではないでしょうか。

浜口: 分子研がカバーすべき学問分野は何かという議論は、何か外にある既存の分野のどれを選ぶかというニュアンスがあります。分子研に期待されるのは、そうではなくて分子研の中から何か新しい分野を作ることと思います。 どういう分野を創出していくかが重要ではないでしょうか?

北川: 人事選考での分野にはなにも書かないということですか?

浜口: そういう意味では分野の指定は必要ないでしょう。広い意味での分子科学の領域から人を選んで、新しい分野

が創出されれば理想です。

田中: どういう学問分野をすべきかという問いかけですが、私は学問分野を選ぶのではなく、研究の姿勢を問うべきではないかと思います。今までは道楽でやってきたと公言できる方法で科学はうまくやってこれましたが、これから道楽ではすまないのではないでしょうか?今まで道楽の科学を支えてきてくれたものが、今後は期待できないのではないでしょうか?これからは科学者自身が、科学の重要性を訴えることのできるものを開拓していく必要性があります。

正畠: 昼の講演を聞いていて感じましたことは、分子研で全く違った見方からScienceを行っても良いのではないか? ということです。追随をする方法にもとづく研究は、ある程度の成果は出るでしょう。それは全くクレージー な考え方を許す方向ではないと思います。追随的研究では分子研の将来は危ういと考えますので、クレージー なアイディアを実行し得るようにしておくこと、それをやるような変わった人を大切にすることが重要です。 分野としては領域をすべてカバーしてしまえば良いのではないでしょうか?

岡田: 分子研創設以前のことを思い出しました。分子科学若手の会で、どうやって若手を送り込むかということを話し合いました。初代所長・赤松先生は全国行脚をされて分子研でやるべき分野を聞いて回られたと伺っております。その結論は「超」のつく分野をやってはどうかというふうにまとめられたと思います。その時代には分子科学はある程度「成熟」しかかった時期でしたので、年長の先生方と若手の間でどの分野が必要だろうかというコンセンサスがとれており、その中から分野が選ばれたと思います。もちろん予想以上に発展した分野もありましたが、ほぼ期待された成果が出たといって良いでしょう。しかし、現在は事情が大きく異なっていると思います。ですから、結論は分野を設定するのではなくて、人を選んでいくことが良いということです。研究分野はその人に任すという考え方です。

西: 外から最高の人を選んでくるには、現在の分子研教授のポジションに魅力が低すぎると思います。外から良い 人を選ぶには、どのようにしたら魅力のあるポジションとなるでしょうか?

岡田: 直接の答えはありません。人事選考で熱心に議論して選んだ方を、来ていただくよう説得するしか道は無いと 思います。

加藤: 分子は原子の集まり、そして分子が集まって集合体を作る、その原理・構造・機能・過程等を研究するのが分子科学でしょう。その分子科学の基礎的な分野で重要な貢献をする人を求めるべきで、応用を主として趣向すべきではないと思います。

増原: 分子研の使命は、分子科学の研究の重要性をほかの学問分野にアピールする事です。そのときに確立型の研究の仕方と、開拓型の研究の仕方があると思います。分子研では確立型よりもむしろ開拓型の研究をすべきではないでしょうか?人事交流が速いですから、開拓型のプロジェクトがやりやすいのではないでしょうか?ただし、人員構成的にはプロジェクト研究がやりにくいなら、ポスドクなどを利用して魅力的なポジションとなるように方策を採れば良いと思います。

#### 「大学と研究所の関係」

北川: 次のテーマの大学と研究所の関係へ移りたいと思います。

川合: 現在の分子研の研究のいくつかを講演で聞かせてもらって、懐かしく思いました。分子研の昔からのやり方は、全く新しい研究ではなくて、ある程度レールの敷かれた研究を、少しだけ先をやり基本的な理解を深め、きれいなデータを出していくというスタイルだと思います。以前は研究費が潤沢でしたからそれはそれで良かった

と思います。分子研は学生がいないので、研究の冒険ができないという面はあります。しかし、レールの無い ところにレールをつくるような、分野を新しく創出できるような人を何人か育てて欲しいと思います。基礎で も応用でも良いから原理的な事をやって欲しい。また、公務員の身分で道楽で、研究をやることはやめてほし い。

田原: 今のご発言はちょっと承伏しかねます。そもそも、レールの無いところにレールをしこうとするような研究は多くの場合うまくいかないのです。そして失敗した研究は表にでません。また、革新的な考えというのは、恐らくはその芽生えの時期においては人に論理だてて説明できるようなものではないと思います。ですのでそのいずれもが、講演などで人前でちゃんと話ができるようなものではありません。ですから、講演を聞かれた印象のみで「ちょっと先の研究のみをやっている研究所」という言い方をなさるのはやや短絡的だと思います。うまくいっているかどうかは別として、チャレンジングな研究にもトライしていると思います。

川副: 今まで分子研では、ちゃんとした選考方法でそれなりの人を選んできています。分子研は個人を大切にする研究所と思いますので、そのうちに結果がでるでしょう。さて、大学と研究所との関係について。我々のところでは、大学院と付置研究所との関係を考えさせられています。はっきり言えることは、付置研究所の研究は良い学生がいなければ不可能であるということです。その意味で、分子研には良い学生がたくさんいるわけではないの



で困難があると思います。研究の道楽論は反対です。少なくとも大声で言うことではありません。

川合: 「ちょっと先をいく研究」以外もやっておられるなら結構です、しかし、それを講演で話してほしかったと思います。また、基礎研究であっても道楽ということはいけない。ドライビングフォースは好奇心であっても、 正当な評価を受けようとするなら、研究の位置づけをはっきりと述べるべきです。

平尾: 道楽論は納得できません。21世紀には許されないと思います。高額のお金を国費から使う以上は責任がありますので、道楽論は公言すべきではありません。大学と研究所の違いは、学生がいるかどうかだと思います。私の研究室の4回生には「君たちは斥候だ」と言っております。学生にはいろいろな可能性があって、新しい方向を目指すことは容易です。分子研はシニアなスタッフで構成されていますので、そのような方向を出すことは困難でしょう。つまり大学の先生は、多かれ少なかれほら吹きであって、アドバルーンを上げて学生をひぱって行くわけですが、シニアなスタッフに対してそれはできないでしょう。分子研のジレンマだと思います。研究所はプロばかりの集団であり、個々の研究者が見通しをもたないといけない。良い人を集めるべきです。

伊藤所長: 道楽論を公言しているつもりはありません。しかし、原理的には道楽論は間違っていないと思っていますし、 好奇心が研究のドライビングフォースだと思います。国民に対して研究の意義や如何に役に立つかを説明しよ うとすると、基礎科学をやる我々としては嘘をついてしまうことになります。説明できる研究は、先の解った 研究になってしまいます。科学のブレークスルーとなる研究は、役に立つ、立たないという尺度では評価でき ません。むしろ当初には見通しの立たない研究が分子研に期待されている。良い人を連れてくることが一番大 事で、連れてきた後はその人を自由にさせる鷹揚さが大切です。 平尾: accountability は、役に立つ立たないという評価とは別だと思います。

伊藤所長: accountability を重視すると、期せずして嘘を言うことになりますので、ただ我々は研究を一生懸命やっていると述べるだけです。

加藤: 道楽という言葉は一般の方には誤解を生むと思います。基礎研究は重要であり、将来の応用にもつながるということをきっちり述べるべきです。

伊藤所長: 道楽という言葉については反省しましょう。しかし、役に立つ役に立たないという尺度のタイムスケールが短 すぎると思います、我々基礎科学の尺度のタイムスケールは50年100年の先です。そのことを主張したい。

加藤: 所長はその考えを持っておられるなら、それを主張し続けるべきです。

梶本: 私も基礎的な研究が重要であると思います。ですから文化となり得る50年100年のタイムスケールのある科学をやるべきだと主張します。さて、大学と研究所の関係についてですが、大学の利点として学生の man power が誇張されますが、現実的には教育に多大の労力を費やしています。分子研の利点を、ポスドクの数の多さと 採り易さの方向に見いだしてはどうでしょうか? 学生を増やす事は考えない方が良いと思います。

関: 私の属する理学部のような所での本務は、純粋な好奇心に従って基礎科学をやることで、このような研究で責任をとるのに一番良い方法はノーベル賞を取ることでしょう。科学研究費はこのような基礎研究をサポートするお金です。一方 CREST などのお金は「役に立つ」仕事をサポートするためのものです。これら2種類のお金を区別すべきでは無いでしょうか。長期的には pure science を守っていくのは重要なことであり、一方でCREST などのお金を貰ったときには役に立つ仕事を行う責任があると思います。

鈴木:「道楽」という言葉は必ずしも適切な言葉ではなく、知的好奇心に従って研究しているということではないで しょうか。

秋元: 所長の基礎科学は、今は役に立たなくても50年後100年後に役に立てば良い、という考えは古いと思います。 基礎科学であっても税金を使っている責任は果たすべきで、それは一般国民の知的好奇心を刺激するような研究をしていく必要があると思います。宇宙とか生物とかの研究は一般の人の知的好奇心を満足するのですが、 分子科学の場合、分子の科学と考えると、一般の人の知的好奇心を満たすのではありませんか。

木下: 基礎科学であるカミオカンデーやB - ファクトリ - には桁違いのお金が出ています。これらは役には立たない 研究でしょう。しかし研究内容を説明する努力を行っていると思います。それがaccountability だと思います。

青山: 私も同じことを感じます。素粒子論や南極については、一般の方に理解してもらえます。しかし化学は一般的に理解してもらえるように説明できていない。今日の講演の内容に、意外性がなかったこともこのことに関係していると思います。

#### 「共同利用研究所としての任務」

北川: 大学共同利用機関としてどうすれば良いか、ご意見をください。

岩田: 秋元さんの言われた、分子科学を「分子の科学」とすべきだという意見に関してですが、科学研究費の特定研究の生物・医学系の三分の一の題目には"分子の"が入っています。このことを考えますと、分子科学研究所のやるべきことがその分野にあるのではないかと思います。

川副: これまでの大学には、学長・副学長以外にマネージャーがいなかったことが問題だったでしょう。そういう意味で、科学がなぜ必要かという一般への宣伝が少なすぎたのではないでしょうか。そのような役割を担ってくれるシステムを分子研で作ってくれませんか?

加藤: 研究の立ち上げ時期に施設利用・共同研究で分子研を大いに利用させていただいた。今後も自由に利用できる機器・施設利用・共同研究が可能な状態を残してほしい。

籏野: 10月26日の大学審議会答申にはaccountabilityが強調されています。個人のaccountabilityの準備をする以外に、 組織としての準備が必要ではないかと思います。応用の分野の人々はその準備がなされているような気がしま す。レベルの高いオリジナルな基礎研究は自ずから応用に結び付くといった説明です。若手の研究を皆が常に 見守っています。オリジナリティの高いものは自然に皆の目にとまっていくはずです。そこで大学の立場から 言うと、分子研が情報の十字路の役割を担ってほしいと思います。また、目玉となるユニークで高度な研究装 置・設備を研究所にキープしていただきたい。

平尾: 分子研は創設20年を迎え、これまで分子科学を引っ張ってきて、世界の COE となっています。そこで今後は international に教授・助教授の人材を公募してはどうですか?

高塚: 分子研の研究はレベルが高く、かっちりしていているが、Journal of Chemical Physics や Journal of Physical Chemistry 等がカバーする領域のいわゆるオーソドックスな内容が多いように思われる。これからの新しい分野を創る人間を発掘するような人事をされてはいかがですか?研究系や部門単位の人事をせずに、もっと広い新奇な分野の international な人を捜し出してほしい。それには今の公募形式ではないピックアップ形式の人事をやるべきかもしれない。実験屋としては、新しい原理を追及するようなオリジナルな実験を考え出せる人に来ていただけるように、分野を指定する公募ではなく、こういうことをやってみたいという人に提案していただく提案型の人事をしてはどうでしょうか?

青山: 分子研が opinion leader 的な立場をとってほしい。共同研究を提案していくようなやり方です。研究所だから man power に頼らないテーマを考えられたらどうでしょうか。また、「ポスドクを求めている人」と「職を求めている人」が合ってないので、その間のネットワーク化ができるような、ポスドクのリストを作っていただけませんか?

増原: 今まで、装置的に、また研究会の関係で、共同利用のお世話になっております。現在でも UVSOR はその例です。ほかにも、大学にはもてない施設で共同利用できる施設はないか検討してほしい。たとえばマイクロファブリケーションの設備など考えられるが、大型で先端的な設備を共同利用設備として持ってはどうでしょうか? また、分子研は良き集中的・権力者を持って、大学にはできない方針を取るべきです。公募の仕方を考え、外国人をもっと採用すべきではないでしょうか。

田中: UVSORの共同利用という視点から意見を述べます。UVSORは21世紀に期待されるVUV領域の光科学分野を支えるために、絶対に必要な共同利用施設です。現有の光源・ビームラインは老朽化していて利用者の要求を満たしていない。本格的に補強・改造する時期にあるので、研究所としてそれを支援してほしい。共同利用申請に関しては、現在は比較的先の見えているテーマが採択されがちだが、息の長い研究も支えるような、採択をお願いしたい。

小杉: 本格的に光源・ビームラインを補強・改造する時期にあることは4、5年前から自覚して、年次計画を立ててできるところから手を打っているところです。対応が遅れている分野も確かに残っています。これは施設スタッフにこれ以上の犠牲を強いることはできないためであり、是非、その分野の所外利用者側からの協力をお願いしたいと思います。完全に現UVSORを更新してしまう計画も持っていますが、実現は容易ではありません。息の長い研究を支援することは施設利用では難しいですが、所内研究者は専用ビームラインを使って息の長い研究を手がけています。

#### 「分子研の研究体制」

中村: 平素から心配している事を述べさせて頂きます。最近、理学の工学化が進行していて科学者がそういう意味で相当汚染されているのではないかと感じています。多額の研究費を使う事による社会に対する責任は当然あると思います。しかし、我々のやっている事は基礎科学であって、一般国民の知的好奇心のレベルまで下がる必要は無いのではないでしょうか。そのような責任は学界全体が持つべき事であり、基礎科学をやっている個々の人に要求するのは間違っていると思います。大学ではもっと、根本原理を追及するという精神を大切にし、哲学、特に東洋哲学をも含めて、来世紀に新しい原理を生み出し得る素地を作る様な高い水準の教育をしていただいて、立派な優れた科学者を育てていって欲しいと思います。

田村: おっしゃることはわかります。大学でも懸命に努力しています。しかし、現実に学生の理科離れの大きな流れの中でできることには限界があります。研究所でもそうでしょう。accountabilityの必要性もその中で考えなくてはなりませんが、研究所が応用にどう結びつくかは難しい問題だと思います。

浜口: COEの研究所として、いい人を選んで行くべきです。藤山さんの言葉として、「分子研 研究きちがいクラブ」を思い出します。COEの研究所として応用に結び付く必要は無いと思います。scienceの基礎に対して本当に「研究きちがい」になれる良い人材を招べるような体制を整備する必要があります。

北川: 時間がなくなりました。人事公募制の見直しを含めて、何でも良いので何かご意見がありましたらどうぞお願いいたします。

渡辺: 分子研の弱さは、reactionのvectorが欠けているような気がします。分子研はresting molecules には強いが、分子科学は広いので分子のfunctionを視野に入れたサイエンスを展開する必要があると思います。生物の分野では分子レベルの研究が盛んになってきています。

岩田: 計算センターの整備改善に関して述べます。UVSORと同様に老朽化が見られます。計算センターとしては個人がもてる計算機資産以上のものになるように努力しておりますが、もっと大きな改善が必要であると感じています。その方向の改善計画の一つは international project ではないかと思います。

田中(郁三): 分子研の今後のあり方に関し色々な意見を聞きました。皆さんの意見に真実があって、大変勉強になりました。まず、人事問題について、良い人を nonsection でとらえていく努力が必要であります。今、総研大の点検評価の委員をしていて、そこで感じたのですが、教育については、現在の学生への授業のカリキュラムを作成すべきです。また共同利用研として、現在のUVSOR以外に、将来計画として共同利用大型設備を考えて

行くべきです。また、生物の分野 は今後の分子研が関わって行くべ き分野であると思います。

北川: 2時間にわたって有益な討論をしていただきありがとうございました。分子研としては今日の討論を点検評価の項で公表すると共に、これからの運営にすぐにでも反映していきたいと考えています。

(文責:加藤立久、北川禎三)



## 発言者の所属と名前

青山	安弘	九州大学	有機化学基礎研究センター	センター長
秋元	肇	東京大学	先端科学技術研究センター	教授
岡田	正	大阪大学大学院	基礎工学研究科	教授
梶本	興亜	京都大学大学院	理学研究科 化学	教授
加藤	肇	神戸大学	理学部化学	教授
川合	知二	大阪大学	産業科学研究所	教授
川副	博司	東京工業大学	応用セラミック研究所	教授
正畠	宏祐	名古屋大学大学院	工学研究科	教授
関	一彦	名古屋大学	物質科学国際研究センター	教授
高塚	和夫	東京大学大学院	総合文化研究科	教授
田中的	建一郎	広島大学	理学部	教授
田村	雅史	東邦大学	理学部 物理学科	講師
籏野	嘉彦	東京工業大学大学院	理工学研究科(化学専攻)	教授
濱口	宏夫	東京大学大学院	理学系研究科	教授
平尾	公彦	東京大学大学院	工学系研究科	教授
増原	宏	大阪大学大学院	工学研究科	教授
田中	郁三	( 学校法人 ) 根津育英会	武蔵大学	学園長
		分子科学研究所		研究顧問
伊藤	光男	分子科学研究所		所長
岩田	末廣	分子科学研究所		教授
北川	禎三	同上		教授
木下	豊彦	同上		助教授
小杉	信博	同上		教授
鈴木	俊法	同上		助教授
田原	太平	同上		助教授
中村	宏樹	同上		教授
西	信之	同上		教授

# 5 . 将来計画及び運営方針

# 5-1 電子計算機センター将来計画

## 5-1-1 現有計算機の構成と利用状況

平成11年1月現在の利用者の総計は約700名,研究課題は174件である。電子計算機センターの計算機システムは, 平成6年1月からスーパーコンピュータNECSX-3が,平成7年1月より並列計算機IBMSPと汎用高速計算機NEC HSP がそれぞれ導入された。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。また汎用演算性 能および並列演算性能を増強する目的で,平成8年9月よりNECHPC計算機,平成9年10月より日立製作所SR2201, 平成10年9月よりシリコングラフィックス社Origin2000を導入し公開運用を行っている。平成11年2月より,高速汎 用計算機の HSP は NEC SX-5 に更新され, 3月から試験運用を開始, 4月より本格的な課金運用を行う予定である。

SX-3は3個のベクトル演算器を持ち最高性能は19.2ギガフロップスである。また、2ギガバイト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60ギガバイト持つ。現在では大規模な配置間相 互作用(CI)計算や分子動力学計算など,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大型 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 メガフロップスの性能をもつ 48 個の演算装置 ( CPU ノード ) から構成さ れており,各CPUノードは40メガバイト/秒以上の高速度で互いに通信を行うことが出来る高速ネットワークスイッ チにより結合されており、メッセージパッシング型の並列計算プログラムの実行を効率よく行うことが出来る。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4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 利用法がよりいっそう高度化する傾向が見られる。新汎用システム SX5 の利用度の向上に伴い,並列ジョップの割合 を増し,利用者の並列プログラムの開発・利用を促進する。

新汎用高速演算システム SX-5 は、ピーク性能が32 ギガフロップス以上の高性能ベクトル計算機であり、8 ギガバイ トの主記憶装置と約150ギガバイトのRAIDディスクをもつ。この計算機は,SP2の逐次専用ノードでは実行が困難な 大容量メモリと一時作業ディスクを必要とするジョブの実行に利用され、その意味でスーパーコンピュータと並列コ ンピュータそれぞれの役割を補間する重要な役目を果たすことが期待されている。NEC HPC は1ギガバイトの主記憶 と2ギガバイトの拡張記憶装置を有し,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,年間平均でもその全CPU能力の約70%が利用されており,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7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となる。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。平成11年4月から本格稼働を予定している汎 用高速演算システム SX-5 の CPU 能力により,一時的とはいえ,このような事態が緩和されることが期待される。

#### 5-1-2 平成11年度の計算機システム更新

平成9年度 文部省に概算要求をしていたスーパーコンピュータ借料の増額によるCPU能力の増強は認められなかっ た。また導入一時経費もつかないという厳しい結果となったため、外部委員を含む「スーパーコンピュータ検討小委 員会」の結論に従い,平成11年1月に機種を更新することを断念し,更新を1年延期することとした。

スーパーコンピュータ検討小委員会では,スーパーコンピュータの更新を1年延期したことから,汎用システムの機種更新を1年早めて,平成11(1999)年2月に行うことが望まれるとの結論を得た。これを受けて,岡崎機構管理局及び文部省と協議の結果,現有の汎用高速演算システムである IBM SP2と NEC HSP を平成11年2月に新たな機種に更新するための準備を進め,最高演算性能が5ギガフロップスを上回る機種の導入を検討し,スーパーコンピュータに準ずる調達手続きを採用することとなった。平成10年5月1日に最終仕様書が完成し,6月22日入札,7月7日開札が行われ上記のSX-5に決定した。現在は,公開に向けて汎用高速演算システムの最終調整作業を行うと同時に,更新を1年延期したスーパーコンピュータシステムの調達手続が進行中である。

#### (1)スーパーコンピュータシステムに要求される性能

スーパーコンピュータの更新目的の第一は、分子科学分野において大学等では実行が困難である大規模なベクトル並列計算を行う計算環境を整備することにある。一方、現状のように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を早急に改善しなければならないため、中小規模のシリアルジョブの実行スループットを向上させる配慮も重要である。このように、ある意味では相反する更新要求を、レンタル期間中の運用変更によって適応可能とする計算機構成を選択することが重要である。すなわち、高い単体演算性能を持つ計算ノードをできる限り多数導入し、CPU リソースの分割運用によって、大規模ベクトル並列計算の実行と中小規模ベクトル計算の両方が干渉することなく実行できることが重要である。これを実現するためには、システム全体として大容量の主記憶と一時作業ディスクが必要である。

具体的には,現有スーパーコンピュータの(SX3/34R)単体 CPU 能力を上回る8ギガフロップス程度の計算ノード48以上が必要であり,16ノードと32ノードのようにリソースを分割運用する。主記憶は128ギガバイト以上,作業ディスクは1500ギガバイト以上必要である。平成8年に発足した次期スーパーコンピュータ検討委員会では単体CPU性能を重視するかCPU台数(並列計算の規模)を重視するかで活発な討論がおこなわれた。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)分野の研究者からはCPU台数を重視すべきとの意見がだされ,一方,大規模な分子軌道(MO)計算や配置間相互作用計算などに代表される並列化が困難な電子状態分野の研究者からは単体のベクトル演算性能と大容量の主記憶および拡張記憶装置の重要性が示された。上記のCPUリソースの分割運用は、大規模ジョブの実行と中小規模ジョブのスループットを運用によりバランスをとってゆく観点としてだけでなく,MD計算とMO計算分野の要求に柔軟に答えて行くための方策としても重要である。

又,CPU リソースの利用状況によっては,超大型計算を奨励する新しい運用方法の導入も検討する必要がある。従来の課金制度とは違う形で,研究課題を募集し,従来の CPU 時間やメモリー利用制限の枠を大幅に越えた計算機利用を可能にして,優れた研究成果を引き出すような施策の検討である。このように次期スーパーコンピュータシステムは,その利用目的が汎用高速演算システムと明確にことなり,超大規模計算を実行できる環境を常に意識した運用体制が必要である。

#### (2)センターの運用方針

前年度の報告にもあるように,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 (計算センター含む)。

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。

それぞれのグループで計算機を利用する分野・形態や、必要な CPU 時間に相違があり、どのグループを重点的にサ ポートして行くかの議論には慎重を要す。最近では、高速ワークステーションの普及によって、研究所内外のいくつ かの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。そのような研究グループがさらに強 力な演算性能を必要とする研究プロジェクトで成果を上げるためには,グループAとBに一層力点をおいた運営方針 を取ることが望ましい。一方,グループCとDの研究者にとって,本センターは研究遂行上不可欠なものであること も事実であり,今後とも適切な配慮が必要である。特にここ1~2年は,グループDの実験を主体とする研究グルー プの利用が急増しており,このような研究室において高性能のワークステーションを自前で運用管理してゆくための 人的・技術的負担を回避する上でも,本センターの計算機資源は重要である。

#### (3)世界のスーパーコンピュータの動向とセンターの立場

現在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,単体 CPU 性能の観点からは,1 CPU のベクトル 性能が5ギガフロップス以上の高価な計算機,4ギガフロップス以下のもの,そしてワークステーションに代表される 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)超並列計算機,並列度の少ないもの,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」、そして分散メモリのハードウエア構成を持ちながら基本ソフトウエアにより論理的に共有メ モリ計算機として利用できる「分散共有メモリ型」に分類することができる。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。

欧米では,計算機アーキテクチャの研究を専門とする分野はもちろんのこと,科学計算分野においても単体 CPU 性 能の向上に頼る時代は終わり,基本ソフトウエアと高速通信技術における並列計算技術の発展に将来の大規模計算環 境を委ねる機運が高まっている。ここで並列化の基本ソフトウエア技術として分散共有メモリ計算機におけるマルチ スレッドや分散メモリ計算機のメッセージパッシングが挙げられる。たとえば米国では1996年よりAccelerated Strategic Computing Initiative (ASCI)を国家プロジェクトとして提案し、コンピュータメーカーと国立研究所が共同で大規模な 超並列計算機の開発を推進している。我が国でも欧米の計算機動向に追従し,かつて単体 CPU 性能で世界1,2位を 争っていたスーパーコンピュータメーカーも,超並列計算機のみの開発に方針転換している。このような状況の中,電 子計算機センターは将来にわたり最先端の大規模計算環境を分子科学者に提供することを最重要と考え、計算機アー キテクチャの動向に注視する努力を怠ってはならない。一方,現状では並列コンパイラや並列プログラム開発のため の支援ツールが未成熟な状況であることもまた事実であり、分子科学計算分野はあくまで高速計算機を研究道具とし て利用し続ける1研究分野であり,安易に並列計算機一辺倒の運営に踏み切ることも慎重にしなければならない。

## 5-1-3 分子研所内及び岡崎国立共同研究機構におけるセンターの役割

#### (1)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

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。分子科学における計算科学は, 単に実験の解析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口利用者でもある。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別な運用を行う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。また平成10年度より,学術振興会および科学技術振興事業団の外部資金によって所内理論グループが導入する計算機の維持管理業務を,電子計算機センターで行うことも試行されている。これは,計算機センターの計算機管理技術と電源・冷却設備等の設置環境を考慮した方策の一つであり,今後このような所内グループ専用計算機の導入がいっそう増えることが予想されることから,業務分担及び維持費等についての制度化が必要である。

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、前述のように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。計算機センターの現スタッフはあくまで計算機利用者の一員として、計算機アーキテクチャの動向や並列ソフトウエアの進展状況を冷静に判断し、プログラム開発やアルゴリズム理論の非専門家である分子科学者に適切な計算環境をバランスよく提供するための人員構成をとっている。一方、計算機の発展に密着しベクトル並列型、超並列及び分散共有メモリの並列計算機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スタッフも重要であり、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。また研究要素として大規模なソフトウエアの構築を含む研究開発テーマなど、多くの若手研究者を必要とする分野(この分野は欧米に依然立ち後れていると言わざるを得ない)では、研究系教官と共同でプロジェクト研究課題を提案し、大学等では困難な課題にも挑戦してゆく必要がある。

#### (2)岡崎機構における分子科学境界分野の重要性とセンターの役割

スーパーコンピュータを中心とする本センターの計算機システムは世界的な観点で見ても、分子の電子構造と反応性・機能、クラスター・液体・固体表面など多くの分子科学分野で多大な研究成果を生み出してきた。計算機の演算速度と記憶容量の向上は、研究対象となる物質範囲を広げることが出来、さらに新分野の開拓に向かうことが出来る。例えば、分子科学研究所理論研究系の二つの研究グループと生理学研究所分子生理研究系のグループが中心となり、大規模分子動力学計算及びモンテカルロ計算によるタンパク質の3次元構造解析が平成10年度学術振興会未来開拓事業の新規テーマとして開始され、研究業績を上げ始めている。このように分子科学と生理学の境界領域における計算シミュレーション分野では、近年目覚ましい発展があり、今後、環境ホルモン、生理活性物質の構造・機能の解析などへの応用が切望されており、分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所の学際研究領域である生命環境科学研究では、分子レベルでの生体物質のシミュレーションはもちろん、神経系、脳研究といった生理科学の領域までをも計算対象とした高性能計算機システムの共同利用が始まりつつある。この様に計算分野自身が今までの少数多体系としての分子科学から分子科学と生命および環境科学の境界領域に拡大するなかで、今後、本センターの計算機システムの役割は今まで以上に重要となるため、近い将来において他2研究所の計算機室と協力し、阿崎機構の計算機センターとしての位置づけを真剣に議論する必要がある。

#### 5-1-4 国際分子科学計算センターとして

分子研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 国際共同研究も進めていく必要がある。 また,現在分子研が概算要求している「多国間国際協力事業」の一つとして プロジェクト方式の研究課題を新たに設定することが可能であろう。

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,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

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。外部研究者に開発プロジェクトを公募すると同時に,予算的措置を伴ったプロジェクト開発制度を発足させることも検討する必要がある。

## 5-1-6 QCLDB の事業化

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,センターの業務として支援する体制をとり続ける必要がある。現在,米国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、平成9年夏からはQCLDBも、WWWを通じて登録制の公開を試験的に開始した。この公開に対する世界中の研究者からの反響は著しく高い。この公開をハード・ソフトの両面で長期的に安定運用をするためには、正式に分子科学研究所の事業の一つとする必要がある。1)データベース作成・管理・運用のためのハードウエア整備、2)データーベース作成のための謝金と事務費の確保のために早急に予算的措置をとる必要があり、平成12年度概算要求を行う予定である。もちろん QCLDBを開発・作成している QCDB (Quantum Chemistry Data Base)研究会と緊密に連携をとってこの事業は進めなければならない。

## 5-1-7 情報ネットワークと計算機センター

平成7年度末に完成した岡崎国立共同研究機構の超高速ATMネットワークシステム(新ORIONと呼ぶ)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。計算機センターは機構情報ネットワークの構築と運用に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かつ安定に利用するために,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。そのための一つの手段として計算機センターの予算の中で学術情報センターへの専用回線を契約する可能性も追求する必要がある。

#### 極端紫外光実験施設の将来計画 5-2

極端紫外光実験施設(UVSOR)の点検評価は,これまで極端紫外光科学研究系の点検評価に一部,含まれる形で,間 接的に行われてきた。今回,外国人評価委員として英国 Daresbury 研究所放射光施設(SRS)の施設長を1997年まで勤め られた Munro 教授(現職:マンチェスター工科大学教授)にお願いし, UVSOR 施設の外部評価を実施した。以下に報 告書を掲載する。

UVSOR 施設の将来計画については「分子研リポート'96」に中間報告したが、Munro教授の評価結果及び昨今の所 内外の情勢変化を踏まえた上で、来年度、さらに具体的に将来計画を策定していく予定である。

## Munro 教授によるUVSOR外部評価(原文)

Dear Professor Kosugi,

It is just over ten years since I was last privileged to work at I.M.S. - and at UVSOR- for any substantial period of time. During the intervening period and particularly for the past four or five years. I have watched and appreciated a very significant growth in the scale and the quality of the science program supported by the UVSOR facility.

## The Facility:

UVSOR now has 20 user stations (including 2 undulators and 1 superconducting wiggler) operating for periods of up to 3000 hours per years and a total user community of between 600 and 1000 scientists. This is, in itself, a very considerable achievement given by the extremely small number, compared with staff numbers at synchrotron radiation user facilities elsewhere, of dedicated and extremely hardworking scientific and technical staff who support the UVSOR machine, beamlines and stations. In this context, the level of machine improvements including the unique short wavelength FEL and the characterization of the UVSOR operating modes during recent years are a worthy "Highlight."

## Future for the Facility:

These achievements of course maintain a challenge for the future since the primary objective of every facility must be to provide at all times, a functioning, reliable and predictable synchrotron radiation source. To be scientifically (and cost) effective it has to provide the maximum possible number of hours per year of photon beams with the optical properties matched to the needs of each different experiment. This is particularly important since many users travel significant distances to use the facility and now the demand for beamtime exceeds the supply. One solution for the future would be to increase the supply of beamtime, although the total number of user stations at least, is probably already at or close to the maximum.

In order to maintain the current position and certainly to generate fresh scientific initiatives resources of extra staff and money are needed by the UVSOR to continue the sound "scrap and build" policy which has already begun. That is, to scrap older, less scientifically competitive stations and replace them with new and (usually!) more expensive ones.

Future growth should be achieved wherever feasible by support from sources external to I.M.S. For example outside Research Institutes or Universities, perhaps sometimes with support from researchers based in industry, could be encouraged to provide their own "private" beamlines or stations (a successful policy called PRT's and CRT's in USA and Europe respectively.) Beamlines or stations on UVSOR which are the property of outside Universities or Institutes would be an alternative way in which the level of exploitation and use of the UVSOR could be increased - and this mechanism also gives a very good signals about the competitiveness and merits of the UVSOR facility.

## The Research Program:

The overall scientific research output from UVSOR is extremely impressive. Over the past few years the number of reports has increased to more than 110 per year (in 1996) and the number of refereed publications has risen to around 80. The published science in 1996 showed that about one third of the overall programme was related to solid state research. The research on organic conductors, superconductors and ionic solids, together with a substantial number of publications on photoemission and exciton-luminescence studies and also work on glassy materials and catalysts often using XANES for low Z structural information are notable. Some of the work in this area, for example on angle resolved resonant photoemission has been very highly cited in the literature. Around one third of the research publications relate primarily to surface studies and the study of surface chemical reactions, surface structures, thin films, overlayers, interfaces and buried layers. This research incorporates infra-red and soft x-ray spectroscopies and also includes research on the physics and chemistry of surface processing and on photon assisted reactions at surfaces. Many of these activities have considerable relevance to future manufacturing and processing technologies and must be seen as important areas for future investment and growth.

Approximately one quarter of the UVSOR programme focuses on basic studies in the gas phase — an area for which the work at I.M.S, has justly achieved world-wide recognition using both laser and synchrotron radiation photo-excitation. Much of this research exploits to the full the great advantage to I.M.S. of "owning" a synchrotron radiation facility. It permits the inclusion of experimental stations of considerable complexity and gives an opportunity to conduct experiments where the timescales involved for data collection are very long. Notable work in this area includes molecular spectroscopy and the study of molecular dynamics, excitation, ionization and fragmentation using a wide variety of angle and energy resolved methods and time of flight studies.

In this work, the links within I.M.S. between theoreticians and experimentalists help play a vital role in defining the good quality of the research programme. Wherever possible, this excellent combination of theoretical and experimental skills within I.M.S. should be further strengthened and increased beyond the Department of VUV Photoscience to cover other areas such as magnetic materials, nano assemblies, molecules at surfaces etc..

The final group of research publications from the UVSOR facility include the technical and experimental developments. This category includes machine instrumentation (eg., the helical undulator and UV-FEL), novel research instrumentation (eg. the potentially very important new combined synchrotron radiation /laser research activities) and "multi technique" research where synchrotron radiation is combined with a range of characterization methods (such as STM and perhaps AFM, RAS etc.). The vitality of the UVSOR facility will always depend importantly upon the development of new techniques and equipment such as monochromators and detectors. Whenever possible, the instrumentation resources within other Centres and Departments in I.M.S. should be pooled to achieve some kind of a "critical mass" in this area ,when required, in order to ensure the most rapid completion of new projects.

#### General Comments:

UVSOR was built about 15 years ago to help create new fields in Molecular Science. It is now a reliable and productive Facility

— of medium to large size — with a science programme which has derived largely from the excellent skills and interests of the staff of the VUV Photoscience Department and the UVSOR facility within I. M. S. There is now an opportunity to capitalise further on this substantial long term investment by seeking wider usage within I.M.S. Staff in almost all I.M.S. Departments could and should be users and certainly must take the lead in stimulating new collaborations with (chemistry orientated) molecular science outside user groups. New broad objectives for example in the areas of new materials, combined laser with synchrotron radiation experiments, surface chemical reactions and thin film studies are well chosen and offer excellent and realistic targets for the medium term.

I think that within UVSOR the level of activity in the area of molecular biological and biochemical spectroscopy and imaging is a little low. Outside Japan, bio-science represents - from 15% to 20% of all SR activity (~25% in the UK) and is predicted to rise to around 30% within 5 years or so across Europe and the USA. Much of this activity is linked to crystallographic structure studies and small angle diffraction and scattering mainly at around 12keV using high energy (>2GeV) storage rings but there is significant interest - and potentially growth - in the use of SXR and VUV radiation for biological spectroscopy and imaging.

In any case, the proximity on the same site as UVSOR of two world class bio-science Institutes (i.e. of N.I.B.B. and N.I.P.S.) - in addition to I.M.S. itself, obviously offers a unique opportunity to create a good bio-molecular science program. There are many potential areas of research using VUV/SXR from UVSOR including, for example, low Z XAFS, VUV/SXR absorption, polarization and fluorescence spectroscopies, laser/synchrotron radiation time resolved studies, radiation damage and VUV confocal and SXR biological imaging etc. The study of wet samples in the VUV/SXR is feasible in principle and could give quite new information to the biologist. The use of far I.R. radiation and future exploitation of I.R. FELs will probably also find many important applications in the study of wet biological samples.

## The long term plan ——UVSOR 2?

In the long term, the proposal for any new Facility and, certainly the achievement of a successful outcome will require at least as much "political" as scientific insight. Any new Facility will have to come with an "operational and reliability guarantee"-like SPring 8, ESRF, APS etc. In the USA and Europe at least, the days of hoping that new science might somehow emerge from an expensive and often not fully tested technology have essentially disappeared.

The Okazaki Institutes may be unique in world terms in their concentration of science expertise in the area of the molecular sciences. There are probably more opportunities now to carry out "ground breaking" molecular science using synchrotron radiation than ever before. For the past few years there has been an increasing convergence of attention on the behavior of all systems at a molecular level. This has undoubtedly been stimulated by the great ease with which the atomic structures of exceedingly complex "molecules" (chemical or biological) can be measured by using SR for diffraction and scattering studies.

However it is also driven by the desire to understand and to manipulate large molecular assemblies to carry out new functions -for the greater benefit of mankind and no doubt also of industry. This emphasis on "molecular microscience" has been further enhanced by the recent discovery of many new materials. The desire to fabricate new structures implies working at the interface between small molecule and solid state science. It will be crucial to understand at a theoretical and an experimental level all that science needed to underpin the electronic and communication devices likely to shape human activity in the next century. This will include Si ULSI mesoscopic single electron devices, nanoparticle based lasers, display materials, all types of quantum device, thin layer research, lithography of all kinds, nanofabricated catalysts and no doubt many others.

In Europe and the USA, the current message to potential researchers is that the intellectual challenge to study "real" systems is at

least as great as any other. Resources are a little more likely to be given to projects which are applied or strategic rather than basic (which is sometimes mistakenly equated with open ended and uncontrolled.) Inside Japan there are other (new) storage ring facilities which are capable of undertaking molecular studies but non of which has made it their exclusive objective.

There is a niche now — in world terms — for an insertion device storage ring with small source size, high flux, primary photon range from 6 eV to 1keV and with perhaps a superconducting magnet array to give some access to ~10-20 keV radiation to be exploited primarily for "Applied Molecular Science," "Molecular Microscience" or "Molecular Materials Science." The research agenda should include molecular science associated with industrial, environmental and biological fields. It would require the support of researchers in the fields of molecular and material science, coordination chemistry, biochemistry and applied and industrial molecular science (for example, in the areas of surface modification, thin film studies, photo processing, bonding in solids etc.). The reputation and experience of the Okazaki Institutes combined with their location in Chubu / Aichi would perhaps be a significant point in this debate. The ring could specialise on "two color" experiments and exploit to the full these new activities started at I.M.S. There could be some growth stimulated now in the area of materials science covering magnetism and magnetic structures, disordered systems, buried interfaces etc., and perhaps in the use of SR for routine analysis. "UVSOR 2" should support all spectroscopies in VUV/SXR range and would be capable of low Z XAFS and some diffraction and scattering.

The strength of such a Facility would lie in its incorporation of interdisciplinary research efforts beyond the traditional boundaries of chemistry and biology and could include for example pharmaceutical material science and medicine.

In conclusion, whatever the long term plans might be for the future of UVSOR and I.M.S, it is quite clear that the UVSOR facility is already a major player both in Japan and at world level as a source for synchrotron radiation science and technology and that it will continue remain so for a very considerable time to come.

Yours sincerely.

Professor Ian Munro

UMIST

## 5-2-2 Munro 教授によるUVSOR外部評価(和訳)

(Munro 教授より小杉施設長あての書簡)

私が分子研すなわち UVSOR で研究する機会を得てから10年以上経っている。特にこの4,5年,規模の点及び質の点で UVSOR での科学的成果はめざましいものがある。

#### 現施設

現 UVSOR は20のステーション(2本のアンジュレータと1本の超伝導ウィグラーを含む)を有し,年間3000時間もの運転を行い,600人から1000人もの科学者をユーザーとして受け入れている。UVSOR光源加速器,ビームライン,ステーションなどの支援業務を一生懸命行っている専任の研究者及び技官が他の施設に比較して極端に少人数なことを考えると,UVSOR施設の活動は脅威的である。また,最近の短波長FELやUVSOR運転モード特性などの光源加速

器の向上は「ハイライト」と呼べる価値の高いものである。

## 施設の将来

これまでUVSOR施設でやってきたことは当然、将来に向けてのものにもなりうる。なぜならどの放射光施設であっ てもその主目的は信頼できる光源としていつでも動作し続けることでなければならないからである。科学面から言っ てもコスト面から言っても、放射光施設であれば、多種多様な実験の要請に応えることのできる性質の光を可能な限 り提供しなければならない。このことは施設を利用しに , 遠くからやってくる多くのユーザーにとって特に大切であ る。また、ユーザーが必要とするビームタイムが供給量を越えていることを考えても大切なことである。需要オーバー に対する将来に向けてのひとつの解決法として、ステーション数はすでに限界に達していても、ビームタイムの供給 量は増やすことができよう。

現在の地位を維持し、さらに科学面でのイニシアチブを新しく生み出していくには、施設要員と予算を増やすこと が必須である。それによって、すでに始まっている「スクラップアンドビルド」の計画を続けていくことが可能とな る。これは,古くて競争力のなくなったステーションをスクラップし,もっと金のかかるステーション(普通は!)に 置き換えることだからである。

UVSORの将来の発展を考えると,可能なところがあればどこからでも外部資金を得るべきである。例えば,企業サ イドの研究者の支援を得て,企業「専用」のビームラインやステーション(アメリカのPRTとかヨーロッパのCRTと か呼ばれている有効な方法)を作ることは可能ではないか。あるいは、分子研外の研究所や大学の所有になるような ビームラインやステーションも可能ではないか。これらはUVSOR施設の競争力や長所を増す点で好都合なやり方であ る。

#### 研究内容

UVSORにおける研究業績は全般的に顕著で印象的なものである。過去数年でみると毎年110件を越えるレポートが 出され,80件前後の審査付き論文が出版されている。1996年の Activity Report を見ると,成果の1/3が固体研究であ る。有機伝導体,超伝導体,イオン結晶に対して,光電子,励起子,ルミネッセンスに関する発表が多く,また,非 晶質物質や触媒中の軽元素周辺局所構造のXANES実験も貴重なものである。これらの業績では、例えば、角度分解共 鳴光電子分光の成果は非常に頻繁に引用されている。さらに,成果の約1/3は,固体表面の研究や表面化学反応,薄 膜,界面,埋め込み層に関するもので,赤外分光,軟X線分光の研究や固体表面の加工の物理や化学の研究を含む。そ の多くは未来の表面加工技術として間違いなく発展するはずの重要な分野である。

成果の約1/4は気相分子の基礎研究である。これは世界的に分子研がレーザーと放射光による光励起研究で認めら れている所以の成果に当たる。その多くは分子研が放射光施設を所有しているという利点を充分に生かして得られた ものである。すなわち、かなり複雑な実験ステーションが整備でき、データ収集にも非常に長い測定時間をかけるこ とができる。この分野で価値のある成果としては、角度やエネルギーを分解するいろいろな方法や飛行時間の測定方 法などを利用して行った分子分光学,分子動力学,励起,イオン化,解離の研究が挙げられる。

UVSORでの研究において、分子研内で理論家と実験家が協力することは、研究内容の質を高める際に不可欠な役割 を果たす。可能な限り,分子研内の理論家と実験家が力を合わせることをもっと強化すべきであり,増やすべきであ る。そのことによって、極端紫外光科学研究系の枠を超えて、磁性材料、ナノ材料、固体表面分子など他の分野もカ バーすることにつながる。

その他の成果として技術的な面や実験手法の面での進歩が挙げられる。これには光源加速器関係の装置(例えば,へリカルアンジュレータや紫外域自由電子レーザー)新しい装置(例えば,非常に重要で有望なものとして放射光とレーザーを組み合わせた研究など),放射光を他の解析装置(STM や AFM, RAS など)と組み合わせた「複合技術」などが含まれる。UVSOR施設の活力はこれからも分光器や検出器のような技術や装置を新しく開発することに依存するであるう。分子研の他の施設・センターや研究系の装置・設備を,必要となれば可能な限り共同利用することで,新しいプロジェクトを最も速く完了させるのに必要な「臨界質量」に達するようにすべきである。

#### 一般的コメント

UVSORは分子科学に新しい分野を構築するために約15年前に建設された。極端紫外光研究系とUVSORのスタッフの優れた技術と関心の高さによって科学的成果に関して今や信頼性もあり生産性も高い中~大規模施設となっている。分子研内でもっと広く活用方法を探ることでUVSORに対し実質的に長期にわたって資金投入の可能性が増えることになる。分子研のほとんどすべての研究系の研究者がUVSORのユーザーになることは可能であろうし、そうすべきである。また、すべての研究者が分子科学分野(化学指向)の所外ユーザーとの共同研究を新たに進めるように指揮を執るべきである。例えば、新材料、放射光との併用実験に使うレーザー、表面化学反応や薄膜などの研究分野において新しく広範囲な目標をうまく定めて、中期計画として優れた現実味のある計画を打ち出すこと。

UVSORにおいて分子生物学や生化学の分光学やイメージングの分野の活動が少し低いのではないかと私は思う。日本以外では生物科学は放射光利用の15% ~ 25% (イギリスでは~ 25%)にも達し,ヨーロッパやアメリカでは5年程度のうちに30%まで増えると予想されている。利用の多くは2 GeV 以上の高エネルギー蓄積リングで主に12 keV 前後での結晶構造解析や小角回折・散乱に関係したものである。しかし,生物学の分光学やイメージングのために放射光軟 X 線や極端紫外光を利用することも非常に興味を持たれており,今後の発展が有力視されている。

いずれにしてもUVSORと同じキャンパスに分子研以外に二つの世界的な生物科学の研究所(つまり,基礎生物学研究所と生理学研究所)が近接しているということは,優れた生物分子科学の研究テーマを創成するには,明らかに他に類を見ない環境である。例えば,軽元素 XAFS,極端紫外光や軟 X線の吸収,偏光,蛍光スペクトル,レーザー及び放射光による時間分解研究,放射線損傷,極端紫外光共焦点イメージングとか軟 X線生物学イメージングなど,UVSORの極端紫外光・軟 X線が利用できる有望な多くの研究分野がある。極端紫外光・軟 X線による水分を含んだ試料の研究は原理的に可能であり,生物学者に全く新しい知見を与えうる。遠赤外線の利用や将来の赤外域自由電子レーザー開発によっても,水分を含んだ生物学的試料の研究への重要な応用が多数生み出されるであろう。

#### 長期計画 UVSOR 2

長期計画においては、いかなる新規施設の計画であっても科学的見識に加えて「政治的」洞察力が少なくとも必要であろう。いかなる新規施設であっても SPring 8、ESRF、APS などのように「運転と信頼性の保証」のもとに建設しなければならない。少なくともアメリカやヨーロッパでは、十分なテストをおこなっているわけではないし金もかかるが、新しい技術によって新しい科学を生み出そうとする時代は過去のものとなった。

岡崎国立共同研究機構は、分子の科学分野を専門として研究している世界にも類を見ない組織であろう。「開拓的」な放射光利用分子科学の研究が実施できる機会が今後、多くなるであろう。ここ数年、すべての研究対象に対して分子レベルで研究するような方向性が増している。このことは疑いもなく放射光による回折・散乱の研究によって著しく複雑な「分子」(化学あるいは生物学)でも原子構造を非常に容易に明らかにできるようになったためである。

しかしながら,人類にとってさらに利益があり,疑いもなく産業にとっても利益になることとして,新しい機能を 発現する分子集合体を理解し ,巧みに操りたいという願望によっても分子レベルの研究が促進される。「分子ミクロ化 学」は多数の新材料の発見によって最近,さらに強調されるようになった。新しい構造を作り上げたいという願望に は、分子と固体の科学の境界領域で研究するという意味が含まれている。人類の活動を形作るような電子デバイスや 通信デバイスの基礎固めに必要な科学を理論と実験の立場から理解することは21世紀において決定的に重要であろう。 Si ULSI メゾスコピック単一電子デバイス,ナノ粒子レーザー,ディスプレイ素子,すべての量子デバイス,薄膜,リ ソグラフィ,ナノ操作触媒やその他多くのものが挙げられる。

ヨーロッパとアメリカにおいて「実在」の系に対し知的に挑戦することも重要なことであるということが叫ばれて いる。基礎的なことよりも応用的あるいは戦略的なプロジェクトに対して研究資金が与えられることが少し多いよう に思える。その際、基礎的な研究は切りがなく手に負えない代物であると誤解を受けていることがある。日本国内で は他の(新しい)放射光施設があり,分子の研究を行うことが可能である。しかし,そのどれも分子の研究だけを目 的としてはいない。

今,小さな光源サイズ,高い光量で6eV~1keVの光エネルギー域の挿入光源を有する蓄積リング(10~20keV のエネルギーも可能な超伝導磁石列もたぶん備えることのできる)を「応用分子科学」「分子ミクロ科学」、あるいは 「分子材料科学」を主目的として開発することは世界的に見ても誰も目をつけていない目新しいものである。研究内容 として工学,環境,生物学の分野に関連する分子科学を含めるべきである。分子材料科学,錯体化学,生化学,応用・ 工業分子科学(例えば,表面修飾,薄膜,光プロセス,固体内結合)の分野の研究者を支援することが必要とされる。 これらを議論する際には、中部地区や愛知県における岡崎国立共同研究機構の名声と経験が重要な点になるであろう。 蓄積リングは「2波長」実験に特殊化することもできる。また,分子研で始まった新しい研究分野に対して開発する こともできるであろう。例えば、磁性や磁気構造、無秩序系、埋め込み層などの材料科学分野や放射光を利用した日 常的な材料分析などに今,発展しているものがあろう。「UVSOR2」は極端紫外・軟X線の領域のすべての分光学を 支援すべきであるし、軽元素 XAFS や一部の回折・散乱実験も可能にできるであろう。

このような施設で強調すべきなのは伝統的な化学と生物学の境界を越えて学際的な研究を含めることにあり、さら に例えば,薬剤学や医学も含むことができよう。

結論として、UVSORと分子研の将来に対する長期計画がいかなるものであれ、現UVSOR施設は日本と世界の両方 において放射光科学のための光源として重要な役割をすでに果たしており,今後もまだまだ重要な役割を果たし続け るであろう。

# 5-3 岡崎国立共同研究機構の将来計画と現在の到達点

# 5-3-1 これまでの経過

分子科学研究所・基礎生物学研究所・生理学研究所の3研究所が合同で進めた岡崎国立共同研究機構将来構想懇談会およびワーキンググループを中心に機構全体の一年以上にわたる討議を経て,平成9年6月に「岡崎国立共同研究機構将来構想」がまとめられた。その内容は,機構を構成する3つの研究所独自の将来計画と共同歩調をとる形で「分子生命体科学共同研究推進センター(仮称)」のE地区への設立を提案するものであった。それは,1)近年の学問の新しい発展に伴い,物理学及び化学と生物学・生命科学にまたがる研究領域が出現し,2)三研究所の研究者間の交流が自然な流れとして増大している現状と,3)生体の機能発現を個体や細胞レベルのみならず分子のレベルで解明しようとする研究が活発に行われ,分子科学研究所との協力の必要性が深く認識されるようになってきたこと,4)分子科学研究所においても新しい機能を有する分子物質の探索・分子設計に関連して,蛋白質をはじめとする生体分子の構造と作用機構に関する分子レベルでの研究が盛んになりつつあることが主な理由であった。こうした機構内での動きを受けて,平成10年度に向けた概算要求では,E地区で行う研究の柱の一つと位置づけされる脳研究に関連する組織が生理学研究所に認められた。

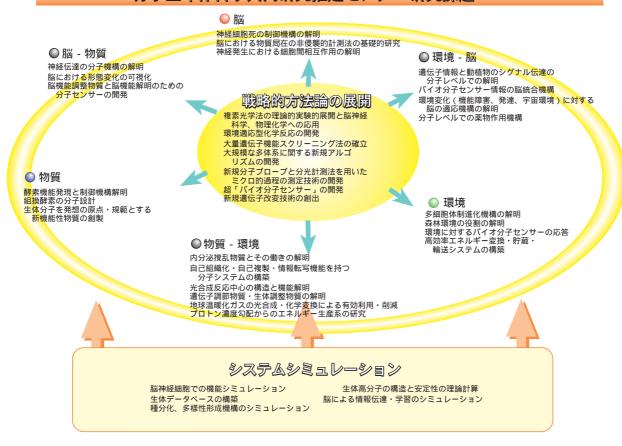
# 5-3-2 平成 10年の活動

平成10年初旬からは,それまでの到達点をふまえて三研究所長・機構長の諮問機関として「分子生命体科学テーマ懇談会(略称:テーマ懇談会)」が発足した。テーマ懇談会は,E地区で三研究所が協力・共同して展開すべき研究領域・研究対象・研究の切り口等を中心に議論が交わされた。その結果,1)具体的な研究ターゲットとして「脳」「物質」「環境」という大きな研究の柱と共に,その境界領域としての「脳・物質」「物質・環境」「環境・脳」を加えた六つの研究領域・対象の大枠が提案された。さらに,2)そうした研究を展開するための新たな方法論を開発する「戦略的方法論の展開」および,3)研究の基礎を支える「システムシミュレーション」というフェイズの異なる切り口からの研究対象が加えられた。それぞれのフェイズの異なる領域における当面する具体的な研究課題と1)~3)の相互の関連を次頁の図にまとめた。

図に示した様に「、戦略的方法論の展開」は分子生命体科学共同研究推進センターにおける研究展開の中核を形成することが期待されるものであるが、複素光学法の理論的実験的展開・環境適応型化学反応の開発・新規分子プローブと分光計測法を用いたミクロ的過程の測定技術の開発等は、分子科学者の参画無しには達成できない課題である。それと同時に、測定対象としての脳神経や酵素・遺伝子等の取り扱いは基礎生物学・生理学の研究者の協力が必須となる。一方、実験の出来ない脳神経細胞での機能シミュレーション・生体高分子の構造と安定性の理論計算・内分泌撹乱物質と遺伝子調節ホルモンの相互作用などの理論科学の分野においても、分子科学者からの積極的な参加が求められる課題が多数提案されている。

テーマ懇談会での議論の期間中にいわゆる環境ホルモンと呼ばれる内分泌撹乱物質の問題が社会的に大きくクローズアップされ、関連する研究の緊急性が検討された。その結果、分子生命体科学共同研究推進センターを中心とする E地区利用を前提とした新たな研究組織として、「生命環境科学研究センター」を三研究所の共同提案として平成11年度に向けた概算要求事項とすることを決定した。

# 分子生命体科学共同研究推進センター研究課題



## 5-3-3 生命環境科学研究センター

三研究所における関連研究の現状

分子科学研究所では,1)金属錯体を用いて,地空温暖化の原因物質である二酸化炭素を炭素-炭素結合生成を伴った有用化合物に変換するプロセスを構築した。さらに,2)人工酵素の設計による化学合成プロセス高効率化の研究で,酸化反応を行う蛋白質の構築に成功した。この人工酵素は,天然に存在する酸化酵素に匹敵する高い選択性と触媒機能を有していることも明かとなった。

さらに,環境情報伝達物質と生体機能という観点から,情報伝達物質の分子レベルでの生成機構と生体情報伝達物質を感知するレセプター蛋白の構造と機能解明を現在進めている。

一方,基礎生物学研究所では,生殖線の発生に不可欠な転写因子を世界に先駆けて発見し,この転写因子の遺伝子を破壊することで動物固体から生殖線が完全に消失することを示した。この研究は,内分泌撹乱物質の生体内作用機構解明の大きな足がかりとなるものである。

生物と環境との関係は多岐にわたるが、その基本は、生体を取り囲む環境変化に対する生物の応答である。その複雑な応答の解析の基礎となる全遺伝子、つまりゲノム構造の全配列決定に大きく寄与し、解析を行い、データベースを構築してきた。

生理学研究所では,生体内外の環境に対するバイオ分子センサーの発見あるいは機能解明を行っている。すなわち,細胞が内外の環境の変化を浸透圧変化による容積変化として感知し,正常容積に復帰する細胞容積バイオ分子センサーが,容積受容性 CI - チャンネルであることを明かとした。さらに,カプサインに対するレセプター遺伝子のクローニ

ングから、それがチャネル機能以外に温度や酸性度を感知するセンサーとして働く事、化学物質やウイルスによる肝硬変に至る一連の化学反応に対して、肝障害情報を感知し肝星細胞の活性化に関与するのがNa・Ca交換トランスポーターであることを明らかにしている。

#### 生命環境科学研究センターにおける研究内容

本センターでは、化学物質を最初に生体がどの様に受け入れ、生体に進入した化学物質がどの様な影響を及ぼし、生命維持活動によって化学物質がどのように分解されて体外に排出されるのかという環境問題に取り組み、その影響の有無によりどのように化学物質が有害なのかを解明し、普遍的で総合的な成果を上げるために、研究の展開を下記の4 テーマで行う。

- 1) バイオ分子センサーによる環境適応機構 色々な化学物質が生体に入り込む際に最初に感知する生体センサーと生体の応答
- 2) 内分泌撹乱物質とその働きの解明 生体内に進入した化学物質と受容体の相互作用・生殖機能形成過程への作用機構
- 3) 環境適応型化学反応の開発 環境ホルモンを含む有害化学物質の本質的な削減と,生体に進入した内分泌撹乱物質の生体内代謝機構の解明
- による環境中の環境ホルモンの分解プロセスの開発 4) 環境生体データベースの構築
- 動物実験・遺伝子工学的な実験では達成し得ない分子レベルでの素過程解明を目指すシミュレーション技術の 開発

### 4 研究テーマの関連性

生命活動の維持にも影響を及ぼす有害な化学物質の作用を解明するためには,1)生体がどのように化学物質を受け入れているのか,2)受け入れた後どのようなメカニズムで障害を引き起こすのか,3)どのようにして体外へと排出しているのか・有害物質をいかに削減するか等の研究を進める。さらに,4)これらの成果等のデータベース構築による影響予測を合わせて行う必要がある。

これらの研究は 相互に連携を計りながら一体のものとして行う必要がある。個々のテーマの成果が互いに他のテーマの研究成果を生み出すための土台となりうるような関係であるため,4テーマの研究を同時に行うことにより,初めて書記の目的が達成出来るものである。

#### 5-3-4 まとめ

この3年間にわたる岡崎国立共同研究機構の将来計画策定のための討議を通じて,三研究所がそれぞれの研究所独自の研究の展開と併走する形で,三研究所が協力・共同する新たな研究の展開を目指す研究課題・方法論と,E地区の利用を視野に入れた物理的な研究施設の設置が提案されている。平成11年度に向けた概算要求では,「生命環境科学研究センター」の新設要求を行うに当たって,現段階では形式的に基礎生物学研究所にその組織を置く事にしている。しかしながら,この組織はE地区に展開を予定している「分子生命体科学共同研究推進センター」を中心とした三研究所の将来計画の展開の線上にあるものであり,将来的には,機構全体の組織として再編されることが前提となっている事を最後に付記するものである。

# 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	Ē		

歴代の評議員(1981~)

				440	44044	L# , **	- ++U		44-44	44044	44044
F	ţ	i.	第1期	第2期	第3期	第4期	第5期	第6期	第7期	第8期	第9期
K	Д	E.	83.5.31 '83.5.31	85.5.31	65.6.1 ∼ '87.5.31	89.5.31 × 89.5.31	91.5.31 '91.5.31	91.6.1 ≈ 93.5.31	93.6.1 ≈ '95.5.31	95.6.1 ∼ 97.5.31	97.6.1 ≈ '99.5.31
赤松	秀雄	# 東大名誉教授,分子研名誉教授				'88.1.8 死亡					
石三	忠雄	<b>推 慶應大学長</b>									
石極	直隆	<b>全 名大学長</b>	~ '81.7.22								
颌鳴	(   	- 名大学長	'81.9.1 ∼			~ '87.7.21					
植村	泰										
神田	爾也	也 九大学長									
小公	正雄	t   東京理科大学長									
小松	┙										
避難	ı	E 東北大理教授,国際基督教大教授		~ '84.5.15							
本	米一思	18   豊橋技科大学長		~ '84.3.31							
島村	ə	多 相模中央研最高顧問理事									
田開	田島弥太郎	18 遺伝研所長									
馬場	沿田	月 北大応電研所長									
福井	##	<ul><li>一 京大工教授,京都工織大学長, 基礎化学研究所長</li></ul>									
職	正生										
向坊	瘞	肇 東大名誉教授									
糕	大吉郎	18 字宙研所長		83.11.25 死亡							
鲁谷	枯	当 星薬科大学長									
角戸	田米	姫路工大学長									
<del> </del>	波雄	t   豊橋技科大学長		'84.4.16 ∼							
田田	柳三	E 東工大理教授,理学部長,学 長,学位授与機構長									
出	貞雄	# 東大物性研所長									
十田	稳	8 宇宙研所長		'84.2.16 ~							
巡離	車	<b>  慶應大理工教授</b>									
糕	正筱	5  豊田中研代表取締役									

東北大理教授, 徳島文理大薬教授 東北大理教授, 徳島文理大薬教授 東北大建教授, 中央大理工教授 東大名誉教授 大名誉教授, 京大名誉教授 中和田大学総長 東京理科大理教授, 城西大理教授 (社)化学情報協会專務理事 (社)化学情報協会專務理事 (社)化学情報協会專務理事 五畿大理工学総合研教授, 統計数理研究所長 (社)化学情報協会專務理事 五十五之大學長, 東北大理教授 東大名誉教授 (本)化学情報協会專務理事 (本) 大理教授, (本) 上, (株) 相談役, (本) 上, (株) 相談公司, (本) 上, (本) 有機化学基礎研究センター教授, (全) 大, (本) 在, (本) 在, (本) 是, (本)	<i>t</i> /	出	第1期	第2期	第3期	第4期	第5期	第6期	第7期,0361~	第8期,	第9期,07.6.1。
龍栄春道耕謙幸 秀 次 弘 昌慎博英義俊 延晴椒進豐一一夫夫三二男 昭 郎 次章 壽一敏樹夫一秀夫雄宋	п		183.5.31	'85.5.31	'87.5.31	189.5.31	'91.5.31	93.5.31	95.5.31	97.5.31	199.5.31
確栄 香道耕謙幸 秀 次 弘 昌慎博英義俊 延晴進豐一一夫夫三二男 昭 郎 次章 壽一敏樹夫一秀夫雄宋	-	大理教授, 徳島文理大薬教授									
龍栄香造耕謙幸 秀 次 弘 昌慎博英義俊 延晴豊一一夫夫三二男 昭 郎 次章 壽一敏樹夫一秀夫雄宋		大金材研所長									
龍栄春道耕謙幸 秀 次 弘 昌慎博英義俊 延晴一一大夫三二男 昭 郎 次章 壽一敏樹夫一秀夫雄宋		物性研所長,中央大理工教授									
宋春道耕謙幸 秀 次 弘 昌慎博英義俊 延晴一夫夫三二男 昭 郎 次章 壽一敏樹夫一秀夫雄宋	-	名誉教授									
有 月 木香道料謙幸 秀 次 弘 昌慎博英義俊 延晴夫夫三二男 昭 郎 次章 壽一敏樹夫一秀夫雄宋		薬科大学長,京大名誉教授									
道 群謙幸 秀 次 弘 昌慎博英義俊 延晴夫三二男 昭 郎 次章 壽一敏樹夫一秀夫雄宋	-	田大学総長									
群謙幸 秀 次 弘 昌慎博英義俊 延晴三二男 昭 郎 次章 壽一敏樹夫一秀夫雄宋		瓦斯化学(株)顧問									
謙幸 秀 次 弘 昌慎博英義俊 延晴二男 昭 郎 次章 壽一敏樹夫一秀夫雄宋		技科大教授,城西大理教授									
幸 秀 次 弘 昌慎博英義俊 延晴男 昭 郎 次章 壽一敏樹夫一秀夫雄宋		理科大理教授									
秀 次 弘 昌慎博英義俊 延晴昭 郎 次章 壽一敏樹夫一秀夫雄宋		屋大学長				'87.7.22 ~		192.2.5 7F T			
秀 次 弘 昌慎博英義俊 延晴昭 郎 次章 壽一敏樹夫一秀夫雄宋	$\rightarrow$							١٠/			
点 月 木次 弘 昌慎博英義俊 延晴郎 次章 壽 一敏樹夫一 秀夫雄宋		理教授, 2学情報協会専務理事									
日 大 弘 昌慎博英義俊 延晴 次章 壽一敏樹夫一秀夫雄宋		大理工学総合研教授 <i>,</i> 大理工教授									
月 大		数理研究所長									
作 間惧博英義俊 延晴 事 一 敏樹夫 一 秀 夫 雄 宋		学 <b>析振興会学術相談役</b> , 名誉教授									
木慎博英義俊 延晴一敏樹夫一秀夫雄宏		(株)相談役最高顧問									
博英義俊 延晴敏樹夫一秀夫雄宏	١.	エンスクリエイト(株)常任顧問									
英義俊 延晴樹夫一秀夫雄宏		<b>郭立大学長</b>									
義俊 延 晴 秀 夫 雄 宏		大理学部長,東北大理教授									
俊 延晴一秀夫雄宗		川大理教授									
		院会員									
祖 開 報 条	_	<b>写機化学基礎研究センター教</b> 授									
晴雄		総長									
<u></u>		理科大総合研教授									
į	宏 成蹊	大法教授									
田中 久 前京都薬科大学長	-	都薬科大学長									

			第1期	第2期	第3期	第4期	第5期	第6期	第7期	第8期	第9期
出	加	所属	'81.6.1 ∼	'83.6.1 ∼	'85.6.1 ∼	'87.6.1 ~	'89.6.1 ∼	'91.6.1 ∼	'93.6.1 ∼	'95.6.1 ~	'97.6.1 ∼
			'83.5.31	'85.5.31	'87.5.31	'89.5.31	'91.5.31	'93.5.31	'95.5.31	197.5.31	'99.5.31
型	幸	金沢工業大副学長									
茶	斑斑	(株)豊田中央研顧問									
次	巾	東京理科大理工教授									
大	门	立命館大理工教授									
清水	民	統数研所長									
田	川	埼玉大理教授,理学部長									
型	莊次	日本女子大理教授									
区貿	ĪĒ	(財)レーザー技術総合研第5研究部長									
九二	和博	京都工繊大学長									
大隊	鍫	北海道大薬教授									
<b>心</b>	好正	大阪大たんぱく質研所長									
後聯	Ш	豊橋技科大学長									
咖啡	— 賦	(株)豊田中央研取締役副所長									
田田	敦男	(社)日本化学会常務理事									
留外	沿米	お茶の水女子大理教授									
<del>  </del>		東京工芸大学長									
取	弘志	東京大物性研所長									
雪	敏光	日本学術振興会監事									

# 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 ~ '97.5 Edward William Schlag(ミュンヘン工科大学物理化学研究所長)'95.6 ~ '97.5

Raphael D. Levine(ヘブライ大学教授)'97.6~ Charles S. Parmenter(インディアナ大学教授)'97.6~

# 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	77.0.01	70.0.01	70.0.01	00.0.01	01.0.01
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 阪大たんぱく研所長					
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 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		(禾昌匡)	(禾昌匡)	(禾昌匡)	(禾昌巨)
   伊東   椒 東北大理教授		(委員長)	(委員長)	(委員長)	(委員長)
大木 道則 東大理教授					
大流   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					
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					

歴代の運営協議員(1981~ 6-3

人 - 人事選考部会に属する運営協議員 共 - 共同研究専門委員会 会長(議長)

(副) 副会長(副議長)

民"	俎	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	第9期 '97.5.1~ '99.4.30
伊藤 憲	憲昭	名大工教授	北								
大野 公	公男二	北大理教授	~								
角戸 正	田米田	阪大たんぱく研所長	(圖)								
朽津 幇		東大理教授	$\prec$	$\prec$							
米級		上智大理工教授									
千原 秀	秀昭	阪大理教授	~								
田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田	莊 次 通	東大教養学教授	共 (共~'82.4.30)								
豐沢	軸	東大物性研教授	$\prec$								
田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田	離	京大理教授	人 (人~'82.3.31)		~	(副)・人					
米澤貞次	久郎	米澤貞次郎   京大工教授	, # ;								
			(共~'82.5.1)								
	洪末、	分子研教授	~	~							
北村	秃	分子研教授	<b>₩</b> .≺	$\prec$	$\prec$	~ '87.5.31					
木村 克	克業/	分子研教授	#	#	<b>半・</b>	<b>₩.</b> -	9	6			
拉雪	—————————————————————————————————————	分子研教授					( '90.1.29~) ( ~'92.3.31) # 人・#	( ~ '92.3.31)   ↓ · ‡ · ↓	#· ~		
		分子研教授	~	$\prec$	$\prec$						
							( ~ '90.1.16)				
選出	常毅	分子研教授	('82.4.30死亡)								
諸熊	一	分子研教授	人・共(共~,82.4.30)	$\prec$	~	#	~	人 ~ '92.2.14)			
吉原經太郎		分子研教授	#· ≺	十・十	十· 十	$\prec$	~	,	~		
		分子研教授(客員)(東工大理教授)		-							
血血	。 ス 。	分子研教授(各員)(阪大基礎工教授)		<b>≺</b>							

出	俎	通	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	第9期 ~ 1.5.1 ~ 99.4.30
世日	秀雄	分子研教授(客員)(名大理教授)									
田	部门	名大理教授	(共~,82.5.1)	~							
伊藤	光罗	東北大理教授			(圖)						
¥ 社	雅男	北大理教授		#							
田	晴雄	東大理教授		#							
雪	和未	宇宙研教授									
田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田	滋	東北大理教授		~							
中村	<b></b>	分子研教授		#		~	~	#	~		
-	-		(米~ 82.5.1)								
光二	有成						~	<b>~</b>			
<del>\</del> ∃	明夫	分子研教授(客員)(東工大名誉教授)									
쌲	  掛	慶應大理工教授			#	¥	#				
曹野	盤	東大物性研教授									
坪村	<b>₩</b>	阪大基礎工教授			~						
智	光	お茶女子理教授			~	~					
又曾	Ιŝ	阪大基礎工教授			#	~ '88.3.31					
松氷	義夫	北大理教授			~	~					
北川	<b>神</b>	分子研教授			#	十· 十	十・十		~	~	
淵縣	#K 	分子研教授									
青野	茂行	金沢大大学院自然科学研究科長									
安積	鎖	東北大理教授				~	~				
四田	難也	東大教養学教授				~	(副)人				
松尾	拓	九大工教授				#					
九山	和博	分子研教授(客員)(京大理教授)				'88.6.1 ∼					
光	门	分子研教授				'88.4.1 ∼		#			
瀬品	久彌	分子研教授				'88.9.1 ∼	#	~	~	#	#
田田	共	分子研教授				~ '88.3.31					
班田	米爾	分子研教授					$\prec$	~	'94.4.1 ∼	~	~
田田	出出	京大理教授					~	~			
田岡	川	東大理教授					~				
仁科雄-	一郎	東北大金材研教授					#				

田	所属	第1期 '81.5.1~	第2期 '83.5.1~	第3期 '85.5.1 ~	第4期 '87.5.1~	第5期 '89.5.1~	第6期 '91.5.1~	第7期 '93.5.1~	第8期 '95.5.1~	第9期 '97.5.1~
		'83.4.30	'85.4.30	'87.4.30	'89.4.30	'91.4.30	'93.4.30	'95.4.30	'97.4.30	'99.4.30
村田 好正	E 東大物性研教授						(圖)			
中筋 一弘	√ 分子研教授						~	人 (~'94331)		
飯島 孝夫	学習院大理教授						~	(三)		
伊藤 公一	- 大阪市立大理教授						~	· ~		
小川禎一郎	№ 九大総合理工教授						#	#		
小尾 欣一	- 東工大理教授						#			
京極 好正	E  阪大蛋白研教授						~	~		
田中 短二	二分子研教授							#	~	~
齋藤 修二	二分子研教授						~ '92.4.1	#	#	#
川崎 昌博	身 北大電子科学研教授							~	~	
近藤保	R 東大理教授							~	(副)人	
点藤 軍治	京大理教授									
塚田	<b>  東大理教授</b>							#	#	
山口 米	8 阪大理教授							~	~	
字理須恆雄	<b>甘</b>   分子研教授								#	#
中村晃	2 分子研教授									
小杉 信博	身 分子研教授								~	~
渡辺 芳人	() 分子研教授								#	#
大澤 联二	豊橋技科大工教授									#
生越 久靖	事 福井高専校長									
小谷 正博	尊 学習院大理教授								~	~
西 信之	2 分子研教授								~	~
三上 直彦	[ 東北大大学院理教授								#	~
田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田田	E  阪大大学院基礎工教授									
加藤重樹	対 京大大学院理教授									~
小公理的指之助	り 姫路工業大理教授									#
関一一商	5 名大大学院理教授									~
田中 武彦	5 九大理教授									~
籏野 嘉彦	5 東工大理学部長									(圖)
小林 速男	3 分子研教授									~

# 6-4 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規則

平成10年9月16日 岡機構規程第8号

# 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規則

# (趣旨)

第1条 大学の教員等の任期に関する法律(平成9年法律第82号。以下「法」という。)第3条及び第6条の規定に基づく岡崎国立共同研究機構分子科学研究所の研究教育職員の任期については,この規則の定めるところによる。

## (教育研究組織,職及び任期)

第2条 任期を定めて任用する研究教育職員の教育研究組織,職,任期として定める期間及び再任に関する事項は,別表に定めるとおりとする。

## (同意)

第3条 任用に際しては,文書により,任用される者の同意を得なければならない。

# (周知)

第4条 この規則を定め、又は改正したときは、速やかに周知を図るものとする。

# 附則

この規則は,平成11年1月1日から施行する。

#### 別表(第2条関係)

教育研究組織	職	任期	再任の可否
(法第4条第1項第1号) 理論研究系 分子構造研究系 電子構造研究系 分子集団研究系 村関領域研究系 極端紫外光科学研究系 錯体化学実験施設	助手	6年	可 (ただし、再任の場合の任期は3年とする。)

# 6-5 「岡崎国立共同研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規則」に基づく任期制の取扱いについて

平成10年9月16日

機構長裁定

# 「岡崎国立共同研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規則」に基づく 任期制の取扱いについて

#### 1. 任期に対する基本的な考え方

分子科学研究所における助教授及び助手の高い流動性は,任期制のみならず完全な公募による教官の採用及び内部 昇格の禁止等を含む研究所創設来の独自の人事政策によるものである。

今回定める「岡崎国立共同研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規則(以下「任期に関する規則」という。)」は、現行の人事政策の一部(研究系における6年任期の助手のみ)を法律に従った形式にしたものであるが、これによって任期に対する基本的な考え方を変えるものではない。

## 2.再任等

「任期に関する規則」によって新たに導入される再任については,回数は制限しない。再任にあたっての選考手続きは,「3.研究業績等の報告」の結果を参考にして,運営協議員会において行う。

なお、「任期に関する規則」の対象となる助手の任期内での転出に対しては、本人のみならず所属研究グループの教授あるいは助教授も最大限の努力を払うことが必要である。

#### 3.研究業績等の報告

6年次及び再任後は,毎年,以下の2段階の手続きを行う。これは法制化された任期制度には含まれていない手続であるが,現行の人事政策に従って,今後も形骸化させることなく実施するものである。

- (1) 当該助手の属する研究系の主幹は,毎年,主幹・施設長会議において,当人の研究業績等の報告を行い,承認を受ける。
- (2) 主幹・施設長会議で承認された後,当該助手の所属研究グループの教授あるいは助教授は,教授会議において当人の研究業績等の報告を行い,承認を受ける。

# 付記

この取り扱いは,平成11年1月1日から実施する。

# 分子研における同業者評価

伊藤 光男

機関の評価のやり方は、その機関の設置目的、規模、評価対象等により大きく異なり、個々の機関で異なるのは当然である。分子科学研究所のような大学共同利用機関は一般にその設置目的が具体的で明確であり、その目的に照らして評価を行うことになる。その点、設置目的が抽象的で多岐にわたる大学等にくらべると評価はしやすいと言える。ここでは1993年以来行っている分子研の外部評価を紹介したいと思うが、その前に分子研の概要を説明しておく必要がある。

分子科学研究所は"物質の最小構成単位である分子の構造とその機能について実験、理論的研究をおこなうとともに、大学共同利用機関として全国の分子科学研究者の共同利用に供する"ことを目的として1975年に愛知県岡崎市に設立された。化学と物理学の境界にある分子科学を中核として生物学、宇宙科学にもまたがる広い分野について基礎的研究を行っている。7研究系、5研究施設、1技術課からなり、専任教官は教授17、助教授29、助手52のトータル99名(所長1を含む)、それに44名の技官をくわえると全定員は143名の所帯である。このほか博士研究員、大学院学生、外国人研究員、パートタイムの支援要員等をあわせると約300名の規模である。分子研はスモールサイエンスの研究所であり、同じ大学共同利用機関である高エネルギー加速器研究機構や宇宙科学研究所のようなビッグサイエンスの研究所にくらべると小さい研究所である。各研究系は2-4部門からなり、1部門は教授1、助教授1、助手2で構成されているが、教授と助教授はそれぞれ独立した研究室を有している。したがって、研究室の数は17+29=46となる。教授、助教授の独立性とともに、分子研は創立以来独自の教官人事を行っている。教授、助教授、助手はすべて公募で採用し、研究系については助手から助教授、助教授から教授への内部昇格は全面的に禁止している。さらに助手には6年の任期がつけられている。このような厳しい人事政策により教官の流動性が極めて高く保たれているが、若手研究者にとってはよい仕事をして外に出てゆかなければ浮ばれないという緊張感が常にある。いろいると問題もあるが、自らに厳しい人事政策は国際的にも高い評価をえている研究水準の維持に大きく貢献している。

分子研では過去2回の外部評価を行った。第一回は1993年、第二回は3年後の1996年、今後も3年毎に行う予定である。研究所の最大の使命は研究である。したがって、評価の対象は当然、分子研で行われている研究である。研究評価については、評価の尺度や多様性などについていろいろと議論のあるところである。論文数や引用度などのデーターは一つの目安になるものであるが、もっと重要なのは同業者の目である。そこで分子研で行われている研究にたいして専門家から直接に、具体的意見を聞くことから始めた。各研究系より現在第一線で活躍中の国内外の研究者で最も適当と思われる候補者を数名推薦していただき、その中から分子研評議員(分子研には2名の著名な外国人分子科学研究者が評議員としている)の意見を聞いた上で、各研究系について1 - 2名の外国人研究者、2 - 4名の国内研究者を選び評価をお願いしている。これらの人とは互いに競争関係にあったり、親しい友人であったりする同業者なので客観的な評価は難しいかもしれない。しかし研究評価は分子研研究者のためにするのであって、外に対して取り繕うためのものではない。そう考えると、研究者にとってあまり意味の無い美辞麗句よりも主観のはいった、ある場合には辛辣な意見のほうが有り難い。こうして、あえて専門の近い同業者を外部評価員としている。1993年には18名(外国人研究者6名、国内研究者12名)、1996年には20名(外国人研究者7名、国内研究者13名)の評価員をお願

いした。評価は各研究系毎におこない、各系にアサインされた国内評価員は系の研究グループリーダー(教授と助教授)全員と一同に会し、この分野の研究の動向、その中における分子研の位置付けと研究の評価、今後の方向等について自由な議論を行なう。重要なことは国内評価員は各グループリーダーの研究を熟知していることであり、したがってこの場での議論はかなり突っ込んだ白熱したものである。国内評価員にはあらかじめ所長から厳しい目で痛いところは容赦無く指摘して欲しい旨を要請している。この全体会議は通常、日をおいて2回おこなわれ、そこでの議論はそのまま報告書にまとめている。さらに国内評価員には個別に所長宛の意見書をいただき、評価員の許可をえて公表している。これらの報告は毎年出している「分子研レポート」に掲載している。1993年の分は「分子研リポート '93」に出ているが、そこに載せられた評価員の辛口批評は新聞紙上でも取り上げられ話題となった(日経産業新聞、1994.7.20)。辛口の評価や都合の悪いこともあえて公表している背景には絶対的な自信が隠されている、と妙に誉めている。

外国人評価員による評価は彼らの来日日程にあわせて各研究系毎に実施している。各外国人評価員には数日間、分子研に滞在していただき、その間、系のグループリーダーと個別にインタビューをし、研究内容について説明をうけるとともに、意見交換をしていただく。多くの場合、外国人評価員は専門の近い同業者であるので白熱した議論となり、一人あたりについても長時間にわたり、どうしても系のグループリーダー全員とのインタビューには数日を要することになる。外国人評価員にとっては大変きついものであるが、彼らは喜んでやってくれるのは有り難いことである。あらかじめ彼らにお願いしている項目は

- 1. Internationa reputation of the research
- Originality of the research
- 3. Suggestions of new research fields
- 4. Proposal for further IMS development
- 5. Submit a report of general comments to director-general (the report will be published in IMS Report)
- 6. Director-general appreciates very much to receive comments for individual research goups in Confidential である。

これら外国人評価員のジェネラルコメントはそのまま分子研リポートに掲載している。コメントは辛口のものもあるが、国際的視野からみた大変有益な建設的なものが多く、さすがと感心させられる。一方、個々の研究グループについて親展でいただいたコメントは当然のことながら公表はしない。しかし関係する部分のみ評価員の許可をえて各研究グループリーダーに知らせている。公表できないのが残念であるが、これらのコメントは極めて適切なものが多く、個々の研究者にとっては励みと反省になっている。

以上が分子研における外部評価の概要である。分子研での特徴は研究分野に近くしかも現在最もアクティヴな研究者に評価してもらうことである。評価員は専門が近い同業者であり年齢も比較的に若いため、生臭さは否めない。時には大変挑発的な意見やあまりにも個人的な見解も見受けられる。その意味では客観性に大いに欠けるが、それでも構わないと思っている。そもそも純粋に客観的な評価は不可能である。できるだけ客観性をもたせるよう努力することは必要であるが、分子研のような一研究機関ではとても無理であり、かりに出来たとしてもデーターの羅列に終わりかねない。まえにも述べたが、評価は研究者自身のためにするものであり、研究者にとって自分がどう思われているかを具体的に知りたいというのが最大の欲求である。同業者による評価は直接その欲求にこたえるものと言える。い

ままでの経験によると、複数の評価員による研究評価はほぼ一致している場合が多くかなりの客観性があると思われる。すこし乱暴なこのような同業者評価ができるのは、分子研研究者が自分の研究に自信を持っていることによると 思う。また公表された的外れの評価にたいしては評価員自身が世間から問われるという側面がある。

各研究分野についての外部評価は必ずしも機関全体の評価とはならないが、それが機関評価の基礎であることは言うまでもない。最近、多くの大学や研究機関で外部評価がなされているが、個々の研究評価に基づいているかどうか大いに疑問に思うことが多い。かなり典型的なのは功なり名をとげた著名な学者や知識人が外部評価員として名を連ねているケースである。これらの人は豊富な経験をおもちなので、大局的な立場から評価していただけると思うが、忙しいこれらの方が研究の内容等についてどれだけ把握されているかは大いに疑問である。どうも評価も形式的なものが多く、有名人が名をつらねることで評価に箔をつける意図が見え隠れしている。

最後に外部評価の後始末について述べたい。前述したように分子研では外部評価をその年の「分子研リポート」に報告、公表している。外部評価は個々の研究内容、研究室の運営、人員配置、研究費、今後の研究方向等、多岐にわたる。また、研究所全体としての諸問題の指摘、それらについての忠告、提言等が寄せられている。これらの評価、提言はそのまま鵜呑みにするのではなく、研究所の教授、助教授全員が参加する将来計画委員会で充分に検討し、検討結果に基づいて将来計画を策定している。この将来計画は外部評価をおこなった翌年の「分子研リポート」に発表し、必要と思われるものについてはその次の年に概算要求を行っている。このように外部評価、将来計画、概算要求を3年のサイクルで行うことが大体定着している。この結果、外部評価で指摘された多くの提言が実を結んだ。例えば、外部評価である分野の理論研究の弱さが指摘された。これを契機に将来計画委員会で検討し、この分野の理論部門の創設に全力をあげ実現することができた。また、近年の研究動向にたいして研究施設が充分に対応できてないことが多くの評価員から指摘があった。これに対して全所的に取り組み、施設の全面的な改編を提案した。かなりの人員増をともなう大きな改編であったが、関係者の理解をうることができ実現することができた。これも同業者評価のおかげと感謝している次第である。

ここでは主に研究に限った評価についてのべたが、研究以外に共同利用研としての役割、国際協力、大学院(分子研は総合研究大学院大学に属し、博士課程後期の学生を受け入れている) 技官等多くの問題を抱えている。これらについてはそれぞれの問題に応じて外部から関係者をお呼びして、評価、検討を行い、その都度、「分子研リポート」に報告している。

点検、評価には大変な労力と費用がかかる。それでなくても忙しい研究者に貴重な時間を割いていただかねばならない。それだけにやるからには研究者自身にとって役に立つものでなければならない。1993年に最初の外部評価を行った時は分子研の教授、助教授の方々に大変な負担をおかけした。しかし、一旦、やり方が定着すれば2回以降は割に楽であることが分かった。また、報告書は外部評価員の報告をそのまま載せることで大いに手間が省けている。費用については四苦八苦しているが、文部省より研究評価促進経費がでるようになって大分楽になった。最後に、文部省の奨励により大学、研究所は大変苦労して報告書をだしているのが現状であるが、いったいこれらの報告がどのように利用され学術行政にどのように反映されているかを知りたいものである。きちんと評価したところはそれなりに評価してもらいたいと思う。

(学術月報51(8),792 (1998).)

#### 1.はじめに

分子科学研究所は大学共同利用の研究機関として1975年に設立され、その後同主旨の下に設立された基礎生物学研究所及び生理学研究所とともに岡崎国立共同研究機構を構成している。分子科学研究所は創設以来独自の人事政策を採用し、我田引水ながら、優れた研究業績のみならず、それを支える研究者の流動性において大変高い評価を得ている。本稿においてはその独自の人事政策とそれが裏打する研究者の高い流動性を若干のデータを掲げながら紹介する。更に、最近の「大学の教員等の任期に関する法律」の制定に伴う分子研の立場を説明するとともに、流動性を高めるための人事政策の全国的普及を願う我々のメッセージを述べたいと思う。なお、分子研は当初五つの研究系(専任教授9名、助教授9名)と六つの研究施設(助教授6名)で構成されていたが、その後研究系の拡充及び施設の再編・拡充を経て現在は教授17名、助教授29名、助手52名からなっている(これには他大学から拠点を二年間分子研に移して研究に専念するいわゆる流動部門が含まれている)。これに、技官、博士課程の大学院学生、博士研究員、各種外国人研究者及び秘書等の支援職員を含めて総勢約300名の所帯である。教授と助教授は独立の研究室を構え、予算配分等も全て平等公平に行われている。

#### 2.分子研の人事政策

さて、分子研の創設に当たっては将来を的確に見据えた高い見識と行動力を持った先輩の先生方の多大の努力によって当時の日本では大変革新的とも言える人事政策が立案され実行に移された。その要点は次の通りである。

- (1)研究系の助手の任期は6年とする(部門創設時の第一期の助手の任期は7年とされた)。
- (2)研究系の助手・助教授の内部昇格を禁止する(但し、助教授には任期は設けない)。
- (3)採用人事は全て所外委員の入った人事選考部会で行う。

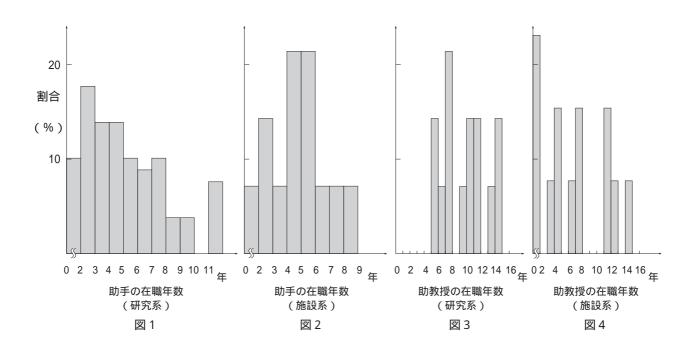
「研究系」と断わっている通り、施設については大学共同利用機関としての業務を遂行する義務があるため上記の規 則は適用されない。しかし、施設系からの内部昇格については今までに助手から助教授への昇任の例が一件あるのみ である。しかも、この例外も分野の特殊性故の例外中の例外でしかない。施設系の流動性は後でも述べるが、実際に は、予想以上に高く、施設業務の継続性を損なわないように人事を進める配慮が必要になっているくらいである。な お、教授については、研究以外に研究所の管理・運営に多大の責任を有するという観点から任期は設けないこととさ れた。ところで、助手の6年の任期が来たらどうするかというと、任期中の研究業績及びその間に行った転出の努力 を関係する研究系の主幹が主幹・施設長会議において説明し一年延長の了承を得る。更に、研究グループの責任者で ある教授あるいは助教授は教授会議において同様の説明を行い承認を得なくてはならない。この主幹・施設長会議及 び教授会議での承認は一年過ぎるごとに毎年行う必要がある。分子研には当然ながら、助手以外にも技官、大学院生、 博士研究員等色々な身分の人がいるので、助手人事の際にこれらの人が応募者であった場合にはその昇格も当然問題 となる。分子研ではこれら全ての身分に対して分子研における総滞在年数を10年までとしている。すなわち、助手に 採用された時、それ以前にこれらの身分で分子研に滞在した年数を10年から差し引いた年数と6年との少ない方がそ の人の助手の任期となる。更に大事なことは、助手の採用に当たって、外部の応募者と同程度の実力と見られた場合 には内部の人を採用しないという点である。世の中で通常行われていることに比べるとかなり厳しいかと思われるが、 とにかく一度外に出て立派な一仕事をしてからなら戻ってもよいということである。内部昇進の禁止については、国 外の識者から時折、「厳し過ぎるのではないか」、「優れた若手をみすみす手放すことはないではないか」といった意見 を頂くことがある。しかし、我々は安易な妥協で「元の木阿弥」になることのないように基本原則を堅持し頑張っている。若い優れた人材を採用し、育て、日本全国に送り出し、その人達が新しい分子科学を作り上げ日本の研究体制をも斬新なものに変革して新しい21世紀の日本を構築して行ってくれることこそが我々の願う所であり、実際かなりその実績を挙げて来ているのではないかと自負している。また、後でも述べるが、注目に値する事実として、分子研内の助手、助教授、その他の若い研究者が分子研の人事政策を「厳しすぎるから改めるべきだ」とは思っておらず、むしろ自然なあるべき姿として受け入れていることである。

#### 3.採用人事の行い方

以上述べてきたことは、研究者の流れの過程の中での言わば出口の部分である。良い研究環境を整え存分に研究が 出来る様に努力しながらも、任期制等を設けてマンネリに陥ることを避け、良い研究成果を挙げて転出し更に新しい 発展を目指すことを奨励・刺激するのが我々の考え方である。このシステムがうまく稼働するためにもう一つ大事な ことは、言うまでもなく入口、つまり採用人事の行い方である。極端な言い方をすれば、真に優れた人材を採用して 良い研究環境を与えれば、任期制が無くても流動性は自然に維持されるはずである。分子研の採用人事の行い方を説 明しよう。助手以上の全ての人事は人事選考部会で行われる。人事選考部会は運営協議委員会の下部組織で、人事の 決定を同委員会に代わって行う組織である。委員は運営協議委員会のメンバーで、所内5名、所外5名の教授で構成 され、分子研所長がオブザーバーとして出席する。委員は4年任期で2年ごとに半数が交替する。人事は全て公募で、 そこに至る手順は教授・助教授の採用の場合には次の通りである。まず、所内で分野検討委員会が構成され、該当す る研究系以外の人がその委員長となる。検討の結果を主幹・施設長会議に諮り教授会懇談会を少なくとも二回開催し て教授・助教授全体の意見を聴取し公募文案を作りあげる。これを人事選考部会・教授会議に正式に諮り最終的に「化 学と工業」や「物理学会誌」等の雑誌への掲載で公募が始まる。公募締切後人事選考部会委員を通じての推薦があれ ばこれを追加して名簿を確定し、人事選考部会での審議が開始される。なお、教授以外の候補者の一覧は教授会議に おいて秘密保持堅持を確認の上回覧される。応募者は原則として推薦書と10篇以内の原著論文を提出することになっ ており、人事選考部会ではこれを分担査読(一人の候補を二人で査読)する。候補者が多い時は大変な作業となる。正 に、外部委員の献身的な努力によって支えられているわけである。委員会は最低月に一回くらいのペースで開かれ、土 曜・日曜を使ったり、外部委員の都合によっては岡崎以外の地で開催されることもしばしばである。候補者は最終的 に3名程度に絞られ最後に面談が行われ、業績説明・将来の抱負・質疑応答が行われる。施設助教授の場合には施設 長の意見を聞き面談に参加してもらうのが通例である。助手の人事の場合には、公募文案を該当する系あるいは施設 で作成し主幹・施設長会議で議論した後人事選考部会・教授会議の承認を得て公募に入る。実際の選考作業は、人事 選考部会から所内二人・所外一人、部会委員以外の所内教官二人(内一人は該当教官)で構成される人事小委員会 で行われる。論文査読・審議・面接(面接には所長が出席)を行って最終候補を人事選考部会に報告して承認をうる。 人事選考部会の決定は教授会議で報告・説明され、教授会議メンバーによる投票で最終的に決定される(法的な決定 権は勿論運営協議委員会にある)。教授・助教授の場合、投票は一週間後臨時教授会議を開いて実施される。候補者の 業績を教授会議メンバー各自が調べられるようにするためである。以上でお分かりの通り、助手の人事も所外委員を 含めて実に客観的に慎重に審査が行われている。恣意的人事が行われる余地は全く無いと言える。容易にご想像頂け ると思うが、以上の人事選考の作業は大変なものである。これだけの努力をして優れた人材を採用しているからこそ、 前述の任期制と相まって研究者の流動性が高く維持されていると信じている。

#### 4. 研究者の流動性

以上で説明した分子研の人事政策は最初にも述べた通り、分子研創設以来一貫して実行されている。流動性を示す 実際のデータを若干示そう。図1、2は研究系と施設の助手の在職年数分布を示している。これは転出した助手の総 数に対する「該当年数で離職した人」の割合を表わしており、平成9年9月1日現在のデータである。6年未満の在 職期間で転出した研究系の助手の割合は66%、8年未満は85%に達している。施設系では、それぞれ、71%、86%に 達する。前述した通り、任期を設けていない施設助手も活発な研究活動を行い転出して行っていることが分かる。同 時点で転出した助手の総数は93名で、全助手の二倍に達する人が入れ替わっていることに相当する(研究所の拡充等 により現在の助手の定員は創設当初に比べて相当増加している事にご注意願いたい)。なお、3年未満にピークがある のは、分子研では一頃任期2年の短期助手と言うのを2-3名別途採用していたことによる。図3、4に助教授に関 する同様のデータを示す。研究系の助教授の半数が在職10年未満で転出していることが分かる。80%の人が12年未満 で転出している。施設では、10年未満で70%の人が、12年未満で85%の人が新しい職場を得ている。ここでも施設系 の方が流動性が若干高いと言う興味ある傾向を示している。業務をこなしながらも施設の利点を活かして優れた研究 成果を挙げ転出している。立派なものである。これは、任期制や昇任禁止の政策が必要ないということを意味してい るのではなく、施設系の研究者がむしろ逆に、自分の周りに課せられている厳しい規則を意識し使命感を感じて、そ れがプラスの効果を生み出しているのではないだろうか。勿論、なんと言っても、優れた人材を採用する事が一番大 事であることに変わりはない。平成9年9月1日現在で転出した助教授の総数は27名で、同時点での定員20名を大幅 に超えている。創設以来20年余りにして、助手については二回以上、助教授については一回以上総入れ替えが起こっ ている勘定になる。



#### 5.全国普及を願って

最近、「大学の教員等の任期に関する法律」なるものが制定され、その適用についてのニュースが時折新聞紙上をも 賑わしている。分子研においてもこれに如何に対応するかについて所内で検討委員会を作り議論を重ねた。その結果、 「研究系の助手の任期を6年とし、再任の場合の任期は3年とする」という形でこれを採用することとした。但し、具 体的運用に当たっては以下の指針に従うものとした:

『6-5 項「岡崎国立共同研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規則」に基づく任期制の取扱いについて』(263 ページに別掲)。

初めて読まれる方にとっては些か複雑すぎて、何故こんなややこしいものにするのかと思われるかもしれない。実 は、これは、我々が自信を持って実施してきている分子研独自の人事政策を決して形骸化させることなく、「法律」と の整合性ある形で運用していこうとする精神の表れなのである。要するに、今まで説明してきた独自の人事政策に加 えて、任期6年を過ぎた者についての再任手続きが更に所外委員の加わった運営協議委員会において実行されるとい うわけである。これによって6年次以降の一年毎の従来の手続きを決して疎かにして良いというわけではない。むし ろ、この規則によって従来より厳しさが若干増したことになる。この規則を決めるに当たっては、前述した通り検討 委員会において活発な議論が行われると同時に、助手の人達に対する無記名アンケート調査も実施された。それによ ると、細かい点では勿論色々な意見はあったが、「このような任期制は刺激になるのであって良い」という意見が大勢 を占めた。このように自分を厳しく律する姿勢があるということは大変健全である。我々の人事政策の基本精神が有 効に働き、生きている証であると思う。そもそも分子研にとっては、かかる「法律」は必要でなく、我々独自の政策 で十分機能しうると考えている。この様な「法律」が制定されざるを得なかった背景がまだ全国に相当あるというこ とを憂うべきである。人事公募及び採用における閉鎖性や非公開性、そして情実や長老支配等が横行する状況を是非 とも打破して行かなくてはならない。この点での大学の自浄作用が最も大事であることは言うまでもないことだと思 う。教授の講座内における権力の執行や助手人事の閉鎖性などではどうしても人間の弱みが出てしまうものである。分 子研で助手・助教授を過ごした人達が、そして全国の研究者がこの弱みに陥ることなく改革の努力を続け、もっと厳 しい「法律」を作らなくては駄目だと言った風潮を助長することの無いように、いや、このような「法律」そのもの が無用なものとなるように、自浄作用を一層高める努力をされることを切に願っている。

(学術月報51(9),919(1998).)

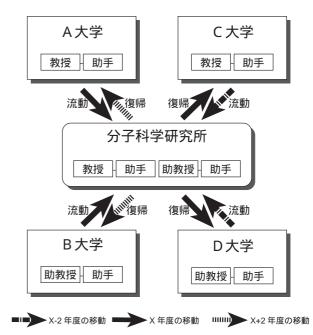
国立の大学や研究機関の研究者の交流や研究活動の活性化を図る目的で、分子科学研究所には「流動部門制度」が設置されている。この度、この制度の改革案が検討され、より魅力ある制度へ変える取り組みがなされている。その経

緯と具体像を紹介し、多くの研究者の参加を呼びかける。

#### 1.流動部門とは

「流動部門制度」は、1984年に大学・研究所間の人的交流を推進し研究の活性化を計る目的で、当時の長倉三朗所長の卓見により導入された。これからの学問的発展が期待され、研究者数もある程度の規模になりつつある分野の国立大学の研究者が、一定期間(通常は2年間)その籍とともに分子科学研究所に移り、分子研の専任教官として集中的に研究を行うための制度である。当初は、分子科学の周辺分野への支援を目的として導入されたが、伊籐光男所長によって分子科学の領域にもこの制度を取り入れ研究者の交流を更に活性化するために分子クラスター研究部門が設立された。

日本の大学が抱える大きな問題は、教授・助教授が様々の会議や講議などで追いまくられ、 じっくりと研究に集中できる余裕が生まれにくいこと、又、学部卒業から退官



流動部門形態図。2箇所以上の大学から教授(助教授)・助手のペアで、あるいは単独で分子研専任としてポジションを移し、2年後に復帰させる。

まで同じ大学に在籍する人が珍しくないという流動性の低さであろう。これらは、研究と教育の両面においてマイナス要因となっている。小学校への入学がら始まって、大学への入学あるいは社会人として新しい職場でのスタートを切るまでは、それぞれの「学校」という異なった環境へ自己を適応させ、新しい知識を吸収し、人は育てられる。社会に出ても、環境が変わることによって、環境への適応という自己変革を繰り返してゆくうちに、人間は成長する。学問の世界でも、新しい分野が起こり、多くの研究者の参入によって活発な分野へと成長するが、多くの場合5年から15年程度の寿命で同様の研究はすたれ、また次の段階を目指した新しい分野への変身が求められる。研究者にとって、常に新しい刺激をうけうる機会と新しい人間環境に身を置くことは、飛躍への大きなチャンスである。米国では、ある特定期間(6年間)教育義務をつとめた研究者に、サバティカル制度による1年間(又は半年)の充電期間が与えられ、研究者はこれを利用してヨーロッパや米国内の他の大学でこれまでの研究のまとめをしたり、今後の7年間の新しい研究展開の準備を行う。これは、7周期のうちの1回は安息が必要という古代ユダヤの知恵に由来している。7年目に畑を休耕することにより、その先、より豊かな収穫が得られることを知っていたユダヤ人の経験が取り入れられたそうである。

かって、日本の若手研究者が続々と博士研究員としてアメリカに渡り、新しい学問や知識・技術を導入し、日本の学会に新しい分野を次々と花咲かせた。そして、日本が世界に追い付いたように見える現在、本質よりも枝葉末節的な研究を強いられている若者は、研究者としての生活に必ずしも魅力を感じなくなっている。これは、アメリカにおいても同じであろう。先生の生活や研究そのものが魅力的ではないというのである。本当に解かなければならない問

題、魅力あるテーマはまだまだたくさんある。しかし、これらの多くは自分達が教わった手法、教科書に書いてある 既存の手法では決して解くことができないであろう困難な問題に思えて、忙しい生活の中ではとても考えてはおれな い、という研究者が多いのではなかろうか。

すべての雑用から解放され、1週間全部(いや6日間)研究に専念できたらと思う研究者は少なく無いはずである。 そういう研究者に分子研の流動部門制度を活用して頂きたいのである。

#### 2.分子研の流動部門

分子科学研究所には、現在3つの流動部門がある。錯体化学研究施設に属する錯体合成研究部門、極端紫外光科学研究系に属する界面分子科学研究部門、そして相関領域研究系の分子クラスター研究部門で、それぞれ、教授1、助教授1、助手2が配置されている。看板どおりの研究を行っている人ばかりでなく、広い立場で関わっている研究者として着任している人もいる。何れの部門も関連研究分野の研究者に囲まれており、様々な交流が可能である。これまでに、22の国立大学と1高専からの70名の研究者が流動を経験しており、ほぼ全国的な規模での流動制度の活用が実現している。

流動部門候補者の選考は、現在の所、関連する教授/助教授あるいは外部からの推薦を受けて所長を中心としたスタッフで検討、その後、本人および所属の学科/専攻・学部との協議を経て行われる。通常のような公募による選考が困難な理由は、候補者の定員枠の振り替え移動が必要となるからである。即ち、所属大学あるいは研究機関の次年度の概算要求書に、定員振り替え(流動:減員)の要求を出して頂き、2年後に振り替え復帰(増員)の要求をして頂かねばならない。分子研で優秀な候補者を選考しても、周りの先生方や事務関係者に、人員が少なくて、こんなに忙しく雑用や講議に追われている時に、減員要求とは何事かと厳しいお叱りを受けて破談となり、ご本人と周りの先生方に大変大きなしこりを与えてしまうことがある。候補者の復帰後の研究の発展と教育への情熱の再燃への暖かい理解が無ければ決してまとまらない。

# 3. 流動部門制度の点検評価

設立以来13年を経過した平成9年度に、その存在意義を含めてこの制度の点検評価を行った。まず、過去の流動経験者に、率直な意見を求めるための詳細なアンケートへの記入を依頼したところ、ボリュームのある解答欄にも係わらず、36名の方からご丁寧な回答を頂いた。その結果、流動の体験者の殆どが「流動を体験して非常に良かった」と思っておられるが、研究室の立ち上げや学生への経済的支援、流動元に戻られてからの再立ち上げなどの苦労の実体が明らかになった。分子研での立ち上げに見込み以上の経費がかかってしまったり、岡崎での生活費や単位の取得という理由で、結局、流動元に残る学生が多くなり、予定したような分子研での大規模な研究展開が困難になったというような、重要な問題点も明らかになった。これらのアンケートの結果をふまえて、13名の所外委員と7名の所内委員による「流動研究部門点検評価委員会」を開催して活発な議論を行った。流動を引き受けた教授は、結局双方での生活を強いられ、大変ハードな思いをするが、助教授および助手にとっては大変意義のある制度であるという意見が多く出された。流動という名称が「流れ者」というイメージを生むのでもっと魅力的な名称に変えられないかという意見も出された。また、流動元にできるだけ迷惑をかけないですむような工夫ができないか、学生が分子研で研究することに対するさまざまな便宜が計られないか等が議論された。これらの議論の内容およびアンケート結果については、「分子研リポート、97 現状・評価・将来計画」の183頁から206頁に詳しく報告されているので御覧頂きたい。

#### 4.魅力ある制度への改革を目指して

点検評価を受けて分子研内の世話人教授と所長とで改革案を検討し、流動制度の真の活性化を計るための次のような具体的方策を提案した。1. 流動元の大学の研究室を巻き込んだ研究体制をとり、従来の分子研中心の体制ばかりでなく、流動元研究室のスタッフや学生が積極的に参加できるような体制を実現する。2. 最先端の早急に解決すべきテーマを開発プロジェクトとして企画し、このプロジェクトを実行しうる研究者を招へいする。3. このプロジェクトに、所内グループも係わることによって、流動部門研究室・流動元大学研究室・分子研内関連研究室の3組織が一体となってプロジェクトを推進するという最も実効性の高い体制がとれることになる。また、現在の流動促進経費の枠を大きく越えたプロジェクト研究経費の設定によって、より大型の研究を可能とする。分子研の広い実験室とサービス体制はこのような大型研究の推進に最適であろう。これは、大学の研究者にとって大きな魅力となるのではないだろうか。この方策実現のために、平成11年度の概算要求の重要項目として「流動部門開発プロジェクト研究経費」を要求し、流動教官あるいは共同研究を行う流動元大学の教官や大学院生が自由に流動元と研究所の間を往復できる旅費、大型研究を実行することができる開発研究費を申請している。

この新しい制度が実現すれば、流動元大学の研究室と分子研の研究室の両方を拠点とし、それぞれ頻繁に交流しながらダイナミックな研究を展開することができ、かつ分子研の関連研究室との交流によって刺激や知識を得て、更に新しい展開を計ることも可能となる。実際には短い期間で大型研究を実行するのは大変であるので、流動が始まる2年くらい前から準備を行う必要があるであろう。

しかし、この制度自身は、前に述べたサバティカル的な発想とは大きな隔たりがある。じっくりと落ち着いて研究に専念するために分子研の流動教官になることを真に希望する研究者も多い。分子研のシステムでは、流動 1 部門には実際には 2 ないし 3 グループがある。従って、その中の 1、2 のグループが大型研究を行い、他のグループは通常規模の研究を行うことも可能である。分子研だから可能であるのは、各種センター等のサポート体制と場所を利用した大型研究ばかりでなく、緑に恵まれ、落ち着いた図書館やコンピュータセンター、そして、多くの関連分野の研究者集団と隣り合わせの研究環境のもとで、じっくりと自分の可能性を追求する時をもつことであろう。多くの研究者が積極的にこの制度を利用されることを望むとともに、このような研究者を是非サポートして頂きたい。

(化学と工業51(12), 1881 (1998).)

# 6-7 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。

# 6-8 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。