

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。

「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、準安定ヘリウム原子のレーザー冷却・トラップの研究が進行し、フェルミオンであるヘリウム3原子同士の極低温衝突イオン化速度がボゾンであるヘリウム4原子同士のそれよりも約3倍大きいことをこれまでの実験で見出している。今回、この断面積の大小関係がクリプトン原子やキセノン原子の場合とは逆の関係になっていることの原因を詳しい理論解析によって明らかにした。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、前年度に観測した液体ヘリウム中のイッテルビウム原子イオンのスペクトルに見られた分裂がイオンを取り囲むヘリウムバブルの四重極振動による動的ヤン・テラー効果に起因するものであることを理論解析によって明らかにした。一方、実験においては、液体ヘリウム3中のマグネシウム原子やカルシウム原子のスペクトルを観測し、液体ヘリウム4中のスペクトルとは大きく異なることを見出すと同時に、これが両液体ヘリウムの量子統計性の違いによるものであることを突きとめた。

「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、電子状態、振動状態に対する時間分解分光を駆使して、フェムト秒～ピコ秒領域の凝縮相光化学ダイナミクスを研究した。第1に、光パラメトリック増幅(OPA)を用いて500 nm～750 nmの範囲で波長可変なサブ10 fsの光パルスを発生する装置を製作した。さらにこの極短パルスを用いた時間分解吸収測定システムを製作し、光励起直後の電子励起状態分子の振動コヒーレンス(核波束運動)の観測を行った。第2にフェムト秒時間分解蛍光分光を用いて、溶液中で多原子分子を S_n 状態へと光励起した後に起こる緩和過程について研究した。テトラセン分子の S_n 蛍光と S_1 蛍光の両方を時間分解観測することに成功し、その強度変化および偏光異方性の測定から、1) $S_n \rightarrow S_1$ 電子緩和、2)電子緩和直後のIVR過程、3)振動冷却、および4)回転緩和、など一連の緩和ダイナミクスを明らかにした。さらにアントラリン分子の分子内プロトン移動反応を研究し、プロトン移動に対応すると考えられる蛍光ダイナミクスを観測した。第3にピコ秒時間分解ラマン分光により、アゾベンゼンの光異性化反応を研究した。 S_1 状態のNN伸縮振動数を決定し S_1 状態でNN結合が二重結合性を保っていることを明らかにするとともに、アンチストークスラマン測定によって振動緩和過程を明らかにした。

「化学反応素過程の可視化」の研究: 80年代より超短パルス pump-probe 法によって化学反応の実時間観測が試みられてきたが、未知の中性励起状態への励起を probe に用いる従来の方法には困難が多い。本研究では、励起状態の波束を陽イオン状態に投影し、光電子スペクトルの変化から化学反応を追跡する、フェムト秒時間分解光電子画像観測を初めて実現した。陽イオン状態は、分光や量子化学計算によりポテンシャル曲面が精確に求められるため、波束を射影するのに最も適している。本方法を、無輻射遷移理論の中間ケースであるピラジン分子に適用した。ピラジンは光励起により二重蛍光減衰するが、これは高速の電子位相緩和と遅い分布数減衰による。多くの研究者がこの問題を研究したが、蛍光は励起分子の一重項性のみを反映し、位相緩和によって生成する三重項状態は実時間観測が行われていなかった。本研究では、光励起直後に現れる、 S_1 状態からの高速の光電子が100 psの寿命で消失し、三重項状態からの低エネルギー光電子が対応して成長する様子が初めて画像化された。また、交差分子線画像観測法による、NO-Ar 回転非弾性散乱の研究では、CCSD(T)レベルのポテンシャル曲面上での散乱計算と、実測の状態選別微分散乱断面の詳細な比較を行い、量子力学的干渉効果を詳細に評価した。

「スピン副準位による状態の選択」の研究では、高分解能レーザーとラジオ波(マイクロ波)の二重共鳴によるラマンビート検出磁気共鳴分光を進めている。電子基底状態と電子励起状態の2つのスピン準位を高分解能CWレーザーとラジオ波でつなぐ。それぞれの遷移が許容で、レーザー光とラジオ波を用いて共鳴励起すると、入射レーザー周波数とスピン準位間のわずかなエネルギー差に対応する周波数だけずれた散乱光が生ずる。この周波数の差は光信号の

“うなり(ビート)”として観測され、これを検出しながらラジオ波周波数を走査すれば磁気共鳴分光ができる。これをレーザーラマンヘテロダイン検出磁気共鳴分光と呼び、この方法の特徴は光で印を付けたスピンだけの磁気共鳴ができるということである。Pr³⁺/LaF₃系のPr³⁺のNQR測定と、Pr³⁺色中心を囲むLaのNQR測定を行った。

「量子力学的Fokker-Planck方程式による反応場コントロール」の研究では、トロポロン中のプロトン移動異性化反応をターゲットとして、溶液中分子のトンネル過程について研究を行った。このような問題は、散逸系の統計力学で古くから注目されている問題であるのだが、数値的にも未だに解けていない難問である。このような問題を解く手段として、量子効果を十分考慮する事が出来る、低温補正付のガウス・マルコフ量子フォッカープランク方程式をあらたに導出し、そのプログラミングを行った。この方法の利点は、もちろん、これまで不可能であった計算が可能になった事であるが、それ以外にも、古典的な結果と量子的な結果を比較出来る事がある。この方程式を数値的に解く事により、様々な温度や粘性下での化学反応率やラマンスペクトルを計算した。化学反応率は、量子的な場合はトンネル過程により増大する事、また、量子準位に対応した振動が観測される事等が見出された。ラマンスペクトルに対しては、ポテンシャルの共鳴振動に対応したピークが、量子的な場合と古典的な場合で大きく異なり、また、量子的な場合は、低い周波数にトンネル過程に対応する鋭いピークが現れる事が観測された。

(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の研究を行っている。

「有機超伝導体の研究」では本年度、初めての有機反強磁性金属κ-(BETS)₂FeBr₄を見出したが、この系は更に低温で超伝導転移を示す。比熱の測定より、超伝導転移以下の温度では反強磁性秩序と超伝導が共存していることが示唆され、有機磁性伝導体開発の究極目標の一つであった「磁性有機超伝導体」が初めて実現した。また、常圧でπ金属電子とアニオンの局在磁気モーメント(Fe³⁺)が結合しπ-d複合反強磁性絶縁相をとるλ-(BETS)₂FeCl₄では加圧によりπ-d結合が弱まり、温度低下と共に、反強磁性金属、超伝導相が出現することを見出した。他にも新超伝導体を発見した。

「分子性導体における新電子相の探索」では分子性導体の電子状態を、ESRおよびNMR測定といった微視的な観点から調べることを目的としている。TTF系伝導体の電荷局在状態に着目し、(EDT-TTF)₂AuBr₂にSDW内部構造があることを見いだした。TTF系以外においても、遍歴-局在電子複合スピン系(CPDT-STF)-TCNQ、伝導性金属錯体Pd(dmit)₂系、新規2鎖一次元系(BDTP)₂Xの研究も進行中であり、注目すべき結果が得られている。

「低次元強相関係の物性理論」では、擬1次元有機導体(TMTCF)₂Xの次元クロスオーバーにともなう電子状態の変化を摂動論的繰り込み群(1+ε)次元、乱雑位相近似、密度行列繰り込み群などで総合的に調べた。(DCNQI)₂Ag_{1-x}Cu_xに対して、フィリング、乱雑さ、次元性の変化によるモット絶縁体、アンダーソン局在、フェルミ液体の競合を調べた。分子性物質の電荷秩序パターンに依存する、電荷とスピンの励起スペクトルを計算した。ハロゲン架橋複核金属錯体の電荷秩序と格子秩序パターンが配位子、ハロゲン、対イオンに依存する起原を、モデル計算を基に考察した。

「π-d電子系の研究」ではNiPc(AsF₆)_{0.5}の金属絶縁体転移温度が圧力と共に上昇することを電気抵抗の実験により証明した。またCoPc(AsF₆)_{0.5}における対電子がCo3d₂軌道にあることを混晶のESRにより確定した。また混晶にのみ見出されるラマンバンドを発見し、それが共鳴効果によること証明した。その他電子性の分子導体DMTSA, BEDT-ATD, BDT-TTP, BEDO-TTF, BEDT-TTF, DMTCNQの電荷移動塩についてバンド構造、金属絶縁体転移、電荷分離状態

について研究した。とくに BEDO-TTF 塩ではプラズモンを正反射法で直接観測することに成功した。

「新規なドナー・アクセプター分子の合成研究」では 1, 3-ジチオール, 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, ヘテロ原子接触や水素結合を利用して特異な超分子構造を構築した。さらに, ヘテロ環の性質により HOMO, LUMO 準位を制御し, 低エネルギーギャップの分子電線を開発した。

「新規分子性強磁性体の開発研究」では, 数種の新規有機ポリラジカルの合成に成功した。高スピンラジカルの化学修飾により, その常磁性遷移金属錯体の磁気相転移の制御に成功したほか, 加圧によっても磁気相転移を制御できることを示した。また, 分子内および分子間反強磁性相互作用を利用して, 有機ラジカル結晶中でスピン平行配列が誘起される新しい現象を観測した。

「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 光子励起システムを構築し, 真空紫外領域にあるパリティ禁制の P 型励起子の測定に成功した。また, レーザー光励起した半導体表面について放射光内殻光電子分光を行い, レーザー光励起中の内殻準位の変化を検出した。これは, 従来の静的な固体電子論では説明できない現象であり, 表面における非平衡電子状態のダイナミクスについての考察を進行中である。

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

(3) 金属錯体による連続反応場の構築

巧妙に分子設計した金属錯体を集積配列させ連続反応場を構築し, 新しい反応系の開発を行うとともに, 新規な物性・機能を有する物質群の開発を行う。特に, 本研究では高度に制御した反応場を利用した金属錯体による生体内反応の反応機構, プロトン濃度勾配からのエネルギー変換ならびに二酸化炭素の化学的利用を目指して以下の研究を行った。「金属酸素錯体と生体高分子との反応」では代表的な神経性疾患である筋萎縮性側索硬化症, アルツハイマー病や狂牛病では, その発病因子として種々のタンパク質, DNA と金属イオンとの作用が指摘されているが, その本質はほとんど不明であることから, アルツハイマー病の最大の原因とされているアミロイドベータペプチドと金属錯体との相互作用をキャピラリー電気泳動法, マススペクトル等で検討した。その結果, いくつかの銅(II)錯体-パーオキサイド付加体が発病と密接に関与しているタンパク質のコンフォメーション変化に重要な影響を与えるメチオニン部位での酸化反応を触媒することを実験的に明らかにした。また, 金属錯体-パーオキサイド付加体が DNA 鎖に結合していることがマススペクトルから明らかになり, DNA 障害の大きな原因の一つに金属錯体-パーオキサイド付加体であることが示された。いずれの結果も, いわゆる遺伝子病の発現には金属錯体-パーオキサイド付加体が大きく関与していることを示しており, 今後はそれらの事実に基づいて病気を予防または治療する化合物の合成への展開を行う予定である。

「プロトン濃度勾配からのエネルギー変換」では, 酸化還元活性な配位子とアコ基を導入した金属錯体上で, 溶液のプロトン濃度に従いアコ基をヒドロキソおよびオキソ基間の酸-塩基平衡を起こさせると, 配位子とヒドロキソ基に不対スピンの誘起され 3 重項状態が安定に生み出されることが明らかになった。溶液のプロトン濃度変化により創成される 1 重項錯体と 3 重項錯体の酸化還元電位が大きく異なることを利用して錯体間の電子移動を外部回路を通じて

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，単座配位のナフチル基が容易に還元され，フリーの窒素が強い塩基になることを利用して，二酸化炭素由来の Ru-CO 結合の炭素にフリーのナフチル窒素を求核攻撃させ，Ru-CO 結合の還元的開裂の抑制に成功した。金属-CO 結合の還元的活性化が可能になった結果，電解質としての 4 級アルキルアンモニウム塩もアルキル化試薬として使用可能となり，二酸化炭素の電気化学的還元反応でケトンのみが選択的に高速で生成する反応系の構築に成功した。

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65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。2000年2月現在で65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

坪村 宏 (大阪大学教授)

2. 「分子設計の基礎としての理論化学」1976.2.15 ~ 2.18

土方 克法 (電通大学教授)

3. 「分子固体における運動自由度」1976.2.15 ~ 2.18

千原 秀昭 (大阪大学教授)

4. 「共鳴及び非線型ラマン散乱」1977.1.18 ~ 1.20

坪井 正道 (東京大学教授) 田隅 三生 (東京大学教授)

5. 「分子・分子結晶の高エネルギー励起状態」1977.12.4 ~ 12.7

田仲 二郎 (名古屋大学教授)

6. 「興味ある物性をもつ有機半導体 - その電子構造の解明を求めて」1978.2.13 ~ 2.15

佐野 瑞香 (電通大学助教授) 井口洋夫 (分子研教授)

7. 「高分解能分子分光の現状と将来」1978.9.4 ~ 9.5

廣田 榮治 (分子研教授)

8. 「原子・分子・固体表面間の相互作用」1979.2.19 ~ 2.21

諸熊 奎治 (分子研教授)

9. 「反応性中間体の分子設計 - カルベン種を中心として」1980.1.7 ~ 1.9
岩村 秀 (分子研教授)
10. 「分子性結晶の励起子-輸送過程の見地から」1980.2.4 ~ 2.6
井口 洋夫 (分子研教授)
11. 「分子内ポテンシャル研究の展望」1980.12.3 ~ 12.5
鈴木 功 (筑波大学教授) 町田勝之輔 (京都大学助教授)
田隅 三生 (東京大学教授)
12. 「化学及び生化学過程における遷移金属錯体の役割」1980.12.11 ~ 12.13
高谷 秀正 (分子研助教授)
13. 「短寿命分子とイオン-星間過程におけるその役割」1981.9.8 ~ 9.10
齋藤 修二 (分子研助教授)
14. 「光化学反応初期過程」1981.10.20 ~ 10.22
又賀 昇 (大阪大学教授) 吉原經太郎 (分子研教授)
15. 「分子線によって生成する分子及びクラスターの分光学と動力学」1982.11.15 ~ 11.17
伊藤 光男 (東北大学教授) 近藤 保 (東京大学助教授)
茅 幸二 (慶應大学教授) 木村 克美 (分子研教授)
花崎 一郎 (分子研教授)
16. 「分子の動的挙動に対する磁場効果」1983.1.17 ~ 1.19
林 久治 (理化学研究所主任研究員)
17. 「芳香族性と芳香族化合物」1983.9.26 ~ 9.28
村田 一郎 (大阪大学教授) 井口 洋夫 (分子研教授)
18. 「化学反応機構の理論の現状と将来」1984.1.19 ~ 1.21
西本吉助 (大阪市立大教授)
19. 「宇宙空間における分子の形成と進化」1984.3.19 ~ 3.21
花崎 一郎 (分子研教授)
20. 「機能化界面を用いた光化学的電子移動」1984.8.18 ~ 8.20
田伏 岩夫 (京都大学教授)
21. 「特異な電子状態を有する金属ポ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)
閑 春夫(群馬大学教授)
26. 「星間空間及び彗星における分子過程」1986.6.26 ~ 6.28
花崎 一郎(分子研教授) 小谷野猪之助(分子研助教授)
齋藤 修二(分子研助教授) 西 信之(分子研助教授)
27. 「高スピン分子とスピン整列」1986.9.8 ~ 9.10
伊藤 公一(大阪市立大教授) 岩村 秀(分子研教授)
28. 「極端紫外光による物性化学」1987.2.5 ~ 2.7
井口 洋夫(分子研教授) 渡邊 誠(分子研助教授)
29. 「イオン - イオン並びにイオン - 溶媒相互作用に関する分子論的考察」1987.5.26 ~ 5.28
大瀧 仁志(東京工業大学教授) 齋藤 一夫(国際基督教大学教授)
大峯 巖(分子研助教授)
30. 「化学過程における電子のダイナミックス」1987.10.28 ~ 10.30
田仲 二郎(名古屋大学教授) 吉原經太郎(分子研教授)
31. 「気相クラスターのイオン化過程」1988.2.10 ~ 2.12
朽津 耕三(東京大学教授)
32. 「励起分子の化学挙動についての理論化学」1988.9.27 ~ 9.29
笛野 高之(大阪大学教授)
33. 「生化学分子の前生物的合成とキラリティの起源」1988.12.1 ~ 12.3
原田 馨(筑波大学教授)
34. 「燃料における化学反応」1988.12.20 ~ 12.22
神野 博(京都大学教授) 幸田清一郎(東京大学助教授)
林 光一(名古屋大学講師)
35. 「金属クラスター化合物の合理的合成と金属多中心骨格構造に基づく協同現象」1989.5.23 ~ 5.25
齋藤 太郎(大阪大学教授) 山崎 博史(理化学研究所主任研究員)
伊藤 翼(東北大学教授) 磯邊 清(分子研助教授)
36. 「水素-電子結合系での物性の創造」1989.11.13 ~ 11.15
三谷 忠興(分子研助教授) 榎 敏明(東京工業大学助教授)
中筋 一弘(分子研教授)
37. 「酸性物高温超伝導体 その物質と超伝導機構」1990.2.13 ~ 2.15
田仲 二郎(名古屋大学教授) 武居 文彦(東京大学教授)
北沢 宏一(東京大学教授)
38. 「生体系金属錯体の構造と動的側面」1990.10.16 ~ 10.18
山内 脩(名古屋大学教授) 森島 績(京都大学教授)
北川 禎三(分子研教授)

39. 「分子素子を目指した機能分子の開発とその組織化」1990.10.25 ~ 10.27
清水 剛夫 (京都大学教授) 小林 孝嘉 (東京大学助教授)
丸山 有成 (分子研教授)
40. 「非線型化学反応と自己秩序形成」1991.2.23 ~ 1.25
北原 一夫 (東京工業大学教授) 中村 宏樹 (分子研教授)
吉川 研一 (名古屋大学助教授) 花崎 一郎 (分子研教授)
41. 「有機反応過程研究における理論化学と物理有機化学との接点」1991.9.30 ~ 10.2
速水 醇一 (京都大学教授), 西本 吉助 (大阪市立大教授)
野依 良治 (名古屋大学教授)
42. 「分子科学：現状と将来」1992.1.7 ~ 1.9
井口 洋夫 (分子研所長) 正畠 宏祐 (分子研助教授)
中村 宏樹 (分子研教授)
43. 「レーザー光電子分光の新展開」1992.3.10 ~ 3.12
木村 克美 (分子研教授)
44. 「化学反応理論の新しい展開」1992.11.4 ~ 11.6
諸熊 奎治 (分子研教授) 中村 宏樹 (分子研教授)
中辻 博 (京都大学教授) 岩田 未廣 (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
吉原経太郎 (分子研教授) 岡田 正 (大阪大教授)
48. 「分子設計されたフタロシアニン錯体を用いた分子素子の探求」1994.1.26 ~ 1.28
旗野 昌弘 (東北大教授) 薬師 久彌 (分子研教授) 丸山 有成 (分子研教授)
49. 「超臨界流体中に生成するクラスターの構造とダイナミクス」1994.3.16 ~ 3.18
梶本 興亜 (京都大教授) 富宅喜代一 (分子研助教授)
大峯 巖 (分子研助教授)
50. 「電子欠損型遷移金属錯体の機能」1994.8.1 ~ 8.3
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クス」1994.10.5 ~ 10.7
村田 好正 (東京大教授) 松本 吉彦 (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) 薬師 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)
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 拓三 (東大教授) 藤田 誠 (分子研助教授)
63. 「気相分子クラスターのレーザー分光 - 構造とダイナミクスの接点 - 」1999.3.23 ~ 3.25
江幡 孝之 (東北大助教授) 藤井 正明 (分子研教授)

開催一覧 2

回	課題, 開催日, 提案代表者	外国人招待研究者
64	「次世代の分子軌道法」 2000.1.20 ~ 1.22 天能精一郎 (名古屋大助教授) 中野 晴之 (東大講師) 波田 雅彦 (京大助教授) 南部 伸孝 (分子研助手)	Robert J. Harrison (パシフィックノースウェスト国立研究所) (アメリカ) Martin Head-Gordon (カリフォルニア大学バークレー校) (アメリカ) Debashis Mukherjee (インド科学開発協会) (インド) Henrik Koch (南デンマーク大学) (デンマーク) Jan H. Jensen (アイオワ大学) (アメリカ) Y. S. Lee (KAIST) (韓国) B. A. Hess (エルランゲン大学) (ドイツ) Josef Noga (スロバキア科学アカデミー無機研究所) (スロバキア) So Hirata (フロリダ大学) (アメリカ) Kyoung K. Baeck (カンナン国立大学) (韓国)
65	「ナノストラクチャー創製における放射光の果たす役割」 2000.1.27 ~ 1.29 宇理須恆雄 (分子研教授) 黒澤 宏 (分子研教授)	Walter Backer (カールスルーエ自然科学機構) (ドイツ) Nikolaus Schwentner (フライエ大学) (ドイツ) John H. Weaver (イリノイ大学) (アメリカ) Victor M. Bermudez (ナバル研究所) (アメリカ) Struan M. Gray (ルンド大学) (スウェーデン) Stephen Urquhart (サスカツーン大学) (カナダ) Sam K. Jo (キョンワン大学) (韓国)

(第63回までの外国人招待研究者は、これまでの「分子研レポート」を参照)