「分子研リポート'99」目次

１．序　　言 1

２．分子科学研究所の概要 3

2-1　研究所の目的 3

2-2　沿　　革 3

2-3　現在の組織とその発足 5

2-4　研究所の運営 6

2-4-1　評議員会 6

2-4-2　運営協議員会 6

2-4-3　人事選考部会 7

2-4-4　共同研究専門委員会 8

2-4-5　学会等連絡会議 8

2-4-6　教授会議 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審査委員会 9

2-4-10　各種委員会等 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（2000 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　1999 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 87
3-4　電子構造研究系 100
3-5　分子集団研究系 111
3-6　相関領域研究系 127
3-7　極端紫外光科学研究系 140
3-8　錯体化学実験施設 163
3-9　研究施設 176
電子計算機センター 176
分子制御レーザー開発研究センター 178
分子物質開発研究センター 189
装置開発室 199
極端紫外光実験施設 201

４．点検評価と課題 209
4-1　理論研究系 210
4-1-1　点検評価国内委員会の報告 210
4-1-2　国内委員の意見書 211
4-1-3　国外委員の評価 216
4-2　分子構造研究系 219
4-2-1　点検評価国内委員会の報告 219
4-2-2　国内委員の意見書 221
4-2-3　国外委員の評価 223
4-3　電子構造研究系 230
4-3-1　点検評価国内委員会の報告 230
4-3-2　国内委員の意見書 233
4-3-3　国外委員の評価 235

4-4　分子集団研究系 240
4-4-1　点検評価国内委員会の報告 240
4-4-2　国内委員の意見書 241
4-4-3　国外委員の評価 244
4-5　相関領域研究系＋錯体化学実験施設 247
4-5-1　点検評価国内委員会の報告 247
4-5-2　国内委員の意見書 248
4-5-3　国外委員の評価 250
4-6　極端紫外光科学研究系 254
4-6-1　点検評価国内委員会の報告 254
4-6-2　国内委員の意見書 256
4-6-3　国外委員の評価 259

５．将来計画及び運営方針 265
5-1　電子計算機センター　現状と将来構想 267
5-1-1　過去と現在 267
5-1-2　岡崎共同研究機構･計算科学研究センターと分子科学研究所・計算機室 270
5-1-3　将来構想検討会議 271
5-2　極端紫外光実験施設の現状と将来計画 275
5-2-1　年次計画の現状 276
5-2-2　年次計画の見直し 276
5-3　岡崎国立共同研究機構の将来構想とＥ地区への統合バイオサイエンスセンターの設置 280
5-3-1　統合バイオサイエンスセンター設置計画検討の経緯 280
5-3-2　統合バイオサイエンスセンター設置の必要性 281
5-3-3　統合バイオサイエンスセンターの研究目的 281
5-3-4　統合バイオサイエンスセンターの構成と研究内容 282
5-3-5　統合バイオサイエンスセンター設置へ 285
5-4　共同研究の見直しについて 286
5-4-1　問題点の洗い出し 286
5-4-2　現時点での改善策 287
5-4-3　今後の課題 288
5-5　教官停年制検討小委員会報告 289

６．資料 293
6-1　歴代の評議員（1976～）..... 293
6-2　歴代の運営に関する委員会委員（1975～1981）..... 298
6-3　歴代の運営協議員（1981～）..... 299
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 302
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 303
6-6　岡崎国立共同研究機構分子科学研究所点検評価規則 304
6-7　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 306

1．序　　言

分子科学研究所の外部評価が1993年から３年ごとに行われ，本年度は３回目を迎えている。私自身前２回，評価委員として参加したが，今回は，評価を受ける立場となった。国の内外からの評価委員の方々に篤く御礼申し上げる。

分子科学研究所が創設されて25年目，2000年という新しい時代を迎えた。この間，分子科学を巡る周辺分野は，大きく変化発展し，分子レベルの生命科学，単電子素子など，21世紀はまさしく「分子レベル」で物事が論じられる時代である。「分子レベル」の先導的研究を行う分子科学研究所が，時代の先頭に立って発展するためには，研究所内外での分野の垣根を乗り越えた交流と，研究所独自の方向付けが必要である。今回の外部評価，また研究所での将来構想委員会，運営協議員会での共同利用研究の在り方など，さまざまな討議と検討の結果を踏まえて，分子科学研究所は21世紀に向けて変革を遂げるべきでる。

平成12年度から岡崎国立共同研究機構３研究所の協力体制が，「統合バイオサイエンスセンター」という生命体をターゲットとした研究推進施設という形で具現化する。物質創製，光分子科学，反応ダイナミックスなどを柱とする分子科学研究に，それらを総合して研究するべき格好の複雑系が生命体であり，統合バイオサイエンスセンターへの参画によって得た研究成果が，分子科学のさらなる発展を生むことを確信している。

本レポートは，その指揮をとられた平田文男教授，広報担当の佐藤敦子さんなど，多数の方々の努力によって作成されたものであり，篤く感謝する。

平成12年２月

分子科学研究所長　　茅　幸二

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^2）が竣工した。

1977.　4.18　相関領域研究系相関分子科学研究部門が廃止され，相関領域研究系（相関分子科学第一研究部門，同第二研究部門），電子計算機センター，極低温センターが設置された。

1977.　4.　大学院特別研究学生の受入れが始まる。

1977.　5.　2　国立学校設置法の一部を改正する法律により生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所，生理学研究所）が設置されたことに伴い，管理部を改組して分子科学研究所管理局とし，生物科学総合研究機構の事務を併せ処理することとなった。管理局に庶務課，人事課，主計課，経理課，建築課，設備課，技術課が置かれた。

1978.　3.　7　分子科学研究所研究棟（2,752 m^2）が竣工した。

1978.　3.11　装置開発棟（1,260 m^2），機器センター棟（1,053 m^2），化学試料棟（1,063 m^2）が竣工した。

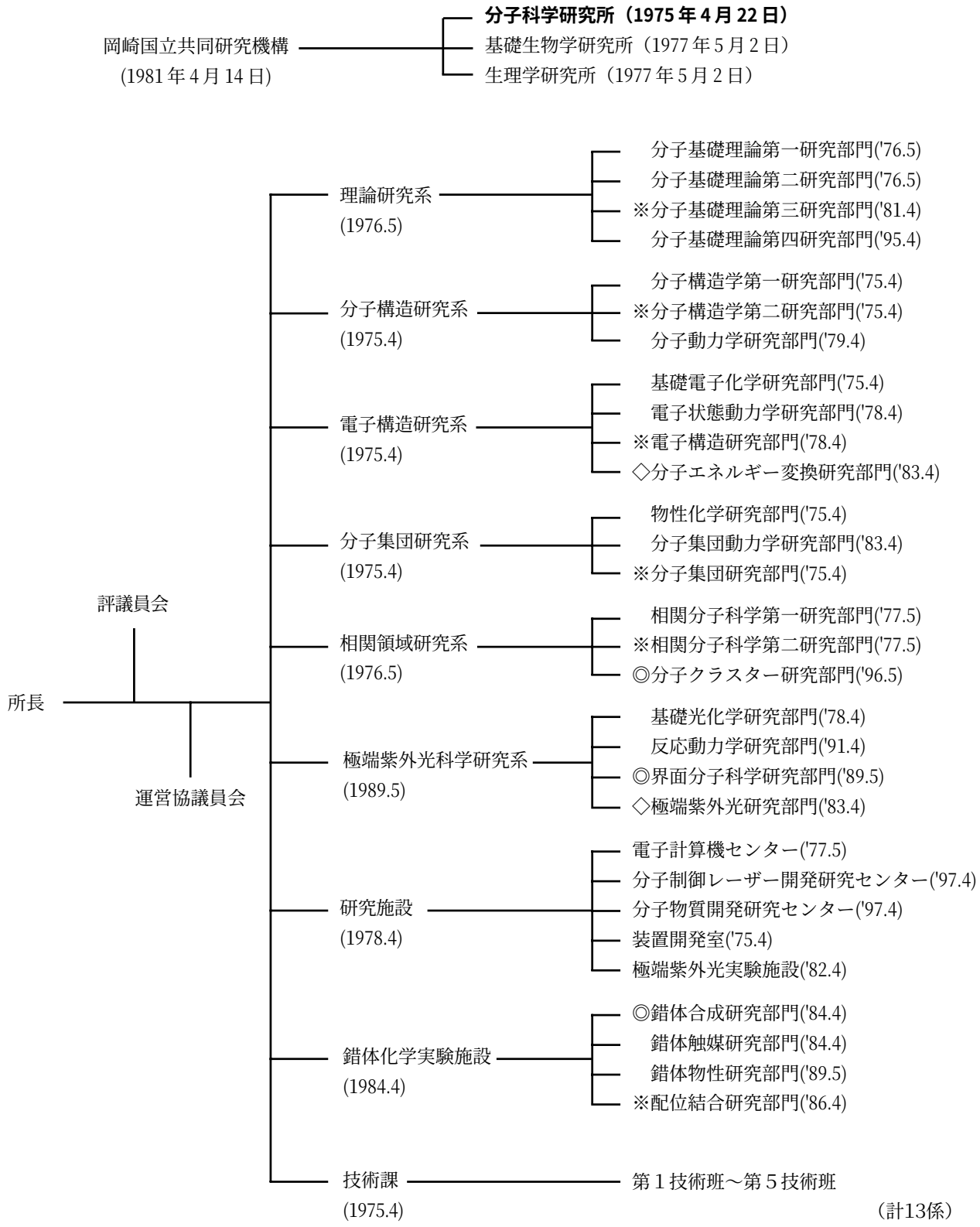
1978.　4.　1　電子構造研究系に電子状態動力学研究部門，電子構造研究部門が，分子集団研究系に基礎光化学研究部門が設置された。

1979.　3.　1　電子計算機センター棟（1,429 m^2）が竣工した。

1979.　3.24　実験棟第２期工事（3,742 m^2），極低温センター棟（1,444 m^2）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^2）が竣工した。
1983. 3.30　極端紫外光実験棟第２期工事（1,463 m^2）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^2）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^2）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^2）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。
1999. 4. 1　第五代研究所長に茅幸二慶應義塾大学教授が任命された。

2-3　現在の組織とその発足



※は客員研究部門　◇は外国人客員研究部門
◎は流動研究部門　(　)書きは設置年月

2-4　研究所の運営

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

2-4-1　評議員会

分子科学研究所の運営は，基本的には研究所長の責任において行われているが，この所長候補者を選考するのは評議員会である。評議員会はその他にも研究所の事業計画，その他の管理運営に関する重要事項について所長に助言する機能をもっている。

現在（1999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，ビュルツブルク大学の Kiefer, Wolfgang 教授とスタンフォード大学の Zare, Richard N. 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

大　塚　榮　子	北海道医療大学薬学部客員教授
荻　野　　博	東北大学大学院理学研究科教授
木　原　元　央	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設長
京　極　好　正	福井工業大学教授
後　藤　圭　司	豊橋技術科学大学長
近　藤　　保	豊田工業大学客員教授
佐　原　　真	国立歴史民俗博物館長
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所長
土　屋　荘　次	日本女子大学理学部教授
中　西　敦　男	学術著作権協会常務理事
廣　田　　襄	京都大学大学院理学研究科教授
福　山　秀　敏	東京大学物性研究所長
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
松　尾　　稔	名古屋大学総長
山　崎　敏　光	日本学術振興会監事
山　村　庄　亮	慶應義塾大学理工学部教授
Kiefer, Wolfgang	ビュルツブルク大学教授
Zare, Richard N.	スタンフォード大学教授

2-4-2　運営協議員会

運営協議員会は，研究所内の教授11名，所外の大学等の教授10名によって構成され，共同研究計画に関する事項その他の研究所の運営に関する重要事項で，所長が必要と認めるものについて所長の諮問に応じる。所外委員は後述する学会等連絡会議によって推薦される。運営協議員会は研究所の運営に関する全ての事項の議決・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（1999年度）を以下に，また，創設以来の委員を 6-2，6-3 に示す。

運営協議員

阿知波　洋　次	東京都立大学大学院理学研究科教授
岡　田　　正	大阪大学大学院基礎工学研究科教授
加　藤　重　樹	京都大学大学院理学研究科教授
北　原　和　夫	国際基督教大学教養学部教授
小谷野　猪之助	姫路工業大学理学部教授
関　　一　彦	名古屋大学物質科学国際研究センター教授
田　中　武　彦	九州大学大学院理学研究科教授
濱　口　宏　夫	東京大学大学院理学系研究科教授
籏　野　嘉　彦	東京工業大学大学院理工学研究科教授
松　本　和　子	早稲田大学理工学部教授
岩　田　末　廣	理論研究系教授
宇理須　恆　雄	極端紫外光科学研究系教授
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
田　中　晃　二	錯体化学実験施設教授
中　村　宏　樹	理論研究系教授
西　　信　之	電子構造研究系教授
平　田　文　男	理論研究系教授
藤　井　正　明	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もとに設置され，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，人事選考部会のもとに専門委員を含む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候補者は,“ 短期任用助手 ”の場合を除いて全て公募による応募者の中から選考される。教授又は助教授を任用する場合には，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年の任期が規定されており，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再任許可の手続きを得なければならない。

人事選考部会委員（1999年度）

加　藤　重　樹	（京大教授）	小　林　速　男	（分子研教授）
関　　一　彦	（名大教授）	西　　信　之	（分子研教授）
田　中　武　彦	（九大教授）	平　田　文　男	（分子研教授）
濱　口　宏　夫	（東大教授）	藤　井　正　明	（分子研教授）
松　本　和　子	（早大教授）	渡　辺　芳　人	（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（1999年度）

伊　藤　　翼	（東北大教授）	田　中　晃　二	（分子研教授）
岡　田　　正	（阪大教授）	中　村　宏　樹	（分子研教授）
小谷野　猪之助	（姫路工大教授）	藥　師　久　彌	（分子研教授）
谷　本　能　文	（広大教授）	井　上　克　也	（分子研助教授）
山　崎　　巌	（北大教授）	鈴　木　俊　法	（分子研助教授）
小　杉　信　博	（分子研教授）	米　満　賢　治	（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（1999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）
澤　木　泰　彦	（名大教授）	小　林　速　男	（分子研教授）
関　　一　彦	（名大教授）	西　　信　之	（分子研教授）
張　　紀久夫	（阪大教授）	平　田　文　男	（分子研教授）
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査委員会

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　各種委員会等

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) 分子科学研究所の各種委員会

会議の名称	設置の目的・審議事項	委員構成	設置根拠等
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 委員会規則
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 教授又は助教授３ 職員以外の研究者若干	
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。		
極端紫外光実験施設運営委員会	実験施設の運営に関する重要事項。 共同研究の採択に関する調査。	実験施設長 実験施設の助教授 教授又は助教授４ 職員以外の研究者７	実験施設規則 委員会規則
錯体化学実験施設運営委員会	実験施設の運営に関する重要事項。	実験施設長 施設の教授又は助教授２ 施設以外の教授又は助教授２ 職員以外の研究者４	
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） 各研究室から各１ 施設から必要数	
図書委員会	購入図書の選定。他		
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	

設置根拠の欄　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各種委員会等

会議の名称	設置の目的・審議事項	分子研からの委員	設置根拠等
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	連絡会議規程
点検評価連絡調整委員会	３研究所共通の事項に関し点検及び評価を行う。	所長，研究所点検評価委員会委員各２	通則第１３条 委員会規程
職員福利厚生委員会	レクリエーションの計画及び実施に関すること，職員会館の運営に関すること。他	教官１ 技官１	委員会規程
共通施設等企画委員会	共通施設の将来計画に関する事項，その他共通施設の企画に関し必要な事項。	所長 研究主幹２	委員会規程
情報ネットワーク管理運営委員会	情報ネットワークの管理運営に関する必要事項。	所長，研究主幹１ 電算機センター長	委員会規程
情報ネットワーク管理運営委員会整備専門委員会	情報ネットワークの管理運営に関し，専門の事項を調査審議する。	教授１（運営委員） 助教授又は助手１（管理室員）	情報ネットワーク管理運営委員会規程第７条
情報ネットワーク管理室	機構における情報ネットワークの日常の管理。将来における情報ネットワークの整備，運用等について調査研究。	次長（技術担当） 助教授又は助手１ 技術職員１	管理室規程
スペース・コラボレーション・システム事業委員会	事業計画，事業の運営方法に関すること。他	所長，教授１ 情報ネットワーク管理室次長	委員会規程
スペース・コラボレーション・システム事業実施専門委員会	事業計画に関する事項等について調査。	事業委員会委員，教官１ 情報ネットワーク管理室員	スペース・コラボレーション・システム事業委員会規程第６条 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	委員会規程
岡崎コンファレンスセンター運営委員会	センターの管理運営に関し必要な事項。	所長，教授１	センター規程第５条
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	委員会規程
放射線障害防止委員会	放射線施設の設置，変更，廃止に関する事項。放射線障害の防止に関する重要事項・研究所間の連絡調整。他	教授又は助教授２ 放射線取扱主任者 技術課長	放射線障害防止規程第３条
情報図書館運営委員会	情報図書館の運営に関する重要事項。	教授１ 助教授１	情報図書館規程第４条 委員会規程
防火対策委員会	防火管理に関する内部規定の制定改廃，防火施設及び設備の改善強化。防火教育，防火訓練の実施計画，防火思想の普及及び高揚。他	研究主幹１ 技術課長 放射線取扱主任者 高圧ガス保安員及び作業責任者	防火管理規程第２条 委員会規程
動物実験委員会	動物実験に関する指導及び監督。実験計画の審査。他	教官１	動物実験に関する指針 委員会規程
文部省共済組合岡崎国立共同研究機構支部食堂運営委員会	営業種目，営業時間。他	研究主幹１ 技術課長	委員会規程
岡崎南ロータリークラブとの交流委員会	岡崎南ロータリークラブが行う交流事業等に関する協議及び事業への協力	教官１	

設置根拠の欄　岡崎国立共同研究機構が定めた規定，略式で記載。記載なきは規定文なし。

2-5　構成員

2-5-1　現在の構成員

茅　　幸　二　　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
諸　熊　奎　治　　名誉教授
丸　山　有　成　　名誉教授
吉　原　經太郎　　名誉教授
花　崎　一　郎　　名誉教授
岩　村　　秀　　名誉教授
齋　藤　修　二　　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
西　川　武　志　　リサーチ・アソシエイト
伊　藤　正　勝　　リサーチ・アソシエイト
Sutcliffe, Brian T.　文部省外国人研究員　'99.3.28 ～ '99.6.27
Lee, Sang Yeon　文部省外国人研究員　'99.7.1 ～ '99.8.31，'99.12.27 ～ '00.2.26
佐　藤　克　彦　　学振特別研究員
陳　　飛　武　　受託研究員
Ammal S. S. Cheettu 受託研究員
橋　本　智　裕　　特別協力研究員

分子基礎理論第二研究部門

中　村　宏　樹　　教　授
谷　村　吉　隆　　助教授
朱　　超　原　　助　手
奥　村　　剛　　助　手
宮　崎　州　正　　非常勤研究員
三　嶋　謙　二　　非常勤研究員
Mil'nikov, G. V.　学振外国人招へい研究者　'99.3.1 ～ '99.12.31
Wang, Y.　学振外国人特別研究員　'99.3.23 ～ '01.3.22
今　村　　穣　　学振特別研究員

分子基礎理論第三研究部門（客員研究部門）

田　中　秀　樹　　教　授（岡山大理）
橋　本　健　朗　　助教授（都立大院理）

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
秋　山　　良　学振特別研究員
森　　道　康　学振特別研究員

分子構造研究系　研究主幹(併)　西　　信　之

分子構造学第一研究部門

森　田　紀　夫　助教授
森　脇　喜　紀　助　手

分子構造学第二研究部門（客員研究部門）

赤　阪　　健　教　授（新潟大院自然科学）
鍔　木　基　成　助教授（姫工大理）

分子動力学研究部門

北　川　禎　三　教　授（併）（基礎生物学研究所）
加　藤　立　久　助教授
松　下　道　雄　助　手
水　谷　泰　久　助　手
岩　瀬　　正　非常勤研究員
Kim, Y.　文部省外国人研究員　'99.6.21 ～ '00.2.28
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
内　田　　毅　学振特別研究員

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
佃　　達　哉　助教授
中　林　孝　和　助　手
渡　邉　武　史　非常勤研究員
田　中　素　子　リサーチ・アソシエイト
石　川　英　里　リサーチ・アソシエイト

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
佐　伯　盛　久　非常勤研究員
Choi, Jong-Ho　文部省外国人研究員　'99.6.28 ～ '99.8.27，'99.12.20 ～ '00.2.19
Müller-Dethlefs, K.　文部省外国人研究員　'99.7.12 ～ '99.10.11

電子構造研究部門（客員研究部門）

松　本　吉　泰　教　授（総研大先導科学）
玉　井　尚　登　助教授（関学大理）
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）

Markosyan, A. S.　教　授（ロシア　モスクワ州立大学上級研究員）　'99.4.26 ～ '00.3.31
Bu, Xian-He　助教授（中国　南開大学教授）　'98.12.15 ～ '99.6.14
Osherov, V. I.　助教授（ロシア　ロシア科学アカデミー教授）　'99.7.1 ～ '99.12.14
Whitham, C. J.　助教授（イギリス　オックスフォード大学講師）　'99.12.15 ～ '00.6.14

分子集団研究系　研究主幹(併)　小　林　速　男

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
山　本　　薫　助　手
Maksimuk, M. Y.　非常勤研究員
塚　田　　浩　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
Ouyang, Jianyong　特別協力研究員　'99.10.1 ～ '00.3.31

分子集団動力学研究部門

小　林　速　男　教　授
緒　方　啓　典　助　手
藤　原　秀　紀　助　手
田　村　格　良　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
田　中　　寿　学振特別研究員
安　達　隆　文　特別協力研究員

分子集団研究部門（客員研究部門）

徳　本　　圓　教　授（工技院電総研）
森　　健　彦　助教授（東工大院理工）
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
細　越　裕　子　助　手
Roach, M. P.　学振外国人特別研究員　'97.11.2 ～ '99.11.1
松　井　敏　高　学振特別研究員
熊　谷　　等　学振特別研究員
Puspita, Waheeda J.　特別協力研究員　'99.4.1 ～ '00.3.31
Ghalsasi, P. S.　特別協力研究員　'99.4.1 ～ '00.3.31

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
Bailleux, S.　　学振外国人特別研究員　'98.4.1 ～ '00.3.20
墨　　智　成　　学振特別研究員
Whitham, Christopher J.　　特別協力研究員　'99.9.1 ～ '99.12.14

極端紫外光科学研究系　研究主幹(併)　宇理須　恆　雄

基礎光化学研究部門

小　杉　信　博　　教　授
田　原　太　平　　助教授
高　田　恭　孝　　助　手
竹　内　佐　年　　助　手
Arzhantsev, S. Y.　　学振外国人特別研究員　'98.11.27 ～ '00.11.26
藤　野　竜　也　　学振特別研究員

反応動力学研究部門

宇理須　恆　雄　　教　授
見　附　孝一郎　　助教授
水　谷　雅　一　　助　手
小　野　正　樹　　非常勤研究員
銘　苅　春　隆　　非常勤研究員
岩　崎　光　太　　学振特別研究員
吉　村　大　介　　特別協力研究員

界面分子科学研究部門（流動研究部門）

黒　澤　　宏　　教　授
福　井　一　俊　　助教授
長　岡　伸　一　　助教授
高　嶋　圭　史　　助　手
竹　添　法　隆　　非常勤研究員

極端紫外光研究部門（外国人客員研究部門）

Ulanski, Jacek P.　教　授（ポーランド　ウッジ技術大学教授）　'99.3.1 ～ '99.8.31
Pavlov, Lubomir I.　教　授（ブルガリア　ブルガリア科学アカデミー教授）　'99.9.1 ～ '00.3.31
Gao, Yongli　助教授（アメリカ　ロチェスター大学準教授）　'99.2.1 ～ '99.7.31
Seijo, Luis　助教授（スペイン　マドリード自治大学助教授）　'99.8.1 ～ '99.12.20
Ahn, Kwang Hyun　助教授（韓国　キュンヒー大学準教授）　'00.2.1 ～ '00.7.31

研究施設

電子計算機センター　センター長(併)　岩　田　末　廣

青　柳　　睦　　助教授
南　部　伸　孝　　助　手
高　見　利　也　　助　手
大　野　人　侍　　助　手
Chun, Gyusung　　文部省外国人研究員　'99.6.18 ～ '99.8.17，'99.12.28 ～ '00.2.27

分子制御レーザー開発研究センター　センター長(併)　藤　井　正　明

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
村　上　英　利　非常勤研究員

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
庄　司　一　郎　非常勤研究員
Pavel, N. I.　学振外国人特別研究員　'99.3.1 ～ '01.2.28

分子物質開発研究センター　センター長(併)　渡　辺　芳　人

パイ電子開発研究部

山　下　敬　郎　助教授
田　中　彰　治　助　手
Zaman, M. D.　非常勤研究員

融合物質開発研究部

藤　井　　浩　助教授
船　橋　靖　博　助　手
水　谷　　守　非常勤研究員

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
Heidenhain, S. B.　特別協力研究員　'99.7.1 ～ '00.3.31

装置開発室　室長(併)　藥　師　久　彌

渡　邉　三千雄　助教授
淺　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
繁　政　英　治　助教授
濱　　広　幸　助教授（併）（東北大院理）
木　村　真　一　助教授（神戸大院自然科学）
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
海老原　昌　弘　助教授
小　澤　智　宏　助　手
川　口　博　之　助　手

錯体触媒研究部門

櫻　井　　弘　教　授（京都薬科大）
溝　部　裕　司　助教授（東大生産技術研）

錯体物性研究部門

田　中　晃　二　教　授
拓　植　清　志　助　手
Yu, Shu-Yan　学振外国人特別研究員　'97.9.1 ～ '99.8.31，特別協力研究員　'99.11.1 ～ '00.1.31
Biradha, K.　学振外国人特別研究員　'98.9.1 ～ '00.8.31
Ali, Md. Meser　特別協力研究員　'99.4.1 ～ '99.8.30

配位結合研究部門（客員研究部門）

相　田　卓　三　教　授（東大院工）
[illegible]　地　　格　助教授（九大院工）

技術課　課　長　酒　井　楠　雄

第１技術班　班　長　松　戸　　修

理論研究系技術係

技　官　鶴　澤　武　士
技　官　鈴　木　陽　子

分子構造研究系技術係

技　官　熊　倉　光　孝
技　官　林　　直　毅
技　官　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

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　水　野　　操

第３技術班

電子計算機技術係

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

装置開発技術係

係　長	鈴　井　光　一
技　官	内　山　功　一
技　官	豊　田　朋　範
技　官	林　　憲　志
技　官	小　林　和　宏
技　官	近　藤　聖　彦

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　正　美
主　任	山　崎　潤一郎
主　任	中　村　永　研
技　官	近　藤　直　範

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
技　官	牧　田　誠　二

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2000年２月１日現在。ただし，外国人研究者で1999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（2000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	5	31	59	163	130	111
転出者数	4	17	32	120	93	93
現　　員	1	14 (1)	27 (1)	43	37	18

*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	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	9	18	5	7	10
転出者数	7	8	16	4	5	9
現　　員	1	1	2	1	2	1

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	85	97
現　　員	7	8

(4)　外国人客員研究部門

職名 / 区分	教　授	助教授
分子エネルギー変換機構研究部門	19	18
極端紫外光研究部門	19	15

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）

研究目的　　水素結合系液体・固体・クラスターの構造・安定性・ダイナミックスの理論的研究

研究課題　1，液液相転移の機構・ダイナミックスとポテンシャル面

2，包接水和物の安定性と生成・解離の機構

3，束縛条件下での水の相挙動

4，水クラスターの構造と安定性

分子基礎理論第四研究部門

研究目的　　分子性液体・固体の構造，物性及び非平衡過程に関する理論的研究

研究課題　1 , 溶液中の平衡・非平衡過程に関する統計力学的研究

2 , 溶液内分子の電子状態と化学反応に関する理論的研究

3 , 生体高分子の溶液構造の安定性に関する統計力学的研究

4 , 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

研究課題　1, ミリ波・サブミリ波・遠赤外実験室分光及び宇宙電波分光による星間短寿命分子の研究
2, レーザー多光子励起による原子・分子の高励起電子状態の分光と動特性の研究
3, サブミリ波望遠鏡の開発と星間化学の研究
4, 中性原子のレーザー冷却・トラッピングの研究とその応用

分子構造学第二研究部門（客員）

研究目的　1, フラーレン分子の構造と機能
2, 呼吸系末端酸化酵素の構造と機能

研究課題　1, 金属ドープ型フラーレンの構造と電子的特性
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

研究目的　1, 生体分子及びそのモデル系の動的構造とその反応性の研究
2, 凝集性物質中の分子の動的構造と機能性との関連についての研究

研究課題　1, 時間分解ラマン分光法による生体分子反応中間体及び電子励起状態の分子構造の研究
2, 磁気共鳴分光とラマン分光法による凝集系中の分子の構造の研究

電子構造研究系

研究目的　分子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

研究目的　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, ナノクラスターの構造と機能発現機構の解明

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，分子物性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開拓と物性解明

研究課題　1, 有機磁性金属・超伝導体の開発と物性研究

2, 分子素子の基礎研究

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研究に取り入れるなど両者の連携を図るための相関領域に関する研究を行う。

相関分子科学第一研究部門

研究目的　有機化学・有機金属錯体化学さらには酵素化学を含む分子科学関連分野の諸問題を, 特に分子の構造とその機能という分子科学の観点から研究

研究課題　1, 金属酵素及び合成モデル系の構造と機能の解明

2, 新規分子性強磁性体の構築とその磁気構造の解明

相関分子科学第二研究部門（客員）

研究目的　分子性結晶の特に表面における励起子の動的過程の解明

研究課題　1, 励起子に起因する原子の脱離機構の研究

2, 励起子の緩和過程とその分岐比の研究

分子クラスター研究部門（流動）

研究目的　1, 分子クラスターの構造，性質の基礎的解明

2, 新しい分子クラスターの探索と分子クラスターを用いた新材料の開発

研究課題　1, 原子・分子・クラスターの電子状態に対する理論的研究

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及びナノ領域の非線形光学特性

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, 放射光を用いた化合物半導体の電子構造に関する研究

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, 新規分子性導体とその高分子膜の研究

2, 表面反応の STM 及び IRRAS による研究

3, 超短波パルス光によるクーロン爆発の研究

4, モデル内殻ポテンシャル法の新展開

5, 蛋白質内に埋め込んだ Mn(salen)錯体による不斉酸化反応の開発

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ー

研究目的　　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

研究課題　1, 新規なπ電子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, 分子デバイス材料の開発研究

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

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

研究課題　1, 極端紫外光源の研究・開発

2, 極端紫外用観測システムの開発と気体及び固体の分光学的研究

錯体化学実験施設

研究目的　　金属原子を含む化合物を中心とする広範な物質を対象とし, その構造, 物性, 反応性等を研究し, 新物質創造のための設計，開発を目的とする。

錯体合成研究部門（流動）

研究目的　　新しい構造や特異な機能を有する金属錯体の合成ならびに機能発現

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, 生体微量金属錯体の生物無機化学

2, 生体関連活性酸素の機能と構造

3, 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

4, 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11年度現在，技術課技官の定員は42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ている。

表１　年齢構成

施設系技官					研究系技官			
			●	58				
				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				
				26	●			
				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					研究系技官			
			●	22				
	●	●	●	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

年度	開催機関	開催日	分科会	備考
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
昭和51	分子科学研究所	昭和50年7月20日	機械	学習院大など参加
		昭和51年2月	機械、（回路）	名大(工)回路技術
昭和52	分子科学研究所	昭和52年7月	機械	都城工専など参加
		昭和53年2月	機械、（回路）	名大プラ研回路技術
昭和53	分子科学研究所	昭和53年6月2日	機械、回路	技術研究会について討論会 分科会形式始める
	高エネルギー物理学研究所	昭和53年10月27日	機械技術	
昭和54	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
	高エネルギー物理学研究所	昭和54年10月19日	機械	
	分子科学研究所	昭和55年2月	機械、回路、電子計算機	
昭和55	高エネルギー物理学研究所	昭和55年10月24日	機械	
	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　章
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	
	高エネルギー物理学研究所	昭和56年1月30日	機械	
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	技術部長　馬場　斉 ３研究機関持ち回り開催が始まる
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	
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、電子計算機、装置技術	実行委員長　藤若　節也
昭和60	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	技術部長　山口　博司
昭和61	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、低温	
昭和62	名古屋大学プラズマ研究所	昭和63年3月29-30日	機械、回路、低温、電子計算機、装置技術	
昭和63	高エネルギー物理学研究所	平成元年3月23-24日	機械、計測制御、低温、電子計算機、装置技術	技術部長　阿部　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、総合技術	２ヶ所で懇談会
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	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	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	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
	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	
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	
	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	インターネット討論会
平成11	東北大学	平成11年11月11日	機器・分析	
	分子科学研究所	平成12年3月2-3日	装置、回路、極低温、電子計算機、ガラス工作	インターネット技術討論会

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

年度	氏　名	所　　属	研　修　期　間	受　入　施　設
平成7年度	石飛　義明	広島大学、理学部、特殊加工技術開発室	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
平成8年度	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
	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
	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
	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
	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
平成9年度	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
	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
	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	2/23/98～3/6/98	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
	福嶋美津広	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
平成11年度	松永　　茂	筑波大学研究協力課	6/14/99～6/18/99	UVSOR
	松永　　茂	筑波大学研究協力課	12/19/99～12/25/99	UVSOR
	渡辺　千香	東北大学科学計測研究所	2/7/00～2/18/00	装置開発室、メカトロニクス
	荒崎　武智	石川工業高等専門学校	2/28/00～3/3/00	装置開発室、メカトロニクス
	田屋　悦子	石川工業高等専門学校	2/28/00～3/3/00	電子計算機センター
	福本　英治	石川工業高等専門学校	2/28/00～3/3/00	分子物質開発研究センター

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。北陸先端科学技術大学院大学技官との交流も継続した。

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。

「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積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。Pr^{3+}/LaF_3 系の Pr^{3+} の NQR 測定と，Pr^{3+} 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-$(BETS)_2FeBr_4$ 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（Fe^{3+}）が結合し π-d 複合反強磁性絶縁相をとる λ-$(BETS)_2FeCl_4$ 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，$(EDT\text{-}TTF)_2AuBr_2$ 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$(BDTFP)_2X$ の研究も進行中であり，注目すべき結果が得られている。

「低次元強相関系の物性理論」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，$(1+\varepsilon)$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 $NiPc(AsF_6)_{0.5}$ 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 $CoPc(AsF_6)_{0.5}$ における不対電子が $Co3d_{z^2}$ 軌道上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 π 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イ禁制の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ッ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，共鳴オージェ過程で一価イオンコアが脱励起した後の内殻励起は，二価の場を感じた励起子となる。このように内殻電子をプローブとして分子固体の励起子について研究を進めている。

(3)　金属錯体による遵続反応場の構築

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，本研究では高度に御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しているタンパク質のコンフォー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が誘起され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ュ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ー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）

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　　巌（分子研助教授）

30.「化学過程における電子のダイナミックス」1987.10.28 ～ 10.30

田仲　二朗（名古屋大学教授）　吉原經太郎（分子研教授）

31.「気相クラスターのイオン化過程」1988.2.10 ～ 2.12

朽津　耕三（東京大学教授）

32.「励起分子の化学挙動についての理論化学」1988.9.27 ～ 9.29

笛野　高之（大阪大学教授）

33.「生化学分子の前生物的合成とキラリティの起源」1988.12.1 ～ 12.3

原田　　馨（筑波大学教授）

34.「燃料における化学反応」1988.12.20 ～ 12.22

神野　　博（京都大学教授）　幸田清一郎（東京大学助教授）

林　　光一（名古屋大学講師）

35.「金属クラスター化合物の合理的合成と金属多中心骨格構造に基づく協同現象」1989.5.23 ～ 5.25

齋藤　太郎（大阪大学教授）　山崎　博史（理化学研究所主任研究員）

伊藤　翼（東北大学教授）　　磯邊　　清（分子研助教授）

36.「水素ー電子結合系での物性の創造」1989.11.13 ～ 11.15

三谷　忠興（分子研助教授）榎　敏明（東京工業大学助教授）

中筋　一弘（分子研教授）

37.「酸性物高温超伝導体―その物質と超伝導機構―」1990.2.13 ～ 2.15

田仲　二朗（名古屋大学教授）　武居　文彦（東京大学教授）

北沢　宏一（東京大学教授）

38.「生体系金属錯体の構造と動的側面」1990.10.16 ～ 10.18

山内　　脩（名古屋大学教授）　森島　　績（京都大学教授）

北川　禎三（分子研教授）

39.「分子素子を目指した機能分子の開発とその組織化」1990.10.25 ～ 10.27

清水　剛夫（京都大学教授）　小林　孝嘉（東京大学助教授）

丸山　有成（分子研教授）

40.「非線型化学反応と自己秩序形成」1991.2.23 ～ 1.25

北原　一夫（東京工業大学教授）　中村　宏樹（分子研教授）

吉川　研一（名古屋大学助教授）　花崎　一郎（分子研教授）

41.「有機反応過程研究における理論化学と物理有機化学との接点」1991.9.30 ～ 10.2

速水　醇一（京都大学教授），西本　吉助（大阪市立大教授）

野依　良治（名古屋大学教授）

42.「分子科学：現状と将来」1992.1.7 ～ 1.9

井口　洋夫（分子研所長）　正畠　宏祐（分子研助教授）

中村　宏樹（分子研教授）

43.「レーザー光電子分光の新展開」1992.3.10 ～ 3.12

木村　克美（分子研教授）

44.「化学反応理論の新しい展開」1992.11.4 ～ 11.6

諸熊　奎治（分子研教授）　中村　宏樹（分子研教授）

中辻　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

籏野　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　吉泰（分子研助教授）

52.「実験室及び天分サブミリ波分光」1995.3.14 ～ 3.16

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）

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－構造とダイナミックスの接点－」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（キュンワン大学）（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）。
（平成11年度後期より UVSOR 協力研究は，協力研究に一本化された）

(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 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　1999 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

「Protein G の β－シート構造に関する研究」を始め115件

(3)　研究会

研　究　会　名	提　案　代　表　者
新世代光源を用いた励起分子ダイナミクス探索の新たな展開	上　田　　潔　（東北大科学計測研助教授）
分子会合体の研究における分光学の役割：その現状と将来	山　田　耕　一　（工技院産業技術融合領域研主任研究官）
若手分子科学研究者のための物理化学研究会	山　内　　薫　（東大院理学系教授）
多体相互作用系へのアプローチ　－ブレインストーミング－	相　田　美砂子　（広大理教授）
分子及び小集団の超高速反応ダイナミクスに関する研究会	鈴　木　俊　法　（分子研助教授）
大気イオンクラスターの化学とその応用	長　門　研　吉　（分子研助教授）
遷移金属元素を含む超微粒子の化学と物理	近　藤　　保　（豊田工大客員教授）
物理化学の現状と将来 II	吉　原　經太郎　（北陸先端大学院大教授）
新規π電子系の設計と構築	御　崎　洋　二　（分子研客員助教授）
内殻電子励起状態とダイナミックス－現状と展望－	長　岡　伸　一　（分子研助教授）
高機能全固体レーザーと新しい応用	平　等　拓　範　（分子研助教授）
クラスター反応動力学若手ミニ研究会	鈴　木　俊　法　（分子研助教授）

(4)　施設利用

①　機器利用

「波長可変レーザー蒸発法による超微粒子生成過程の研究」を始め45件

②　計算機利用

「蛋白質立体構造の変化と運動」を始め167件

(5)　UVSOR 課題研究

研　究　課　題	提案代表者
角度分解紫外光電子分光法による有機薄膜の電子状態研究	上　野　信　雄　（千葉大工教授）

(6)　UVSOR 協力研究及び招へい協力研究

「SR によるナノ構造形成と評価のビームライン建設」を始め10件

(7)　UVSOR 施設利用

「遷移金属酸化物の真空紫外反射分光」を始め147件

2-9-3　共同研究実施件数一覧

分子科学研究所共同研究実施一覧

年度 / 項目	'76～'92		'93		'94		'95		'96		'97		'98		'99		備考
	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	
課題研究	68	541	1	8	1	6	2	16	2	18	3	23	1	5	1	5	人数：登録人数
協力研究	2,138	2,184	127	176	128	182	95	131	92	121	117	181	107	157	115	212	
招へい協力研究	182	182	3	3	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	
所長招へい	1,110	1,110	105	105	129	129	148	148	62	62	118	118	139	139	105	105	
研究会	174	2,348	9	122	9	143	11	163	10	170	6	121	5	84	11	83	人数：旅費支給者
施設利用 I	1,053	1,977	66	206	45	129	56	173	51	163	50	152	50	151	45	120	件数：許可件数 人数：許可人数
施設利用 II	2,215	6,242	180	586	187	602	181	583	169	563	186	694	174	680	167	641	
合計	6,940	14,584	491	1,206	499	1,191	494	1,215	386	1,097	480	1,289	476	1,216	443	1,164	
経費	254,047		19,709		21,492		20,054		20,390		28,003		18,645		―		千円

（'99 年度の数値は，2000.2.1 現在）

分子科学研究所UVSOR共同研究実施一覧

年度 / 項目	'85～'92		'93		'94		'95		'96		'97		'98		'99		備考
	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	
課題研究	24	232	2	30	2	28	4	49	3	38	3	43	3	41	1	11	人数：登録人数
協力研究	169	506	36	151	28	123	23	91	24	95	23	88	24	104	8	35	
招へい協力研究	49	49	8	8	9	9	4	4	1	1	1	1	2	2	2	2	
研究会	21	260	2	34	2	51	2	41	1	23	1	18	0	0	0	0	人数：旅費支給者
施設利用	688	3,448	132	714	130	655	136	632	147	671	153	706	157	769	147	699	件数：許可件数 人数：許可人数
合計	951	4,495	180	937	171	866	169	817	176	828	181	856	186	916	158	747	
経費	88,077		12,729		12,729		13,120		13,279		14,068		14,027		―		千円

（'99 年度の数値は，2000.2.1 現在）

2-10　国際交流と国際共同研究

2-10-1　国際交流

分子科学研究所には１ヶ月以上滞在して共同研究を実施する長期滞在者と研究会や見学・視察等で来所される短期訪問者を合わせて，毎年200名前後の外国人研究者が訪れている。前者には外国人客員教官（教授２名，助教授２名），文部省招へい外国人研究員（毎年３～５名，３か月以上滞在），日本学術振興会招へい外国人研究者，日韓協力による来訪研究者（毎年３名，１人４か月滞在）及び特別協力研究員（私費や委任経理金等により共同研究実施のために来訪する研究者）等がある。短期訪問者とは岡崎コンファレンスを始めとして次項で述べる様な色々な国際共同研究事業に基づく研究会への参加者及び短時日の見学来訪者である。

以下に今迄の来訪者の過去10年間のデータを種類別及び国別に示す。表中「文部省外国人招へい研究者」とは文部省関係の招へい外国人，すなわち(1)外国人客員教官，(2)文部省招へい外国人研究者及び(3)日韓協力による韓国人研究者の総計である（年度を越えて滞在している人は二重に数えられている）。

表１　外国人研究者数の推移（過去10年間）

	長期滞在者			短期滞在者		
年度	文部省外国人招へい研究者	日本学術振興会外国人招へい研究者	特別協力研究員	研究会	訪問者	合計
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
98	18	21	11	84	33	167
合計	167	172	312	881	422	1,954

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
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
98	30	17	13	10	12	12	20	53	167
合計	456	191	130	85	216	192	170	514	1,954

2-10-2　国際共同研究

1999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III期目に入ったが，2000年１月末日をもって本事業を終了することとなった。本事業推進にあたっては，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きた。また日米の研究推進機関（文部省と全米科学財団）の間で研究実施，企画，評価のために，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	1979．6～1999．3	毎年１回
研究者派遣	1979～1998年度　中・長期派遣	119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	1981～98年度	全部で27回開催

1999年度には以下の２件を開催した。

・Photoconversion and Photosynthesis: Past, Present, and Perspective　岡崎

・超分子光化学　ルイジアナ

99年11月には，20年の共同事業と今後の展望を議論する情報交換セミナー“ Photoconversion and Photosynthesis: Past, Present, and Perspective ”を岡崎カンファレンスセンターで開催した。このセミナーは，本事業の日本側のもう一つの対応期間である理化学研究所の協力を得て実現した。アメリカ合衆国から15人，我が国から16人の招待講演，90余件のポスター講演が行われ，今後の展望までを含めた総括的な意見交換の場となった。

(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，1999年１月韓国のテジョン（Taejon）市で開いた第８回シンポジウムに引き続き，第９回シンポジウムを2001年１月分子科学研究所において開催する予定である。

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，1999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月にプラハのアカデミーハウスで３日間のジョイントセミナーを実施し、所長をはじめ、所内から５人、所外から３人が参加した。これ以外に1999年の４～７月　２人を派遣し、１人を受け入れた。８月から中村宏樹が日本側代表となっている。

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～ '98参照）。

残念ながらこの計画は未だ認められるに至っていない。ここで繰返し，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子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，特にアジアの基礎科学を支援する為の共同研究をもっと推進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「光分子科学」，「物質分子科学」，「化学反応ダイナミックス」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（「5. 将来計画及び運営方針」のp. 287「国際共同研究拠点形成に向けての方策」を参照）。

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）

所　　属	1977～89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99
北海道大学	10										
室蘭工業大学	2										
東北大学	8	1			2					1	1
山形大学										6	
筑波大学										1	
群馬大学					1						
埼玉大学	2										
千葉大学									1	1	1
東京大学	21	2	2	2	1			1	1	1	
東京工業大学	15					2	3	4			
お茶の水女子大学	4			1	1						
横浜国立大学	1										
金沢大学	3							3	3		
新潟大学	2			1	1						
福井大学	2						1	1		1	3
信州大学				1	1				1		
岐阜大学					1	1					
名古屋大学	41	4	5	3	2	2	1	3	3	3	1
名古屋工業大学	6									1	4
豊橋技術科学大学	22	3	3	2							
三重大学								2	2	2	1
京都大学	6	2	2		7	5	4	4	2	2	1
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	17	2	2	2	1						
神戸大学									1	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	15		1	1	1	7	6	1			1
山口大学	1										
愛媛大学	2		1								
高知大学			1	1							
九州大学	15	8	5	4	1			1	2	1	1
佐賀大学	1			2	4	5	1				
熊本大学	4				2						
宮崎大学											2
琉球大学										1	
東京都立大学	16	1									
大阪市立大学	3										1
学習院大学									1		
北里大学								1	1		
慶應義塾大学	3	1							1	1	
上智大学	1										
東海大学	1										
東京理科大学										1	1
東邦大学								1			
星薬科大学	1										
早稲田大学	1							1	5	2	
名城大学									2	2	
計	233	24	22	20	27	30	19	25	27	28	19

2-11-2　総合研究大学院大学

総合研究大学院大学は1988年10月１日に発足し，初代学長に長倉三郎岡崎国立共同研究機構長が就任した。更に1990年１月廣田栄治教授が同大学副学長に就任した。分子科学研究所は，同大学院大学に参加し，構造分子科学専攻及び機能分子科学専攻を受け持ち，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（1999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	5	6	9
計	12	16	22

在籍学生数（2000年１月現在）単位：人

入学年度専攻	1996年度	97年度	98年度	99年度	計	定　員
構造分子科学専攻	1	6	11	4	22	6
機能分子科学専攻	3	7	7	6	23	6

学位取得状況　単位：人　（年度別）

専　攻	1991	92	93	94	95	96	97	98	99 （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)	8(2)	2	47(8)
機能分子科学専攻	5	5	4(1)	8(1)	4	7(1)	3(2)	6	2(1)	44(6)

（　）は論文博士で外数

入学状況（定員各専攻共６）　単位：人　　（年度別）

専　攻	1989	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99
構造分子科学専攻	3	6	5	7	12	7	4	10	10	12	5
機能分子科学専攻	9	7	6	6	9	4	6	8	9	7	6

外国人留学生数（国別，入学者数）　　単位：人

	構造分子科学専攻			機能分子科学専攻		
	1989-97年度	98年度	99年度	1989-97年度	98年度	99年度
中　国	6	2	1	4		
フランス				1		
ロシア				1		
バングラディッシュ	2				1	
インド	1					
チェコ				1		

大学別入学者数

大学名等	構造分子科学専攻			機能分子科学専攻			計
	'89～'97	'98年度	'99年度	'89～'97	'98年度	'99年度	
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	4	1					5
東京大学	5		1	5		1	12
東京工業大学				2			2
お茶の水女子大学	2	1		1			4
電気通信大学	1					1	2
横浜国立大学	1						1
新潟大学						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
信州大学	2						2
静岡大学	1						1
名古屋大学	1			2			3
名古屋工業大学	1						1
豊橋技術科学大学	1	1					2
三重大学	1						1
京都大学	5	1		9	1	1	17
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		2		1	4
山口大学				1			1
愛媛大学		1					1
九州大学	2			2			4
熊本大学	2						2
琉球大学			1				1
北陸先端科学技術大学院大学	3						3
名古屋市立大学				1			1
大阪府立大学	2					1	3
姫路工業大学				1			1
石巻専修大学	1						1
学習院大学	1	1	1	2			5
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	1			3
東邦大学				2			2
日本大学				1			1
明星大学	1						1
早稲田大学	3			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	1	8	1		22

＊ 外国の大学等

2-12　定員と財政

2-12-1　定員

1999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)	4	9(2)		9(2)
極端紫外光科学研究系		3(1)	4(1)	5	12(2)		12(2)
研究施設		3(2)	14(3)	16	33(5)		33(5)
技術課						42	42
合計	1	17(9)	30(10)	50	98(19)	42	140(19)

（　）内は客員数で外数である。

2-12-2　財政

（単位：千円）

科目等＼年度	1994年度	1995年度	1996年度	1997年度	1998年度
人件費	1,291,019	1,221,676	1,333,573	1,346,850	1,396,272
運営費，設備費	2,745,703	3,791,336	3,002,740	2,795,476	2,761,911
施設整備費	31,076	251,772	344,400	88,987	590,312
合計	4,067,800	5,264,784	4,680,713	4,231,313	4,748,495

＊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	1999年度
件数（件）	42	63	64	58	62	74	91
金額（千円）	180,360	252,630	124,077	151,540	242,093	220,460	493,030

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459種（和231，洋228），単行本34,231冊（和6,026，洋28,205）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れている。

機構内の公募によって「岡崎コンファレンスセンター」と命名された建物は，延べ床面積2,863 m^2，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
1999. 6. 8	レーザ光で，何が見える？　何が出来る？	猿倉　信彦　助教授

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
1999年度	8	206

※1999年度は平成12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
1998.9.～1999.8.	1999	401	47

3-2　理論研究系

分子基礎理論第一研究部門

岩　田　末　廣（教授）

A-1) 専門領域：理論化学

A-2) 研究課題：

a) 分子構造理論における新しい方法と数値解析法の開発

b) 水クラスターとその錯体

c) 大気環境下の原子・分子過程の計算化学

d) 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) 状態普遍結合クラスター展開の形式を用いて，多参照線形応答理論を開発した。２電子物理量である静的構造因子を結合クラスター法によって計算し，電子相関の影響を見積もった。２変数２準位に現れる円錐交差付近でおきる非断熱遷移を古典論，半古典論，量子論を用いて解析した。固有値スペクトル分布を繰り返し法で求める方法により離散および連続スペクトルが混在する多準位へのフランク･コンドン因子を計算し、CO^+ の $^2\Pi$ 準位へのZEKE スペクトルを解析した。

b) 水クラスター負イオン $(H_2O)_n^-$ と１族金属 M（Li，Na）と水クラスターの錯体 $M(H_2O)_n$ に共通して見いだされる(OH){e}(HO)結合とも呼べる電子雲と複数の(OH)結合の相互作用を理論的に調べた。OHの伸縮振動の低波数シフトと OH 結合距離の伸張の相関は，通常の水素結合と同様であることが分かり，OH と電子雲{e}の相互作用は電子－水素結合と呼べるものであることを明らかにした。また、電子雲{e}の中心と水素原子間の距離もまた OH の伸縮振動の低波数シフトと強く相関していることも明らかになった。振動スペクトルのパターンから{e}周辺の構造を同定できることも判明し，振動スペクトルの観測実験の重要性を提唱した。電子スペクトルも構造特異であることを光励起･光電子脱離断面積の計算によって示した。$X^-(H_2O)_n$（X ＝ F，Cl，Br）の分子内振動と分子間振動の相互作用を計算し，実験で観測されているスペクトルの中には内部エネルギーが高いクラスターからの寄与があることを示した。

c) 大気環境で進行する様々な原子・分子過程を理論化学・計算化学の立場から研究する研究プロジェクトを新たに開始した（科学技術振興事業団・計算科学技術活用型研究開発推進事業）。もっとも基本的分子である N_2，O_2，CO とそのイオン N_2^+，O_2^+，CO^+ の基底状態・励起状態のポテンシャルエネルギー，双極子モーメント，電子遷移モーメントを精密に計算し，電子・振動・回転スペクトルの絶対強度，放射寿命を見積もった。実験データがある場合は実験誤差範囲内で一致していることが分かり，計算で得られたこれらの量は，定量的計測・シミュレーションに用いることができることを示した。たとえば，人工衛星に搭載された分光器で測定された太陽の CO 分子の赤外スペクトルの強度分布を，理論計算で得られた吸収強度を用いて解析することによって，太陽大気の温度分布を推定することができた。OHラジカルは，対流圏においても成層圏においても大気の化学反応で重要な役割を

果たしている。その生成機構と反応, 特にVOCと呼ばれる植物起源の揮発性有機化合物との反応の機構と反応速度を量子化学的に研究した。

B-1) 学術論文

P. BANDYOPADHYAY, S. TEN-NO and S. IWATA, "Ab initio Monte Carlo simulation using multicanonical algorithm: temperature dependence of the average structure of water dimer," *Mol. Phys.* **96**, 349-358 (1998).

T. SUZUKI, T. IKEGAMI, M. FUJII and S. IWATA, "Theoretical studies of internal methyl rotations in *m*-xylene: Comparison of Franck-Condon factors with the experimental spectra," *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* **461-462**, 79-90 (1999).

S. TEN-NO, S. IWATA, S. PAL and D. MUKHERJEE, "Generalization of the coupled-cluster response theory to multi-reference expansion spaces: an application of the coupled-sluster singles and doubles effective Hamiltonian," *Theor. Chem. Acc.* **102**, 252 (1999).

T. IKEGAMI and S. IWATA, "Photodissociation dynamics of argon cluster ions," *J. Chem. Phys.* **110**, 8492-8500 (1999).

P. NACHTIGALL, J. HRUSAK, O. BLUDSKY and S. IWATA, "Investigation of the potential energy surfaces for the ground X^1A_1 and excited C $^1B_2$ electronic states of SO_2," *Chem. Phys. Lett.* **303**, 441-446 (1999).

K. K. BAECK, H. CHOI and S. IWATA, "Thedoretical study on spectroscopic properties of positive, neutral and negative species of BCl_2 and $AlCl_2$: The stability of the neative species," *J. Phys. Chem. A* **103**, 6772-6777 (1999).

J. HRUSAK, Z. HERMAN and S. IWATA, "The heat of formation of the SiF^{2++} dication: A theoretical prediction," *Int. J. Mass Spectrom.* **192**, 165-171 (1999).

N. WATANABE, S. TEN-NO, S. PAL, S. IWATA and Y. UDAGAWA, "Size-extensive calculations of static structure factors from the coupled cluster singles and doubles model," *J. Chem. Phys.* **111**, 827-832 (1999).

P. BANDYOPADHYAY, S. TEN-NO and S. IWATA, "Structures and photoelectron spectroscopies of $Si_2C_2^-$ studied with ab initio multicanonical Monte Carlo simulation," *J. Phys. Chem. A* **103**, 6442-6447 (1999).

S. TEN-NO and S. IWATA, "On connection between the reference interaction site model integral equation theory and the partial wave expansion of molecular Orstein-Zernike equation," *J. Chem. Phys.* **111**, 4865-4868 (1999).

W.-N. WANG, H.-R. TANG, K.-N. FAN and S. IWATA, "Theoretical studies of $[Si_4NO]^-$ with ab initio MO and DFT methods," *Chem. Phys. Lett.* **310**, 313-322 (1999).

T. TSURUSAWA and S. IWATA, "Theoretical studies of structures and ionization threshold energies of water cluster complexes with a group 1 metal, $M(H_2O)_n$ (M = Li and Na)," *J. Phys. Chem. A* **103**, 6134-6141 (1999).

M. SAEKI, T. TSUKUDA, S. IWATA and T. NAGATA, "Electronic Isomers in $[(CO_2)_nROH]^-$ cluster anions. II. Ab initio calculations," *J. Chem. Phys.* **111**, 6333-6343 (1999).

K. SATOH and S. IWATA, "Theoretical study of vibrational spectra for $Cl^-(H_2O)$: Temperature dependence and the infulenced of Ar_n (n = 1–3)," *Chem. Phys. Lett.* **312**, 522-529 (1999).

B-3) 総説、著書

T. IKEGAMI and S. IWATA, "Intracluster Reaction Dynamics of Ar_4^+," *The Transition State, Theoretical Approach*, Fueno, Ed., Kodcansha; Tokyo, pp. 115-128 (1999).

岩田末廣, 「定量的量子化学計算理論の開拓と確立ーポープル教授とコーン教授の業績ー」, *現代化学* **20** (1998).

岩田末廣,「化学結合論・量子化学・計算化学」, *学術月報* **52**, 570-576 (1999).

K. FUKE, K. HASHIMOTO and S. IWATA, “Structures, spectroscopies and reactions of atomic ions with water clusters,” *Adv. Chem. Phys.* **110**, 431 (1999).

B-4) 招待講演

岩田末廣、鶴澤武士,「電子雲と相互作用している HO 結合の理論振動スペクトル：電子－水素結合」, 高エネ機構研究会「水素結合誘電体－水素結合プロトンの振動スペクトルと同位体効果」, つくば , 1999 年 12 月 .

S. IWATA, “The electron-hydrogen bond: structrural and spectroscopic properties,” IMS COE Conference “Interplay of theories and experiments in structural analyases of molecualar clusters,” Okazaki (Japan), December 1999.

岩田末廣,「計算機で化学する」, 分子科学フォーラム , 岡崎 , 1999 年 10 月 .

岩田末廣,「水クラスターとその錯体の量子化学」, 分子構造討論会 , 大阪 , 1999 年 9 月 .

岩田末廣,「大気環境における分子過程の理論化学」, 日本化学会第 77 秋季年会 , 札幌 , 1999 年 9 月 .

岩田末廣,「水クラスターの作る錯体の量子化学」, 超水分子の化学に関するワークショップ , つくば , 1999 年 9 月 .

S. IWATA, T. TSURUSAWA and F. CHEN, “Theoretical studies of water cluster anions and water cluster complexes with a group 1 metal atom $M(H_2O)_n$ (M = Li, Na): The unique size dependence of ionization energy and spectroscopic properties,” Beijing International Conference on photoelectron spectroscopy: Molecules, ions and clusters, Beijing (China), September 1999.

S. IWATA and T. TSURUSAWA, “A new type of chemical interaction found in computational chemistry: Water cluster anions and the ion-pair state of $M(H_2O)_n$ (M = Li, Na),” 5th International Confernce COMPUTERS IN CHEMISTRY ‘99, Szklarska Poreba (Poland), July 1999.

岩田末廣,「水クラスターとその錯体：量子化学計算で何ができるか」, 分子研研究会「大気イオンクラスターの化学とその応用」, 岡崎 , 1999 年 6 月 .

S. HIRATA and S. IWATA, “Development and application of analytical derivative methods in ab initio 1D crystal orbital theory,” 39 Sanibel Symposium, Florida (USA), March 1999.

S. HIRATA and S. IWATA, “Analytical derivative methods in ab initio 1D crystal orbital theory,” The 8th Korean-Japan Joint Symposium on Molecular Science, Taejon (Korea), January 1999.

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（豊橋）プログラム委員会委員長(1993.7).

Symposium “Computational Quantum Chemistry” in PacfiChem '95: (Hawaii) (1995.12).

Symposium “In the Frontier of Quantum Chemistry and Chemical Reactions,” Atlanta (1999.5).

Japan-US Information Exchange Seminar “Photoconversion and Photosynthesis: Past, Present and Perspective,” Okazaki (1999.11).

IMS COE International Conference “Interplay of Theories and Experiments in Structural Analysis of Molecular Clusters,” Okazaki (1999.12).

Symposium “Solvated Molecules and Ions: From Clusters to Condensed Phases” in PacifiChem 2000, Hawaii (2000.12).

文部省、学術振興会等の役員等

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(1992-1998).

慶応義塾大学大型研究助成審査委員(1994-).

東京工業大学総合情報処理センター外部評価委員(1995).

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(1996-1998).

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-).

Molecular Physics (1999-).

科学研究費の研究代表者、班長等

重点領域研究「化学反応理論」領域代表者(1993-1996).

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

科学技術振興偉業団･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、客員

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 .

慶應義塾大学理工学研究科化学専攻 , 非常勤講師 , 1999 年 4 月 1 日―1999 年 9 月 30 日 .

C) 研究活動の課題と展望

大気環境中では原子・分子過程に加えて，中性クラスターおよび正・負イオンクラスターが関与する過程も重要である。基礎的分子については特別に高精度の理論計算を行い，実験精度と同程度で分光学的諸量などの物理量を，大気科学者に提供する。そのためには，電子状態理論の高精度化と同時に核の運動の量子論的取り扱いの改良にも努める。分子クラスターの成長・崩壊にも研究の対象を広げ，そのための理論的手法の開発にも取り組む。

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。特に，拡張アンサンブル法では一回のシミュレーションの結果から，最小エネルギー状態ばかりでなく任意温度における熱力学量を求めることができるので強力であるが，マルチカノニカル法などではその重み因子を決定することが自明ではない。この問題を克服するため，我々は新たにTsallis統計に基づく拡張アンサンブル法を開発したり，レプリカ交換法の分子動力学法版を導入したりしてきた。特に，レプリカ交換法はその簡潔さゆえに幅広い問題に適用される可能性がある。これらの手法を使うことにより，小ペプチド系の最小エネルギー構造として，αヘリックスやβシート構造が実験と一致する場所に得られること示した。また，ヘリックス・コイル転移の熱力学的解析を行うとともに，ペプチド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。最近では，拡張アンサンブルシミュレーションを小蛋白質系に適用し始めている。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，距離に依存した誘電率で表すものや溶質の溶媒への露出表面積に比例する項を試してきた。また，厳密な溶媒効果としては，RISM や SPT などの液体の統計力学に基づくものや水分子を陽にシミュレーションに取り入れること等を検討してきた。特に最近では RISM 理論によるアルコール溶媒の蛋白質の立体構造に及ぼす影響を調べ，面白い結果を得ている。

B-1) 学術論文

T. NAKAZAWA and Y. OKAMOTO, “Electrostatic Effects on the α-Helix and β-Strand Folding of BPTI(16-36) as Predicted by Monte Carlo Simulated Annealing,” *J. Peptide Res.* **54**, 230-236 (1999).

U. H. E. HANSMANN, Y. OKAMOTO and J. N. ONUCHIC, “The Folding Funnel Landscape for the Peptide Met-Enkephalin,” *Proteins: Struct., Funct., Genet.* **34**, 472-483 (1999).

U. H. E. HANSMANN and Y. OKAMOTO, “Finite-Size Scaling of Helix-Coil Transitions in Poly-Alanine Studied by Multicanonical Simulations,” *J. Chem. Phys.* **110**, 1267-1276 (1999).

Y. OKAMOTO, M. MASUYA, M. NABESHIMA and T. NAKAZAWA, "β-Sheet Formation in BPTI (16-36) by Monte Carlo Simulated Annealing," *Chem. Phys. Lett.* **299**, 17-24 (1999).

M. KINOSHITA, Y. OKAMOTO and F. HIRATA, "Analysis on Conformational Stability of C-Peptide of Ribonuclease A in Water Using the Reference Interaction Site Model Theory and Monte Carlo Simulated Annealing," *J. Chem. Phys.* **110**, 4090-4100 (1999).

U. H. E. HANSMANN and Y. OKAMOTO, "Effects of Side-Chain Charges on α-Helix Stability in C-Peptide of Ribonuclease A Studied by Multicanonical Algorithm," *J. Phys. Chem. B* **103**, 1595-1604 (1999).

A. MITSUTAKE, M. IRISA, Y. OKAMOTO and F. HIRATA, "Classification of Low-Energy Conformations of Met-Enkephalin in the Gas Phase and in a Model Solvent Based on the Extended Scaled Particle Theory," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **72**, 1717-1729 (1999).

A. MITSUTAKE, U. H. E. HANSMANN and Y. OKAMOTO, "Temperature Dependence of Distributions of Conformations of a Small Peptide," *J. Mol. Graphics Modell.* **16**, 226-238; 262-263 (1998).

A. MITSUTAKE and Y. OKAMOTO, "α-Helix Propensities of Homo-Oligomers in Aqueous Solution Studied by Multicanonical Algorithm," *Chem. Phys. Lett.* **309**, 95-100 (1999).

Y. SUGITA and Y. OKAMOTO, "Replica-Exchange Molecular Dynamics Method for Protein Folding," *Chem. Phys. Lett.* **314**, 141-151 (1999).

T. NISHIKAWA, T. KINOSHITA, S. NANBU and M. AOYAGI, "A Theoretical Study on Structures and Vibrational Spectra of C84 Fullerene Isomers," *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* **461-462**, 453 (1999).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. OKAMOTO, "Protein Folding Simulations by Generalized-Ensemble Algorithms," *the Proceedings of The 24th Taniguchi International Symposium "Old and New Views of Protein Folding,"* K. Kuwajima and M. Arai, Eds., Elsevier Science, pp. 227-236 (1999).

Y. SUGITA, "Computational Analysis of Protein Thermal Stability and the Denatured State," *the Proceedings of The 24th Taniguchi International Symposium "Old and New Views of Protein Folding,"* K. Kuwajima and M. Arai, Eds., Elsevier Science, pp. 185-194 (1999).

Y. OKAMOTO, "Ab Initio Predictions of Three-Dimensional Structures of Proteins by Monte Carlo Simulations," *the Electronic Proceedings of SCRI International Workshop on Monte Carlo and Structure Optimization Methods for Biology, Chemistry and Physics*, B.A. Berg, H. Meirovitch, M.A. Novotny and P.A. Rikvold, Eds., http://www.scri.fsu.edu/MCatSCRI/proceedings/ (1999).

B-3) 総説、著書

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」, *物性研究* **71**, 335-347 (1998).

U. H. E. HANSMANN and Y. OKAMOTO, "The Generalized-Ensemble Approach for Protein Folding Simulations," *Annual Reviews of Computational Physics VI*, D. Stauffer, Ed., World Scientific; Singapore, pp. 129-157 (1999).

U. H. E. HANSMANN and Y. OKAMOTO, “Tackling the Protein Folding Problem by a Generalized-Ensemble Approach with Tsallis Statistics,” in special issue, “Nonextensive Statistical Mechanics and Thermodynamics,” *Braz. J. Phys.* **29**, 187-198 (1999).

U. H. E. HANSMANN and Y. OKAMOTO, “New Monte Carlo Algorithms for Protein Folding,” *Current Opinion in Structural Biology* **9**, 177-183 (1999).

B-4) 招待講演

岡本祐幸,「拡張アンサンブル法で探る蛋白質の折り畳み機構」, 京都大学基礎物理学研究所研究会「モンテカルロ法の新展開」, 京都 , 1999 年 2 月 24 － 25 日 .

Y. OKAMOTO, “Protein Folding Simulations by Generalized-Ensemble Algorithms,” The 24th Taniguchi International Symposium “Old and New Views of Protein Folding,” Kisarazu (Japan), March 3-7, 1999.

Y. SUGITA, “Computational Analysis of Protein Thermal Stability and the Denatured State,” The 24th Taniguchi International Symposium “Old and New Views of Protein Folding,” Kisarazu (Japan), March 3-7, 1999.

西川武志,「並列版プログラムをどう開発するか」, 分子研スーパーコンピュータワークショップ「新汎用コンピュータの利用と次期スーパーコンピュータへの展望」, 岡崎 , 1999 年 3 月 11 － 12 日 .

Y. OKAMOTO, “Ab Initio Predictions of Three-Dimensional Structures of Proteins by Monte Carlo simulations,” SCRI International Workshop on Monte Carlo and Structure Optimization Methods for Biology, Chemistry and Physics, Tallahasse, Florida (USA), March 28-30, 1999.

Y. OKAMOTO, “Protein Folding Simulations by Monte Carlo Simulated Annealing and Multicanonical Algorithm,” International Conference, Optimization in Computational Chemistry and Molecular Biology: Local and Global Approaches, Princeton, New Jersey (USA), May 7-9, 1999.

Y. OKAMOTO, “Tackling the Multiple-Minima Problem in Protein Folding by Monte Carlo Simulated Annealing and Generalized-Ensemble Algorithms,” U. S.-Japan Bilateral Seminar “Understanding and Conquering Long Time Scales in Computer Simulations,” Maui, Hawaii (USA), July 27-30, 1999.

Y. OKAMOTO, “Protein Tertiary Structure Predictions by Generalized-Ensemble Simulations,” CECAM Workshop: Overcoming Broken Ergodicity in Simulations of Condensed Matter Systems, Lyon (France), September 27-29, 1999.

Y. OKAMOTO, “Protein Folding Simulations by Simulated Annealing and Generalized-Ensemble Algorithms,” The 5th International Conference on Computational Physics (ICCP5), Kanazawa (Japan), October 11-13, 1999.

杉田有治,「レプリカ交換法による蛋白質折れ畳み機構の解析」, 大阪大学蛋白質研究所セミナー , 吹田 , 1999 年 11 月 25 － 26 日 .

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本生物物理学会分野別専門委員「分子動力学」(1999-).

学会の組織委員

IMS International Workshop on Protein Stability and Folding, Okazaki, January 13-15 組織委員 (1999).

IMS Winter School on Statistical Mechanics "Nonextensive Generalization of Boltzmann-Gibbs Statistical Mechanics and Its Applications," February 15-18 組織委員 (1999).

SCRI International Workshop on Monte Carlo and Structure Optimization Methods for Biology, Chemistry and Physics, Tallahasse, Florida, U.S.A. March 28-30 国際 Advisory Board (1999).

IMS Mini International Workshop on Protein Folding Simulations, Okazaki, October 14-15 組織委員 (1999).

学術雑誌編集委員

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

Molecular Simulation, Editorial Board (1999-).

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-).

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り, 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。そして最近になってやっと, 単純な溶媒効果を取り入れた拡張アンサンブルシミュレーションに成功したばかりである。よって, エネルギー極小状態に留まらないシミュレーション法が確立されてきた今, いよいよ, 現在存在する標準的な力場と溶媒理論を使う時, どこまで正確に蛋白質の折れ畳みに関する情報が得られるかを判断できる段階に入ってきたと言える。

分子基礎理論第二研究部門

中　村　宏　樹　（教授）

A-1) 専門領域：化学物理理論、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) 非断熱遷移の基礎理論の構築と応用

c) 化学動力学の制御

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。例として，$O(^3P)HCl$，ClHCl，BrHCl系を取り上げ化学反応動力学を振動非断熱遷移として概念化出来ることを示した。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。後者に対するプログラムを完成し，DH_2^+ 系の計算を行った。

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，全反応確率を良く再現しうる事を示した。３次元反応さえ完全に解析的に取扱いそのメカニズムを明確にしうる事を示した。更に，Rosen-Zener-Demkov型をも包含した非断熱遷移の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。レーザー場によって誘起されるエネルギー準位交差の所で場の強さあるいは周波数を掃引することによって，振動準位間遷移やトンネル遷移を制御しうる事を示した。光分解などの動的過程の制御の研究をも進めている。また，非断熱トンネル型遷移に現われる完全反射現象を利用し，レーザー場の周波数と分子の振動状態を旨く選ぶ事によって光分解を選択的に起しうる事をモデル計算で示した。

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り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

K. NOBUSADA, O. I. TOLSTIKHIN and H. NAKAMURA, “Quantum Reaction Dynamics of Cl + HCl → HCl + Cl: Vibrationally Nonadiabatic Reactions,” *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* **461-462**, 137-144 (1999).

V. I. OSHEROV and H. NAKAMURA, “Analytic Solution of Two-State Time-Independent Coupled Schrödinger Equations in an Exponential Model,” *Phys. Rev. A* **59**, 2486-2489 (1999).

G. V. MIL'NIKOV, O. I. TOLSTIKHIN, K. NOBUSADA and H. NAKAMURA, "Quantum Reaction Dynamics of Asymmetric Exoergic Heavy-Light-Heavy Systems: Cl + HBr → HCl + Br," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **1**, 1159-1163 (1999).

H. NAKAMURA, "Molecular Switching in a Two-Dimensional Constriction," *J. Chem. Phys.* **110**, 10253-10261 (1999).

Y. TERANISHI and H. NAKAMURA, "New way of Controlling Molecular Processes by Time-Dependent External Fields," *J. Chem. Phys.* **111**, 1415-1426 (1999).

K. NOBUSADA and H. NAKAMURA, "On the *J*-Shift Approximation in Quantum Reaction Dynamics," *J. Phys. Chem. A* **103**, 6715-6720 (1999).

B-4) 招待講演

中村宏樹, 「超球座標系と化学反応動力学機構」, 物理学会年会 , 原子核理論・原子核実験合同シンポジウム「少数粒子系の物理」, 広島 , 1999 年 3 月 .

H. NAKAMURA, "Control of Nonadiabatic Processes by Time-Dependent External Fields," 日中理論化学シンポジウム, 合肥（中国）, May 1999.

H. NAKAMURA, "Nonadiabatic Transitions and Chemical Reaction Dynamics," The Frontiers of Quantum Chemistry and Chemical Reactions Dedicated to the 65-th Birthday of Prof. Keiji Morokuma, Emory Univ., Atlanta (U. S. A.), May 1999.

H. NAKAMURA, "Nonadiabatic Transitions in Chemical Reactions," Workshop on "Quantum Reactive Scattering," Perugia (Italy), June 1999.

H. NAKAMURA, "Complete Solutions of the Landau-Zener-Stueckelberg Curve Crossing Problems and Their Generalizations and Applications," XXI-ICPEAC (Int. Conf. on Physics of Elect. and Atomic Collisions) Review Talk, Sendai (Japan), July 1999.

H. NAKAMURA, "Nonadiabatic Transition and Tunneling as an Origin of Mutability of this World," ICLTC(Intern. Conf. on Low Temperature Chemistry), Nagoya (Japan), July, 1999.

H. NAKAMURA, "Nonadiabatic Transitions:Basic Theory and Its Applications," ACS Symposium "Electronically Nonadiabatic Processes in Gaseous, Cluster, and Condensed Media," New Orleans (U. S. A.), August 1999.

H. NAKAMURA, "Nonadiabatic Transitions and Hydrogen Transfer Chemical Reactions," 8-th Asian Chemical Congress, Taipei (Taiwan), November 1999.

H. NAKAMURA, "New Way of Controlling Molecular Processes by Lasers," 日米セミナー , Hawaii (U. S. A.), December 1999.

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, 1998-).

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等

重点領域研究班長(1992-1995).

特定領域研究計画班代表者(1999-).

基盤研究代表者(1998-).

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－ .

東京大学工学部 ,「化学動力学の基礎」, 1999 年 11 月 .

京都大学理学部 ,「化学動力学の基礎」, 1999 年 11 月 .

北海道大学理学部 ,「化学動力学の基礎」, 1999 年 12 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。特に，我々の開発したポテンシャル曲線交差による非断熱遷移の完全解が大変良く働く事が判ったので，様々な化学動力学過程への応用を広範に進め多次元の具体的系に有効に応用出来る半古典力学的理論を完成していきたい。また，我々の新しい制御理論をも色々な動的過程に適用し，実験家との協力によって新しい分野を切り開いていきたい。

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) 近年の実験技術の進歩により，超高速非線形分光も３次から５次，７次とより高次の非線形性を追求するようになってきた。我々は，この可能性を，２次元分光として理論的に示したが，本年は実験的に特に大きな進歩があり，ラマンと赤外を組み合わせた周波数領域の実験や，２次元赤外エコーの実験等が実現された。また，そのアプリケーションも溶液分子から，混合系やたんぱく質等，大きく広がりを見せている。我々は，２次元ラマン分光の元祖として，これら大きな広がりを見せている実験の，インフラを築く事を使命に，さまざまなモデル系に対し理論を展開した。本年度は，特に溶液分子の振動モードの不均一広がりを考慮するモデルとして，振動揺動を引き起こす非線形結合型のブラウン運動モデルを提唱し，不均一広がりが，５次や７次の２次元分光信号にどのように現れるかを考察した。また，化学反応系についても，量子フォッカープランク方程式を用いて，トンネル過程や非調和振動子性がある系についての２次元スペクトルを計算した。

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，その過程は，溶媒や蛋白質等の中では，熱励起や摩擦のため，シュレディンガー方程式で記述される孤立系とは，非常に異なったものになる。この研究のため，低温補正項を入れた新しい形のガウス・マルコフ型量子フォッカー・プランク方程式を導出した。そのプログラムを用いて，化学反応率がトンネル過程や熱励起，摩擦等の効果により，どのように変化するか計算した。また，電子移動反応を解析するため，反応座標よ溶媒座標の２自由度系での量子フォッカー・プランク方程式を導出し，そのプログラムを作成した。

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変数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，放物面になる事が知られている。しかしこれは，中心極限定理等がよく効く，高温での事だけであり，極性溶媒のようなフラストレートした系は，低温ではガラス転移してしまい，そのエネルギー面は極小をたくさん持った全く異なったものになる。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。本研究では，極性溶媒にとり囲まれた荷電分子を，荷電分子に対する極性溶媒分子の配向を，内側，外側の２つしかとらないと仮定する事により，スピングラス系を用いてモデル化し，そのモンテカルロシュミレーションを行い研究した。荷電分子がある系を冷却していくと，極性分子の凍りつき方が一様でない事を発見した。

d) DCNQI塩やBEDT-TTF塩結晶は，配位する金属原子や分子の置換基を変化させる事により様々な電子状態を取る。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れる。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試みた。まず，DCNQI 分子や BEDT-TTF 分子の中性，アニオン両方のモノマーを ab initio HF/DZP レベル計算を行った。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 分子や BEDT-TTF 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，実験と一致する結果を得た。

B-1) 学術論文

Y. IMAMURA, S. TEN-NO and Y. TANIMURA, “Ab initio MO studies on electronic states of DCNQI molecules,” *J. Phys. Chem. B* **103**, 266-270 (1999).

Y. SUZUKI and Y. TANIMURA, “Optimized perturbation approach with Legendre transformation to a dissipative system: correlation functions of a Morse oscillator,” *Phys. Rev. E* **59**, 1475-1488 (1999).

G. GANGOPADHYAY, S. GHOSHAL and Y. TANIMURA, “A thermal bath induced new resonance in linear and nonlinear spectra of two-level systems,” *Chem. Phys.* **242**, 367-385 (1999).

K. OKUMURA, A. TOKMAKOFF and Y. TANIMURA, “Structural information from two-dimensional fifth-order Raman spectroscopy,” *J. Chem. Phys.* **111**, 492-503 (1999).

A. AETHIA, F. HIRATA, Y. TANIMURA and Y. SINGH, “Polaron density matrix and effective mass at finite temperature,” *Phys. Rev. B* **60**, 7245-7251 (1999).

Y. IMAMURA, K. YONEMITSU, S. TEN-NO and Y. TANIMURA, “Ab initio MO studies on electronic states of BEDT-TTF molecules,” *J. Chem. Phys.* **111**, 5986-5994 (1999)

K. OKUMURA, A. TOKMAKOFF and Y. TANIMURA, “Two-dimensional line shape analysis of photon echo signal,” *Chem. Phys. Lett.* **314**, 488-495 (1999).

B-3) 総説，著書

Y. TANIMURA, K. YAMASHITA and P. A. ANFINRUD, “Femtochemistry,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **96**, 8823-8824 (1999).

B-4) 招待講演

Y. TANIMURA, “Two-dimensional spectroscopy of intramolecular vibrational modes,” 日韓セミナー , Taejon, 1999 年 2 月 .

Y. TANIMURA, “2D Raman spectroscopy for intramolecular vibrational modes,” International Symposium on Two-Dimensional Correlation Spectroscopy, Osaka (Japan), 1999 年 8 月 .

Y. TANIMURA, “The 5th- and 7th-order 2D Raman spectroscopy for intramolecular vibrational modes,” アメリカ分光学会 , サンノゼ , 1999 年 9 月 .

Y. TANIMURA, “The 5th- and 7th-order 2D Raman spectroscopy for intramolecular vibrational modes,” International conference on the condensed phase dynamics of chemical system, 京都 , 1999 年 11 月 .

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

通産省工業技術院研究人材マネージメント研究会諮問委員(1999-).

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

コロラド大学化学科 , “Ultrafast nonlinear spectroscopy of molecules in the condensed phase,” 1999 年 10 月 2 日 .

九州大学理学部 ,「よい子の経路積分」, 1999 年 11 月 29 日

大阪大学理学部 ,「散逸系の量子ダイナミクスと超高速分光」, 1999 年 11 月 10 － 12 日 .

金沢大学理学部 ,「散逸系の量子ダイナミクスと超高速分光」, 1999 年 11 月 15 － 17 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

分子科学は化学と物理の境界領域の学問であり, 理論的研究を行うにあたっても, 個々の分子の持つ特殊性と, 一般性という化学的，物理的な両方の視野を要求される。化学現象を捕らえる上で，どこまで特殊性を求め，どこから一般性を引き出すかは，結局センスの問題であろう。センスを養うには，よい実験家の話を聞くのが一番である。実験事実は理論家のインスピレーションをはるかに超えており，ネタはその中に無限にころがっている。（アインシュタインが実験事実を説明するために，相対性原理を発見したのは有名な話だ）。その中でも，複雑怪奇な生体分子系内の化学反応は，散逸，フラストレーション，フラクタル，量子ダイナミックス，溶媒効果，電子状態，光応答等々，百鬼夜行なんでもありで，センスを磨くにはよい問題だ。何が本当の問題かという事もよくわかっていない，大変手ごわい対象だが，これまでの研究を発展させながらも，断熱的に，それらに手を出していこう。

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) 電極の原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) 溶液内分子の電子状態に対する溶媒効果と化学反応の理論

溶液中に存在する分子の電子状態は溶媒からの反作用場を受けて気相中とは大きく異なり，従って，分子の反応性も違ってくる。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。この理論を使って1999年度に行った研究の主な成果を以下にまとめる。

(i)　水溶液中のハロゲン水素の酸－塩基平衡

水溶液中のハロゲン化水素のうち HCl，HBr，HI はいずれも強い酸性を示すのに対して，HF は弱酸性を示す。これらのハロゲンのうちでフッ素の電気陰性度が最大であることを考慮するとこのふるまいは直感と非常に食い違っており，量子化学のチャレンジングな問題として早くから理論家の注目を集めた問題である。（L. Pauling もその名著「*Nature of Chemical Bond*」の appendix の中で議論している。）この問題を解くカギは「溶媒効果」を考慮することであり，Pauling は溶液中では HF の非解離状態が解離状態よりも低い自由エネルギーをもつことを溶媒和自由エネルギーの実験データを使って示した。しかしながら，Pauling の解析は現象論であるため，HF の非解離状態が何故解離状態より安定であるかという問題に関する分子レベルでの解答は与えない。われわれはRISM－SCF理論に基づく解析により実際に HF が弱酸性であることを定性的に示すとともに，HF の非解離状態が安定である理由として，他のハロゲン化水素がひとつのタイプの水素結合（H_2O----H-X）しか形成しないに対して，フッ化水素は水分子と（H_2O----H-F）および（HF----H-O-H）のふたつのタイプの水素結合を形成するからであることを明らかにした。［*J. Am. Chem. Soc.* **121**, 2460 (1999) に既報］

(ii)　超臨界状態を含む広い温度，密度範囲における水とその自己解離

水溶液が中性であることを示す pH = 7 は，水の自己解離反応に於けるイオン積（pKw）が 14 であることに由来する。この pKw は温度・圧力に依存して変化することが知られているが，その機構を説明するためには，自己解離反応と熱力学状態の関係を明らかにする必要がある。ところが，これは化学反応と溶媒効果が複雑に絡まり合った問題であり，これまで現象論的でさえも説明することが出来なかった。我々はRISM－SCF理論に基づく解析により広い温度・密度領域に於ける pKw 変化を再現することに成功し，その分子論的描像を明らかにした。すなわち，密度変化については溶媒和効果が，温度変化については分子の電子分極と溶媒和の効果がそれぞれ大きな役割を果たしていることを見いだした。［*J. Phys. Chem. B* **103**, 6596 (1999) に既報］

一方, 水を特徴付けるもう一つの重要な側面として, 水素結合によるネットワーク構造を挙げることが出来る。

しかし広い温度・密度領域に於ては，上記の例からも明らかな様に水分子の電子分極が重要となり，既存の理論では信頼に足る解析が不可能である。我々は非経験的電子状態理論とRISMを組み合わせた理論を用いて，温度・密度変化に対する液体構造の変化を分子論的に明らかにした。水は常圧付近ではよく発達した水素結合性の構造を有しているが，低密度になるとこれは徐々に崩壊してくる。一方で高密度側ではパッキング構造が支配的になっていることが分かった。温度の上昇も水素結合を弱めることが分かり，常温・常圧の水は，これらのバランスの上に水素結合性の構造を保っていることが分かった。［*J. Chem. Phys.* **111**, 8545 (1999) に既報］

(iii)　水および超臨界水中での Diels-Alder 反応

超臨界水を溶媒に用いた有機反応は反応物以外の有機物質を必要としないため環境への影響も最小限に抑えられ，環境調和型の工業化学として期待されている。なかでも Diels-Alder 反応は，水溶媒中で反応速度が劇的に増加することが知られている付加環化反応であるが，溶媒である水を超臨界条件にすることによって反応収率が極めて高くなり，反応速度も水中に比べてさらに増加するという実験結果が最近報告された。本研究ではこの問題を取り上げ RISM-SCF に基づく解析を行った結果以下の結論を得た。

(iii-a)　水中の反応速度は気相中に比べて劇的に増加する。その増加の主な要因は疎水相互作用によって活性化エネルギーが減少するからである。

(iii-b)　超臨界水中の反応速度も水中に比べてさらに増加するが，その主な要因は温度上昇に伴う熱運動の増加によるものであり，水中のそれとは物理的本質において異なっている。

(iii-c)　超臨界水中では水中に比べて反応収率が大きく増加するが，その理由は溶媒の極性が下がったために反応物質の溶解度が増加したことによる。［**Y. HARANO, H. SATO and F. HIRATA**, *J. Am. Chem. Soc.* に印刷中］

b) 溶液中の集団的密度揺らぎと非平衡化学過程

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)　液体の相互作用点モデルに基づく水のダイナミックス理論

水のダイナミックスに関して注目を集めている重要な問題のひとつはいわゆる「速い音響モード」の帰属に関わるものである。これは Teixeira らが中性子散乱スペクトルのレーリーピークに現れたショルダーの解釈論として，毎秒1500 m程度の音速をもつ通常の音波の他にその２倍程度の位相速度をもつ音響モードが存在すると示唆したことに端を発する。このショルダーの帰属をめぐる物理的解釈がふたつに分れている。ひとつはこれを水中に存在する水素結合ネットワークを伝わる音波に起因するとみなす解釈，他は波数ベクトルの増加に伴う粘弾性的な正の速度分散が原因であるとみなす解釈である。

われわれは昨年度までに発展させてきた理論により水中の集団的密度揺らぎ（集団励起）を音響モードとふたつの光学モードに分解し，それらのモードの分散関係（周波数と波数ベクトルの間の関係）を解析することにより，このモードの物理的本質を解明することを試みた。［詳細は **S. CHONG and F. HIRATA**, *J. Chem. Phys.* **111**, 3083; 3095 (1999) に既報］

(ii)　水中のイオンのダイナミックス

水中のイオンに働く摩擦抵抗はいわゆる古典的なストークス－アインシュタイン則がブレークダウンする典型

的なケースとして20世紀初頭以来M. BornやL. Onsagerなど著名な物理学者が挑戦を繰り返してきた問題である。ストークス－アインシュタイン則によればイオンに働く摩擦抵抗は$Li^+ < Na^+ < K^+ < Rb^+ < Cs^+$のようにイオン半径とともに増加しなければならないが，実験結果は全く逆に$Li^+ > Na^+ > K^+ > Rb^+ > Cs^+$の順序になる。イオンの抵抗係数に関するストークス－アインシュタイン則のブレークダウンを説明するモデルのひとつはいわゆるいわゆる「溶媒和イオン」モデルであり，溶媒和したイオンの実効的ストークス半径が（裸の）イオンサイズの増加とともに減少することにより上に述べた抵抗係数のイオンサイズ依存性を説明する。もうひとつのモデルはいわゆる「誘電摩擦」の概念に基礎をおくものであり，イオンサイズの増加とともに「誘電摩擦」が減少することを物理的根拠とする。過去におけるこれらのモデルは流体力学や誘電体論などの現象論に基づいておりその分子レベルでの物理的意味やお互いの関係が不明確であった。我々は本研究で一般化ランジェヴァン方程式，RISM理論およびモードカップリング理論を組み合わせて，水中のイオンに作用する摩擦抵抗およびイオンの速度相関関数を解析した。その結果，以下の諸点を明らかにした。

(ii-a)　水中のイオンに作用する摩擦抵抗ζはイオン半径Rの増加とともに一端減少し，極小を通って増加に転じる。この一般的振る舞いに関しては単純な極性溶媒中のそれと定性的に一致している。

(ii-b)　水が溶媒であることに起因する重要な特徴のひとつはカチオンとアニオンの（ζ *vs.* R）- プロットが異なる曲線を描くことである。これは水分子の電荷分布の非対称性がその物理的原因である。

(ii-c)　イオンに働く溶媒の摩擦抵抗をイオン－溶媒間相互作用に対する溶媒の集団励起の応答として記述した。その結果，現象論の「ストークス抵抗」はイオン－溶媒間の短距離相互作用に対する溶媒の音響モードの応答に，また誘電摩擦はクーロン相互作用に対する光学モードの応答に，それぞれ対応することを明らかにした。さらに興味深いことはこの「ストークス抵抗」に対応する寄与自身イオンサイズの増加とともに一端減少し，極小を通って増加に転じる一般的特徴を示した。この結果は小さなイオンでは実効的イオン半径を増加させるような「溶媒和クラスター」が存在することを示唆している。

(ii-d)　小さなイオン（Li^+，F^-）の速度相関関数はサブピコ秒持続する顕著な振動構造を示し，その振動はイオンサイズ増加とともに消失する。このことは小さなイオンでは振動を支持する「溶媒和クラスター」が形成されていることを強く示唆しており，「ストークス抵抗」に関して上に述べた結果と符合している。［**S. CHONG and F. HIRATA**, *J. Chem. Phys.* **111**, 3654-3667 (1999) に既報］

c) 生体高分子の溶媒和構造の安定性に関する研究

本研究の最終目的は第一原理すなわち分子間相互作用に関する情報のみから出発して蛋白質の立体構造を予測することである。蛋白質の立体構造予測（すなわちフォールディング）には二つの要素がある。そのひとつは広い構造空間をサンプルするための効果的なアルゴリズムであり，他は蛋白質の構造安定性を評価する問題である。蛋白質の安定性はそれが置かれている環境すなわち熱力学的条件によって完全に規定される。この熱力学的条件には溶媒の化学組成（溶媒の種類および共存溶質の濃度），温度，圧力などが含まれる。本プロジェクト「溶媒班」は蛋白質の構造安定性に対して熱力学的条件が与える影響を分子レベルで明らかにする目的で，その素過程として，アミノ酸やペプチドおよび疎水分子の水和現象を分子性液体の統計力学（RISM理論）に基づき解析している。これらの解析は蛋白質の安定性に関わる物理的要因を分子レベルで解明するだけでなく，今後，蛋白質のフォールディングを実際に実行するうえで重要となる溶媒和自由エネルギーを計算するための方法論的基礎を与えるものである。

(i)　ペプチド構造の安定性に対する溶媒の影響

Goto らの実験によると水ーアルコール混合溶媒中の C- ペプチド（10個のアミノ酸からなるペプチド）はアルコールの濃度を増加させるとランダムな構造からα - ヘリックス に転移する。アルコール濃度による蛋白質やペプチドの構造転移は狂牛病の原因として注目されているプリオンの構造転移と類似しており，蛋白質の構造安定性に対する溶媒環境の重要性を示す顕著な例である。

われわれは本研究において水，メタノール，およびエタノール中の二つのペプチド（エンケファリン，C- ペプチド）の溶媒和自由エネルギーをRISM理論を使って解析した結果，以下の諸点が明らかになった。

(i-a)　アルコール中では水中にくらべて，溶媒和自由エネルギーが低く（より安定），ペプチドの構造変化に伴うその変化が小さい。そして，その傾向はアルキル鎖の長さとともに顕著になる。

(i-b)　このような水とアルコールの違いはアルコールが水に比べてはるかに数密度が小さいためにいわゆる空孔形成に要する自由エネルギーが小さくて済むこと，およびアルコールが両親媒性の分子であるためペプチドの疎水部位や親水部位の双方にうまく溶媒和できることから出てくる。

(i-c)　以上の結果から，水中では溶媒和自由エネルギーの変化がペプチド内の原子間相互作用エネルギー（主として分子内水素結合）のそれに比べて大きく，ペプチドの構造安定性は溶媒和エネルギーによって支配される。一方，アルコール中では溶媒和自由エネルギーの寄与が小さくなり，分子内水素結合を含む構造エネルギーによってペプチドの安定性が支配されるようになり，その傾向はアルコールのアルキル鎖が長くなるほど顕著になる。

以上のことから，上記の後藤らの実験におけるC-ペプチドの構造変化はアルコール濃度の増加に伴いペプチド内水素結合に比して溶媒効果の寄与が減少したことによって説明することができる。［**M. KINOSHITA, Y. OKAMOTO and F. HIRATA**, *J. Am. Chem. Soc.* に投稿中］

(ii)　ペプチドの安定性に対する塩効果

蛋白質を溶液中から析出させるために最も古くから使われている方法に塩の添加があげられる。これはイオンが蛋白質の水に対する溶解度を下げる（塩析）効果を利用したもので，その効果の大きさは Hofmeister 順列として知られる次ぎの規則に従っている。

$SO_4^{2-} > CH_3COO^- > Cl^- > Br^- > NO_3^- > ClO_4^- > I^- > CNS^-$

$(CH_3)_4N^+ > NH_4^+ > Rb^+$，$K^+$，$Na^+$，$Cs^+ > Li^+ > Mg^{2+} > Ca^{2+} > Ba^{2+}$

上の不等号は塩効果の大きさを示し，左に行くほど蛋白質の溶解度が減少し，その天然構造を安定化する。重要なことはこの順列が蛋白質に限らず，非常に多くの物質の水への溶解度を規定する一般性の高い規則であることである。それ故，小さなペプチドに対する塩効果を分子レベルで解析すれば，蛋白質に関するその効果の物理的本質を明らかにできる可能性がある。蛋白質は，通常の実験条件下では，緩衝溶液などイオン溶液中に存在しているので，蛋白質の構造変化（フォールディング）を調べる上でも，その基本的熱力学条件のひとつとして，塩効果を明らかにしておく必要がある。蛋白質の構造安定性に対する塩効果に関して，後藤らによって次ぎのような疑問が提出されている。通常，蛋白質やペプチドは正，負の解離基や部分電荷をもっていて，これらの電荷とイオンとの静電相互作用は蛋白質などの自由エネルギーに大きな寄与をする。後藤らの実験結果によると，そのような塩効果は必ずしも Hofmeister 順列に従わない。それでは，一体，どのような塩効果が Hofmeister 順列に関係しているのだろうか？

本研究では水溶液中のペプチド（acetylglycine ethyl ester）の安定性に対するアルカリ金属イオン（Li^+, Na^+, K^+）

および塩化物イオン（Cl^-，Br^-，I^-）の効果をRISM理論に基づき解析した結果，以下の結論が得られた。

(ii-a)　水溶液中の溶質に対する塩効果は，主として溶質－イオン間の直接的な相互作用に起因する項とイオンによる溶媒の再配置を通して効いてくる項の二つ効果のバランスによって決定される。

(ii-b)　アニオンの場合，溶媒の再配置からの寄与が支配的であり，それが Hofmeister 順列を決定している。

(ii-c)　カチオンでは，両者の寄与が拮抗しているため，両者のバランスによって Hofmeister 順列が決定されている。［**T. IMAI, M. KINOSHITA and F. HIRATA**, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* に投稿中］

(iii)　生体分子の安定性に対する圧力効果（アミノ酸の部分モル容積）

生体分子の安定性に影響を及ぼす変数のひとつに圧力があげられる。以下の熱力学関係式により，溶媒中の溶質の圧力に対する応答を反映するのは部分モル容積であるから，生体分子の部分モル容積を解析することにより，その構造安定性に対する圧力の影響を調べることができる。

$$\frac{\partial \ln K}{\partial P} = -\frac{\Delta V}{RT}$$

Edsalによる古典的な研究以来，生体分子の部分モル容積に関する数多くの実験研究が行われてきたが，理論的研究，特に，統計力学に基づく分子レベルでの研究は極めて限定されている。とりわけ，複雑な幾何形状と電荷分布をもつアミノ酸，ペプチド，蛋白質などのリアルな生体分子に関する理論は皆無といっても過言ではない。

本研究では，Kirkwood-Buff の溶液論とRISM理論を結合することにより，生体分子に適用可能な部分モル容積の理論式を導出し，その理論に基づき天然に存在する20個のアミノ酸の部分モル容積の解析を行った。この解析の結果は以下のとおりである。

(iii-a)　アミノ酸の C- 末端，N- 末端基の解離による部分モル容積への寄与は –3.2 cm^3/mol から –9.7 cm^3/mol の範囲でアミノ酸の種類により異なる。

(iii-b)　アミノ酸残基の解離の寄与は –3.0 cm^3/mol から –6.0 cm^3/mol の範囲で，やはり負の寄与をする。

(iii-c)　これらに対して，極性残基の体積に対する寄与は小さく，多くの場合，正の寄与をする。

(iii-d)　同じ原子団（例えば，メチレン基やアミド基）からの体積に対する寄与はアミノ酸の種類やその原子団が置かれているアミノ酸内の位置によって大きく異なる。従来，実験家はペプチドや蛋白質の部分モル容積を見積もるために，原子団からの寄与の重ね合わせによる経験的な方法を用いてきたが，本研究の結果はそのような方法に全く理論的根拠がないことを示している。

(iii-e)　アミノ酸の部分モル容積をその分子量に対してプロットすると実験データとの間で系統的な偏差を生じ，その偏差はアミノ酸中の原子数（N）および温度に比例するという結果が得られた。この偏差に関してわれわれは次ぎの仮説を提唱した。溶媒中に１モルの理想気体を導入すると，溶媒の体積は（圧縮率× RT：R，気体定数）だけ増加する。理想気体と溶媒は相互作用しないので，この体積増加は溶質－溶媒間の相互作用によるものではなく，理想気体がその自由度を増やそうとすることに起因するエントロピー的な効果であり，いわゆる，浸透圧と同じ物理的要因に基づく。ところで，溶媒中にアミノ酸のような多原子分子を導入するとき，この理想体積項がどのような寄与をするかは必ずしも自明ではない。何故なら，１モルの分子はもしその中の原子が独立に運動すると仮定すれば，理想体積に対して N（原子数）モルだけの寄与をするからである。実際の分子は大きくなればなるほど分子内自由度が大きくなり，その揺らぎによって理想体積に相当の寄与をすることが予想される。また，同様の理由で揺らぎは温度に比例して増大する。一方，われわれの理論では分子は剛体（分

子内の自由度はデルタ関数的に束縛されている）であるから，その重心の自由度からの理想体積への寄与しか許容されていない。このため，原子数と温度に比例する理想体積項だけの偏差が理論と実験との間で生じたものと考えられる。［**T. IMAI, M. KINOSHITA and F. HIRATA**, *J. Chem. Phys.* に投稿中］

(iv)　疎水水和自由エネルギーの評価

疎水性は蛋白質の天然構造を安定化する要因のひとつであると考えられている。この疎水性を理論的に研究するためのモデル物質として従来より希ガスや小さなアルカンのような非極性の低分子が使われてきたが，これらの分子の水に対する溶解度は直感と反する異常な振るまいを示すことが実験的に知られている。すなわち，直感的には疎水性分子の水に対する溶解度はそのサイズとともに減少すると予想されるが，希ガスの場合それは He ＜ Ne ＜ Ar ＜ Kr ＜ Xe のように逆に増加し，また，アルカンの系列の場合，メタン＜エタン＞プロパン＞ブタン＞ペンタンのようにエタンで極大となる。非極性分子の溶解度のこのような振るまいは溶質の導入に伴う溶媒の再配置エネルギーおよび溶質－溶媒間相互作用の詳細な関係によって決定されており，実験結果を理論的に再現することは極めて難しく，分子シミュレーションの結果も必ずしもコンシステントにはなっていない。我々がこれまで発展させてきたRISM理論もこの振るまいを説明することはできず，RISM理論の最も大きな困難のひとつと看做されてきた。本研究ではこのようなRISM理論の困難を解決するひとつの方法を提案し，低分子の水に対する溶解度の実験結果を定性的に再現する結果を得た。［**A. KOVALENKO and F. HIRATA**, *J. Chem. Phys.* に投稿中］

d) 電極の電子配列を考慮した電極－溶液界面の統計力学

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。われわれは昨年度までの研究において，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。さらに，３次元に拡張したRISM理論を Kohn-Sham 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を行った。［**A. KOVALENKO and F. HIRATA**, *J. Chem. Phys.* **110**, 10095-10112 (1999) に既報］

本年度はこれらの成果を基礎に電極－溶液界面における電子移動反応の問題への取組を始めた。溶液中の電子移動反応は溶媒の電気的分極の熱揺らぎによって駆動される。この電気分極の揺らぎを規定するのはいわゆるMacusの自由エネルギー曲面であり，われわれは以前に RISM 理論に基づきこの自由エネルギー曲面を求める一般的な方法を提案している。［**S. CHONG, S. MIURA, G. BASU and F. HIRATA**, *J. Phys. Chem.* **99**, 10526 (1995)］この理論によれば電気分極の揺らぎは仮想電荷に対する溶媒の電気的応答によって模擬することができ，その応答関数のふるまいから揺らぎの性質に関する知見を得ることができる。本研究では溶液中のイオンから電極に移動した電子が移動後に一個の金属原子上に局在する場合，および全原子上に均一に非局在化する場合のふたつの場合に関して解析を行った。その結果，電子が非局在化した場合は電子分布の非対称性に起因する分極の非線形揺らぎが強く現れるが，局在化した場合はその非線形性が消失することが明らかになった。さらに，この研究においてイオンの電場に対する溶媒の分極応答をイオンの水和に関する1957年モデルに基づき理解する新しい解釈論を確立した。［**R. AKIYAMA, M. KINOSHITA and F. HIRATA**, *Chem. Phys. Lett.* **305**, 251-257 (1999) に既報］

B-1) 学術論文

T. ISHIDA, F. HIRATA and S. KATO, “Thermodynamics analysis of the solvent effect on tautomerization of acetylacetone: An ab initio approach,” *J. Chem. Phys.* **110**, 3938-3945 (1999).

K. NAKA, H. SATO, A. MORITA, F. HIRATA and S. KATO, “RISM-SCF study for the free energy profile of Menshutkin type reaction $NH_3 + CH_3Cl \rightarrow NH_3CH_3^+ + Cl^-$ in aqueous solution,” *Theor. Chem. Acc. (Fukui issue)* **102**, 1-6; 165-169, (1999).

H. SATO and F. HIRATA, “The syn-/anti- conformational equilibrium of acetic acid in water studied by the RISM-SCF/MCSCF method,” *THEOCHEM (Morokuma issue)* **461-462**, 113-120 (1999).

A. KOVALENKO, S. TEN-NO and F. HIRATA, “Acceleration of liquid structure calculations by modified direct inversion in the iterative subspace,” *J. Comput. Chem.* **20**, 928-936 (1999).

M. KINOSHITA, Y. OKAMOTO and F. HIRATA, “Analysis on conformational stability of C-peptide of ribonuclease A in water using the reference interaction site model theory and Monte Carlo simulated annealing,” *J. Chem. Phys.* **110**, 4090-4100 (1999).

H. SATO and F. HIRATA, “Revisiting the acid-base equilibrium in aqueous solutions of hydrogen halides: study by the ab inition electronic structure theory combined with the statistical mechanics of molecular liquids,” *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 2460-3467 (1999).

A. KOVALENKO and F. HIRATA, “Self-consistent description of a metal-water interface by the Khon-Sham density functional theory and three-dimensional reference interaction site model,” *J. Chem. Phys.* **110**, 10095-10112 (1999).

A. SETHIA, F. HIRATA and Y. SINGH, “Density matrix for an excess electron in a classical fluid. Results for a one dimensional system,” *J. Chem. Phys.* **110**, 10086-10094 (1999).

F. HIRATA and S. CHONG, “Response to Comment on ‘Dynamics of Solvated ion in polar liquids: An interaction-site-model description’ [*J. Chem. Phys.* **110**, 1833 (1999)],” *J. Chem. Phys.* **110**, 1835-1836 (1999).

S. CHONG and F. HIRATA, “Dynamics of Ions in Liquid Water: An Interaction-Site-Model Description,” *J. Chem. Phys.* **111**, 3654-3667 (1999).

S. CHONG and F. HIRATA, “Interaction-Site-Model Descritption of Collective Excitations in Liquid Water I: Theoretical Study,” *J. Chem. Phys.* **111**, 3083-3094 (1999).

S. CHONG and F. HIRATA, “Interaction-Site-Model Descritption of Collective Excitations in Liquid Water II: Comparison with Simulation Results,” *J. Chem. Phys.* **111**, 3095-3104 (1999).

H. SATO and F. HIRATA, “Ab initio Study on Molecular Properties and Thermodynamics of Water: A Theoretical Prediction of pKw over a Wide Range of Temperature and Density,” *J. Phys. Chem. B* **103**, 6596-6604 (1999).

T. ISHIDA, F. HIRATA and S. KATO, “Solvation dynamics of benzonitrile excited state in polar solvents: A time-dependent reference interaction site model self-consistent field approach,” *J. Chem. Phys.* **110**, 11423-11432 (1999).

R. AKIYAMA, M. KINOSHITA and F. HIRATA, “Free energy profiles of electron transfer at water-electrode interface studied by the reference interaction site model(RISM) theory,” *Chem. Phys. Lett.* **305**, 251-257 (1999).

A. MITSUTAKE, M. IRISA, Y. OKAMOTO and F. HIRATA, “Classification of Low-Energy Conformation of Met-Enkephalin in the Gas Phase and in a Model Solvent Based on the Extended Scaled Particle Theory,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **72**, 1717-1729 (1999).

H. SATO and F. HIRATA, “ab initio study of water (II): liquid structure, electronic and thermodynamic properties over a wide range of temperature and density,” *J. Chem. Phys.* **111**, 8545 (1999).

A. KOVALENKO and F. HIRATA, “Potential of mean force between two molecular ions in a polar molecular solvent: a study by the three-dimensional reference interaction site model,” *J. Phys. Chem. B* **103**, 7942 (1999).

A. SETHIA, F. HIRATA, Y. TANIMURA and Y. SINGH, “Polaron Density Matrix and Effective Mass at Finte Temperature,” *Phys. Rev. B* **60**, 7245-7251 (1999).

A. SETHIA, S. SANYAL and F. HIRATA, “Eigenstates from the Discretized Path Integrals,” *Chem. Phys. Lett.* **315**, 299-303 (1999).

B-3) 総説、著書

佐藤啓文、平田文男 ,「水の物性に見る量子化学的および古典統計的自由度の結合」, 日本物理学会誌 **54**, 696 (1999).

F. HIRATA, H. SATO, S. TEN-NO and S. KATO, “RISM-SCF Study of Solvent Effect on Electronic Structure and Chemical Reaction in Solution: Temperature Dependence of pKw,” *ACS symposium series “Combined Quantum Mechanical and Moleular Mechanical Methods,”* J. Gao and M. A. Thompson, Eds. (1998).

B-4) 招待講演

F. HIRATA, “Collective density fluctuations in polar liqiuds and their response to ion dynamics,” The 8th Korea-Japan Joint Symposium on Molecular Science: on Molecular Spectroscopy & Theoretical Chemistry, Taejon (Korea), January 1999.

F. HIRATA, “Equilibrium and non-equilibrium processes in solution studied by the RISM theory,” IMS International Workshop on Protein Stability and Folding, Okazaki (Japan), January 1999.

平田文男 ,「溶液化学の理論と応用」, 新化学発展協会・コンピュータケミストリー分科会講演会 , 東京 , 1999 年 3 月 .

平田文男 ,「電子状態と化学反応に対する溶媒効果」, 分子研研究会 , 岡崎 , 1999 年 5 月 .

F. HIRATA, “Molecular Processes in Solvation Dynamics,” 26th International Conference on Solution Chemistry, Fukuoka (Japan), July 1999.

F. HIRATA, “Equilibrium and Non-equilibrium Processes in Solution Described by Interaction-site Model of Molecular Liquids,” European Research Conference “Molecular Liquids: New Trends in the Study of Dynamical Properties,” San Feliu de Guixol (Spain), September 1999.

平田文男 ,「溶媒和の分子論：電子状態から蛋白質まで」, 分子構造総合討論会 , 大阪 , 1999 年 9 月 .

F. HIRATA, A. KOVALENKO and R. AKIYAMA, “Molecular Theory of Electrode-Solution Interface,” The 1999 Joint International Meeting of Electrochemical Societies of USA and Japan, Honolulu (USA), October 1999.

F. HIRATA, “Role of Solvent Induced Force on Protein Folding,” IMS Mini International Workshop on Protein Folding Simulation, October 1999.

佐藤啓文 ,「液体内分子の電子状態理論」, 大阪大学ベンチャー・ビジネス・ラボラトリー若手研究会「凝縮系の超高速ダイナミクスと光学過程」, 大阪 , 1999 年 11 月 .

B-6) 学会及び社会活動

学協会役員、委員

溶液化学研究会運営委員(1994-).

学会等組織委員

第 26 回溶液化学国際会議（1999 年 7 月，福岡）組織委員 .

同プレシンポジウム「Equilibrium and non-equilibrium theories in molecular liquids」，組織委員長 .

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

第 23 回溶液化学シンポジウム組織委員長 .

学術雑誌編集委員

「物性研究」各地編集委員(1996-).

Phys. Chem. Commun. Advisory Board メンバー .

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11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次元有機導体の鎖間電子遷移から鎖内散乱過程へのフィードバック効果

b) 擬１次元電子系の次元クロスオーバーに伴う一体及び二体相関関数の変化

c) 乱れた擬１次元電子系におけるモット絶縁体，アンダーソン局在，金属間の競合

d) 低次元電子系の電荷秩序に依存した電荷励起及びスピン励起スペクトル

e) ハロゲン架橋複核金属錯体の電荷／格子秩序の配位子，ハロゲン，対イオン依存性

f) 多重安定な１次元電子系の秩序状態と時間発展

g) 電界発光する伝導性ポリマーの発光の起原と電場依存性

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 擬１次元有機導体$(TMTTF)_2X$, $(TMTSF)_2X$は圧力を加えたり, アニオンを変えたりすることによって, 電子的な次元性が変化し，１次元的なモット絶縁相から，１次元，２次元，３次元的な金属相へクロスオーバーすることが，近年の実験から明らかになっている。これまで我々のグループは摂動論的繰り込み群を使って，低次元の側から次元クロスオーバー，つまり１粒子及び２粒子のコヒーレンスの回復を調べてきた。本年は乱雑位相近似を使って，高次元の側からフェルミ面のネスティングによる磁気秩序の形成を調べた。実験で見られるように転移温度がクロスオーバーの起こる付近で最大になることが再現された。これまでの摂動論的方法では鎖内プロセスが鎖間プロセスからフィードバックを受ける効果が入っていない為に，電荷局在の起こる温度が次元性によらない結果を出していた。これを改良する為，$1+\varepsilon$次元という連続次元で基本的なダイアグラムを計算しなおし，次元性があがると電荷局在が起こりにくくなるのを再現した。

b) 擬１次元有機導体の次元クロスオーバーの問題は，上に述べたように摂動論的方法で詳細を再現することに限界がみえてきた。そこで，数値的な方法の中で最も信頼性が高い密度行列繰り込み群を使って，有限系に対して一体及び二体の相関関数が横方向のトランスファー積分や二量化とともにどう変化するかを計算した。電荷ギャップの振舞は実験で観測されているのと同様なものが得られた。横方向のホッピング相関（一体相関）は二量化による電荷ギャップがトランスファー積分と同程度以上になると急激に抑制されることがわかった。それと同時にスピン相関（二体相関）の横方向コヒーレンスも弱くなる。スピン密度波から反強磁性体への変化に対応すると考えられる。一方，電荷相関（二体相関）はこれらの変化に鈍感で，むしろ次近接相互作用により敏感に変化する。即ち，次近接斥力により $4k_F$ の成分が成長する。

c) 擬１次元 πd 電子系 $(DMe\text{-}DCNQI)_2Li_{1-x}Cu_x$ や $(DI\text{-}DCNQI)_2Ag_{1-x}Cu_x$ は，$x=0$ のときに外的な要因では二量化を持たない 1/4 フィルドの１バンド電子系，$x=1$ のときに 1/3 フィルドと 1/6 フィルドの２バンド電子系，x が増えるとフィリングが変わり，Cu の d 軌道を介して３次元性が増し，$x=0.5$ 付近で乱雑ポテンシャルの効果が最大となる複雑な系である。電子相関に起因するモットの局在と乱雑さに起因するアンダーソン局在の競合問題はかつて扱われたことがあった。ここでは，これらとフェルミ液体との競合問題を始めて調べた。摂動論的繰り込み群の範囲で行い，電子格子相互作用は簡単の為に無視し，フィリングの変化はウムクラップ散乱の強さをパラメタで振っている。xが小さいときにはウムクラップ散乱が強く, xとともに乱雑さが増し, 反強磁性秩序をともなうモッ

トの電荷局在相から，アンダーソン局在相へクロスオーバーする。一方，xが大きいときはウムクラップ散乱が弱く，xとともに鎖間の重なり積分が増し，アンダーソン局在相から金属相へクロスオーバーする。

d) 擬２次元分子性導体の電子相を多様にするおもな原因は，κ-(BEDT-TTF)$_2$X の場合は二量化による電子相関で，(Et$_n$Me$_{4-n}$Z)[Pd(dmit)$_2$]$_2$の場合はトランスファー積分の異方性による次元性あるいはフラストレーションの効果であることを明らかにしてきた。一般に，低次元の分子性導体の絶縁機構としては，ウムクラップ散乱によるもので，しばしばオンサイト斥力が強調されるモットの機構と，長距離相互作用が強調され，ウィグナー結晶との類似性が指摘される電荷秩序の機構がある。κ-(BEDT-TTF)$_2$X や (Et$_n$Me$_{4-n}$Z)[Pd(dmit)$_2$]$_2$ など，二量化の強い系では有効的にハーフフィリングになっているので，前者がおもな機構と考えられている。しかし二量化の弱い系でもしばしば絶縁化し，実際に電荷秩序が観測される。これらを励起スペクトルの形状の違いから区別する為に，乱雑位相近似で光吸収スペクトルを計算し，それぞれのモードの起原を考察している。出発点として扱った１次元のモデルでは，スピン密度波と電荷密度波が共存するか否かに依存したスペクトルが得られた。

e) 擬１次元ハロゲン架橋複核金属錯体（MMX鎖）には，金属イオン，ハロゲンイオン，配位子，対イオン，溶媒に依存して，多様な混合原子価状態が現れる。配位子としてdtaを使った中性の白金ヨウ素系は室温以上で金属相，低温でスピンパイエルス的な格子変位をともなう交互電荷分極相が観測されている。一方，対イオンが存在する，配位子として pop を使った系は，白金塩素系や白金臭素系で電荷密度波型の格子変位が観測され，白金ヨウ素系で対イオンに依存して，さらに平均原子価相，電荷分極相の存在が示唆されている。これらの相の発現に何が効いているかを調べる為，１次元強相関電子格子系のモデルに平均場，厳密対角化，密度行列繰り込み群などを使って電子状態のパラメタ依存性を計算した。配位子による違いは，対イオンの有無による複核間弾性定数の違いとして理解できる。中性で対イオンのないdtaの系は複核間の距離が不均一になりやすく，非対角電子格子相互作用により容易に交互電荷分極相が現れる。ハロゲンイオンによる違いはp軌道をとおしてd軌道間のトランスファーが大きく変化することで理解される。ヨウ素の系はp軌道がd軌道に近いので複核間の電子移動が容易になっている。配位子とハロゲンイオンが同じ場合は対イオンにより複核間の距離が異なり，その為に対角電子格子相互作用の強さが変わることが要因である。

f) 擬１次元電子系は対称性の異なる電子状態が多重安定になっている場合に光，圧力，温度などによって異なる電子状態間を転移することがある。特に光照射によって誘起される相転移は，中間状態として高励起状態を経ることで他にない相転移がありえる点と，ソリトンやドメイン壁の動力学が電子間，電子格子間の相互作用の競合を反映する点で興味が持たれている。特に励起波長依存性や照射エネルギーに対する非線型な振舞がまだよくわかっていない。この問題に対する為に，今まではあまり取り入れられなかった非断熱効果をフルにとりいれた多電子の時間発展を調べようとしている。その前段階として，まず静的な電子状態が電子間，電子格子間の相互作用にどう依存しているかを，平均場近似でみている。

g) 電界発光する伝導性ポリマーは非線型励起と光物性，LED などへの応用の観点で興味が持たれている。電界発光に効く非線型励起状態として励起子とポーラロンが考えられるが，これらは一般にそれぞれに特徴的な局在モードの違いによって実験的に区別することが可能である。それぞれの非線型励起状態での局在モードの波数を計算すると，赤外活性モードでは違いが大きく出ないが，ラマン活性モードで大きな差があることがわかった。電界発光するポリマー m-LPPP では電場が強いと発光が抑制されることが知られている。計算すると，これは本来中性の励起子が弱い電場のもとで分極し，強い電場のもとでは正負の荷電ポーラロンに分離する為と結論される。ポリマーの配向の乱雑さを考慮すると実験で観測されるような発光の電場依存性が再現された。

B-1) 学術論文

K. YONEMITSU, J. ZHONG and H.-B. SCHÜTTLER, “Berry Phases and Pairing Symmetry in Holstein-Hubbard Polaron Systems,” *Phys. Rev. B* **59**, 1444-1467 (1999).

L. LI, R. L. FU, X. SUN and K. YONEMITSU, “Electric-Field Response of Exciton in Electroluminescent Polymer,” *Phys. Status Solidi B* **214**, 337-342 (1999).

J. KISHINE and K. YONEMITSU, “Anisotropic Renormalization-Group Flow of Quasiparticle Weight in a Two-Dimensional Electron System with a Partially Flat Fermi Surface,” *Phys. Rev. B* **59**, 14823-14826 (1999).

J. KISHINE and K. YONEMITSU, “Spin-Density-Wave Phase Transitions in Quasi-One-Dimensional Dimerized Quarter-Filled Organic Conductors,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 2790-2801 (1999).

Y. IMAMURA, S. TEN-NO, K. YONEMITSU and Y. TANIMURA, “Structures and Electronic Phases of the Bis(ethylene-dithio)tetrathiafulvalene (BEDT-TTF) Clusters and κ-(BEDT-TTF) Salts: A Theoretical Study Based on Ab initio Molecular Orbital Methods,” *J. Chem. Phys.* **111**, 5986-5994 (1999).

H. JIANG, X. H. XU, X. SUN and K. YONEMITSU, “Localized Vibrational Modes of Excitation in Electroluminescent Polymers,” *Chin. Phys. Lett.* **16**, 836-837 (1999).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

J. KISHINE and K. YONEMITSU, “Effects of Dimerization and Interchain One-Particle Hopping in a Weakly Coupled Dimerized Chain System at Quarter Filling,” *Synth. Met.* **103**, 1833-1834 (1999).

M. MORI, K. YONEMITSU and H. KINO, “Possible Magnetic Phases in Two-Band Systems with Different Dimensionality,” *Synth. Met.* **103**, 1883-1884 (1999).

T. OGAWA and K. YONEMITSU, “Conductivity and Magnetic Properties of One-Dimensional Heisenberg-Kondo Lattice,” *Synth. Met.* **103**, 2149-2150 (1999).

K. YONEMITSU, “Renormalization-Group Study of Competition between Density Waves and Pairing in Quasi-One-Dimensional Electron Systems,” *Synth. Met.* **103**, 2216-2217 (1999).

M. OGATA, N. KOBAYASHI and K. YONEMITSU, “Coexistence of SDW and Purely-Electronic CDW in Quarter-Filled Organic Conductors,” *Synth. Met.* **103**, 2242-2243 (1999).

X. H. XU, R. T. FU, X. SUN and K. YONEMITSU, “A Correlated-Basis-Function Study of SDW in Polymers,” *Synth. Met.* **103**, 2337-2338 (1999).

J. KISHINE and K. YONEMITSU, “Geometry, Universality and Dimensional Crossovers in Weakly-Coupled One-Dimensional Conductors,” *Synth. Met.* **103**, 2650 (1999).

B-4) 招待講演

岸根順一郎,「擬１次元電子系におけるインコヒーレント金属状態からの相転移～ TM 系のスピン密度波転移を中心にして～」, 東大駒場物性セミナー , 東京大学 , 1999 年 2 月 .

岸根順一郎,「擬１次元伝導体～量子揺らぎと次元性が引き起こす相転移とクロスオーバー～」, 東大物工鹿野田研セミナー , 東京大学 , 1999 年 4 月 .

岸根順一郎、米満賢治,「擬１次元電子系の量子揺らぎと次元性が引き起こす相転移とクロスオーバー」, 物性研

短期研究会「強相関電子系としての分子性導体」, 東京大学 , 1999 年 5 月 .

岸根順一郎 ,「低次元電子系における相関と乱れと次元性のインタープレイ」, 超伝導若手の学校 , 浜松市 , 1999 年 7 月 .

岸根順一郎 ,「スピンギャップと電荷ギャップ」, 有機固体若手の学校 , 淡路島 , 1999 年 7 月 .

米満賢治 ,「二量化した低次元導体の電子相関―Pd(dmit)2 塩と MMX 鎖を中心として―」, 日本物理学会 1999 年秋の分科会特別講演 , 岩手大学 , 1999 年 9 月 .

米満賢治 ,「擬 1 次元電子系における電子相関と乱れの効果―DCNQI 塩を中心に―」, 物理学科コロキウム , 東邦大学 , 1999 年 11 月 .

K. YONEMITSU, “Electronic Phases in Strongly-Dimerized Low-Dimensional Conductors —Pd(dmit)$_2$ Salts and MMX Chains—,” International Workshop on Control of Conduction Mechanism in Organic Conductors (ConCOM'99), Hachioji (Japan), November 1999.

米満賢治 ,「擬 1 次元電子系における次元性と電子相関による次元クロスオーバー」, 応用物理学科コロキウム , 大阪市立大学 , 1999 年 12 月 .

米満賢治 ,「擬 1 次元電子系における次元性，ギャップ，局在と電子状態」, 応用物理学教室談話会 , 名古屋大学 , 1999 年 12 月 .

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-).

学術雑誌編集委員

「日本物理学会誌」編集委員(1998-1999).

B-7) 他大学での講義，客員

大坂市立大学工学部 ,「特別講義 III：低次元有機導体の物性理論」, 1999 年 12 月 7 日－ 8 日 .

名古屋大学大学院工学研究科 ,「低次元分子性導体の物性理論」, 1999 年 12 月 13 日－ 15 日 .

C) 研究活動の課題と展望

電子的に低次元な物質は多様な電子状態を示し，個々を記述することは比較的容易であっても，その全体像を整理することは容易でない。有機導体の場合はπ電子が物性の主な担い手なので，バンド描像から出発して概要を押さえ易い。しかし，d電子が活躍する金属錯体では必ずしもそうでない。物性を左右するパラメタがあまりにも多いことがよくあるからである。最近はπ電子系でも様々な電荷秩序が報告され，一筋縄でいかなくなってきている。低温で電子状態の対称性が高温と比べてどう低下するかといった，静的な情報からはあまり多くのことが導けない。今後は動的な情報，つまりスピン，電荷，格子それぞれのチャンネルの励起スペクトルにみられる次元性や電子相関の効果を的確に記述することが必要である。さらに, 光照射など外場を加えたあとでの時間変化, つまり非線型励起状態の動力学と多電子の協力現象の絡み合いといった非平衡系での物性が面白いテーマとなると考えている。そういった意味で，絶縁体間転移により自発的に電荷が分極する系として，交互積層型の電荷移動錯体やハロゲン架橋複核金属錯体の最近の実験に大きな興味を持っている。

3-3　分子構造研究系

分子構造学第一研究部門

齋　藤　修　二（教授）*)

A-1) 専門領域：高分解能分子分光、宇宙電波分光

A-2) 研究課題：

a) 星間関連短寿命分子のミリ波・サブミリ波分光と分子構造

b) サブミリ波・遠赤外高感度分光法の開拓

c) 分子雲の星間化学

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)　FO ラジカルのサブミリ波スペクトルの検出

FOラジカルは酸化ハロゲンラジカルの中でも最も基本的なラジカルであり, フッ素の酸化反応や含フッ素有機化合物の酸化反応において要となるラジカルである。70年代後半，その赤外スペクトルが主にレーザー分光法により明らかにされて以来, FOラジカルのマイクロ波スペクトルの検出が多くの研究者により試みられてきた。しかし，その双極子モーメントが非常に小さい（$\mu_0 = 0.0043D$）ため長い間未検出であった。今回，電子基底状態にある FO ラジカルの磁気双極子許容純回転遷移を 220–410 GHz のミリ波サブミリ波領域でマイクロ波分光としては初めて検出，測定することができた。FO ラジカルの生成には効率の良いオゾンとフッ素原子の反応を用いた。スペクトルを解析の結果，回転定数，遠心力歪定数，Λ型結合定数，フッ素核の超微細結合定数などを非常に精密に決定することができた。FO ラジカルの分光学的な特性の解明がこれにより最終的に終了した。

a-2)　新しい遷移金属水酸化化合物，CuOH，AgOH および同位体種のマイクロ波スペクトル：分子構造と分子力場の決定

前年度のリポートで，遷移金属水酸化化合物である CuOH のマイクロ波スペクトルを初めて検出したことを報告した。これに続いて，AgOH のマイクロ波スペクトルも初めて明らかにした。両水酸化物は，これまで知られている多くの金属水酸化物と異なり，直線でなく曲がった構造を示す。初めての遷移金属水酸化物の精密な構造と結合状態を明らかにする目的で，今回，両種の重水素置換体のマイクロ波スペクトルを測定した。それぞれの分子種について得られた分子定数から分子力場を決定し，これを用いて，調和振動の効果を除いた零点平均構造を精密に決定した。この結果，これらの分子の金属ー酸素結合が典型的なイオン結合と共有結合の中間にあることが明らかになり，両結合の力の釣り合いとして金属ーOH 結合が三角形になることが明瞭に示された。

b) 重水素化合物の星間化学ー重水素濃縮と分子雲コアの進化年齢：前年度のリポートで，星間重水素化合物の重水素濃縮度を利用すれば，分子雲コアの進化年齢を見積もることができることを，牡牛座暗黒星雲 TMC-1 のリッジについて，c-C_3HD の濃縮度を用いて示した。その後，この方法の適用範囲や信頼性を調べる目的で，分子雲の水

素密度，金属原子の存在度，C 及び O 原子の存在度，さらには宇宙線によるイオン化率に対する濃縮度の依存性を調べた．その結果，TMC-1 のような一つの分子雲については，金属存在度，C/O 存在度，イオン化率はある程度一定と仮定できるが，水素密度の変動は考慮する必要があることが分かった。さらに，c-C_3HD の生成の要の反応である $C_3H_3^+ + HD \rightarrow C_3H_2D^+ + H_2$ が反応の出口に 4 eV 程度のポテンシャルバリヤーを持つことが分かり，高濃度の c-C_3HD の生成には別の経路を考慮する必要があることが分かった。

しかし，表題の考え方は初めての提案なので，これを裏付ける実際例として，TMC-1 について他に唯一報告されている DCO^+ にも適用し，TMC-1 リッジのコアの進化年齢を同様に見積もることができることを示した。

c) 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である口径 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，富士山頂に昨年度設置した。望遠鏡には 346 GHz および 492 GHz の受信機を備え，衛星通信を利用して遠隔制御する。昨年11月より今年２月まで，中性炭素および ^{13}CO のサブミリ波スペクトルを代表的な巨大分子雲，暗黒星雲，超新星分子雲についてサーベイ観測を行った。特に中性炭素のスペクトル線輝度の分布から分子雲形成過程についての新しい情報が得られつつある。また，今年度は中性炭素のもう一つのスペクトル線（$^3P_2$–$^3P_1$）を観測する目的で 809 GHz の受信機を開発し，今年夏望遠鏡に設置し，今年冬から実際の観測に用いはじめた。この結果，中性炭素の正確な柱密度の見積もりが可能となり，分子雲形成初期過程の定量的な検討が容易になる。

B-1) 学術論文

H. S. P. MUELLER, H. KLEIN, S. P. BELOV, G. WINNEWISSER, I. MORINO, K. M. T. YAMADA and S. SAITO, “Terahertz Spectroscopy of the Amidogen Radical, NH_2,” *J. Mol. Spectrosc.* **195**, 177-184 (1999).

C. J. WITHAM, H. OZEKI and S. SAITO, “Microwave Spectroscopic Detection of Transition Metal Hydoxides: CuOH and AgOH,” *J. Chem. Phys.* **110**, 11109-11112 (1999).

M. ARAKI, H. OZEKI and S. SAITO, “Microwave Spectrum of the Inversion-Rotation Transitions of the D_3O^+ Ion: $\Delta k = \pm 3n$ Interaction and Equilibrium Structure,” *Mol. Phys.* **97**, 177-183 (1999).

H. MAEZAWA, M. IKEDA, T. IYO, G. SAITO, Y. SEKIMOTO, S. YAMAMOTO, K. TATEMATSU, Y. ARIKAWA, Y. ASO, T. NOGUCHI, S. SHI, K. MIYAZAWA, S. SAITO, H. OZEKI, H. FUJIWARA, M. OHISHI and J. INATANI, “Large-Scale Mapping Observations of the C_I $^3P_1$-$^3P_0$ Line toward Heiles Cloud 2 in the Taurus Dark Cloud,” *Astrophys. J.* **524**, L129-L132 (1999).

S. SAITO and S. YAMAMOTO, “The Microwave Spectrum of a New-Phosphorus Bearing Radical $CH_2P(^2B_2)$,” *J. Chem. Phys.* **111**, 7916-7920 (1999).

M. TANIMOTO and S. SAITO, “Microwave Spectroscopic Study of the SiF_3 Radical: Spin-Rotation Interaction and Molecular Structure,” *J. Chem. Phys.* **111**, 9242-9247 (1999)

C. J. WHITHAM, H. OZEKI and S. SAITO, “Microwave Spectra of CuOD and AgOD: Molecular Structure and Harmonic Force Field of CuOH and AgOH,” *J. Chem. Phys.* **112**, 641-646 (1999).

B-3) 招待講演

S. SAITO, “High-Sensitivity Submillimeter-Wave Spectroscopy of Transient Molecules,” 54th International Symposium on Molecular Spectroscopy, Columbus (Ohio), June 1999.

S. SAITO, “Laboratory Millimeter- and Submillimeter-Wave Spectroscopy,” Panel Discussion for Molecular Data Needs, IAU (International Astronomical Union) Symposium 197, Astrochemistry: From Molecular Clouds to Planetary Systems, Sogwipo (Cheju), August 1999.

B-4) 受賞，表彰

齋藤修二 , 分子科学研究奨励森野基金(1985).

齋藤修二 , 仁科記念賞(1991).

齋藤修二 , 東レ科学技術賞(1993).

B-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(1995-1999).

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).

第 24 回国際天文連合（IAU）総会 JD1 科学組織委員(2000).

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).

＊）1999 年 3 月停年，8 月福井大学・遠赤外領域開発研究センター教授

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) ヘリウム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) ヘリウム原子のレーザー冷却・トラップの研究：レーザートラップ可能な最も軽い原子であるヘリウム原子を対象として，レーザー冷却・トラップの研究を行なっている。レーザー冷却により超低速となった原子同士の衝突現象は，極めて微弱な摂動にも敏感であることや限られた低次の部分波のみによる衝突であることなどの著しい特徴を持つため，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。本年は，前年に行った理論解析をさらに進め，ヘリウム原子の極低温衝突に見られる同位体差とクリプトン原子やキセノン原子の極低温衝突に見られる同位体差との違いの原因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：液体ヘリウム中に置かれた原子やイオンは泡や氷球を作ってその中に納まっていると考えられるが，それらの原子やイオンのスペクトルを測定することによって泡や氷球の状態さらには液体ヘリウムそのものの性質を微視的に調べることが出来る。本年は，前年に観測された液体ヘリウム中の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の詳しい理論的解析を行い，液体ヘリウムの泡の四重極振動による動的ヤン・テラー効果がそれらのスペクトルに大きな影響を与えていることを明らかにした。また，液体ヘリウム - ３中のマグネシウム原子およびカルシウム原子のスペクトルを実験的に観測し，液体ヘリウム - ４中のそれらの原子のスペクトルとは大きな違いがあることを見出すとともに，その違いの原因をそれぞれの液体ヘリウムの量子統計性の違いや密度の違いなどから理論的に説明することが出来た。

B-1) 学術論文

A. TORII, R. S. HAYANO, M. HORI, H. T. ISHIKAWA, N. MORITA, M. KUMAKURA, I. SUGAI, T. YAMAZAKI, B. KETZER, F. J. HARTMANN, T. von EGIDY, R. POHL, C. MAIERL, D. HORVATH, J. EADES and E. WIDMANN, “Laser measurements of the density shifts of resonance lines in antiprotonic helium atoms and stringent constraint on the antiproton charge and mass,” *Phys. Rev. A* **59**, 223-229 (1999).

Y. MORIWAKI and N. MORITA, “Ultraviolet spectra of Mg in liquid helium,” *Eur. Phys. J. D* **5**, 53-57 (1999).

M. KUMAKURA and N. MORITA, “Laser trapping of metastable 3He atoms: Isotopic difference in cold Penning collisions,” *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2848-2851 (1999).

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大きな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，それを基にして新たな装置を製作してトラップ原子数の飛躍的な増加を図り，準安定ヘリウム原子気体におけるボーズ凝縮の実現を目指したい。液体ヘリウム中の原子・イオンのレーザー分光については，実験装置や測定系の改良によってさらに多くの種類の原子やイオンに対する観測を進めて行きたい。特にイオンに関しては，超流動液体ヘリウム中のRFイオントラップを実現し，イオン種の選択的観測を行うとともに，イオンの寿命を延ばすことを考えている。

分子動力学研究部門

北　川　禎　三（教授）

A-1) 専門領域：振動分光学、生物物理化学

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

h) タンパク質のフォルディング／アンフォルディングの初期過程

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。$O_2 \rightarrow H_2O$ を触媒するチトクロム酸化酵素，$O_2 \rightarrow H_2O + SO$ を触媒するチトクロム P-450，$H_2O_2 \rightarrow H_2O$ を触媒するペルオキシダーゼ等のヘム環境の特色，その反応中間体である高酸化ヘムの Fe^{IV}=O 伸縮振動の検出等，この分野の国際的フロンティアをつくっている。小倉助手のチトクロム酸化酵素による O_2 還元機構の研究は1993年の化学会進歩賞受賞の栄誉に輝いた。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。1997年には，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) 金属ポルフィリン励起状態のダイナミクスのピコ秒時間分解ラマンが現在の仕事の中心，振動緩和の測定で振動エネルギー再分配に新しい発見をして1999年に *J. Chem. Phys.* に印刷された。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調べる一方，金属ポルフィリンダイマーの励起状態 π-π 相互作用をピコ秒ラマンで見つけた。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もみつけている。

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末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。

h) ナノ秒温度ジャンプ法を用いてウシのリボヌクレアーゼAの熱アンフォルディングのナノ秒時間分解ラマンの測定に成功。タンパク質のナノ秒温度ジャンプでは世界で初めてのデータである。

B-1) 学術論文

T. KOHZUMA, T. INOUE, F. YOSHIZAKI, Y. SASAKAWA, K. ONODERA, S. NAGATOMO, T. KITAGAWA, S. UZAWA, Y. ISOBE, Y. SUGIMURA, M. GOTOWDA and Y. KAI, “The structure and unusual pH-dependence of plastocyanin from the fern Dryopteris crassirhizoma: The protonation of an active-site histidine is hindered by π-π interactions,” *J. Biol. Chem.* **274**, 11817 (1999).

S. NAKASHIMA, S. TANIGUCHI, T. OKADA, A. OSUKA, Y. MIZUTANI and T. KITAGAWA, “Evidence for π-π interactions in the S_1 state of Zn porphyrin dimers revealed by picosecond time-resolved resonance Raman spectroscopy,” *J. Phys. Chem. A* **46**, 9184 (1999).

S. KAMINAKA, Y. IMAMURA, M. SHINGU, T. KITAGAWA and T. TOYODA, “Studies of bovine enterovirus structure by ultraviolet resonance Raman spectroscopy,” *J. Virol. Methods* **77**, 117 (1999).

A. WADA, S. OGO, Y. WATANABE, M. MUKAI, T. KITAGAWA, K. JITSUKAWA, H. MASUDA and H. EINAGA, “Synthesis and characterization of novel alkylperoxo mononuclear iron(III) complexes with a tripodal pyridylamine ligand: A model for peroxo intermediates in reactions catalyzed by non-heme iron enzymes,” *Inorg. Chem.* **38**, 3592 (1999).

T. IWASE, C. VAROTSIS, K. SHINZAWA-ITOH, S. YOSHIKAWA and T. KITAGAWA, “Infrared evidence for CuB ligation of photodissociated CO of cytochrome *c* oxidase at ambient temperatures and accompanied deprotonation of a carboxyl side chain of protein,” *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 1415 (1999).

T. TOMITA, S. HIROTA, T. OGURA, J. S. OLSON and T. KITAGAWA, “Resonance Raman investigation of Fe-N-O structure of nitrosylheme in myoglobin and its mutants,” *J. Phys. Chem. B* **103**, 7044 (1999).

S. NAGATOMO, M. NAGAI, A. TSUNESHIGE, T. YONETANI and T. KITAGAWA, “UV resonance Raman studies of α-nitrosyl hemoglobin derivatives: Relation between the α1-β2 subunit interface interactions and the Fe-histidine bonding of α heme,” *Biochemistry* **38**, 9659 (1999).

N. SUZUKI, T. HIGUCHI, Y. URANO, K. KIKUCHI, H. UEKUSA, Y. OHASHI, T. UCHIDA, T. KITAGAWA and T. NAGANO, “Novel Iron Porphyrin-alkanethiolate complex with intramolecular NH…S hydrogen bond: Synthesis, spectroscopy and reactivity,” *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 11571 (1999).

S. ITOH, H. BANDOH, S. NAGATOMO, T. KITAGAWA and S. FUKUZUMI, "Aliphatic hydroxylation by a bis(μ-oxo)dinickel(III) complex," *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 8945 (1999).

M. NAGAI, H. WAJCMAN, A. LAHARY, T. NAKATSUKASA, S. NAGATOMO and T. KITAGAWA, "Quaternary structure sensitive tyrosine residues in human hemoglobin: UV resonance Raman studies of mutants at α140, β35, and β145 tyrosine," *Biochemistry* **38**, 1243 (1999).

Y. MIZUTANI, Y. UESUGI and T. KITAGAWA, "Intramolecular vibrational energy redistribution and intermolecular energy transfer in the (d,d) excited state of nickel octaethylporphyrin," *J. Chem. Phys.* **111**, 8950 (1999).

Y. MIZUTANI, Y. UESUGI and T. KITAGAWA, "Vibrational energy relaxation in the (d,d) excited state of nickel octa-ethylporphyrin," *Laser Chem.* **19**, 275 (1999).

S. ITOH, M. TAKI, S. TAKAYAMA, S. NAGATOMO, T. KITAGAWA, N. SAKURADA, R. ARAKAWA and S. FUKUZUMI, "Oxidation of benzyl alcohol with Cu^{II} and Zn^{II} complexes of the phenoxyl radical as a model of the reaction of galactose oxidase," *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **38**, 2774 (1999).

B-4) 招待講演

T. KITAGAWA, "Cooling Behavior of the Fe-histidine Bond of Heme Heated by Photodissociation of Carbonmonoxy Myoglobin," Intrl. Conf. Time-Resolved Vibrational Spectroscopy, Tucson (Arizona), May 1999.

T. KITAGAWA, "Time-Resolved Resonance Raman Investigation of Fast Responses of the Heme Moiety upon Photo-dissociation of Carbonmonoxy Myoglobin," Intrl. Workshop on Efficient Energy Localization and Transduction in Life, Soft Matter and New Artificial Materials, Los Alamos (New Mexico), June 1999.

T. KITAGAWA, "Time-Resolved Resonance Raman Study on Terminal Oxidases," Bioenergetic Mechanisms in Multi-center Redox Enzymes, Heraklion (Crete), June 1999.

T. KITAGAWA, "Cooling Dynamics of CO-photodissociated Myoglobin," Telluride Workshop on Protein Dynamics Telluride, Colorado, July 1999.

T. KITAGAWA, "Vibrational Relaxation of Electronically Excited Metalloporphyrin in Protein Matrix and Organic Solvents Probed by Pico-second Time-Resolved Resonance Raman Spectroscopy," 19th Intl. Conf. Photochemistry, Duke Univ., Durham (North Carolina), August 1999.

T. KITAGAWA, "Structures of Heme-Oxygen Intermediates of Terminal Oxidases: Comparison between Bovine Cytochrome *c* Oxidase and *E. Coli* Cytochrome bo," 4th Workshop on Molecular Biometallics, November 1999.

Y. MIZUTANI, "Fast Protein Dynamics Probed by Vibrational Spectroscopy," The 24th Taniguchi International Symposium on "Old and New Views of Protein Folding," Chiba (Japan), March 1999.

Y. MIZUTANI, "A Role of Solvent in Vibrational Energy Relaxation of Metalloporphyrins," 26th International Conference on Solution Chemistry, Fukuoka (Japan), July 1999.

Y. MIZUTANI, "Fast Protein Dynamics Probed by Time-resolved Raman Spectroscopy: Ultrafast Dynamics of Myoglobin Triggered by CO Photolysis," Symposium on "Protein Dynamics Studied by Advanced Spectroscopic Methods," Kobe (Japan), November 1999.

北川禎三,「時間分解共鳴ラマン分光法によるヘム蛋白及び金属ポルフィリンの振動緩和の研究」, 分子構造総合討論会 , 大阪 .

北川禎三,「立体構造ダイナミックスを測定する」, 第 14 回「大学と科学」公開シンポジウム , 生物の働きを生み出すタンパク質のかたち , 神戸 .

北川禎三,「呼吸酵素の構造と機能」, 第 17 回物性物理化学研究会「物性物理化学の基礎と創薬の道のり」, 京都 .

北川禎三,「時間分解共鳴ラマン分光法によるチトクロムc酸化酵素の反応機構の解明」, 構造生物学国際シンポジウム , 大阪 .

水谷泰久,「ヘム蛋白質における高速現象」, 分子研研究会「分子及び分子小集団の超高速動力学」, 岡崎 .

水谷泰久,「液相の時間分解振動分光－光化学反応とそれに伴う緩和過程を中心に－」, 第 39 回分子科学夏の学校（講師）, 山梨 .

B-5) 受賞、表彰

北川禎三 , 日本化学会学術賞(1988).

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), 委員長(1999).

日本生化学会評議員 .

日本化学会東海支部副支部長(1999).

学会の組織委員

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

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

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

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

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

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, Nov. 11-15 (1998).

文部省、学術振興会等の役員等

文部省学術審議会科研費分科会理工系小委員会委員(1997-1998).

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査委員(1991-1993, 1995-).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員(1992-1993, 1994-1995, 1996-1997, 1998-1999).

日本学術振興会国際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, Editorial Board (1993-).

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

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

Journal of Biological Inorganic Chemistry, Editorial Board (1999-).

科学研究費の研究代表者、班長等

重点研究「生物無機」班長(1991-1993).

総合研究(B)班長(1994, 1995).

重点研究「生体金属分子科学」領域代表者(1996-1999).

B-7) 他大学での講義

大阪大学工学研究科 , 応用化学 , 精密化学専攻集中講義 , 1999 年 4 月 .

大阪大学工学研究科応用物理学専攻特別講義 , 1999 年 9 月 .

総合研究大学院大学光科学専攻講義 , 1999 年 5 月 .

総合研究大学院大学機能分子 , 構造分子科学専攻集中講義 , 1999 年 12 月 .

C) 研究活動の課題と展望

a) チトクロム酸化酵素における電子移動とプロトン輸送とのカップリング機構の解明

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ブ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) 液晶系の振動ラマン分光

c) フラーレン類のラジカルの磁気共鳴分光

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1,4-dibromonaphthalene単結晶の励起三重項エキシトンに関する光ラマンビート検出磁気共鳴測定に成功した。

b) 液晶系の振動ラマン分光：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。今年度は反強誘電性を示すMHPOBC液晶について、一連の相転移にともなう配向オーダーパラメータを調べた。

c) フラーレン類のラジカルの磁気共鳴分光：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，La@C_{82} の分子の ^{13}C と ^{139}La の超微細構造に由来するパルスESR信号の電子スピンエコーエンベロップ変調信号を発見した。

B-1) 学術論文

M. MATSUSHITA and T. KATO, “NQR by Coherent Raman Scattering of a Triplet Exciton in a Molecular Crystal,” *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2018-2021 (1999).

M. KATO, C. KOSUGE, K. MORII, T. S. AHN, H. KITAGAWA, T. MITANI, M. MATSUSHITA, T. KATO, S. YANO and M. KIMURA, “Luminescence Properties and Crystal Structures of Dicyano(diimine)platinum(II) Complexes Controlled by Pt-Pt and p-p Interactions,” *Inorg. Chem.* **38(7)**, 1638-1641 (1999).

T. AKASAKA, S. OKUBO, T. WAKAHARA, K. YAMAMOTO, K. KOBAYASHI, S. NAGASE, T. KATO, M. KAKO, Y. NAKADAIRA, Y. KITAYAMA and K. MATSUURA, “Endohedrally Metal-Doped Heterofullerenes: La@C_{81}N and La_2@C_{79}N,” *Chem. Lett.* 945-946 (1999).

M. KUMAGAI, H. KANAMORI, M. MATSUSHITA and T. KATO, “Development of Phase-lock System between Two Single-Mode Lasers for Optical-Optical Double Resonance Spectroscopy,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, 466-470 (1999).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. KATO, K. YAMAMOTO, S. OKUBO and T. AKASAKA, “Spin Chemistry of Metallofullerenes,” *Proceedings of the Symposium on Recent Advances in the Chemistry and Physics of Fullerenes and Related Materials* **7**, K. M. Kadish, Ed., The Electrochemical Society, Inc., Pennington (1999).

N. HAYASHI and T. KATO, “State Correlated Raman Spectroscopy,” *Proceedings of the International Conference of the Two-Dimensional Correlation Spectroscopy*, Y. Ozaki and I. Noda, Eds., American Institute of Physics, New York (1999).

B-3) 総説、著書

T. KATO, “Spectroscopic Studies on Radicals of Fullerenes,” *Recent Research and Development in Physical Chemistry* **2**, Transworld Research Network, pp. 981-1010 (1998).

加藤立久，「講座：液晶の実験分光学『第２回：Raman 分光（その１）』」, *液晶* **2**, 214-221 (1998); 「講座：液晶の実験分光学『第２回：Raman 分光（その２）』」, *液晶* **2**, 317-323 (1998).

B-4) 招待講演

T. KATO, “Spin Chemistry of Metallofullerenes,” The Symposium on Recent Advances in the Chemistry and Physics of Fullerenes and Related Materials in the Electrochemical Society Meeting, Seattle, Washington (U. S. A.), May 1999.

T. KATO, “State Correlated Raman Spectroscopy,” the International Conference of the Two-Dimensional Correlation Spectroscopy, Kobe-Sanda (Japan), September 1999.

C) 研究活動の課題と展望

今年度補正予算で研究所に導入された，W－バンド（95GHz）パルスESR装置は，我々の金属内包フラーレンの磁気共鳴分光研究に大きな新しい展開をもたらし得る。また，光ラマンビート検出法による磁気共鳴分光との関連で，光と磁気共鳴測定の接点としても新しい方向を示すことができる。液晶系の振動ラマン分光研究では，反強誘電液晶系に関する測定結果の蓄積ができはじめ，この特殊な液晶系の相状態に分子科学論的な検討を加えていける。

3-4　電子構造研究系

基礎電子化学研究部門

西　　信　之（教授）

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分子間相互作用と電荷移動・エネルギー移動ダイナミックス

c) 光によるスーパークラスターの生成と構造・反応・物性

d) 溶液中の有機分子およびクラスターのイオン化過程と構造・イオン分子反応

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 水は，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が，アルコールやカルボン酸などの会合性分子を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。低振動数ラマンスペクトルやAb Initio 振動数計算，平田グループとのRISM計算による水溶液中の酢酸分子の会合状態の研究から，水の中では酢酸が大きな双極子を持つサイドオン型ダイマーを単位としてクラスターを形成する「Micro Phase」として存在していることを明らかにしてきた。これは，1）溶質分子が水の中にばらまかれる時に生じる水構造の破壊を最小限に押さえるには，溶質が集合して，出来るだけ水の構造発生に有利な広い空間を生じること，２）溶質同士の相互作用エネルギーが最大になるような最密構造が実現していること，３）溶質，溶媒の両「Micro Phase」の幅広いサイズ分布，構造分布の出現によりエントロピー的にも有利になるという条件が満たされるためであると考えられる。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。

b) タンパク質や生体の膜の中で，様々な官能基がどのような相互作用をするかは，極めて重要な問題である。我々は，ベンゼン環とカルボキシル基との相互作用様式を，気相から調べ始めている。カルボン酸がベンゼン陽イオンに付加する時は，これが水素原子受容体として作用し，ベンゼン環の水素原子に平面内で２個ないし１個の酸素原子が水素結合することが解った。特に，２個の酸素原子がベンゼン環の２個の C-H と結合する時は，カルボン酸の OH の水素原子はアルキル基側に向く anti- 構造をとることが，赤外光解離分光によって明らかになった。カルボン酸が２個以上ベンゼン環と相互作用するクラスターでは，カルボン酸が環状２量体となってベンゼン環にスタックすることが解った。

一方，電荷共鳴相互作用により安定化しているベンゼン２量体にアルゴン原子を付着させたクラスターのC-H 伸縮振動を励起し，その解離過程を調べたところ，結合が強いベンゼン環同士が解離し，弱くしか結合していないアルゴン原子はフラッグメントのモノマーカチオンに付着したまま飛んでいった。これは，振動エネルギーの分

子内移動の後，ベンゼン環同士の分子間伸縮振動は励起されるが，アルゴン原子とベンゼン環との分子・原子間モードは励起されず, アルゴンがスペクテイターとして振る舞っていることになる。このような大きなクラスター系でもエネルギー移動は完全には熱的に平衡になっておらず，エネルギー移動のコヒーレンスが存在している可能性が高い。

c) 12個以上の金属原子サイトを持つ，酸化バナジウムクラスターの長球状のシェルの中に，コアとなる分子やクラスターを閉じ込め，バナジウム原子間の超交換相互作用が最適となる構造を持つために，大きなスピンを有する磁性分子の合成反応の開発を行っている。また，その反応機構の分光学的追跡を行うと同時に，溶液中でのクラスター成長過程を時間的に追跡する，新しい液体質量分析計の開発を行っている。

d) 波長可変フェムト秒紫外励起ピコ秒共鳴ラマン分光法を用いて，溶液中の有機分子のイオン化に伴う構造変化や反応過程を追跡する装置を立ち上げ，溶液中クラスター内イオン－分子反応の動的過程の研究を始めている。

B-1) 学術論文

K. OHASHI, Y. NAKANE, Y. INOKUCHI, Y. NAKAI and N. NISHI, “Photodissociation Spectroscopy of (Benzene-Toluene)$^{+}$. Charge Delocarization in the Hetero-dimer Ion.” *Chem. Phys.* **238**, 429-436 (1998).

N. NISHI, “Water and Alcohols: Searching the Nature of Mixture States at Molecular Levels,” *Bull. Cluster Sci. Tech.* **2**, 3-7 (1999).

T. NAKABAYASHI, K. KOSUGI and N. NISHI, “Liquid Structure of Acetic Acid Studied by Raman Spectroscopy and Ab Initio Molecular Orbital Calculations,” *J. Phys. Chem. A* **103**, 8595-8603 (1999).

T. TAKAMUKU, A. YAMAGUCHI, M. TABATA, N. NISHI, K. YOSHIDA, H. WAKITA and T. YAMAGUCHI, “Structure and Dynamics of 1,4-Dioxane-Water Binary Solutions Studied by X-ray Diffraction, Mass Spectrometry, and NMR Reaxation,” *J. Mol. Liq.* **83**, 163-177 (1999).

N. NISHI, T. NAKABAYASHI and K. KOSUGI, “Raman Spectroscopic Study on Acetic Acid Clusters in Aqueous Solutions:Dominance of Acid-Acid Association Producing Microphases,” *J. Phys. Chem. A* **103**, 10851-10858 (1999).

B-4) 招待講演

N. NISHI, “Charge Delocalization and charge Hopping in Benzene Cation Clusters and in the Liquid,” International Symposium on Molecular Clusters, Niderpöking (Germany), May 1999.

西　信之 ,「水の中のクラスター」, 福岡市民フォーラム , アクロス福岡 , 福岡 , 1999 年 8 月 29 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

学協会役員、委員

日本化学会学術活性化委員会委員 .

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

三重大学 ,「クラスター化学」, 平成 11 年度後期 .

C) 研究活動の課題と展望

溶液中のクラスターの局所構造の問題は奥が深く，特に機能発生との関係に重点を置く必要がある。生体系で重要な分子が何故カルボキシル基やフェニル基或いはイミダゾール基等を持つ必要があるのかは，これら官能基間の相互作用あるいは官能基と金属酵素部位との相互作用という観点から検討しなければならない。

遷移金属酸化物スーパークラスターの研究は，電子状態の観点から大変興味深い。単分子として磁性を示し，結晶化できる化合物としては，$Mn_{12}O_{12}(O_2CR)_{16}(H_2O)_4$ が知られているが，これを超える特性を出すには更に大きなネットワークを持つスーパークラスターの合成が必要である。このための学問的基礎はまだ弱く，これから新しい手法を次々と導入し，クラスター研究の新たな道を開拓しなければならない。

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

d) ２波長分光法を用いる超解像レーザー蛍光顕微法の研究

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_0，S_1 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。従来，赤外－紫外二重共鳴分光法の一種である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て基底状態 S_0 及び電子励起状態 S_1 での赤外スペクトルの観測を行い，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）との比較からクラスターの構造を明らかにしてきた。しかし，現有の超音速ジェット発生装置で観測できるクラスターは小さなものに限定されており，反応活性になる大きなクラスターの測定には試料源を分子線にし，かつ大きなマスまで測定できるTOF型質量分析器が不可欠であった。そこで本年度は分子線源とTOF質量分析器を有するクラスター分光装置を設計・製作し，現在装置の立ち上げ中である（科研費）。同時にプロトン移動反応に対する溶媒効果の系統的理解をめざし，ナフトール・アルコールクラスターへの展開も試みている。さらに，溶媒の極性により光励起反応が大きく異なる系としてカルバゾール溶媒和クラスターにも着目し，同様の手段により構造決定を試みている。

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状態のフェノール分子のOH高次倍音を測定し，線巾の変化からベンゼン環を有する大きな分子であっても分子内振動緩和は段階的に進む（doorway）事を示してきた。さらにこの方法を２個のOHを有するベンゼン誘導体・カテコールに応用し，意図的に振動数が近接した振動準位を導入することに依る分子内振動緩和の変化を調べた。

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。本年はCOE客員教授 Klaus Müller-Dethlefs ヨーク大教授（英国）と共に大振幅振動間の相互作用解明を意図し，*o*-cresolとその水素結合クラスターに本分光法を適用することに着手した。単量体に対する実験は既に得られており，クラスターについてはab initio MO計算による中性及びカチオンでのクラスター構造の推定を含めて実施予定である。

d) ２台のレーザーを用いる分光法は回折限界を凌駕する空間分解能（超解像）に展開できる。即ち，１色のレーザーを集光した際に出来る像は回折限界で制限されているが，２つのレーザー光の重なり部分を取り出せば回折限界以下の空間分解能が得られるはずである。このアイディアを元に原理確認実験を行なっている。

B-1) 学術論文

S. ISHIUCHI and M. FUJII, “Overtone Spectrum of Jet-cooled Phenol Studied by Nonresonant Ionization Detected IR Spectroscopy,” Resonant Ionization Spectroscopy, 9th International, American Institute of Physics, NY, pp. 137-142 (1998).

B-3) 総説、著書

Y. ENDO and M. FUJII, “Double Resonance (MODR, OODR) Spectroscopy,” *Nonlinear Spectroscopy for Molecular Structure Determination*, R. W. Field, E. Hirota, J. P. Maier and S. Tsuchiya, Eds., Blackwell Science, Chapter 2, pp.29-54 (1998).

藤井正明, 「レーザーによる高振動励起分子の観測と反応制御の可能性」, *レーザー研究* **27**, 404-410 (1999).

B-4) 招待講演

藤井正明, 「PFI-ZEKE 疑似光電子分光法」、フォトンファクトリー研究会「21世紀に向けての放射光原子分子科学研究」, 高エネルギー加速器研究機構 1999 年 1 月 .

M. FUJII, “Structure of Solvated Naphthol Clusters Studied by IR-UV Double Resonance Spectroscopy and Ab Initio MO Calculations,” 63rd Okazaki Conference on Laser Sperctroscopy of Molecular Clusters —Structure and Dynamics, Institute for Molecular Science, March 1999.

M. FUJII, “Structure of Solvated Naphthol Clusters Studied by IR-UV Double Resonance Spectroscopy,” Symposium on Molecular Clusters, Niederpöcking (Germany), March 1999.

藤井正明, 「分子振動の観測と分子切断」, 平成 11 年度分光学会シンポジウム , 東京医科大臨床講堂 , 1999 年 6 月 .

B-5) 受賞、表彰

日本化学会進歩賞受賞(1992).

山下太郎学術奨励賞受賞(1992).

分子科学奨励森野基金(1996).

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

分子科学研究会事務局 .

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 .

C)　研究活動の課題と展望

反応活性クラスターの研究で問題であった多量体クラスターの生成に関して，科研費により分子線源と高マスまで測定可能なリフレクトロン質量選別器を備えた真空装置を製作できることになった。現在真空装置のチェック，信号確認などを行なっており，バルブ，スキマーなどを工夫することで反応活性クラスターが自在に生成できることを期待している。1998年11月より助手の酒井誠君，1999年４月よりIMS fellowとして佐伯盛久君が研究室に加わった。酒井君は時間分解振動分光，佐伯君はイオンクラスターと量子化学計算のバックボーンを有しており，時間分解や多量体クラスターなど従来の課題解決への強力な戦力になると期待している。

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) 反応性散乱の交差分子線実験

b) 化学反応の立体動力学，ベクトル相関

c) 超高速光電子，光イオン画像観測法による化学反応の実時間観測

d) 超強レーザー場中の分子動力学

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) NO-Arの回転非弾性散乱の観測により交差分子線法画像観測装置の性能を試験した。$O(^1D)$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。

b) 光解離反応のベクトル相関について，フラグメント間の角運動量相関を取り入れ，Balint-Kurti and Shapiro の理論を拡張した。

c) 光電子散乱分布の画像化法とフェムト秒pump-probe法を組み合わせた新しい光電子分光法を開発した。同手法により，ピラジンの超高速電子位相緩和を検出した。

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画像化し，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

N. YONEKURA, C. GEBAUER, H. KOHGUCHI and T. SUZUKI, “A crossed molecular beam apparatus using high-resolution ion imaging,” *Rev. Sci. Instrum.* **70**, 3265 (1999).

Y. MO, H. KATAYANAGI and T. SUZUKI, “Probing the alignment of $NO(X^2\Pi)$ by [2+1] resonance-enhanced multiphoton ionization via $C^2\Pi$ state: A test of semiclassical theory in 355 nm photodissociation of NO_2,” *J. Chem. Phys.* **110**, 2029 (1999).

T. SUZUKI and N. HASHIMOTO, “Predissociation of acetylene from the $A(^1A_u)$ state studied by absorption, LIF, and H-atom action spectrocopies,” *J. Chem. Phys.* **110**, 2042 (1999).

T. SUZUKI, L. WANG and H. KOHGUCHI, “Femtosecond time-resolved photoelectron imaging on ultrafast electronic dephasing in an isolated molecule,” *J. Chem. Phys.* **111**, 4859 (1999).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

L. WANG, H. KOHGUCHI and T. SUZUKI, “Femtosecond time-resolved photoelectron imaging,” *Faraday Discuss. Chem. Soc.* **113**, 37 (1999).

B-4) 招待講演

T. SUZUKI, “Femtosecond time-resolved photoelectron imaging,” East Asian Workshop on Chemical Dynamics, Kyoto (Japan), March 17-19, 1999.

T. SUZUKI, “Femtosecond time-resolved photoelectron imaging,” XVI International Conference on Molecular Energy Transfer, Assisi (Italy), June 20-25, 1999.

鈴木俊法,「時間分解光電子画像分光」, 分子研研究会「分子及び分子小集団の超高速反応ダイナミクスに関する研究会」, 岡崎 , 1999 年 6 月 7, 8 日 .

T. SUZUKI, “Femtosecond time-resolved photoelectron imaging,” Service des Photons Atomes et Molecules, Saclay (France), June 30, 1999.

T. SUZUKI, “Femtosecond time-resolved photoelectron imaging,” Faraday Discussion of Royal Society of Chemistry, Leeds (U. K.), July 2-5, 1999.

T. SUZUKI, “Studies on molecular structure and dynamics by two-dimensional photoion/electron imaging with femtosecond lasers,” Workshop on Dynamical Stereochemistry, Sendai (Japan), July 21, 1999.

T. SUZUKI, “Femtosecond time-resolved photoelectron imaging spectroscopy on ultrafast molecular dynamics,” The International Symposium on Photo-Dynamics and Reaction Dynamics of Molecules, Okazaki (Japan), July 31-August 2, 1999.

T. SUZUKI, “Femtosecond time-resolved photoelectron imaging,” ACS meeting, Symposium on Imaging Chemical Dynamics, New Orleans (U. S. A.), August 23-26, 1999.

鈴木俊法,「反応動力学は分光学になった」, 分子研ミニ研究会「クラスター反応動力学若手放談会」, 岡崎 , 1999 年 10 月 12, 13 日 .

T. SUZUKI, “Time-resolved photoelectron imaging on ultrafast intramolecular dephasing,” 8th Asian Chemical Congress, Taipei (Taiwan), Nov. 22-24, 1999.

B-5) 受賞、表彰

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) 学会および社会的活動

学会の組織委員

第１回日本台湾分子動力学会議主催者(1997).

分子構造総合討論会プログラム委員(1997).

分子研ミニ研究会「化学反応動力学若手放談会」主催者(1998).

第１回東アジア分子動力学会議主催者(1998).

第１５回化学反応討論会組織委員(1999).

分子研研究会「分子及び分子小集団の超高速反応ダイナミクスに関する研究会」主催者(1999).

国際シンポジウム The International Symposium on Photo-Dynamics and Reaction Dynamics of Molecules プログラム委員(1999).

分子研ミニ研究会「クラスター反応動力学若手放談会」主催者(1999).

C)　研究活動の課題と展望

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，化学反応途中の分子における電子状態や核配置の変化を可視化する研究を進めている。このような研究は，化学の最も基礎であると同時に，非平衡条件下で進行する成層圏オゾン層あるいは星間空間での化学の解明に資するものである。今後は，溶液反応などの複雑多体系の動力学を新しい切り口で捉える実験研究にも挑戦していきたいと考えている。

電子構造研究部門（客員研究部門）

松　本　吉　泰（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) 銀酸素表面における光化学

d) 多光子光電子分光による表面電子状態の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 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。特に，この表面をN_2Oで表面第一層のみを酸化させた表面に注目して研究を行った。この表面でも稀ガスは物理吸着するが，清浄表面にくらべてより高い効率で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た。特に興味深い点は最も早い速度成分をもつ脱離チャンネルが光子エネルギー3.5 eV以上で開くことである。また，その並進速度分布は極めて非熱的であり，励起状態の失活速度が吸着種の表面からの距離に大きく依存していることがわかった。

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りメタンを活性化し，励起メカニズムをより明らかにすることを試みた。Pt(111)表面ではメタンの光化学反応が共吸着したCsによって大きく失活されることがわかった。励起メカニズムと仕事関数との関連について考察を行った。また，今まで研究を行ってきたPt(111)やPd(111)ではすべてメタンは解離か脱離をするのみであったが，Cu(111)面ではC-C結合反応が光化学的に起こり，エチレンが生成されることを見出した。

c) Ag(110)表面を酸化すると表面には(nx1)の銀酸素鎖からなる超構造が形成される。この表面に紫外光を照射すると酸素が消失することが報告されていた。しかし，そのメカニズムはまったく不明である。そこで，本研究ではXPS，TPDを用いてこの点を明らかにすることを目的として研究を行った。まだ，測定は初期的なものであるが，光照射によって酸素被覆率が減少すること，波長依存性があることなどを確認した。しかし，反応効率は低く，また，表面の準備方法によっても変化するため，これらの原因について検討を加えている。

d) 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。本年度は，フェムト秒チタンサファイアレーザーの２倍波と，これをXeセルに集光することによって得られた真空紫外光を用いたポンプ・プローブ２光子光電子分光の装置を製作した。従来の可視光のみを用いる２光子光電子分光ではフェルミ準位に近い非占有状態の観測が困難であるが，この方法では真空紫外光をプローブ光に用いることによりこの欠点を補うことができる。Pt(111)表面およびそれへの吸着種系について検討を進め，まず清浄Pt(111)表面において，これらの２光子の相関スペクトルをとることに成功した。また，Pt(111)

表面における sp バンド由来の表面状態や鏡像準位が Xe を吸着させることによりどのような影響を受けるかについて測定を行った。

B-1) 学術論文

K. WATANABE, Y. MATSUMOTO, M. KAMPLING, K. AL-SHAMERY and H-J FREUND, “Photochemistry of methane on Pd/Al_2O_3 model catalysts: Control of photochemistry on transition metal surfaces,” *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **38**, 2192 (1999).

B-4) 招待講演

Y. MATSUMOTO, “Photochemistry of Physisorbed Molecules: From Single Crystal Surfaces to Clusters,” NEDO Symposium on “Frontiers in Eelctronically Induced Surface Processes,” Hayama (Japan), February 1999.

Y. MATSUMOTO, “Excitation Mechanisms and Dynamics of Surface Photochemistry,” The 6th International Workshop on Femtosecond Technology, FST’99, Chiba (Japan), July 1999.

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).

日本学術振興会学術参与(1999-).

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「分子ー表面ダイナミクス」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 COE 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).

NEDO Symposium on “Frontiers in Eelctronically Induced Surface Processes” 組織代表者(1999).

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(1997-1999).

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。

3-5　分子集団研究系

物性化学研究部門

藥　師　久　彌（教授）

A-1) 専門領域：物性化学

A-2) 研究課題

a) フタロシアニン導体におけるπ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) フタロシアニン導体におけるπ電子・d電子相互作用の研究：フタロシアニン導体$NiPc(AsF_6)_{0.5}$に高圧力をかける事によりフタロシアニン中心金属のd電子が配位子のπ軌道へ電荷移動を起こす。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事を加圧下の電気抵抗の実験により証明し，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。また$NiPc(AsF_6)_{0.5}$と$CoPc(AsF_6)_{0.5}$の均一な混晶 $Ni_{1-x}Co_xPc(AsF_6)_{0.5}$ 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，$Co_{0.009}Ni_{0.991}Pc(AsF_6)_{0.5}$のESR信号に，コバルトの超微細構造を見出した。この実験によってコバルト上のスピンが $3d_{z^2}$ 軌道上の不対電子であること，またこの不対電子が金属絶縁体転移以上の温度でπ伝導電子と交換相互作用を起こしていることを直接捕らえることができた。また混晶にのみにおいて観測されるラマンバンドを見出し，これが共鳴効果によって強度が増大していることを証明した。

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π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）1:1 の組成をもつ金属的な電荷移動塩 DMTSA-BF_4 の起源を探るべく，多バンド電子系と 3 次元電子系の可能性を分光法によって調べたが，いずれも否定的で，単一バンドをもつ擬一次元電子系であることが分かった。見かけのオンサイトクーロンエネルギーは極めて小さく，このことが金属性の起源と思われる。また DMTSA を電子供与体とする物質探索の過程で，DMTSA-$FeCl_4$ が反強磁性状態へ転移（12 K）することを見出した。（２）非平面分子$(BEDT\text{-}ATD)_2X(solvent)$ ($X = PF_6, AsF_6, BF_4$; 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。この物質の絶縁相の構造解析を行ない，一部の塩で溶媒分子が秩序化している事を明らかにした。（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。昨年までの$(BDT\text{-}TTP)_2X$ ($X = SbF_6, AsF_6$)に加えて，$X = ClO_4, ReO_4$, さらに$(ST\text{-}TTP)_2AsF_6$, $(BST\text{-}TTP)_2AsF_6$ にも拡張して，移動積分に対して同様の結果を得た。また外側の硫黄をセレンに置換してもバンド構造に大きな変化が無いこともこの実験で明らかになった。また数多くの金属的な電荷移動塩を作る BDT-TTP 塩の中で例外的に絶縁化する θ-$(BDT\text{-}TTP)_2Cu(NCS)_2$ の電気抵抗が相転移を示す事，そして相転移に伴って反射率とラマンスペクトルが劇的な変化を起こす事を見出した。また 1:1 の(BDT-TTP)Br の電荷移動吸収遷移は2000 cm^{-1}という極めて低い位置に現れ，この分子のオンサイトクーロンエネルギーが小さいこ

とを実験的に証明した。（４）上記の現象を解明するために，諸性質が良く分かっており，かつ同様な構造を持つ θ-(BEDT-TTF)$_2$X (X = CsCo(SCN)$_4$, RbCo(SCN)$_4$)について反射分光法とラマン分光法の実験を開始した。相転移に際して θ-(BDT-TTP)$_2$Cu(NCS)$_2$ と同様な変化を起こす事を明らかにしたので，現在現象の解明に取り組んでいる。（５）BEDO-TTF のバンド構造を反射分光法で調べている過程で，水分子の脱着現象を発見すると共に，プラズモンの観測に成功した。プラズモンを正反射法で観測したのは極めて稀であり，勿論有機導体では初めてである。（６）$Et_4N(DMTCNQ)_2$ におけるサイトエネルギー差を反射分光法とラマン分光法を組み合わせることによって実験的に決定し，それをマーデルングエネルギーの数値計算によって説明することに成功した。

B-1) 学術論文

K. YAKUSHI, M. URUICHI and Y. YAMASHITA, “Spectroscopic Study of Narrow-Band Metal (BEDT-ATD)$_2$PF$_6$(THF) without Dimerized Structure,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 531-538 (1999).

J. OUYANG, K. YAKUSHI, K. TAKIMIYA, T. OTSUBO and H. TAJIMA, “Low-Energy Electronic Transition in Organic metal, DMTSA-BF$_4$,” *Solid State Commun.* **110**, 63-68 (1999).

K. GOTO, T. KUBO, K. YAMAMOTO, K. NAKASUJI, K. SATOB, D. SHIOMI, T. TAKUI, M. KUBOTA, T. KOBAYASHI, K. YAKUSHI and J. OUYANG, “A Stable Neutral Hydrocarbon Radical: Synthesis, Crystal Structure, and Physical Properties of 2,5,8-Tri-tert-butyl-phenalenyl,” *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 1619-1620 (1999).

L. MARTIN, S. TURNER, P. DAY, P. GUIONNEAU, J. A. K. HOWARD, M. URUICHI and K. YAKUSHI, “Synthesis, crystal structure and properties of the semiconducting molecular charge-transfer salt (bedt-ttf)$_2$Ge(C_2O_4)$_3$·PhCN [bedt-ttf = bis(ethylenedithio)tetrathiafulvalene],” *J. Mater. Chem.* **9**, 2731-2736 (1999).

J. OUYANG, J. DONG, K. YAKUSHI, K. TAKIMIYA and T. OTSUBO, “Spectroscopic Study of Isostructural Charge-Transfer Salts: Non-metallic DMTTA-BF$_4$ and Metallic DMTSA-BF$_4$,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 3708-3716 (1999).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. YAKUSHI, J. DONG, J. OUYANG, K. TAKIMIYA, T. OTSUBO and H. TAJIMA, “Metallic properties of 1:1 Charge-Transfer Salt DMTSA-BF$_4$,” *Synth. Met.* **103**, 2208-2209 (1999).

J. OUYANG, K. YAKUSHI, Y. MISAKI and K. TAKIMIYA, “Band Structure of (BDT-TTP)$_2$X (X = SbF$_6$, AsF$_6$, ClO$_4$) Studied by Reflection Spectroscopy,” *Synth. Met.* 103, 2207-2207 (1999).

M. URUICHI, K. YAKUSHI and Y. YAMASHITA, “Temperature-dependent Reflection Spectra of Metallic (BEDT-ATD)$_2$-X(THF) (X = PF$_6$, AsF$_6$),” *Synth. Met.* **103**, 2206-2206 (1999).

Y. YONEHARA and K. YAKUSHI, “Optical Spectra of Phthalocyanine Salts,” *Synth. Met.* **103**, 2214-2215 (1999).

M. INOKUCHI, K. YAKUSHI, M. KONOSHITA and G. SAITO, “Optical Properties of α’-(BEDT-TTF)$_2$IBr$_2$,” *Synth. Met.* **103**, 2101-2102 (1999).

C. YANG, J. QIN, K. YAKUSHI, Y. NAKAZAWA and K. ICHIMURA, “BEDT-TTF being inserted into a layered MnPS$_3$,” *Synth. Met.* **102**, 1482-1482 (1999).

B-3) 総説、著書

藥師久彌，「電子スピンがもたらす新しい伝導物性」，*化学* **54**, 68 (1999).

B-4) 招待講演

藥師久彌,「フタロシアニン導体混晶 $Ni_{1-x}Co_xPc(AsF_6)_{0.5}$ の物性」, 物性研短期研究会「強相関電子系としての分子性導体」, 東大物性研 , 東京 , 1999 年 5 月 .

K. YAKUSHI, “Spectroscopic Studies of Molecular Metals,” Czech-Japan Joint Seminar, Prague (Czech), June 1999.

K. YAKUSHI, “Phase Transition in Narrow-band Organic Metals $(BEDT\text{-}ATD)_2X$(solvent) (X = PF_6, AsF_6, BF_4; solvent = THF, DHF, DO),” Electrical and Related Properties of Organic Solids, ERPOS-8, Szklarska Poreba (Poland), June 1999.

藥師久彌,「フタロシアニン導体におけるπ - d 相互作用」, 日本化学会秋季年会シンポジウム「電子機能分子性物質」, 北大 , 札幌 , 1999 年 9 月 .

藥師久彌,「分光法による分子性導体の電子構造の研究」, 高分子学会シンポジウム「電子・磁気機能材料」, 新潟大学 , 新潟 , 1999 年 10 月 .

K. YAKUSHI, “Spectroscopic study of the metallic and non-metallic BDT-TTP charge-transfer salts,” Quasi-two-dimensional metal and superconducting system, Chernogolovka (Russia), December 1999.

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).

日本分光学会東海支部支部長(1999-).

学術雑誌編集委員

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(1997-1998).

東京大学物性研究所 物質設計評価施設運営委員会委員(1998-1999).

B-7) 他大学での講義

名古屋大学工学系研究科 , 1999 年 2 月 .

熊本大学理学部 , 1999 年 5 月 .

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π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 今やπ－d電子系という言葉が定着し，磁性との関連を念頭において多くの人がπ－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π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特徴と，磁性金属を含むフタロシアニン導体が重い電子系に類似の電子構造を持つという特徴をもっている。特に後者で最も重要な役割を果たすπ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 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-BF_4や$(BDT\text{-}TTP)_2X$では600 cm^{-1}より高波数側ではクーロン力が表に出てこない電子系になっているが，θ-$(BDT\text{-}TTP)_2$-$Cu(NCS)_2$や$(BEDT\text{-}ATD)_2X(solvent)$においては正のクーロン反発力が重要な役割を演じている。現在のところ，これらの物質全体を通して負の電子間反発力らしい現象は見つかっていない。しかし最近他の研究グループが$(TTM\text{-}TTP)I_3$において電荷が0と2+に分離する絶縁状態をNMRで見つけている。今後(BDT-TTP)Brの結晶構造を含めてより詳しい研究が必要である。いずれにしても長距離型クーロン力が強相関電子系における絶縁性基低状態を特定する重要な要素であり，電荷分離状態のような新しい電子相を出現させている。

分子導体の分野全体の成果として，現在では極めて安定な金属物質を合成できるようになっている。今後の方向の一つとして，対イオンの励起状態を低くして伝導電子と強く結合できる物質の設計が重要であろうと考えている。

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) 一次元 1/4-filled 系 EDT-TTF のSDW相の理解

b) 遍歴－局在スピン競合系の新規電子相の研究

c) 二次元電子系における電荷局在状態の解明

d) 導電性金属錯体 $Pd(dmit)_2$ の反強磁性磁気構造と磁気揺らぎ

e) 分子性導体における新電子相の探索

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 擬一次元電子系の競合電子相は，物理の基本的かつ重要な問題を含有しており，その電子状態の理解すべく，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。1/4-filled 系 EDT-TTF の^{1}H—NMRスピン-格子緩和時間を調べた結果，この系がSDW転移を起こすことがわかった。また，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，このことは系が不整合SDWになっていることを強く示唆している。今後，^{1}H—NMR吸収曲線の解析から反強磁性の磁気構造を調べるとともに，同位体置換試料による^{13}C—NMR測定を行い，常磁性相における電荷局在状態について言及する。

b) 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）。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。これまでのEPRならびに^{1}H—NMR測定の結果，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定数から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。より電子密度の大きいサイトに対する^{13}C—NMR測定を行うことにより，その電子構造を明らかにする。

c) θ型と称される二次元電子系の電荷局在状態を，磁気的な手法（磁化率，EPR，NMR）により調べている。二次元的な Fermi 面をもち安定な金属状態をもつと期待されているにもかかわらず，低温で絶縁体転移を起こす物質群がある。θ-$(BEDT\text{-}TTF)_2CsZn(SCN)_4$ 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。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（この塩に関しては，学習院大学:高橋教授との共同研究）。現在，この異常常磁性相の起源を系統的に理解するために，一連の物質群に対し引き続き研究を行っている。

d) 導電性金属錯体$Pd(dmit)_2$は強い二量化によるバンド交差のために，圧力印加により多彩な電子状態を取ることが知られている。電子の波動関数の対称性により反強磁性磁気構造が異なることが，米満らにより理論的考察により示唆されている。我々はESRおよびNMRによる反強磁性相の研究を行っている（理研：加藤博士との共同研究）。これまでに，系統的な反強磁性状態の現象論的理解は進み，現在単結晶試料による極端条件下におけるNMR

測定の準備を行っている。

e) 分子性導体における新電子相を探索するために, 興味深い新規な系に対して微視的な観点から測定を行っている。

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. NAKAMURA, W. MINAGAWA, R. KINAMI, Y. KONISHI and T. TAKAHASHI, "Low-Temperature Electronic States in θ-(BEDT-TTF)$_2$RbZn(SCN)$_4$: Competition of Different Ground States," *Synth. Met.* **103**, 1898-1899 (1999).

T. NAKAMURA, T. TAKAHASHI, M. TANIGUCHI, Y. MISAKI and K. TANAKA, "Magnetic Properties of a New Two-Chain Organic Conductor: (CPDT-STF)-TCNQ," *Synth. Met.* **103**, 1900-1900 (1999).

K. KODAMA, T. NAKAMURA, T. TAKAHASHI, E. OJIMA and H. KOBAYASHI, "Metal-insulator transition in α-(BEDT-TSeF)$_2$I$_3$ and α-(BEDT-TTF)$_2$I$_3$," *Synth. Met.* **103**, 1963-1964 (1999).

T. NAKAMURA, H. YAMANE, T. TAKAHASHI, S. AONUMA and R. KATO, "ESR and NMR Investigation of β'-R_4Z[Pd(dmit)$_2$]$_2$," *Synth. Met.* **103**, 2142-2142 (1999).

M. HISANO, T. NAKAMURA, T. TAKAHASHI and G. SAITO, "SDW wave number and charge localization in (TMTTF)$_2$-Br: ^{1}H-NMR investigation," *Synth. Met.* **103**, 2195-2195 (1999).

M. YAMANE, T. NAKAMURA, T. TAKAHASHI, S. AONUMA, R. KATO and H. SAWA, "Impurity effect on the spin-Peierls state of (DMe-DCNQI)$_2$Cu$_x$Li$_{1-x}$," *Synth. Met.* **103**, 2196-2196 (1999).

Y. NISHIO, Y. NIHEI, M. TAMURA, K. KAJITA, T. NAKAMURA and T. TAKAHASHI, "Specific heat and metal-insulator transition of (BEDT-TTF)$_2$*M*Zn(SCN)$_4$ (*M* = Cs, Rb)," *Synth. Met.* **103**, 1907-1908 (1999).

B-4) 招待講演

T. NAKAMURA, "Metal-Insulator Transition in Highly-Correlated Organic Compounds: θ-(BEDT-TTF)$_2$RbZn(SCN)$_4$," 4th International Symposium on Advanced Physical Fields: Quantum Phenomena in Advanced Materials at High Magnetic Fields, Tsukba (Japan), March 1999.

B-7) 他大学での講義、客員

名古屋大学理学部 , 「物性化学Ｉ」, 1999 年 10 月－ 2000 年 3 月 .

C) 研究活動の課題と展望

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）により明らかにしている。着任から１年が経ち１台目のNMR分光器も立ち上がった。現在二台目の分光器を立ち上げ中である。分子性導体における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。

分子集団動力学研究部門

小　林　速　男（教授）

A-1) 専門領域：固体化学

A-2) 研究課題

a) 反強磁性有機超伝導体の開発とその物性，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解明

b) 新規分子性金属，純有機磁性金属の開発

c) 有機分子性結晶の超高圧下の電気伝導測定

d) 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) 近年，π金属電子－磁性イオン間相互作用が注目されるようになったが，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，従来話題となった殆どの系は実際上は低温で導電性を失い単純な磁性絶縁体となる。しかし最近のπドナー分子 BETS と四面体アニオンからなる一連の有機伝導体についての私達の研究によって，磁性有機伝導体の研究は大きな発展期を迎えつつある様に思われる。今年度，(1)初めての反強磁性有機超伝導体を発見した。即ち，κ-$BETS_2FeBr_4$は常圧下で有機伝導体として初めて反強磁性金属状態を示すだけでなく，更に低温で超伝導転移をも示す。比熱の測定より超伝導状態は，反強磁性秩序と共存している事が強く示唆され，磁性的有機伝導体の開発研究の究極目標の一つであった磁性超伝導体が実現した。磁気秩序を媒介する電子と，超伝導転移するπ金属電子系との関係は今後の重要課題である。又，この系では2*T*でメタ磁性転移を示し，強磁性金属状態に転移することも明らかにされた。(2)また，λ-$BETS_2FeCl_4$ではπ-d電子系がカップルした特異な反強磁性絶縁相が実現している事を以前報告したが，加圧と共にπ-d 電子系の結合が弱まりπ金属電子と Fe の d スピンの反強磁性秩序が共存するようになる。また，更に低温で超伝導転移を示すことが判明した。これらは勿論，皆有機伝導体として初めての現象である。(3)更に，κ-$BETS_2FeBr_4$と同型のκ-$BETS_2GaBr_4$が常圧超伝導体となることを発見した。これらの塩は，全て1993年に *Chem. Lett.* 誌に報告したものであったが，当時は大きな展開をさせることが出来なかった。これらの物性研究の進展には分子研分子物質開発研究センターの共通設備の活用が不可欠であった事を付記しておきたい。

b) 純有機磁性金属の開発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。

c) 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改良を継続している。既に当面の目標であった５万気圧を遥かに越え，15 万気圧程度までの実験が可能である。この様な高圧で，精度が高い伝導度測定がなされたことは恐らく例が無く，今後，高圧固体科学への寄与が期待される。またこの過程で，1980年に発見された初めての有機超伝導体，$(TMTSF)_2PF_6$ の硫黄類似体である$(TMTTF)_2PF_6$ の超伝導を約５万気圧で発見した（TMTTF は TMTSF の４つの Se 原子を S に置換した分子）。但し，$(TMTSF)_2PF_6$ の超伝導の発見者の Jerome のグループでも極く最近，$(TMTTF)_2PF_6$ の超伝導転移を観測したとの情報もある。

d) ダイヤモンドアンビル単結晶Ｘ線結晶構造解析を進めている。最近，1992年に報告した特異な P-T 相図をもつ超伝導体$[(CH_3)_2(C_2H_5)_2N][Pd(dmit)_2]_2$ の 10 kbar までの結晶構造解析を完成させた。更に高圧での実験，イメージン

グプレート低温Ｘ線構造解析システムとを組み合わせた低温，高圧のＸ線構造解析の検討を開始している。

B-1) 学術論文

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-$(BETS)_6Bi_3Cl_{12}\cdot PhCl$ and $(BETS)_2Bi_2Cl_8$: Synthesis, Structure and Conducting Properties. First Characterization of the New Trinuclear Anion $[Bi_3Cl_{12}]_3^-$,” *J. Chem Soc., Dalton Trans.* 683-688 (1998).

T. ADACHI, I. SHIROTANI and J. HAYASHI and O. SHIMOMURA, “Phase Transitions of Lanthanide Monophosphides with NaCl-type Structure at High Pressures,” *Phys. Lett. A* **250**, 389-393 (1998).

H. TANAKA, A. KOBAYASHI and H. KOBAYASHI, “Electrical and Magnetic Properties of BETS Conductor with Modified λ-type Structure, λ’-$(BETS)_2GaBr_4$,” *Chem. Lett.* 133-134 (1999).

E. OJIMA, B. Z. NARYMBETOV, H. FUJIWARA, H. KOBAYASHI, A. KOBAYASHI, K. TAKIMIYA, T. OTSUBO and F. OGURA, “New Stable Metallic Salt Based on a Donor Molecule Containing *peri*-Ditellurium Bridges, TMTTeN-$(SCN)_{0.88}$,” *Chem. Lett.* 845-846 (1999).

H. TANAKA, A. KOBAYASHI, A. SATO, H. AKUTSU and H. KOBAYASHI, “Chemical Control of Electrical Properties and Phase Diagram of a Series of λ-Type BETS Superconductors, λ-$(BETS)_2GaBr_xCl_{4-x}$,” *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 760-768 (1999).

M. A. TANATAR, T. ISHIGURO, H. TANAKA, A. KOBAYASHI and H. KOBAYASHI, “Anisotropy of Upper Critical Field of the Organic Superconductor λ-$(BETS)_2GaCl_4$,”*J. Supercond.* **12,** 511-514 (1999).

N. D. KUSHCH, O. A. DYACHENKO, V. V. GRITSENKO, L. I. BURAVOV, V. A. TKAHCEVA, E. B. YAGUBSKII, M. G. KAPLUNOV, E. N. GOLUBRV, T. G. TOGONIDE, A. KOBAYASHI and H. KOBAYASHI, “Novel Organic Metal of α-$(BETTS)_2Cu_5I_6$ with a Two-Dimensional Polymeric Anion Network; Synthesis, Structure and Properties,” *J. Mater. Chem.* **9**, 687-691 (1999).

B. NARYMBETOV, H, KOBAYASHI, M. TOKUMOTO, A. OMERZU and G. MIHAILOVIC, “Low Temperature Structure Analysis of Unannealed TDAE*C_{60} Single Crystal,” *Chem. Commun.* 1511-1512 (1999).

A. KOBAYASHI, A. SATO and H. KOBAYASHI, “Stable Two-Dimensional Metallic State with Stacking Motif of ‘Spanning Overlap’ in γ-$[(CH_3)_2(C_2H_5)_2N][Ni(dmit)_2]_2$,”*J. Solid State Chem.* **145**, 564-572 (1999).

S. I. PESOTSKII, R. B. LYUBOSSKII, N. D. KUSHCH, M. V. KARTSOVNIK, W. BIBERACHER, K. ANDRES, H. KOBAYASHI and A. KOBAYASHI, “de Haars-van Alphen Oscillations and Angular Magnetoresistance Oscillations in the Organic Metal κ-$(BETS)_2GaCl_4$,” *J. Exp. Theor. Phys.* **88**, 114-117 (1999).

E. OJIMA, H. FUJIWARA, K. KATO, H. KOBAYASHI, H. TANAKA, A. KOBAYASHI, M. TOKUMOTO and P. CASSOUX, “Antiferromagnetic Organic Metal Exhibiting Superconducting Transition, κ-$(BETS)_2FeBr_4$ [BETS = Bis(ethylene-dithio)tetraselenafulvalene],” *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 5581-5582 (1999).

E. OJIMA, H. FUJIWARA and H. KOBAYASHI, “Synthesis, Structures and Properties of an Unsymmetrical Tetraselena-fulvalene Donor Fused with a Pyrazino-Ring (PEDTTSeF) and its Cation Radical Salts,” *Adv. Mater.* **11**, 459-462 (1999).

E. OJIMA, H. FUJIWARA and H. KOBAYASHI, “Synthesis, Structures and Physical Properties of 4,5-Ethylenedithio-4,5-Pentathiotetrathiafulvalene and Its Perchlorate Salt, “*Adv. Mater.* **11**, 758-761 (1999).

A. SATO, H. KOBAYASHI and A. KOBAYASHI, "Structural Electrical and Magnetic Properties of low Dimensional Conductors Based on Unsymmetrical π Donor EDT-TTF and Analogous Selenium-Substituted Molecules," *J. Mater. Chem.* **9**, 2365-2371 (1999).

H. KOBAYASHI, A. SATO, H.TANAKA, A. KOBAYASHI and P. CASSOUX, "A Novel Superconductor with Insulating Magnetic Ground State," *Coord. Chem. Rev.* **190-192**, 921-832 (1999).

A. SATO, E. OJIMA, H. KOBAYASHI, Y. HOSOKOSHI, K. INOUE, A. KOBAYASHI and P. CASSOUX, "Coexistence of Antiferromagnetically Ordered Fe^{3+} Spins and Metal π-Electrons in λ-$BETS_2FeCl_4$," *Adv. Mater.* **11**, 1192-1194 (1999).

H. FUJIWARA and H. KOBAYASHI, "New π-Extended Organic Donor Containing a Stable TEMPO Radical as a Candidate for Conducting-Magnetic Multifunctional Materials," *Chem. Commun.* 2417-2418 (1999).

A. KOBAYASHI, H. TANAKA, M. KUMASAKI, H. TORII, B. NARYMBETOV and T. ADACHI, "Origin of the High Electrical Conductivity of Neutral $[Ni(ptdt)_2]$ ($ptdt^{2-}$ = propylenedithiotetrathiafulvalenedithiolate): A Route to Neutral Molecular Metal," *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 10763-10771 (1999).

H. TANAKA, T. ADACHI, E. OJIMA, H. FUJIWARA, K. KATO, H. KOBAYASHI, A. KOBAYASHI and P. CASSOUX, "Pressure-Induced Superconducting Transition of λ-$(BETS)_2FeCl_4$ with π-d Coupled Antiferromagnetic Insulating Ground State at Ambient Pressure,"*J. Am. Chem. Soc.* **121**, 11243-11244 (1999).

E. OJIMA, H. FUJIWARA and H. KOBAYASHI, "Synthesis, Structure, and Properties of New Organic Conductors Based on Tellurocycle-Fused TTF Donor Molecules," *Adv. Mater*. **11**, 1527-1530 (1999).

Y. MISAKI, H. FUJIWARA, T. MARUYAMA, M. TANIGUCHI, T. YAMABE, T. MORI, H. MORI and S. TANAKA, "Novel Oxygen-Containing π-Electron Donors for Organic Metals: 2-(1,3-Dithiol-2-ylidene)-5-(pyran-4-ylidene)-1,3,4,6-tetra-thiapentalenes," *Chem. Mater.* **11**, 2360-2368 (1999).

M. KANADA, H. HARASAHIMA, H. SASAKI, K. KODAMA, M. SATO, K. KAKURAI, M. NISHI, E. NISHIBORI, M. SAKATA, M. TAKADA and T. ADACHI, High Pressure Neutron and X-ray Studies on the Mott Transition of $BaCoS_2$," *J. Phys. Chem. Solids* **60**, 1181-1183 (1999).

I. TAMURA, Y. NODA and Y. MORII, "Reinvestigation of the Structure of $(ND_4)_3D(SO_4)_2$ and $(NH_4)_3H(SO_4)_2$ at Room Temperature," *J. Phys. Chem. Solids* **60**, 1411-1414 (1999).

L.V. ZORINA, B. Z. NARYMBETOV, S. S. KHASANOV, R. P. SHIBAEVA, N. D. KUSHCH, E. B. YAGUBSKII, A. KOBAYASHI and H. KOBAYASHI, "Crystal Structures of the New BETS-Based Organic Metal: α-$(BETS)_2TlHg(SeCN)_4$ and κ-$(BETS)_2C(CN)$," *Synth. Met.* **102**, 1735-1736 (1999).

T. COURCET, I. MALFANT, H. GORNITZKA, P. CASSOUX, and H. KOBAYASHI, "Preparation, X-ray Crystal Structure, Electrical and Optical Properties of a New BETS Charge Transfer Salt: θ-$(BETS)_4Cu_2Cl_6$," *Synth. Met.* **102**, 1761-1762 (1999).

H. KOBAYASHI, H. AKUTSU, H. TANAKA, A. KOBAYASHI, M. TOKUMOTO, L. BROSSARD and P. CASSOUX, "On the Low-temperature State of Highly Correlated BETS Conductors," *Synth. Met.* **102**, 1654-1657 (1999).

H. FUJIWARA and H. KOBAYASHI, "Synthesis and Properties of New Organic Donor Containing Organic Radical Part," *Synth. Met.* **102**, 1740 (1999).

H. FUJIWARA, E. OJIMA and H. KOBAYASHI, "Synthesis, Structure and Properties of Novel TTF Dimers Bridged by Two Trisulfide Chains," *Synth. Met.* **102**, 1739-1740 (1999).

H. FUJIWARA, T. NISHIKAWA, Y. MISAKI and T. YAMABE, “Synthesis and Properties of Tris-fused Donor Containing Thiopyran Ring,” *Synth. Met.* **102**, 1737 (1999).

K. KODAMA, T. NAKAMURA, T. TAKAHASHI, E. OJIMA and H. KOBAYASHI, “Metal-Insulator Transition in α-$(BEDT\text{-}TSeF)_2I_3$ and α-$(BEDT\text{-}TTF)_2I_3$,” *Synth. Met.* **103**, 1963-1964 (1999).

H. KOBAYASHI, H. AKUTSU, E. OJIMA, A. SATO, H. TANAKA, A. KOBAYASHI and P. CASSOUX, “Superconductor-to-Insulator Transition of λ-$(BETS)_2GaBr_xCl_{4-x}$,” *Synth. Met.* **103**, 1837-1838 (1999).

A. KOBAYASHI, M. NAKATA, E. ARAI, H. FUJIWARA, H. KOBAYASHI, K. TAKIMIYA, T. OTSUBO and F. OGURA, “Three Dimensional Metals Based on a Tellurium-containing Donors, TMTTeN and related conductors,” *Synth. Met*. **103**, 1865-1868 (1999).

B-3) 総説、著書

P. CASSOUX and H. KOBAYASHI, “Interplay of Conductivity and Magnetism in BETS-Derived Compounds,” *Supramolecular Engineering of Synthetic Metallic Materials*, Veciana, Ed., Academic Publishers; Netherlands, pp. 313-327 (1999).

安達隆文、城谷一民、下村理,「NaCl 型構造を持つ希土類リン化物の圧力誘起相転移」, *日本結晶学会誌* **41**, 146-151 (1999).

B-4) 招待講演

H. KOBAYASHI, “Magnetic Order and Superconductivity of BETS Conductors,” International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets (ISCOM’99), Oxford (U. K.), September 1999.

H. KOBAYASHI, “New Organic Superconductors Based on BETS and TMTTF,” International Workshop on Control of Conduction Mechanism in Organic Conductors, Tokyo, November 1999.

H. KOBAYASHI, “Magnetic and Superconducting Properties of BETS Conductors with Tetrahedral Magnetic and/or Non-Magnetic Anions,” International Seminar —Quasi-Two-Dimensional Metal and Superconducting Systems, Chernogolovka (Russia), December 1999.

小林速男,「磁性有機超伝導体」, 東大物性研短期研究会 , 東京 , 1999 年 5 月 .

小林速男,「磁性イオンを含む BETS 伝導体」, 高分子討論会 , 新潟 , 1999 年 10 月 .

B-5) 受賞、表彰

小林速男, 日本化学会学術賞(1997).

B-6) 学会および社会的活動

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(1996-1997).

東大物性研究所協議会委員(1998-).

東大物性研究所共同利用施設専門委員会委員(1999-).

文部省、学術振興会等の役員等

学術審議会専門委員(1999-).

特別研究員等審査会専門委員(1999-).

科学研究費の研究代表者、班長等

特定領域（B）「分子スピン制御による新機能伝導体・磁性体の構築」領域代表者(1999-).

B-7) 他大学での講義、客員

東京大学大学院理学系研究科化学専攻 , 「化学結晶学」, 1999 年前期 .

C) 研究活動の課題と展望

(1)最近πドナー分子と磁性アニオンよりなる有機伝導体で, 旧来の単一π伝導系とは全く異なる新たな磁性有機分子性金属，磁性有機超伝導体を見出した。特に反強磁性有機超伝導体の発見は近年急速に注目を集めてきた有機磁性伝導体の開発研究の究極目標の一つを達成したことを意味する。又，一昨年には無機伝導体にも前例のない金属-超伝導-反強磁性絶縁相転移を示す有機超伝導体を見出している。又, これらの系では磁場誘起金属状態, メタ磁性，強磁性金属等，従来の有機伝導体には例のない様々な新しい状態が次々に発見されている。今後，理論的研究を含め磁性有機伝導体の研究が展開されて行く契機となると思われる。一方，この様な磁性有機伝導体研究の発展を受けて，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次の目標としていよいよ浮かび上がってきている。(2)数年前までは困難な実験技術であった低温Ｘ線結晶構造解析は現在では我々の試みを契機に非常に簡便な装置がほぼ完成し，非常に容易になった。次の目標は超高圧単結晶Ｘ線構造解析および低温・高圧単結晶Ｘ線構造解析である。既に先駆的な仕事がなされているが, 5万気圧を越える領域での実験を普及させるためには高圧セル等の改良が必要であろう。(3) 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，高圧固体化学の今後の発展を期する上で不可欠である。現在実験法の改良を重ね，150 kbar での有機単結晶の伝導度測定を実現させている。この過程で最初の有機超伝導体, $(TMTSF)_2PF_6$ 系の硫黄類似体である$(TMTTF)_2PF_6$ の超伝導転移を約 5 万気圧で発見した。広い範囲の対象への適応は今後の課題である。

宮　島　清　一（助教授）*)

A-1) 専門領域：凝縮系の磁気共鳴分光学

A-2) 研究課題

a) パルス磁場勾配NMR法の開発

b) 液晶の相転移とダイナミクス

c) アルカリ－水素－炭素系化合物の構造と電子状態

d) 単層カーボンナノチューブの電子状態

e) 疎水性二次元細孔中に閉じ込められた水分子の構造とダイナミクス

f) フラーレン化合物の構造相転移と低温電子状態

g) 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勾配NMR法がある。この手法をスピン間が強く双極子結合した系の，しかも異方的な拡散係数（*D*）テンソルの測定へと拡張するための方法を開発し，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次元磁場勾配によって液晶の異方的な *D* テンソルを決定した。

b) 液晶における反強誘電秩序の微視的起源を明らかにするために^{13}C NMRによる実験研究を行った。その結果，極性分子間の双極子相互作用による安定化を実現するうえで有利に作用する分子構造（いわゆる屈曲鎖モデル）が液晶状態で実現していることを立証した。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。等方及び配向スペクトルの完全帰属を行った。

c) 最外殻に１個の s 電子を持つアルカリ金属原子と水素は，π電子系を持つホスト格子中に取り込まれた時，多彩な電子構造をとることが期待される。種々のアルカリ -C_{60} 及びアルカリ -C_{70} 化合物について、主に *in-situ* NMR法を用いて、水素の吸蔵、反応過程をその場観測することにより反応の制御を行い、種々のアルカリ - 水素 - フラーレン化合物を合成し、格子中における水素の状態及びその安定性について検討した。さらに、どのような原子配列および電子物性が実現しうるかを明らかにすることを目的として、アルカリ - 単層カーボンナノチューブ化合物の合成及び *in-situ* NMR法による水素吸蔵過程の研究を行い、アルカリ - 水素 - 単層カーボンナノチューブ集合体中において、一次元的な水素配列が実現している可能性を明らかにした。

d) 単層カーボンナノチューブは、合成時に強磁性金属を触媒として用いることが多い為、これまで単層カーボンナノチューブの固体NMRに関するきちんとした報告がなかったが、非強磁性金属を触媒として合成し、注意深く精製を行った単層カーボンナノチューブ試料を用いて^{13}C－NMRの測定に初めて成功し、その電子状態の特異性を明らかにした。

e) 二次元疎水性細孔をもつ活性炭素繊維中に吸着された水分子のダイナミクスおよびその凍結挙動を^{1}H－NMRにより明らかにし、二次元氷形成の可能性について検討した。

f) $Na(THF)_xC_{60}$ 化合物の構造相転移に伴う分子運動の詳細な変化および低温電子状態を^{23}Na , ^{1}H , ^{13}C－NMRスペ

クトルおよびスピン格子緩和時間を測定することにより明らかにした。

g) 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

T. NAKAI, S. MIYAJIMA, Y.TAKANISHI, S. YOSHIDA and A. FUKUDA, “High Resolution 13 NMR Study of an Antiferroelectric Liquid Crystal: Verification of the Bent Chain Structure,” *J. Phys. Chem. B* **103**, 406-416 (1999).

T. NAKAI, H. FUJIMORI, D. KUWAHARA and S. MIYAJIMA, “Complete Assignment of 13C NMR Spectra and Determination of Orientational Order Parameter for Antiferroelectric Liquid-Crystalline MHPOBC,” *J. Phys. Chem. B* **103**, 417-425 (1999).

S. YOSHIDA, B. JIN, Y. TAKANISHI, K. TOKUMARU, K. ISHIKAWA, H. TAKEZOE, A. FUKUDA, T. KUSUMOTO, T. NAKAI and S. MIYAJIMA, “A Bent and Asymmetrically Hindered Chiral Alkyl Chain of an Antiferroelectric Liquid Crystal as Observed by 2H NMR,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 46-48 (1999).

K. TOKUMARU, B. JIN, S. YOSHIDA, Y. TAKANISHI, K. ISHIKAWA, H. TAKEZOE, A. FUKUDA, T. NAKAI and S. MIYAJIMA, “Molecular Rotation in an Antiferroelectric Liquid Crystal by 13C Nuclear Magnetic Resonance Spin-Lattice Relaxation Time Measurement,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, 255-259 (1999).

H. OGATA and S. MIYAJIMA, “Structural and electronic properties of hydrogen-absorbed alkali-C_{60} compounds,” *Synth. Met.* **103**, 2378-2379 (1999).

K. SUGIURA, K. IWASAKI, K. UMISHITA, S. HINO, H. OGATA, S. MIYAJIMA and Y. SAKATA, “X-Ray Photoelectron Spectroscopy of Metallo Porphyrins Having Bulky Substituents: Standard Values of Core Ionization Potentials,” *Chem. Lett.* 841-842 (1999).

D. KUWAHARA, T. NAKAI, J. ASHIDA and S. MIYAJIMA, “Novel Satellites in a Two-Dimensional Spin-Echo NMR Experiment for Homonuclear Dipole-Coupled Spins in Rotating Solids,” *Chem. Phys. Lett.* **305**, 35-38 (1999).

B-3) 総説、著書

宮島清一、中井利仁,「講座　液晶の実験分光学　第 4 回：NMR分光法（その１）」, *液晶* **3**, 43-51 (1999).

宮島清一、中井利仁,「講座　液晶の実験分光学　第 5 回：NMR分光法（その 2）」, *液晶* **3**, 124-132 (1999).

宮島清一、中井利仁,「講座　液晶の実験分光学　第 6 回：NMR分光法（その 3）」, *液晶* **3**, 205-212 (1999).

宮島清一,「エッセンシャル化学辞典」, 分担執筆 , 東京化学同人 (1999).

B-4) 招待講演

緒方啓典,「フラーレン化合物のNMR」, 日本大学自然科学研究所主催「磁気共鳴分光学の物性科学への応用」, 1999 年 8 月 20 日－ 22 日 .

緒方啓典,「カーボンナノチューブの NMR」, 特定領域研究（A）「フラーレン・ナノチューブネットワーク」主催　平成 11 年度第二回公開ワークショップ , 1999 年 11 月 10 日－ 12 日 .

B-6) 学会及び社会的活動

宮島清一, 日本化学会東海支部常任幹事(1995-1997).

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

宮島清一, 日本液晶学会誌編集委員(1997-1999).

緒方啓典, フラーレン研究会幹事 .

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。

＊）1999 年 3 月 31 日辞職

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) 角度分解紫外光電子スペクトル（ARUPS）による有機薄膜表面構造の定量的測定

b) 水素化したフラーレンからの水素脱離機構の研究

c) 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-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 有機薄膜のARUPS測定は，その電子状態のみでなく表面分子配向の決定にも有効である。我々は，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たスペクトル強度計算プログラム（IAC31）を独自に開発して，ARUPSの測定スペクトルと計算スペクトルの定量的な比較を可能にした。これによって，測定プローブによるダメージ等の問題が大きい有機薄膜に対して，非破壊的かつ定量的な表面分子配向の決定が行えるようになった。

今年度は，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（SAMs）や，高分子（poly(1,10-phenanthroline-3,8-diyl)），オリゴマー（tetratetracontane）について，ARUPSのスペクトル強度計算による研究成果を得た。特にピロリル SAMs では，分子動力学計算（アニーリングシミュレート）によって予測された表面構造（ピロールの face-stacked 配列と herringbone 配列）に対して光電子強度の角度分布計算を行い，本測定手法が官能基を有する SAMs においても有効であることを示した。

b) 水素化フラーレンからの水素脱離がCs等のアルカリ金属の共存によって促進される現象は，有機水素吸蔵材料を探索する上で興味深い。その脱離機構を明らかにするために，脱離反応の遷移状態計算や，高分解能電子エネルギー損失分光法（HREELS）を用いた研究計画を進めている。

c) 昨年に引き続いて，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を行っている。

B-1) 学術論文

D. YOSHIMURA, H. Ishii, Y. OUCHI, E. ITO, T. MIYAMAE, S. HASEGAWA, K. K. OKUDAIRA, N. UENO, and K. SEKI, “Angle resolved ultraviolet photoelectron spectroscopy (ARUPS) of well-ordered ultra-thin films of tetratetracontane (n-$C_{44}H_{99}$) on Cu(100) with the aid of theoretical simulation: molecular orientation and intramolecular energy-band dispersion,” *Phys. Rev. B* **60**, 9046-9060 (1999).

T. MIYAMAE, N. UENO, S. HASEGAWA, Y. SAITO, T. YAMAMOTO and K. SEKI, “Electronic structure of poly(1,10-phenanthroline-3,8-diyl) and its K-doped state studied by photoelectron spectroscopy,” *J. Chem. Phys.* **110**, 2552-2557 (1999).

K. K. OKUDAIRA, S. HASEGAWA, H. ISHII, K. SEKI, Y. HARADA and N. UENO, “Structure of copper- and H_2-phthalocyanine thin films on MoS_2 studied by angle-resolved ultraviolet photoelectron spectroscopy and low energy electron diffraction,” *J. Appl. Phys.* **85**, 6453-6461 (1999).

C)　研究活動の課題と展望

角度分解光電子スペクトルの強度計算は，ARUPSによる表面構造解析を行う上で不可欠なツールである。現在，共同研究者のみに配布しているプログラムをより高度化して，一般の研究者への公開をめざす。具体的には，現在の single-scattering 近似による計算から一歩前進し，光電子の多重散乱（２回散乱以上）をプログラムに取り込む。また，始状態の二重ゼータ基底関数への対応，計算対象元素の拡充，原子因子パラメーター（phase shift と radial matrix）の最適化，使いやすいユーザーインターフェイスの改良等を行いたい。

水素化フラーレンからの水素の脱離機構は，次世代の有機水素吸蔵材料を考える上で重要である。質量分析器を備えた昇温脱離測定装置を立ち上げ，炭化水素ラダーポリマー等を用いた新しい水素吸蔵物質の探索を進める。

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する研究は，多くの測定上の困難さのために，これまでほとんど行われていない。それらの問題に対処した新しい試料調製技術の確立は，生体関連分子の光電子スペクトル測定のみならず，一般的な超高真空チャンバーで行う様々なスペクトルスコピーにも有用であろう。

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) 人工ペルオキシゲナーゼの分子設計

c) 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

d) 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-3) 研究活動の概略と主な成果

a) ペルオキシダーゼやシトクローム P-450 などの酸化反応を行うヘム酵素は，スルフィドやオレフィン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，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反応であることを明らかにした。現在，その詳細を検討中である。

b) 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πカチオンラジカル，通常compound I と呼ばれる）の観測に成功した。さらに，外来軸配位子の導入が可能なミオグロビンミュータントを作成し，高原子価生成過程に対する軸配位子効果の詳細を検討している。

c) 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，Fe，Cu，Ni（単核および複核）の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。

d) 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た研究を行っている。現在，種々のカルボニル化合物の還元反応に成功している。

B-1) 学術論文

Y. GOTO, T. MATSUI, S. OZAKI, Y. WATANABE and S. FUKUZUMI, “Mechanisms of Sulfoxidation Catalyzed by High-Valent Intermediates of Heme Enzymes: Electron Transfer *vs* Oxygen Transfer Mechanism,” *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 9497-9502 (1999).

T. MATSUI, S. OZAKI, E. LIONG, G.N. PHILLIPS and Y. WATANABE, “Effects of the Location of Distal Histidine in the Reaction of Myoglobin with Hydrogen Peroxide,” *J. Biol. Chem.* **273**, 2838-2844 (1999).

T. MATSUI, S. OZAKI and Y. WATANABE, “Formation and Catalytic Roles of Compound I in the Hydrogen Peroxide-Dependent Oxidations by His64 Myoglobin Mutants,” *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 9952-9957 (1999).

T. MURAKAMI, I. MORISHIMA, T. MATSUI, S. OZAKI, I. HARA, H.-J. YANG and Y. WATANABE, “Effects of the Arrangement of Distal Catalytic Residue on Regioselectivity and Reactivity in the Coupled oxidation of Sperm Whale Myoglobin Mutants,” *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 2007-2011 (1999).

S. OZAKI, H-J. YANG, T. MATSUI, Y. GOTO and Y. WATANABE, “Asymmetric Oxidation Catalyzed by Myglobin Mutants,” *Tetrahedron: Asymmetry* **10**, 183-192 (1999).

S. TAKARA, S. OGO, Y. WATANABE, K. NISHIKAWA, I. KINOSHITA and K. ISOBE, ""Direct Observation by Electrospray Ionization Mass Spectrometry of $[Cp^*RhMo_3O_8(OMe)_5]^-$, a Key Intermediate in the Formation of the Double-Bookshelf-Type Oxide Cluster $[(Cp^*Rh)_2Mo_6O_{20}(OMe)_2]^{2-}$,” *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **38**, 3051-3053 (1999).

A. WADA, S. OGO, Y. WATANABE, M. MUKAI, T. KITAGAWA, K. JITSUKAWA, H. MASUDA and H. EINAGA, “Synthesis and Characterization of Novel Alkylperoxo Mononuclear Iron(III) Complexes with a Tripodal Pyridylamine Ligands: A Model for Peroxo Intermediates in Reactions Catalyzed by Non-Heme iron Enzymes,” *Inorg. Chem.* **38**, 3592-3593 (1999).

S. OGO, N. MAKIHARA and Y. WATANABE, “A Unique pH-Dependent Transfer Hydrogenation of Water-Soluble Carbonyl Compounds with $[Cp^*Ir^{III}(H_2O)_3]^{2+}$ ($Cp^* = \eta^5\text{-}C_5Me_5$) as a Catalyst Precursor and HCOONa as a Hydrogen Donor in Water,” *Organometallics* **18**, 5470-5474 (1999).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. WATANABE, “Rational Molecular Design of a Catalytic Site: Engineering of Catalytic Functions to the Myoglobin Active Site Framework,” *J. Inorg. Biochem.* **74**, 56 (1999).

Y. GOTO, T. MATSUI, S. OZAKI, Y. WATANABE, S. FUKUZUMI, J.P. DINNOCENZO and J.P. JONES, “Reaction Mechanisms of N-Demethylation and Sulfoxidation Catalyzed by Heme Enzymes,” *J. Inorg. Biochem.* **74**, 146 (1999).

T. MATSUI, S. OZAKI and Y. WATANABE, “Formation and Reaction of Compound I in Myoglobin,” *J. Inorg. Biochem.* **74**, 225 (1999).

M. P. ROACH, S. OZAKI and Y. WATANABE, “Quantitation of the Proximal Heme Iron Ligand Push Effect: Use of Myoglobin Cavity Mutant H93G and Substituted Imidazoles to Investigate Heme-Enzyme Catalyzed Peroxide O-O Bond Cleavage,” *J. Inorg. Biochem.* **74**, 277 (1999).

H. HAYASHI, S. FUJINAMI, M. SUZUKI, S. NAGATOMO, S. OGO, Y. WATANABE and T. KITAGAWA, “Synthesis and Reactivity of a Bis(μ-oxo)dicopper(III) Complex,” *J. Inorg. Biochem.* **74**, 308 (1999).

A. WADA, S. OGO, Y. WATANABE, K. JITSUKAWA, H. MASUDA and H. EINAGA, “Novel Non-Heme Iron Complexes as Oxidation Catalysts in Alkene Functionalization,” *J. Inorg. Biochem.* **74**, 331 (1999).

B-3) 総説、著書

Y. WATANABE, “High-Valent Intermediates,” in *The Porphyrin Handbook*, K. M. Kadish, K. M. Smith and R. Guilard, Eds., Academic Press; San Diego, Vol. 4, pp. 97-118 (1999).

B-4) 招待講演

Y. WATANABE, “Rational Molecular Design of a Catalytic Site: Engineering of Catalytic Functions to the Myoglobin Active Site Framework,” The 9th International Conference on Biological Inorganic Chemistry, Minneapolis (U. S. A.), July 1999.

Y. WATANABE, “Myoglobin Compound I as a Protein Model for the Active Species of P450,” 11th International Conference on Cytochrome P450, Sendai, August 1999.

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-).

日本化学会東海支部常任幹事(1999-).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員(1999-).

学術雑誌編集委員

Journal of Inorganic Biochemistry, Editorial Board (1997-).

B-7) 他大学での講義

富山大学工学部 , 1999 年 1 月，12 月 .

C) 研究活動の課題と展望

酸化反応を触媒するヘ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。一方，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では，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。水溶液中での新たな反応の開拓は，今後ますます重要な化学反応系として展開したい分野であり，現在は，還元反応を中心に研究を行っている。

井　上　克　也（助教授）

A-1) 専門領域：固体物性化学

A-2) 研究課題：

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

b) 新規高スピン有機ラジカルの合成研究

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π－共役ポリニトロキシドラジカルを配位子とする遷移金属錯体の合成と物性に関する研究：高次元の磁気構造を持つ分子磁石の新しい構築手法として，高スピン有機ラジカルを遷移金属錯体を介して自己組織化するという方法を提案した。この手法に従い一次元，二次元，さらには三次元の磁気構造を持つ分子磁石の構築および構造解析に成功した。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ポリラジカルを合成し，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

H. KUMAGAI and K. INOUE, “A Chiral Molecular based Metamagnet Prepared from Manganese Ions and a Chiral Triplet Organic Radical as a Bridging Ligand,” *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **38**, 1601-1603 (1999).

F. IWAHORI, K. INOUE and H. IWAMURA, “Mn(II)-Induced Formation and Structural Elucidation of a [3+3] Benzene-Dimer Derivative from *m*-Phenylenebis(*N*-*tert*-butylaminoxyl),” *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 7264-7265 (1999).

S. HAYAMI and K. INOUE, “Structure and Magnetic Property of the Organic Triradical with Triazine Skeleton; 2,4,6-Tris{*p*-(*N*-oxy-*N*-*tert*-butylamino)phenyl}triazine,” *Chem. Lett.* 545-546 (1999).

Y. HOSOKOSHI, Y. NAKAZAWA, K. INOUE, K. TAKIZAWA, H. NAKANO, M. TAKAHASHI and T. GOTO, “Magnetic properties of low dimensional quantum spin systems made of stable organic biradicals PNNNO, F_2PNNNO and PIMNO,” *Phys. Rev. B* **60**, 12924-12932 (1999).

A. S. MARKOSYAN, Y. HOSOKOSHI and K. INOUE, “Influence of the thermal excitations of the ferrimagnetic (–1/2, 5/2, –1/2) linear trimer on the paramagnetic behavior of the layered metal-radical complex $\{Mn(hfac)_2\}_3(RD)_2 \cdot n\text{-}C_7H_{16}$,” *Phys. Lett. A* **261**, 212-216 (1999).

Y. HOSOKOSHI, K. KATOH, K. INOUE and T. GOTO, “Construction of a Quantum-Spin System of S = 1/2 Antiferromagnetic Chain with the Next-Nearest-Neibor Interactions,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 2910-2913 (1999).

A. S. MARKOSYAN, H. IWAMURA and K. INOUE, “Magnetic Behavior of the Ferrimagnetic (1/2, 5/2, 1/2) Linear Trimer in Complex of $Mn(hfac)_2$ with Bis- and Trisnitroxide Radicals,” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **334**, 549-568 (1999).

H. KUMAGAI and K. INOUE, “Synthesis and Characterization of a Chiral Molecule-based Metamagnet Made by a Chiral Triplet Organic Radical and Transition Metal Ion,” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **334**, 487-496 (1999).

S. HAYAMI, K. INOUE and Y. MAEDA, “Structures and Magnetic Properties of Binuclear Iron(III) Spin-Crossover Complexes,” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **335**,1285-1294 (1999).

F. IWAHORI, K. INOUE and H. IWAMURA, “Synthesis and Magnetic Properties of Bis(hexafluoroacetylacetonato)-copper(II) Complex with 5-Bromo-1,3-Phenylenebis(*N-tert*-butylaminoxyl) as a Bridging Ligand,” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **334**, 533-538 (1999).

Y. HOSOKOSHI, K. SUZUKI, K. INOUE and H. IWAMURA, “Pressure effect on Mn complexes of bisaminoxyl radicals,” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **334**, 511-520 (1999).

Y. HOSOKOSHI and K. INOUE, “Pressure effects on organic radicals with ferromagnetic and antiferromagnetic interactions,” *Synth. Met.* **103**, 2323-2324 (1999).

I. S. DUBENKO, I. YU. GAIDUKOVA, Y. HOSOKOSHI, K. INOUE and A. S. MARKOSYAN, “Consentration and Pressure Dependence of Magnetic Ordering in $Y(Mn_{1-x}Me_x)_2$ Compounds with Me = Al, Fe and Ni,” *J. Magn. Magn. Mater.* **195**, 687-691 (1999).

I. S. DUBENKO, I. YU. GAIDUKOVA, Y. HOSOKOSHI, K. INOUE and A. S. MARKOSYAN, “The magnetic phase diagram and the effect of pressire on the magnetic properties of the $Y_{1-x}Gd_xMn_2$ intermetallic compounds,” *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, 2937-2953 (1999).

M. MANAGO, S. HAYAMI, Y. YANO, K. INOUE, R. NAKATA, A. ISHIDA and Y. MAEDA, “Valence Delocalization and Crystal Structure of $[Fe_3O(pazo)_6(py)_3]$apy: An Example of the Mixed Valence Delocalization between Two Iron Atoms,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **72**, 2229-2234 (1999).

M. MITO, T. KAWAE, Y. HOSOKOSHI, K. INOUE, M. KINOSHITA and K. TAKEDA, “Pressure-induced crossover from alternating to uniform interaction in a S = 1/2 one-dimensional Heisenberg antiferromagnet,” *Solid State Commun.* **111**, 607-611 (1999).

N. V. BARANOV, A. A. YERMAKOV, A. N. PIROGOV, A. E. TEPLYKH, K. INOUE and Y. HOSOKOSHI, “The Magnetic State of the Co-sublattice in $Tb_{1-x}Y_xCo_2$," *Physica B* **269**, 284-289 (1999).

K. MUKAI, M. YANAGIMOTO, Y. SHIMOBE, K. INOUE and Y. HOSOKOSHI, “Doping effect of magnetic impurities on the spin-Peierls compound *p*-CyDOV,” *Chem. Phys. Lett.* **311**, 446-452 (1999).

A. SATO, E. OJIMA, H. KOBAYASHI, Y. HOSOKOSHI, K. INOUE and P. CASSOUX, “Coexistence of antiferro-magnetically ordered Fe^{3+} spins and metal π-electrons in λ-$BETS_2FeCl_4$ [BETS = bis(ethylenedithio)tetraselenafulvalene],” *Adv. Mater.* **11**, 1192-1194 (1999).

B-4) 招待講演

熊谷　等、井上克也, 「不斉分子磁石の合成と物性」, モレキュラーキラリティシンポジウム , 仙台 , 1999 年 5 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(1997-1998).

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-3) 研究活動の概略と主な成果

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。現在，すべての元素に対してこれまで発表したものより高精度の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開発中である。

b) ArI_2，HgN_2，ArHCN，ArHF 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レベルで，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。ArHF の基底および励起状態 $^1\Sigma^+$ についてポテンシャル曲面を計算し，HF 分子の励起状態に Ar を衝突させることで F-イオンが生成する可能性を示した。

c) 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CASSCF/MRSDCIのレベルで*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。また，ベンゼン３量体カチオンにたいして同様の計算を行い，３量体カチオンにおいてもサンドウィッチずれ構造が最も安定な構造であること，さらに，そのずれ構造における励起スペクトルが実測のスペクトルをよく説明することを示した。また，フェノール２量体カチオンのいくつかの安定構造の電子状態に対する *ab initio* 計算を行ない計算で得られた OH 伸縮振動の基準振動を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（MD）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。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。現在，希ガス流体のそれと大きく異なる水銀の気 - 液共存曲線を説明するため MD 計算を行ない，超臨界領域における長距離構造に関係する密度揺らぎの極大と微細構造との関連性について調べている。

B-1) 学術論文

E. MIYOSHI, J. MAKI, T. NORO and K. TANAKA, “Multi-Reference Coupled Pair Approximation (MRCPA) Calculations for the Ground State of the ArI_2 Complex,” *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* **461-462**, 547-552 (1999).

T. SUMI, E. MIYOSHI and K. TANAKA, “Molecular-Dynamics Study of Liquid Mercury in the Density Region between Metal and Nonmetal,” *Phys. Rev. B* **59**, 6153-6158 (1999).

E. MIYOSHI and N. SHIDA, “Ab initio Study on the Structure of the Ground State of the C_3O_2 Molecule,” *Chem. Phys. Lett.* **303**, 50-56 (1999).

Y. SAKAI, K. MOGI and E. MIYOSHI, “Theoretical study of low-lying electronic states of TiCl and ZrCl,” *J. Chem. Phys.* **111**, 3989-3994 (1999).

B-4) 招待講演

E. MIYOSHI, “Recent Devepolment of Model Core Potentials (MCPs) and Their Applications,” The 8th Korea-Japan Joint Symposium on Molecular Science, Taejon (Korea), January 1999.

E. MIYOSHI, “Coupled Pair Approximation Calculations of van der Waals Complexes,” The 5th Sino-Japan Symposium on Theoretical Chemisty, Hefei (China), May 1999.

B-7) 他大学での講義、客員

九州大学 ,「総合科目核を考える」, 1999 年 12 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スピン軌道相互作用の取り扱いを含めて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。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に対する理論研究にも取り組んでいく予定である。

田　中　桂　一（助教授）

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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

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（Ar·HCN）クラスターの分子間（vdW）変角振動遷移を観測した。Ar·HCN および Ar·DCN 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，Ar·HCN 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。高精度の量子化学計算によりポテンシャル曲面を求めた。変角振動回転準位をこのポテンシャル曲面により計算し実験と比較した。Ar·HBr，OCO·HF，OCO·DF および $H_2O·H_2$ クラスターの分子間 変角振動遷移を超音速分子線分光法により観測した。実験より得られたエネルギー準位を分子間ポテンシャル曲面より計算した結果と比較し，量子化学計算の妥当性を議論した。

検出感度の飛躍的な向上を図るためにサブミリ波領域のホワイト型多重反射セルを開発した。また後進行波管（BWO）を用いたテラヘルツ分光装置を開発し分子クラスターの分子間（vdW）変角振動遷移を観測した。

b) 超音速ジェット噴流中に放電や紫外光解離によりラジカルや分子イオンの不安定分子を生成し，電荷や不対電子を持つ分子クラスター，すなわちイオンクラスターやラジカルクラスターの構造と物性を解明する。このための分子線紫外光解離装置，および低速電子線衝撃装置を開発した。

c) レーザー誘起蛍光法とサブミリ波分光法との二重共鳴分光法により特にラジカルクラスターの分子間（vdW）変角振動遷移を高感度でかつサブミリ波分光法の高精度で観測する事が出来る。このためのレーザー誘起蛍光サブミリ波二重共鳴分光装置をエキシマーレーザー励起パルス色素レーザーおよびサブミリ波超音速分子線分光装置とを組み合わせて開発した。

d) 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，$Fe(CO)_2$ ラジカルは $^3\Sigma g^-$ 電子基底状態を持つ直線分子であり，FeCO ラジカルと同様に非常に大きな電子スピン－スピン相互作用定数を持つ事を明らかにした。

B-1) 学術論文

M. ISHIGURO, K. HARADA, K. TANAKA and T. TANAKA, “Color-center Laser Infrared Absorption Spectroscopy of the ν_{12} Band of Benzene Cooled in a Pulsed Jet,” *J. Mol. Spectrosc.* **192**, 235-236 (1998).

O. DOPFER, S. A. NIZKORODOV, R. V. OLKHOV, J. P. MAIER and K. HARADA, “Infrared Spectrum of the Ar-NH_2^+ Inonic Complex,” *J. Phys. Chem. A* **102**, 10017-10024 (1998).

K. TANAKA, H. HONJO, T. TANAKA, H. KOUGUCHI, Y. OHSHIMA and Y. ENDO, “Determination of the Proton

Tunneling Splitting of Tropolone in the Ground State by Microwave Spectroscopy," *J. Chem. Phys.* **110**, 1969-1978 (1999).

T. BABA, T. TANAKA, I. MORINO, K. M. T. YAMADA and K. TANAKA, "Detection of the Tunneling-rotation transitions of Malonaldehyde in the Submillimeter-wave Region," *J. Chem. Phys.* **110**, 4131-4133 (1999).

T. OKABAYASHI, K. TANAKA and T. TANAKA, "Analysis of Rotational Resonances Observed in the Microwave Spectrum of FCCCN," *J. Mol. Spectrosc.* **195**, 22-42 (1999).

K. TANAKA, Y. TACHIKAWA, K. SAKAGUCHI, T. HIKIDA and T. TANAKA, "Time-resolved Infrare Diode Laser Spectroscopy of the v_3 Band of the Jet-cooled $Fe(CO)_2$ Radical Produced by Ultraviolet Photolysis of $Fe(CO)_5$," *J. Chem. Phys.* **110**, 3970-3977 (1999).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. IMAJO, D. WANG, K. TANAKA and T. TANAKA, "High Resolution Fourier Transform UV Emission Spectroscopy of the 410 nm Band of the TiCl Radical," *The 53nd International Symposium on Molecular Spectroscopy* **MG10**, 98 (1998).

K. TANAKA, N. NAKAMURA, M. SHIRASAKA and T. TANAKA, "Millimeter-wave Spectroscopy of the Iron Carbonyl Radical (FeCO) in the v_2 Bending Vibrational State," *The 53nd International Symposium on Molecular Spectroscopy* **MG16**, 100 (1998).

T. IMAJO, K. TOKIEDA, K. TANAKA and T. TANAKA, "Fourier Transform UV Emission Spectroscopy of the $B^2\Sigma^+$-$X^2\Sigma^+$ Band of the PN^+ ION," *The 53nd International Symposium on Molecular Spectroscopy* **RD11**, 220 (1998).

M. ISHIGURO, K. HARADA, K. TANAKA and T. TANAKA, "Color-center Laser Spectroscopy of the v_{12} Band of Benzene Observed with the Pulsed Supersonic Jet Expansion," *The 53nd International Symposium on Molecular Spectroscopy* **RF04**, 229 (1998).

M. ISHIGURO, K. HARADA, K. TANAKA and T. TANAKA, "Color-center Laser Spectroscopy of Fluoroenzene Observed with the Pulsed Supersonic Jet Expansion," *The 53nd International Symposium on Molecular Spectroscopy* **RF05**, 229 (1998).

T. IMAJO, K. TOKIEDA, Y. NAKASHIMA, K. TANAKA and T. TANAKA, "Fourier Transform UV Emission Spectroscopy of the $B^2\Sigma^+$ - $X^2\Sigma^+$ Band of the PN^+ ION," *The 12thd International Conference on Fourier Transform Spectroscopy* **TH5**, (1999).

K. TANAKA and T. TANAKA, "Time-resolved Diode Laser Spectroscopy of Jet-cooled $Fe(CO)_x$ (x = 1–3) Radicals Produced by UV Laser Photolysis of $Fe(CO)_5$," *The 12thd International Conference on Fourier Transform Spectroscopy* **TH30**, (1999).

T. BABA, T. TANAKA, I. MORINO, K. M. T. YAMADA and K. TANAKA, "Determination of the Proton Tunneling Splitting of Malonaldehyde in the Ground State by Submillimeter-wave Spectroscopy," *The 54th International Symposium on Molecular Spectroscopy* **MH05**, 95 (1999).

O. DOPFER, S. A. NIZKORODOV, R. V. OLKHOV, J. P. MAIER and K. HARADA, "Infrared Spectrum of the Ar-NH_2^+ Inonic Complex," *The 54th International Symposium on Molecular Spectroscopy* **TH06**, 148 (1999).

K. TANAKA, T. HIKITA and T. TANAKA, "Time-resolved Infrared Diode Laser Spectroscopy of the $v_1 + v_2 - v_2$ Hot Band of the FeCO Radical Produced by the Ultraviolet Laser Photolysis of $Fe(CO)_5$," *The 54th International Symposium on Molecular Spectroscopy* **WI15**, 189 (1999).

M. ISHIGURO, K. HARADA, K. TANAKA and T. TANAKA, "Direct Observation of the vdW Bending Band of the OCO-HF Cluster in the Millimeter-wave Region," *The 54th International Symposium on Molecular Spectroscopy* **RG12**, 223 (1999).

S. BAILLEUX, K. HARADA, A. MIZOGUCHI and K. TANAKA, "Observation of the van der Waals Bending Bands of the Ar-DCN Cluster by Millimeter-wave Spectroscopy in Supersonic Expansion," *The 54th International Symposium on*

Molecular Spectroscopy **RG14**, 224 (1999).

K. HARADA, A. MIZOGUCHI, S. BAILLEUX and K. TANAKA, "Submillimeter-wave Spectroscopy of the van der Waals Bending Band of Ar-HBr," *The 54th International Symposium on Molecular Spectroscopy* **RG15**, 225 (1999).

A. OKUMURA, M. ISHIGURO, K. TANAKA and T. TANAKA, "Color-center Laser Spectroscopy of Thiophene Observed with the Pulsed Supersonic Jet Expansion," *The 54th International Symposium on Molecular Spectroscopy* **RJ01**, 236 (1999).

B-3) 総説，著書

田中桂一、原田賢介，「イオンクラスターの直接吸収赤外レーザー分光法」, *分光研究* **47**, 228-229 (1998).

B-4) 招待講演

田中桂一，「分子クラスターの van der Waals 振動遷移の測定と分子間ポテンシャル」, 分子研セミナー「分子クラスターの研究における分光学の役割：その現状と将来」, 岡崎 , 1999 年 7 月 .

田中桂一，「水和分子クラスターの van der Waals 振動遷移の観測」, The First Workshop on the Chemistry of Supramolecular Water, 筑波 , 1999 年 9 月 .

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).

学術雑誌編集委員

日本分光学会会誌「分光研究」編集委員(-1999).

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）, 1999 年 4 月－ 2000 年 3 月 .

九州大学 ,「分子構造論」, 1999 年 4 月－ 10 月 .

九州大学 ,「量子化学特論」, 1999 年 4 月－ 2000 年 3 月 .

九州大学 ,「量子化学講究」, 1999 年 4 月－ 2000 年 3 月 .

C) 研究活動の課題と展望

a) 測定領域を後進行波管（BWO）を用いてテラヘルツ領域（50 cm^{-1}）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) サブミリ波領域には巨大有機分子，超分子の超低周波振動や内包フラーレンの殻内大振幅振動等の興味深い振動遷移の観測が期待される。これらの固体試料の観測のための低温セルおよび，高速掃引型サブミリ波分光装置を開発し，興味有る対象の振動スペクトルを観測する。

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) イオン移動度／質量分析システムの開発

b) 対流圏大気中におけるイオン－分子反応

c) イオン－分子反応を利用した大気微量成分測定法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 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ブ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。本システムでは大気圧中で生成し一定時間ドリフトチューブ内で大気中の微量成分とイオン－分子反応させた正・負イオンの，全イオン移動度スペクトル，質量選択移動度スペクトル，および質量スペクトルの測定が可能である。

b) 新たに開発したイオン移動度／質量分析システムを用いて，生成後 10 －数 100 ms の正・負イオン種のサーベイを行った。正イオンでは始めに $NH_4^+(H_2O)_n$ が主要なイオンとして現れるが，時間と共により陽子親和力のより大きなピリジンやアミン類のイオンが生成していく過程が明らかになった。生成が確認されたイオン種は，ピリジン，メチルピリジン，ジメチルアミン，トリメチルアミン，イソブチルアミン，アミノヘキサン，キノリン，メチルキノリン，などである。また組成が未同定のイオン（質量数 135，149，152，279 amu など）も検出された。負イオンでは亜硝酸，ギ酸，酢酸，シュウ酸，硝酸のイオンが検出された。これまで対流圏の負イオン反応モデルにおいてはギ酸，酢酸，シュウ酸などの有機酸は考慮されておらず，有機酸が重要な役割を果たしていることを初めて明らかにした。

c) イオン移動度／質量分析システムを用いた正・負イオン種のサーベイによって検出されたイオン種の親成分の多くは対流圏大気化学において重要な役割を果たしているものの濃度が極めて低く(ppb以下), これまで十分な測定が行われずにいるものである。これらの成分の質量スペクトルによる測定法を検討すると同時に，より簡便な移動度スペクトルを用いた測定法の開発を行っている。負イオンの場合，移動度スペクトル中のそれぞれのイオンピークが比較的分離されているためそれらを用いて測定できる可能性がある。また正イオンでは多くのイオンが同時に存在し移動度スペクトルが複雑であるが，ドリフトチューブ内でのイオンの移動，拡散，および反応によるスペクトルの変化をシミュレーションすることにより測定する方法を開発中である。

B-1) 学術論文

K. NAGATO, D. TANNER, H. FRIEDLI and F. EISELE, “Field Measurement of Positive Ion Mobility and Mass Spectra at a Colorado Site in Winter,” *J Geophys. Res.* **104**, 3471-3482 (1999).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. NAGATO, “New Insight into the Role of Tropospheric Ions in Aerosol Formation,” *First Asia Aerosol Conference*, 342-343 (1999).

K. NAGATO, “Possible Role of Ions in the Tropospheric Aerosol Formation,” *Proceedings of Sixth Scientific Conference of the International Global Atmospheric Chemistry Project (IGAC)* 95 (1999).

B-3) 総説、著書

長門研吉 ,「大気イオンの化学組成」, *静電気学会誌* **23**, 37-43 (1999).

C) 研究活動の課題と展望

地上付近の下部対流圏におけるイオン化学はすべての地球大気層の中で最も複雑である。新たに開発したイオン移動度／質量分析システムは下部対流圏におけるイオン種の同定およびイオン反応経路の決定に威力を発揮することが確認された。引き続き対流圏イオン化学過程のより詳しい観測・解析を行うと同時に，得られたイオン－分子反応の情報を利用した対流圏微量成分測定法の実用化を目指す。具体的には大気圧化学イオン化質量分析法によるこれまでに測定されていない成分も含む多成分同時測定法の開発，および真空装置を使わずに大気圧で測定できるコンパクトで可搬性の高いドリフトチューブ型移動度計の開発を進める。また，近年対流圏エアロゾルの生成に対するイオンの役割が指摘されており，イオン誘発核生成，およびイオン再結合による微粒子の生成機構についても取り組む予定である。

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) 軟Ｘ線分光による内殻電子の光物性研究（3）共鳴発光

d) 内殻励起分子の振動分光と解離ダイナミクスの研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 軟Ｘ線分光による内殻電子の光物性研究（1）偏光吸収：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。中心金属としてニッケルを含む一連の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 π* 空軌道への一電子遷移（MLCT）がサテライト帯として異常に強く観測されることを見いだした。固体光物性の研究者は多体効果ではないかとして我々の解釈を疑っていたが，その後，理論解析によっても一電子性の強いMLCT帯であることがはっきりした。配位分子と金属の共有結合が強く，擬縮重による多体効果は押さえられているものと考えられる。さらにπ-MLCT帯の強度解析から，π逆供与の大きさが半定量的に評価できること，また，偏光依存性から異なる対称性のπ逆供与を分離して議論できることを理論計算結果との比較から示した。

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するという奇妙な挙動を示す。金属，強相関系，分子性錯体の違いと類似性を整理し議論している。

c) 軟Ｘ線分光による内殻電子の光物性研究（3）共鳴発光：光電子放出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同じ試料に対して調べ，分子性の遷移金属錯体では一電子性が強いことを明らかにしている。

d) 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

L. G. M. PETTERSSON, T. HATSUI and N. KOSUGI, “Ni 2p-3d photoabsorption and strong charge transfer satellites in divalent Ni complexes with molecular ligands. Evaluation of π-back donation based on the DFT approach,” *Chem. Phys. Lett.* **311**, 299 (1999).

T. HATSUI, Y. TAKATA and N. KOSUGI, “Metal-to-ligand charge transfer bands observed in polarized Ni 2p photoabsorption spectra of $[Ni(mnt)_2]^{2-}$,” *J. Electron Spectrosc.* **101-103**, 827 (1999).

Y. TAKATA, T. HATSUI and N. KOSUGI, “A unified view of resonant photoemission of metallic, molecular, and correlated solid systems,” *J. Electron Spectrosc.* **101-103**, 443 (1999).

H. OJI, R. MITSUMOTO, E. ITO, H. ISHII, Y. OUCHI, K. SEKI, T. YOKOYAMA, T. OHTA and N. KOSUGI, “Core hole effect in NEXAFS spectroscopy of polycyclic aromatic hydrocarbons: Benzene, chrysene, perylene, and coronene,” *J. Chem. Phys.* **109**, 10409 (1998).

J. J. NEVILLE, A. JORGENSEN, R. G. CAVELL, N. KOSUGI and A. P. HITCHCOCK, “Inner-shell excitation of PF_3, PCl_3, PCl_2CF_3, OPF_3 and SPF_3,” *Chem. Phys.* **238**, 201 (1998).

A. JORGENSEN, N. KOSUGI and R. G. CAVELL, “The sulphur 2p photoabsorption spectrum of NSF_3,” *Chem. Phys.* **247**, 445 (1999).

J. ADACHI, N. KOSUGI, E. SHIGEMASA and A. YAGISHITA, “Vibronic coupling and valence mixing in the 1s-Rydberg excited states of C_2H_2 in comparison with N_2 and CO,” *Chem. Phys. Lett.* **309**, 427 (1999).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

E. ITO, H. OJI, T. ARAKI, K. OICHI, H. ISHII, Y. OUCHI, N. KOSUGI, T. OHTA, Y. MARUYAMA, T. NAITO, T. INABE and K. SEKI, “Tautomeric structure of N-salicylideneaniline derivatices studied by soft X-ray absorption spectroscopy and X-ray photoelectron spectroscopy,” *J. Synchrotron Radiat.* **6**, 781 (1999).

T. HATSUI, Y. TAKATA and N. KOSUGI, “Strong metal-to-ligand charge transfer bands observed in Ni K- and L-edge XANES of planar Ni complexes,” *J. Synchrotron Radiat.* **6**, 376 (1999).

T. HATSUI, Y. TAKATA and N. KOSUGI, “Polarized Ni K- and L-edge and S K-edge XANES study of $[Ni(III)(mnt)_2]^{1-}$,” *J. Synchrotron Radiat.* **6**, 781 (1999).

B-3) 総説、著書

高田恭孝、小杉信博，「内殻領域の共鳴光電子スペクトルの統一的見方．酸化ニッケル，金属ニッケル，ニッケル錯体の Ni 2p 吸収端での比較」, *日本放射光学会誌* **12**, 117 (1999)

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

日本放射光学会庶務幹事(1994).

日本放射光学会評議員(1994-1995, 1998-1999).

日本分光学会東海支部幹事(1993-1997).

学会の組織委員

Ｘ線吸収微細構造国際会議第７回プログラム委員及び実行委員(1992).

Ｘ線吸収微細構造国際会議第 11 回組織委員及びプログラム委員(2000).

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, 1997, 2000).

光イオン化国際ワークショップ国際プログラム委員(1997).

光イオン化国際ワークショップ国際諮問委員(2000).

第 12 回真空紫外光物理国際会議プログラム委員(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(1998).

第８回電子分光及び電子構造国際会議国際プログラム委員(2000).

文部省、学術振興会等の役員等

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(1997-1999).

B-7) 他大学での講義、客員

東京大学大学院理学系研究科 , 「物性化学特論 III」, 1999 年 11 月 24, 25 日 .

C) 研究活動の課題と展望

内殻励起分子では寿命幅が大きいが，小さな孤立分子に限れば分解能を上げることで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ができる。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，現状としてはUVSORに拘らず国内外の高輝度光源施設を利用しなければならない。このように国内外の施設との協力体制を築きながら，UVSORの将来計画に備えることが肝要である。

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

a1)われわれはこれまでの一連の研究によって，高い電子励起（S_n）状態から最低電子励起一重項（S_1）状態への電子緩和は一般にフェムト秒領域で起こるため，フェムト秒領域ではS_1蛍光のみならずS_n状態からの蛍光も観測されるということを実験的に明らかにしてきた。このことはすなわち，フェムト秒時間分解蛍光分光がS_1状態のみならず，S_n状態やその緩和ダイナミクスを研究する重要な手段となることを意味している。そこで，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，ポリアセンの一種であるテトラセンを例にとり，フェムト秒時間分解蛍光分光法によって研究した。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約120 fsでおこる$S_n \rightarrow S_1$電子緩和，②電子緩和直後のIVR過程，それに引き続く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。また東京工業大学のグループとの共同で，ポルフィリンのS_2蛍光およびS_1蛍光を時間分解測定し，ポルフィリンの$S_2 \rightarrow S_1$電子緩和ダイナミクスを研究した。

a2) 7－アザインドール二量体の光プロトン移動反応の研究を進め，蛍光偏光異方性の測定とその定量的な解析により光励起直後にあらわれる２つの電子状態の遷移モーメントの方向を実験的に決定した。また，分子間プロトン移動よりさらに速くすすむ分子内プロトン移動反応の研究へとすすみ，アントラリン分子の蛍光のフェムト秒時間分解測定を行い，プロトン移動反応に対応すると考えられる時定数約100 fsの蛍光ダイナミクスを観測した。

b) ピコ秒時間分解ラマン分光により，最も基本的な反応でありながらその詳細がわかっていないアゾベンゼンの光異性化反応を研究した。光励起直後に現れる過渡吸収に共鳴させて寿命１～10 ps（溶媒に依存）のS_1状態のラマンスペクトルを測定した。^{15}N同位体シフトに基づいて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，したがって分子はNN結合まわりで平面構造を保っていること，を明らかにした。さらにピコ秒アンチストークスラマンスペクトルの測定によって，S_1状態およびS_0状態における振動緩和過程を明らかにした。これらにより，アゾベンゼンの$\pi\pi^*$（S_2）励起に伴う光異性化はこれまで言われていたのとは異なって，反転（inversion）機構による異性化である可能性が高いことを示した。また，ピコ秒時間分解測定に用いられる増幅したピコ秒パルスを使ってレチナール分子の共鳴ハイパーラマン散乱測定を行い，増幅したピコ秒パルスが高次ラマン過程であるハイパーラマン散乱の測定に有効であることを示した。

c) 光学領域の時間分解測定の分解能を極限まで高めるため，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プローブ光に，またその２倍波をポンプ光に用いる時間分解吸収測定システムを製作した。製作した装置を使って，光励起直後の分子の振動コヒーレンス（核波束運動）の観測を行った。また他に，チタンサファイアレーザーの再生増幅光

を短パルス化するため，希ガスの自己位相変調とプリズム対を用いたパルス圧縮を行い，30 fs以下の光パルスを得た。

B-1) 学術論文

N. SARKAR, S. TAKEUCHI and T. TAHARA, “Vibronic Relaxation of Polyatomic Molecule in Non-polar Solvent: Femtosecond Anisotropy/Intensity Measurements of the S_n and S_1 Fluorescence of Tetracene,” *J. Phys. Chem. A* **103**, 4808-4814 (1999).

S. C. JEOUNG, S. TAKEUCHI, T. TAHARA and D. KIM, “Ultrafast Decay Dynamics of Photoexcited Cu(II)(TMpy-P4) in Water Solvent,” *Chem. Phys. Lett.* **309**, 369-376 (1999).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. TAHARA and S. MATSUO, “Femtosecond Material Response Probed by Phase-Stabilized Optical Heterodyne Detected Impulsive Stimulated Raman Scattering,” *Laser Chemistry (Proceedings of TRVS VIII)* **19**, 149-152 (1999).

B-4) 招待講演

田原太平 ,「超高速分光で観る分子のコヒーレンス，緩和，光化学」, 総研大グループ研究「光科学の新展開」研究会 , 総研大 , 葉山 , 1999 年 2 月 .

田原太平 ,「ピコ秒・フェムト秒分光で観る分子ダイナミクス」, 弥生研究会「極短量子ビームポンプ＆プローブ分析」, 東京大学 , 東京 , 1999 年 3 月 .

T. TAHARA, “Ultrafast Dynamics of Condensed-Phase Molecules Studied by Femtosecond Spectroscopy: Coherence, Relaxation and Reaction,” Pohang Institute of Science and Technology, Pohang (Korea), April 1999.

T. TAHARA, “Vibrational Spectroscopy in Picosecond and Femtosecond Time Region: Time-resolved Frequency Domain Raman and Time-domain Raman Spectroscopy,” Korea Research Institute for Standards and Science, Tajeon, (Korea), April 1999.

T. TAHARA, “Photochemical Reaction and Relaxation Studied by Femtosecond Time-resolved Fluorescence,” The 83rd Annual Meeting of Korean Chemical Society, Suwan (Korea), April 1999.

田原太平 ,「僕らが最近見たこと，知ったこと」, 分子研研究会 , 分子科学研究所 , 岡崎 , 1999 年 6 月 .

T. TAHARA, “Femtosecond Fluorescence and Raman Study on Ultrafast Dynamics of Condensed-Phase Molecules: Coherence, Relaxation and Photochemistry,” ETH, Zurich (Switzerland), July 1999.

田原太平 ,「フェムト秒分光の化学への応用」, 近畿大学極限光技術・物理研究会 , 近畿大学 , 大阪 , 1999 年 10 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-6) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本分光学会東海支部幹事(1999-).

学会の組織委員

第９回放射光学会年会プログラム委員(1995).

分子構造総合討論会プログラム委員(1997).

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。これを念頭におき，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先端的研究を行うため, すでに始めている測定時間分解能の極限化と分光エネルギー領域の拡張をさらにすすめる。これら研究を行う過程で，新しい分光手法の開発をめざす。

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－ Molecular nanoscience －の開拓

b) SR光反応用分光技術の開発

c) 埋め込み金属層基板赤外反射吸収分光法－ BMLIRRAS －の開拓と反応機構の解明

d) STMによる放射光光反応のその場観察

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 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する。これによって得られる新しいナノ反応場での化学反応を調べる。1999年度は，放射光励起 Si 表面清浄化（酸化膜除去）において，熱反応では得られない，結晶性の良い熱平衡状態の Si 表面が得られることを発見した。

b) 1998年度に完成した多層膜ミラー分光器や薄膜フィルターを用いて, 放射光励起反応のエネルギー依存性を調べる。今後この分野でのアンジュレータの重要性を考慮し，その利用実験の準備に着手した。

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－BML-IRRAS －の開発を進めている。1999年は，Si(100), Si(111) 表面の水素吸着脱離において指紋領域の良好な S/N での測定に成功し，BML-IRRAS の有用性を確実なものとした。

d) 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による放射光励起反応表面のその場観察を1997年より開始した。1999年は，放射光励起により，Si 原子の表面拡散がエンハンスされることを発見した。また，酸化膜の下層にも７×７構造が形成されることを発見し，７×７構造の形成に関する D. Vanderbilt の理論を実験的に証明することができた。

B-1) 学術論文

K. MASE, M. NAGASONO, S. TANAKA, T. URISU , E. IKENAGA, T.SEKITANI and K. TANAKA, “Auger electron photoion coincidence technique combined with synchrotron radiation for the study of the ion desorption mechanism in the region of resonant transitions of condensed H_2O,” *J. Chem. Phys.* **108**, 6550-6553 (1998).

S. HIRANO, H. NODA, A. YOSHIGOE, S. I. GHEYAS and T. URISU, “Annealing and Synchrotron Radiation Irradiation Effects on Hydrogen Terminated Si(100) Surfaces Investigated by Infrared Reflection Absorption Spectroscopy,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **37**, 6991-6995 (1998) .

Y. IMAIZUMI, H. MEKARU and T. URISU, “Quantum Yield and Carbon Contamination in Thin Film Deposition Reaction by Core Electron Excitations,” *Appl. Organometallic Chem.* **13**, 195-200 (1999).

S. HIRANO, T. YOSHIGOE, M. NAGASONO, J. OOHARA, Y. NONOGAKI, Y. TAKEDA and T. URISU, “Ultra High Vacuum Reaction Apparatus for Synchrotron Radiation Stimulated Process,” *J. Synchrotron Radiat.* **5**, 1363-1368 (1998).

M. NAGASONO, K. MASE, S. TANAKA and T. URISU, “State-selected ion desorption from condensed H_2O at 80 K studied by Auger electron-photoion coincidence spectroscopy,” *Chem. Phys. Lett.* **298**, 141-145 (1998).

T. MIYAMAE, H.UCHIDA, I.H.MUNRO and T.URISU, “Direct observation of synchrotron radiation stimulated desorption of thin SiO_2 films on Si(111) by scanning tunneling microscopy,” *Surf. Sci. Lett.* **437** L755-760 (1999).

T.MIYAMAE, H. UCHIDA. I. H. MUNRO and T. URISU, “Synchrotron-radiation stimulated desorption of SiO_2 thin films on Si(111) surfaces observed by scanning tunneling microscopy,” *J. Vac. Sci. Technol., A* **17**, 1733-1736 (1999).

H. MEKARU, Y. TSUSAKA, T. MIYAMAE, T. KINOSHITA, T.URISU, S. MASUI, E. TOYOTA and H. TAKENAKA, “Construction of the multilayered-mirror monochromator beam line for the study of synchrotron radiation stimulated process,” *Rev. Sci. Instru.* **70**, 2601-2605 (1999).

T. MIYAMAE, T. URISU, H. UCHIDA and I. H. MUNRO, “Scanning tunnelling microscopy for the study of the synchrotro-radiation stimulated process; synchrotron-radiation stimulated desorption of SiO_2 films on Si(111) surface,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, 249-252 (1999).

T. URISU, “Infrared reflection absorption spectroscopy of selective etching and decomposition stimulated by synchrotron radiation,” *MRS Bulletin* **24**, 46-48 (1999).

M. NAGASONO, K. MASE, S. TANAKA and T. URISU, “Study of ion desorption induced by resonant core-electron excitation of isolated NH_3 monolayer adsorbed on a Xefilm using Auger electron photoion coincidence spectroscopy,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, 325-327 (1999).

Y. HOMMA, P. FINNIE, T. OGINO, H. NODA and T. URISU, “Aligned island formation using step-band networks on Si(111),” *J. Appl. Phys.* **86**, 3083-3088 (1999).

S. NAGAOKA, K. MASE, M. NAGASONO, S. TANAKA, T. URISU, J. OHSHITA and U. NAGASHIMA, “Site-specific phenomena in Si:2p core-level photoionization of $X_3Si(CH_2)_nSi(CH_3)_3$ (X = F or Cl, n = 0–2) condensed on a Si(111) surface,” *Chem. Phys.* **249**, 15-27 (1999).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. URISU, H. MEKARU, T. MIYAMAE, S. HIRANO and H. NODA, “Energy and polarization control in synchrotron radiation stimulated nano-process,” *SPIE Proceedings* **373**, 340-350 (1999).

B-3) 総説、著書

平野真也、野田英之、吉越章隆、宇理須恒雄，「埋め込み金属層基板を用いた赤外反射吸収分光法と放射光励起表面反応」, *表面科学* **20**, 875-881 (1999).

B-4) 招待講演

T. URISU, T. MIYAMAE, Y. GAO and H. UCHIDA, “Synchrotron radiation stimulated nanoprocess and atom level charaterization,” The 1st UK-JAPAN Internal Seminar of Application of Synchrotron Radiation to Studies of Nano-Structured Materials, Okazaki, March 26-27, 1999.

T. URISU, H. MEKARU, T. MIYAMAE, S. HIRANO and H. NODA, “Energy and polarization control in synchrotron radiation stimulated nano-process,” SPIE Conference on X-ray Optics Design, Performance, and Applications, Denver (Colorado), July20-21, 1999.

T. URISU, “Synchrotron radiation stimulated surface photochemical reaction and application to nano structure fabrication,” Seminar at Yonsei University ASSRC, Seol, November 25, 1999.

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).

姫路工業大学ニュースバル新素材開発利用専門委員会委員(1999-).

日本放射光学会評議員(1997-1998).

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).

日本原子力研究所研究嘱託(1998-).

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(1998-1998).

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」研究推進委員会委員(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).

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ップ顧問委員(1995, 1997, 1998).

1999 International Workshop on X-ray and Extreme Ultraviolet Lithography 顧問委員

SRI97 組織委員会プログラム委員会委員(1995-1997).

SPIE's Annual International Symposium on Microlithography 論文委員(1997-1999).

レーザ学会第 19 回年次大会プログラム委員(1998-1999).

The 1st UK-JAPAN International Seminar 組織委員長(1999).

学会誌編集委員

JJAP 特集論文特別編集委員(1992-1993, 1998).

電気学会，電子情報システム部門誌特集号編集委員(1995-1996).

B-7) 他大学での講義、客員

豊橋技術科学大学非常勤講師 , 1999 年 4 月 1 日－ 12 年 3 月 31 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。

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) 原子・分子・クラスターの光イオン化過程の研究を目指した粒子同時計測法の開発

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) 極端紫外域の偏極励起原子の光イオン化ダイナミクス

e) 高分解能斜入射分光器の研究開発

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クス，イオンの前期解離ダイナミ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である。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にイオン化させる（≡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。希ガス偏極原子の光イオン化における「量子力学的完全実験」を目指している。

e) 軌道放射光施設に，気相光励起素過程の研究を目的とした高分解能高フラックスの斜入射分光器を建設した。主に、分子の２電子励起状態の崩壊過程並びに第３周期元素のＬ殻電子の励起およびイオン化に関する研究を行っていく予定である。

B-1) 学術論文

Y. HIKOSAKA, H. HATTORI and K. MITSUKE, “Spectator- and participant-like behavior of a Rydberg electron on predissociation of superexcited states of OCS,” *J. Chem. Phys.* **110**, 335-344 (1999).

G. K. JARVIS, M. EVANS, C. Y. NG and K. MITSUKE, “Rotational-resolved pulsed field ionization photoelectron study of $NO^+(X\ ^1\Sigma^+, v^+ = 0–32)$ in the energy range of 9.24–16.80 eV,” *J. Chem. Phys.* **111**, 3058-3069 (1999).

T. MATSUO, T. KOHNO, S. MAKINO, M. MIZUTANI, T. TONUMA, A. KITAGAWA, T. MURAKAMI and H. TAWARA, “Gross Ionization Cross Sections for Rare-GasAtoms and Simple Molecules in 6-MeV/amu Fully-Stripped Ion Impact,” *Phys. Rev. A* **60**, 3000 (1999).

B-4) 招待講演

見附孝一郎,「放射光解離生成物の紫外レーザー分光」, PF 研究会「21 世紀へ向けての放射光原子分子科学研究」, 物質構造科学研究所 , つくば , 1999 年 1 月 23 日 .

見附孝一郎,「放射光励起反応生成種のレーザーによる検出」, レーザー学会第 19 回年次大会 , 名古屋国際会議場 , 名古屋 , 1999 年 1 月 28 日 .

見附孝一郎,「気相・表面，放射光・レーザー２光子分光」, 第６回高輝度光源ビームライン分光光学系検討会 , 東京大学物性研究所 , 東京 , 1999 年 2 月 22 日 .

K. MITSUKE, “SR-pump and laser-probe experiments for the photofragmentation dynamics of atoms and molecules,” The 21st International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC XXI), Sendai, July 26 (1999).

見附孝一郎,「SR とレーザーを併用した原子・分子分光研究」, 物理学会秋の分科会 , 岩手大学 , 盛岡 , 1999 年 9 月 24 日 .

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(1998-1999).

学会の組織委員

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(1998-1999).

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(1998-1999).

International Symposium on Photo-Dynamics and Reaction Dynamics of Molecules, Cochair (1998-1999).

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（流動研究部門）

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エピタキシャル超薄膜中の分子の3次元配向を実験的に決定できるようになった。この方法利用することによって，有機／無機界面における新しい電子状態の原因，秩序性の乏しい高分子薄膜表面での側鎖の配向決定することが可能になった。H-Si(111)表面電子状態の研究にも適用できることが分かった。

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。配向テフロン薄膜表面のイオン脱離の偏光依存性において，イオン脱離効率が巨視的な表面モルフォロジーにも影響されるという現象が見出された。

B-1) 学術論文

A. ABDUREYIM, S. KERA, H. SETOYAMA, R. SUZUKI, M. AOKI, S. MASUDA, K.K. OKUDAIRA, M. YAMAMOTO, N. UENO and Y. HARADA, “Penning Ionization Electron Spectroscopy on Self-Assembled Monolayers of 1-Mercapt-8-Bromooctane on Au(111),” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **322**, 203-208 (1998).

K. K. OKUDAIRA, S. HASEGAWA, H. ISHII, K. SEKI, Y. HARADA and N. UENO, “Structure of Copper- and H_2-Phthalocyanine Thin Films on MoS_2 by Means of Angle-Resolved UPS and LEED,” *J. Appl. Phys.* **85**, 6453-6461 (1999).

A. ABDUREYIM, S KERA, H. SETOYAMA, K. K. OKUDAIRA, R. SUZUKI, S. MASUDA, N. UENO and Y. HARADA, “Observation of Outermost Surface Layer of 4-Mercaptohydrocynnamic Acid Self-Assembled Film on Au(100) by Penning Ionization Electron Spectroscopy,” *Appl. Surf. Sci.* **144-155**, 430-434 (1999).

T. MIYAMAE, N. UENO, S. HASEGAWA, Y. SAITO, T. YAMAMOTO and K. SEKI, “Electronic Structure of Poly(1,10-phenanthroline-3,8-diyl) and Its K-Doped State Studied by Photoelectron Spectroscopy,” *J. Chem. Phys.* **110**, 2552-2557 (1999).

Y. YAMAMOTO, H. OHARA, K. KAJIWARA, H. ISHII, N. UENO, K. SEKI and Y. OUCHI, “A Differential Thermal Analysis and Ultraviolet Photoemission Study on Surface Freezing of *n*-Alkanes,” *Chem. Phys. Lett.* **304**, 231-235 (1999).

N. UENO, “Angle-Resolved UPS Studies of Organic Thin Films,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, 226-232 (1999).

D. YOSHIMURA, H. ISHII, Y. OUCHI, E. ITO, T. MIYAMAE, S. HASEGAWA, N. UENO and K. SEKI, "Angle-Resolved UPS Study of Oriented Thin Film of Tetratetracontane (n-$C_{44}H_{90}$) on Cu(100) and Theoretical Simulation by IAC Approximation," *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, 340-343 (1999).

T. SEKITANI, E. IKENAGA, K. FUJII, K. MASE, N. UENO and K. TANAKA, "Control of Chemical Bond Scission by Using Site-Specific Photochemical Surface Reactions," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **101-103**, 135-140 (1999).

B-4) 招待講演

上野信雄,「放射光を利用した有機薄膜の角度分解紫外光電子分光：有機エピタキシャル超薄膜から高分子薄膜まで」, 第 12 回日本放射光学会・放射光科学合同シンポジウム , つくば , 1999 年 1 月 .

B-6) 学会および社会的活動

科学研究費の研究代表者、班長等

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(-1999).

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(-1999).

B-7)　他大学での講義、客員

千葉大学工学部 , ― 1999 年 3 月 .

同自然科学研究科 , ― 1999 年 3 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。我々のグループでは，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を中心として，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している。本実験法を用いて，高分子表面での側鎖の配向決定やヘテロ界面で生じる新物質創製など，準不規則系表面における化学種の同定，配向・電子状態研究も行えることが分かりつつあるので，このような従来の研究法では研究することが困難な系についても研究する道を開拓したい。

＊）1999 年 4 月 1 日千葉大学工学部教授

黒　澤　　宏（教授）*)

A-1) 専門領域：レーザー工学、真空紫外光源の開発とその応用、非線形光学

A-2) 研究課題：

a) 真空紫外光を用いた光CVDによる薄膜作成

b) 新しい真空紫外光源の開発

c) シンクロトロン放射光励起による半導体表面の構造変化

d) ナノ領域非線形分光

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 誘電体バリヤ放電励起によるエキシマランプは，126 nm から 308 nm のUVからVUVの波長領域における新しい光源である。このランプを用いたCVD法で，Tetraethoxyorthosilicate（Si-$(OC_2H_5)_4$：TEOS）から酸化珪素（SiO_2）薄膜を室温で成長させることができる。UVSORを利用した吸収係数の測定, 成膜速度の基板温度依存性及び波長依存性などを詳しく調べ，TEOSの光分解は気相中で起こっており，SiO_2 分子の基板への衝突確率で成膜速度が制限されていることを明らかにした。さらに，N_2O や O_2 ガスをTEOSに混ぜることで成膜速度が大幅に上昇し，さらに微細構造物上でも平坦な表面を作ることができることを明らかにした。

b) 希ガスエキシマは真空紫外光源媒質として有望であり, 電子ビーム励起によってレーザー発振が実現されている。一方, 応用の立場から見れば, できるだけ希ガスハライド系と同じように放電励起で発振するものが望ましい。高気圧放電，希ガスクラスターの放電励起，誘電体バリヤ放電，キャピラリー放電などを利用して，希ガスエキシマの発光を観測し，レーザー発振の可能性を追求している。これらの中では，高気圧放電が最も有望である見通しが立っており，高効率予備放電，放電回路の最適化及び高反射率ミラーの開発などが必要であることを明らかにした。

c) 半導体表面構造を原子レベルで観測し，放射光照射による構造変化を観測するべく，BL−4A2ビームラインの立ち上げ，およびその場観察を可能にする走査型トンネル顕微鏡を設置，整備した。InP や GaAs などの化合物半導体における表面反応を観測対象に研究を継続していく予定である。

d) 短パルスレーザーを励起源として高次高調波発生を行い，近接場光学顕微鏡を用いてナノ領域における非線形光学特性を調べるべく，近接場光学顕微鏡の設計を行った。さらに，光源として利用するファイバーレーザーの整備も実施した。短パルスレーザーだけでなく, シンクロトロン放射光励起の蛍光観測なども実施する予定である。

B-1) 学術論文

K. KUROSAWA, P. R. HERMAN and W. SASAKI, “Radiation Effects of Vacuum Ultraviolet Lasers on Silica Glasses,” *J. Photopolymer Sci. Tech.* **11**, 367-372 (1998).

N. TAKEZOE, A. YOKOTANI, K. KUROSAWA, W. SASAKI, T. IGARASHI and H. MATSUNO, “SiO_2 Thin Film Preparation Using Dielectric Barrier Discharge-Driven Excimer Lamps,” *Appl. Surf. Sci.* **138-139**, 340-343 (1999).

K. KUROSAWA, P. R. HERMAN, E. Z. KURMAEV, S. N. SHAMIN, V. R. GALAKHOV, Y. TAKIGAWA, A. YOKOTANI, A. KAMEYAMA and W. SASAKI, "X-Ray Emission Spectroscopic Studies of Silicon Precipitation in Surface Layer of SiO_2 Induced by Argon Excimer Laser Irradiation," *Appl. Surf. Sci.* **126**, 83-91 (1998).

M. OHMUKAI, Y. TAKIGAWA and K. KUROSAWA, "Polycrystalline Silicon Precipitates on SiO_2 Using an Argon Excimer Laser," *Appl. Surf. Sci.* **137**, 78-82 (1999).

H. YAMASHITA, M. KATTO, S. OHNISHI, Y. KURIOKA, Y. TAKIGAWA, K. KUROSAWA, T. YAMANAKA and J. MIYAHARA, "Response Characteristics of Imaging Plate in UV Region," *Rev. Laser Engin.* **26,** 812-815 (1998).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. TAKIGAWA, T. IMOTO, T. SAKAKIBARA and K. KUROSAWA, "Thermoelectric Properties of $AgBiTe_2$-Ag_2Te Composite," *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **545**, 105-109 (1999).

K. KUROSAWA, N. TAKEZOE, H. NAYAGIDA, R.NOMURA and A. YOKOTANI, "SiO_2 Film Coatings With VUV Excimer Lamp CVD," *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **555**, 167-172 (1999).

A. KAMEYAMA, A. YOKOTANI and K. KUROSAWA, "Large second-order optical nonlinearity in thermally poled high purity silica glass," *Conf. Lasers and Electro-Optics* (May, 1999).

S. KUBODERA, J. KAWANAKA, A. YOKOTANI, K. KUROSAWA and W. SASAKI, "Ar excimer emission excited from clusters," *1999 Opt. Soc. of America Annual Meeting* (Sep. 1999).

A. KAMEYAMA, A. YOKOTANI and K. KUROSAWA, "Large second-order optical nonlinearity in thermally poled high purity silica glass," *1999 Opt. Soc. of America Annual Meeting* (Sep. 1999).

A. YOKOTANI, N. TAKEZOE, K. KUROSAWA and W. SASAKI, "A new scheme for silica-film coating using a dielectric barrier discharge driven excimer lamp," *1999 Opt. Soc. of America Annual Meeting* (Sep. 1999).

B-3) 総説，著書

W. SASAKI, K. KUROSAWA, S. KUBODERA and J. KAWANAKA, "The State of the Art of Rare Gas Excimer Lasers and Lamps as a Light Source For Giga-Bit Lithography," *J. Photopolymer Sci. Tech.* **11**, 361-366 (1998).

N. TAKEZOE, A. YOKOTANI and K. KUROSAWA, "Thin Film Preparation Using Vacuum Ultraviolet Rare Gas Excimer Lamps," *Hyomen Kagaku* **20**, 402-406 (1999) (in Japanese).

黒澤　宏, 「レーザー基礎の基礎」, オプトロニクス社 (1999).

黒澤　宏、竹添法隆、柳田英明、横谷篤至,「真空紫外光CVDによる薄膜作成」, *レーザー学会研究会報告* No.RTM-99-32, 1-6 (1999).

B-6) 学会および社会的活動

学会の組織委員

第 13 回日本放射光学会年会実行委員長，組織委員およびプログラム委員(1999-).

第 20 回レーザー学会年会プログラム副委員長および実行委員(1999-).

B-7) 他大学での講義、客員

宮崎大学工学研究科 ,「光量子工学」, 1999 年 6 月 27 日－ 30 日 .

C) 研究活動の課題と展望

光の応用・実用から見れば真空紫外領域は未開拓の分野であり，光源の開発とそれを使った応用の両面からの研究が必要である。最近, エキシマランプが開発されるにいたって, ますます応用分野の広がりを見せている中, 半導体用絶縁膜や光学素子の反射防止・損傷防止膜を室温でやさしく形成する技術の開発を行っており，産業界に浸透していくことは時間の問題であろう。このような状況にあって，光反応の基礎過程を明らかにすることが研究者に課せられていると考えている。さらに，エレクトロニクスデバイスやフォトニクスデバイスに新しい現象を付加するナノ構造の作成と評価の技術確立を目指した研究の必要性が叫ばれている現在，シンクロトロン放射光やフェムト秒レーザーと自由電子レーザーなどの新しい光源を利用した新しい技術の開発を目標に研究活動を実施するつもりである。また，近接場光学顕微鏡の出現で，ナノ領域を研究対象にすることが可能となり，今までに培ってきた非線形光学の研究対象をナノ空間領域に適用した研究を実施したい。

＊）1999 年 4 月 1 日着任

長　岡　伸　一（助教授）*)

A-1) 専門領域：光物理化学

A-2) 研究課題：

a) 光のナイフの創成－内殻準位励起後のサイト選択的解離の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 分子全体に非局在化している価電子と異なり，内殻電子は元々属していた原子付近に局在化している。一つの分子中の同じ元素の同じ内殻の準位でも，その原子の周囲の結合などの環境によって内殻電子の励起エネルギーは変化する（例えば，$\underline{C}F_3\underline{C}H_3$）。そこで，照射光のエネルギーを厳密に選ぶと，分子を構成する原子のうち特定のもののみを選択的に励起することが可能であると考えられる。その結果，その原子との結合だけが選択的に切れるようなサイト選択的解離反応を起こすことができる。このような発想に基づいて，放射光と同時計数法を用いて，内殻電子励起後の励起サイトに選択的な解離反応を検討し，分子中の原子の位置によって反応がどのように変化するかを研究した。

B-1) 学術論文

澤田公平、小野寺祥、榎本裕之、長岡伸一、向井和男，「スピンプローブ法を用いたポリ塩化ビニル内部における低分子添加剤の動的挙動」, *日本化学会誌* 166-176 (1999).

S. NAGAOKA, J. KUSUNOKI, T. FUJIBUCHI, S. HATAKENAKA, K. MUKAI and U. NAGASHIMA, “Nodal-Plane Model of the Excited-State Intramolecular Proton Transfer of 2-(o-Hydroxyaryl)benzazoles,” *J. Photochem. Photobiol., A* **122**, 151-160 (1999).

澤田公平、小野寺祥、榎本裕之、長岡伸一、向井和男，「スピンラベル法を用いたポリ塩化ビニル樹脂中におけるステアリン酸添加剤の動的挙動」, *高分子論文集* **56**, 298-306 (1999).

友田英幸、北嶋弘一、仲井正徳、山本修太郎、長岡伸一，「ラッピングテープによるチタン合金研磨用加工液の開発（第２報）－研磨特性に及ぼす硫黄の影響－」, *精密工学会誌* **65**, 851-856 (1999).

S. NAGAOKA, K. MASE, M. NAGASONO, S. TANAKA, T. URISU, J. OHSHITA and U. NAGASHIMA, “Site-Specific Phenomena in Si:2p Core-Level Photoionization of $X_3Si(CH_2)_nSi(CH_3)_3$ (X = F or Cl, n = 0–2) Condensed on a Si(111) Surface,” *Chem. Phys.* **249**, 15-27 (1999).

B-4) 招待講演

S. NAGAOKA, M. INOUE, C. NISHIOKA, Y. NISHIOKU, K. MUKAI and U. NAGASHIMA, “Tunneling Effect in Antioxidant, Prooxidant, and Regeneration Reactions of Vitamin E,” 3rd International Conference on Low Temperature Chemistry, Nagoya (Japan), July 1999.

長岡伸一，「内殻励起を用いた表面脱離の研究；分子メスへの応用をめざして」, 日本物理学会秋の分科会 , 盛岡 , 1999 年 9 月 .

S. NAGAOKA, “Molecular Knife—Control of Chemical Reactions by Core Excitation,” Interesting World of Physical Chemistry, Kyoto (Japan), November 1999.

S. NAGAOKA, “Investigation of Photoinduced Electron Transfer of the Model Vitamin E-Quinone System,” Photoconversion and Photosynthesis: Past, Present and Future Prospects, Okazaki (Japan), November 1999.

B-6) 学会および社会的活動

学会の組織委員

第 13 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム実行委員(1999).

科学研究費の研究代表者、班長等

特定領域研究「電子励起を用いた原子分子操作」班長(1999-).

B-7) 他大学での講義、客員

愛媛大学理学部 ,「磁気化学」, 1999 年 8 月 2 日－ 4 日 .

愛媛大学理学部 ,「分子構造論」, 1999 年 8 月 5 日－ 7 日 .

広島大学放射光科学研究センター , 客員研究員 , 1999 年 7 月－ .

C) 研究活動の課題と展望

今後は，UVSOR の BL2B1，BL3A2，BL8B1 ビームラインを用いて，放射光励起による表面および気相におけるサイト選択的解離反応を研究する。また，電子線励起の実験装置を実験室で製作している。本装置は，内殻電子励起状態，あるいはオージェ終状態を選別して，エネルギー選別したイオンの収量を定量的の測定でき，本研究に最も適しているとともに世界的に前例が無い装置である。

＊）1999 年 4 月 1 日着任

福　井　一　俊（助教授）*)

A-1) 専門領域：真空紫外分光学、固体物性

A-2) 研究課題：

a) 化合物半導体の電子構造に関する研究

b) 放射光分光技術に関する研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) K 内殻吸収の吸収端近傍のスペクトル形状が価電子帯の p 状態の部分状態密度をほぼ反映することを用い，窒化物半導体の価電子帯p-部分状態密度を実験的に示し，かつスペクトルの入射角依存性からp-部分状態密度の異方性成分を分解する手法を提示した。また，内殻吸収の特徴であるサイト選択性を利用し，陰イオン直上と陽イオン直上での価電子帯 p- 部分状態密度の相違を明らかにした。

b) 放射光の発光点が長く，大きい被写界深度を必要とする場合の集光光学系として古くから提唱されている通称 magic mirror を初めて実用することを試み，ほぼ達成した。また，放射光用光学ミラーの性能を決めるミラーの曲率やスロープエラーを評価するための装置の開発を行っている。

B-1) 学術論文

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 3 m normal incidence monochromator,” *J. Synchrotron Radiat.* **5**, 836 (1998).

K. FUKUI, K. ASAKURA, K. NIIMI, I. ISHIZUE and H. NAKAGAWA, “Absorption and luminescence spectra of amorphous CdI_2 thin films,” *J. Elecron Spectrosc. Relat. Phenom.* **101-103**, 299 (1999).

H. OKAMURA, J. NAITOH, T. NANBA, M. MATOBA, M. NISHIOKA, S. ANZAI, I. SHIMOYAMA, K. FUKUI, H. MIURA, H. NAKAGAWA, K. NAKAGAWA and T. KINOSHITA, “Optical study of the metal-nonmetal transition in $Ni_{1-\delta}S$,” *Solid State Commun.* **112**, 91 (1999).

K. FUKUI, R. HIRAI, A. YAMAMOTO, S. NAOE and S. TANAKA, “Soft X-ray Absorption Study of III–V Nitrides,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, 538 (1999).

B-7) 他大学での講義、客員

東京大学物性研究所嘱託研究員 , 1999 年 4 月－ 9 月 .

高輝度光科学研究センター外来研究員 , 1999 年 4 月－ 2000 年 3 月 .

C)　研究活動の課題と展望

化合物半導体の光学的性質や電子構造に関する知見は, 基礎物性として物質系の物性を理解するためだけでなく, 応用するための重要な情報である。この様な研究に対し，光学定数の決定に必要な基礎吸収端を含む広い波長範囲をカバーでき，かつまた電子構造に関し構成元素別に切り分けることを可能にする内殻電子励起を行うことが

できる放射光は極めて有用な光源である。対象とする物質系に合わせた測定系・測定法・解析法の開発も含め，放射光を利用した化合物半導体の光学的性質や電子構造に関する研究を進めていきたい。

＊）1999 年 4 月 1 日着任

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機能を目指した機能性分子（触媒，医薬品，多段階反応）の構築を行っていた塩谷教授の転出にともない，後任の魚住教授は錯体触媒による水系での有機合成を行う予定である。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。また，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計画している。

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た。客員部門として配位結合研究部門があり，超分子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

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，およびこの二核鉄(III)－パーオキサイド付加体がいくつかの基質と直接的に相互作用している証拠を見い出した。これらは金属錯体 - パオキサイド付加体の反応性を考える上で貴重な結果である。

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。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ているが，それによって初めてDNA切断挙動が化学的に解明されることが明らかになった。この結果は，今後新しい制癌剤を開発する上で，非常に重要であり，我われはこの新しい考えに基づいてDNA切断に活性な金属錯体を合成し，これまでとは違った観点からの制がん剤の開発を可能にした。

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，特に銅(II)錯体と過酸化水素による蛋白質の切断反応を検討し，実際にアミロイド蛋白で起こりうることを示した。

B-1) 学術論文

Y. NISHIDA, S. NISHINO, M. KUNITA, L. L. GUO, H. MATSUSHIMA and T. TOKII, "DNA promotes activation of oxygen moelcule by binuclear cobalt(II) complex," *Inorg. Chem. Commun.* **2**, 609-611 (1999).

S. NISHINO, Y. ISHIKAWA and Y. NISHIDA, "Interaction between copper(II) compound and protein investigated in terms of capillary electrophoresis method," *Inorg. Chem. Commun.* **2**, 438-441 (1999).

S. NISHINO, M. KUNITA, T. KOBAYASHI, H. MATSHUSHIMA, T. TOKII and Y. NISHIDA, "Interaction between the peroxide adduct of binuclear iron(III) complex with (HPTP) anion and the sugar moiety of nucleosides," *Z. Naturforsch., B* **54**, 1272-1276 (1999).

S. ITO, Y. SASAKI, Y. TAKAHASHI, S. OHBA and Y. NISHIDA, "Oxygenation of nucleosides by peroxide adduct of binuclear iron(III) complex with a μ-oxo bridge," *Z. Naturforsch., C* **54**, 554-562 (1999).

T. KOBAYASHI, Y. SASAKI, T. AKAMATSU, T. ISHII, Y. ODA, H. MASUDA, H. EINAGA and Y. NISHIDA, "High activity of binuclear cobalt(II) complex for ethylene evolution from 1-aminocyclopropane-1-crboxylic acid in the presence of hydrogen peroxide," *Z. Naturforsch., C* **54**, 534-542 (1999).

W. OKUTSU, S. ITO and Y. NISHIDA, "Elecrospray mas specrometry of the peroxide adduct of a monomeric Fe(III) complex containing a phenol group," *Inorg. Chem. Commun.* **2**, 308-310 (1999).

Y. SASAKI, T. KOBAYASHI, S. OHBA, H. MASUDA, H. EINAGA and Y. NISHIDA, "Interaction between the peroxide ion and acetato moiety of the ligand system in a cobalt complex with a binucleating ligand," *Inorg. Chem. Commun.* **2** 244-246 (1999).

Y. NISHIDA, M. KUNITA and S. NISHINO, "Mechanism of DNA cleavage due to green cobalt(II)-bleomycin hydroperoxide irradiated by visible light," *Inorg. Chem. Commun.* **2**, 156-157 (1999).

S. NISHINO, S. OHBA, H. MATSUSHIMA, T. TOKII and Y. NISHIDA, "Selective dioxygenation of cyclohexane catalyzed by hydrogen peroxide and binuclear iron(III) complexes with μ-alkoxo bridge," *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* 1509-1514 (1999).

S. NISHINO, M. KUNITA, T. KOBAYASHI, S. ITO and Y. NISHIDA, "Structural variety of copper(II)-peroxide adducts and its relevance to DNA cleavage," *Z. Naturforsch., C* **54**, 94-99 (1999).

B-3) 総説、著書

Y. NISHIDA, "Important role of substrate in activation of dioxygen in biological oxygenase," *Trends Inorg. Chem.* **5**, 89-103 (1998).

Y. NISHIDA. "New insight into oxidative DNA cleavage reaction catalyzed by metal compounds," *Recent Res. Dev. Pure Appl. Chem.* **3**, 123 (1999).

Y. NISHIDA, "Structure and function of free iron ion in biological system and their model compounds," *Recent Res. Dev. Pure Appl. Chem.* **3**, 103 (1999).

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入れ，努力してきた。わたくしの新しい機構は従来のものとは全く違った観点から考察されており，これまでの酸化反応の機構を一変させるものである。その新しい機構の実験的な証明や, 計算による証拠固めを行っているが, 最近までの結果ではほぼ満足のいく結果であると思っている。いくつかの系では推定された中間体がなかなかESI-Mass法で掴まらないが，これもそれが活性種と考えれば，仕方のないことかもしれない。将来，何か別の手段で検出を試みたいと思っている。

海老原　昌　弘（助教授）＊）

A-1) 専門領域：錯体化学

A-2) 研究課題：

a) 新奇イリジウム複核錯体の合成に関する研究

b) 第９族三核クラスター錯体の電子状態と反応性に関する研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 報告例の非常に少ないランタン型イリジウム複核錯体の合成法を開発し，その物性を明らかにすべく研究を行ってきた。市販の塩化イリジウム酸から１段階反応でイリジウム原子間に単結合を持つイリジウム(II)複核錯体を合成する方法を見いだし，さらにこれにより合成した複核錯体の軸位の配位子を様々に変化させることにより電子状態が変化することを明らかにした。

b) 金属クラスター骨格の１つの基本形である三角型の第９族三核クラスター錯体の電子状態に関して研究を行い，酸化による構造変化，^{1}H NMR常磁性シフト，DFT計算などによりそのHOMOの軌道を明らかにした。また，これらの錯体の反応性に関しての研究も行い，銀(I)塩やハロゲンとの反応によりこれらがコバルト－コバルト間を架橋した構造が生成することを明らかにした。

B-1) 学術論文

N. KANEMATSU, M. EBIHARA and T. KAWAMURA, “Preparation, structure and electrochemical behavior of dinuclear cyclooctadiene-chelated Ir(I) complexes with 2-aminopyridinato bridges,” *Inorg. Chim. Acta* **292**, 244-248 (1999).

N. KANEMATSU, M. EBIHARA and T. KAWAMURA, “A one-step synthesis of an Ir(II) dinuclear complex. Preparation, structures and properties of bis(μ-acetato)dichlorodicarbonyldiiridium(II) complexes,” *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* 4413-4417 (1999)

S. KATO, N. KITAOKA, O. NIYOMURA, Y. KITOH, T. KANDA and M. EBIHARA, “Heavy Alkali Metal Arenedithiocarboxylates: Dimeric Structure and Nonbonding Interaction Between The Metals and Aromatic Carbons,” *Inorg. Chem.* **38**, 496-506 (1999).

C)　研究活動の課題と展望

近年，金属クラスター骨格を用いた新たな３次元ネットワーク系の構築が盛んに行われている。ランタン型イリジウム複核錯体は同族のロジウム複核錯体と比べて合成例が極めて少ない。一般的に，金属原子間，金属原子－配位子間の結合は周期表下位の原子同士で強くなることが期待でき，報告されているロジウム錯体の性質から考えてイリジウム錯体ではより強い相互作用による新たな性質が期待される。以上の点から，まず現在はまだ確立されていない合成法を開発することが必要である。第１段階としての複核錯体ユニットの合成に成功しているので，これをさらに発展させ多くのイリジウム複核錯体を合成し，新たなイリジウム錯体の化学を展開させて行きたい。

＊）1999 年 4 月 1 日着任

錯体触媒研究部門

塩　谷　光　彦（教授）*)

A-1) 専門領域：生体分子科学

A-2) 研究課題：

a) 金属錯生成により塩基対を形成する人工DNAの合成と機能化

b) 環状ペプチド金属錯体の合成法の開発

c) DNA上に集積する自発的集合型金属錯体：金属アンチセンス法による遺伝子発現制御，DNAを環状に取り囲む自発的集合型金属錯体，鋳型DNAの情報転写・複製システム

d) 集積型金属錯体の合成・構造・機能

e) 金属錯体を用いた抗HIV活性化合物の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 金属錯生成により塩基対を形成する人工DNAの合成と機能化：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 *o*-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種の金属配位子型ヌクレオシドの合成ルートを確立し, アミダイト法によるオリゴヌクレオチドへの導入を行った。現在，これらの金属イオン存在下の性質を検討中である。

b) 環状ペプチド金属錯体の合成法の開発：環状ペプチドは，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L-システインと，グリシンの繰り返し配列を含む様々のサイズを持った直鎖状および環状ペプチドを，高い収率で合成することに成功した。金属錯体の種類やアミノ酸の種類に関わらず本手法が適用できれば，様々の環状ペプチド金属錯体の合成が可能となると考えられる。本研究で合成された環状ペプチド金属錯体は，環状ペプチド部分の立体構造に加え, 正電荷を帯びた金属錯体部分をもつため, 様々なアニオン種（無機イオン，有機アニオン，DNA）との相互作用が観察された。

c) DNA上に集積する自発的集合型金属錯体：プログラムされた情報をもとに, 分子を可逆的に集積化することができれば，分子素子，分子メモリー，テイラーメイドの触媒などの新しい構築原理が創出されると期待される。DNAは, 生体中で塩基配列をもとにプログラムを担う分子として働いている。本研究は，DNAの塩基配列を鋳型として可逆的に集積する分子システムを構築することを目的としている。二つの金属配位部位と核酸塩基を有するモノマーが, 鋳型となるDNA上に金属錯体を形成しながら集積化することにより, 塩基配列に相補的なモノマーの配列化が起こることを明らかにしつつある。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。これらの集積型人工DNAと天然型DNAの相互作用が，融解実験や円二色性スペク

トル測定などから明らかになった。

d) 集積型金属錯体の合成・構造・機能：（１）亜鉛イオンと，二つの bidentate な金属配位部位をもつ含窒素芳香族配位子から，四角型の亜鉛四核錯体が定量的に生成した。この錯体は，自然分晶しており，一つの結晶内には一方の光学活性体のみが含まれていた。これは，亜鉛複核錯体として亜鉛上のキラリティーと亜鉛間の相対的立体配置が完全にコントロールされた最初の例である。キラリティーを有する金属イオンとアキラルな配位子から直接光学活性な化合物を創出することは困難と考えられていたが，今回の結果により，合成法に関する非常に重要な知見が得られた。不斉場を提供する化合物として，今後その機能化を図る予定である。（２）銀イオンと，三つの bidentate な金属配位部位をもつ含窒素芳香族配位子から，10個の銀イオンと10個の配位子から成る20-gon を単位ユニットとするヘキサゴナルな３次元ポリマー錯体が得られた。しかもこのネットワーク二つがお互いに interpenetrating している珍しい構造をとっていることがＸ線結晶解析から明らかになった。それぞれのネットワークにはらせん構造も含まれており，お互いに鏡像体の関係（全体ではラセミ体）になっている。これは，編み目状のポリマーが interpenetrating している非常に稀な例であり，どのような性質をもっているか興味が持たれる。

e) 金属錯体を用いた抗HIV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，活性構造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。メカニズムについては，CXCR4 のアンタゴニストであることが生化学的な実験より明らかになった。

B-1) 学術論文

H. KUROSAKI, K. HAYASHI, Y. ICHIKAWA, M. GOTO, K. INADA, I. TANIGUCHI, M. SHIONOYA and E. KIMURA, “New Robust Bleomycin Analogues: Synthesis, Spectroscopy, and Crystal Structures of the Copper(II) Complexes,” *Inorg. Chem.* **38**, 2824-2832 (1999).

H. KUROSAKI, **Y. ICHIKAWA**, **K. HAYASHI**, **M. SUMI**, **Y. TANAKA**, **M. GOTO, E. KIMURA and M. SHIONOYA**, “Synthesis and Spectroscopic and Redox Properties, and DNA Cleavage Activity of Low-spin Iron(III) Complexes of Bleomycin Models,” *Inorg. Chim. Acta* **294**, 56-61 (1999).

K. TANAKA and M. SHIONOYA, “Synthesis of a Novel Nucleoside for Alternative DNA Base Pairing through Metal Complexation,” *J. Org. Chem.* **64**, 5002-5003 (1999).

K. TANAKA, K. SHIGEMORI and M. SHIONOYA, “Cyclic Metallopeptides, cyclo[-Gly-L-Cys(terpyPt^{II})-]$_n$Cl$_n$,” *Chem. Commun.* 2475-2476 (1999).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. TANAKA, H. CAO, M. TASAKA and M. SHIONOYA, “Artificial DNAs with Metal Assisted Base Pairs,” *Nucleic Acids, Symp. Ser.* **42**, 111-112 (1999).

B-4) 招待講演

塩谷光彦,「人工DNAの合成と機能化」, 第２９回中部化学関係学協会支部連合秋季大会, 豊橋技術科学大学, 1998年 10 月 .

M. SHIONOYA, “Molecular Design of Artificial DNAs,” The 62nd Okazaki Conference, Okazaki, January 1999.

塩谷光彦，「生体分子の再構築：人工DNA・人工ペプチド」, 第15回機能性ホスト・ゲスト研究会 , 理研 , 1999 年 3 月 .

塩谷光彦，「人工DNAの設計と合成」, 日本薬学会1999年春季年会 , 徳島大学 , 1999 年 3 月 .

塩谷光彦，「DNAを標的とする機能性分子の設計と合成」, 第 3 回がん分子標的治療研究会総会 , 福岡 , 1999 年 6 月 .

塩谷光彦，「生命からの発想を原点とする新しい機能分子構築：人工DNA，人工ペプチド」, 生物無機化学研究会・生体機能関連化学若手の会サマーセミナー , 福岡 , 1999 年 8 月 .

塩谷光彦，「金属イオンが誘起する非天然型二重鎖DNA」, 日本化学会秋季年会 , 北海道大学 , 1999 年 9 月 .

塩谷光彦，「金属イオンを用いたDNA・ペプチドの機能化」, 北里大学理学部セミナー , 北里大学理学部 , 1999 年 11 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(1997-1999).

日本化学会生命化学研究会理事(1998-).

錯体化学研究会将来計画委員(1999-).

日本化学会常任理事(1999-).

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).

Pacifichem 2000 Session Organizer (2 sessions) (1999-2000).

学術雑誌編集委員

日本薬学会ファルマシアトピックス専門委員(1993 〜 1995).

European Journal of Pharmaceutical Science, Guest Editor (1998).

Coordination Chemistry Reviews, Guest Editor (1998-).

B-7) 他大学での講義

名古屋大学工学部 ,「生命と金属イオン」, 1999 年 7 月 .

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。新しい機能分子システムの世界を切り拓くには，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た，あらゆる元素を組み合わせた自由度の大きい分子設計を行い，それに「情報」を生産したり制御したりする機能を与えることが必要であろう。

＊）1999 年 4 月 1 日東京大学大学院理学系研究科教授

錯体物性研究部門

田　中　晃　二（教授）

A-1) 専門領域：錯体化学

A-2) 研究課題：

a) 二酸化炭素由来の金属－ CO 結合の還元的活性化を利用した反応系の開発

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

c) 金属錯体の酸化還元反応を利用した物質変換

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) ２分子の二酸化炭素から金属－カルボニル錯体と炭酸イオンへの二酸化炭素の還元的不均化反応の高速化に成功した。さらに二酸化炭素由来の金属－カルボニル結合を切断（一酸化炭素発生）させることなく，その結合を還元的に活性化させる方法論を確立させた。その結果，化学的には不活性と考えられていた４級アルキルアンモニウム塩を極めて効率の良いアルキル化試薬として反応させることが可能となり，二酸化炭素を１段の反応で選択的かつ触媒的にケトン，α－ケト酸およびα－ジケトンに還元する反応を確立させた。

b) 細胞膜内外のプロトン濃度勾配を利用した ATP 合成は生体系が持つ最も基本的なエネルギー変換反応である。我々はプロトン濃度変化に依存して金属錯体上でアコ，ヒドロキソ，オキソ基の平衡反応を起こさせ，その平衡反応に配位子の酸化還元反応を共役せることにより，金属錯体の酸化還元反応を溶液のプロトン濃度変化のみで制御しうる反応系を構築させた。その結果，中和反応で放出される自由エネルギー（中和熱）の90%以上を電流として反応系外に取り出すことに成功した。この研究は酸塩基の中和反応で発生する自由エネルギーを熱を経由させることなく電気エネルギーに変換した初めて反応である。

c) プロトン濃度に依存したアコ金属錯体とヒドロキソ金属錯体との可逆反応にチオレン配位子の酸化還元反応を共役させるとチオレン配位子のイオウ上に電子が蓄積され，酸素付加が起こることを見出した。この反応は物質の酸素酸化に対して基本的な概念を提供することが期待される。一方，近接した２つの金属錯体上でアコ，ヒドロキソおよびオキソ基の変換を行うと極めて良好な水の４電子酸化反応の触媒となることを見出した。

B-1) 学術論文

M. ALI, K. TANAKA and M. HAGA, “Two-electron reduction of $[\{(bpy)_2Ru(dmbbbpy)\}_3Ru]^{8+}$ from $(BNA)_2$ via photo-induced electron transfer [dmbbbpy = 2,2’-Bis(N-methylbenzimidazole-2-yl)-4,4’-bipyridine],” *Inorg. Chem.* **37**, 6176 (1998).

T. MIZUKAWA, **K. TSUGE, H. NAKAJIMA and K. TANAKA,** “Selective Production of Acetone in Electrochemical Reduction of CO_2 Catalyzed by Ru-naphthyridine Complex,” *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **38**, 362-363 (1999).

H. SUGIMOTO, K. TSUGE and K. TANAKA, “Double Addition of CO_2 and CH_3OH to Ruthenium Carbonyl Complex with Novel Mono-dentate Dithiolene,” *Chem. Lett.* 1007-1008 (1999).

B-4) 招待講演

K. TANAKA, “Activation of CO_2 Directed toward Carbon-Carbon Bond Formation,” Conference of Inorganic Chemistry,

University of Strasbourg (France), September, 1999.

K. TANAKA, “Chemical Utilization of Carbon Dioxide as a C1 resource,” Conference of European school for higher studies in chemistry, polymers and material sciences, Strasbourg (France), September, 1999.

B-5) 受賞、表彰

田中晃二 , 日本化学会学術賞(1999).

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

地球環境関連研究動向の調査化学委員会委員(1990-93).

錯体化学研究会事務局長(1990-).

学会の組織委員

第 30 回錯体化学国際会議事務局長(1990-94).

第 8 回生物無機化学国際会議組織委員(1995-97).

文部省、学術振興会等の役員等

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(1996-97).

次世代研究探索研究会・物質科学系委員会委員(1997).

B-7) 他大学での講義、客員

京都大学大学院理学研究科 , 「二酸化炭素還元とエネルギー変換」, 1999 年 11 月 .

金沢大学理学部 , 「錯体触媒による二酸化炭素還元反応」, 1999 年 11 月 .

京都大学大学院理学研究科併任教授 , 1999 年－ .

理化学研究所客員主任研究員 , 1999 年－ .

University of Strasbourg, France, Visiting Professor (1999).

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-CO_2 錯体は容易に金属－ CO 錯体に変換可能であることから，二酸化炭素の化学的利用は金属－ CO 錯体の還元的活性化の方法論の開発である。金属－ CO 錯体の金属中心を還元してカルボニル基の活性化を行うと金属－ CO 結合の還元的開裂（CO 発生）が起こるが，還元型の配位子を直接 CO 基に結合させてカルボニル基の還元的活性化を行うと中心金属に過剰な電子の蓄積が起こらず金属－ CO 結合が開裂されないことが明らかとなった。このような反応系では金属－ CO のカルボニル炭素に求電子試薬が付加し，１段の CO_2 還元反応で複数個の炭素－炭素結合生成が可能であり CO_2 が C1 資源として活用しう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に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で金属錯体の電子状態の制御が可能となる。その結果，プロトン濃度勾配から電気エネルギーへのエネルギー変換素子の開発，ならびにオキソ金属錯体を触媒とする各種の物質変換反応への応用が期待される。

藤　田　　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) (1) 三次元レセプターのゲスト誘起自己集合：熱力学平衡にあるかご型分子混合物（レセプターライブラリー）から各々の構造を最適ゲストの添加により選択的に自己集合させることができた。(2) ボウル型錯体三環構造の定量的自己集合：ナノメートルスケールに到達するM_6L_4ボウル型錯体２分子がカプセル状に会合して，o-もしくはm-テルフェニル４分子を取り込むことを結晶構造解析で明らかにした。(3) ポルフィリン化合物のプリズム型集合体：ポルフィリン化合物を遷移金属で集合化させ，プリズム状構造を定量的に構築した。(4) 二重ロックカテナンの自己集合：自己集合法とテンプレート法を組み合わせて二重にロックした[2]カテナン化合物を定量的に合成した[J.-P. Sauvage 教授（ルイパスツール大，仏）との共同研究]。(5)配位結合ナノチューブの自己集合：3,5- オリゴピリジン配位子とパラジウム錯体からチューブ構造を合成することに成功した。(6) 24成分からの分子カプセルの自己集合：正三角形分子６枚を金属イオン18個で張合せた六面体のカプセル構造を定量的に自己集合させた。

b) (1) ナノサイズかご型錯体の特異な包接挙動：Pd(II)錯体と平面的な三座配位子からM_6L_4の組成で自己集合するかご型錯体の包接挙動を検討した。アゾベンゼン誘導体のシス - トランス混合物からはシス体のみが２分子選択的に包接され，一旦取り込まれたシス体は室温で一週間以上放置してもトランス体へ異性化されなかった。(2)分子フラスコ（反応場）としての利用：上記錯体の空孔内では Diels-Alder 反応が促進されること，ジエンの不均化が触媒的に進行すること，この系では錯体３が逆相間移動触媒として作用している等を明らかにした。さらにこの系に小過剰量の Pd(II)成分を共存させると，Wacher 酸化が容存酸素を再酸化剤として触媒的に進行することや，オレフィン異性化も触媒的に起こることを明らかにした。

c) (1) 20 Å格子を有する無限骨格錯体の自己集積：一辺の長さが，20 オングストロームに到達する大きな格子骨格錯体を自己集積自己集積させることに成功した。格子内にはベンゼン５分子が包接され，結晶全体を貫いてベンゼンカラムがつくられている。(2)「ソフト」な配位結合ゼオライト：柔軟な架橋配位子を用いて錯形成により，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する。ゲストの種類に応じて一次元鎖状，二次元網目状，３次元格子状に骨格の構造が変化することを明らかにした。

B-1) 学術論文

T. KUSUKAWA and M. FUJITA, "'Ship-in-a-Bottle' Formation of Stable Hydrophobic Dimers of *cis*-Azobenzene and -Stilbene Derivatives in a Self-Assembled Coordination Nanocage," *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 1397-1398 (1998).

N. TAKEDA, K. UMEMOTO, K.YAMAGUCHI and M. FUJITA, "A Nanometre-sized Hexahedral Coordination Capsule Assembled from 24 Components," *Nature* **398**, 794-796 (1999).

M. FUJITA, N. FUJITA, K. OGURA and K. YAMAGUCHI, "Spontaneous Assembling of Ten Small Components into a Three-dimensionally Interlocked Compound Consisting of the Same Two Cage Frameworks," *Nature* **400**, 52-55 (1999).

M. AOYAGI, K. BIRDHA and M. FUJITA, "Quantitative Formation of Coordination Nanotubes Templated by Rod-like Guests," *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 7457-7458 (1999).

S. HIRAOKA and M. FUJITA, "Guest-Selected Formation of Pd(II)-Linked Cages from a Dynamic Receptor Library," *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 10239-10240 (1999).

M. AOYAGI, K. BIRADHA and M. FUJITA, "Pd(II)- and Pt(II)-linked Tetranuclear Square Complex as Assembling Units into Higher Ordered Frameworks," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **72**, 2603 (1999).

F. IBUKURO, M. FUJITA, K. YAMAGUCHI and J.-P. SAUVAGE, "Quantitative and Spontaneous Formation of a Doubly Interlocking [2]Catenane Using Copper(I) and Palladium(II) as Templating and Assembling Centers," *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 11014-11015 (1999).

B-3) 総説、著書

M. FUJITA, "Metal-directed Self-assembly of Two- and Three-dimensional Synthetic Receptors," *Chem. Soc. Rev.* **27**, 417-425 (1998).

M. FUJITA, "Self-assembly of [2]Catenanes Containing metals in their Backbones," *Acc. Chem. Soc.* **32**, 53-61 (1999).

B-4) 招待講演

藤田　誠,「自己集合性分子システム」, 東京大学工学部化学系講演会 , 東京 , 1998 年 11 月 .

藤田　誠,「自己集合孤立空間の構築と機能発現」, 東京工業大学資源化学研究所講演会 , 神奈川 , 1998 年 11 月

藤田　誠,「自己集合性分子システム」, 東海高分子セミナー , 名古屋 , 1999 年 6 月 .

藤田　誠,「自己集合性三次元錯体の分子内空間を活用した反応制御と機能設計」, 第 15 回田丸コンファレンス「反応制御と機能設計への挑戦」, 静岡 , 1999 年 7 月 .

藤田　誠,「自己集合孤立空間の構築と機能発現」, 構造有機化学若手の会 , 神戸 , 1999 年 8 月 .

藤田　誠,「自己集合性分子システム」サイエンス・フロンティア２１ , 山梨 , 1999 年 9 月 .

藤田　誠,「細孔構造を有する含フッ素網目構造錯体の合成と機能」日本化学会第 77 秋季年会 , 札幌 , 1999 年 9 月 .

藤田　誠,「自己集合性分子システム」, 第 15 回基礎化学研究所講演会 , 京都 , 1999 年 10 月 .

藤田　誠,「分子の環をつなぐ」第 3 回先端材料研究部門講演会 , 千葉 , 1999 年 12 月 .

藤田　誠,「ひとりでに組み上がる分子を求めて」, 三重大学有機化学セミナー , 三重 , 1999 年 12 月 .

M. FUJITA, "Construction of Nanostructures by Coordination," The 62nd Okazaki Conference, Okazaki (Japan), January 1999.

M. FUJITA, "Construction of Cages, Tubes, and Capsules by Metal-directed Self-assembly," 第 2 回大阪大学産業科学研

究所国際シンポジウム－分子デバイスへ向けての化学的および物理的将来展望 , Osaka (Japan), January 1999.

M. FUJITA, “Transition-metal directed assembly of discrete nanostructures,” International symposium on Synthesis of Novel Polymeric Materials in ACS meeting, Anaheim, March 1999.

M. FUJITA, “Metal-directed Assembly of Discrete Nanostructures: Macrocycles, Catenanes, Tubes, Cages, and Capsules,” 34th Euchem Conference on Stereochemistry, Burgenstock (Switzerland), April 1999.

M. FUJITA, “Transition metal-directed assembling of macrocycles, catenanes and cages,” XXIV International Symposium on Macrocyclic Chemistry, Barcelona (Spain), July 1999.

M. FUJITA, “Palladium(II)- and Platinum(II)- Directed Assembly of Discrete Nanostructures,” 7th International Conference on The Chemistry of The Platinum Group Metals, Nottingham (U. K.), July 1999.

M. FUJITA, “Metal-directed Assembly of Three-Dimentional Nanostructures,” Third Workshop on Frontier Applied Chemistry Research 21st Century Molecular Synthesis and Catalysis, Hong Kong (China), September 1999.

M. FUJITA, “Guest-selected Formation of Pd(II)-Linked Cages from a Dynamic Receptor Library,” the Ninth Korea-Japan Joint Symposium on Organometallic and Coordination Chemistry, Seoul (Korea), November 1999.

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).

学術雑誌編集委員

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(1997-).

B-7) 他大学での講義、客員

ルイパスツール大学化学科 , 客員教授 , 1999 年 5 月 .

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。

＊）1999 年 4 月 1 日名古屋大学工学研究科教授

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理論的研究

c) 分子軌道並列計算手法の開発研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 高振動励起状態の理論的研究：OCSの紫外光解離に関与する3重項励起状態のポテンシャルエネルギー曲面を，状態平均多参照配置SCF軌道を基底とした配置間相互作用法（MR-CI）により決定した。HCP分子の電子基底状態及び励起状態（$1^1A''$, $2^1A'$, $2^1A''$）のポテンシャルエネルギー曲面と振動回転固有状態の解析を行った。非可積分系における反交差の起源を明確に理解する目的で，簡単なモデル系について半古典的手法を用いた解析を行った。$1^1A''$及び$2^1A'$電子励起状態のポテンシャル面に局所的並行構造を見出し，SEP等の実験結果で未解決であった振動回転バンドを新たに帰属した。非経験的電子状態計算により$CH_3CO \rightarrow CH_3 + CO$のポテンシャルエネルギー曲面を解析関数に最適化し，古典ダイナミックス計算，及びRRKM計算の結果を比較することにより，単分子解離反応の解離速度が非統計的な挙動を示す起源を調べた。

b) 大気環境化学に関連する素反応の理論的研究：フッ化炭化水素（HFC）またはフッ素化エーテル類とOHラジカルとの反応は，フロンの地球温暖化への影響等に関与する大気化学における重要な素反応である。高精度の非経験的分子軌道計算によりメタン系及びエタン系HFC，フッ素化エーテル類とOHとの反応経路を決定し，変分的遷移状態理論により反応速度定数求めた。シラン及びホスフィンの常温における自然発火のメカニズムには多くの未解決の課題が残されている。我々は非経験的分子軌道法によりシラン及びホスフィンの燃焼過程に関与する５０以上の素反応について遷移状態の構造と活性化エネルギーを決定し，反応の経路を探索した。その結果シランの反応では，酸化の２段階目で$SiH_2 + O_2$の反応経路に$OSiH_2O$及びOSiHOH中間体が重要な役割を果たしていることを示した。ホスフィンの酸化反応では，$PH_2 + O_2$から高振動励起されたPH_2O_2が生成され，環状のOPH_2Oを経てOPH_2Oに至る経路と，HPOOHを経てHPO + OHへと分解する経路が競合することを示した。

c) 分子軌道並列計算手法の開発研究:非経験的MCSCF計算と分子動力学手法を組み合わせ，多原子分子のポテンシャルエネルギー曲面の情報を電子状態計算から直接取得するための新たな手法を開発し，モデル計算として，イオン分子反応$C + H_3^+$に応用した。MCSCFエネルギー勾配を古典軌道計算の時間ステップ毎に求めることが可能となり，共有結合の生成・解離，電子励起状態を含む多くの気相素反応過程の動力学研究に応用できるだけでなく，並列計算手法を導入することにより，生体関連分子，金属クラスクー，固体表面反応等，従来の理論では計算が困難な大規模系にを応用が可能となる。

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**, 6838 (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).

S. KONDO, K. TOKUHASHI, M. SUGIE and M. AOYAGI, “Ab Initio Study of PH_2 + O_2 Reaction by Gaussian-2 Theory,” *J. Phys. Chem.* **103**, 8082 (1999).

S. KONDO, K. TOKUHASHI and M. AOYAGI, “Ab Initio Molecular Orbital Studies of Isomerization Reaction from c-$OSiH_2O$ to t-OSiHOH”, *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* **469**, 25-30 (1999).

T. NISHIKAWA, T. KINOSHITA, S. NANBU and M. AOYAGI, “A Theoretical Study on Structures and Vibrational Spectra of C_{84} Fullerene Isomers,” *J. Mol. Struct.* **461**/**462**, 453 (1999).

B-4) 招待講演

M. AOYAGI and S. NANBU, “Wavepacket Studies on photo-dissociation reactions,” 218th-ACS meeting, New Orleans, August 22-26, 1999.

C) 研究活動の課題と展望

分子の電子状態理論ポテンシャル曲面への応用および分子内ダイナミックスに関る重要な課題の一つである高振動励起状態の問題を主な研究テーマとしている。電子状態理論の分野では今後, MCSCF等の電子相関を記述する既存理論と並列処理に適した分子動力学手法を組み合わせたプログラム開発を引き続き行い，生体関連分子，金属クラスター，固体表面反応等，化学的に興味ある大規模系の動力学研究へ応用する。また，波束動力学計算とMCSCF直接法の併用により，４原子分子以上の反応系において, 基礎となるポテンシャル曲面を解析関数として最適化することなく，電子励起状態を含む量子反応ダイナミックスの解析を行う。また反応のダイナミックスを理解する上で非常に重要なIVRの諸問題を，これまでと同様に実現的な系の特徴を中心に考察してゆく。さらに簡単な量子カオス系との比較を行うなど，より基本的な物理概念とも結び付けて発展させたい。

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，及び期待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

S. IZUMIDA, S. ONO, Z. LIU, H. OHTAKE and N. SARUKURA, “Spectrum control of THz radiation from InAs in a magneric field by duration and frequency chirp of the excitation pulses,” *Appl. Phys. Lett.* **75**, 451-453 (1999).

Z. LIU, S. IZUMIDA, S. ONO, H. OHTAKE and N. SARUKURA, “High-repetition-rate,high-average-power,mode-locked Ti:sapphire laser With an intracavity continuous wave-amplification scheme,” *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3622-3623 (1999).

Z. LIU and N. SARUKURA, “All-Solid-State subnanosecond tunable ultraviolet laser sources based on Ce^{3+}-activated fluoride crystals,” *J. Nonlinear Opt. Phys. Mater.* **8**, 41-54 (1999).

S. IZUMIDA, S. ONO, Z. LIU, H. OHTAKE and N. SARUKURA, “Intense THz-radiation sources using semiconductors irradiated with femtosecond laser pulses in a magnetic field,” *J. Nonlinear Opt. Phys. Mater.* **8**, 71-87 (1999).

K. SHIMAMURA, N. MUJILATU, K. NAKANO, S. L. BALDOCHI, Z. LIU, H. OHTAKE, N. SARUKURA and T. FUKUDA, “Growth and characterization of Ce-doped LiCaAlF6 single crystals,” *J. Cryst. Growth* **197**, 896-900 (1999).

T. A. LIU, K. F. HUANG, C. L. PAN, Z. LIU, S. ONO, H. OHTAKE and N. SARUKURA, “High average power mode locked Ti:sapphire laser with intracavity continuous-wave amplifire and straind saturable Bragg reflector,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, L1109-L1111 (1999).

H. OHTAKE, S. ONO, Z. LIU, N. SARUKURA, M. OHTA, K. WATANABE and Y. MATSUMOTO, “Enhanced THz radiation from femtosecond laser pulse irradiated InAs clean surface,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, L1186-L1187 (1999).

T. A. LIU, K. F. HUANG, C. L. PAN, Z. LIU, S. ONO, H. OHTAKE and N. SARUKURA, “THz radiation from intracavity saturable Bragg reflector in magnetic field with self-started mode-locking by strained saturable Bragg reflector,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, L1333-L1335 (1999).

Z. LIU, S. IZUMIDA, S. ONO, H. OHTAKE and N. SARUKURA, “Direct generation of 30-mJ, 289-nm pulses from a Ce:LiCAF oscillator using Czochralski-grown large crystal,” *OSA TOPS Vol. 26 Advanced Solid-State Lasers* 115-117 (1999).

Z. LIU, S. IZUMIDA, S. ONO, H. OHTAKE and N. SARUKURA, “High-average power mode-locked Ti:sapphire laser with newly-invented intra-cavity cw-amplification scheme,” *OSA TOPS Vol. 26 Advanced Solid-State Lasers* 394-395 (1999).

S. IZUMIDA, Z. LIU, S. ONO, H. OHTAKE and N. SARUKURA, “Spectrum control of coherent, short-pulse, far-infrared radiation from InAs under magnetic field irradiated with stretched femtosecond laser pulses,” *OSA TOPS Vol. 26 Advanced Solid-State Lasers* 402-404 (1999).

S. ONO, M. SAKAI, Z. LIU, H. OHTAKE, N. SARUKURA, T. TSUKAMOTO, S. NISHIZAWA, A. NAKANISHI and M. YOSHIDA, “Compact THz-radiation Source Consisting of an InAS emitter, a Mode-Locked Fiber laser, and a 2-T Permanent Magnet,” *OSA TOPS Vol. 28 Ultrafast Electronics and Optoelectronics* 83-86 (1999).

S. ONO, T. TSUKAMOTO, H. OHTAKE, Z. LIU, N. SARUKURA, M. OHTA, K. WATANABE and Y. MATSUMOTO, “Enhancement of the THz radiation from InAs (100) clean surface at 50K,” *OSA TOPS Vol. 28 Ultrafast Electronics and Optoelectronics* 87-89 (1999).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

H. OHTAKE, S. ONO, S. IZUMIDA, Z. LIU, K. KURIHARA, N. SARUKURA, K. WATANABE and Y. MATSUMOTO, “Significant enhancement of the THz radiation from an InAs (100) clean surface at low temperature,” Quantum Electronics and Laser Science Conference, Baltimore, May 23-28, 1999, paper QThG13.

H. OHTAKE, S. ONO, S. IZUMIDA, Z. LIU, K. KURIHARA, N. SARUKURA, S. NISHIZAWA and A. NAKANISHI, "A compact THz-radiation source consisting a bulk semiconductor, a mode-locked fiber laser, and a 2-T permanent magnet," Ultrafast Electronics and Optoelectronics (IEEE), Snowmass, April 14-16, 1999, paper UWA2.

K. WATANABE, H. OHTAKE, S. IZUMIDA, S. ONO, Z. LIU, K. KURIHARA, N. SARUKURA and Y. MATSUMOTO, "Enhancement of the THz radiation from an InAs (100) clean surface at 50K," Ultrafast Electronics and Optoelectronics (IEEE), Snowmass, April 14-16, 1999, paper UWA3.

H. OHTAKE, S. ONO, S. IZUMIDA, M. SAKAI, Z. LIU and N. SARUKURA, "Intense THz radiation from femtosecond laser pulses irradiated InAs in a strong magnetic field," 1999 International conference on luminescence and optical spectroscopy of condensed matter, Osaka, Augast 23-27, 1999, paper PB1-41.

M. SAKAI, Z. LIU, H. OHTAKE, N. SARUKURA, Y. MIYAZAWA, K. SHIMAMURA, S. L. BALDOCHI, K. NAKANO, N. MUJILATU and T. FUKUDA, "LiCAF crystal as a new vacuum ultraviolet optical material with transmission down to 112 nm," 1999 International conference on luminescence and optical spectroscopy of condensed matter, Osaka, Augast 23-27, 1999, paper PB3-49.

H. OHTAKE, S. ONO, S. IZUMIDA, Z. LIU, K. KURIHARA, N. SARUKURA, K. WATANABE and Y. MATSUMOTO, "Significant Enhancement of the THz Radiation from InAs(100) Clean Surface at Low-Temperature," The Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics, Seoul, August 30-September 3, 1999, paper FD4.

H. OHTAKE, S. ONO, M. SAKAI, Z. LIU and N. SARUKURA, "Intense THz radiation from InAs irradiated with femto-second laser pulses in a strong magnetic field," 1999 IEEE seventh international conference on terahertz electronics, Nara, November 25-26, 1999, paper Th-C4.

S. ONO, H. OHTAKE, S. IZUMIDA, T. YANO, M. SAKAI, Z. LIU, Y. NAKAYAMA, T. TSUKAMOTO and N. SARUKURA, "Demonstration of newly invented Negative-mask scanning imaging scheme using THz-radiation sources," Conference on Lasers and Electro-Optics, Baltimore, May 23-28, 1999, paper CTuK14.

S. ONO, T. TSUKAMOTO, M. SAKAI, S. IZUMIDA, Z. LIU, H. OHTAKE, N. SARUKURA, S. NISHIZAWA, A. NAKANISHI and M. YOSHIDA, "Compact THz-radiation source consist of bulk semiconductor, a mode-locked fiber laser, and a 2T permanent magnet," 1999 International Workshop on Femtsecond Technology, Chiba, July 13-15, 1999, paper WB-15.

S. ONO, H. OHTAKE, S. IZUMIDA, T. YANO, M. SAKAI, Z. LIU, Y. NAKAYAMA, T. TSUKAMOTO and N. SARUKURA, "Demonstration of newly invented Negative-mask scanning imaging scheme using THz-radiation sources," 1999 International Workshop on Femtsecond Technology, Chiba, July 13-15, 1999, paper TC-29.

S. ONO, H. OHTAKE, S. IZUMIDA, T. YANO, M. SAKAI, Z. LIU, Y. NAKAYAMA, T. TSUKAMOTO and N. SARUKURA, "Demonstration of newly invented Negative-mask scanning imaging scheme using THz-radiation sources," The Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics, Seoul, August 30-September 3, 1999, paper P1.61.

S. ONO, T. TSUKAMOTO, M. SAKAI, S. IZUMIDA, Z. LIU, H. OHTAKE, N. SARUKURA, S. NISHIZAWA, A. NAKANISHI and M. YOSHIDA, "Compact THz-radiation source consisting of a bulk semiconductor, a mode-locked fiber laser, and a 2T permanent magnet," The Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics, Seoul, August 30-September 3, 1999, paper P1.62.

S. ONO, T. TSUKAMOTO, H. OHTAKE, S. IZUMIDA, Z. LIU and N. SARUKURA, "Saturation of the THz radiation

from femtosecond pulse irradiated InAs at high magnetic field," OSA annual meeting, Santa Clara, September 26-30, 1999, paper ThN3.

S. ONO, T. TSUKAMOTO, M. SAKAI, S. IZUMIDA, Z. LIU, H. OHTAKE, N. SARUKURA, S. NISHIZAWA, A. NAKANISHI and M. YOSHIDA, "Compact THz-radiation source consisting of a bulk semiconductor, a mode-locked fiber laser, and a 2T permanent magnet," IEEE International Conference on Terahertz Electronics, Nara, November 25-26, 1999, paper P5.

Z. LIU, S. IZUMIDA, S. ONO, H. OHTAKE and N. SARUKURA, "High-repetition-rate, high-average-power mode-locked Ti:sapphire laser with newly invented intracavity cw-amplification scheme," 1999 International Workshop on Femtsecond Technology, Chiba, July 13-15, 1999, paper WA-6.

Z. LIU, S. IZUMIDA, S. ONO, H. OHTAKE and N. SARUKURA, "Spectral control of coherent, short-pulse, far-infrared radiation from InAs under magnetic field irradiated with stretched femtosecond laser pulses," Advanced Solid-State lasers, Boston, February 1-3, 1999, paper ME13.

Z. LIU, S. IZUMIDA, S. ONO, H. OHTAKE and N. SARUKURA, "Direct generation of 30-mJ, 289-nm pulses from a Ce:LiCAF oscillator using Czochralski-grown large crystal," Advanced Solid-State lasers, Boston, February 1-3, 1999, paper TuB14.

Z. LIU, S. IZUMIDA, S. ONO, H. OHTAKE and N. SARUKURA, "High-average power mode-locked Ti:sapphire laser with newly-invented intra-cavity cw-amplification scheme," Advanced Solid-State lasers, Boston, February 1-3, 1999, paper PD16.

Z. LIU, S. IZUMIDA, S. ONO, H. OHTAKE and N. SARUKURA, "High-Average Power Mode-Locked Ti:Sapphire Laser with Newly-Invented Intra-Cavity CW-Amplifier," The Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics, Seoul, August 30-September 3, 1999, paper P1.44.

Z. LIU, H. OHTAKE and N. SARUKURA, "Characteristics of Gain Spectra in Highly Pumped Yb:Glass for High Power Lasers," The Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics, Seoul, August 30-September 3, 1999, paper P1.77.

Z. LIU, H. OHTAKE, S. IZUMIDA and N. SARUKURA, "All-Solid-State UV Tunable Picosecond Ce^{3+}:$LiLuF_4$ Laser Pumped by the Fifth Harmonic of Nd:YAG Laser," The Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics, Seoul, August 30-September 3, 1999, paper P1.78.

Z. LIU, S. IZUMIDA, S. ONO, H. OHTAKE, S. IZUMIDA and N. SARUKURA, "Czochralski-Grown Large Ce:LiCAF Crystal for Efficient UV Laser with Output up to 60-mJ," The Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics, Seoul, August 30-September 3, 1999, paper ThJ6.

Z. LIU, H. OHTAKE, N. SARUKURA, M. A. DUBINSKII, R. Y. ABDULSABIROV and S. L. KORABLEVA, "ALL-SOLID-STATE ULTRAVIOLET PULSE GENERATION FROM VARIOUS CERIUM:FLUORIDE LASERS," Proceedings of the International Conference on LASERS '98, 422, (1999)

S. IZUMIDA, S. ONO, H. OHTAKE, Z. LIU and N. SARUKURA, "Spectral control of THz-radiation from InAs in magnetic field by the excitation pulse duration and chirp," 1999 International Workshop on Femtsecond Technology, Chiba, July 13-15, 1999, paper TC-21.

S. IZUMIDA, H. OHTAKE, S. ONO, M. SAKAI, Z. LIU and N. SARUKURA, "Saturation of Intense THz radiation from femtosecond-laser-pulse irradiated InAs in a strong magnetic field," 1999 International Workshop on Femtsecond Technology,

Chiba, July 13-15, 1999, paper TC-22.

S. IZUMIDA, S. ONO, H. OHTAKE, Z. LIU, and N. SARUKURA, "Spectral control of THz-radiation from InAs under magnetic field by the excitation pulse duration and chirp," Conference on Lasers and Electro-Optics, Baltimore, May 23-28, 1999, paper JThA4.

S. IZUMIDA, S. ONO, Z. LIU, K. Kurihara, H. OHTAKE and N. SARUKURA, “Visualization of the Beam Propagation and Focusability of Short-Pulse THz Radiation,” The Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics, Seoul, August 30-September 3, 1999, paper P1.63.

M. SAKAI, Z. LIU, H. OHTAKE, N. SARUKURA, Y. SEGAWA, T. OBA, K. SHIMAMURA, S. L. BALDOCHI, K. NAKANO, N. MUJILATU and T. FUKUDA, “LiCAF crystal as a new vacuum ultraviolet optical material with transmission down to 112 nm,” Conference on Lasers and Electro-Optics, Baltimore, May 23-28, 1999, paper CThW3.

M. SAKAI, Z. LIU, H. OHTAKE and N. SARUKURA, “LiCAF Crystal as a New Vacuum Ultraviolet Optical Material with Transmission down to 112 nm,” The Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics, Seoul, August 30-September 3, 1999, paper WL4.

B-3) 総説、著書

島村清史、S. L. BALDOCHI、Z. LIU、猿倉信彦、福田承生,「紫外固体レーザー用フッ化物単結晶」, *レーザー研究* **27**, 547-552 (1999).

大竹秀幸、猿倉信彦,「高強度テラヘルツ電磁波の発生法」, *応用物理* **68**, 1394-1395 (1999).

B-4) 招待講演

N. SARUKURA, H. OHTAKE, Z. LIU, S. IZUMIDA and S. ONO, “Highly Efficient Generation of THz Radiation in Semiconductors under Magnetic Field,” The Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics, Seoul, August 1999.

K. SHIMAMURA, S. L. BALDOCHI, T. FUKUDA, H. OHTAKE and N. SARUKURA, “Growth of New Fluoride Single Crystals for the Superior UV and IR Lasers,” The Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics, Seoul, August 1999.

N. SARUKURA, H. OHTAKE, S. ONO,M. SAKAI and Z. LIU, “Saturation of THz-radiation from femtosecond-laser irradiated InAs in a high magnetic field,” UPS, October 1999.

N. SARUKURA, Z. LIU, K. SHIMAMURA and T. FUKUDA, “High Pulse Energy from Ce:LiCAF Laser as Potential Terawatt UV Ultrashort Pulse Laser System,” Xiangshan Science Conference '99, November 1999.

N. SARUKURA, “Enhanced THz-Radiation from InAs in a Magnetic Field and Its Spectrum Control,” Lasers '99, December 1999.

猿倉信彦,「強磁場下での超短パルスレーザー励起半導体からの THz 電磁波の飽和現象」, テラフォトニクス研究会 , 1999 年 9 月 .

猿倉信彦,「新紫外波長可変固体レーザーの開発」, 応用物理学会春季シンポジウム , 1999 年 3 月 .

猿倉信彦,「新紫外波長可変固体レーザーの開発」, 照明学会シンポジウム , 1999 年 10 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(1998-1999).

Ultrafast Phenomena プログラム委員(1997-).

GORDON CONFERENCE '99 INTERNATIONAL COMMITTEE (1998-1999).

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-).

Advanced Solid State Lasers プログラム委員(1999-).

学術雑誌編集委員

「レーザー研究」編集委員(1997-).

「応用物理」編集委員(1999-).

「ＪＪＡＰ」編集委員(1999-).

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 年 4 月－ 9 月.

宮崎大学工学部非常勤講師, 1998 年 10 月－ 1999 年 3 月.

理化学研究所非常勤フロンティア研究員, 1996 年 4 月－.

工業技術院電子技術総合研究所非常勤研究員, 1994 年 4 月－ 1995 年 3 月, 1998 年 7 月－ 9 月.

財団法人神奈川科学技術アカデミー非常勤研究員, 1998 年 5 月－.

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素子と応用の開発研究

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発見された。以来，我々は先導的な研究を行ってきた。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注目される半導体レーザーは，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が困難であったが，モード品質を示す量として導入されつつあるM^2因子を利用することにより半導体レーザー励起固体レーザーの最適化に成功した。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，最近，アップコンバージョン損失が無いことを利用し上記構成で 85 nm と蛍光幅の９倍にも及ぶ広帯域波長可変動作を実現した。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持つ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，4at.% 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べレーザー共振器に適用する予定である。

c) 現在，開発した共振器内部 SHG 型 Yb:YAG マイクロチップレーザーにおいて，500 mW 級の単一周波数青緑色光を得ている。さらに，同調素子を挿入することで，515.25 ～ 537.65nm と 22.4nm（24.4 THz）にわたる広帯域の波長可変特性も確認した。この応用として，Fe:$LiNbO_3$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，波長多重記録に始めて成功した。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，注目されている。また，上記手法では，結晶の複屈折位相整合（BPM）法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（QPM）法では，位相整合条件を光リソグラフィによるディジタルパターンで設計できるため高機能，多機能な非線形波長変換が可能となる。しかしながら，従来の$LiNbO_3$におけるプロセスでは分極を反転させるための印加高電界を深さ方向に制御することが不可能であった。現在，均一高電界を実現するための雰囲気制御と，光伝導効果を用いた新しい制御方式を検討しており，これにより実用的な赤外域の QPM チップ作成を目指す。一方，

紫外域においては，天然に豊富に存在し，堅牢で200nm以下の短波長領域までの透過特性を有する水晶を用いることを検討している。しかし，水晶ではBPMによる位相整合が不可能であるだけでなく，自発分極を持たないため電界ポーリングも不可能である。そこで，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

N. PAVEL and T. TAIRA, "Pump-beam M^2 factor approximation for design of diode fiber-coupled end-pumped lasers," *Opt. Eng.* **38**, 11 (1999).

N. PAVEL, S. KURIMURA and T. TAIRA, "Design criteria for optimization of fiber-coupled diode longitudinally-pumped lasers using pump-beam M^2 factor," *OSA TOPS on Advanced Solid-State Lasers* **26**, 253 (1999).

T. TAIRA, S. KURIMURA, J. SAIKAWA, A. IKESUE and K. YOSHIDA, "Highly trivalent neodymium ion doped YAG ceramic for microchip lasers," *OSA TOPS on Advanced Solid-State Lasers* **26**, 212 (1999).

N. PAVEL, M. FURUHATA and T. TAIRA, "High-efficiency longitudinally-pumped miniature Nd:YVO_4 laser," *Opt. Laser Tech.* **30**, 275 (1998).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. TAIRA, J. SAIKAWA, A. IKESUE and K. YOSHIDA, "Highly Nd doped YAG ceramic microchip laser," OSA Topical meeting on Advanced Solid-State Lasers '99, Boston, Massachusetts (U. S. A.), 1-3 Febrary 1999, TuB3, 220-222 (1999).

N. PAVEL and T. TAIRA, "A high-efficiency TEM_{00} miniature Nd:YAG laser designed by pump-beam M^2 factor method," OSA Topical meeting on Advanced Solid-State Lasers '99, Boston, Massachusetts (U. S. A.), 1-3 Febrary 1999, MB13, 54-56 (1999).

T. TAIRA, A. IKESUE and K. YOSHIDA, "Performance of highly Nd^{3+}-doped YAG ceramic microchip laser," Conference on Lasers and Electro-Optics CLEO '99, CTuK39, 136-137 (1999).

J. SAIKAWA and T. TAIRA, "Frequency-doubled tunable Yb:YAG microchip laser for holographic volume memories," Conference on Lasers and Electro-Optics CLEO '99, CWO5, 333-334 (1999).

J. SAIKAWA, S. KURIMURA, I. SHOJI and T. TAIRA, "Volume holographic memories by using tunable frequency-doubled Yb:YAG microchip laser," CLEO/Pacific Rim '99, FK4, 1179-1180 (1999).

B-3) 総説、著書

T. TAIRA, "Yb^{3+}-doped solid-state lasers," *Kougaku* **28**, 435 (1999).

池末明生、平等拓範、吉田國雄，「セラミックスレーザー素子の開発と発展性」，*レーザー研究* **27**, 593 (1999).

池末明生、平等拓範、吉田國雄，「高性能多結晶 YAG レーザー媒質の開発」, *Materia Japan* **38**, 784 (1999).

B-4) 招待講演

平等拓範，「最近の固体レーザー研究動向」, レーザー学会研究会 , 大阪 , 1999 年 3 月 .

平等拓範，「Advanced Solid-State Laser Conference 会議報告」, 学術振興会第 130 委員会 , 東京 , 1999 年 3 月 .

平等拓範，「マイクロチップ固体レーザーとその応用」, 無機材質研究所 , 東京 , 1999 年 4 月 .

平等拓範,「多機能計測応用を目指した小型固体レーザーの開発」, 宮崎大学 , 宮崎 , 1999 年 7 月 .

平等拓範,「マイクロチップレーザー」, 理化学研究所 , 仙台 , 1999 年 9 月 .

平等拓範,「広帯域波長可変クロマチップレーザーの展望」, 福井大学 , 福井 , 1999 年 11 月 .

B-5) 受賞、表彰

平等拓範, 第23回（社）レーザー学会業績賞（論文賞)(1999).

平等拓範, 第１回（財）みやぎ科学技術振興基金研究奨励賞(1999).

栗村　直, レーザー顕微鏡研究会優秀賞(1996).

斎川次郎, 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, レーザー学会　研究会委員(1999-).

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-).

平等拓範, 福井大学非常勤講師(1999-).

平等拓範, 宮崎大学非常勤講師(1999-).

平等拓範, 理化学研究所非常勤研究員(1999-).

平等拓範, 米国スタンフォード大学客員研究員(1999-).

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-).

平等拓範, 基盤 B(2)一般研究（No. 11694186）研究代表者(1999-).

C)　研究活動の課題と展望

結晶長が 1 mm 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，短パルス化についても検討したい。この様な高輝度レーザーは多様な非線形波長変換を可能にする。そこで，従来の波長変換法の限界を検討するとともに，これまでの複屈折性を用いた位相整合法では不可能であった高機能な非線形波長変換を可能とする新技術である擬似位相整合法のためのプロセス及び設計法の研究開発を行う。

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チップの研究開発により，中赤外域から紫外域にわたる多機能な応用光計測を可能とする高機能･広帯域波長可変クロマチップレーザー（Chromatic Microchip Laser System; Chroma-Chip Laser）が実現できると信じている。

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) 新規な有機伝導体の開発

c) 単一成分有機導体の分子設計

d) 小さなバンドギャップ有機ポリマーの開発

e) 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クー分子を合成した。これらの中にはヘテロ原子の相互作用で特異な分子集合体を形成するものや，一段階で二電子酸化還元を行うものがある。

b) 新規な有機伝導体の開発：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。これらの中には低温まで金属的性質を示すものがある。

c) 単一成分有機導体の分子設計：ヘテロ環の性質を利用して新しいドナー－π－アクセプター系分子を設計合成し，単一成分での高い導電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

T. FUKUSHIMA, N. OKAZERI, T. MIYASHI, K. SUZUKI, Y. YAMASHITA and T. SUZUKI, “First Stable Tetracyanodiphenoquinodimethane with a Completely Planar Geometry: Preparation, X-ray Structure, and Highly Conductive Complexes of Bis[1,2,5]thiadiazolo-TCNDQ,” *Tetrahedron Lett.* **40**, 1175-1178 (1999).

M. URUICHI, K. YAKUSHI and Y. YAMASHITA, “Spectroscopic Study of Narrow-Band Organic Metal $(BEDT\text{-}ATD)_2PF_6$-(THF) without Dimerized Structure,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 531-538 (1999).

S. IRIE, S. ISODA, K. KUWAMOTO, M. J. MILES, T. KOBAYASHI and Y. YAMASHITA, “Monolayer Epitaxy of a Triangular Molecule on Graphite,” *J. Cryst. Growth*, **198**/**199**, 939-944 (1999).

M. B. ZAMAN, M. TOMURA and Y. YAMASHITA, “Novel Supramolecular Synthon in Crystal Engineering: Ionic Complexes of 4,4’-Bipyridine and 1,2-Bis(2-pyridyl)ethylene with 2,5-Dichloro-3,6-dihydroxy-1,4-benzoquinone,” *Chem. Commun*. 999-1000 (1999).

M. B. ZAMAN, M. TOMURA, Y. YAMASHITA, M. SAYADUZZAMAN and A. M. S. CHOWDHURY, “A Decamethylferrocene and Chloranilic Acid Complex with Hydrogen Bonded Supramolecular Structure between CA and H_2O Molecules,” *Cryst. Eng. Commun.* 9 (1999).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

S. TANAKA and Y. YAMASHITA, “New Building Unit for Rigid and Coplanar Oligo-Aromatic Molecular Wires with Insulating Mantel,” *Synth. Met.* **101**, 532-533 (1999).

K. SUZUKI, M. TOMURA and Y. YAMASHITA, “TCNQ Analogues Composed of Heterocyclic Rings,” *Synth. Met.* **102**, 1480-1481 (1999).

H. YAMOCHI, S. NAKAMURA, G. SAITO, M. B. ZAMAN, J. TOYODA, Y. MORITA, K. NAKASUJI and Y. YAMASHITA, “Cyananilate Anion as Hydrogen Bonded Counter Ion in Conducting CT Complexes,” *Synth. Met.* **102**, 1729 (1999).

Y. YAMASHITA, M. TOMURA, S. TANAKA and K. IMAEDA, “Novel TTF Vinylogues Affording Stable Cation Radicals,” *Synth. Met.* **102**, 1730-1731 (1999).

M. URUICHI, K. YAKUSHI and Y. YAMASHITA, “Temperature Dependent Reflection Spectra of Metallic $(BEDT\text{-}ATD)_2$-X(THF) (X = PF_6, AsF_6),” *Synth. Met.* **103**, 2206 (1999).

B-4) 招待講演

Y. YAMASHITA, “Crystal Structure Control for Organic Conductors,” The Second SANKEN International Symposium on Chemical and Physical Perspective for Molecular Devices, Osaka (Japan), January 1999.

山下敬郎, 「結晶構造制御を目指したπ電子系の分子設計」, 日本化学会秋季年会 , 札幌 , 1999 年 9 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-).

C)　研究活動の課題と展望

有機伝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「新規な有機伝導体の合成研究」の課題を続行する。今までに金属的性質を示す伝導体の合成に成功しているので，今後，超伝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導電性の実現を計る。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。

藤　井　　浩（助教授）

A-1) 専門領域：生物無機化学、物理化学

A-2) 研究課題：

a) 金属酵素反応中間体の電子構造と反応性の研究

b) 磁気共鳴法による小分子活性化機構の研究

c) 金属酵素が作る反応場の特色と機能との関わり

d) 窒素循環過程に関与する金属酵素の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 生体内には，活性中心に金属イオンをもつ金属酵素と呼ばれる一群のタンパク質が存在する。生体内で金属酵素が行う反応は，生体エネルギー合成，物質代謝，生体防御，生理活性物質の合成など多種多様である。金属酵素が，多くの生体反応をおこなうことができるのは，金属酵素それぞれが独自の反応場を使って，その反応中間体の電子状態，反応性を制御しているからだと考えられる。我々は，金属酵素の構造と機能との関わりを解明することを目指して，これまでにペルオキシダーゼやカタラーゼのヘム酵素反応中間体（Compound I）のモデル錯体を合成した。現在，ヘムを活性中心に持たない非ヘム酸素活性化酵素の反応中間体の特色を解明するため，そのモデル錯体の合成を行っている。

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ている。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解明することを試みている。生体内に多く存在する銅酵素を対象として，銅一酸化炭素錯体の ^{63}Cu-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。現在^{17}O-NMRを用いて，銅イオンにより活性化される酸素分子の電子状態と反応性の研究へと展開している。また，ヘム鉄に配位するシアンイオンをプローブとした酵素の反応場の解析法の開発も行っている。

c) 金属酵素が作る反応場の特色と機能との関わりを解明するため，ヘムオキシゲナーゼを題材にして研究を行っている。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。酵素の活性中心近傍のアミノ酸残基をミューテーションすることにより，反応選択性に関与する構造因子を解明することができた。

d) 我々多くの動物は，生命エネルギー合成に酸素を利用しているが，酸素の乏しいところで生育する菌類やバクテリアなどは窒素をエネルギー合成に利用している。これらの菌類やバクテリアは，酸素の代わりに硝酸イオンを電子受容体として利用している。硝酸イオンは，菌体内のさまざまな金属酵素により亜硝酸イオン，一酸化窒素，

亜酸化窒素と還元されて，最終的に窒素になる。これらの菌類は，この反応過程で環境破壊につながる窒素酸化物を分解するため，環境保全の面で最近大きな注目を集めている。我々は，これら一連の酵素の中で，亜硝酸還元酵素に焦点をあて研究を行っている。菌体から本酵素を単離する研究は古くから行われているが，不明な点が多い。本研究では，本酵素の機能発現機構を解明する目的で，ミオグロビンという酸素貯蔵タンパク質をミューテーションにより亜硝酸還元酵素へ機能変換することを行っている。

B-1) 学術論文

K. CZARNECKI, J. R. KINCAID and H. FUJII, “Resonance Raman Spectra of a Legitimate Model for the Ubiquitous Compound I Interediates of Oxidative Heme proteins,” *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 7953-7954 (1999).

C. T. MIGITA, H. FUJII, K. M. MATERA, S. TAKAHASHI, H. ZHOU and T. YOSHIDA, “Molecular oxygen oxidizes the porphyrin ring of ferric α-hydroxyheme in heme oxygenase in the absence of reducing equivalent,” *Biochim. Biophys. Acta* **1432**, 203-213 (1999).

M. NAKAMURA, T. IKEUE, A. IKEZAKI, Y. OHGO and H. FUJII, “Electron Configuration od Ferric Ions in Low-Spin (Dicyano)(meso-tetraarylporphyrinato)iron(III) Complexes,” *Inorg. Chem.* **38**, 3857-3862(1999).

N. NISHIMURA, M. OOI, K. SHIMADZU, H. FUJII and K. UOSAKI, “Post-assembly insertion of metal ions into thiol-derivattized porphyrin monolayers on gold,” *J. Electroanal. Chem.* **473**, 75-84 (1999).

T. IKEUE, Y. OHOGO, A. UCHIDA, M. NAKAMURA, H. FUJII and M. YOKOYAMA, “High-Spin (meso-Tetraalkyl-porphyrinate)iron(III) Complexes As Studied by X-ray Crystallography, EPR, and Dynamic NMR Spectroscopies,” *Inrog. Chem.* **38**, 1276-1281 (1999).

K. CZARNECKI, L. M. PRONIEWICZ, H. FUJII, D. JI, R. S. CZERNUSZEWICZ, and J. R. KINCAID, “Insensitvity of Vanadyl-Oxygen bond Strengths to Radical Type ($^2A_{1u}$ *vs* $^2A_{2u}$) in Vanadyl Porphyrin Cation Radicals,” *Inorg. Chem.* **38**, 1543-1547 (1999).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

H. FUJII, “^{13}C-NMR study of cyanide complexes of iron porphyrins and hemoproteins,” *J. Inorg. Biochem.* **74**, 132 (1999).

B-4) 招待講演

藤井　浩,「多核ＮＭＲによる生体内金属酵素の構造と機能の研究」, ＭＲサイエンス９９ , 理化学研究所 , 和光 , 1999 年 12 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。

永　田　　央（助教授）

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) 光励起電子移動を利用した触媒反応の開発

c) 高効率電子移動触媒を指向した新規金属錯体の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) コバルト(III)錯体とポルフィリンが配位結合を介してつながった化合物を合成した。この化合物は溶液中光照射すると容易に配位結合が切断され，溶媒（アセトニトリル）が配位したコバルト(III)錯体とポルフィリンの混合物となる。暗所ではこの反応は極めて遅いため，ポルフィリンからコバルト(III)錯体への分子内光励起電子移動が配位子交換を促進していることが示唆された。実際，この化合物においてはコバルト錯体の影響によってポルフィリンの蛍光が定常状態で10%ほどまで消光されており，電気化学測定の結果と合わせると励起一重項状態から電子移動が起こっている可能性は高い。この系は原始的ながら「光励起電子移動によって生成した活性金属中心の反応」を実現しており，今後より有用な触媒反応への展開の足掛かりになると考えている。

b) 光励起電子移動を利用して，ポルフィリンを触媒として用いる合成反応を開発した。触媒量のポルフィリンの存在下で，キノンと電子ドナー・シリル化試剤の混合物を光照射するとキノンの還元的シリル化が進行する。照射光の波長依存性を調べたところ，500 nm 以下の短波長領域ではキノンの励起状態も反応に関与するが，それ以上の長波長領域ではポルフィリンの励起状態のみから反応が進行していることがわかった。生体内などの電子伝達系では電子移動と共役してプロトン移動が起こるが，本反応では無水溶媒中でシリル基を「fancy proton」として働かせて電子移動と共役させている。

c) ターピリジンとカテコールを分子内で結んだ配位子とその金属錯体を合成し，構造と反応性について調べた。ターピリジン・カテコール・金属の３元錯体はルテニウムについて詳細に調べられているが，配位子交換が容易に起こる第一遷移金属でこのような混合配位子錯体を合成することは一般に困難である。本研究では，同一分子内にターピリジンとカテコールを持つ配位子を利用することで３元錯体を安定化することを試みた。コバルト・鉄・マンガンについて１：１の錯体が高い錯形成定数で生成していることが ESI-MS により明らかとなった。コバルト(III)の錯体については単離およびＸ線構造解析に成功し，ターピリジンとカテコールを結ぶメチレン鎖長の違いは金属周りの構造にはあまり影響を及ぼさないことを示した。また，電気化学的挙動についても調べ，コバルト(II)への還元に伴って６番目の配位子（この場合は１－メチルイミダゾールを用いた）の交換と錯体の構造変化が同時に起こっていることを示した。

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(1999-).

C)　研究活動の課題と展望

生体内で多くの反応がワンポットで同時進行しているのは，生体系の空間的・時間的な不均一性によるところが大きい。これまでいわゆる「光合成モデル系の構築」として化学の立場からアプローチされてきた研究は，こと光励起電子移動に関する限りこの不均一性を分子レベルで模倣することに主眼をおいてきたように感じられる。しかしながら，触媒反応の開発というセンスでアプローチしてみると，完全な均一系でもうまく条件を選べば多数の同時進行する反応を手なずけることが可能である，ということがわかってきた。この上に空間的不均一性をうまく導入できれば，より複雑な反応系を設計することができるであろうと考えている。このときもまた，さまざまな不均一系触媒反応のノウハウが参考にできるに違いない。こういったアプローチを進めていくことで，化学と生物の間の大きなギャップを少しでも埋めて，新しい「生体関連化学」を打ち立てていきたい。

鈴　木　敏　泰（助教授）

A-1) 専門領域：有機合成化学

A-2) 研究課題：

a) アモルファス性有機電子輸送材料の開発

b) テルル原子を含有した新規有機伝導体の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 有機エレクトロルミネッセンス素子は次世代のフラットディスプレーとして注目されているが，これを構成する電子輸送材料は選択の余地がないほどに少ない。このため我々は全フッ素置換されたフェニレンデンドリマーを設計し，$C_{60}F_{42}$（分子量：1518）および$C_{132}F_{90}$（分子量：3295）を臭素化反応と有機銅を使ったクロスカップリングにより合成した。*p*-トリフェニレンおよび*p*-テトラフェニレン基を含んだ２つの$C_{60}F_{42}$異性体も比較のため合成した。これら３つの$C_{60}F_{42}$は125-135度でガラス転移を示し，アモルファス相が安定であることがわかった。高真空下での昇華によりアルミニウムキノリン錯体を発光層，フッ化フェニレン化合物を電子輸送層とした有機EL素子を作成した。すべての素子で発光が見られ，最高輝度は24.4 Vで2860 cd/m^2であった。電気化学測定の結果によれば，フッ化フェニレンの電子親和度が増加するとともに素子の性能が向上することがわかった。これらの知見をもとに合成したperfluoro-*p*-sexyphenylでは素子の性能が劇的に改善され，最高輝度が13.7 Vにおいて12200 cd/m^2に達した。

b) 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。テルルはイオウやセレンに比べそのサイズが大きく，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。しかしながら，テルル原子を含む有機電子ドナーはイオウやセレンのものに比べて少なく，テトラテルラフルバレン（TTeF）でもこれまで数種類のものが合成されたにすぎない。今回我々は，1-Benzyl-2,5-dihydropyrroleのTTeF誘導体の合成に成功した。このものは溶液では黄緑色で，塩化メチレンより黒色のプレート結晶を与えた。Ｘ線構造解析によれば，分子間のTe-Teの最短距離は3.95 Åであり，Teのファンデルワールス半径の和より小さい。また，このものは電解合成により種々のアニオンと良質の電荷移動錯体塩を作ることがわかった。

B-1) 学術論文

T. AKASAKA, T. SUZUKI, Y. MAEDA, M. ARA, T. WAKAHARA, K. KOBAYASHI, S. NAGASE, M. KAKO, Y. NAKADAIRA, M. FUJITSUKA and O. ITO, “Photochemical Bissilylation of C_{60} with Disilane,” *J. Org. Chem.* **64**, 566-569 (1999).

B-3) 総説、著書

鈴木敏泰，「フラーレン類の合成－ヘテロフラーレン」, *季刊 化学総説* **44**, 49-51 (1999).

鈴木敏泰，「フラーレン類の反応－構造特性と電子的性質」, *季刊 化学総説* **44**, 79-84 (1999).

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。

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，蛋白質中の炭素ー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, J. ASHIDA and S. MIYAJIMA, “Novel satellites in a two-dimensional spin-echo NMR experiment for homonuclear dipole-coupled spins in rotating solids,” *Chem. Phys. Lett.* **305**, 35-38 (1999).

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) 試作した超高真空摩擦試験機により約20種類の表面処理膜について超高真空中における潤滑性能を評価した。また焼付の発生する過程を追跡調査した。

b) 旧型機を改造し装置開発室でガラスやセラミックスの精密加工が出来るようにした。

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イオン結晶の分光

c) 内殻 - 価電子帯遷移を利用した光活性物質の開発

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，BaF_2 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) 内殻－価電子帯輻射遷移を示すイオン結晶において光増幅作用を初めて観測した。

B-1) 学術論文

M. KAMADA, S. ASAKA, T. TSUJIBAYASHI, O. ARIMOTO, M. WATANABE, S. NAKANISHI, H. ITOH, S. HIROSE and M. ITOH, “Combination of Synchrotron Radiation and Lasers for Solid- and Surface-Researches,” *J. Jpn. Soc. Synchrotron Radiat. Res.* **12**, 48-55 (1999).

T. TSUJIBAYASHI, M. WATANABE, O. ARIMOTO, M. ITOH, S. NAKANISHI, H. ITOH, S. ASAKA and M. KAMADA, “Resonance enhancement effect on two-photon absorption due to excitons in alkaline-earth fluorides excited with synchrotron radiation and laser light,” *Phs. Rev. B* **60**, R8442-R8445 (1999).

V. B. MIKHAILIK, M. ITOH, S. ASAKA, Y. BOKUMOTO, J. MURAKAMI and M. KAMADA, “Amplification of impurity-associated Auger-free luminescence in mixed rubidium-caesium chloride crystals under core-level excitation with undulator radiation,” *Opt. Commun.* **171**, 71-76 (1999).

C)　研究活動の課題と展望

a)については真空紫外光用のMichelson型干渉計を建設中である。b)については広い意味でのポンププローブ法を用いた新規測定手法を開発中である。c)については極端紫外光領域においてレーザー発振させうる方法を検討中である。

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) 光誘起現象（脱離，相転移）のダイナミックスの研究

c) 半導体表面の電子状態の研究

d) 放射光科学の新しい方法論の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 固体の内殻励起状態は，輻射過程，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の中の物性情報などを解明する目的で研究を行っている。たとえば，オージェフリー発光における内殻励起子の役割を明らかにするために，共鳴光電子分光を行い，減衰確率を求めることを行った。

b) 結晶を光励起すると，表面から構成原子が脱離したり，結晶構造が変化したりすることがある。この光誘起の原子移動や光誘起相転移などの現象を研究している。たとえば，イオン結晶表面を励起すると表面からアルカリ原子が脱離する。その時間応答をレーザー誘起蛍光法で測定した結果，電子遷移誘起の過程が起こっていることが明らかになった。また，スピンクロスオーバー錯体を光励起すると電子状態が大きく変わることが見出された。

c) 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する。そこで，清浄ならびに吸着した半導体表面の電子状態を調べている。たとえば，Cs や酸素を共吸着させた GaAs について光電子分光を行い，負の電子親和力表面の形成過程を明らかにした。また，光誘起起電力の測定に成功した。

d) 放射光を有効に利用するためには，新しい測定法の開発が必要である。スピン角度分解光電子分光法，レーザー光との組み合わせ実験，時間分解測定，分光器の開発などを行っている。たとえば，放射光とレーザー光との組み合わせにより，１光子遷移とは異なった選択則に従う２光子励起を行い，ｐ励起子のエネルギー位置を決定することに成功した。

B-1) 学術論文

T. TSUJIBAYASHI, M. WATANABE, O. ARIMOTO, M. ITOH, S. NAKANISHI, H. ITOH, S. ASAKA and M. KAMADA, “Resonant enhancement effect on two-photon absorption due to excitons in alkaline-earth fluorides excited with synchrotron radiation and laser light,” *Phys. Rev. B* **60**, 8442-8445 (1999).

M. SANO, Y. SEIMIYA, Y. OHNO, T. MATSUSHIMA, S. TANAKA and M. KAMADA, “Orientation of oxygen admolecules on a stepped platinum(133) surface,” *Surf. Sci.* **421**, 386-390 (1999).

N. SANADA, S. MOCHIZUKI, S. ICHIKAWA, N. UTSUMI, M. SHIMOMURA, G. KANEDA, A. TAKEUCHI, Y. SUZUKI, Y. FUKUDA, S. TANAKA and M. KAMADA, “The (2×4) and (2×1) structures of the clean GaP(001) surface,” *Surf. Sci.* **419**, 120-127 (1999).

M. KOBAYASHI, T. NAMBA, M. KAMADA and S. ENDO, "Proton order-disorder transition of ice investigated by far-infrared spectroscopy under high pressure," *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, 11551-11555 (1998).

K. OHTANI, H. DOSHITA, M. KOHAMA, Y. TAKAMINE, K. ASAO, S. TANAKA, M. KAMADA and A. NAMIKI, "Physisorption lifetimes of Cl_2 on the Si(100) surfaces adsorbed with Cs and Cl," *Surf. Sci.* **414**, 85-92 (1998).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

I. OUCHI, I. NAKAI, M. KAMADA, S. TANAKA, T. GEJO and T. HAGIWARA, "Structure and Core Electron Absorption Spectra of Plyester Films," *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, 183-186 (1999).

M. KAMADA, N. TAKAHASHI and S. HIROSE, "Nanosecond desorption of alkali fluorides excited by synchrotron radiation pulses," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **101/103**, 599-602 (1999).

N. KIDA, N. OHNO, K. DEGUCHI and M. KAMADA, "VUV optical spectra of hydrogen-bonded ferroelectrics $PbHPO_4$ and $PbHAsO_4$," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **101/103**, 603-606 (1999).

B-4) 招待講演

鎌田雅夫,「放射光を用いた新しい物質科学」, 原子分子レベルのキャラクタリゼーションシンポジウム , 大阪電通大学エレクトロニクス基礎研究所 , 1999 年 3 月 .

鎌田雅夫,「放射光とレーザーの組み合わせによる固体表面の研究」, 放射光産業利用技術懇談会第２２回講演会 , 立命館大学 , 1999 年 4 月 .

鎌田雅夫,「放射光利用光電子分光法による半導体表面研究」, 表面分析講演会 , 1999 年 6 月 .

鎌田雅夫,「アンジュレーターとレーザーの組み合わせ実験への期待」, 物性研アンジュレーター検討会 , 東大物性研 , 1999 年 7 月 .

鎌田雅夫,「半導体表面における光誘起現象―高輝度光源への期待」, 日本物理学会領域９シンポジウム , 岩手大学 , 1999 年 9 月 .

鎌田雅夫,「放射光とレーザーの組み合わせ実験」, 物性研研究会「先端分光物性研究の現状と将来展望」, 1999 年 10 月 .

鎌田雅夫,「レーザーと高輝度軟Ｘ線を組み合わせた研究」, SPring-8 研究会「３０ｍ軟Ｘ線アンジュレータ利用固体物理学研究の展望」, SPring-8, 1999 年 12 月 .

鎌田雅夫,「放射光とレーザーの組み合わせによる表面研究」, 第５回Ｘ線結像光学シンポジウム , 名古屋国際会議場 , 1999 年 12 月 .

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(1995-96, 1999-).

日本放射光学会渉外幹事(1999-).

学会の組織委員

日本放射光学会合同シンポジュームプログラム委員(1999).

日本物理学会イオン結晶光物性分科世話人(1998.11-1999.10).

学術雑誌編集委員

Synchrotron Radiation News, correspondent (1993.4-).

科学研究費の研究代表者、班長等

特定領域研究Ｂ「放射光と可視レーザー光との組み合わせによる新しい分光法」班代表者(1999-).

B-7) 他大学での講義、客員

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った。たとえば，半導体表面がレーザー光によってバンドの曲がりが生じるなどの光誘起現象の測定に成功した。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, 短パルスレーザーの整備によって, 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, 半導体表面の電荷移動についての研究が進んでいる。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：加速器物理学，ビーム物理学、原子核物理学

A-2) 研究課題：

a) 加速器を用いた光源の研究

b) 自由電子レーザー

c) 非線形ビーム運動学の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 電子蓄積リングの挿入光源の非線形磁場の解析と，それが電子ビームに与える影響の理論的考察を行い，実際にUVSOR蓄積リングに設置されている円偏光アンジュレータがビームに及ぼす収束力を精度良く説明することに成功した。

b) 電子蓄積リングを用いた自由電子レーザーにおける飽和レーザー出力を解析的に導き,実験値と良い一致を得た。また負の運動量収縮因子を持つ蓄積リングを用いた自由電子レーザー相互作用を数値シミュレーションし，その特性評価を行った。また，電子ビームと自由電子レーザーの時間ずれを両者の高調波スペクトルの位相差を検出して，これをフィードバックすることにより自由電子レーザー発振の安定性を保つ制御システムを開発した。

c) 電子蓄積リングに現われる非線形なエネルギー分散関数を測定し，解析的に導出されたそれと良く一致することを見い出した。これによって蓄積リングに多重極のガイド磁場を持ち込むことにより非線形エネルギー分散関数を変化させ電子バンチの縦方向長さを極端に短く制御する可能性を開いた。

B-1) 学術論文

H. HAMA and M. HOSAKA, “Longitudinal Beam Dynamics and FEL Interaction on a Negative Momentum Compaction Storage Ring,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A* **429**, 172-178 (1999).

M. HOSAKA, J. YAZAMAKI and H. HAMA, “Influences of Electron Beam Properties on Spontaneous Radiation from an Optical Klystron,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A* **429**, 191-196 (1999).

H. TANAKA, M. TAKAO, K. SOUTOME, H. HAMA and M. HOSAKA, “A Perturbative Formulation of Nonlinear Dispersion for Particle Motion in Storage Rings,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A* **432**, 396-408 (1999).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

M. HOSAKA, J. YAMAZAKI, T. KINOSHITA and H. HAMA, “Longitudinal Beam Dynamics on an Electron Storage Ring with Negative Momentum Compaction Factor,” *Proceedings of the 1st Asian Particle Accelerator Conference* 426-428 (1998).

H. HAMA, M. HOSAKA, H. TANAKA and J. YAMAZAKI, “Consideration for an FEL-Optimized Electron Storage Ring,” *Proceedings of the 1st Asian Particle Accelerator Conference* 728-730 (1998).

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

超先端電子技術開発機構ニュースバル調査委員(1999).

兵庫県ニュースバル技術検討委員(1999).

日本原子力学会先端的自由電子レーザー研究専門委員(1999-).

Executive Committee of International Free Electron Laser Conference (1998-).

学会の組織委員

Local Organizing Committee of the 1st Asian Particle Accelerator Conference.

ビーム物理研究会幹事会委員 .

加速器科学研究発表会組織委員 .

C) 研究活動の課題と展望

蓄積リングにおける電子ビームと自由電子レーザーの相互作用がもたらす非線形な電子の運動の理解が深まってきている。しかしながらその挙動は非常に複雑であり，加速器中での電子ビームの特性を自由電子レーザーに最も適したものにするための制御は困難なものと言える。電子ビームのエネルギー分布関数を明確にすることと，それによる位相空間での非線形運動を明確にし，いかに蓄積リングのガイド磁場を構築するかが今後の課題となっている。従来の高輝度光源を目指した放射光リングとは異なったアプローチで加速器設計の最適化を図って行かなければならない。また自由電子レーザー相互作用によって形成したミクロバンチを崩さずコヒーレントな高調波放射光を発生させることなどの応用を考えても，高次エネルギー分散関数の正確な評価は非常に重要で，そのための基礎的な実験及び理論の進展を急がなくてはならないと考える。

＊）1999 年 9 月 1 日東北大学大学院理学研究科助教授

繁　政　英　治（助教授）*)

A-1) 専門領域：軟X線分子分光、光化学反応動力学

A-2) 研究課題：

a) 内殻励起分子の光解離ダイナミクスの研究

b) 配向分子からのオージェ電子角度分布測定（繁政）

c) 高性能斜入射分光器の開発

d) 二次元画像法を用いた高効率同時計測装置の開発（下條助手）

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) オージェ終状態と解離イオンの相関，特に内殻電子の局在性により，ある原子サイトの内殻電子を選択的に電離した後に期待される選択的な結合の切断の原因を直接検証することは興味深いテーマである。この本質的な原因は何かを探るために，$(CH_3)_6Si_2O$ 分子を対象として Si2p-VV，C1s-VV オージェ電子と解離イオンの相関を観測した。サイト選択的な結合の切断が起こるためには，オージェ終状態に於ける二正孔が切断される結合に局在化し，しかも振動緩和を通じてエネルギーが再配分される前に速やかに解離する必要があると考えられる。測定結果から，価電子二正孔状態の内，最もエネルギーの小さい状態を選んだ場合，内殻電離サイトに依存した解離の選択性が最も高くなり，それ以外の電子状態では明確なサイト選択性が見られない事が判明した。さらに，高分解能電子分光のデータから，内殻電離サイトに依存した二価イオン状態が最低束縛エネルギー領域に形成される事が，サイト選択性の原因であると結論付けられた。

b) 観測される二次応答スペクトルの高分解能化及び理論計算の進歩により，共鳴オージェ電子放出過程については，共鳴励起と脱励起過程とを分離して記述できないという認識が広まった。一方，通常のオージェ電子放出過程の場合には，先ず内殻正孔状態が形成され，引き続いてオージェ電子放出過程が起こる二段階過程と考えられてきた。ところが，CO 分子の炭素 1s 電離領域において，配向分子からのオージェ電子の角度分布を測定したところ，炭素1s電子がσ対称性の波として分子を離れる場合とπ対称性の場合とではオージェ電子の角度分布が全く異なる結果が得られた。内殻電子のイオン化しきい値近傍で光のエネルギー（つまり光電子の運動エネルギー）を変化させると，光電子とオージェ電子の運動エネルギーとスペクトルプロファイルが変化する事は PCI（Post Collision Interaction）効果として知られているが，角度分布の中でその影響らしきものを捉えたのは世界初である。このことは，通常のオージェ電子放出過程もまた完全に独立した二段階過程ではない事を示唆しているものと思われる。

c) 近年のシンクロトロン放射光に関連する分光技術の進歩は目覚ましく，通常の偏向電磁石部からの放射光でも，炭素，窒素，酸素を含む分子の内殻励起状態の振動分光が比較的容易に行える，いわゆる高分解能斜入射分光器が世界各地の放射光施設で次々と建設されている。しかし残念ながら，現在の UVSOR には，200 eV を越える領域でこの種の実験を可能にする高性能斜入射分光器が存在しない。内殻励起分子の解離ダイナミクスの詳細の解明のためには，振動分光が可能な高性能分光器が必要不可欠である。90～600 eV のエネルギー範囲で，分解能 5000 以上を達成するように，不等刻線平面回折格子を用いた分光器のデザインを行った。

d) 内殻励起状態の崩壊ダイナミクスは，分子解離とオージェ電子放出との競争過程であるという間接的な証拠が二

次応答スペクトルの解析から得られている。しかし，反結合性の強弱と競争過程の関係や内殻電離状態の場合はどう変わるのかなど，内殻正孔状態に起因する解離ダイナミクスではまだまだ不明な点が多い。これは，原子核の変位に対しては，より敏感で直接的情報が得られるはずの解離イオンのベクトル相関測定や，電子とイオンのベクトル相関測定から解離ダイナミクスを議論出来ていない事に起因すると思われる。我々は，解離イオン種間のベクトル相関測定の実現を目指して，新しい計測システムの開発を行っている。二次元検出器の導入は急務であり，本格的導入に向けたテスト実験を行っている。（下條助手）

B-1) 学術論文

A. A. PAVLYCHEV, N. G. FOMINYKH, N. WATANABE, K. SOEJIMA, E. SHIGEMASA and A. YAGISHITA, "Dynamic Properties of N and O $1s^{-1}$ σ_u* Shape Resonances in N_2 and CO_2 Molecules," *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3623-3626 (1998).

T. HAYAISHI, T. TANAKA, H. YOSHII, E. MURAKAMI, E. SHIGEMASA, A. YAGISHITA, F. KOIKE and Y. MORIOKA, "Post-collision interaction effects of threshold photoelectrons in Kr L_3-shell photoionization," *J. Phys. B* **32**, 1507-1513 (1999).

J. ADACHI, N. KOSUGI, E. SHIGEMASA and A. YAGISHITA, "Vibronic coupling and valence mixing in the 1s → Rydberg excited states of C_2H_2 in comparison with N_2 and CO," *Chem. Phys. Lett.* **294**, 427-433 (1999).

E. MURAKAMI, T. HAYAISHI, Y. LU, Y. MORIOKA, F. KOIKE, E. SHIGEMASA and A. YAGISHITA, "Post-collision interaction effects induced by Auger cascades following Xe L_1-shell photoionization," *J. Electron Spectrosc.* **101-103**, 167-171 (1999).

T. GEJO, K. OKADA, T. IBUKI and N. SAITO, "Photodissociation of Ozone in the K-edge Region," *J. Phys. Chem. A* **103**, 4598-4601 (1999).

B-4) 招待講演

E. SHIGEMASA, "Photoelectron Angular Distributions from Oriented Molecules," LURE, Orsay (France), January 1999.

E. SHIGEMASA, "Angular Distributions of Photoelectrons from Fixed-in-space Molecules as a Probe of Shape Resonances," University of Freiburg, Freiburg (Germany), February 1999.

繁政英治, 「配向した分子からのオージェ電子の角度分布」, 日本物理学会 1999 年秋の分科会 , 盛岡 , 1999 年 9 月 .

B-6) 学会および社会的活動

学会の組織委員

繁政英治, 第 13 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(1999-).

学会誌編集委員

下條竜夫, 日本放射光学会誌編集委員(1999-).

C) 研究活動の課題と展望

他施設での研究とは異なる独自性を出すために，我々は内殻励起状態の寿命幅以下の光分解能により実現される共鳴X線散乱過程における内殻励起状態の崩壊ダイナミクスを詳細に研究する事を目指す。このような実験条件下では，多原子分子でもある程度振動モードを選択励起することが可能であり，共鳴オージェ電子と生成イオン

との同時計測により，内殻励起後の解離過程における原子移動（分子振動あるいは分子変形）と結合切断との関係の詳細を解明出来ると考えている。また，直線偏光に対する分子の空間的な配向や原子核の運動が，電子放出や解離過程に対してどのように影響するのか，そのダイナミクスの詳細の解明を目指した研究を展開して行きたい。これらの研究をUVSORで実現するためには，高性能分光器の建設と二次元検出器内蔵の高効率同時計測装置の開発が必須である。しかし，このような大型装置の開発・立ち上げにはかなりの時間が必要なので，UVSORに既存の設備を活用した予備的な実験を中心に，国内外の放射光施設での共同研究も当面は継続して行く方針である。

＊）1999 年 5 月 1 日着任

４．点検評価と課題

分子科学研究所は，1993年から３年毎に外部評価委員による点検評価を行い，その報告が分子研レポートに掲載されている。本年度は第３回の外部評価が，６研究系および，錯体化学実験施設に対して実施された。分子科学の指導的立場にある６名の外国人研究者が，多忙な時間を割いて岡崎を訪れ，数日のインタビューによって的確な評価をされたことに篤く感謝する。研究の第一線で活躍されている，国内の著名な研究者による外部評価でも，分子研が四半世紀の歴史を持つ現況を踏まえ，共同利用研究機関としての在り方を含め，多くの貴重な御批判，御意見をいただいた。

国内外いずれの評価においても，分子研での現在の研究水準については，高い評価が与えられている。分子科学の発展の指導的役割を果たす意味で，さらに野心的，意欲的な分野開拓型研究を期待する声が大きかったことが印象に残る。このためにも，分子研の研究者が，所の内外と協力して発展的な研究を行うことが重要である。

4-1　理論研究系

国内評価委員会開催日：平成11年12月25日

委　員　　加藤　重樹　（京大院理，教授）
　　塚田　　捷　（東大院理，教授）
　　吉川　研一　（京大院理，教授）
　　中村　宏樹　（分子研，教授）
　　岩田　末廣　（分子研，教授）
　　平田　文男　（分子研，教授）
オブザーバ　谷村　吉隆　（分子研，助教授）
　　岡本　祐幸　（分子研，助教授）
　　米満　賢治　（分子研，助教授）
　　青柳　　睦　（分子研，助教授）

国外評価委員面接日：平成12年１月17日～18日

委　員　　Professor Nicholas Handy (Department of Chemistry, University of Cambridge)

4-1-1　点検評価国内委員会の報告

(1) 分子科学における理論の位置付け

分子科学における理論の重要性は近年ますます増しており，理論研究グループの存在は 今や不可欠なものであると認識されるに至っている。研究対象も，小さな分子から，液体，生体高分子などの巨大分子，そして分子性導体へと大きく広がっている。量子化学に代表される電子状態論，化学動力学とその制御，分子系の散逸過程の統計力学，分子集合体の電子相変化の理論，生体分子の シミュレーション等など実験に刺激されながら理論的手法も大いに発展を見せている。一方，電子計算機は言うまでもなく理論研究にとって極めて重要な道具となっている。ハードウエアや計算手法等の計算科学の発展が理論に及ぼした影響も計り知れない。

(2) 日本における理論分野の発展と問題点

上述した様な理論の重要性とともに理論が本来持っている幅広い可能性にも拘わらず，日本ではまだ十分に理論に対する評価が根付いていない。以前から言われている事であるが，その状況は今もあまり変わっていない。欧米諸国に比較して理論の重要性に関する認識が依然として低い。この状況を改善するためには，日本の化学に於ける教育の改善（化学物理関連の科目や学科がない等）及び学界の理論に対する認識の変革が必要である。これは，化学側だけの問題ではなく，物理の方からも化学との交流を深め学問の融合をもっと推進する努力がなされるべきである。

(3) 分子研理論研究系の評価，問題点，期待する役割等

理論研究系では幅広い分野に亙る研究が行われている。特に理論第四の設立により，化学系と物理系様々な分野の研究者が一堂に会して議論し切磋琢磨できる環境が整い，研究活動が飛躍的に増大した。研究活動・環境について特に問題点はないと言える。

ただし，分子研は大学と同じ様な体制・構造を採るべきではなく，研究本位の仕事をするべきである。特に，若い人（助手等）が大学院教育などで時間をとられる様な体制にすべきではない。また，大学では学生の学力低下が深刻な問題になっているが，それに巻きこまれないようにもするべきである。つまり，分子研では，博士課程はまだしも，修士課程を持つのは良くない。むしろ，大学で博士号を取得した学生の博士研究員等の教育の場としての役割を持つべ

きであろう。分子研でやるべき事をこのように位置づけることが大切であると考える。また，分子研は，化学と物理の人間が出入りし易い環境を常に保ち，色々な学問分野の交流の中心になるべきである。様々な研究会の開催等を通してこれに貢献すべきである。

(4) 電子計算機センターの評価と問題点

分子研電子計算機センターが，日本の理論化学発展のために果たした役割は大変大きい。理論研究にとっての数値計算の重要性は言を待たないが，国際的に最先端の計算機環境を常に整備・維持する事が必要がある。ワークステーション等の発達により，小規模な計算は，計算機セン ターを必要としなくなったが，分野によっては，計算機の能力が国際競争の鍵となっており，その重要性はますます増している。電子計算機センターの今後の重要な役割の一つは，真に大型計算を必要とする分野を選択しそこに特化したシステムを持つことであろう。大学では計算機センターの目的を特定できないが，分子研では特定できる。分子科学の研究の飛躍的進展のためには計算機の能力が不可欠であることをアピールし，予算増を目指すべきである。そのためには，電子計算機センターを積極的に使う大型ユーザーを，予算申請やシステム選定に積極的に参加させるべきであろう。

分子研電子計算機センターは来年度から岡崎国立共同研究機構･計算科学研究センターへと組織変えが行われる。従来からの分子科学を大事にしながらも生物科学を包含した形での展開をする事になるが，それをどのように実現するかについては，十分な議論が行われるべきである。機構への組織変えに伴い，将来はなお一層の計算能力の拡大を目指さなくてはならない。

また，予算の問題もあるが，分子研の施設は大学共同利用機関として全国の研究者に研究支援を行う必要があるにも関わらず，相変わらず支援スタッフ（助手や技官など）が不足しているという深刻な問題もある。予算や人員の不足問題は，前回の評価でも指摘されているが，何も改善されていない。

(5) 博士研究員に関する問題

分子研は，高度な研究を行う場として，また若手研究者を訓練する場として，博士研究員を増員すべきである。また，現在分子研に所属する博士研究員には，さまざまな待遇のものがあるが，ある程度待遇を統一した方がよい。また，外国人の博士研究員をもっと容易に採用できる制度を導入するべきである。

(6) 独立行政法人化に関する問題等

独立行政法人化に当っては，分子研は高等学術研究機関としての役割を果たすことを目指すべきであろう。そのためには，予算の集中投資が必要である。基礎学術研究の重要性を訴え続け，直ぐに役立つ研究にしかお金が出なくなる様な状況の到来を絶対に避ける努力をしなくてはならない。また，米国におけるように，研究指導者が研究費申請のための労力に研究時間の何割も費やさなくては ならないというような本末転倒な状況は是非とも避ける必要がある。

4-1-2　国内委員の意見書

委員 A

分子科学研究所理論研究系は，設立以来，25年の間，日本の理論化学の研究の中心的役割を果たしてきた。現在の日本における理論化学，化学物理理論の研究の進展も分子研理論研究系の存在を抜きには語れないと言っても過言ではない。数年前に分子基礎理論第４部門が作られ専任部門が３部門になったことにより研究分野が広がり，電子状態，反応動力学，液体統計論，生体高分子など理論化学，化学物理の幅広い分野の研究者を擁する研究センターとして大きく発展している。特に，歴史的理由により理論化学の分野に偏りが大きい日本の現状を考えると，理論研究系における研究分野の配置のバランスの良さは極めて重要であり，今後の日本における理論化学，化学物理理論の研究に幅

を持たせ大きく発展させるためにはこれまで以上に重要な役割を果たすことが期待される。分子研の恵まれた研究条件の下で研究をすることは若い研究者にとって憧れであった。これまでも分子研での研究を通じて力量をつけ，大学等の場で活躍している研究者を多く生み出してきた。ここ10年ほどの間の大学における理論化学の研究室数の増加やこの間の大学院の量的拡大により理論化学，化学物理理論の研究者を目指す学生，特に博士課程大学院生の数が20数年前に比べて大幅に増加している。これは理論化学の学問的発展にとっては好ましいことではあるが，一方で，いわゆるオーバードクター問題を再び生み出し，現状ではかなり深刻な事態となっている。このような現状を考えると，分子研が博士課程修了者に研究の場を与えることは極めて重要であると思える。現在，IMSフェローを初めポスドクの人たちが分子研で研究を行っているが，日本の大学から生み出される博士課程修了者の数を考えると，分子研のポスドクの数はまだまだ少ないと言える。分子研における研究は，大学のように学生に対する教育の一環として進める研究ではなく，professional な研究者が切磋琢磨して進める質の高い研究であるべきであり，そのために卓越した研究条件が用意されていると言えよう。従って，特に理論研究系は，ポスドクを主力に研究を進めるべきであると言える。具体的には，１研究グループ当たり２名の分子研独自のポスドクを持つ制度を早急に確立すべきである。これが保証された上で学振その他のポスドクを受け入れる体制を作るべきである。

理論化学，化学物理理論の研究を進める上で電子計算機の利用は不可欠である。分子研計算機センターは，設立以来，日本の理論化学の研究の発展に極めて大きな貢献をしてきた。日本が分子科学のための大きな計算機センター，計算資源を持っていることは国際的にも有名であり，海外からの高い評価を受けてきた。分子研計算機は，日本の乏しい研究条件の下で理論化学の研究を進めるための一種の生活保障のような役割を果たし，それが今日の理論化学研究の進展を支えてきたといえるが，科研費の増額などにより個々の研究室が不十分ながらワークステーションを所有することができるようになってきていることを考えるとその役割を変化させる必要があるように思える。当然，日本の多くの理論化学研究者は，自分の所属する大学等に十分な計算資源を持っていないため，分子研計算機を日常の研究のため使う必要があり，日本の理論化学のレベルを維持するためにはこの機能を引き続き持つ必要がある。しかし，現状では，Gaussian などの汎用プログラムが多く使用され，多数のCPUやメモリーを要する大型計算が容易に実行できる環境が十分に整備されていない。共同利用研の計算機は，大学などでは様々な制約のため実行することが困難な大型計算を実行することができる環境を整え，研究の先端部分を前進させる役割を持っている。来年度には，分子研計算機センターが岡崎研究機構のセンターになり，新しいスーパーコンが導入されることになっている。この機会に20数年間続けてきた計算機利用申請の方法を再検討することも必要であろう。特別プロジェクトの申請を他の申請とは別に募集するのも一案かもしれない。

最後に，現在，国立大学の独立行政法人化が大きな問題となっている。分子研も独立行政法人化の対象となっていると聞いている。そもそも独立行政法人は，日本の財政問題に端を発し，行政改革の一環として大学，研究所を政府から切り離し，効率化の論理で評価しようというものである。もし，現在言われている法人化が実行に移されたならば，分子研は大きな打撃を受けることは想像に難くない。特に，理論研究系の研究は，実用に直接結びつくものではなく，産業その他に役立つことを基準に評価された場合，極めて困難な事態に陥らざるを得ない。また，効率化の論理，費用対効果の論理で論文増産競争に巻き込まれた場合，質の高い研究によって理論化学，化学物理理論のセンターとしての役割を果たすことが困難となり，ひいてはその存在価値も問われることになる。分子研理論研究系は，これまで日本の理論化学の研究の進展に大きな寄与をしてきたが，それは実用の論理ではなく，純粋に学問の論理に則ってである。この意味で，独立行政法人問題は，理論研究系にとって極めて深刻な問題であると言わざるを得ない。理論研究系として，これまで果たしてきた役割，成果を踏まえ，独立行政法人問題に対して明確な意志表示をすべきで

あると考える。

委員B

研究内容について

一般的な印象として，理論研究系の各部門のスタッフは，分子科学の最も重要と思われる領域に布陣しており，それぞれが専門的に掘り下げた一流の研究活動を行っている。新設の分子基礎理論第四部門は順調にスタートし，活発な研究活動を軌道に乗せたように思われる。とりわけ電極・溶液界面などの溶液関連の研究や，有機導体関連の研究はそれらの中核であり，従来カバーしきれなかった理論系研究科としての新しい領域を開拓している。分子基礎理論第一研究部門では量子化学の中軸となる研究が進み，励起状態やクラスターなどで大きな成果があがっているが，たんぱく質分子の第一原理計算からの立体構造予測など，生物との関わりのある研究も大いに注目される。分子基礎理論第二研究部門でのトンネル遷移過程の解析的な理論はユニークな研究であるが，溶液の非線形高次光学過程，溶液内電子移動の研究も分野的には重要な方向を目指すものと言えよう。

一方，これからまさに大きく発展しようとする分子科学の課題は多く，その前線は極めて大きな広がりを示している。例をあげれば個々の分子を機能回路素子として用いる単分子エレクトロニクス，原子間力顕微鏡で開かれる原子分子ナノ力学，カーボンナノチューブと表面のハイブリッド系，有機分子と無機固体複合系など，将来の超微細デバイス，機能性ナノ材料と関係する分野がある。このような躍動的に進展している周辺分野の動きにも，理論の立場からの目配りが欲しい。物性物理や電子工学などの分野とのより太いパイプができることを，さらに期待したいところである。電子計算機センターの関連では，新しい計算理論やコンピュータアーキテクチャなど関連分野についても，関心を持っていただき，交流の機会を作るよう努力されるといいのではないかと思った。

一般論として，先端的な科学研究者には専門分野で超一流の研究をすることを絶えず求められているのはもちろんだが，分子研の研究者にはそれ以上のことを期待するのは間違いだろうか？　すなわち，研究の成果とその意義，あるいは面白さを，同業者はもちろんのこと，他の科学一般の領域にいる人々，さらにはアカデミックな世界とは無縁な一般社会にどのようなかたちにせよ有形無形に絶えず発信してゆくようなスタンスを持ってほしいと思う。すなわち基礎科学がなぜ社会にとって必要なのかという，一般国民，特に行政やメディアにたいする説得性（アカウンタビリテイ）が必要とされる。これは科学や文化に対する基本的な無理解にねざす安易な独立法人化などが喧伝される現在，とくに重要なことと思われる。残念ながら我が国では一般の国民を始め，政財官界，マスコミなどの多くは，科学に対する共感や理解は乏しく，技術と科学の違いすらよく認識していないように思われる。たとえば先端技術の基礎として応用研究に徹する工学的研究ならば経済的基礎も得やすく，政府，国民にたいして十分な説得力を持ちうるであろう。しかし，分子研の使命は必ずしも応用を指向する訳では無く，自然科学的な真理の探求あるいは純粋な学問的な好奇心に触発される基礎科学としての展開に重点があると思われる。そうであればこそ，上に述べたアカウンタビリテイと情報発信の努力が求められるのではなかろうか？　上に述べたことを実現するためにも，関連分野はもちろんのこと，科学技術 の最先端の動向にいつも関心を持ちつづけ，場合によっては新しいパラダイムを創生するほどの気構えが，必然的に求められることとなるであろう。一つの専門分野でリーダシップをとりつづけることは，おそらくどのような一流の研究にとっても必要条件であるに違いない。しかし，そればかりではなく発想やアプローチを固定化することなく，生き生きと躍動する異分野を横断的に眺められるスケールの大きさと大胆な発想が重要になる。これは研究者一般に望まれることであるが，とりわけ分子研の研究者にはそのようなことを期待したいところである。ことばを変えれば専門性に埋没するのではなく，非専門性の中から養分をとりこむ努力を怠らないことである。

ことなる環境にいる研究者との感受性の豊かな出会いが必要なのである。学問の細分化が極限にまで進みつつある現在，異分野間の交流，情報発信の意欲の重要性はますます高まりつつある。分子研の研究者，とくに理論研究者の方々には，是非こうした意識を持ち続けていただくことをお願いしたい。

大学院教育について

研究にたいするしっかりした動機をもった学生については，分子研で大学院教育行うことによって，いろいろな面で良い効果が期待される。学生自身が優れた研究者からの影響をうけ，第一線を切り開く一流の研究に身をもって参加し，一つの達成を体験することの教育効果は計り知れない。そればかりでなく研究者自身にとっても，学生の生き生きと発想にふれること，自らも教育者として初心回帰を迫られることなど，いろいろと望ましい効果があると思われる。

一方，十分な動機と能力のない学生を分子研に受け入れること，あるいはそうならざるを得ない教育システムにコミットすることには，賛成できかねる。このような学生の指導をするには，膨大な労力と時間を割かなければならないからである。もちろん，このように全精力をもって動機付けから出発する初心者教育をおこなうこと自体は有意義なことである。しかし，これに最先端の研究を行う研究所スタッフが取り組むのは，経済的，人的資源の効率的運用の観点からしても，決して望ましいことではないと思われる。

委員C

年の暮れのおしせまった12月25日に分子研に寄らせていただき，中村先生をはじめ理論系の研究者の方々と，情報交換・議論をさせていただきました。その折私が発言しましたことを中心に，ここで一筆述べさせていただきます。

(1) 分子科学関連分野での理論の発展

電子状態理論は過去20年余の間に驚異的な発展をとげ，各種分光法によって得られるスペクトルの解析はもとより，多様な化学反応について反応経路の詳細を明らかにすることのできるような理論的手法が発展してきた。

一方，分子集団や蛋白質などの巨大分子を対象とする統計力学的な研究についても，De Gennesのスケーリング理論に代表されるように，大きな進展があった。さらに，非平衡系の統計力学の主たる研究対象が，国際的に見て線形領域から非線形領域へとシフトしたのも，ここ20年余の間の特徴であると思われる。

(2) 日本における現状と国際的位置付け

分子軌道理論に代表される量子化学の研究者は，分子研創設以降着実に増加しており，国際的に見て，トップクラスの研究が進められてきている。一方で，日本国内の大学では依然，化学と物理の間の溝は深く，分子科学の理論的発展を担いうる人材の養成には大きな問題が残されている。

(3) 分子研の役割と評価

分子研はこの間，分子の電子状態や反応論の研究の発展に中核的な役割を果たしてきたと言って良いと思われる。過去，理論系の人員は決して多いとは言える状況にはなかったが，国際的に見ても，極めてレベルの高い研究が進められていた。

又，少ないスタッフのもと計算センターがOpenな形で運営され，それを活用する中で国内外の研究者が，有意義な研究を進めてきたといえる。

分子科学領域の理論計算は，大規模なものとなることが多い。又，そのような高負荷の計算によってはじめて分子や分子集団の挙動をより正しく，記述することが可能となる。それ故，共同利用研究所としての有効に機能するためにも，計算機環境を持続的に整備していくことが重要な課題である。

(4) 今後の発展が期待されている研究課題

分子の理論計算は依然，極めてホットな研究課題であり，今後も大きな発展が期待される。そのためにも計算機環境の整備が必須であることは既に述べた。そこでここでは別の側面から私見を言わせていただきたいと思う。

過去20余年の間に，化学物理（物性）理論は，質的な発展をとげた。繰り込み群やスクーリング理論，カオスなどの非線形現象，ランダウ流の相転移理論等，それまでの時代とは一線を画するような新しい概念や理論が生み出されてきている。非平衡系の統計力学の理論的対象自体，線形から非線形に大きく拡張した。このような理論的発展を踏まえて，いまや北米や欧米を主体に30を超えるNonlinearをその名称の中に持つ研究所や機関が創設されてきている。そしてこういった研究所では数理物理的方法論を核にして，化学，生物さらにはもっと広い分野を対象とした研究が進められている。残念ながら日本ではこのような学際的な研究所はまだ無い。私の個人意見としては，日本でこのような研究所を作ると，すぐにそれ自体が変質して新たな“村社会”となる危険性が大きいと思われる。そこで，分子研の理論部門を，今後一段と拡充することにより，このような非線形ダイナミクスを中心に捉えた研究も行えるようにしていただければと思う。特に岡崎研究機構に設置予定の総合バイオセンターは，分子研と基生研・生理研の３研究所が協力してできるものとお伺いしている。分子研はかつて“バイオ系の研究はしない”ものと思われていた頃と比べると，隔世の感があるが，この新しい方向性は歓迎すべきものと思われる。

生命現象の核心に迫ろうとするなら個々の分子の物性研究だけでは限界がある。生命は，極めて多数の分子が巾広い時間スケールにわたって関わっている非平衡の現象である。そこでは近年発展してきた化学物理の理論が大いに役立つものと期待される。

分子研への期待

物理と化学を融合した新しい化学物理研究を切り開いていただくことを期待している。又，日本の大学や学会の持つ“村社会”の悪弊を打ち破るような，研究活動をしていただければと思っている。

特に重要なのは，欧米の流行を追いかける競争的研究ではなく，学問的に意味のある創造的研究を推進していくことであろう。

(5) 分子研に対する諸々の意見

①博士研究員

各大学で博士課程を終了した若手研究員が武者修行できるように，十分な数の博士研究員のポストを確保することを努めて頂きたい。特にIMSフェロー（非常勤講師）の一層の充実が望まれる。

②大学院生教育

優秀な大学院生が入学してくるよう努力することが求められていると思います。少なくとも国立大学の修士修了者が分子研の博士課程に進学する時には，入学金は免除されるべきものと考える。又，各々の国立大学においても学生を抱え込むのではなく，流動化するような方策をとる必要があるであろう。

今後，総研大として，修士の学生も採るようになるのであれば，分子研の若手・中堅の研究者にとって教育上の負担が大きくなりすぎないような配慮が望まれる。

③独立行政法人化

分子科学研究所は過去20年余，一貫して基礎的な学問を推進し，学界に貢献してきた。その成果は新材料や医薬品開発などの広範囲な応用部門に，必ずしも目に見えない形で役立ってきている。換言すると“目的志向”の研究所でないが故に，その社会への寄与はむしろ極めて大きなものとなっている。議論が進められている独立行政法人化は，安易な形で実行されるなら基礎研究所の使途をつぶすものになりかねないと思われる。基礎研究を推進する場としての，

分子科学研究所の役割が社会に認知されるよう，より一層の努力をお願いしたい。

4-1-3　国外委員の評価

原文

19 January, 2000

Dear Professor Kaya

I now send you my report and recommendations following the presentations of the Professors of the Department of Theoretical Studies. I saw three Full Professors (Iwata, Nakamura, Hirata) and three Associate Professors (Okamoto, Tanimura, Yonemitsu) as well as Professor Aoyagi from the computer centre.

I was impressed with the originality of the research presented, and the enthusiasm of the scientists in their research. Much of the research commands international attention and is certainly at the forefront of modern research in these areas. The breadth of research is considerable: quantum chemistry, protein folding dynamics, molecular reaction dynamics, condensed phase non-linear optical spectroscopy, molecules in solution, one- and two-dimensional organic conductors, spectroscopy and dynamics of 3- and 4-atom molecules. Taken all together the research is of the highest quality.

It is my view that the size of the Department of Theoretical Studies is appropriate. Of course today theory plays a role in all branches of physics and chemistry and there are innumerable areas in which a theoretician can make a contribution. Increasingly experimental groups will carry out their own theoretical studies. My only advice regarding new directions is that when an Associate Professor departs for elsewhere, it should not follow that his successor is in the same field.

There is good collaboration with other departments at IMS and other universities in Japan.

The situation of theoretical chemistry in particular in Japan is rapidly improving. I know of large research groups in Tokyo, Kyoto and elsewhere; this means that IMS must work hard to maintain its reputation for excellence if its function is to be justified. A critical decision must soon be made because Suehiro Iwata retires shortly. Quantum chemistry (following its Nobel Prize in 1998) is now recognised as a permanent mature branch of theoretical chemistry. Every leading theoretical chemistry department must have a quantum chemist. IMS must have a quantum chemist! I furthermore observe that many universities are appointing young people as their quantum chemists. Quantum chemistry now covers a broad range from state-of-the-art studies of small molecules through the use of density functional theory for larger molecules, leading to a combination of quantum mechanics and classical mechanics for the largest systems.

I was particularly impressed that the associate professors were pleased with, the scientific environment within which they work, their equipment and the library facilities. I was also pleased that they were able to attend important international conferences in their fields; this is vital for the development of their research.

I was pleased to hear that the scientists at IMS recognise the importance of holding scientific meetings at their conference centre; such meetings and participations are becoming almost as important as writing scientific papers. They automatically lead to international collaborations.

The area of concern which was drawn to my attention: in a modern research environment (consisting of full professors and associate professors) the role of the post-doctoral scientist is important; he/she will already have research experience and will contribute strongly to research and will bring in new ideas. Permanent staff members wish have funds available to appoint postdoctorals to work on specific projects; such applications should be dealt with promptly by the grant issuing authorities, and it is usual for the

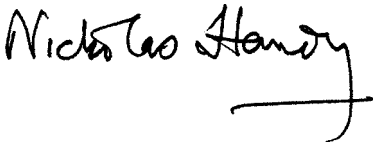
postdoctoral positions to be advertised once they are awarded. It is recommended that the procedures for postdoctoral appointments is re-examined.

I heard about the new machines which are expected at the computer centre. Their prospective performance will be of great benefit of the Department of Theoretical Studies.

In summary, it was a pleasure for me to hear about the exciting research being carried at the Department of Theoretical Studies at IMS. The Department's size and activities mean that it is well placed to contribute to 21st century science.

Yours Sincerely

Nicholas Handy



訳文

茅所長殿：

理論研究系のグループリーダーの方々による研究紹介を伺い私の報告と助言を申し上げます。三名の教授（岩田, 中村，平田）と三名の助教授（岡本，谷村，米満），及び計算センターの青柳助教授にお会いしました。

皆さんの研究のオリジナリティと熱意には感銘を受けました。研究の多くは国際的な注目を受けており，各々の分野の研究の最前線に間違いなく位置付けられます。研究の広がりは実に顕著であり，次の様な様々な分野にまたがっています：量子化学, タンパク質フォールディング, 分子の反応動力学, 凝縮系の非線形光学分光, 溶液中の分子，１，２次元の有機導体，３及び４原子分子の動力学。これら全ての研究は最高水準のものであります。

理論研究系の大きさは，私の見る所，適当なものと思われます。勿論今日では，理論は物理と化学の全ての分野に渡って重要な役割を果たしており，理論家が貢献出来る分野は数え切れない程あります。実験家は益々彼等自身で自分達の理論的解析を行う様になるでしょうが。今後の新しい方向に対する助言として言える事は，将来助教授が他に転出した時その後継者を同じ分野で選ぶ必要はないであろうと言う事だけです。

分子研の他の研究系及び日本の他の大学との共同研究も活発に行われています。日本に於ける理論化学の状況は最近富に改善されています。東京や京都，その他の場所に大きな研究グループが形成されています。従って，分子研はその役割を正当化する為に研究における高い評価を維持する様に十分な努力をする必要があるでしょう。岩田末広教授が間もなく退官されるので，近い将来重要な決定がなされなくてはならないでしょう。量子化学は1998年のノーベル賞を受けて今や理論化学の成熟した恒久的分野として認知されるに至っています。全ての拠点的な理論化学部門には必ず量子化学者が必要です。分子研にも量子化学者が絶対に必要です。多くの大学が若い量子化学者を採用しているのが見てとれます。量子化学は今や小さい分子の詳細な研究から大きな分子の密度汎関数による取り扱いまでに及び，量子力学と古典力学を結合して大きな系への挑戦を始めています。

助教授の人達が分子研における研究環境，設備，図書等の完備に満足しているのには大変感銘を受けました。また彼等が各々の分野で重要な国際会議に出席出来る様になっているのもまた喜ばしい事です。これは彼等の研究の発展にとって極めて大事なことです。

分子研の研究者達が岡崎コンファレンスセンターに於いて種々の研究会を開催することが重要な事であると考えておられるのを聞いて嬉しく思いました。そういう研究会議に参加する事は論文を書くのと同じ位重要なことです。そ

れは国際的な協力研究へと自動的に発展しうるからです。

私が気になった事の一つは，現代の研究環境に於いては（教授にとってであれ助教授にとってであれ）博士研究員の役割が大変重要であるという事です。彼等は研究経験があるが故に研究に大いに貢献してくれますし新しいアイディアを持ち込んでくれます。教授・助教授の人達は個々の研究課題に参画してくれる博士研究員を採用できる資金が出来る事を望んでいます。その為の申請は資金供給の当局によって速やかに処理される事が望ましいと思います。博士研究員を採用出来る事が分かったらそれを速やかに公にし優れた人を採用出来るようにすべきです。博士研究員採用の手続きを見直す必要があるでしょう。

電子計算機センターに設置される新しい計算機の事を伺いましたが，その能力は理論研究系にとって大きな力となるでしょう。

最後に，分子研の理論研究系において行われている高度な研究活動のお話しを聞く事が出来大変嬉しく思います。系の大きさとそこにおける研究活動は正に21世紀の科学に大いに貢献して行けるものであります。

4-2　分子構造研究系

国内評価委員会開催日：平成11年11月８日

委　員　　田隅　三生　（埼玉大理，教授・理学部長）
　　志田　忠正　（京大院理，名誉教授）
　　藪崎　　努　（京大院理，教授）
　　北川　禎三　（分子研，教授）
オブザーバ　森田　紀夫　（分子研，助教授）
　　加藤　立久　（分子研，助教授）

国外評価委員面接日：平成11年12月13日～14日

委　員　　Professor Wolfgang Kiefer (University of Würtzburg)

4-2-1　点検評価国内委員会の報告

分子構造系の将来・展望

所内委員Ｄ：分子構造研究系の現状を説明します。第一部門の齋藤教授が３月で退官され，後任人事を行いました。しかし人事部会が決定した候補者を招聘することに失敗しました。現在このポジションは空き枠になっています。研究所全体の現状としては，三研究所合同の研究センターが発足し，基生研所属のセンターとなっています。この研究センターの発展としての統合バイオサイエンスセンターを概算要求中です。まず，系の再編成ということを含めて分子構造系の将来を議論していただけないでしょうか。

所外委員Ｂ：分子構造系の今後や，分子研の将来に対する意見は，３年前に述べた内容と何ら変わりがないと思います。歴史的には高分解能分光がこの研究系のキーワードになってきたのだから，高分解能分光の現状評価と将来展望を行ってみては如何ですか？

所内委員Ｄ：それではこの研究系の分野として高分解能分光を今後も生かして行くべきか否かを議論してください。

所外委員Ｃ：最近は世界的に高分解能分光を基礎とし，原子や分子を制御する研究など，新しいものへの応用として広がりつつある。それは化学と物理の接点として重要である。

所外委員Ａ：コロンバスミーティングなどの出席者を例にとって，高分解能分光の人口は増加しているのでしょうか？

所外委員Ｃ：物理の分野では人口は増えていない，他分野への広がりと変化している。

所外委員Ｂ：高分解能分光の人口は増減していないでしょう。しかし，米国内では高分解能分光の分野として悲観論はない。落ち着いた安定した学問であって，安定感がみられる。その上で岡先生や天野先生のような天文学への進出が盛んである。つまり，基礎がしっかりしているがゆえに，変幻自在に変化・発展している。その点日本の学会では，他への応用など他分野への進出がうまくいっていない気がします。

所外委員Ａ：人口は増加していないにしても，内容が大きく変わってきているのではないですか？　クラスターや天文学の問題へと。

所外委員Ｂ：高分解能分光としての方法論はほぼ完成して進歩は止まって，今後新しい応用への展開を模索していくことが必要でしょう。

所内委員Ｄ：「分子構造研究系」という名前を捨てるような改組も頭に入れた，系の再編成についてはどう考えられますか？

所外委員Ｂ：基礎分子科学として何が重要なのかという観点から，高分解能分光（分子構造）が必要かを徹底的に議

論すべきで，名前の問題は二の次のような気がします。

化学者として分子間相互作用を正しく人々に知らしめることが仕事と考えます。たとえば水中のタンパク質の問題でも，生物学者や薬学者に対して化学者はそこに働く分子間相互作用の正しい姿を教えているのでしょうか？　物理化学者のやり方が荒っぽく，解ることだけを解るように説明してきたし，例えば分子軌道法などでは状態のエネルギーですべてを片づけてきた。そこに安住しすぎた感がある。

所外委員Ｃ：確かに，日本の化学者はよく解らないことに興味を示さないようです。例えば，液体He中の分光を行うと，よく解らない分子間相互作用や反応がいっぱい見つかるのですが，化学者は興味を示さない。

所外委員Ｂ：化学者は保守的です。各論的で，安定感のあるところに満足している。

所外委員Ａ：創立当初の分子研の旗頭は「極限に挑む」でした。最近この旗頭がボケてきていると思います。

所外委員Ｃ：分子研は保守的であってはならない，チャレンジングであるべきです。

所外委員Ｂ：創立当時はもっとチャレンジングでした。若い人に機会を与えるべきです。

所外委員Ｃ：若い人たちが必ずしも，保守的ではなくチャレンジングかというと疑問ですね。今はお金で買える装置を使って研究をして，本当のオリジナリティーが欠けている。また，新しい物を作らなくなった。他の人の良い仕事をフォローしたがる傾向がある。

所外委員Ｂ：オリジナリティーの定義をそこまで厳格にする必要はないと思いますが，若い人が新しい物を作らなくなったことは問題です。それに数学的訓練が大きく不足している。

所外委員Ａ：それは大学にこそ当てはまると思います。

大学との区別

所内委員Ｄ：それでは分子研と大学との住み分けについて議論願いますか？

所外委員Ａ：国立大学・研究所の特殊法人化が現実味を帯びてきている今，分子研は大学との差をはっきり打ち出すべきです。

所外委員Ｃ：法人化は，基礎学問派は反対で，実学問派は賛成ですね。

所内委員Ｄ：分子研も基本的には法人化に反対してます。大学の理学部と同じ立場です。プロジェクト志向型の研究は法人化に適しているが，基礎研究にとって年次計画で結果を求められても困ります。現在，分子研としては国立の高等研究所構想を考えています。

所外委員Ｂ：法人化に反対して，例外的存在が可能であるならば高等研究所構想はおもしろいですね。しかしそのためには，建物，人材などそれなりの『器』が必要ではないですか？

所外委員Ａ：それに高等研究所であるためには，外からのサポートが必要でしょう。

所外委員Ｂ：外の大学からのサポートが難しければ，ヨーロッパとの連合高等研究所構想などはできないでしょうかね？

所内委員Ｄ：21世紀の構想のなかで，税金を使っていることへのアカウンタビリティーが必要な気がしますが，どう考えられますか？

所外委員Ｂ：納税者（一般大衆）へのアカウンタビリティーは必要ないでしょう。

所内委員Ｄ：しかし，天文学などは一般大衆へのうまいアピールで多額の研究費を獲得しています。

所外委員Ｂ：ライフサイエンスの領域を，分子研レベルの分子科学まで引き上げるような努力をすれば良いのではないですか？

所外委員Ａ：生物学・生理学の問題を分子科学として分子研が取り上げるという考えは20年前なら良かったが，今か

らでは手遅れですよ。現在の遺伝子操作・発生分化操作技術は，分子科学基礎レベルで説明できるようなものから遙かに先を走っています。生物の上流だったはずの物理学・化学が，今は下流になりつつある。

所内委員Ｄ：環境科学に対する分子科学の貢献が可能ではないでしょうか？

所外委員Ａ：大変どろくさい研究になって，研究所全体でやれますか？

所外委員Ｂ：それに，環境科学の研究所はすでに２つありますので，ずっと後発になります。

所外委員Ａ：そう考えていくと，物質科学の分野に展開していくのがオーソドックスな展開方向ですね。系の改組を考える考える前に，研究系を越えた共同研究プロジェクトを進めては如何ですか？

所外委員Ｂ：確かに系を越えた共同研究による，変幻自在なアメーバー的プロジェクト研究を推し進めるのは良いですね。研究テーマによって協力する系の組み合わせが自在に変わっていくようなプロジェクトです。

所外委員Ａ：これまで，本気でこのような系を越えた共同研究プロジェクトを考えた人がいなかったのではありませんか？　系を越えた共同研究プロジェクトを強くひぱっていく人が必要です。

人事問題

所内委員Ｄ：教授人事で教授にきてくれる人が少ないという問題はどうお考えですか？

所外委員Ｃ：教授候補者が分子研へきたがらないのは，もうすでに研究や研究体制がかなり確立したシニアな人を選んでいるからではないのですか？

所外委員Ａ：分子研の教授人事選考の方法が硬直化しています。固すぎます，柔軟性に欠けていると思います。もっと柔軟・敏速に人事選考すべきです。最初から書類審査に始まり，候補者全員の論文査読，等々すべての手続きを固くとっていく。これでは良い人を柔軟・敏速に採ることができませんし，時間の無駄です。

所外委員Ｂ：バイオセンターの件にしても，高等研究所構想にしても，それを推し進める上で「器」だけは確保してほしいですね。欧米の一流の研究施設をみるときに，分子研は研究所としてのインフラストラクチャーを堅持すべきです。

所外委員Ａ：その通りです。経費削減のために研究者が草抜きをするなんてことはやめるべきですよ。

4-2-2　国内委員の意見書

委員Ａ

評価委員会でとくに話題になったことが二つあったと思う。第一は，齋藤修二氏が定年で退職された後の人事に関係して，高分解分光分野を分子研で今後どう取り扱ったらよいかという点であった。分子研発足以来，廣田榮治，齋藤修二の２代の教授が多くの輝かしい研究業績をあげ，分子研の名声を高からしめたことは衆目の一致するところであろう。そもそも高分解分子分光は分子科学の基幹的手法であり対象であるから，この分野で今後有望と目される人材がいるのなら，やはりこの分野は分子研として保持してほしいと私は思っている。しかし，どうしても適当な人材が得られないのならば，他の分野の有望研究者を当てることも止むを得ないであろう。

もう一つの話題は，生体分子関係の分野を分子研で拡大すべきかどうかというものであった。私はこの問題について mixed feeling を持っている。私自身も生体分子の研究を行ってきたつもりなので（現時点ではほとんど行っていないが）, そのような視点から見て，分子研がこの分野を重視するのが遅かったと常々思ってきた。もちろん，分子研では北川教授がラマン分光によるヘム蛋白の研究で世界的な業績をあげてこられたが，分子研の相当大きな部分がこれからこの分野に参入するとなると，生物科学にどういう切り口で挑戦するのかよほど考えなければならない。生物科

学の過去20年間の進歩は恐ろしいほどのものがあり，分子科学に一番近い構造生物学も活気溢れる分野に成長している。分子生物学と薬学，医学との距離が縮小し，分子生物学自体も急速に変質しつつあるように見える。このような状況下で，分子科学が本当に意味のある貢献ができるだろうか。個々の研究者がばらばらに自分が興味を持っていることを研究するだけでは，大きなインパクトは期待できない。ユニークな研究課題について組織的な研究を展開することができなければ，出遅れを取り戻すことは不可能であろう。よほどの覚悟がなければ出来ないことだと思う。

委員B

分子構造研究系は気相での短寿命分子の高分解能分子分光と生体系の時間分光を中心としてこれまで先駆的な業績をあげてきた。この研究系の分野は分子研の研究の中でも最も基礎的な実験研究を指向したものであり，分子研が今後，どのように進展するかによらず，このような「基礎の基礎」をコアとして確保することは重要である。高分解能分子分光の実験手法は完成度が高いように見えるので将来的にはなばなしい発展が期待できないという見方もあるが，信頼性の高い分光データは今後とも分子科学の進歩を支えるものである。最近の星間分子に関する分光情報は狭い意味の化学の領域を抜け出て宇宙科学に大きな貢献をした。このような形が堅実な分子科学のあるべき姿の好例といえる。生体系や少数多体系での分子間相互作用の定量的な情報を含んだ分光データを得ることも，慶昧な推論に基づいた議論より重要な作業である。生体系などに見られる微妙な分子間相互作用の解明にも結局，分子分光学的な研究が最も基礎になるものと考える。

これまでの構造研究系が辿ってきた道は大筋で正しいものであり，種々の外圧によって改変が迫られているように見える現在こそ，分子研が四半世紀をかけて築いてきた研究の路線に自信をもってよいと考える。しかし，勿論，現状維持にとどまることは許されない。そこで，仮にエージェンシー化が進み，運営の自由度が増すものとして，これを機に思い切った若手リーダーの登用を進めることが望まれる。また，快適な生活空間を含むインフラストラクチュアーの整備に力を入れ，これによって欧米諸国から見ても真に魅力的な研究機関に発展すること，さらに，アジア地域の研究者との実質的で長続きのする研究交流を推進することが期待される。

共同利用研のあり方：

分子研の本来の目的の一つは，大学だけでは果たせない研究交流，人事の流動を促進することにあった。しかし，国立大学のエージェンシー化の流れが始まり，大学の事情が流動的な方向へ向いそうな現在，共同利用研としての分子研のあり方については率直に云って十分な見通しをもつことができない。ヨーロッパの各国とくにヨーロッパ連合に加盟の国々はいろいろな形での提携や共同作業を模索しつつあるように見える。この際はその動きをよく把握して参考になり得るものは取り入れる努力をしてみるのもよいのではないか。

委員C

(1) 当該研究系の研究分野での分子研の役割，寄与と位置付け

当該研究分野での研究はレーザーを駆使した分光と関連する基礎科学（基礎化学，物理）が中心となっている。その面で，短期間の特定のテーマの研究が主流である分子研内の他の研究系とは異なり，長期的な視野を持った基礎的な研究を行うという使命を持っている。このような基礎科学の研究は，将来の分子科学に重要な寄与と位置付けを持っている。現在のこの研究系は少数のメンバーであるにもかかわらず，世界の最先端を行く研究がなされていると思われる。

(2) この分野の国内国外での研究分野としての重要度

この分野は国内，国外を通して現在最も重要な研究分野の１つである。例えば，当該研究系で推進している反陽子ヘリウムの研究は独創的で，我が国が誇る研究の１つである。またレーザー冷却を駆使した研究は分子科学においてますます重要になってくることが予想されるが，当該研究系で推進しているヘリウム原子のレーザー冷却の研究は日本で唯一のものであり，特に励起状態の冷却原子の衝突に関する立派な成果をあげている。

(3) 今後この分野の発展はあるか，どのような方向か

この分野の発展は従来以上に非常に期待できると思われる。特に原子や分子の運動を光や特異な環境のもとで制御することで，より高分解能に物質の状態を知ることができる。さらに，このような制御は新しい分子の生成（たとえば分子研の当該分野で行われている反陽子ヘリウムのようなエキゾティック原子分子の研究）などの新しい研究が期待できる。また，レーザー冷却などの新しい技術を用いた超低温下での分子分光，化学反応は分子科学の基盤となる今まで得られ難かった重要な知見をもたらすことが期待される。

(4) 分子研の当該研究系が今後，どのように進むべきか

上述したように当該研究系は分子研の中で，レーザー分光を基盤とした長期的な基礎研究を行うといった特異的な存在で，分子を化学の観点から研究する他の多くの研究者の中で，唯一物理学的な視野に立った研究が行われている。分子研全体のバランスから，この分野の研究者がもう少し多くなることを望みたい。

将来構想

(5) 分子研の共同利用機関としての現状と，将来への提言

分子科学における各種データをより充実し，これらの中心地となり，外部から用意にアクセスできるようにしていただきたい。また，上述のように，現在化学が中心となっている分子研の分野の枠を多少広げ，物理学，生物学の分野の分子科学者の増強を望みたい。

(6) 分子研に対する建設的批判，提言

良い研究所は若い研究者にとって魅力のある研究所である。優秀な若い人材を集めるには人事公募に内部からの研究者も応募できるようにしてはどうか。

4-2-3　国外委員の評価

原文

Report for Prof. Kato

The main scientific activities of Professor Kato are twofold:

(i) Site selective spectroscopy in the solid state applying Raman Heterodetection of Magnetic Resonance:

This elegant technique was already invented by Professor Brewer in 1983 at IBM in San Jose and has been exclusively applied to rare earth impurity ions in inorganic crystals until Professor Kato's work. The method combines radio frequency with optical frequencies in order to produce coherent states in atomic ions and by detecting the beating between the laser frequency and the anti-Stokes Raman signal produced in the system one is able to derive high resolution splittings in the Mhz range. While Brewer's group investigated the hyperfine splittings of the Pr^{3+} ion, Professor Kato extended this work to study the La^{3+} ion in two ways. First he tried to derive the splittings of the ^3P_o levels which are of the order of about 1 Mhz. Since the jitter of his laser is of the order of 1.5 to 2 Mhz he could not succeed for this study. However, most interestingly, he was able to find new signals in the range between 2 and 5 Mhz which he could interpretate to the contribution of different sites of the La ion relative to the Pr ion by calculating the magnetic dipole interactions.

A real breakthrough, however, was certainly the application of this technique to molecular crystals. By converting the technique in going from the ground state to the electonic state by the optical step and then using the radio frequency he could study high resolution splittings in the excited state in a molecular crystal and could measure for the first time the triplet exciton in 1,4-dibromonaphthalene using this technique. This lead to an excellent publication in *Phys. Rev. Lett.*

(ii) Study of the molecular and electronic structure of radical ions of fullerenes and metallofullerenes by EPR and ENDOR measurements:

Particularly the investigations of metals inside the carbon cage and the chemical properties of such systems as a whole and as related to their chemical reactivity are of great general importance. By high field pulsed ESR he could study the metallofullerenes Sc@C82, Y@C82, and La@C82. Of special interest are also his studies by varying the size of the cage (C76 to C90) and the work on La in the two isomers of C82. Pulsed ENDOR measurements on these systems round up these investigations.

Further studies performed in Professor Katos' group are:

(iii) Double resonance spectroscopy using two phase-locked lasers:

The technique has already been set up and there will very interesting experiments being done related to dephasing processes in excited molecules or phase controlled reaction dynamics in the future.

(iv) State correlated Raman spectroscopy for the elucidation of phase transitions:

Professor Kato has started with investigations of the orientational ordering in the ferro- and antiferroelectric liquid crystal molecule MHPOBC.

Both approaches (iii and iv) are of high scientific interest.

Report for Prof. Morita

The scientific work of Professor Morita and his group is related to fundamental physical problems mainly in the field of (i) laser cooling and trapping of neutral atoms, (ii) spectroscopy of atoms and ions in liquid helium, and (iii) laser investigations of an antiproton-helium compound, which he calls "atomcule." Their results have been published mostly in the leading physics journals *Phys. Rev.* and *Phys. Rev. Lett.*

To (i):

The main experimental achievement clearly is the construction of a magneto-optical trap (MOT) for metastable helium-3-atoms. While there has been several demonstrations of laser trapping of the bosonic isotope ^{4}He, laser trapping of the fermionic isotope ^{3}He has never been demonstrated before. By confining ^{3}He and ^{4}He in their respective MOTs, the Morita group was able to measure the ionization rate coefficients for Penning collisions between two cold He atoms and could therefore study the difference in cold collision dynamics. The interpretation of the isotopic difference is not trivial but could be interpreted by considering the various ionizing channels and the degree of degeneracy which is different for ^{4}He* + ^{4}He* and ^{3}He* + ^{3}He*. Fairly good agreement between the experimental values of the ionization rates for He (2s $^3S_1$) + He (2s $^3S_1$) collisions could be obtained whereas the agreement is not so good for He* + He* collisions in the presence of laser light. This outstanding work could be published in *Phys. Rev. Lett.* There is a great challenge to use particularly the ^{3}He trap to perform Bose-Einstein condensation of fermionic atoms. Most impressive is the experimental set-up which contains a home-made single-mode cw ring LNA laser.

To (ii):

They have measured some excitation and emission spectra of Mg and Ca in liquid ^{3}He in order to observe interesting phenomena

which arise from quantum features differing between liquid ^{3}He and ^{4}He. In this context they have presented a new model of exciplex formation between Mg and He and found that this model is more suitable for understanding the dynamics in the studied transition than the bubble model used earlier.

Also very interesting results were obtained from the Yb^+ ions in liquid helium which were produced by laser sputtering. A double resonance excitation from the $^2S_{1/2}$ into the $^2P_{1/2}$ and $^2P_{3/2}$ states showed sharp emission only from the $^2P_{1/2}$ state because of fast relaxation from the $^2P_{3/2}$ to the $^2P_{1/2}$ state. The frequency shift as well as the the linewidth in the observed double line structure for the D2 excitation spectrum could be explained by a theory envolving a vibrating bubble model.

To (iii):

Most of the papers published during 1996 until 1998 of Professor Morita's group were on laser investigations of antiproton helium compound, an unusual species which is the first long-lived exotic atom containing hadrons other than normal protons and neutrons. On this new compound ("atomcule") laser spectroscopic investigations were performed in order to study its properties and dynamics. Of particular interest is their report on the first observation of laser-induced resonant annihilation. This work has been performed at CERN together with nuclear physicists.

Report for Prof. Kitagawa

The scientific achievements of Professor Teizo Kitagawa and his group in the field of biomolecular science are outstanding. The research activities of this group cover a very widespread area ranging from the development of special Raman techniques including picosecond time resolved resonance Raman (TR^3) spectroscopy and the construction of coherent light sources required for their particular research, up to a great many of very thorough studies of problems in biochemical science. It would be too much to summarize comprehensively all the work done by this group during the period from 1996 to 1999. In the following only a few selected investigations which were performed in Prof. Kitagawa's laboratories and which are regarded to have the highest scientific impact will be summarized:

(i) In a very exciting contribution to „*Science*" he reports on the direct observation of cooling of heme upon photodissociation of carbonmonoxy myoglobin. The formation of vibrationally excited heme and its subsequent vibrational energy relaxation has been monitored by applying picosecond anti-Stokes Raman spectroscopy yielding a vibrational relaxation time constant of 1.9 ps for the CO-photodissociated heme. This most important study allowed the direct observation of the vibrational energy flow through the protein moiety and to the water bath.

(ii) Another most important work, which has been published very recently in *J. Chem. Phys.*, is related to the intramolecular vibrational redistribution (IVR) and intermolecular energy transfer (IET) in the (d,d) excited state of nickel octaethylporphyrin (NiOEP). While comparable work has been performed before for small molecules, this is the first detailed quantitative study of the time evolution of the two processes (IVR, IET) for large molecules in solution. By successfully applying picosecond TR^3-spectroscopy the group demonstrated that their technique is very powerful to study the mechanism of vibrational energy relaxation.

(iii) Very impressing work of the group – published in „*Biochemistry*" – is also their study on the two quaternary structures of hemoglobin (Hb), called T (tense) and R (relaxed), which correspond to the low-affinity and high-affinity states, respectively, and whose typical structures are seen for deoxy and CO-bound forms, respectively. They examined the Fe-His bonding of α heme and the intersubunit interactions at the $\alpha1$-$\beta2$ contact of α^{NO}-Hbs under various conditions with EPR and UV resonance Raman (UVRR) spectra excited at 235 nm, respectively. In particular, they present UVRR spectra for normal NOHb, the half-

ligated α^{NO}- β^{deoxy}, and the mixed ligated α^{NO}- β^{CO} in the presence and absence of an effector. From these studies they could derive valuable information on possible correlation between the Fe-His bonding of a hemes and intersubunit interactions at the α1-β2 interface for the quaternary structure change.

(iv) Applying time-resolved (0.1 to 5 ms) resonance Raman difference spectroscopy Professsor Kitagawa investigated the mechanism of dioxygen reduction catalyzed by cytochrome c oxidase (CcO), the terminal enzyme of the respiration chain of aerobic organisms. While extensive efforts have been made previously to elucidate the reaction mechanism of this enzyme using time-resolved absorption, cryogenic absorption, EPR, and non-time-resolved resonance Raman spectroscopy mainly by other groups, it has now been shown that the above mentioned technique applied by Prof. Kitagawa, is uniquely powerful for elucidation of the reaction mechanism of CcO, since only this technique is able to detect the vibrations of dioxygen and its reductive intermediates bound to the catalytic site during the enzymatic turnover. Their results —published in *J. Am. Chem. Soc.*— open a new page in understanding the mechanism of dioxygen reduction by CcO and its coupling with proton pumping. In a subsequent publication in the same journal, they explored the role of one of the four redox active metal centers (Cu_B) in the proton-pumping function of CcO by making use of time-resolved IR measurements.

Besides the above mentioned five papers which are of particular general interest and which rank as outstanding scientific achievements, Professor Kitagawa published another 41 papers in highly recognized journals during the last three years. He applies sophisticated experimental instrumentation to study a wide range of topical problems in the field of biomolecular science and fast dynamics of photoproducts in solution phases. The very high level of science performed in his laboratories has won worldwide recognition and I am sure that also other colleagues working in the field of Raman spectroscopy would join me to regard Professor Kitagawa as one of the leading scientists in the area of time-resolved Raman spectroscopy of biochemical molecules.

訳文

加藤助教授のグループに対する報告

加藤助教授のグループの研究成果は大きく二つに分けられる：

(i) 磁気共鳴のラマンヘテロダイン検出による固体中のサイト選択分光

この手法は1983年にIBMサンノゼ研究所のBrewerによって創始されたものであるが, その応用はこれまで無機結晶中の不純物希土類イオンの分光に限られていた。この方法はラジオ波とレーザー光とを組み合わせて原子イオン中にコヒーレント状態を作り出し，そこからの反ストークス光とレーザー光とのビート信号を検出することによってMHzレンジの高分解能分光を可能にするものである。Brewerのグループはこの方法によってPr^{3+}イオンの超微細構造の研究を行ったが，加藤助教授のグループはそれをLa^{3+}イオンの研究に拡張した。まず最初に，僅か1 MHz程度しかない$^3P_0$状態の分裂を観測することを試みたが，レーザーの周波数ジッターが1.5–2 MHz程度あったためこれは不成功に終わった。しかしこの実験では，非常に興味深いことに，2–5 MHzレンジに新しい信号が見出された。これは，磁気双極子相互作用の計算から, Prイオンの場合とは異なったサイトのLaイオンからの寄与であると解釈することが出来た。しかし，最も画期的なことはこの方法を分子結晶に応用したことである。すなわち，この方法を逆ラマン型に転用することによって分子結晶の励起状態の超微細分裂を高分解能で分光することができ，その結果1,4-dibromonaphthaleneの三重項エキシトンを初めて観測することができた。この傑出した研究は *Phys. Rev. Lett.* 誌に掲載されている。

(ii) EPRおよびENDORによるフラーレンおよび金属内包フラーレンのラジカルイオンの分子・電子構造の研究

炭素ケージの中の金属の研究やこのような系全体の化学的性質およびそれらの金属の反応性の研究は一般に非常に

重要である。加藤助教授のグループは高磁場パルスESRによって金属内包フラーレン$Sc@C_{82}$, $Y@C_{82}$, および $La@C_{82}$ の研究を行った。特に興味深いことは，炭素ケージの大きさを変えて研究したこと（C_{76} から C_{90} まで），および C_{82} の二つの異性体について La を調べたことである。パルスENDORによる測定はこれらの研究をさらに深めた。

その他の研究：

(iii) 位相ロックされた２台のレーザーを用いた二重共鳴分光

この方法のための装置は既にセットアップを終えており，励起状態の分子の位相緩和過程や位相制御された化学反応に関する興味深い研究が将来期待される。

(iv) 相転移の解明のための状態相関ラマン分光

加藤助教授のグループは，強磁性および反強磁性液晶 MHPOBC における方向整列性の研究を始めている。

両研究ともに非常に科学的興味の持たれるものである。

森田助教授のグループに対する報告

森田助教授およびそのグループの研究は，主として (i) 中性原子のレーザー冷却・トラップ, (ii) 液体ヘリウム中の原子・イオンの分光, (iii) 反陽子ヘリウム化合物（atomcule）のレーザー分光研究というような基礎物理学的問題に関するものである。それらの研究結果のほとんどが世界的に評価の高い物理学雑誌である*Phys. Rev.* 誌および *Phys. Rev. Lett.* 誌に掲載されている。

(i)に関する報告：

主たる実験的な成果は準安定ヘリウム‐３原子の光磁気トラップ（MOT）の達成である。これまでにボゾンであるヘリウム‐４のトラップはいくつかのグループで行われてきたが，フェルミオンであるヘリウム‐３のトラップは全く例がない。さらに森田グループでは，^{3}He と ^{4}He とをそれぞれのトラップに閉じこめて，冷却された原子同士の衝突によるペニングイオン化の速度定数を測定し，両同位体における衝突過程の差異を研究した。その差異の解釈は簡単ではないが，^{4}He* + ^{4}He* 衝突と ^{3}He* + ^{3}He* 衝突とで異なるイオン化チャンネル数と縮退度を考慮することによって理解することができた。この解釈に基づくイオン化速度の計算値と実験値とは，レーザー光が存在する場合の衝突ではそれほど良い一致は得られていないが，レーザー光が存在しない場合すなわち He (2s $^3S_1$) + He (2s $^3S_1$) 衝突の場合はかなり良い一致が得られた。この傑出した研究は *Phys. Rev. Lett.* 誌に掲載されている。この ^{3}He トラップを用いるとフェルミオン原子のボーズ･アインシュタイン凝縮という大きなチャレンジが可能であろう。自作のリング型単一モードLNAレーザーを含めこの実験の実験装置には強い感銘を受けた。

(ii) に関する報告：

森田グループは，液体ヘリウム中の Mg および Ca 原子の励起スペクトルおよび発光スペクトルを測定し，液体 ^{3}He と ^{4}He とで異なる量子性に起因する興味深い現象を観測した。彼らはこの観測結果の解釈において，液体ヘリウム中に Mg と He とのエキサイプレックスが生成しているというモデルを提案し，このモデルによって観測された遷移のダイナミクスを従来の単純なバブルモデルよりもうまく説明できることを示した。

レーザースパッタリングによって液体ヘリウム中に生成された Yb^+ イオンに関しても非常に興味深い結果が得られている。$^2S_{1/2}$ 状態から $^2P_{1/2}$ および $^2P_{3/2}$ 状態へのレーザー励起に対して $^2P_{1/2}$ 状態のみから狭いスペクトル幅の発光が見られた。これは $^2P_{3/2}$ 状態から $^2P_{1/2}$ への速い緩和が存在しているためである。それぞれのスペクトルに見られた周波数シフトや線幅およびD2線の励起スペクトルに見られたスペクトルの分裂は，振動するバブルのモデルによって説明することができた。

(iii) に関する報告：

1996年から1998年にかけての森田助教授のグループの論文の大部分は反陽子ヘリウム化合物のレーザー分光学的研究に関するものである。この極めて希な化合物は，普通の陽子や中性子以外のハドロンを含んだ初めての長寿命エキゾチック原子である。彼らはこの新しい化合物（atomcule）の性質やダイナミクスを調べるためにレーザー分光学的研究を行ったわけであるが，レーザー誘起消滅の初めての観測に関する報告はとりわけ興味深い。この研究はCERNにおいて原子核物理研究者とともに行われたものである。

北川教授のグループに対する報告

生体分子科学の分野における北川禎三教授およびそのグループの研究成果は傑出している。このグループの研究成果は，ピコ秒時間分解共鳴ラマン（TR^3）分光をはじめとする特殊なラマン分光法の開発や彼らの研究に必要なコヒーレント光源の製作から生体分子科学における非常に多くの徹底した研究まで，極めて広い範囲にわたっている。したがって，このグループの1996年から1999年までの全ての研究を分かり易くまとめるのはたやすいことではない。このため，以下では，北川教授の研究室において行われたもののうち最も大きなインパクトを持つと思われるもののみを選んで総括する。

(i) 「*Science*」誌に発表された非常にエキサイティングな論文の中で，carbonmonoxy myoglobinの光解離におけるヘムの冷却の直接観測を報告している。振動励起されたヘムの生成およびそれに続く振動エネルギー緩和をピコ秒アンチストークスラマン分光法によって観測し，COが光解離した後のヘムの振動緩和時間として1.9ピコ秒が得られた。この最も重要な研究成果は，蛋白の一部を通り抜けて水溶媒に至る振動エネルギーの流れを直接的に観測することが可能となったことを意味する。

(ii) もう一つの最も重要な研究は，nickel octaethylporphyrin（NiOEP）の(d,d)励起状態における分子内振動再配分（IVR）と分子間エネルギー移動（IET）に関するものであり，これはごく最近 *J. Chem. Phys.* 誌に発表されている。同種の研究は小分子に関しては以前に報告されているが，溶媒中の大きな分子に対してこれらの二つの過程（IVR, IET）の時間発展を定量的に詳しく研究したのは初めてである。この論文では，ピコ秒TR^3分光法を上手く適用した彼らの手法が振動エネルギー緩和のメカニズムの研究に極めて有効であることを実証して見せている。

(iii) ヘモグロビン（Hb）の二つの４次構造に関する研究もまた非常に興味深い研究であり，それは「*Biochemistry*」誌に発表されている。それらの４次構造はT（tense）およびR（relaxed）と称されるが，それぞれ低親和性，高親和性の状態に相当していて，それらの典型的な構造はそれぞれdeoxy型，CO-bound型に対して見られている。彼らは，様々な条件下のα‐ヘムのFe-His bondingおよびα^{NO}-Hbのα1-β2サブユニット間の相互作用をそれぞれEPRと波長235 nmの励起光を用いた紫外共鳴ラマン（UVPR）スペクトルで調べた。とりわけ，イフェクターが有る時と無い時の両方に対してノーマルなNOHb，half-ligated α^{NO}- β^{deoxy} および mixed ligated α^{NO}- β^{CO} のUVPRスペクトルが測定されたことは特筆される。これらの研究から，４次構造変化に対するα‐ヘムのFe-His bondingとα1-β2界面におけるサブユニット間相互作用との間の相関に関する有益な情報を引き出すことができた。

(iv) 時間分解（0.1–5 ms）共鳴ラマン差分分光によって北川教授のグループは，好気性生物における呼吸鎖の最終酵素であるcytochrome c oxidase（CcO）の触媒作用によって引き起こされる酸素還元反応のメカニズムを研究した。これまでこの酵素の反応メカニズムの解明には，時間分解吸収法，極低温吸収法，EPR，あるいは非時間分解共鳴ラマン分光法などを用いて多くの努力が払われてきたが，北川教授によって用いられた上述の方法がCcOの反応メカニズムの解明のためには唯一有効であることが示された。すなわち，この方法だけが，酸素分子の振動や酵素

始動時に触媒サイトに結合している酸素分子の中間状態の振動を検出することができるのである。この研究の結果は *J. Am. Chem. Soc.* 誌に掲載されているが，CcO による酸素還元反応メカニズムおよび脱酸素還元過程とプロトンポンピングとのカップリングのメカニズムの理解に新しいページを開くものである。また, 同じ雑誌に引き続いて発表された論文では，時間分解赤外分光測定により，CcO のプロトンポンピング機能における４つの酸化還元活性金属中心（Cu_B）のうちの一つの役割が調べられている。

上に挙げた特に興味深くランクの高い５つの論文の他に，北川教授は過去３年の間に41報の論文を世界的に評価の高い科学雑誌に発表している。このグループは高度な実験装置を駆使して生体分子科学や溶液中の光反応生成物の高速ダイナミクスの分野における広範囲な問題を研究している。北川教授の研究室で達成された研究成果のレベルの高さは世界に良く知られており，北川教授が生体分子の時間分解ラマン分光の領域における世界の第一人者の一人であることはこの分野の誰もが認めるところである。

4-3　電子構造研究系

国内評価委員会開催日：平成11年12月15日

委　員　　濱口　宏夫　（東大院理，教授）
　　大野　公一　（東北大院理，教授）
　　西　　信之　（分子研，教授）
　　藤井　正明　（分子研，教授）
オブザーバ　鈴木　俊法　（分子研，助教授）

国外評価委員面接日：平成11年12月13日～23日

委　員　　Professor Klaus Müller-Dethlefs (Department of Chemistry, The University of York)

4-3-1　点検評価国内委員会の報告

電子構造研究系では，この３年間に２名の教授と１名の助教授の交代があり，基礎電子化学研究部門では研究内容にも大きな変化があった。溶液の研究とクラスターの研究を結び付けるような新しい研究と言う立場から西信之教授が，レーザー分光技術と光電子分光や赤外分光を組み合わせた新しい手法による電子構造の研究という立場から藤井正明教授が，また，これからの新しい研究分野へ対応し，金属クラスターの電子構造，機能物性の研究を行うべく佃達哉助教授が着任した。鈴木俊法助教授は，分子線手法とイオンや電子の運動エネルギー分布画像解析手法，更に超高速レーザー分光法とを組み合わせて反応動力学への精緻なアプローチを行っている。このような人事によって電子構造研究系では，孤立分子や溶液，そして表面の孤立分子という対象に加え，新たにクラスターという分子集合体を研究の対象として捉え，集団の中の分子の性質，動態，構造変化などを追求して行く研究が展開されることになった。以下に，委員会メンバーが電子メールを通して議論を重ねた幾つかの点について記述してみたい。

[大学と研究所そして系という組織]

C（所内）：大学との区別化が可能な研究をどのように進めて行くかは，分子研の持つ大きな問題の一つです。電子構造研究系のように，個々の研究グループの専門的な研究内容は微妙に違っていても，全体としてみると共通性が高いテーマを持ったスタッフを揃えた集団の中では，それぞれのグループが内容的にも技術的にも活発な交流を持ち，科学的好奇心を刺激しあって最先端の結果を出すことができます。このような環境の実現という意味では，現在の大学には見られない研究体制をとっていると言えるでしょう。特に，それぞれのグループに属する若い研究者の密な日常の交流を更に活発にするような環境の整備を考える必要があると思います。

A（所外）：大学は，学生と共同で進める研究においては，学位論文指導という制約から，一定期間内に学位論文としてまとめることが要求されることと，技術者・研究者養成のためのトレーニングも兼ねる課題が望ましいということなどが，研究所での研究課題設定と決定的に異なります。前者の条件から失敗できない面があると同時に，とくに学士論文やときには修士論文でも，アカデミックには失敗して単なる練習に終わっても許される場合があります。大学には，このような教育的な制約があり，また，工作室や機器センターなどの研究支援体制においても，一般に大学は研究所と比べて，貧弱な環境にあります。こうしたことを考慮すると，自ずと研究所の使命がより鮮明になるはずです。先に提出した「意見書」では，こうした大学の状況との比較はほとんど行いませんでした。結論をいいますと，研究所では，教育や人

材育成といった側面は度外視し，失敗をものともせず，可能性を求め，技術の粋を尽くし，ブレークスルーに挑戦することが肝要ということになるでしょう。

B（所外）：大学と研究所で行われるサイエンスに違いがあるはずがありません。目指すサイエンスは同じであるが，それを実現するための実行手続きが異なり得るということでしょうか。大学では実行が難しい研究が分子研ならば可能であるという状態が分子研にとって最も望ましいのではないでしょうか。また，分子研では系と言う組織が特徴の一つとなっていると思います。この点で，私の意見は，Ｃさんの意見と一致しています。

D（所内）：分子研はいわゆる「研究所」とも異なっており，総研大の学生も在籍し，また，助手でさえ６年任期です。心構えとして「失敗をものともせず，可能性を求め，技術の粋を尽くし，ブレークスルーに挑戦」というのは重要でしょうが，大学院生，助手に対しても責任を持つ事を考えると「教育や人材育成といった側面は度外視し……」とは思えません。やはり，分子研は大学に近い組織と私には思えます。ある時，分子研はポスドクを教育しているのだ，という方が居りましたが，その方がまだ現実に近いように思います。

E（所内）：分子研では大学ではできない研究を行うという意味は，大学では買えない高価な装置で実験するということではない，と思っています。何年も鳴かず飛ばずになっても挑戦する研究姿勢を持たねばならないと思います。一方で，総研大学生は，ゼロから出発し３年間の内に博士論文にまで到達せねばならないという過酷な時間的制約を負っており，余り挑戦的な課題を与えることができないのが現状と思います。冒険的な課題は，職員自身の研究にしか設定できません。この問題は，分子研が総研大の一翼をも担うという二重構造の本質的なジレンマに起因しており，それ故に，いろいろな意見があるのは当然ではないでしょうか。一方，系に属する研究グループの交流に関してですが，長い間グループ間の合同セミナーが立ち消えになっている事が指摘されます。研究活動で国際的に闘わねばならない我々は，近しい相手と研究に対する議論を尽くすことが大事ではないでしょうか。系には創造的な学問の雰囲気を充満させることが大事で，このような「研究上の交流」はそのために必須ではないでしょうか。

D（所内）：研究者同士の交流は重要です。研究者交流による触発ができれば分子研に在籍する大きな魅力になるはずですが，現状ではほとんど有効に機能してないと思います。研究者の交流はグループ間セミナーの様な堅苦しいものではなく，インフォーマルに別のグループの人間と「これ，どう思う？」と自由に意見交換（？）できることが重要だと考えています。そのような雰囲気が現状では不十分だと思い，私も促進するよう心がけています。

[研究室の規模]

E（所内）：マンパワーの問題は常に我々のジレンマです。しかし，分子研の研究員増員は事実上困難だと思います。助手や技官の数は減る一方ですし，博士研究員の数も惨めなものです。また，現在の社会状況の中で，日本国内で人材を集めること自体が容易でないと思います。当面，少人数という与えられた環境の中でどうやって国際的に通用する研究を行うかという戦略（テーマの選択）が必須と思われます。すなわち，この人数ではできる研究とできない研究があるのではないでしょうか。

A（所外）：現状の規模では，労働集約型の研究は不適当であり，アイディアと技術の粋を集中する先端的課題への挑戦が最適であると思います。これは次の研究戦略とも関係しています。

D（所内）：現実的対処として重要なご指摘と思います。人数が少ないので現実問題，推進できるテーマを選ばざるを得なくなっています。一方，現在の規模は分子研設立当時よりもスタッフ数が減少していることもご理解頂きたいと思います。以前は教授グループは助手２技官１，助教授グループは助手１技官１だったと思いますが，現状では助手１というケースもあります。分子研は昔から人数が少ないことが問題と言われていたはずなのに，現実はグループ数の増加に従って逆の動きをしているわけです。残念ながら総研大は１学年12人定員であり，博士の進学者数が少ない現状では必ず入学してくるとは期待できませんし，助手とは意味合いが異なります。人数が多ければ良いとは思いませんが，いわゆる国立研究所や理研などと比べても小規模すぎると思います。また，大学では教官１名で１研究室と言うことも有り得るわけですが，教育義務と引き替えに学生と協調作業ができます。分子研の研究室規模や総研大併任／助手任期を含む独特のスタイルは，いわゆる研究所とも大学とも異なるため，私は制度的な中途半端さを強く感じる点です。

B（所外）：研究グループによってその規模が大きく異なっても良いのではないかといのが私の意見です。

[研究戦略]

C（所内）：分子科学研究所は創設後25年を迎えようとしており，この間，分子科学の大きな進歩に貢献してきました。分子科学自体も大きな変貌を遂げており，特に理論計算と実験との協同作業の必要性が益々高くなっています。特に，電子構造の立場からのクラスター研究には高度な分子軌道法計算が不可欠であり，また，動力学研究にとっては，量子力学的解析を高度な理論に基いて行わねば，新しい概念の発見という道には辿りつけないと思います。周辺分野である大気化学，溶液化学，固体物性，分子生物学などの研究者との交流，特に，共同研究を通じて，これらの分野における本質的な問題を電子構造の立場から解明しようとする挑戦が可能となり，真のブレークスルーが生まれるのではないでしょうか。様々な理論計算手法が，次第に汎用化されつつあり，計算機の急速な進歩によって，10年前には考えられなかった大きな分子あるいは集合系の精密な計算も夢ではなくなってきました。このような状況は，実験を主体とする電子構造研究系の各グループの研究の戦略設計や展開に少なからぬ影響を与えています。しかし，一方で，予想可能な結果を出す事よりも，予想を超えた発見こそ，真のブレークスルーではないかということを，我々は肝に命じておく必要があると思います。先端の理論を取り入れる事により，理解がいっそう深まるのも事実ですが，もっと未知な領域に飛び込めば，新しい発見の可能性は飛躍的に増大する訳です。これは，相当の困難を伴いますが，研究所ではこのような未知に近い領域への挑戦が必要ではないでしょうか。研究者の視線が，広い興味と深い洞察力を伴って，まだ見ぬ真理へと向けられていれば，研究所は質の高い研究者集団として成果をあげることができると考えます。

A（所外）：クラスターという構造自由度の極めて高い系を扱うために，従来からの実験手法のみからでは有意な議論を展開するのに困難が伴うという事情は，皆が認めることだと思います。ただし，その解決策は，

１）新種の実験手法の開発と応用

２）実験データの新しい解析法の開発と応用

３）理論計算法の開発と応用

のように，計算だけではないように思います。より広い視座に立って研究戦略を練って欲しいと思います。なお，新概念の樹立を目標に置くときに，必ずしも，手法や技術の粋を極めるのではなく，これま

で着目されていないことに新たな取り組みを進める際には，かなり荒削りな手法でよいこともあります。ただ，このようなプリミティブなアプローチは，お金や研究支援体制ではるかに劣る環境の大学などに，ゆずっていただく方がよいかも知れません。

D（所内）：近年の理論計算の進歩・有効性はだれしもが認めるところで，理論家との共同研究も重要になってます。一方，新たな実験手法の開発は新領域の開拓につながる可能性があり，広い視点で独自の方法論を展開する事の重要性はご指摘の通りと思います。その意味でもアイディアを試行する際のしきい値を低くする様，心がけることも重要と思います。

E（所内）：実験が「値」の測定を目的とするなら，計算によって，より少ない労力でそれが得られるようになった時，実験の役割は終わると思います。重要な実験は，その時点で最も深い我々の理解（理論）を検証し，欠けている新しい視点（概念）を提案するもののはずです。前者においては，最高の理論，計算との比較を行って，解明されたこととそうでないことを峻別し，次の新しい研究の方向を示すべきです。後者においては，新しい個性的な視点が示されれば精度などどうでも良いと思います。「予想を超えた発見」の「予想」とは，言い換えれば優れた理論と計算であり，直感ではないはずです。少数多体系の研究も，理解の検証と新視点の提供にどれだけ寄与しているかで，実験の真価が明確になる時代が来たのだと思います。これは，小さな分子の研究で過去に起こったことと同じことのように思えます。

B（所外）：“予想可能な結果を出す事よりも，予想を超えた発見こそ，真のブレークスルーである”に大賛成です。ただし，計算化学との関連については，個人的には疑問に感じます。計算から意味のある予想外の結果が出ることはありえないからです。もし計算から予想外の結果を得たとしても，それは単にモデルが正しくないか近似が十分でないかなどの理由で却下されるのがオチです。その点が実験と計算の大きな違いです。

4-3-2　国内委員の意見書

委員A

分子科学研究所は，国内共同利用研究機関として設置されたものであるが，国際的に急速に発展している分子科学分野において，我が国の研究体制を大学等では対応しえない極めて高度な国際的水準で整備し，さらには世界をリードする水準へと高めることを，その主要な使命としてきた。電子構造研究系は，発足の当初より，高い水準でこの分野の発展に貢献してきており，教授・助教授ともに世代交代した現在においても，分子科学研究所に課された使命を，きわめて高い水準で維持発揚するに相応の陣容を備えていることは喜ばしい。しかしながら，今日では，大学等においてCOE等の各種大型予算の獲得が可能となり，国立共同利用研の存在意義と使命の根拠が薄れつつある。また，大学の独立行政法人化が検討され大学の研究体制の柔軟な拡充が可能になろうという情勢に鑑み，大学ではなしえない使命を分子科学研究所に求めることは従前より困難になりつつある。こうした情勢の中で，分子科学研究所においては，既存の学問体系にとらわれずに，新分野の形成につながる研究領域を果敢に開拓する役割を集中的に担うべきであろう。分子科学研究所の使命を新研究領域の開拓に集約すれば，現在の研究体制はこれに適していない。研究の方向が挑戦的になればなるほど失敗の危険は増加する。研究単位が小さければ，失敗は即その単位の滅亡を意味する。命を賭すほどの研究者魂こそ重要とはいうものの現実にその勇気を各研究者に強いることは無理であろう。挑戦的課題に多大な設備投資や労力投入をそれほど要さない理論研究系とは異なり，実験研究系では，研究単位の拡充こそが失敗を恐れない挑戦を大胆に展開するための唯一の解決策である。

西グループは，溶液構造について独自の視点から国際的にこの分野の研究をリードしており，研究組織を拡充して広範にこの研究を展開することが望まれる。新規な現象認識と概念形成を課題にする限り，精緻な水準に至らない側面は避けがたい。今後も瑣末な精密化に拘泥せず，溶液構造の分子科学の基盤を樹立し，新規な現象認識と概念形成を含む研究を発展させていただきたい。

藤井グループは，着想のよい研究を多数めざしているが，研究組織が小さいため十分に推進できていない点が気がかりである。超解像レーザー顕微鏡の開発を共同研究で進めているが，分子科学の新領域開拓と合目的的新技術開発の２足の草鞋は，現在の研究組織では無理が伴う。研究室の歴史がまだ浅いだけに現状はやむを得ないと思われるが，上で述べた研究体制の拡張がすぐに実現できないとすると，課題を精選して集中的に研究を展開することが急務であろう。

鈴木グループは，革新的な画像観測技術を駆使して化学反応素過程研究の新領域の開拓に勢力を集中していることは評価できる。理論だけでは解明の難しい現象を精密に観測できるようにすることによって，理論と実験の詳細な比較を可能にし，化学反応系の挙動を予測できる理論の開発を促すことは，実験的分子科学研究の重要な課題である。さらに実験的研究技法の根幹をも独自に開発できれば，よりスケールの大きい挑戦的研究を展開できると期待できる。

委員Ｂ

西グループは，クラスターレベルでの分子間相互作用という大きなテーマのもとに，液体／溶液の部分構造という旧くて新しい，そして化学にとって必須な問題に取り組んでいる。低波数ラマンスペクトルの解析から，水とアルコールの混合液体の部分構造が，水とアルコールそれぞれに固有な部分構造に分解されるという仮説を提出し，この問題の新しい切り口を提示した。最終的な検証には，低波数ラマンスペクトルを与える部分構造モードの特定を含め，さらなる研究が必要であると思われるが，議論の出発点としてこの仮説の果たす役割は極めて重要である。今後の発展，とくに動的な視点がどのように導入されて行くのか注目したい。藤井グループは，イオン化検出による超音速自由ジェット中の振動分光により，分子や分子クラスターの構造とダイナミクスを調べている。この手法は藤井グループ独自のものであり，従来の手法では到底得られなかった数多くの極めて興味深いデータが集積されている。しかし，それらの解釈は今後さらに深化させる余地があるように思われる。その過程で，何らかのブレークスルーの糸口が見つかることを期待する。鈴木グループは，光電子，光イオン化種などの２次元画像検出により，超音速自由ジェット中の分子の反応素過程を詳細に調べることを目指している。独自の実験装置を設計・製作し，他のグループの追随を許さない精緻な実験に挑戦する研究姿勢は高く評価できる。理論が最も得意とする小さな自由分子を対象として，理論のより高いレベルでの検証に焦点を置く方向と，機能性分子などやや大きな分子を対象として，従来得ることが不可能であった素過程に関する新しい知見を得る方向の二つの可能性が提示された。筆者は後者の方向により，何か予想外の実験結果が得られることを期待する。

電子構造研究系の３グループの研究レベルが，国際的に見て一流の水準にあることは疑いない。それは，国際的に評価が確立している論文誌に，過去数年にわたって継続的に論文が発表されていることからも窺われる。これまでに得られた研究成果が，文字通り画期的というレベルに達しているとは言い難いが，今後画期的成果につながる可能性を十分にはらんだ研究が行われているということは間違いない。これらの研究が相互にどのような関係にあるのか，また「電子構造」というキーワードでどう括れるのかという点に関しては，検討の余地がある。新任の助教授も含め，研究系としての重点をどこに置き，それに向かってどのような体制をとるのか議論することが必要であると考える。

分子研全体を見ると，個々の研究グループの健闘が目立つ一方，全体としての姿が見えにくくなっている感が否め

ない。Heisenberg が言ったように,「部分」をいくら集めても「全体」にはならない。分子研は，独立の研究所であるが故に, その存在理由を明確にするための「全体」像を強く求められている。設立時における狭義の分子科学から, 次々に間口を広げて広義の分子科学の担い手となった現在の分子研において，どのような「全体」像が成立し得るのだろうか。分子研内の研究者のみならず，外部にいて分子研と協力する立場にある分子科学者にとっても，極めて重要な問題である。筆者は, 大学の理学部的なスタンスで,「基礎分子科学」の研究に邁進する研究所であってほしいと願う。昨今の時限プロジェクト研究には馴染まない，知的好奇心に基づいて自然の根源を問う研究を支援する中核機関としての分子研であってほしい。そのためには，分子研の顔となるべき有力な研究グループを育成して（場合によっては人員配置の再構成を行って), 他を圧倒するような基礎研究業績をあげることにより, 基礎研究における分子研の存在意義を強く訴えてゆくことが急務であると考える。

最後に今回の外部評価に携わった感想を一言述べたい。ヒアリングの予定時間は１時間であったが，どのグループの場合もその予定を大幅に超え，ヒアリングというよりはディスカッションの様相を呈した。内容はいずれも筆者にとって有益かつ楽しいものであった。今後，研究者がこのような外部評価に携わる機会が増えて行くものと予想される。研究内容等に関する十分なディスカッションに基づき,「自分ならこうする」という意見を peer review という形で述べることは，評価される側にとってはもちろん評価する側にとっても有益である。その意味で，我々研究者は外部評価の機会を積極的に活用して行くべきであると思う。ただし，外部評価をあまり頻繁に行うのは好ましくない。筆者は，５年ないし７年に一度程度が適当であると考える。

4-3-3　国外委員の評価

原文

Professor K. Müller-Dethlefs
Department of Chemistry
The University of York

Report on my review of the Department of Electronic Structure

Dear Professor Kaya

It was my privilege to visit the Department of Electronic Structure at the Institute for Molecular Science from 13 to 23 December 1999. During this short visit I had the pleasure to hold interviews with Professor N Nishi, Professor M Fujii and Associate Professor T Suzuki. The discussions with the faculty of the Department of Electronic Structure were held in a cooperative atmosphere and allowed me to get deep insight into their past, present and future research activities. I would like to express my gratitude to all of them for their openness in our discussions and for their full cooperation that allowed me to prepare this review in a rather short time.

The Department of Electronic Structure

The Department is fairly small, however, it covers quite a broad range of state-of-the-art research. Since the last report by Professor Carl Lineberger two new Full Professors have been appointed following the retirement of Professors Hanazaki and Yoshihara. Professor Nobuyuki Nishi moved to IMS from Kyushu University in April 1998 and Professor Masaaki Fujii joined IMS from Waseda University in April 1997. These appointments follow the well established tradition of the Institute for Molecular Science to always search for the best available candidate in *open competition,* and not to promote internally from Associate Professor to Full Professor. Both Fujii's and Nishi's appointment has clearly been a remarkable success story for the Department and IMS. Both

Professor show very high originality and innovative experimental concepts in their research. Within the rather short time past since their appointment they have established new state-of-the-art scientific fields at IMS that can compete on an international level. The same can be said about the scientific achievements of Associate Professor Toshinori Suzuki (at IMS since 1992), who has gained a remarkable international reputation in spite of his young age. In my view the Department of Electronic Structure represents those aspect of modern science that I feel should be enhanced ; modern and competitive fields of research, and open view of science and scientific achievement, and guiding of research associates, post doctoral fellows and students through scientific ideas, innovation and achievement and not through autocracy.

The research in the Department excels in a variety of fields that are currently of high international interest: Intermolecular interactions at cluster level, bridging the gap between the isolated molecule and the condensed phase, molecular beam studies of intramolecular vibrational energy redistribution, excited state and ion spectroscopy of large molecules and clusters, microscopy below the diffraction limit, and chemical dynamics studied by time resolved laser spectroscopy, and fragment and photoelectron imaging techniques. The experimental activities of all three research groups reviewed rely heavily on the use of sophisticated detection methods to study molecules and clusters in molecular beams and liquids. This necessarily involves the day-to-day use of lasers, with a particular emphasis on the picosecond and femtosecond time scale. Much of the short-pulse laser equipment has to be shared between the groups, leading sometimes to a shortage of measurement time, for instance on the ps two-colour laser system. Just shortly before my arrival this laser system broke down, causing a major disturbance of a part of Fujii's research activities.

Generally it can be said that the research activities of the Department are at an internationally competitive level. Publication output in international high quality scientific journals is excellent. All three group leaders have received invitations to give talks at international conferences. The research associated, postdocs and PhD students find in the Department an intellectually stimulating and scientifically challenging environment. To maintain this level, the Department needs a very high level of funding to be able to expand and maintain its laboratory equipment and laser facilities. All three groups have attracted very substantial external funding, which is a clear sign of very high recognition. The external funding contribution should, however, not be seen as a replacement for IMS funding. The research activities of the Department require a very high level of research infrastructure.

I also noted during my visit that both Full Professors have quite enormous administrative duties. These duties are often extremely time consuming and scientifically counterproductive. I do not see why IMS must have so many committees and why they always have to be chaired by a full professor. How important it is not to be overloaded by administrative duties is clearly evident when looking at the Associate Professor position. As Associate Professor, it is possible to concentrate completely on research. Associate Professor T Suzuki presents us with a very convincing success story. His research is internationally acknowledged, his research had innovated the use of imaging techniques in chemical dynamics. I feel the level of support from IMS was just right for him, so I do not, of course, propose here to increase the administrative duties of Associate Professors. I think the system at IMS is very good, and rightly so, for an innovative Associate Professor and I would recommend to keep it like that.

Another problem relates to student numbers in the Department. Student numbers, considering the resources and the potential research projects could easily be tripled or quadrupled. This is a very difficult problem to solve, but one way forward might be to have joint professorial appointments with Universities. Also it would be a good investment to increase the number of studentships available from IMS substantially. These should then be open to competition to all groups at IMS.

Now some more general remarks for the principal discussion which should focus on the following point: Is IMS within all its Departments able to maintain the scientific leadership in Molecular Science in Japan and is it able to compete a the highest level

internationally? The answer is related to technical support, infrastructure, internal and external funding and administration. A lot of technical support and technical resources are now very much localized UVSOR facility and the Laser Center. It might be better to localize some of those resources in the most productive research groups. In contrast to the earlier times at IMS, when a full professor at IMS had two research associates, one technical associate and often at least one more postdoc, the situation in the Department of Electronic Structure is now that for two Professors and one Associate Professor there are four Research Associates (H. Kohguchi, Y. Inokuchi, T. Nakabayashi, M. Sakai), one Postdoc (Saeki) and one Technical Associate (H. Katayanagi). Though in my view external funding is very important as a proof of competitiveness, IMS as a Center of Excellence should provide sufficient funds for infrastructure and scientific personnel so it will be able to compete with the personnel structure of the big universities. The universities have the advantage of student throughput; IMS should provide an adequate number of research associates, technical associates and postdocs. This would also further enhance the opportunities to obtain external funding.

In summary, all three research groups in the Department of Electronic Structure are innovative and original in their research and their research is internationally recognized. The groups are too small, in particular Fujii's and Nishi's group. An increase in the number of research and technical associates would be a very good investment. Most important is an increase in student numbers by attracting high quality chemistry and physics graduates. The two Full Professors are also overloaded by too many administrative duties. One way forward to solve this problem would be to provide the Director-General of IMS with the administrative infrastructure, through reorganization of the Administration, to reduce the overall administrative burden of IMS and Department of Electronic Structure faculty drastically.

訳文

K. ミューラー‐デスレフス教授
ヨーク大学化学教室

電子構造研究系の評価の報告

茅　教授　殿

1999年12月13日から23日に分子科学研究所電子構造研究系を訪れるのは，私にとって名誉なことでした。この短い滞在中に西教授，藤井教授，鈴木助教授のインタビューを持てた事を嬉しく思います。電子構造研究系の教授・助教授との議論は協調的な雰囲気の中で行われ，彼等の過去，現在，未来の研究活動への深い洞察が可能となりました。私は，打ち明けた議論を行い，短期間の間にこのレビューを作成することに協力的であった彼等全員に感謝の意を表したいと思います。

電子構造研究系

この系は少人数であるにもかかわらず，非常に広い分野に渡って最先端の研究を行っています。前回のカール・ラインバーガー教授による報告以後，花崎，吉原教授の退官に伴って，２名の新しい教授が任命されました。西教授は1998年４月に九州大学から分子研に移り，藤井教授は1997年４月に早稲田大学から分子研に加わりました。これらの人事は，公募による競争の中で最良の候補を探し，助教授を教授に内部昇進させないという分子科学研究所の十分に確立された伝統に従い行われました。藤井（教授）および西（教授）の任命は，明らかに，系にとっても分子研にとっ

ても素晴らしい成功であると思います。両教授は，その研究の中に独創性と斬新な実験構想を示しています。既に，着任後の短期間の間に，国際的に競争力の有る最先端の研究を立ち上げました。同じ事が，（分子研に）1992年着任の鈴木俊法助教授の学問的な業績に対しても言えるでしょう。彼は，その若さにもかかわらず，素晴らしい国際的な評判を得ています。電子構造研究系は，私が現代科学に重要と感じている次のような要素の好例であると思います。すなわち，最新の競争の激しい研究領域に取り組み，科学研究と業績に対して公平な目を持ち，助手，博士研究員あるいは大学院生を，上下関係によってではなく，科学的着想，技術革新，研究成果によって導いています。

この系は，国際的に高い興味を持たれている様々な領域において卓越した成果をあげています。それらは，孤立分子と凝縮相とを結ぶクラスターレベルでの分子間相互作用，また，分子間の振動エネルギー再分配や大きな分子やクラスターの励起状態やイオンの分子線を用いた分光学研究，回折限界以下の顕微鏡観測，時間分解レーザー分光法，そして解離断片や光電子の画像観測手法などです。私が今回評価した三グループの全ては，分子線の中，或いは液体中の分子やクラスターを調べるための高度な検出手段を必要としています。レーザー，特に，ピコ秒‐フェムト秒レーザーの日常的な使用は不可欠です。超短パルスレーザー装置の多くを，幾つかのグループで共同利用しなければならないでしょう。これはまた，実験時間を短くしてしまうことにもなるのですが。ちなみに，ピコ秒２色レーザーシステムは，私が来る直前に故障してしまい藤井（グループ）の研究活動の一部の大きな障害となってしまいました。

総じて，この系の研究活動度は国際的な競争力を備えた水準にあります。国際的に高度な学術雑誌への発表状況も立派です。三つのグループのリーダーもそれぞれ国際会議で招待講演を行っています。助手や博士研究員，大学院生も，この系が知的刺激に富み科学的な挑戦を起こさせるような雰囲気を持っていると感じています。この水準を維持するために，この系は多額の研究資金を得て，その実験装置やレーザー設備を更に充実・維持することが必要です。実際，３グループの全てが大きな外部資金を獲得しています。これは，外部からの高い評価の証しでしょう。外部資金の獲得は，しかしながら，決して分子研での内部からの研究費のサポートを犠牲にするような事態を招いてはいけません。この系の研究活動には，所が充実した研究基盤を与えることが不可欠なのです。

私の滞在中に気がついた事ですが，両教授とも極めて多大な管理的な仕事を負っています。これらの仕事には，非常に長い時間を費やさねばなりませんし，研究活動にとっては非生産的です。分子研がどうしてこのように多くの委員会を持っているのか，また，何故，教授が委員長を務めなければいけないのか解りません。管理的な仕事が過大にならないようにすることが如何に大切かは，助教授を見れば，極めて明白です。助教授は，完全に研究に専念することが可能だからです。鈴木俊法助教授は，文句無しの成功例です。彼の研究は国際的にも評価され，化学動力学の研究に革新的な画像手法を導入しました。彼に対する分子研の援助は，まさに適切だと思います。従って，ここで，助教授の義務をこれ以上増やすべきだとは申し上げられません。私は，分子研のシステムは非常に良いと思います。創造的な助教授に対しては，間違い無く良いのです。このシステムを維持されるようお勧めします。

もう一つの問題点は，系の中の学生数に関したことです。学生の数は，研究設備や実施可能な研究プロジェクトを考えると，３倍あるいは４倍であっても良いはずです。これは，大変難しい問題ですが，一つの改善策は，（研究所の教授・助教授が）大学の教官を兼任することでしょう。そして，分子研が提供できる奨学生の数を大幅に増やすことも有効でしょう。無論，奨学生は，分子研の全てのグループ間での開かれた競争に供せられるべきです。

さて，次のような極めて重要な問題について，所見を述べたいと思います。分子研の全ての系が，日本の分子科学における指導的立場を保ち，且つ，国際的に最高のレベルで競争してゆくことができるのでしょうか？　その答は，技術面でのサポート，経済的構造的研究基盤，内部あるいは外部資金，および運営に依存します。分子研の分子研内の技官による支援体制とその資源は，UVSOR施設やレーザーセンターに片寄っています。これらの一部を，最も活発な

研究グループに集中するのも良いかもしれません。教授が２名の助手と１名の技官と時には複数の博士研究員を持っていた分子研の創設当初に比べて，電子構造系では今や，２名の教授と１名の助教授に対して，４名の助手（高口博志，井口佳哉，中林孝和，酒井誠）と１名の博士研究員（佐伯盛久），１名の技官（片柳英樹）という状況である。私の意見としては，外部資金は競争力の証しとして大変重要ではありますが，分子研はセンター・オブ・エクセレンスとして充実した研究基盤と大学の研究室と競争できるだけの研究人員が持てるように，研究者に予算を与えるべきです。大学は学生のもたらす研究生産能力によって分子研よりも有利な立場にあります。ですから，分子研は適切な数の助手，技官，そして博士研究員を研究者に提供しなければなりません。それがまた，外部からの資金を導入する機会を増加させることになるでしょう。

要約しますと，電子構造研究系の３グループは，いずれもその研究において革新的，独創的であり，国際的に評価されています。ただ，グループはいずれも小さく，特に，藤井グループと西グループは余りにも小さすぎます。助手と技官の増加は研究面で良い結果をもたらすでしょう。最も重要なのは，能力の高い化学と物理の院生を集める事によって学生数を増やすことです。二人の教授はあまりにも多くの管理的仕事の負担が多すぎます。この問題を解決する方策としては，運営組織の再構成によって，所長の運営を助ける組織を設け，分子研の，そして電子構造研究系の教授・助教授の事務負担を劇的に減らすことだと思います。

4-4　分子集団研究系

国内評価委員会開催日：平成11年11月26日

委　員　　木下　　實　（山口東京理科大，教授）
　　鹿児島誠一　（東大院総合文化，教授）
　　小林　速男　（分子研，教授）
　　藥師　久彌　（分子研，教授）
オブザーバ　中村　敏和　（分子研，助教授）
　　米満　賢治　（分子研，助教授）
　　井上　克也　（分子研，助教授）
　　山下　敬郎　（分子研，助教授）
　　鈴木　敏泰　（分子研，助教授）

国外評価委員面接日：平成12年１月８日

委　員　　Professor Fred Wudl (University of California at Santa Barbara)

4-4-1　点検評価国内委員会の報告

分子科学研究所創設以来25年の間に分子集団関連分野の学問領域は著しい発展を遂げ，現在では分子物質は物性分野において酸化物とともに主要な物質群と見なされるようになった。我国の分子物質の物性研究は長い伝統をもっているが，その研究領域は近年，物性理論から合成化学に跨る一大分野を形成するに至っている。分子科学研究所における関連分野の研究は我国内外から高い評価を得ているものと思われ，分子科学における本分野の重要性は大きく，今後一層の発展が望まれる。

個々の研究についてはルーチン化したやり方だけではなく，掘り下げた深い仕事を生み出す努力をする必要がある。この点に関連して，前回の点検評価に際しても指摘されたことであるが，教官の研究環境，特に多忙さについての改善の必要性が非常に大きい。研究室の体制に関しては，助手，技官層の一層の充実が望まれるが，其れは一般的に非常に困難な事態である。特に最近，相対的な助手の定員数が減少して来て，転出した前任者の助手が残っている為に，新任教官が共同研究者を持てず，成果を挙げにくい状況が生じている事は問題である。一つの解決策として，博士研究員の充実が望まれる。

前回の96年度の点検評価の時点は，分子物質開発研究センターの設立直前に当たっていたこともあり，「分子物質開発研究センターを含めて，分子集団系全体として分子物質研究の新しい柱を立てる必要性」が述べられていたが，センターが当時構想したように機能しているかを点検し，可能な時期に改善していくことが必要である。分子物質開発研究センターはその設立の構想そのものがそれ以前の分子集団研究系の点検評価の中から生み出されたものであり，これは点検評価作業が研究系の将来の発展計画にとって極めて重要な役割を果たしてきたことを示すものでもある。また，外部の点検評価に関連して，これまで点検評価の際に指摘された問題点に対して，分子科学研究所としてどの様に対応し，解決しようとしてきたのか，あるいは，外部の評価に対してどの様に釈明し，それに対して反論，説明があったのかなどについて外部の研究者に判る形で示す事が重要である。

客員部門の役割に関しては，客員教官として分子科学研究所で実際に研究を行い成果を出す事の他に，研究会等を通して，研究分野の活性化に寄与するという側面とがあり，後者に関しては内部の教官の間ではその重要性が認識されているようであるが，外部の研究者からはむしろ前者について，「分子科学研究所に客員制度があるので出来た」と

いう成果が得られるような状況の実現が望まれている。

分子物質の研究分野における分子科学研究所に期待される役割の一つとして,「興味深い分子物質のサンプルの供給」に関する役割がある。前回の点検評価に際して「分子科学研究所で良いものを作り，外部の研究者に広く供給するように」との指摘があった。現在では分子物質の物性分野では「物理」と「化学」が完全に融合しているが，なお測定試料を供給する化学者のやり方に二つの立場がある。即ち，興味を持つ研究者に無差別的に幅広くサンプルを供給する立場と共同研究者を絞り供給し研究を進める立場があり，測定試料の配布については「分子物質」に対する化学者と物理学者の認識の差が完全に埋まる段階までには至っていない事を示唆している。これは「物質開発」と「物性解明」のいずれの段階に重点を置くかという事とも関わっているが，特に分子物質開発センターに対しては今後とも外部より試料供給源としての機能が期待されるものと予想される。しかし，現実には各研究室が人員的にその役目を充分果たせる体制にはなく，対応が難しい状況にある。この問題は共同利用機関における分子物質研究の拠点としての役割との関連において継続的な課題となっていくものと思われ，何らかの具体的な対応が望まれる。いずれにせよ分子性固体について，合成から理論に亙る広い分野の研究者が集まれる場所は世界的に稀であって，分子科学研究所は世界的にも重要な位置を占めている。今後，物質科学としての「分子」の研究が益々重要性を増すものと思われるが，今後とも他分野に影響を与え続けられるよう,構成員が自ら考えるべき新しい時期にさしかかっている様に思われる。

4-4-2　国内委員の意見書

委員A

世界的に見て，分子性結晶の伝導性・光学的性質・磁性の研究は，戦後急速に発展してきた分野であり，その中で日本の研究が果たしている役割は非常に大きい。しかも，この分野の成果は，いろいろな形で物性物理や化学の諸分野ばかりでなく周辺の学問領域にも大きな影響を与えている。分子科学研究所は設立以来，この分野の研究に力を注ぎ，顕著な業績を挙げてきた。とくに，設立当初有機あるいは分子性の伝導体・超伝導体の開発・研究，電子・陽子移動錯体の開発・研究，また有機強磁性体の開発・研究など一連の研究目標を定め，そのような目標に適った人材を集めて，互いに協力しながら研究を強力に展開してきた。その間に分子性結晶の超伝導体や有機強磁性体が開発され，研究が進められたが，そこで分子研が果たした主導的な役割は高く評価される。

現在，この分野の研究は，当初の目標をほぼ達成し一段落した時期のように思われる。この時期に，分子科学研究所がこの分野でどのような方向を目指しているのかが必ずしも見えていないのが残念な気がする。もちろん，これまでの成果を踏まえて，その延長上の研究もしなければならないし，やり残してきたことを詳細に研究することも大切であり，そこから新しい問題が発展する可能性も高い。その意味では，次の発展への誘導期と考えた方がよいかも知れない。しかしながら，このような時期の研究は，前回の外部評価でも指摘されたようにルーティンな研究と見なされる。このようなルーティンな研究がよくないというのではなく，そこからの発展が期待されるという意味で必要である。しかし，世界的な視野から研究を主導する立場にある研究所では，ルーティンな研究を進める一方で，次のターゲットをどう考えているかを発信することも要求される。

分子集団関連研究分野には，理論も含めて７人の所員が関係しており，それぞれに多くの優れた発表論文があり，活発に研究を進めていることは高く評価できる。しかし，発表論文を拝見すると，若干の共同研究が見られるけれども，グループ間の交流は必ずしも十分でないような印象を受ける。世界的に見ても，一つの機関でこれだけの人員をこの分野に割り当てているところはほとんどない。それだけに，グループ間で相補的に協力しながら研究の日常的な交流を積極的に行い，効率のよい研究発展を図ることが望まれる。グループ間の日常的な交流を通して，研究所における

研究のあり方，あるいは現在のメンバー（近い将来の人事も含めて）で行えるこの分野の発展の方向などが見えてくるのではないかと期待している。研究所の研究室では，大学の研究室とは違う面があるはずで，その特徴を十分に活かして欲しいと思う。

このことに関連して，人事公募のあり方について「分子研リポート 98」の中の議論で，いろいろな考え方が述べられているのを興味深く読んだ。いずれの意見もそれなりに解るけれども，やはり研究の方向を決めるのは，分子研自身であり，分子研が何をやりたいかがあって，はじめてどういう人を求めようかとなるのが本筋ではないかと思う。それには，多くの人の意見を参考にしながら，現有のメンバーで常に提案・討論を繰り返し，自分たちで何ができるか，その時にこういう人材がいたらもっと能率があがりそうだ，新しいことが生み出せそうだという観点から進めるのがよいのではないかと思う。研究所は，研究する大きな課題がなくなったら，存在意義を失うので，そのくらいの緊張感をもって研究を開拓していって欲しい。このことは，研究分野についてもいえることで，場合によっては別の分野に乗り換えることも視野に入れて，広い立場から真剣に議論するべきことであろう。

共同利用に関しては，毎年相当数の施設利用・協力研究などを受け入れ，教職員の負担は大変なものであろうと思われる。利用する側からの意見になるが，共同利用を有効に機能させるには，まず上述のように研究所や研究室としての旗印がはっきりしていることが重要であり，考え方，測定法，機器などに何か特徴がなければならない。現在のように，どこの大学にも種々の機器が充実してきた段階では，何か特徴のある装置や機器が必要になるし，特殊な測定ができることが望まれる。とくに化学関係の場合には，市販の装置で大抵の測定は間に合うことが多いので，これはかなり難しい注文かも知れないが，共同利用機関では，可能な限り最高級の装置を設置するとか，大学で購入するときには省略せざるを得ないような付属品（オプション）を揃えるように心がける必要がある。その他，最近では極端条件下（超極端である必要はない）での各種測定が必要なことが多いので，このような需要にも対応できるように計画することが望まれる。

共同利用について，次に重要なことは，優秀なスタッフと支援職員であり，両者の時間的な余裕であろう。共同利用できた研究者に，単に測定や合成の便宜を提供するだけでなく，その結果について互いに十分な討論をする余裕が欲しい。事務的なことや雑務的なことをできる限り簡素化・機械化し，利用者との対応ではポスト・ドク，院生にも手伝ってもらい（もちろん，その成果は院生等の成果にも及ぶ），そのうえで人員増を望む以外に，この問題を解決する名案はない。

これと関連して，客員制度がやや形骸化しているような印象を受けた。流動部門と同様に所内でも議論をしているのであろうが，客員部門のあり方，成果の帰属，発表の方法など検討して欲しい。

早いもので，私達分子科学を志してきた者が大きな期待をもって創立を見た分子科学研究所も，今年西暦2000年４月で25周年を迎える。分子研と付かず離れずで見守って来たが，その期待に応えてくれた分子研に拍手を送りたい。しかし一方で，分子研の第一世代が過ぎようとしているような気がしないでもない。時代の流れが速いだけでなく，学問の進歩も一段と加速されている現在，次なる新しい研究分野を設定することは容易ではない。しかし，研究することがなくなった訳ではなく，むしろますます難しくなり，挑戦しにくい課題が残されている。それだけに息の長い挑戦をする機会が訪れているともいえる。春秋に富む中堅・若手の人たちに，常に開拓者精神を失わずに，困難な課題に挑戦してもらいたい。

委員Ｂ

(1) 研究領域の将来性と分子研グループの活動について

いまや分子性物質は，物性科学の中で酸化物とならぶ主要な物質群となった。これを象徴的にあらわしているのが，超伝導や強磁性をもつ分子性物質の合成・発見である。およそ物性科学の教科書に登場する物性現象で，分子性物質で演じられないものはないといっても過言ではない。それどころか，電子系の低次元性やフェルミ面に関係するいくつもの物性現象など，在来の物質では知られていなかったあらたな物性科学の世界が広がっている。

これからの物性科学において分子性物質への期待は大きい。特に，新物性・物質の設計が今後の物性科学の主要な方向になると考えられ，この点で分子性物質は大事な役割をはたさなければなるまい。今後は「分子性物質でもできた」というだけでは評価されず,「分子性物質だからできた」といえる段階に進むことが要求されるであろう。

この分野での分子研の研究グループの寄与は大きい。研究成果においては，いくつかの全くオリジナルな成果があげられており，現在，世界で進行している主要な研究のかなりの部分は，分子研グループがその中心となっている。また，組織的・地理的な研究センターとしての役割においても，この分野における分子研は，世界的に主要でユニークは研究所として認知されている。

それでは分子研グループの研究の今後にまったく問題がないかといえば，もちろん，そうは言い切れない。研究には広がりと深さが求められる。まず広がりについては，物質開発を必須とする分子性物質の研究において，物性の精密測定を専門とする研究者との協力が必須である。その際に２つの態度がありうる。ひとつは，「来るものは拒まず」と，希望する研究者にはひろく試料を提供するやり方である。この方法の長所は，大事な発見を狭い範囲に閉じ込めることなく多くの研究者に公開できるので，切磋琢磨によって研究の発展が望めることである。短所は，多くの試料がブラックホールに落ち込んだかのように，試料の提供先から何の反応も返ってこないという危険があることであろう。もうひとつの態度は，試料提供先を選別して限定することである。これの長所と短所は，ちょうど，先のケースの裏返しである。この二つの態度のはざまで，場合に応じて適切な選択をすることが求められる。

つぎに，研究を深めるには，まず優れた理論家との共同が不可欠である。「分子性物質でもできた」から「分子性物質だからできた」に進み，物性科学の世界にその成果を残すには，物質や実験技術にとらわれない立場から，研究の成果を物性科学の体系の中に位置付けることが必要である。いっそう多くの理論家をまきこむことが望まれる。次に，研究成果の発表そのものに深さを印象付けることが望ましい。分子研グループの研究成果は華々しいので，論文誌以外にも多くの国際会議などで報告を求められる。その結果として，ひとつの研究にまとまった論文の形をもたせる暇がなく，他の研究者がその成果を参照・引用する際に，結局，どの論文が重要なのかを見極められない，ということがありそうである。これはあたら重要な成果を拡散させることになる。

(2) 共同利用機関としての現状と将来への提言

研究資金の増大のおかけで，いまや多くの大学・研究機関では（昔に比べると）機器が充実してきている。このため多くの研究所で，かつて果たしていた機器センターとしての役割が消滅してきており，分子研も例外ではない。また語弊を恐れずに言うならば，設立から25年を経て，研究者集団としての役割も変容してきた。設立当初は関係者の間に緊張感と一抹の不安が共有され，研究所としての成果をあげることに邁進されたであろう。これが現在の分子研の大きい成果に結びついたに違いないが，これからは，そのような運命共同体的な一体感とは，質的に異なったものが，求められるのではなかろうか。それは研究所が「所」という組織としての成果をめざすのではなく，一つの構想を持った研究者がある期間，集中的に研究を進めるための「器」の役割を果たすことである。この点において，分子研が堅持してきた任期制は，今後いっそうその重要性が強調されなければなるまい。

すでに述べたように，研究の広がりと深さを得るためには共同研究が必要であり，分子研グループの中にはその仕組みがすでに用意されている。これをいっそう活性化することはもちろん必要である。しかしながら,「協同」は義務で

なされるものであてはならない。所内のグループ間の協同が必然的に生じることが，もっとも望ましい。これにこだわることなく，所外のグループとの協同も同様に重視されるべきであるが，もっと望ましいのは，ある期間，外部の協同研究グループがそっくり所内グループとなることであろう。分子研が現在用意している客員制度の運用を，さらに工夫することによって実現できるはずであるが，これをきっかけとして，外部にポストと予算の柔軟な運用を働きかけることが必要であろう。それが可能になる条件が整ってきているのではないか？

(3) 点検評価について

最後に，点検評価制度そのものについて，若干の思いつきを記しておきたい。今回の点検評価に際して，「分子研リポート」に掲載された前回の点検評価の報告書を拝見した。しかし，そこに指摘，提案されていることに対して分子研がどのように考えるのかは公表されていない。説明や反論・釈明などをし，オープンに対応したほうが内部的にも外部的にもよい結果を生むのではなかろうか。

4-4-3　国外委員の評価

原文

Report on Seven Groups of Research on Molecular Solids

Fred Wudl (University of Calfornia at Santa Barbara)

January 15, 2000

Introduction

On January 8, 2000 I interviewed the groups of Yakusi, K. (Department of Molecular Assembly), Nakamura. T. (Department of Molecular Assembly), Kobayashi, H. (Department of Molecular Assembly), Inoue, K. (Department of Applied Molecular Science), Yonemitu, K. (Department of Theoretical Studies), Yamashita, Y. (Research Center for Molecular Materials) and Suzuki, T. (Research Center for Molecular Materials)

The premise that the IMS at Okazaki is clearly the premier center of research on molecular materials in the world holds true today even more so than it did at the time of the last review (1996). It is a unique institute, especially in a worldwide environment where institutes dedicated completely to the pursuit of fundamental research are decreasing in number.

Even though their size ranges only in 3 to 7 members per group, the scientists and their associates I reviewed are performing excellent research on various aspects of the science of molecular solids. The spectrum of interest of the research groups ranges in variety from organic synthesis to very high-level condensed matter physics theory.

The general impression is that all scientists are strongly motivated and their results are at the cutting edge of their respective fields. The main topics being explored are molecular semiconductors, metals, superconductors and ferromagnets. The overwhelming emphasis is on organic conductors. This is very likely historical as a result of the efforts of Prof. Hiroo Inokuchi, whose pioneering contributions were in organic conductors.

Recommendations

1. Science

Though organic superconductors based on the TTF family are still producing interesting condensed matter physics results, such as reentrant and coexisting superconductivity, I believe this may be the time to move on to other systems and, for example, give somewhat more emphasis to organic SEMICONDUCTORS. The only group studying some aspects of these is the T. Suzuki group.

In terms of chemistry, physics, and materials science; the semiconductors, whether small molecule or polymeric, are currently the most interesting systems. In that vein, one wonders if the “molecular fasteners” examined briefly by Professor Inokuchi, some time ago, should be investigated as possible TFT’s (thin film transistors).

2. Personnel

If one were to use similar research institutes in the United Sates as models (Lucent, IBM); then the size of the research groups is adequate, assuming that the groups of the young professors will grow to the size of the H. Kobayashi and Y. Yamashita groups. On the other hand, the groups at the Max Planck Societies (Institutes) are larger.

As already mentioned in a previous report (P. Cassoux, 1996), it is important for IMS to improve its student recruitment. This will help attract top Assistant and Associate Professors and will help the existing Professors carry out their research more expediently.

Summary

The IMS enjoys an excellent international reputation for the research performed on molecular solids. The only area which needs to receive more attention is the chemistry and physics of organic semiconductors, both as small molecules (TFT’s) or polymeric. There exist already several ties to international groups but to strengthen these, the establishment of a prestigious international fellowship for foreign graduate students to perform part of their thesis research at Okazaki and Japanese students to spend at least one year abroad should be established. This would be an additional mechanism to increase the student population at IMS.

訳文

分子性固体研究の７グループに関する報告

Fred Wudl　2000年１月15日

はじめに

2000年１月８日，分子集団研究系の薬師，中村，小林，相関領域研究系の井上，分子基礎理論第四部門の米満，分子物質開発研究センターの山下，鈴木グループのインタビューを行った。

分子科学研究所が世界で第一級の分子物質の研究センターであるということは，むしろ前回の点検評価の時点（1996年）以上に，明らかに今日でも真実である。また，分子科学研究所は基礎研究を追求する研究所の数が減少すると言う世界的な状況の中でユニークな存在でもある。

グループの構成員のサイズは３から７名程度であるが，私がレビューしたグループは分子性固体科学の種々の方面で非常に優れた研究を行っている。各グループの興味は有機合成から高いレベルの固体物理理論まで広がっている。

私の全般的な印象としては，すべての研究者は強いモチベーションを持っており，彼らの研究結果はそれぞれの分野での先端的なものである。主なトピックスは，分子性半導体，金属，超伝導体，および強磁性体であるが，圧倒的に強調されているのは有機伝導体である。これはおそらく有機伝導体のパイオニアである井口洋夫教授の努力の結果による歴史的背景をもつものであると思われる。

勧告

１.科学

TTF 骨格を持つ分子より構成されている有機超伝導体では「リエントラントや共存的な超伝導」（reentrant and coexisting superconductivity）（訳註：超伝導‐絶縁体転移を示す有機超伝導体や，反強磁性秩序と超伝導が共存する有

機伝導体の事を指していると思われる）などの興味深い固体物理上の成果が現在も得られているが，私は有機**半導体**のような他のシステムにそろそろ重点を移してもいい頃であると信じている。これに関連する研究を行っているのは鈴木グループのみである。化学，物理，および物質化学の分野において，低分子あるいは高分子の半導体は，現在最も興味深いシステムである。そのような研究の流れに関して，井口教授によって研究された“ 分子ファスナー ”は，薄膜トランジスタとしての可能性を調査すべきではないかと思われる。

２.人員

Lucent, IBMのようなアメリカの同様な研究所をモデルとするならば, 分子研の研究グループの大きさは, 若い教授・助教授のグループがいずれ小林，山下グループの大きさに成長すると仮定するならば，適当なものであろう。しかし，マックスプランクの研究グループはこれより大きい。

Cassoux教授が前回のリポートで述べたように, 分子研にとって学生のリクルートを改善することが重要である。これはトップクラスの助手・助教授を引き付けるのに役立つし，すでに在籍している教授の研究を遂行するのにも役立つであろう。

まとめ

分子研は，分子性固体の研究において優れた国際的名声を得ている。より注目すべき唯一の分野は，低分子あるいは高分子の有機半導体の化学と物理である。海外のグループとのつながりがすでに存在するものの，これらを強めるため，外国人大学院生が博士論文研究の一部を分子研で行えるよう，また，日本人学生が最低１年間，海外で研究できるような国際奨学金を確立すべきである。これは，分子科学研究所での学生の数を増やすことにもつながるであろう。

4-5　相関領域研究系＋錯体化学実験施設

国内評価委員会開催日：平成11年12月15日

委　員　　中村　　晃　（大阪大，名誉教授）

　　伊藤　　翼　（東北大理，教授）

　　渡辺　芳人　（分子研，教授）

　　田中　晃二　（分子研，教授）

国外評価委員面接日：平成11年８月26日～28日

委　員　　Professor John Dawson (Department of Chemistry & Biochemistry, University of South Carolina)

4-5-1　点検評価国内委員会の報告

(1) 現状の問題

相関・錯体化学の領域では新物質の創成が研究をリードしている。新しい発想による新物質の開発は新たな理論，物性あるいは物質変換を誘発する。相関・錯体の研究グループの規模の大きさから，新物質の創成のためには分子物質開発センターとの共同研究のみならず理論，測定の研究者との共同研究も極めて重要である。この分野において分子科学研究所が中心的な役割を果たすためには研究所全体が新物質創成の重要性を認識することが必要不可欠である。一方，全国レベルでの中型測定装置（NMR，EPR，Mass，CD，X線等）の改善により，相関・錯体が利用している装置は国内の主要大学と比べてかなり貧弱になってきており，新物質を合成した研究者が，その物性測定を全国の大学の中から共同研究者を捜して依頼する時代になりつつある。この状況は全国共同利用機関としての分子科学研究所の根幹に関わる問題である。

(2) 指向性と展望

分子科学研究所での相関・錯体では，その研究グループの大きさから流行の研究の追随は行うべきではなく，多くの分野に基本的な概念を与えうる分野，たとえば“資源・環境・情報”を分子レベルで化学的に具象化しうるテーマにチャレンジすることが望まれる。特に以下の分野はその重要性にも関わらず，化学的にはまだまだ未成熟であることから，分子研の限られた人数でも，独自の物質を開発し，その発想により突破口を開き，国際的に指導的な役割を果たせることが期待される。

１）生体系が行なっている不活性小分子（N_2，CO_2，CH_4，O_2，飽和炭化水素化合物等）の代謝系への取り込み，ならびにイオンの濃度勾配（H^+，Na^+，Ca^{2+} 等）を利用したエネルギー変換を化学的に具象化し，人工的な系でのシステム化。

２）ノナスケールに及ぶ金属錯体の集積化による錯体化学と無機化学の融合と新たな光学，磁性，伝導性材料の創成。

３）不活性溶媒中で高活性な試薬を用いた合成反応から水系での温和な反応条件での合成反応への展開による環境およびエネルギー問題での分野の創成。

４）高選択性・特異性を有する新規錯体触媒の開発。

(3) 研究体制及び設備

分子研の中でも特に，錯体化学実験施設での全国の大学との活発な人事交流は同施設の人事選考の妥当性を示している。一方，活発すぎる人事異動は施設としての研究の一貫性の欠如をもたらすことも指摘されている。この問題は現状の相関・錯体の研究規模が小さく，特定の分野で国際的に指導的な役割を担うためには，より大きな研究グルー

プを形成させることが必要であることに起因している。新物質の創成を行うためには，人的なサポート体制の確立が是非とも必要である。ある程度の規模の研究チームを形成するためには，独自の研究を全面的に出し，高い資質を備える学生の興味を引き起こし大学から分子研へ目を向けさせることが重要であるが，分子科学研究所で行われている研究が，総研大の学生に大きく依存をする事態となれば，その存在自体が疑問視されかねない。現在，各省庁の研究所では独自の博士研究員枠を持ち，博士課程を修了した若手研究者が大学に比べて研究設備の整った各省庁の研究所で目的設定型の研究を行い，研究の大きな推進力となっている。一方，基礎科学センターとしての分子科学研究所における博士研究員の数は，COEに指定された現在でも，極めて少ない数に限られている。若手博士研究員が国立の研究機関で活躍する機会が増大することは，日本の学問の向上から喜ばしいかぎりであるが，21世紀を見据えた基礎科学の発展からは文部省の研究所こそ，十分な人的サポートが与えられるべきであり，次代の日本を背負う研究者は文部省が中心になり育てるべきであると思われる。

4-5-2　国内委員の意見書

委員A

錯体化学実験施設について

1．分子科学研究所錯体化学実験施設は1984年（昭和59年）に発足，以来約15年の歳月が経過した。多くの錯体化学研究者や院生がこの施設で研究を行い，さまざまな研究を展開してきた。その発足以来の活動を外部から眺めてきた一錯体化学者として，錯体化学実験施設のこれまでの足跡を眺め，所感を述べてみたい。紙数や時間の制限もあり，断片的且つ独断的なものになることをご容赦戴きたい。

2．この施設の発足の動機は，「錯体化学研究所」設立に向けたものであった。歴代の施設長他多くの諸先輩のこれまでの多大な努力にもかかわらず，残念ながら設立には至っていない。錯体研設立の構想は昭和39年には公式に文書化されている。その設立の理念の主たる部分は錯体化学実験施設の創設に際しても継承されてきた。すなわち，“施設”には，①日本の錯体化学のセンターであると同時に，世界をリードする研究機関であること，②大学の研究室では出来ないような高度な研究テーマに基づく研究を展開すること，③共同研究を推進すること，④人事交流の拠点となること，などが求められてきた。施設の設立以来15年を経過し，この間，沢山の錯体化学者や院生が錯体化学実験施設に所属し，新しい経験をし大きく成長・飛躍したことは意義深いことと評価できる。この間，施設長はじめ関係する諸先生方が施設の運営に払われた多くの努力に敬意を表し感謝したい。しかし，上記のような当初掲げた高い理念と比べたとき，この15年間の施設の活動にどのような評価が可能であろうか？　多くの大型機器，豊富な研究費などをバックにさまざまな意味で日本の分子科学ををリードしてきた分子科学研究所の中心的な研究分野の活動状況と比べて，錯体化学実験施設では世界をリードするような研究が不断に展開されていたであろうか？　そのような分子科学研究所の一施設として誕生したメリットが生かされてきたであろうか？　施設の活動が当初掲げた高い理念と比べて必ずしも十分ではなかったと感じるのは筆者だけではなかろう。

3．錯体研設立運動の母体は会員数が550名におよぶ「錯体化学研究会」であり，これとの関連で創設された「錯体化学実験施設」は，したがって，錯体化学研究会と無縁ではない。実際に，例えば，所外のメンバーの科研費による研究会を分子研で開催することなどは，施設発足当時は頻繁に行われ，錯体化学研究会は“施設”の活動を活発にsupportしてきた。また，分子研研究会を錯体化学関連のテーマで企画する際，その案内が錯体化学研究会の会員誌“*Information Bulletin*”に記載されるなど，多くの研究会会員の参加を求めるような努力が払われてきた。このような「錯体化学実験施設」と「錯体化学研究会」との協力関係は，施設の発足の頃は極めて重要なことと捉えられ

そのような運営がなされてきたように思う。しかし，そのような配慮や意識は時を経るに連れて次第に薄れ，錯体化学実験施設の全国の錯体化学者への求心力は低下しつつあると筆者は感じている。

４．この15年間，大学では，学部改革や大学院重点化など高等教育や研究の場としての改革が進み，これに伴う大学院先端設備費，研究基盤重点設備費，高度化推進特別経費等の予算措置がなされた。また，科研費の充実や新しい大型研究のための新しいさまざまな研究種目が誕生し，大学に所属する教官の研究環境は設備面では施設発足の頃と比べ大幅に改善されてきている。今では，多くの錯体化学者が routine 的に必要とする単結晶Ｘ線回折計，NMR，磁化率測定装置などは，多くの大学に設置済みである。このような状況の中で，共同利用施設としての錯体化学実験施設の在り方について十分な discussion がなされてきたであろうか？

５．歴代の施設長は，例えば流動部門の人事などについて多くの時間や労力を費やしてきた。その真摯な努力に深い敬意を表したい。錯体化学実験施設の専任教官の人事異動は極めて活発に行われている。これは人事選考が適切に行われ，活発な人事交流が可能な優秀な人材が選ばれている結果と評価したい。しかし，上記のような錯体化学実験施設の運営にとってきわめて重要なさまざまな問題や施設の教官の研究活動の在り方について，外部の錯体化学者を含めた場で十分な議論がなされてきたであろうか？　錯体化学実験施設には運営委員会なる組織があり，そのメンバーには何人かの外部の錯体化学者も参加している。上記のようなさまざまな問題を議論するとすれば，公式には，おそらくこの委員会がその適当な場なのであろう。この委員会でどのような議論がなされてきたかについては筆者は十分には承知していない。的外れかも知れないが，この委員会がもっと高度に適切に機能し，施設長を強力に support する役割を果たすべきであったと思われる。物質科学における金属錯体の重要性は近年ますます認識され，新しい物質の開拓研究の必要性が増大している。錯体化学の今後の研究の推進すべき方向，これと関連する専任教官の人事問題，研究会開催や課題研究の提案などについてもできればこの委員会で率直な議論が展開され，錯体化学実験施設の在り方，あるいはまた，錯体化学研究会との関係などについて提言をするような活発な役割を果たして欲しいと考える。そのためにはこの委員会の役割や開催頻度について，制度的な改革が必要であろう。

錯体化学実験施設は近い将来分子研の一研究系へ組織替えを行うことが決定されその手続きを開始する予定と聞いている。組織の形態が変わってもその運営には，外部の錯体化学研究者が関わるとのことである。組織の形態変更を含め歓迎すべきことと考える。「錯体化学研究系」が分子科学研究所の中心的な役割を果たす組織として，ますます発展することを期待してやまない。

委員Ｂ

分子研としての研究目標

設立された時点と分子研究の状況が著しくかわってきた。分子研が主に研究を展開している物理化学ではその対象がより複雑な物質（例えば，固体状態での複雑な電子移動や磁気相互作用，生体中の金属蛋白質での電子移動など）について行われるようになったと言えよう。同時に我が国の物理研究では「複雑系」のように化学や高分子化学の課題が「新しい物理」として研究されるようになってきた。また，生物では化学構造に立脚した「構造生物学」がトレンドとなり従来「生体高分子化学」の分野と思われていた領域が「新生物学」として広く研究されている。化学の新しい分野として有機金属化学が有機および無機化学の領域をつないで大きく発展したが，物理や生物の領域を取り込むものではなく，結果として化学の新しい領域は縮少しているとさえ感じられる。

現時点で，物理と化学の境界にある物質科学領域を見ると，世界中での高温超電導物質の研究から基礎的な電子ー格子相互作用が解明されたが，これらに光が関わった固体での電磁相互作用の研究が将来の光コンピュータの開発を

めざして進められている。ここでは新しい電磁機能性物質の化学合成が重要な課題である。新しい「ものづくり」は合成のアイディアと技術の基礎の上に築かれるものであり，たとえば農業での「つち作り」から行う必要がある。少数の天才だけではできない面が多い。一般に，このような研究は成果が直ちに出ないので基礎の確立した研究所や大学の研究グループのみが参加可能である。その点，分子科学研究所のような所は優れた基盤を持っているので，機能性の「ものづくり」には国内での拠点と思われる。このような物質として各種の遷移金属を中心にもつ「d-p 軌道共役系」が興味ある物性を示すと大いに期待されている。遷移金属化学の研究を行ってきた錯体化学実験施設はこの新しい「ものづくり」の場所としてこれまでの実績を生かしてゆくのが最適と考える。

有機化学と生物学との繋がりは最近更に緊密となり，20年前には成熟したと思われた「生理活性天然物の化学」は再び見方を換えながら注目されている。たとえば，我が国では薬学部においてこのような薬用天然物の化学合成が盛んに行われている。また，金属イオンを含んだ有機天然物は新しい分野として発展してきたが，金属側から見ると「複雑な錯体」なので生物無機化学という分野を生んでいる。ここでも複雑構造の大分子が次々と合成されている。

現代の化学研究では，測定機や計算機の大幅な進歩の結果，他の多くの分野と同様，計算機端末の前にすわりこんだ研究者ばかりとなり，化学の独特の研究法つまり，化学反応を用いて精密合成を行う化学者が減少している。これは化学が我が国において将来物理と生物に飲み込まれ弱小分野に落ちる兆しとも見られる。分子研として化学の先頭に立ち，将来の発展を約束された化学独自の研究が望まれる。

錯体化学実験施設について

この数年間，専任の教授と助教授を新任したところが相次いで大学へ昇任され，現在活動しているのは田中グループのみである。職員も学生も少ないので大きな新領域を作って他のグループを寄せつけない状態にするのは困難であろう。田中教授は従って金属としてルテニウム，配位子として共役系を持つピリジン系にしぼって研究を展開され，新しい酸素原子移動反応を発見しエネルギー問題に重要な炭酸ガスに応用し，エネルギー変換系の創設を提案されている。これは独創性が高く今後の発展が期待される研究である。

相関領域研究系について

この系は分子研創立時に，有機および無機領域に国立の新研究所を設けるイニシアチブを取る場所として設定された。その後，有機では九大に「有機化学基礎研究センター」，無機では上述の実験施設が設けられ，設立時の計画は一応成功している。この25年の間に有機金属のような大きな新しい領域が確定したので現在では有機無機と区別するのは時代遅れとなった。有機と無機が完全に混じり合った新しい概念の研究系または研究所が必要と思われる。

渡辺グループの研究は生物有機および生物無機化学の領域の他，有機金属も含んでいて非常に活発に行われている。高度に触媒活性の金属酵素の中心を組み換えDNA法で合成した金属蛋白の迅速X線解析によって詳しく調べて，「蛋白質の持つ化学機能を人工的に増強」しようという重要な目標に向かって研究が展開されている。また，有機金属の分野でも水溶性の新しいイリジウム錯体を合成し有機合成触媒作用を検討している。このように有機－無機と生化学が渾然一体となった研究体制をとっていることは，今後の化学研究の典型と見られ大いに評価される。

4-5-3　国外委員の評価

原文

Review and Evaluation of the Research Programs of Professors Yuzo Nishida, Koji Tanaka, and Yoshihito Watanabe, Institute for Molecular Science, Myodaiji, Okazaki 444, Japan

Reviewed by: Professor John Dawson, Department of Chemistry & Biochemistry, University of South Carolina, Columbia, SC

29208 USA

Date of Review: August 26-28, 1999

Professor Yuzo Nishida

Professor Nishida is a Professor in the Coordination Chemistry Laboratories at IMS in the area of Synthetic Coordination Chemistry. He is studying the redox chemistry of inorganic metal complexes and, in particular, has focused his attention on the mechanism of dioxygen activation by copper, heme iron, and non-heme iron metalloenzymes. These enzymes are able to directly functionalize saturated hydrocarbons, converting alkanes to alchohols, as well as unsaturated hydrocarbons, converting alkenes to epoxides. In some instances, these metalloenzymes are able to carry out a much more extensive range of oxygen insertion reactions with varied substrates. The detailed mechanism of how the dioxygen is activated for insertion into unactivated substrates has long been the focus of research efforts in numerous laboratories around the world. The metalloenzymes that carry out these reactions generally form a dioxygen adduct with the reduced form of the metal. With dinuclear non-heme iron systems such as methane mono-oxygenase, addition of dioxygen to the di-ferrous form of the enzyme would effectively generate a ferric-peroxide adduct. With heme iron systems such as cytochrome P450, the initial dioxygen adduct of the ferrous state is further reduced to again effectively generate a ferric-peroxide adduct. Similar considerations can be applied to copper hydroxylases such as dopamine beta-monooxygenase. Dr. Nishida has focused attention on the electrophilic nature of the metal peroxide intermediate and has proposed the provocative idea that the interaction of this intermediate with bound substrate is necessary to proceed to generate the high valent metal-oxo adduct that has generally been assumed to be the critical intermediate in oxygen atom transfer reactions. This idea challenges the more generally held view that the substrate does not play a role in cleavage of the metal-bound peroxide. In a recent review article in *Trends in Inorganic Chemistry* (**5**, pp. 89-103 (1998)), Dr. Nishida has summarized all of the evidence that supports his new viewpoint. As always, to understand the mechanism of any reaction, one must assemble the facts and see whether they support the particular mechanism. Dr. Nishida's stimulating ideas will now need to be tested by others to see if they provide a more consistent interpretation of the facts than the more commonly accepted proposals for the mechanism of dioxygen activation.

Professor Koji Tanaka

Professor Koji Tanaka is the Director of the Coordination Chemistry Laboratories at IMS in the area of Functional Coordination Chemistry. His research is focused on the organometallic chemistry of carbon dioxide. In particular, his laboratory is investigating the activation of carbon dioxide by metal complex catalysts. A related research effort involves the study of energy conversion from proton gradients to electricity by metal complexes. Dr. Tanaka is a leading researcher in these areas and has published extensively in the top journals. He is a frequent participant at international meetings on these topics. The development of catalysts for the conversion of carbon dioxide to reduced one carbon derivatives such as formic acid, formaldehyde, methanol and methane is an extremely challenging goal. A related and equally demanding aim is to couple two molecules of carbon dioxide to form oxalic acid and other two-carbon derivatives. Dr. Tanaka has been able to accomplish substantial portions of these objectives and he has clearly developed and improved our understanding of the principles that control the chemistry of carbon dioxide. This should enable his laboratory to generate even better catalysts for these reactions in the future. One of the particularly challenging aspects of this research is the design of metal complexes that not only bind carbon dioxide, but which also suppress the evolution of the carbon monoxide to enable multi-electron reduction of carbon dioxide to proceed to the more highly reduced one carbon products listed

above. In the process of studying the metal complex catalyzed reduction of carbon dioxide to reduced one-carbon products, Dr. Tanaka has discovered some extremely interesting examples where the metal-bound carbon dioxide can be coupled to form oxalic acid. The development of catalysts for the use of carbon dioxide as a convenient one-carbon precursor to multi-carbon containing products represents a significant advance in organometallic chemistry.

Professor Yoshihito Watanabe

Professor Watanabe is a Professor in the Department of Applied Molecular Science at IMS. His research is focused on the development of a better understanding of the mechanism of dioxygen activation by heme enzymes such as cytochrome P450. Related studies involve the activation of hydrogen peroxide by peroxidase enzymes. While the majority of his research over the years has involved studies of heme iron systems, he has recently turned his attention to the study of non-heme iron dioxygen activation catalysts. He is a leading researcher in these research areas and has published extensively in the top journals. He has frequently been invited to speak at major international conferences in the area of bioinorganic chemistry including the Ninth International Conference on Bio-Inorganic Chemistry (July 1999, Minneapolis, MN USA) and at the upcoming Eleventh International Conference on Cytochrome P450 (August 1999, Sendai, Japan). One of the remarkable features of heme enzymes is that they catalyze a widely diverse set of reactions including oxidation and oxygenation reactions as well as the dismutation of hydrogen peroxide despite the presence of a common heme iron prosthetic group at the center of each enzyme. It has been demonstrated that the heme environment plays a critical role in controlling the chemical reactions that each heme enzyme catalyzes. This has opened up the opportunity to change the heme environment using site-directed mutagenesis in order to change the chemistry carried out by one heme enzyme into that accomplished by another. Dr. Watanabe's research group has been at the forefront of this effort and they have succeeded in converting myoglobin, a heme protein that normally only binds dioxygen reversibly without carrying out any chemistry with the bound dioxygen, into a peroxidase enzyme that oxidizes substrates. This is but one example of the long list of important accomplishments from the Watanabe lab over the past several years that have led to significant improvements in our understanding of the mechanism of dioxygen and peroxide activation by heme enzymes and related systems.

訳文

西田雄三，田中晃二，渡辺芳人教授の研究に関する点検・評価

（ジョン・ドーソン，南カロナイナ大学化学・生化学科）

西田雄三教授は，分子科学研究所・配位化学実験施設錯体合成研究部門の教授として，錯体合成化学の分野で研究を行っている。金属錯体の酸化還元反応，特に，銅，ヘム鉄および非ヘム鉄を含む酵素による酸素分子の活性化機構が研究の中心となっている。こうした金属酵素は飽和炭化水素のアルコールへの変換やオレフィンのエポキシ化等を行い，場合によっては，多様な基質への酸素の挿入を行っている。分子状酸素の活性化機構は世界中で研究されている課題である。酵素中心の還元型金属イオンは酸素分子と付加体を形成し，２核非ヘム鉄中心を有するメタンオキシゲナーゼ等の場合には，鉄‐過酸化水素錯体を生成する。ヘム酵素であるシトクローム P450 は，２価状態にあるヘム鉄に酸素が付加し，引き続く一電子還元により鉄‐過酸化水素付加錯体が生成する。西田教授は，金属‐過酸化水素付加存の親電子的反応性に着目し，蛋白の活性中心に存在する基質と過酸付加付の相互作用により，真の酸化活性種と考えられているO=Fe中間体が生成するという考えを提出している。この考え方は一般に考えられている基質非依存型過酸の O-O 結合解裂機構に対する新たな提案であり，この提案を支持する証例を含めてまとめた論文が *Trends in*

Inorganic Chemistry **5**, 89-103 (1998) に掲載された。反応機構についての理解は，実験事実の積み重ねとそれを支持する機構の探索が必要である。西田教授の新規な提案は今後，多くの検証が必要となると考える。

田中晃二教授は錯体化学実験施設長として，錯体物性化学の分野で研究を行っている。研究の中心課題は，二酸化炭素の有機金属化学であり，二酸化炭素を金属錯体により活性化する反応を研究している。関連する課題として，プロトンの濃縮勾配により，金属錯体の反応エネルギーを電流へと変換する反応を研究している。この分野では田中教授は世界的な研究者であり，最高水準の論文誌に研究成果を発表している。またこの分野に関する国際学会にひんぱんに出席している。二酸化炭素をギ酸，メタノール及びメタン等へ還元的に変換する触媒の研究は非常にチャレンジングな課題である。また２分子の二酸化炭素の２量化によるオキザロ酢酸等の生成反応の研究も望まれる。こうした課題に対する田中教授の貢献は大きく，二酸化炭素の反応性制御の原理的な理解を深いものにしており，将来的には有効な触媒系の展開へとつながることが期待される。本研究の課題で重要な点は二酸化炭素を効率的に結合するのみならず，一酸化炭素の発生を抑え，多電子還元を行う金属触媒の設計である。一連の研究で，田中教授は金属‐二酸化炭素付加体がオキザロ酢酸を生成する非常に興味深い発見を行っている。二酸化炭素を多炭素化合物合成のC1源として利用する触媒の構築は，有機金属化学の発展にとって極めて重要である。

渡辺芳人教授は相関領域研究系の主幹教授であり，P450等のヘム酵素による酵素活性化の分子レベルでの解明を中心に研究を行っている。同様な反応としてペルオキシターゼ類による過酸化水素の活性化についても検討を行っている。近年の渡辺教授の研究の中心はヘム蛋白質であったが，最近は非ヘム系への展開も計っている。渡辺教授は当該分野の国際的リーダーの一人であり，高水準の学会誌に論文を発表しており，生物無機化学の主要な国際会議（第９回国際生物無機化学会議，ミネアポリス，1999年７月の第11回シトクローム P450 に関する国際会議，仙台，1999年８月）の招待講演者となっている。ヘム酵素の多様性，すなわち酸化および酸素添加，過酸化水素の分解がヘムという共通の補欠分子族により達成される点が興味を持たれ，活性中心周辺のアミノ酸の環境が機能制御に関与していることが示されている。このことから，部位特異的アミノ酸置換により，酵素機能の変換の可能性が出てきた。渡辺教授のグループはこうした研究の先頭に立っており，酸素の可逆的脱着をおこなう蛋白質であるミオグロビンを基質酸化を行うペルオキシダーゼへと変換することに成功している。これは渡辺教授のこれまでのヘム酵素や関連系による分子状酸素や過酸化水素の活性化機構に関する重要な研究成果の一端にすぎない。

4-6　極端紫外光科学研究系

国内評価委員会開催日：平成11年12月12日

委　員　　尾嶋　正治　（東大院工，教授）
　　佐藤　幸紀　（東北大科学計測研，教授）
　　難波　孝夫　（神戸大院自然科学，教授）
　　田中健一郎　（広大理，教授）
　　渡辺　　誠　（東北大科学計測研，教授）
　　宇理須恆雄　（分子研，教授）
　　小杉　信博　（分子研，教授）
オブザーバ　黒澤　　宏　（分子研，教授）
　　田原　太平　（分子研，助教授）
　　見附孝一郎　（分子研，助教授）
　　長岡　伸一　（分子研，助教授）
　　福井　一俊　（分子研，助教授）
　　鎌田　雅夫　（分子研，助教授）
　　繁政　英治　（分子研，助教授）

国外評価委員面接日：平成11年11月８日～９日

委　員　　Professor Ingolf Lindau (SSRL, Stanford University)

4-6-1　点検評価国内委員会の報告

(1) 極端紫外光科学研究活動の現状

UVSORは16年前に運転を開始し研究活動を展開して以来, 国内外の高い評価を得てきた。その活動は, 大別すると, ケミカルマシンと称されるごとく，設置時の主目的である分子科学研究への応用と，物理，生物，医学，光学の幅広いユーザの共同利用への応用に大別される。これまでの成果を振り返った時に気付く大きな特色は，一つは，分子科学という特定のフィールドに的を絞るとことにより，この分野での国際的リーダーシップを勝ち得ることに成功したことと，第二は，挿入光源や赤外光源を装備した高性能な装置かつ，小型で使いやすい装置であり，また，他の施設では許可されない，あるいはやりにくいような化学的実験もでき，放射光利用研究のすそ野を拡大するうえで，大きく貢献してきたことである。専任部門の最近の成果は，研究所内における系の存在感と放射光装置の必要性をアピールする柱となるもので，①内殻励起領域の高分解分光（小杉），②放射光による物質創製とナノ科学（宇理須），③放射光とレーザの同時照射分光（見附，田原）である。また，分子科学応用の研究について，気体分子の励起蛍光分光，しきい電子分光などは過去において分子科学をリードするうえで大きな貢献をした。有機固体，無機固体，固体表面の角度分解光電子分光，各種のイオン電子コインシデンス分光，赤外吸収分光，オージェフリー励起ダイナミックス，直入射領域での各種分光, 顕微光電子分光などの研究は, 主として界面分子科学流動研究部門およびUVSOR施設の教官や外部ユーザの方々の努力によるところが大きい。所内専用ビームラインによる分子科学研究は大きな特色である。これは，所内スタッフおよび，目的を同じくする外部研究者との協力研究によって研究がなされている。先に述べた，使いやすさの特色を最大限に生かせる結果，化学というミクロサイエンスの分野でユニークな新しい分野を開拓するうえで成功してきたと考えられる。ただし所内専用ビームラインの研究は，スタッフの人事異動にともなって，所外

研究者のテーマとなるため，所内，所外の区別は固定されたものではない。なお，所内スタッフの研究において，より高輝度の光源を必要とする部分については，他施設を利用して高度化を計っている。共同利用研究としての大きな成果は，人工衛星搭載用Ｘ線望遠鏡ミラーの評価，生物の軟Ｘ線顕微鏡撮影，各種フラーレンの構造解析，各種光学素子の評価，膜形成エッチング反応応用，などである。なお，UVSOR施設の光源に関する研究で特記すべきものとして，自由電子レーザの開発の研究がある。

(2) 現状の問題点など

(a) UVSOR光源自体の老朽化対策が必要である。また，より高輝度の光源を使う必要のある研究が増加している。

(b) 光源の低エミッタンス化で外部と競争しても意味がない，実験ステーション装置の高度化，ユニークなアイデアの発案などで勝負する方向が今後は重要であろう。

(c) 施設のみならず，研究系のスタッフの数も，一グループあたり，グループリーダを含めて1―2名と少なく，研究効率の観点から問題である。

(d) 分子科学での啓蒙期の役割は終わった，これからは，もっと多くの分子科学者が利用し，設置初期の目的である分子科学利用研究が，質量ともに活発に展開されることが望まれる。

(e) 分光器開発など，よりよい光源を提供する仕事は重要なので，良い評価を与えるべきである。放射光＋レーザも今までとは異なる光源を提供できることに注目したい。

(f) 流動部門について，現実に流動教官として来てみると非常に大変である。学生を連れてきて研究する費用が無い。もとの大学との併任ができると良い。

(g) サイトスペシフィックの研究については，より選択性をあげる工夫など新しい特徴を追求することが望まれる。

(3) 研究の将来展望

(a) 上記に掲げた外部ユーザの研究や所内専用ビームラインの研究を今後もさらに発展させることが望まれる。

(b) ほとんどの研究に共通して言えることは，高フラックス化，特にアンジュレータをふんだんに使えるようになることで，研究の質が飛躍的に良くなることが明白である。

(c) 近い将来，他施設において，第３世代光源がフル稼働の状況となることから，暫定的にも，これらの装置を借りて，飛躍の第一歩をふみだすことも重要と考えられる。

(d) 現在取り組んではいないが，将来重要となる可能性のあるテーマとしては，クラスターの軟Ｘ線光化学，軟Ｘ線－赤外領域の顕微分光，生体物質応用，などが考えられる。クラスター研究は，実験スペースを広く取れるようにすることが望まれる。また，クラスタービームのフラックスを上げる努力が必要である。

(e) 有機物のマルチカラー，あるいは二重共鳴の研究も面白い。

(4) 装置の将来計画 ── 極端紫外光科学研究系の見解 ──

系・施設の研究者での討論以外に，今回の点検評価を含めた国内外の所外の専門家による点検評価を受け，将来計画についても有益な助言を得て来た。これらの経緯をもとに，以下のように考えている。

(a) 現在世界最高水準にある，所内外のユーザの研究を維持しさらに発展させなければならない。しかし，UVSORはすでに建設後16年を経過し，近い将来装置の老朽化が顕在化することが明白ある。

(b) 現在分子科学研究分野において非常にユニークな分野を開拓し，且つ国際的視野で高い水準にあるのは，①装置が使いやすい，②所内（分子科学）専用ビームライン制度を有する，さらに，③所内の多様な分子科学研究者集団や，機構内の基礎生物学研究所，生理学研究所などの研究者との交流により新しい発想を得やすい，などの特色によるところが大きい。この長所を将来も発揮するために，機構内において，装置の高性能化の改造あるいは新装置の設

置を行う必要がある。

(c) 装置の高性能化や新装置の設計においては, 分子研の研究の特色を反映することに的をしぼり, この点においては, むこう20年間ほど十分な性能を保証するものでなくてはいけない。リングや分光器の性能を追求するだけでなく, マンパワーの確保や, 現在の特色である使いやすさの保持も高水準な研究を展開する上で無視できない重要な課題である。

(d) 設計については，上記の点と土地問題を配慮し，加速器の専門家のシュミレーションによって，第三世代に準じた高フラックス（アンジュレータが主），できるだけ小型，ユニークな時間構造，ユーザーフレンドリ，などのキーワードを考慮した，新しい加速器設計概念を掘り起こすことが望まれる。

(e) 装置の高性能化，あるいは新装置の設置の方針策定にあたっては，既存の装置の再使用可能部分の活用，これまでのビームラインおよび, 実験ステーションの莫大な投資と, 所内外の多数のユーザに蓄えられた知的資産を十分に活用し，コストミニマムを十分に配慮する必要がある。

(f) 現有装置でも500 mA運転が可能であるが， そのためには前置ミラーの耐熱性の向上や, 部分的な放射線遮蔽の向上が必要である。また前置ミラーなどをより平滑にし, 表面散乱を抑制しフラックスを向上させることも大いに意味がある。

4-6-2　国内委員の意見書

委員A

分子研UVSORは16年が経過したマシンであり, これまでに分子科学の発展に大きな貢献をしてきた。これは１つは分子科学にターゲットを絞った施設として運用するという戦略，もう１つは優れた施設研究者たちの努力によるものであろう。17年以上経過したPFとちょうど補完するような形で大きな成果を挙げて来たと思う。特に放射光－レーザ同時照射分光，内殻励起領域高分解能分光，放射光ナノ物質創製などで極めてユニークな成果が出ている点を高く評価したい。しかし，マシンの老朽化は否めず，またスタッフ，学生の数の少なさは驚きである。SPring8 の速い立ち上がり, PF高輝度化, 第３世代軟Ｘ線光源計画などの外部状況を考えると, 今後の戦略が今一明確でないと思われる。分子科学として何をやれば世界で Big になれるのか，21世紀の分子研のミッションは何か，基礎生物学研究所などとの共同研究をもっと全面に出して「分子生命科学研究所」的にターゲットを広げるのか，その中で極端紫外研究系の役割は何か，などの問いに答えを出さなければならない。単に高フラックス化，使いやすさの追求，クラスター研究の重点化などでは，対処出来ない大きな課題である。是非，21世紀の分子科学をリードして行って頂きたい。

委員B

・当該研究系の研究内容については, UVSOR施設の放射光を利用しているか否かに関わりなく, 全体的には, 分子科学として高度の質を維持した研究が行なわれているという印象を受けました。

・当該研究分野における分子研の特色を打出してゆく一つの方向は, 分子研内でも十分に意識されているようではありますが, やはり, 放射光とレーザーの組み合わせによる研究を発展させてゆく方向であろうかと思います。この点で, 見附グループ, 田原グループ, および鎌田グループの研究は新たな研究手法と新たな研究領域の開拓を目指して, 放射光光源として現在のUVSORの利点を生かし弱点を克服するために非常な工夫と努力を重ねておられることが伺われ，大いに評価いたします。今後のますますの発展に期待します。

・UVSORにフェムト秒レーザーを組み合わせて, 電荷移動, プロトン移動, 異性化反応などの基本的な化学変換過程

を位相制御する研究も分子研に適したテーマではないでしょうか。このような研究には,現に田原グループで推進されておりますように,必ずしも放射光を用いる必要は無いかも知れませんが,放射光とレーザーを組み合わせることによる特色が生かせれば新しい研究分野が開かれると思います。

・分子の多様性に着目する研究も分子研の特色を打出す健全な方向の一つであると思います。この点から，有機分子，クラスター，生体高分子，或いはそれらのイオンを対象に，放射光や放射光＋レーザーを利用する研究を追求する方向を深めることも考えらます。例えば，大きな分子のイオン（正イオン或いは負イオン）を蓄積するリングやトラップを放射光実験に導入することなども有り得ると思います。ヨーロッパではインシュリン等に電荷を帯びさせて蓄積するイオン蓄積リングが建設されています。

・分子の内殻励起によるサイト選択的な解離反応の研究は,今後は,サイト選択性が生じるメカニズムの解明を深めてゆく方向と，サイト選択性を応用する展開的な研究とに分かれてゆくと思います。UVSORを用いる場合には，分子の多様性に着目した展開的な研究が適していると思います。

・小さな分子の光解離では,サイト選択性のメカニズムを追求すると,結局は選択制に限界があることの理由を追求することになります。それよりは，高分子や，長岡グループが計画しているような表面吸着分子などを対象とする応用的な研究の方が面白そうです。長岡グループの今後の発展に期待します。

光源施設として分光器を含めたビームライン光学系の性能を向上させることは放射光施設にとって不断に必要な努力でありますから，このような努力には十分な評価を与えるべきかと思います。この点から，不等刻線平面回折格子分光器，SGMあるいはSGM，TRAIN，3mNIM等の導入を高く評価いたします。今後も，現在の電子蓄積リングの許す性能の限界まで光源としての性能を改良してゆく努力は重要であると思います。

委員C

平成11年12月12日に開催された極端紫外光科学研究系点検評価委員会で,研究活動の現状報告を受け,まず,スタッフの数が圧倒的に足らないことを痛感した。この状態で，それぞれが研究成果を上げており，これ以上を求めることは無理である。しかしながら，以下に記した意見を，今後の研究方針を定め，将来構想を構築する際の参考にしていただきたい。

人的資源の有効活用と組織化が急務

基礎光化学研究部門では，国内外の研究者と活発な共同研究を行っており素晴らしい成果をあげているが，分子研独自の研究とは言い難く，新たな展開を期待したい。一方，反応動力学部門では，物質創製とナノ科学に関する研究の展開を試みており，放射光科学が今後進むべき一つの方向として魅力的ではあるが，学問的位置づけを明確にする必要がある。

分子科学の新分野を発展させることが極端紫外光科学研究系の本務である以上，両研究部門には，これまで進めてきた研究とは視点の異なった研究が求められる。個々の研究者が独自の研究を進めるのは当然のことであるが，UVSORの目玉となる研究成果を生み出すためのプロジェクトを関係研究者間で話し合って決めてみてはどうか。PFやSPring-8とは違ってユーザーが比較的分野の共通した研究者集団であるので，不可能なことではない。そのためにも，極端紫外光科学研究系が中心となって，少ない人的資源の有効活用と組織化に取り組んでいただきたい。

放射光分子科学の将来について

放射光利用研究は，多くの研究分野においてまだ成熟期に達しているとは言い難い現状である。分子科学の分野においても未開拓な分野が多く残っており，放射光利用研究は無限の可能性を秘めている。分子科学研究所では，その

ような未開の分野を切り拓く研究に挑戦していただきたい。新しい研究分野を開拓することと既存分野でのピークを出すこととは本質的に異なる。勿論，研究には連続的な側面もあるが，既存分野でのピークを追求する研究が新分野の開拓につながらないことは歴史の教えるところである。分子研ならではの独自の研究を目指さない限り放射光分子科学の行方は見えてこない。

委員D

1. 極端紫外光科学研究系について。

分子科学研究所における研究活動の柱を担う部門として尚所内外から大いに期待されている部門であると思います。その期待の中で研究する研究者の使命は重大です。そもそも研究所設立は日本における分子科学を先導する中核的な役割を担う研究機関にするという使命にあったと思います。しかし，文部省を含む各省庁から比較的研究資金が出回るようになった昨今（サイエンスの基礎を支える部分へのてこ入れは尚充分ではないのは自明ですが）では大学における実験環境もかなり改善されて来たこともあって，分子科学研究所と競合する相手が幾つも出てきたように思います。そのような中で研究所が当初の使命をどの様に果たして来ているのか，回りから常に問われて続けています。系も例外ではありません。系の長所は研究所の極端紫外光施設（UVSOR）を専用して研究が展開出来るという点です。これは一般の大学に所属する研究者には望めない有利な地位で，この点を多いに利用することが系の研究活動の高さを内外にアピールする上で重要であると思われます。この点に関して云えば，レーザーとの同時分光，分子メスとしてのUVSORの利用，ナノ結晶創生への利用，自由電子レーザー開発，等で高い研究水準を維持していると評価出来ます。今後とも系における分子科学の情報を世界に向けて発信するにはUVSORをフルに利用した研究が展開出来る様に系の人事を含めた対応が今後一層研究所に要請される処です。報告を受けて気になった点は，各グループのスタッフ数に濃淡があり，研究者が一人のグループがあるという点です。これは一時的な現象とは思いますが常に気を配って頂きたい点です。

2. UVSORについて。

ケミカルマシン（Chemical Machine）のうたい文句で運転が開始されてから16年になりますが使い易さの特長を最大限に生かしつつ他のリングでは得られない特色ある研究が行なえるリングとして利用されていると思います。分子メスとしてのUVSOR利用・レーザーとの同時分光・有機物の研究・赤外放射光の利用等がこれに相当します。近い将来の課題として気が付いた点を列挙します。

(1) 機構化に伴ない，

UVSORはこれまでの分子科学研究所専用施設の色彩から機構全体の財産であると云う色彩に順次移行して行かざるを得ない様に思われます。21世紀は光と生命の時代ともいわれていますからUVSOR利用については同じ機構内の生物･生命系の研究所との連携を常に模索してゆくことがUVSORに新しい側面を付与するという点で重要であると思います。その為には，系側に研究面でのチャンネルを持ち得る人材を配置する事も（系内に新しい分野の創設も含めて）選択肢の一つです。

(2) 光源の老朽化の中で，

世界の放射光施設と競争してゆく為にはUVSORならではの研究の特色を更に前に出すべきです。それらはレーザーとのドッキング，有機物系での利用，極低エネルギー領域での利用，等が挙げられます。

(3) UVSORの当面の対策。

第３世代のリングと競争しても意味がないでしょう。むしろ使い易さを前面に出し，低電子エミッタンスを要求し

ない実験を更に追求する方が得策です。そのためには観測系の光学系や真空の改良も視野に入れた蓄積電流の増大化が望まれます。

(4) UVSORの将来像

先行するVUV・SXリング計画の先行きが見えない現状では（常に新しい計画を保持しているのは重要であるが）分子科学研究所の新しいリング計画の可能性が高いとは思われません。そこで，各予算規模に応じた改良策を具体的に練って予算要求し，UVSORの手当を実現してゆく事が重要であると思われます（30億以内で実現出来る計画，10億で出来る計画，５億で出来る手当，等の様に。これは(3)とも関連する点である）。

委員E

極端紫外光科学研究系は創設後８年間，気体分子および固体表面上の光化学や有機固体の光物性など分子科学的な研究を大いに推進してきた。これには，専任部門の活動のみならず，流動部門の寄与が大変大きいと考えられる。特に，流動部門は明確な課題を持ち，装置作りから，実験の遂行，データの解析，研究の完成まで短期間で精力的に行い，新風を吹き込んだことが意義深い。さらに，研究系が独自のビームラインを持っていることも重要な点である。しかし，協力研究などで所外（国外を含む）の研究者と共同で研究を発展させるような面はまだまだ弱いように見える。また，創設の目的であるUVSORの利用を通しての研究推進に関し，温度差がある様に見受けられる。このあたりは，今後さらに自己点検を行って頂く必要があろう。一方，加速器や施設利用のビームラインを受け持っている極端紫外光実験施設および外部ユーザーの研究活動も活発である。しかし，外部評価委員会においては，研究系と施設の協力関係について殆んど触れられなかったのは残念である。

UVSORは完成後16年を経過したことは事実であるが，適正な保守・改良を行えば原子核研究所のシンクロトロンを見る如く，加速器自体の寿命はそんなに短くはない（36年間）。これから光学系，検出器，測定装置などの高効率化に積極的に取り組めばもっと成果が上がるであろう。しかし，新奇なテーマに対し，それに対応するビームラインを建設できないことは否めない。この様な観点から現UVSORの upgrade や新しい光源も必要であろう。ねらうべき研究，人員，土地，予算，時期等を考えると色々な案があり得る。多くの人の討論により，それぞれの案をまず作り，それから各々の比較検討が必要であろう。もし，壮大な計画を立てるのであれば，分子科学者のさらなる利用，分子研の人員の大幅な振替，岡崎研究機構三研究所の協力および東海地区の大学，研究機関の協力が必須である。

今後の方向として，分子科学という分野を大きく捉え，分子科学の学問的な研究のみならず，実用に関する基礎的な研究も是非行って頂きたい。最後に具体的な研究課題として，現在私も開発に携わっているマイクロビームによる顕微分光を一つ挙げておきたい。

4-6-3　国外委員の評価

原文

EVALUATION OF THE DEPARTMENT OF VACUUM UV PHOTOSCIENCE

In a Letter dated July 27, 1999, Professor Koji Kaya, Director General of the Institute of Molecular Science, asked me to review the Department of Vacuum UV Photoscience. It was both an honour and a true pleasure for me to accept this invitation, in particular since I have followed closely the scientific work at UVSOR for the past 15 years.

On November 6, 1999, I was welcomed to Okazaki by Professors K. Kaya and T. Urisu. As part of the review process I had one-hour long interviews on Nov. 8-9 with nine professors: Prof. T. Urisu, Prof. N. Kosugi, Associate Prof. K. Mitsuke and Associate

Prof. T. Tahara from the Department of Vacuum UV Photoscience: Associate Prof. M. Kamada and Associate Prof. E. Shigemasa from UVSOR Facility; Prof. K. Kurosawa (from Miyazaki Univ.), Associate Prof. K. Fukui (from Fukui Univ.) and Associate Prof. S. Nagaoka (from Ehime Univ.) as visiting professors to the Department of Vacuum UV Photoscience on two-year terms. On Nov. 9 I also toured the UVSOR Facility and was informed about the capabilities of the machine and the different beamlines. Profesor T. Urisu had organized a most efficient schedule that made my visit very productive. This was my third visit to IMS and it was rewarding experience to take part of the continued great scientific progress.

My overall judgement is that the quality of science is excellent, as evidenced by an impressive publication record of articles in the most prestigious international journals in physics and chemistry. Several factors contribute to this and also point towards important future developments and are the base for my recommendations. The quality of the faculty and the junior scientists are high. The more senior faculty members are internationally well-recognized and world leading in their respective research fields. The younger faculty members and young scientists are doing impressive, independent work and are very promising for the future. The addition of top quality young scientists has been a healthy development for the Department and will continue to be an important factor for the future. The research profile of the Department has been strengthened during the last few years and it will be a challenge to keep up the dynamic developments. From the interviews I was particularly impressed that every faculty member had both well-defined and ambitious plans, and a clear vision, for the future research. I took also notice of the many collaborations, both national and international. The Department has always been known for its successful collaborative projects. These have been further strengthened over the years and have added to the high reputation of the Department. I consider these collaborative activities, also including the visiting professor programs, workshops and symposia, of critical importance for a continued dynamic development of the future research in the Department. In addition to research at UVSOR, ongoing and planned activities at other synchrotron radiation facilities will strengthen future programs and should be encouraged.

The research within the Department is well focussed on molecular science issues related both to the gas and condensed phases. There has been a continual effort to take part in the development of new fields, a fact which is very healthy to keep the department in the research frontier. It includes studies of; nanostructures, radiation stimulated processes on semiconductor surfaces, mechanisms for formation of negative-affinity surfaces, dynamics of ionization processes, excited states and molecular fragmentation, dynamics of superexcited states, different orbital contributions to resonances, and dynamics of photochemical/photophysical processes on the femtosecond timescale, to mention a few fields. In my opinion, the Department is doing research in the most active areas seen from an international point of view and will be a major contributor world-wide to the advancements of these fields in coming years.

The UVSOR has a central role for most of the research programs within the Department. Over the years there have been considerable investments in construction and upgrades of beamlines, insertion devices, monochromators and end-station equipment. The free-electron laser (FEL) is unique and belongs to a few storage-ring-based FELs worldwide with tunability down to very short wavelengths. The combination of conventional lasers with synchrotron radiation (SR) is the heart of many successful pump-probe experiments at UVSOR. Also the in situ combination of SR with other analysis and characterization techniques, *e.g.* infrared spectroscopy and tunneling microscopy, gives the Department unique research opportunities. Most noteworthy is also the exceedingly strong coupling between advanced computer model calculations and experiments, and the laboratory experiments using state-of-the-art femtosecond lasers.

From the discussion above my opinion should have become clear, namely that the Department has a very strong base to remain competitive in broad areas of molecular science in the future. But there are two issues which in my opinion should be given close

attention. My overall assessment is that there is a shortage of manpower in terms of both technicians and junior scientists. This problem is further enhanced by the fact the scientific and operational staff at UVSOR is very small (but extremely efficient, skilled and hard working !!). Therefore there is a danger that some research projects may become subcritical in terms of manpower to be scientifically effective. The other problematic area, in my opinion, is the age of the UVSOR storage ring. UVSOR is a second generation SR source and has by all standards been a great success and a very productive facility. In the long term future it will not be a competitive source with the third generation of sources in full operation. This will have serious consequences for the research programs in the Department. Therefore I strongly recommend that planning starts as soon as possible to upgrade or replace UVSOR. I am fully aware that initiatives have already been taken but a carefully planned, systematic and vigorous effort is necessary. I believe that a strong and compelling case can be made for an upgrade/replacement because of the following reasons. There are so heavy investments in beamlines, optics, end-station equipment and auxiliary instrumentation that the cost for an upgrade/replacement of the storage ring is just a small fraction of the existing and useful investments. The investment in human resources and expertise are also very substantial. Of course, all these investments are there because of the successful research programs based on UVSOR and the cental role UVSOR has for IMS. With the existing investments and well developed infrastructure for operating a SR facility IMS should be in an excellent position to argue that an upgrade/replacement of UVSOR is a very cost-effective way of proceeding with state-of-the-art research in Japan. In my opinion, research in molecular should continue to be the focus of the facility with an upgraded/replaced storage ring but careful consideration should be given to what extent the research can be broadened in certain areas and also involve an expanded research community outside IMS.

In summary, the Department of Vacuum UV Photoscience can look back at many extremely important and successful research accomplishments over the years and is well positioned to keep a leading role in molecular science world wide in the future. The future prospects and challenges are there to be met and should be a great stimulance for the Department. Personally I will follow the research in the Department with great interest and high expectations.

Stanford, November 22, 1999

Ingolf Lindau

Professor

訳文

極端紫外光科学研究系の点検評価

分子科学研究所長である茅幸二教授より1999年７月27日付けの手紙において，極端紫外光科学研究系の点検評価を行うことの依頼を受けた。この招聘を受けることは，この15年間UVSORの科学的成果を注目し続けてきた私にとって，大変名誉かつ真に嬉しいことであった。

1999年11月６日，茅教授と宇理須教授により岡崎に迎えていただいた。点検評価プロセスの一環として11月８日から９日にかけて，９名の教官のそれぞれ１時間にわたる面接を行った。９名の教官はそれぞれ，系からの宇理須教授，小杉教授，見附助教授，田原助教授，および，UVSOR施設からの，鎌田助教授，繁政助教授および，２年間の任期の流動研究部門の黒澤教授（宮崎大学から），福井助教授（福井大学から），長岡助教授（愛媛大学から）であった。11月９日にはUVSOR施設を見学し装置や異なったそれぞれのビームラインの性能について説明を受けた。宇理須教授は

私の訪問をもっとも効率的なものとなるよう計画してくださった。これは私にとって３回目の訪問で，継続する偉大な科学的進展に参画するというやりがいのある経験であった。

私の全般的判定は，非常に威信のある物理，化学分野の国際的学術雑誌に論文が掲載されていることに証されるごとく，科学的業績の質は非常にすぐれているというものである。いくつかの要因がこの判定に寄与しており，重要な将来の発展を指摘している，そして私の勧告の基本ともなっている。研究系および若手研究者の質は高い。年長の研究員は国際的に良く知られておりまた，それぞれの研究分野において国際的リーダーである。若い研究員および科学者は印象に残る独自な仕事をしており将来が嘱望される。トップクラスの若い科学者を系の職員として加えることは系の健全な発展であり，将来にわたって重要な要因であり続ける。系の研究状況は過去数年にわたって強化され続けてきたし，さらに躍動的な発展を維持し続けることは挑戦すべきことである。面接において特に感じたことは，すべての研究員が明瞭な野心に満ちた計画と明確な展望を将来の研究にたいして持っていることである。また，多くの国内，国外との共同研究を遂行しているこも注目に値する。系は多くのその成功裏に終わった共同研究プロジェクトで知られている。これらの点はここ数年にわたり強化され系の高い評価に加わってきた。これらの共同研究の活動は，流動研究員制度，ワークショップ，シンポジウムなども含め系の将来の研究の躍動的な発展にとって本質的に重要なことである。UVSORでの研究に加えて，他の放射光施設での進行中および計画中の研究活動は将来の系の計画を強化するものであり推奨すべきものである。

系内の研究はガス系および凝集系の両方に関連して，良く分子科学の問題に焦点が絞られている。新しい分野を開拓する絶え間ない努力がなされており，系が研究の最前線に保持し続けられているという健全さの事実である。いくつかの分野について言えば，ナノ構造の研究，イオン化過程の動的挙動，励起状態および分子の解離，超励起状態の動的挙動，共鳴への異なる電子状態軌道の寄与，光化学，物理過程のフェムト秒時間スケールでの動的挙動などの研究である。私の見解では，系は国際的観点から最も活発な研究分野において研究を展開していると言え，今後この分野における発展において，国際的レベルでの主たる寄与者となることであろう。

UVSORは系内のほとんど多くの研究プログラムにおいて中心的役割を担っている。何年にもわたって，ビームライン，挿入光源，分光器，およびエンドステーションの建設と高性能化にかなりの投資がなされてきた。自由電子レーザは個性的で非常に短波長まで波長が可変と言う意味で国際的にも数少ない蓄積リング挿入型のものである。放射光と通常のレーザを組み合わせる研究はUVSORで成功したポンプ－プローブ実験の代表的な成果と言える。また，SRと他の分析手法，例えば，赤外分光やトンネル電子顕微鏡などとの組み合わせは系にユニークな研究機会を作り出している。また，先端的な計算機のモデル計算と実験結果との結合や高度なフェムト秒レーザを用いた実験室での研究も最も特記するに値するものである。

以上のことより，私の意見は明瞭なごとく，この系は将来にわたって分子科学の広い分野にわたって競争力を保持できる強力な基盤をすでに有していると言える。しかし，私の意見として，注意を喚起したい二つの重要な問題がある。全体的な評価として，技術者と若い研究者層でのマンパワーが不足している。この問題はUVSOR施設の研究者や運転スタッフが非常に少ない事によってさらに深刻さが増幅されている（ただし，彼らは非常に能率的であり且つ熟練しており，良く働いている）。したがって，いくつかの研究プロジェクトがマンパワーの点で，有効な科学的成果を達成するに必要な規模を下回る危険性がある。私の見解として他の問題点はUVSOR 装置の老朽化である。UVSOR は第二世代の放射光光源で，平均的な水準から言えば，極めて非常な成功を収めてきており，非常に生産性の良い施設であった。長期的な将来展望において，しかし，フル稼働になった第三世代光源とは競争力をもたない。このことは，系の研究プログラムにおいて深刻な結果をもたらすであろう。したがって，私はUVSORをより高性能なものに改造す

るか，新しいものにおきかえる計画を出来るだけ早くスタートする必要があると勧告する。第一歩はすでに踏み出されていると思われるが，しかし，注意深く組織的にかつ精力的な努力が必要とされることを強く感じた。以下の理由で，高度化あるいは新装置導入について強い，説得力のある状況を作り出せると信じている。ビームライン，光学系，エンドステーション装置，および高性能な装置など，すでに相当な額の投資がしてあり，これらの現在有効に働いている投資にくらべ，光源装置の高度化あるいは新設のコストはほんの一部にしかすぎない。人的資源およびその専門家教育になされている投資もまた非常に，かつ本質的に重要である。もちろん，これらのすべての投資は，UVSORの優れた研究プログラムおよび，UVSORが分子研において中心的役割を担っていることにもとづいている。 これらの現存する投資と放射光装置を良好に動作させるに必要な基盤設備にもとづけば，分子研は，日本において最先端の研究を推進する上でUVSORの高度化あるいは新設は非常に経済的な道であると主張できる有利な状況にある。私の意見としては， 高度化あるいは新設においても，分子科学研究を施設の目標とし続けるべきであろう。しかし，所定の分野でどの程度まで研究を拡大できるか，および，分子研外部の広い研究共同体をどの程度まで取り込めるかについては注意深い検討が必要である。

総体的に，振り返って，極端紫外研究系は過去何年間にわたり多くの極めて重要な研究の成功を達成してきており，将来においても国際的な分子科学の分野において指導的役割を保ち続けるであろう。将来への展望や挑戦は適切なものであり，系への大きな刺激となっている。私としても，系の今後の研究を大きな興味と期待を持って見守りたい。

スタンフォード，11月22日，1999

インゴルフ　リンダウ

教授

５．将来計画及び運営方針

はじめに：

分子科学研究所が1975年に岡崎の地に設立されてから25年が経過した。四半世紀を経た現在，分子科学をめぐる状況は大きく変化している。設立以来，分子科学，つまり分子と分子の集合体の基礎科学は，我が国における科学・技術の発展において重要な一翼を担い，分子科学研究所は様々な研究成果によって新奇化学反応の開発と物質創製の科学の拠点として目覚ましい発展をとげ，世界的にも「IMS」の略称で広く認知された存在となっている。その結果，分子レベルでの科学は，生命科学や環境科学を含む多くの周辺分野に浸透し，幅広く普遍化した概念となっている。言い替えれば，分子科学研究所は「分子レベルの科学の拠点」としてさらなる新しい展開を行うべき大きな責任を担っていると考えられる。つまり，分子科学研究所は，21世紀の分子科学への新たなる道筋を開拓し構築する責任を持っており，「高等学術研究機関」として先導的研究を国の内外と協力して実施する共同利用研究機関と位置付けることが適当であると考える。そのためには，平成10年10月に行った分子研研究会「2010年の分子科学を語る」においても議論された様に，分子研にとって最も肝要な事として，既存の分野にとらわれずに優れた人材を，幅広く求め，新しい分野・学問を開拓して分子科学の国際的拠点としてさらなる飛躍を行うことが現在の分子科学研究所に求められている。世界は日進月歩で進歩しており，常にその先を見据えながら世界の科学・文化の指導的立場に立つ研究機関として，重い責任を果たすべく優れた研究環境と組織を再構築し未来を目指すことが必要である。

この度，岡崎国立共同研究機構は，平成12年度の概算要求に基づき「統合バイオサイエンスセンター」を中心とした機構共通研究施設をＥ地区に設立することが認められ，生命科学の分子レベルからの新しいパラダイムを岡崎に構築し，世界に発信することを目指す場を確立した。分子科学研究所は，この「統合バイオサイエンスセンター」の運営の責任を分担し，支援して行くと共に，それとの交流・協力を通じて，分子科学の柱の一つである「新奇物質創製」の新展開をＥ地区で実施する。Ｂ地区においては，Ｅ地区との連携をとり「物質創製」の一翼を担いつつ，「光分子科学」及び「化学反応ダイナミックス」に力点をおいて新しい研究を推進する。また，分子科学研究所電子計算機センターは，従来の分子科学計算は無論のことであるが，複雑系としての生命体科学計算をも視野に入れた機構共通の研究基盤施設として改組再編する。

上述した通りの理念と使命を胆に銘じ，21世紀にあるべき分子科学研究所の先導的立場を所内において議論し，２月に分子科学研究所将来計画委員会において以下の様な将来構想の大枠を纏めた。

物質分子科学の新展開：

分子科学研究所での新奇な物質創製の中核をなす分子物質開発研究センター，相関領域研究系，錯体化学実験施設は，Ｅ地区において統合バイオサイエンスセンターと協力しつつ，物質創製の新概念を提案する立場で新しい物質分子科学の展開を計る。そのために，これらのグループ間での密接な共同研究体制が必要不可欠であり，それに伴う諸設備の充実が望まれる。特に，新奇物質開発の要となる分子物質開発研究センターの新しい企画を強力に推進して行く必要がある。

光分子科学の新展開：

「光の世紀」と言われる21世紀の分子科学にとって，分子科学研究所が有するユニークな極端紫外光実験施設と分子制御レーザー開発研究センターは極めて重要な役割を演ずる。時間幅，エネルギー幅，強度，波長，位相等のあらゆ

る面で優れた可能性を持つレーザーを開発・活用して分子科学の新展開をもたらし，将来のフォトニクス科学等への貢献を行うことが求められる。また，分子科学固有の極端紫外光実験施設を持つ分子科学研究所は，「地球上の自然にない光」である極端紫外光をふんだんに利用し，光科学の新局面を開拓する可能性を秘めている。現在の施設を有効に高度化しつつ，世界に類を見ないユニークな「分子科学専用」のこの施設を活用しレーザーとの相補性を活かして，高励起状態の光分子科学，内殻電子励起による状態選択反応，新奇なナノ構造の生成等，基礎から応用までの分子科学の新しい分野を作り出す事は現在緊急に必要とされている。

レーザー分子科学に関しては，分子制御レーザー開発研究センターが要となって新規企画を強力に推進していく必要がある。一方，現有極端紫外光実験施設の「高度化計画」は，施設の老朽化を考えた時，分子科学研究所将来計画の中で最優先課題として推進して行く必要がある（5-2 参照）。

化学反応ダイナミックス研究の新展開：

分子科学研究所は，日常世界の有為転変の根源である化学反応を，その根本原理から解明し，新規反応を開発し，それを制御する方策を探索していく事の出来る施設と優れた研究者を備えた特徴ある研究機関である。化学反応の自在な制御は21世紀の重要な課題であり，光分子科学及び物質分子科学との有機的連携の下に，また分子制御レーザー開発研究センターとの密接な協力の下にこの夢の科学を推進して行かねばならない。

共同研究の活性化：

分子科学研究所は，共同利用研究機関として，国の内外の研究者との共同研究や交流などによって多大な成果を挙げている。インターネットを通して研究情報を瞬時に交換している現在において，共同研究に国という垣根はあってはならない。あらゆる国の研究者との交流と共同研究が自由に行える拠点として分子科学研究所を位置付けうるかという事は，共同利用研究機関としての分子科学研究所の今後を決定する重要課題である。我々は「国際共同研究拠点」としての分子科学研究所を強く指向する。21世紀の世界において，アジアでの科学技術の発展はグローバルな視点からも必要不可欠なものである。わが国は欧米との接点を持ち，アジアの一員としての立場から，アジアの科学技術の発展に深く関り，それへの協力と支援を行うことが求められている。

これらの視点から，分子科学研究所は多国間に跨る垣根のない交流と協力を行う拠点となることを提案するものである（5-4 参照）。

5-1　電子計算機センター　現状と将来構想

5-1-1　過去と現在

分子科学研究所・電子計算機センターは1978年に設立され，今日に至っている。2000年４月より，岡崎国立共同研究機構・計算科学研究センターに改組される。電子計算機センターは日本全国の分子科学研究者に大規模計算を実行する環境を提供する計算機センターとして設立され，22年を経た今日においても所内外の分子科学研究の基盤施設としての重要性は変わらない。実際，「分子研リポート 94」に報告されている通り，外部評価委員，運営委員，所内外の利用者の多くは，本センターが分子科学理論計算分野へ貢献してきた歴史的経緯を高く評価しており，当初の目標を高い水準で達成できていることを認めている。

この22年間にセンターの計算機の性能・記憶容量は大幅に増強され，インターネットの普及により利用形態も大きく様変わりしている。図１はセンターに導入された計算機のCPU能力（理論ピーク性能）を年度別に示したグラフである。分子科学計算に必要な計算処理の需要は年々増加の一途をたどっている。1995年以降，従来からの計算機借料を汎用計算機借料とスーパーコンピュータ借料に分割した。この分割によって，より性能の高い新型機種を導入できるチャンスと，計算機アーキテクチュアの多様化に迅速に適応できる計算機構成となった。2000年３月末から稼動を開始するスーパーコンピュータ（富士通VPP5000とSGI Origin2800），そして汎用高速演算システム（日本電気製SX-5とIBM製SP2）の総合性能は，1979年１月に初めて導入された日立製作所製M-180（２台）の実に13500倍に至っている。また図２に示すように，性能の大幅な増強に加えて，記憶容量は主記憶メモリで約70000倍，ディスク容量で約1300倍に増加している。この間，計算機アーキテクチュアも，単一CPUのスカラ型からベクトル型へ，その後，複数CPUを有するスカラ及びベクトル並列型の混成システムとなった。また複数CPUにおける主記憶メモリへのアクセス機構も分散型，共有型，分散共有

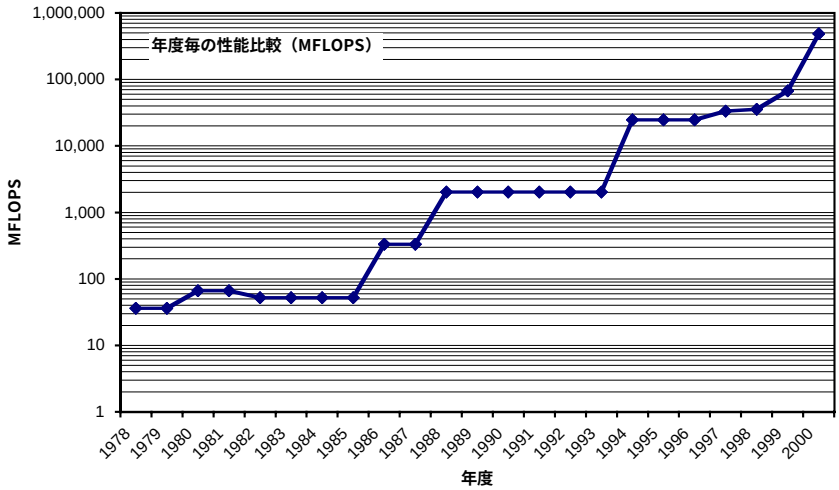


図１　電子計算機センターにおける CPU 能力の増強

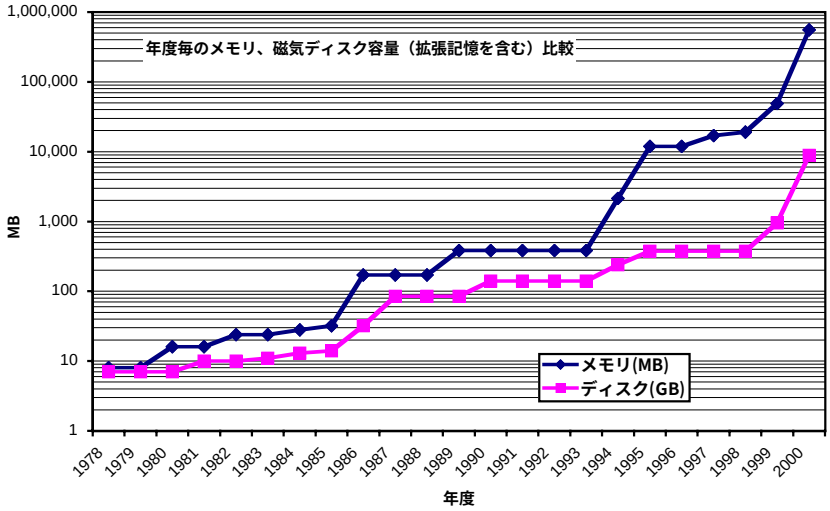


図２　電子計算機センターにおける記憶容量の増強

型等へと高度化及び複雑化している。

分子科学計算の計算機利用分野においても多様化が進んだ。設立以来，初めてベクトル型スーパーコンピュータが導入された1986年以前までは，全CPU資源の60～70%程度が電子状態計算分野に利用されてきた。1986年，日立製作所製 S-810 ベクトル型計算機の導入に伴い，分子動力学，量子反応動力学などの動力学分野での計算機利用が増え，その後ベクトル型計算機としては，同 S-820，日本電気製 SX-3，SX-5 へと更新され，今日においてもこの傾向は続いている。今後の計算機利用においては，ベクトル並列計算方式や分散共有メモリ機能を最大限に活用できるような，新たなソフトウエアが開発され，例えば電子状態計算と動力学計算を融合したアルゴリズム等，媒質との相互作用をも精密に取りこんだ電子構造計算や生体高分子などへの新分野での応用が期待される。

現在の計算機システムは，スーパーコンピュータ NEC SX-3（3CPU），並列計算機 IBM 製 SP2（48CPU）が稼動しており，昨年度の汎用高速演算システムの更新により日本電気製 HSP（2CPU）が同 SX-5（4CPU, 32GB）に更新された。また CPU 能力を増強するために施設運営費によって日本電気製 HPC（2CPU），日立製作所製 SR2201（16CPU）が導入されている。前述の通り，まもなく SX-3 は富士通 VPP5000（30CPU）と SGI Origin2800（256CPU）から成るシステムに更新される。過去６年間に導入され利用されてきた計算機が，実際にジョブ処理のために稼動してきた時間を年度毎の1CPU当たりの月平均ジョブ処理時間として図３に示した。本センターでは，年間を通じて定期保守及び障害対応時間以外１日24時間体制の運用を行っており，１ヵ月の通電時間は約700時間であることから500時間（稼働率70%）を越える運用は，利用者から見た場合には，待ちジョブが並ぶ高負荷状態である。48CPUから構成されるSP2は約半数のCPUが並列ジョブクラスに割り当てられているため1CPU当たりで平均すると，他の逐次処理を主体としたベクトル計算機に比べ，ジョブ処理時間は高くはない。

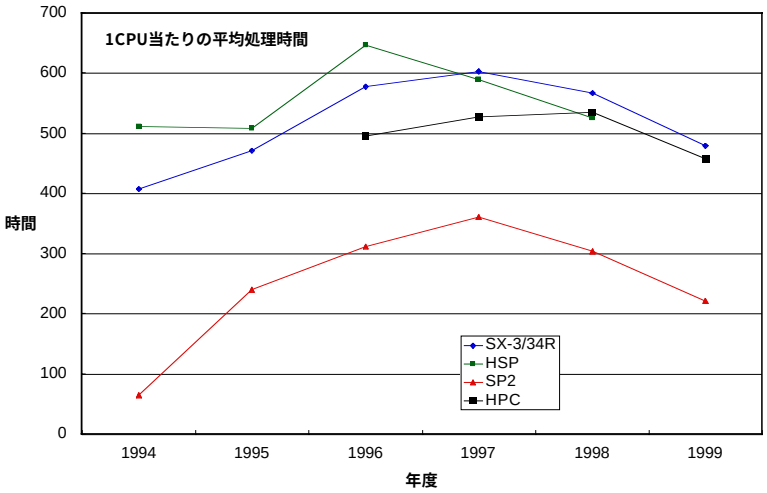


図３　過去６年間のCPU利用状況

それぞれの計算機は導入以降，徐々に利用率が増加し２・３年後にピークを迎えている。SX-3，HSP については利用率が80%以上にも達し飽和状態を経験している。導入当初は個々の計算機に適したソフトウェアへの移植作業を行うなどジョブ処理以外での利用も含まれ，ソフトウェアの完成度が高まり，利用者が新しい計算機に慣れるに従い，より大規模な計算処理を要求することがグラフから覗える。逐次処理コードからの並列化が比較的困難な分散メモリ型計算機（SP2）では，ソフトウエアの移植（並列化）が行われたとみられる時期（1997年度）での利用率の上昇は著しい。導入から２・３年後に利用のピークに達した計算機は，さらに大規模な計算処理を多数要求されるが，計算機資源に限りがあるため常時待ちジョブが並ぶ状態が長期にわたると利用率は徐々に低下してゆく。スーパーコンピュータに比べてワークステーション等の小型計算機の開発期間が著しく短いため，最新鋭の計算機が利用者の研究室に導入されることも，グラフが右肩下がりとなる要因の一つと考えられる。従ってセンターでは，利用のピークを迎えた時期から２・３年以内に次期の更新によるCPU能力の増強を行い，研究室では実行が困難な（または不可能な）計算処理の要求に迅速に対応してゆくことが必要である。

1997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，1999年１月に機種を更新することを断念し，スーパーコンピュータの更新を１年延期することとした。これを補うべく汎用システムの機種更新を１年早め, 1999年３月には最新鋭のベクトル並列計算機SX-5が導入された。このように，汎用高速演算システムとスーパコンピュータシステムは，それぞれ中規模ベクトル演算と大規模スカラ並列演算及びベクトル並列演算のように相補的なシステム構成としての位置付だけでなく，計算機の更新時期を柔軟に調整する観点からも２システムから成る計算機構成は重要である。

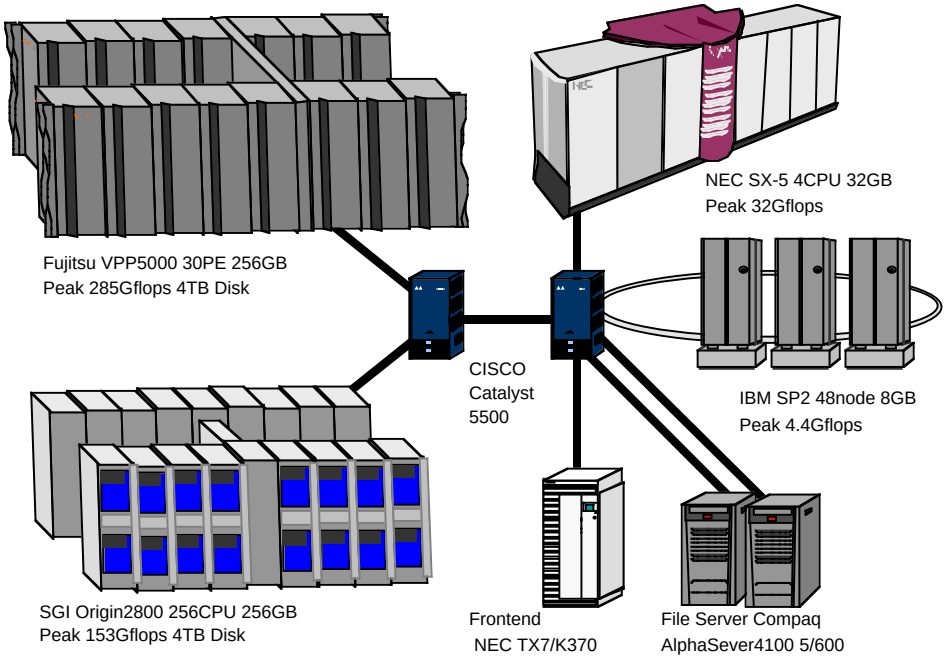


図4　2000年４月以降の計算機構成

2000年４月以降の計算機構成を図４に示す。今回導入が決まったスーパーコンピュータシステムを図の左側に，昨年度に更新を終えた汎用高速演算システムを右側に示す。新スーパーコンピュータシステムは，富士通製 VPP5000 と SGI 製 Origin2800 から構成される。VPP5000 は1CPU当たりの最高演算性能が 9.5 Gflops のベクトル演算装置 30 台から構成され，各CPUに8～16GBの主記憶装置を持つベクトル並列計算機である。一方，SGI Origin2800 は1CPU当たりの最高演算性能が 0.59 Gflops のスカラ演算装置256CPUから構成され，CPU当たり1GBの主記憶をそれぞれのCPUから共有メモリとしてアクセスが可能な分散共有方式の超並列計算機である。VPP5000では高速なベクトル演算能力を活かした大型ジョブの逐次演算処理はもちろん，例えば８台以上のベクトル演算装置を使った大規模なベクトル並列演算が可能となる。Origin2800 は Non Uniform Memory Access （NUMA）方式と呼ばれる論理的な共有メモリ機構を有する。NUMAは主記憶装置が各CPUに分散して配置されているためCPUから主記憶へのアクセス速度が非等価ではあるが，利用者プログラムから大容量のメモリを容易に利用することが出来るため，大規模な並列ジョブの実行が可能となる。昨年度，導入された SX-5 は1CPU当たり 8Gflops の最高演算能力を持つ共有メモリ型ベクトル計算機であり，SP2 は分散メモリ型スカラ並列計算機である。これらの計算機の特徴を活かしつつ，利用者ジョブの効率的な実行環境を構築することがこれからの課題である。

5-1-2　岡崎共同研究機構･計算科学研究センターと分子科学研究所・計算機室

2000年４月には，分子科学研究所電子計算機センターは岡崎国立共同研究機構・計算科学研究センターに改組転換される予定である。スタッフは，教授１，助教授１，助手２から構成されることになっている。しかし，定員増があったわけではなく，分子研から助教授１と助手１が，基礎生物学研究所（基生研）と生理学研究所（生理研）から各助手１の定員が計算科学研究センターに振り替えられることになっている。

改組以前（現在）の岡崎機構内で電子計算機・情報ネットワーク関連のスタッフとしては，分子科学研究所電子計算機センターには，理論系教授が兼任しているセンター長，助教授１，助手２，技官５（うち一人は所内情報ネットワーク専任）がおり，また基生研には，培養育成研究施設・電子計算機室に助手１，生理研には，脳機能計測センター・生体情報処理室に助手１がいる。さらに基生研と生理研には計算機･ネットワーク関連の仕事をしている技官がそれぞれ若干名いる。これに加えて数年前より岡崎機構全体の情報ネットワークの企画・管理・運営などを総括する助手が１名採用されて，岡崎機構「情報ネットワーク管理室」に配属されている（組織上はこの助手の所属は分子研計算機センターに属している）。

４月の改組転換以降も，これまで分子科学研究所電子計算機センターが共同利用研究機関の業務としてきた利用者サービスには変更はない。現行の分子科学研究所電子計算機センター規則には,「第１条　岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター（以下「センター」という）は，センターの大型電子計算機システムを分子科学の大型計算等のために分子科学研究所内外の研究者の利用に供するとともに，これに必要な研究開発を行い，かつ，岡崎国立共同研究機構に置かれる研究所の研究に関する計算を処理することを目的とする。」となっている。すなわち，これまでも基生研・生理研の研究に関連する計算を処理することにはなっている。そのために，運営委員には各研究所から教授あるいは助教授が参加している。2000年度の計算機利用申請は，従来通りこの３月に開かれる「運営委員会」で審議されるが，今後，改組転換に伴い新たな申請を募集する場合は，計算科学研究センター運営委員会で新たに議論する必要があろう。

分子研の電子計算機センターでは，助手１と技官５が「岡機構化」されないが，彼らの働きなしには新計算科学研究センターは全く動きが取れない。したがって，分子研内の措置として「計算機室」をあらたに設置して，この計算機室と計算科学研究センターとの密接な共同作業で，新研究センターを運営していく必要がある。しかしながら，運営諸経費等，日常業務の上ですぐさま問題になることが生じよう。また，従来，分子研所内利用者が負担していた使用料の取り扱いも問題になろう。

計算科学研究センターへの改組は，統合バイオセンターが３研究所の共同事業として岡崎機構に作られることに伴って進められることになった。他に生理学研究所・動物実験施設が動物実験研究センターに，基礎生物学研究所・アイソトープ実験施設がアイソトープ実験センターに「岡機構化」される。MIT press は，新しく「*Computational Molecular Biology Series*」を発刊するにあたり“Recent developments in Molecular Biology are not evolutionary but revolutionary. Computer Science, Statistics and Mathematics are the driving forces transforming molecular biology from an informational science to a computational science. Computational Molecular Biology is a new discipline, bringing together computational, experimental, and technological methods, that is energizing and dramatically accelerating the discovery of new technologies and tools for molecular biology.” と述べている。「分子生物学を情報科学から計算科学へ転換する」というのは少々言い過ぎとしても，生物学における計算機利用が情報科学的側面からより広い計算科学的利用へと発展しつつあることは事実である。

岡崎国立共同研究機構･計算科学研究センターは，計算分子科学を中心に据えて，計算生物科学をも包含し，世界的に特異な展開を実現しなければならない。そのためには，もちろん優れた研究者の結集が第一の条件であり，同時に，さら

にいっそう高性能な計算機システムの導入も不可欠である。また，国際協力の推進が新センターの発展のために特に重要である。

ネットワーク管理室との関係

岡崎機構・「情報ネットワーク管理室」は引き続き，岡崎機構内の情報ネットワークの維持・管理・企画に責任を持たなければならない。この「管理室」を通じて，数年間３研究所と管理局のネットワーク関係スタッフは共同作業を積み重ねてきた。この作業の中で，各研究所・管理局で責任を持つ部分と，岡崎機構「管理室」が責任を持つ部分とが整理されてきた。各研究所・管理局内の情報ネットワークがそれぞれの責任で運営されている現状の体制を維持し続けなければならない。もちろん，計算科学研究センターは情報ネットワーク管理室と緊密な連携を持ち続けなければならない。

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。

5-1-3　将来構想検討会議

2000年１月25日に「分子科学研究所電子計算機センター将来構想検討会議」を開催した。所外からは，相田美砂子（広島大）教授，大峰巌（名古屋大）教授，片岡洋右（法政大）教授，柏木浩（九州工大）教授，斎藤晋（東工大）教授，斎藤稔（弘前大）教授，榊茂好（熊本大）教授，橋本健朗（都立大）助教授，中島徹（東大）助手，中野雅由（大阪大）助手，中村恒夫（京大）大学院生，三浦伸一（東工大）助手，山西正人（東大）大学院生の13名が参加した。研究所内からは茅所長を始め，平田文男教授，中村宏樹教授，小杉信博教授，岡本祐幸助教授，谷村吉隆助教授，神坂英幸(総研大)大学院生，西川武志博士研究員および，電子計算機センターの岩田末廣センター長，青柳睦助教授，南部伸孝助手，高見利也助手と技術スタッフ（西本，水谷，南野，手島）が討論に参加した。４時間以上に渉って様々な問題が議論された。その中で主に議論された問題点を以下に整理する。

a)　電子計算機センターはどの様な利用者への計算機サービスに力点をおくべきか

センターの設立当初から原子分子の電子構造の理論計算分野を中心に，センターでなければ実行が困難な計算機の利用が盛んに行われ，国内で唯一の分子科学計算センターとしての位置付を確立した。近年では，計算分野も拡大さ

れ，また研究室に比較的安価で高性能のワークステーションが導入され，センターの利用のされ方及びジョブの内容にも変化がみられる。そこで，今後電子計算機センターはどの様な利用者への計算機サービスに力点を置いて運用を行うべきか，について委員の方々に議論して頂いた。

- 設立当初，運用が上手くいっていたのは，利用目的がかなり限定されており，ユーザもその利用分野の方が大多数であったからであろう。現在は利用形態，利用分野ともに非常に複雑に，広範になっている。全部をサポートしようとするのは無理ではないか。この様な討論会を数回開いて，方向性を明確に決定して行くのはどうか。
- 大学の大型計算機センターでは，以前は課金係数が高いこと，計算機資源の制限（ディスク，メモリ制限）もあり，大規模ジョブの実行が困難であった。現在では課金も安くなってきたので大型ユーザが研究費を出して大型計算機センターを使う傾向が見られる。
- ユーザがどういう計算機の使い方をしているのかを把握しないと，環境整備はできない。外部ユーザがどの程度の環境を持っているかも把握する必要がある。それをふまえて，棲み分け等を考える必要がある。
- 安いマシンの性能が急速に上がっている。コストパフォーマンスで研究室の計算機環境と比較したらセンターの存在意義は低下してしまうのではないか。最初の頃のセンターでは新しい方法論を開発していた。現在は計算機アーキテクチュアや，ソフトウェアが複雑化し，また応用プログラムも肥大化しているので，本格的な開発は難しいが，センターは新しい方法論の確立をめざす場所でもあって欲しい。
- センターは利用目的と規模において３種類のユーザを持っている。１つは理論研究分野のトップレベルの研究を行っている（大規模計算も行う）研究グループ。１つはある程度のワークステーションを持っている理論研究グループ。もう１つは大規模な計算を行う実験のグループ。それぞれ無視できないのではないか。
- 所内（理論研究系）が使いやすい計算環境をめざすのも１つの方向。
- 計算機が１台あれば研究が遂行できるグループは，各大学の大型計算機センターで吸収できるのではないだろうか。昔ほど計算環境が無いという緊迫感は無い。
- 計算機運用の面で特徴がなければ，大規模計算ユーザはセンターから離れていく。独自性，方向性を明確に出さないとユーザがついてこなくなるので，計算機更新時の借料の増額等，施設設備の拡充も困難となる。
- 議論の観点が，古い分子科学ユーザに特化しすぎているようだ。常に新しいユーザ，新しい分野のことも考えることが必要である。特定分野のために計算機資源を用意するだけでなく分野の拡大も検討する必要があるのではないか。
- 新規利用者や比較的小規模な研究グループと大規模計算グループのどちらかに決めずに，両方の計算機利用環境を考慮した運用が必要。リプレース直後のリソースが余っている時期だからこそ，大規模計算向けの大型プロジェクトに計算資源を利用する，という試みをしても良い。ただしスケジュールが難しい。

b)　新システムをどのように運用するか

４月より新スーパーコンピュータが運用を開始するに先立ち，VPP5000(VPP)30ノードとSGI Origin2800 256 CPUを

どのように運用するか，並列ジョブのジョブクラス等について議論した。

- 並列計算ジョブに利用できるプロセッサ数は多い方が良い。VPPなら８プロセッサ以上。将来はもっと多数の並列が必要であろう。多数プロセッサによる効率的な応用ソフトウェアの開発には，それだけの環境が必要。センターとしては多数の環境を用意していただけるとありがたい。
- VPPならば16以上，SGIならば64以上のクラスを作っていただきたい。
- 名古屋大学大型計算機センターでは32CPU及び16CPUの並列ジョブが常に走っている。大規模計算利用者にはメモリ，ディスクが足りない。ユーザ持ち込みのディスクを設置できるようなフレキシブルな運営が必要。
- 計算資源を細切れにするのは，大規模計算を行う環境として適さない。VPPを８プロセッサ程度で分割運用するのでは意味がない。
- 京大では40PEまで普通に使える。SGIも多数を一度に使えて初めて意味がある。

またセンター側から,「少数の研究グループに最大リソースを提供する様な運用をしてもよいかどうかを判断しかねている。思い切った運用についてどう思うか？」との問いかけに対し以下の意見を頂いた。

- ４月以降の計算機リソースは確実に増加する。３月の運営委員会時点での割り振りでリソースが多少余るのではないだろうか。その余剰分で思い切った運用するのは可能。運用当初，テスト的にやるには好機である。
- 京大でVPPを使っているが，ベクトルの効かないものはワークステーションかまたはパソコン並の性能である。大きなメモリを使いたいだけならば，VPPを使わせるよりもパソコンクラスタを用意すべき。
- 土日が大規模計算のみに占有されるようなのはきつい。月に１度くらい試行されるのならば問題ないのでは。年に４，５回が限度ではないか。
- できるだけ大きく使いたい。SGIならば128までは並列で使えるようにしてもらいたい。VPPも並列で大きくとれるとうれしい。常に監視して適切なルールを適応して運用してほしい。
- 少数の研究グループに最大リソースを提供する様な運用を行う場合は，審査の仕方，審査委員の選定も２重化していく必要がある。従来の審査方法とは違った方法が必要である。

c) バイオサイエンス分野の研究課題について

2000年４月には，分子科学研究所・電子計算機センターは岡崎共同研究機構・計算科学研究センターに改組される予定である。また機構の共通センターとして統合バイオサイエンスセンターが設置される予定であり，バイオサイエンス分野の計算機利用について議論した。

- 分子研がバイオサイエンス含め生体系などの複雑系に進出していくのは基本的に良いことだと思う。機構化によって，分子研が主導を担う形でバイオ分野での計算機利用が促進されることが理想だと思っている。当面の移行にあたっては，センターのリソース不足等，危惧すべき点は少ないと思う。
- バイオロジの分野でもゲノムという情報処理的な用途だけでなく，次のレベルに発展しようとしてきている様だ。現時点のリソースでは，そこまでは難しいので，当面は分子科学分野に限った利用に限定せざるを得ない。近い将来，次のステップではバイオ関連の計算機利用を念頭においたシステムに変わっていくことになるだろう。

・ 分子科学はこのままではいけない。分子科学がどういう分野に成長していくかが重要で，バイオ分野に成長していくことは重要である。それに連れて，計算機利用分野も変わってゆく。
・ 生物系であれ，生体系であれ，生命系であれ蛋白質１つを扱っている限りは生命を扱っているとは思えない，と言うのは言い過ぎであろうか。
・「生体分野の信頼のおける計算方法を開発する」ことを目標にしてはいかがか？今のバイオロジーの研究者の利用しているソフトウェアをセンターに準備してサービスを行うだけでは研究開発とは言えない。
・ ゲノム解析ではマルチプルアライメントでする人，構造予測する人，NMRの予測をする人などがいて，情報処理を含め色々な計算機利用を行っているようだ。このような情報処理的な利用として，バイオ関係のサービスを始めると，単にサービスをするだけのセンターになるのではないか？

d) 新しい組織及び，国際化について議論した。

・ 電子計算機センターにソフトウェア開発部門を作ったらどうだろうか。アメリカだと，センターには10人くらいのドクターがいてソフトウェア開発をやっている。そういう環境でなければ応用ソフトウェアが生まれてこない。オブジェクト指向のプログラミングは並列化に適している。そういうものが普及しないのはセンター内に開発部門が無いからでは。
・ 大学のセンターには人は結構いるけど目標が定まらない。センターが目標を掲げることが必要。

現在のセンターの運用方針では，外国人でも国内の研究グループに所属していれば利用できるが，国際研究集会などで，外国人主導の利用の要請がある。すなわち，国内に研究グループを持たないが，インターネットを通じて国外からセンターの計算機資源を利用するといった要請である。この点について委員から以下の意見を頂いた。

・ 現在の計算リソースでは無理だが，将来的には外国人の客員部門なども作ってはどうか。計算機センターは計算機のおもり役ではなく，サイエンスの牽引役として進展すべきである。
・ 方法論の国際シンポジウムを開く，というのも国際化の選択肢にあげられると思う。

今回の議論を参考にして，３月の電子計算機センター運営委員会でも議論を重ね，４月からの運用を考えていく必要があろう。今後もこのような会議を開いて，広い世代の研究者の意見を採り入れ，センターの方向性を考える機会を増やし運用に反映させていかなければならない。

5-2　極端紫外光実験施設の現状と将来計画

極端紫外光実験施設(UVSOR)の組織が昭和57年度認められ翌年に世界で唯一の化学専用のシンクロトロン放射光実験施設を設置し，共同利用実験を開始した。共同利用10年を経た平成６年度より将来計画について検討を開始した。その議論の内容は「分子研リポート」に公表してきたが，将来計画委員会において全体の将来計画を，またその下部組織である研究分野検討小委員会では，（1）観測系の将来計画と（2）光源系の将来計画に分けて議論をした。

平成７年度にこれらの議論を中間報告として以下の「極端紫外光実験施設の４つの将来計画」として取りまとめ，10回にわたる将来計画委員会において承認されている。

UVSORの４つの将来計画

（1）現施設（光源，分光器，測定装置）の高度化による世界的研究成果の達成

（2）レーザー，自由電子レーザーを併用した実験技術の開発と新しい放射光分子科学の展開

（3）第３世代高輝度軟Ｘ線光源（分子研外）の利用した軟Ｘ線分光研究の遂行

（4）現UVSOR後継機として次世代極端紫外光源の建設と新研究分野の開拓

その後，具体的施策を検討してきたが，「分子研リポート '96」にUVSORの将来計画 ── 中間報告その２ ── を公表して以来，将来計画に関しては進展がなく，UVSOR施設では人手難，予算難に苦しむ事態となっている。ただし，所内，機構内で見るとUVSOR施設の将来に影響するいろいろな動きがあった。例えば，将来計画（2）としてUVSOR施設に新しい研究分野「レーザー・放射光多光子実験」を掲げてそれを行う研究グループを置く計画があったが，結局，分子制御レーザー開発研究センター創設に集中することになり，その結果，放射光同期レーザー開発研究部とそのための予算が平成９年度に認められるところとなった（「分子研リポート '96」参照)。また，平成12年度からは機構に直接，所属する統合バイオサイエンスセンターがＥ地区に発足し，岡崎機構の３研究所が共通の場所で共同研究するチャンスが与えられる予定になっている。すでにUVSOR施設では平成10年度に外国人研究者による外部評価を受け，そのひとつの結論として，岡崎機構の環境を生かしてUVSOR施設で生物関連の研究も推進すべきであるとの指摘があった（「分子研リポート '98」参照)。外部評価後，UVSOR施設では直ちに基礎生物学研究所の研究者を中心にした共同研究を始めている。このように生物関連研究を広い意味での放射光分子科学として捉えて力を入れていくことは，今後，統合バイオサイエンスセンター構想やUVSOR施設の将来計画において重要事項のひとつになろう。

UVSORの将来計画 ── 中間報告その２ ── を公表してからも，いろいろな場で絶えず将来計画について議論したり，意見を伺ったりしている。例えば，平成11年以降では以下の通りである。

平成11年１月７日（木）　所外　日本放射光学会年会，UVSOR利用者懇談会

平成11年２月９日（火）　所内　第33回極端紫外光実験施設運営委員会

平成11年７月13日（月）　所内　第34回極端紫外光実験施設運営委員会

平成11年12月14日（火）　所外　学術審議会加速科学部会ヒアリング

平成12年１月７日（金）　所外　日本放射光学会年会，UVSOR利用者懇談会

平成12年１月17日（月）　所内　第35回極端紫外光実験施設運営委員会

平成12年２月８日（火）　所内　将来計画委員会（教授・助教授全員による）

本報告書では，これら最近，開催された会議で議論された内容（将来計画に関わる年次計画）についてまとめることにした。なお，これ以外に平成11年度は極端紫外光科学研究系の外部評価を実施し，極端紫外光科学の研究推進の観点でUVSOR施設に対する意見を伺っている。これについては本リポートに別途，報告があるので，そちらを参照願いたい。

5-2-1　年次計画の現状

これまで補正予算やCOE関連の設備予算によって将来計画（1）が進み，分子制御レーザー開発研究センター，極端紫外光科学研究系，UVSOR施設の三者の共同研究で将来計画（2）が進んできたが，平成10年度から始まったUVSOR運営費の15%削減やその削減を補うだけの他の予算獲得に成功していないことによって，将来計画（1）（2）はペースダウンを余儀なくされている。ストレージリングの運転時間も年間3000時間から2600時間に削減されている。また, 放射光分子科学における６研究分野の柱を立ててUVSOR施設の共同研究及び極端紫外光科学研究系の共同研究を活発に実施し成果を挙げているが,12テーマの要求に対して９テーマ分の共同研究しか認められていない。そのため, 放射光分子科学の進展に伴って増大している共同研究の要請（ビームタイムはもちろんのこと研究内容に応じた装置設備面でも）への対応が不十分になってきている。

将来計画（3）では所外の大型の軟Ｘ線高輝度光源施設においてしかできない一部の分子科学研究を目指すものであるが，それらの大型軟Ｘ線施設計画は予算規模がはるかに大きく未だに認められていない。このような他施設における放射光分子科学の展開を考えるのは時期尚早である。一方，将来計画（4）のUVSOR次期リング計画はこれまでのUVSOR施設の共同研究で挙げた実績を踏まえて, さらに著しい放射光分子科学研究の質の向上を極端紫外光領域を中心として図るものであり，予算規模も適正規模の範囲内でデザインを進めているところである。現在，日本では大型軟Ｘ線施設計画の遅れもあってUVSOR利用者を初めとする研究者からUVSOR次期リング計画に関心が高まりつつある。ただし，日々の業務に追われている現施設スタッフの空き時間でしか次期リング計画の検討が行えない状況であり，全国の研究者からの期待に充分応える体制を整える必要が生じている。

5-2-2　年次計画の見直し

現状から判断するに，将来計画（4）次期リング計画を目指すための現施設の増強を人手面，予算面で大幅に見直す必要が出ている。平成11年度に実施した極端紫外光科学研究系の外国人研究者による評価でも極端紫外光科学のさらなる展開のためにUVSOR施設において緊急に人的資源の補強と光源加速器の高度化を行うよう勧告されている。以上の観点から以下の三項目について早急に（可能なら平成13年度より）実現することが必須である。

(1)　光源加速器の教授グループ（教授１，助手１）の要求（平成12年度概算要求より要求中）

UVSOR施設建設当初, 光源加速器の維持業務の必要性から最小限の加速器科学の研究者を所内に擁することにし，助教授１助手１を配置した。建設後の10年間，助教授グループは維持業務に加えて真空紫外域自由電子レーザー利用に向けての基礎研究においてめざましい成果を上げることもできた。しかし，建設後10年を経たあたりから深刻な老朽化が始まり，維持業務が年々増え，現在，助教授１助手１では対応し切れない事態になっている。さらに，光源加速器の維持は言うまでもなく，世界的な放射光源加速器の進歩に遅れをとらないようにするためには現施設の性能向上のための開発研究が必須であり，さらには近い将来，現施設を更新する際の光源加速器の設計を進めておく必要に迫られている。

UVSOR施設のような大型設備では継続性が重要であり，将来計画（1），（2），（4）に関わる光源加速器分野の組織の補強は緊急性が非常に高い。特に世界のどの施設を見ても，維持業務に加えて開発的な業務を行う加速器科学の教授グループを擁している。それは加速器は加速器科学の研究者が開発するものであり，さらに，建設後も研究者自身が開発的研究を継続して行い，性能を向上（高度化）させるとともに，老朽化による維持が難しくなる20～30年後を目指して更新計画を立てる必要があるからである。このように長期的ビジョンに基づいて加速器を育てていくため

には，分子研の他の施設とは異なり，教授職が必須である。また，加速器を有している研究所は国内でも非常に限られており，加速器科学の研究は助手に採用されてから始める場合が多く，教授あるいは助教授に院生という体制では加速器科学の研究者を養成するどころか，研究の道具である加速器の維持さえも困難となる。そのため，光源加速器関係では教授グループ，助教授グループ共に最低限，助手１を加えることが必要である。

UVSOR施設完成後17年目に入っている現在,時代のニーズに応えて新しい光源加速器の設計ができないようでは世界の学問の進歩に取り残されてしまう。学術審議会加速器科学部会の報告（「加速器科学関係機関等における今後の連携・協力の在り方について」平成11年４月９日）にもあるように，加速器科学は科学技術や工業の発展と密接に関連している。本施設もその研究拠点として加速器科学の発展に積極的に貢献することが期待されている。さらに，分子科学のような先端的な物質科学基礎研究から応用研究・産業利用まで多様な放射光利用のニーズがあるため，全国共同利用型の最先端放射光源施設と特定目的指向型の比較的小規模な光源施設の整備が必要であるとの報告もあり，全国共同利用型の最先端放射光源施設に位置づけられてきた本施設の整備と将来の新しい展開のためにも加速器科学の研究者の増強，特に教授グループの新設が必須である。

(2)　UVSOR施設教官の役割分担と再編（平成12年度概算要求より要求中）

国内外の放射光施設ではいずれも加速器科学の研究者による光源加速器の維持及び開発（性能向上，高度化）と放射光利用の研究者による観測システムの維持及び開発を行っている。これまでUVSOR施設では前者については助教授１助手１を配置し，後者については助教授３助手２（客員助教授１を含む）を配置してきたが，施設の設立時より今日までいろいろな局面での自由度を持たせる意味で助教授の役割をはっきり分けることはしてこなかった。しかし,その後の加速器科学に基づく放射光科学の大きな発展に伴い，専門分野が細分化され，それぞれの細分化された分野でより専門的な研究者が育つようになった。現状として，施設内で専門分野に偏りが生じており，共同利用研究者に対して細分化された研究分野の専門的な支援が行えないなどの障害が出ている。学問の進歩に合わせて，より専門的な研究を行っていくためには，以下に示すように，放射光利用科学の研究者（分子研の場合は分子科学者）を配置する研究部，放射光用の分光器を開発する光学研究者を配置する研究部，加速器科学の研究者を配置する研究部に再編する必要がある。

・光物性測定器開発研究部　　（施設内振替）助教授１，助手１
・光化学測定器開発研究部　　（施設内振替）助教授１，助手１
・放射光分光器開発研究部　　（施設内振替）助教授１（客員）
・電子ビーム制御研究部　　（施設内振替）助教授１，助手１
・光源加速器開発研究部　　（新設）　　教　授１，助手１

光物性測定器開発研究部と光化学測定器開発研究部では，それぞれ固体の光物性と気体分子の光化学に関する放射光利用研究のための測定装置を開発するとともに，施設外研究者の施設利用（共同研究）を支援する。また，客員教官の所属する放射光分光器開発研究部では，主に測定器に分光して放射光を供給するための分光器を開発する。電子ビーム制御研究部では,光源加速器内を運動する電子ビームの物理を研究すると共に,電子ビームの高度な制御によってレーザー同期技術や自由電子レーザー利用技術に対応できる安定した高輝度放射光を供給する。また，光源加速器開発研究部では，現施設の光源加速器（電子蓄積リング）と挿入光源（アンジュレータ等）の維持及び性能向上のための開発研究を行うと共に，次期リング設計の中心的役割を果たす。

(3)　光源加速器の高度化計画の推進

平成10年度より施設予算が15%カットされたことによって，将来計画（1）である現施設のupgradeに関する年次計画が中断し，深刻な事態になっている。特に入射器には手が付けられないまま，時間が経ってしまった。また，所外の高輝度軟Ｘ線光源計画の遅れを見る限り，将来計画の最終目標である分子研独自の次期リング建設が当初計画通りに進むことは非常に困難であると判断される。このような次期リング計画の遅れをカバーするために，以下のように，現施設を大きく変更することなく適度の予算規模での入射器の性能向上，挿入光源の増強，高輝度化・高強度化を段階的に行う必要がある。当初の年次計画と高度化計画を加えた現在の年次計画の比較を図１に示す。

（１）入射器の性能向上（RF高性能化，直線加速器高性能化，シンクロトロン改良）

（２）現施設の挿入光源３カ所の内，２カ所の挿入光源・ビームラインを高度化

（３）第１高輝度化・高強度化。ラティス改造による短直線部４ヵ所増設

（４）第２高輝度化・高強度化。挿入光源６カ所（長直線４，短直線２）を持つ施設へ

本高度化計画（1）～（4）は現施設を大きく変える計画ではないので，老朽化が深刻になる前にできるだけ早く段階的に実施していけば，技術的に大きな問題はない。今後，光源加速器の研究者の増強を行い，細部について検討する必要があるが，高度化計画（1）～（4）の段階で，各コンポーネントを次期リングでも利用できるように工夫することも可能である。このように新しい施設計画を走らせる前に高度化計画を実現することは，より現実的，より効率的な性能向上を可能とする。

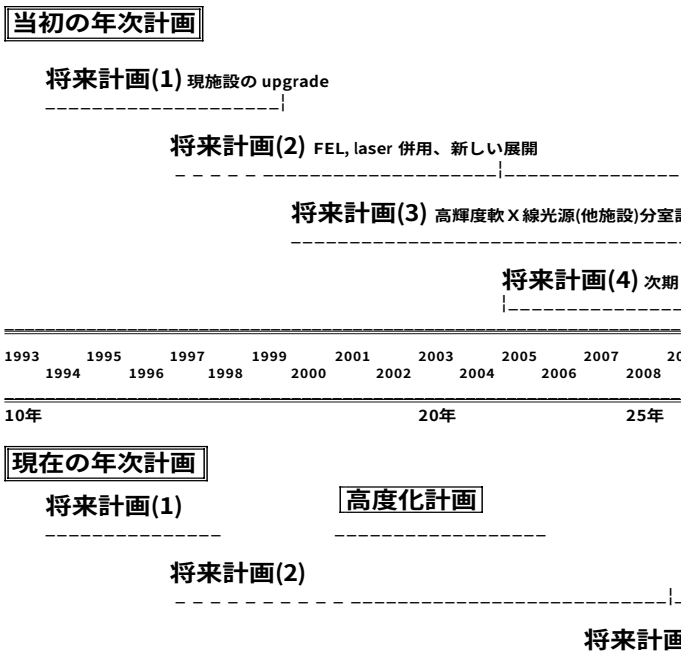


図１　当初の年次計画と現時点での年次計画（高度化計画を含む）

世界的には高輝度，高強度の放射光を実現するために，UVSOR施設と同程度の中規模共同研究施設は単なる老朽化対策を施すのではなく，それぞれ新たに放射光リングを建設して新しい成果を発表し始めている。国内では残念ながらこのような形での施設更新計画が認められていない。また，短パルス性，干渉性等にすぐれた通常のレーザー光源の特性をＸ線領域で実現しようとする全く新しい考えで大型の自由電子レーザー施設計画も始まっている。現在，我が国では放射光の全国共同利用施設としてUVSOR（0.75 GeV）以外にSPring−8（8GeV）と高エネルギー加速器研究機構のPhoton Factory（2.5, 3.0 GeV）の二施設があるだけである。利用者に供給できる光のエネルギーはこれら三施設で大きく異なっており，いずれも放射光科学として欠かすことのできない施設である。また，全国共同利用施設として計画中の東京大学と東北大学による高輝度軟Ｘ線光源（それぞれ1.6 GeV，1.8 GeV）との重なりもほとんどない。放射光利用研究として大型施設を建設すれば中型・小型施設が不必要になるものではなく，施設の大きさ（ビームエネルギーの大きさ）によって最も有効に利用できる光のエネルギー（波長）が異なる。図２にこれらの役割の違いを概念的に示した。中規模放射光施設としてUVSOR施設が最も有効に提供できる極端紫外光は分子との相互作用が非常に大きく，分子科学を中心とする物

質科学研究に不可欠である。UVSOR施設におけるこれまでの利用研究をさらに強化し，世界的な学問の動向に立ち後れないようにするためには，緊急に上記UVSOR高度化計画を推進し，極端紫外光領域を中心とする高輝度，高強度の放射光利用研究，短パルス性，可干渉性の自由電子レーザーの利用研究を実現する必要がある。

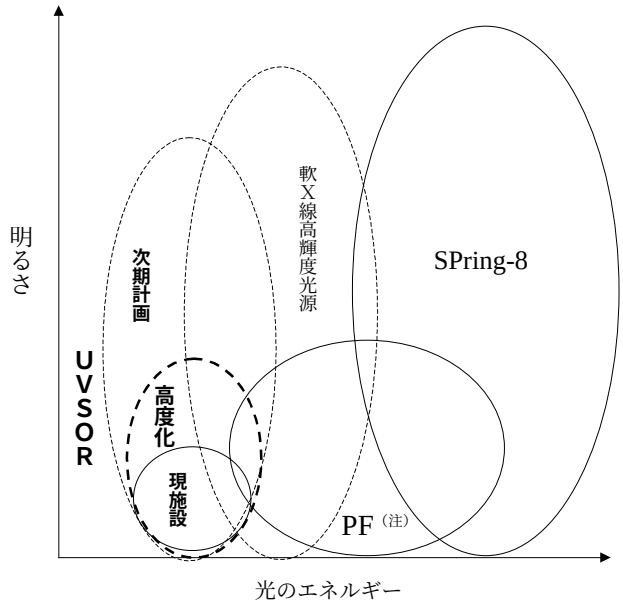


図２　全国共同利用放射光施設（計画中のものを含む）の位置付け（概念図）

（注）PFの将来計画としてPF更新計画（詳細不明～2010年を目標），
AR高度化計画，X線FEL計画の三つがある。

5-3　岡崎国立共同研究機構の将来構想とＥ地区への統合バイオサイエンスセンターの設置

5-3-1　統合バイオサイエンスセンター設置計画検討の経緯

(1)　これまでの経過

岡崎国立共同研究機構は，これまで機構を構成する分子科学研究所，基礎生物学研究所及び生理学研究所の３研究所がそれぞれの将来構想のもとで組織の整備を行い，国際的に卓越した研究機関として着実に研究を推進してきたが，機構全体としての将来構想を検討する取り組みが遅れていた。しかしこの数年，Ｅ地区利用の課題もあって，機構としての将来構想の必要性の認識が高まり，平成８年３月に，岡崎国立共同研究機構将来構想委員会の下にワーキンググループを設置し，このワーキンググループを中心に，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，i) 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，ii) ３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，iii) 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，vi) 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年度には，Ｅ地区で行う研究の柱の一つと位置付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，平成11年度には，この分子生命体科学共同研究推進センター構想の第一段階として，基礎生物学研究所所属の研究施設として生命環境科学研究センターの設置が認められた。

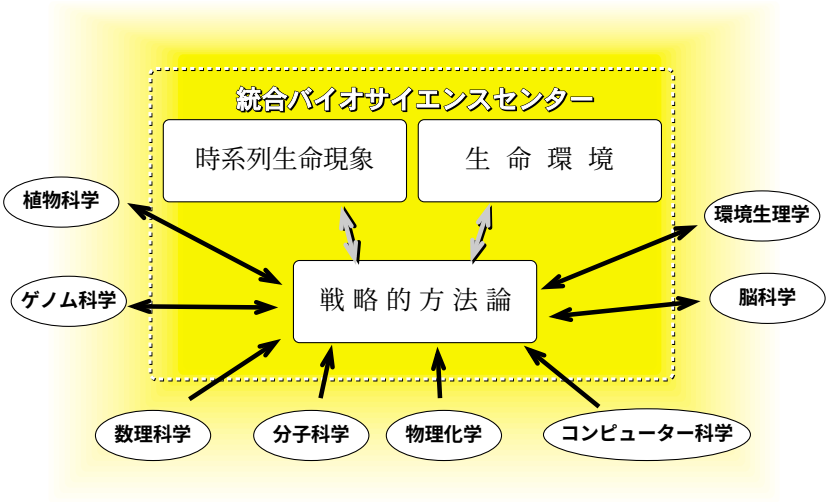
(2)　分子生命体科学共同研究推進センター構想の見直し

上述のように，平成10年12月の大蔵省内示を受けて，「生命環境科学研究センター」の準備作業に着手するとともに，分子生命体科学共同研究推進センター構想の見直しを開始した。特に，３研究所のこれまでの研究成果を基礎として，今後展開すべき研究課題の中で，学術的・社会的に特に要請されている分野の検討を行った。

その結果，新設の生命環境科学研究センターの研究課題とともに，時間軸に沿った生命現象（時系列生命現象）研究の重要性がクローズアップされてきた。更に，バイオサイエンス研究に新たな手法と視点を提供する戦略的方法論の重要性が再確認された。こうした検討の結果，分子生命体科学共同研究推進センターという名称が，センターの内容を正確に表現していないとの認識に至った。最終的に，「統合バイオサイエンスセンター」の名称が採用されることになった。

以上のような研究内容・課題の見直しと平行して，３研究所と機構が共同・協力する形で，i) 知覚と生体内情報伝達，ii) 地球環境と生命，iii) 限界を越える構造・機能計測，iv)生体内NOの化学と生理機能に関するシンポジウムが開催された。こうした企画は，生命環境研究を中心にしながらも，統合バイオサイエンス研究としての位置付けの下に，３研究所の共同作業として行ってきた。

以下には，「統合バイオサイエンスセンター」構想で提案している「時系列生命現象」，「戦略的方法論」及び既設の生命環境科学研究センターを統合した「生命環境」の相互の位置づけと，統合バイオサイエンス関連研究との関係を以下に示した。



5-3-2　統合バイオサイエンスセンター設置の必要性

生命現象の本質を，分子のレベルからその集合組織体としての生命体に統合する視点から解明しようとするバイオサイエンス，すなわち統合バイオサイエンスは，新たな技法の導入により飛躍的に発展を続けており，21世紀に向けて，医療，食糧，環境等の分野で豊かな応用成果を人類にもたらすものとして期待されている。バイオサイエンス研究については，応用に結びつける研究が急がれていることはいうまでもないが，その基盤としての長期的視野に立った学術研究を着実に推進していくことが重要であり，これらの研究を通じて若手研究者を育成していくことは，大学共同利用機関である本機構の任務である。

癌，先端医療研究等を含むバイオサイエンス分野における重要課題の研究推進が強く望まれるなか，本機構では，生理学研究所では脳，基礎生物学研究所では発生・分化・再生等の時系列生命現象及び生命環境，更に分子科学研究所では蛋白質を中心とする生体高分子の理論的な取り扱いに関する基礎研究を展開し，数多くの研究実績を挙げてきた。本機構では，今回，分子科学研究所，基礎生物学研究所及び生理学研究所が総力を挙げて協力し，これらのバイオサイエンスの研究課題について，発生・分化・再生等の時系列生命現象研究を中心に分子レベルから統合的に取り組むこととし，我が国のバイオサイエンス研究において，本機構が研究推進の中核的役割を担うものと位置付けている。

このように，本機構の３研究所が共同して発生・分化・再生等の時系列生命現象を中心とする新しい生命科学研究に取り組むために，機構共通の研究施設として統合バイオサイエンスセンターを設置し，これら研究を格段に推進しようとするものである。

5-3-3　統合バイオサイエンスセンターの研究目的

統合バイオサイエンスセンターは，発生・分化・再生等の時系列生命現象を中心とする生命科学研究を，分子レベルからその集合組織体としての生命体へと統合する視点から行うことを目的とする施設である。化学・物理学における最新の構造論・反応論における研究成果・研究手法を大胆に取り入れ，生体機能分子構造の可視化技術やシミュレーションを駆使し，21世紀のバイオサイエンス研究の潮流を主導的に形成することを目的としている。異なる学問分野からの研究者の流動的参入を得て，各レベルからの共同研究を推進するために，扱う研究テーマは５年を目途に弾力的・流動的に見直し，常に学問的・社会的要請を先取りした独創的研究を推進する。分子科学・基礎生物学・生理学という異なる領域における最先端の研究をリードする岡崎国立共同研究機構の３研究所の英知を結集し，本分野における国内の共同研究推進の拠点となり，国際的にもバイオサイエンス研究をリードする先端的かつ基盤的な研究セン

ターとして発展することを目的としている。

5-3-4　統合バイオサイエンスセンターの構成と研究内容

(1)　研究推進上の特色

統合バイオサイエンスセンターは，最先端の分子レベルでのバイオサイエンスを推進する施設である。革新的な方法論とシミュレーションを駆使し，生命原理を明らかにすることを目的としている。発生・分化・再生等の時系列生命現象，生命環境，革新的な方法論の開発といった分子レベルから生体システムへと統合する視点から研究を行うバイオサイエンスの展開に当たっては，分子科学・基礎生物学・生理学という異なる領域における最先端の国内研究をリードする３研究所の英知を結集し，センターに所属する研究者と３研究所の研究者間の活発な研究交流・情報交換・合同勉強会の開催など，分野にとらわれない形態での研究推進が求められる。特に，従来のバイオサイエンスに研究のバックグランドを持つ研究者にとっては，化学・物理学的発想で研究を進める関連領域の分子科学者と共同研究を推進することは，当該領域研究に新たな広がりを持たせ，これまでにない研究展開の可能性を与えるものとなる。逆に，分子科学に研究の本籍を置く研究者にとって，分子生物学・構造生物学・生理学などの研究者の問題意識や研究手法を学ぶことで，研究を一層深いものにする大きな助けとなる。このため，可能な限り研究施設は分野の垣根を越えて共通に設置する。現在，分子科学研究所に所属する電子計算機センターが，これまで分子科学研究に果たしてきた役割・機能に加えて，バイオサイエンス推進のための計算機環境を整備し，岡崎国立共同研究機構の直属の研究施設としての計算科学研究センターへと改組されることは，こうした３研究所の決意の現れでもある。もちろん，３研究所にはそれぞれの学問分野における国内研究の拠点（COE）としての独自の研究課題に対しても，常に世界をリードする成果が要求されていることは言うまでもない。こうした観点から，以下に述べる様に３つの大研究部門のもとに，幾つかの研究課題を推進することを計画した。

(2)　大研究部門の設置

１）時系列生命現象

多細胞生物は，受精後瞬く間に姿形を変えながら生物固有の形態を獲得する。生物個体の生涯における形態変化の共通性や種による特異性を記載し，個体の発生原理を明らかにすることは生物学の最も重要なテーマのひとつである。近年，ショウジョウバエを用いた遺伝学から，形態形成を制御する遺伝子が次々に単離され，それらの多くは，ヒトも含めた多様な動物種に共通して用いられていることが明らかになってきた。生物における普遍的な発生原理の解明は，生物多様性の解明と表裏一体であり，生物進化の謎を解く鍵となると考えらる。従って，このような問題を学際的基盤のもとにアプローチすることが21世紀の新しい生物学が目指すべき方向である。発生を分子レベルで理解することは，それぞれに特殊化し個体を獲得した細胞で特異的に発現する遺伝子を明らかにし，その組織特異的な発現の制御機構を探ることである。しかし，現在では組織特異的遺伝子発現を制御するDNA配列には多くの因子が複雑に相互作用していることがわかっている。発生の仕組みを理解するためには，これら細胞の個体を決定する遺伝子が，発生過程のいつどこで発現しどのように他因子と相互作用してその機能を発揮するのかを遺伝子プログラムとして理解する必要がある。そのためにはマイクロアレイ法など最新技術の導入や発現プロフィールから生物学的意味を抽出するための生物情報学の協力は不可欠である。

このように発生・分化の制御機構を遺伝子発現のプログラムとして理解する試みは生物の神秘的な能力のひとつである組織や器官の再生現象の分子機構を探る上でも非常に重要である。また，「動植物の細胞のうち全能性をもつ細胞

研究部門	研　究　課　題
時系列生命現象	胚発生プログラム
	組織・器官再生プログラム
	神経細胞の発生・分化・再生の分子機構
	分化全能性の分子機構
戦略的方法論	複素観測法による生命過程の分子分解能可視化技術の開発
	生体内情報伝達の分子機構
	大規模な多体系に関するシステムシミュレーション
	生命現象の数理モデル樹立のための実験／シミュレーション対応システムの開発
生命環境	内分泌撹乱物質とその働きの解明：発生・分化との関わり
	環境適応型化学反応の開発
	バイオ分子センサーの環境適応機構
	環境生体データベースの構築

の特性についても遺伝子が重要な鍵を握ると考えられる。細胞の全能性を規定する遺伝子を明らかにできれば，幹細胞の特性を解明できるのみならず，組織・器官の再生を人工的に制御することも可能になるであろう。

２）戦略的方法論

新しい学問領域は，新しい方法論の発見・発明によりスタートすることが多い。例えば，現在医学の診断に幅広く使われている磁気共鳴イメージング（MRI；Magnetic Resonance Imaging）は，もともと分光装置として誕生した磁気共鳴（NMR）から生まれた。更にその中から，脳科学の究極計測法として機能イメージング（f-MRI；functional MRI）が近年開発され，脳研究が人を対象として飛躍的に発展した。

このように，各分野の学問分野の急速な発展の裏には新しい方法論の発見がある。その方法論が根本的であればあるほど，新しい分野を活性化し，それがまた新しい方法論を次々に生み出して発展して行く。こうした革新的方法論は，単なる個別技術を超えた戦略的方法論と呼ぶのがふさわしい。

統合バイオサイエンスという新しい学際領域は，融合という領域間の単純和の方法で確立し得ない困難さを持っている。また，複数領域が集って，短期集中的に同一テーマの問題解決を図るプロジェクトタイプの研究手法でも不充分である。統合バイオサイエンスでは，領域全体を引っぱる新しい方法論のブレークスルーが必要となる。すなわち，従来の方法では見えなかった１分子レベルの３次元構造解析，分子レベルの機能の入出力関係解析，複雑系のその場の機能観測などを明確に開示する戦略的方法論が期待されている。

例えば，複素観測法を用いた発生，分化，再生過程の分子的可視化，生体内情報伝達の分子機構，大規模な多体系全体をシステムとしてとらえるシミュレーション，生命現象の数理モデル樹立のための実験／シミュレーション対応システムの開発などは，これまでにない視点からの方法論の開拓なしには達成できない重要な研究課題である。

こうした研究は，ハイリスクのため従来サイドワークとして通常研究の陰で細々と開発が行われてきた。しかし，センターでは，リスクを覚悟でこの方法論自体の開発を正面に据え，共同研究者の総力を挙げて体制を作りたい。

３）生命環境

人工的に作られる何百万種の化学物質のほとんどが，かつて生命体の出会ったことのない物質であり，それがもたらす人体等への影響は，多くの公害事例で明らかになった（例えばスモン病や有機水銀中毒）。しかし，人体の活動調節に必須である化学物質の類似物質が微量で多大な影響を与えることは，予期せざる未知の出来事であったと言える。この問題は，まずホルモン作用という意味で生理学の問題であるが，それが環境中にわずかしか存在せず，しかも影響が大きいという意味で環境応答生物学でもあり，生物濃縮されて影響を与えていくことから環境生態系・循環系の研究にもつながっていく。また，ホルモンとの類似性の研究という意味で，物質科学の対象にもなる。さらに，生殖

ホルモンの働きを乱すことは脳で作られる性殖腺刺激ホルモンと関係する。すなわち内分泌撹乱物質は，脳・物質・環境の３つのキーワードすべてに関わる問題である。したがって，それら複雑領域の協力なしに解明し得ない新しい問題と言える。このように，真の新しい境界領域を研究することが，統合バイオサイエンスの使命の一つである。

(3)　各大研究部門の研究課題

１）時系列生命現象

胚発生プログラム

胚発生は，細胞増殖，分化を司る遺伝子が厳密に制御されて発現することによって進行する。これまでに発生過程における遺伝子発現プロフィールに関する解析は，時間軸および遺伝子についての断片的な情報があるのみである。本プロジェクトでは，最近開発されたマイクロアレイを用いた発現プロファイリングを駆使して，胚発生に関わる遺伝子発現プログラムを網羅的にまた詳細に記載することにより生物の胚発生プログラムを解明する。

組織・器官再生プログラム

再生現象は，肝臓やイモリの水晶体（レンズ）の再生でよく知られているが，その様式は生物種や組織，器官によって実に多様であり，細胞の脱組織化，増殖・分化，再組織化を経る再生や未分化な幹細胞からの再生などが知られている。特に，発生生物学の最近の進歩によって，幹細胞の実体が確認され，それらの性質も明らかにされつつあるが，多くの組織では組織・器官の再生を人工的に制御するにいたっていない。本プロジェクトでは，各種臓器・組織の幹細胞の特性を明らにするとともに，器官の形態形成における細胞相互作用の制御機構を分子レベルで解明することにより，緊急な社会的要請にこたえる。

神経細胞の発生・分化・再生の分子機構

神経幹細胞よりの神経細胞の誘導・分化・極性形成機構さらには神経回路の特異的結合の形成，神経細胞の維持，及び損傷後の軸索の再生と機能の再構築に関わる分子群とその機能を形態学的な観点から調べると共に生理学的手法を用いて機能の面からもアプローチする。そしてそれらの発達・加齢に伴う変化とその原因を探る。

分化全能性の分子機構

植物細胞は脱分化・再生能が高く，1963年には既に，ニンジン体細胞からクローンを作る技術が確立している。しかし，脱分化・再分化には植物ホルモン，細胞壁糖タンパク質，染色体・ゲノムの修飾などが関与していると考えられているが，分子機構の実体については未知である。本プロジェクトでは，脱分化・再分化に異常をもたらす突然変異体の解析から，分化全能性の新たな研究展開を目指す。

２）戦略的方法論

複素観測法による生命過程の分子分解能可視化技術の開発

複素観測法は，岡崎で生まれた波動現象の革新的観測技術で，従来の可視化計測法の分解能とコントラストを大幅に改善する。この方法を光学顕微鏡，電子顕微鏡に適用し，発生，分化，及び再生過程の細胞内分子機構を生きた状態で高分解能観察する。さらに抽出サンプルのDNAやタンパク質について１分子配列解析，立体構造解析法を確立し，分子生物学と構造生物学を細胞という現場でつなぐ統合的方法論の開発を行う。

生体内情報伝達の分子機構

生体外からの様々な刺激に伴う血管や筋肉の弛緩などの命令情報は，一酸化窒素（NO）の拡散などにより伝達され，NOがヘムタンパク質に結合することにより，応答へと展開される。こうした情報伝達物質の作用機序を，分子分光学

の方法論を駆使することで，解明する。

大規模な多体系に関するシステムシミュレーション

第一原理分子動力学の手法を，生体関連分子に適用するための電子状態計算分子動力学計算を融合したアルゴリズムを開発し，大規模並列演算用のソフトウエアを構築する。これらを用い，蛋白質，核酸等の生体高分子の構造と機能，及び反応ダイナミックスの研究を行う。

生命現象の数理モデル樹立のための実験／シミュレーション対応システムの開発

幹細胞から決定された細胞へと分化・多様化していく発生・再生過程を分裂・増殖を基本とする複雑適応系（自己生成系）ととらえる新しい数理モデルを樹立する。そのモデルをもとにコンピューターによる構成的シミュレーションを行いつつ，現象の本質的記述と根元的パラメータを探索し，より現実的なモデルの確立を目指す。

３）生命環境

内分泌撹乱物質とその働きの解明：発生・分化との関わり

自然界に放出された種々の化学物質が，生殖などの基本的生命現象に及ぼす影響が問題となっている。これらの影響を，レセプター型転写因子の機能との関係で検討する。

バイオ分子センサーの環境適応機構

環境の物理的・化学的変化を生体は，すべてセンサー分子で受容し，その情報が体内の各器官・中枢に伝達されることによって認識される。例えば，光センサーから視覚中枢及び体内時計機構へ，温度センサーから体温調節中枢は，ガスセンサーから呼吸中枢へ，NaCl センサーから体液量調節機構へと情報は伝達・処理される。これらの情報が生体の中で統合されることによって，すべての生体は環境の変化に対応することができる。これらのセンサー受容・伝達・認識・統合・適応メカニズムを解明する。

環境適応型化学反応の開発

化学反応は，複数の異なるプロセスで進行する場合が多い。このため，個々のステップでの単離精製に有機溶媒などの大量消費が含まれる。したがって，ワンポット，あるいは酵素の利用による新たな反応手法の開発を行う。

環境生体データベースの構築

生物あるいは生体分子を扱う分野では，今後，遺伝子・タンパク質等の構造と機能及び生体に作用する化学物質に関する最新の情報の取得が必須となる。そのため，環境生体データベースを構築し，それを利用した大規模シミュレーションにより，生体と化学物質との相互作用を分子レベルで解明する。

5-3-5　統合バイオサイエンスセンター設置へ

これまで述べてきた統合バイオサイエンスセンター設置計画は，平成12年12月の大蔵省の内示で設置が認められる運びとなった。それと同時に，電子計算機センターは機構共通施設である計算科学研究センターとして整備されることになり，助手一名の振り替えによる教授ポジションが新たに認められた。機構共通施設には，現在基礎生物学研究所と生理学研究所が共同で利用している動物実験センター・アイソトープ実験センターの二施設も含まれている。さらに，平成11年度に発足した生命環境科学研究センターで提案していた３課題を実施するための研究施設として，E地区への 5,130 m^2 の研究棟の設置が認められた。

現在，統合バイオサイエンスセンターで第一期として取り上げる研究課題の見直しや，機構共通施設の運営等の問題を検討するための準備委員会が設置され，活発な議論を行っている最中である。

5-4　共同研究の見直しについて

大学共同利用機関・分子科学研究所の使命である共同研究の実態は研究所創設期とはかなり変化している。つまり，研究設備の面では大学の環境がかなり改善され，分子研の設備が見劣りするような場合も出てきている。よって，設備にとらわれず，人を中心とする新たな視点でも共同研究を捉え直す必要がある。このように現在の共同研究の在り方をいろいろな面から検討することは，つまるところ研究所そのものの存在意義を見直すことにつながる。現在，研究所として将来の分子研の在り方を議論している最中であり，そのひとつの可能性として高等学術研究機関を目指すべきであるという考えが出されている。共同研究を見直す際，高等学術研究機関構想の中で共同研究をどう捉えるかという大きな問題設定も重要であるが，今期の共同研究専門委員会では，まず現在の共同研究の実態を調べ，改善すべき点を検討することにした。

5-4-1　問題点の洗い出し

具体的な作業としてワーキンググループを編成し，メンバーの意見を聞きながら問題点を洗い出し，その後，ワーキンググループで意見交換した。メンバーは所内委員の中村宏樹，鈴木俊法，井上克也，小杉信博（まとめ役）と所外委員の伊藤翼東北大教授，岡田正阪大教授である。問題点として浮かび上がったことは以下の通り。

(1) 所外研究者１名（＋同伴者若干名）が所内研究者１名（１グループ）と共同研究するために申請する協力研究，所内外の複数の研究者が集中的に分子研に集まって行う課題研究，研究会等の実態を調べ，硬直化している部分について何らかの打開策を打ち出すことが必要である。

(1a) 実態を調べるために，共同研究結果のヒアリングを行うことが必要ではないか。また，共同研究の見直しと評価は共同研究専門委員会の本来の役目のひとつでもあるので，絶えず議論できる場を委員会に設定する必要があるのではないか。共同研究専門委員会における所外委員の役目もそのあたりにあるのではないか。

(1b) 協力研究枠でありながら施設利用的になっているものがあるので，本来の協力研究（所内対応教官の研究の展開にも必須の研究）と区別して実施する仕組みが必要ではないか。

(1c) 新しい共同研究を所内から発信することが重要ではないか。そのためには所内研究者が代表者として申請できる共同研究枠の設定が重要ではないか。

(1d) 課題研究を強化するための工夫が必要ではないか。研究の展開で共同研究の内容が変化するような自由度を増やす等。

(1e) 現在の申請締切（前期・後期）の設定では，平均すると実施時期の半年以上前の申請になってしまうために，それが硬直化のひとつの原因になっているのではないか。特に，４月に所属変更する場合が多いが，現システムでは４月から共同研究を始めることは不可能で，後期からしか対応できない。臨機応変な対応ができるシステムにできないか。

(1f) 共同研究がオープンに行われていることをもっと広く知らせるように努力すべきではないか。所外に対しオープンな姿勢が重要であり，広報活動にも工夫が必要ではないか。

(2) 国際共同研究の拠点形成を目指して，外国人客員部門等を活用した新しい共同研究の枠組が必要ではないか。

(3) 分子科学の将来を支えるいろいろな分野の若手研究者（院生を含む）がもっと積極的に研究所の活動（共同研究，研究会等）に参画あるいは参加できるように対策を立てるべきではないか。

(4) 今後の共同研究は所外の研究者が分子研に来て行うという一方通行ではなく，分子研の研究者も所外（海外を

含む）に出かけていって展開するような双方向の共同研究を可能にしなければならないのではないか。分子研が主導権をもった共同研究を行えるようにすると言う意味で「高等学術研究機関構想」とも合致する。

5-4-2　現時点での改善策

次に，以上の各項目への具体的な施策についてワーキンググループ及び所内委員全員で議論した。現時点で考えられる案は以下の通りである。ただし，これらはそのまま実現できるものばかりではない。

(1)　現状の共同研究の強化策

(1a) 共同研究専門委員会では，課題研究以外の共同研究も１，２件（例えば，長期間，継続して行っている協力研究）選択し，申請代表者（あるいは所内対応教官）に成果報告してもらうことで実態を把握しながら，共同研究の見直しと評価を継続して行うものとする。

(1b) 施設長が対応している協力研究や施設の共同利用機器を利用した協力研究については，各施設の活動でもあるので，各施設の運営委員会で申請内容について議論したり，成果を報告したりすべきである。また，このような検討の中から，協力研究以外の枠として各施設の裁量で独自の共同研究スタイル（施設利用枠を使ったもの）を各施設で構築していくべきである。検討を要する主たる施設はレーザー及び物質開発研究センターと装置開発室。

(1c) 所内研究者自身も代表者として申請できる課題研究枠を利用すれば，所内発信の新しい共同研究が提案できる。このような課題研究の位置づけを徹底し，所内外から課題研究への応募を促す努力が必要である。

(1d) 課題研究においては，構成メンバーの年度途中の変更は旅費配分総額を変えない範囲で認めるようにし，学問の動きに即した機動性あるものにすべきである。

(1e) ミニ研究会の扱いと同じ要領で，特別の理由がある場合，協力研究に随時受付の枠を認める。ただし，各研究者あたりの協力研究の総枠規制を越えないものとする。

(1f) 共同研究の報告をもっとオープンにすることが重要で，成果報告も「分子研レターズ」と *Annual Review* に掲載するばかりではなく，もっと広く知らせるように努力すべきである。随時受付が可能であるミニ研究会についても所外にオープンにすべきである。

(2)　国際共同研究拠点形成に向けての方策

延べ４人／年の枠のある外国人客員部門の教官採用計画を立てる際に，半年以上の長期滞在という条件（これは，現在，選考する際の運用上の約束事）を一部で緩和して３ヶ月単位の採用も可能にすると，来日可能な候補者が増加して国際共同研究を現在以上に活性化することができる（なお，３ヶ月未満の採用計画は客員部門として許可されていない）。採用の確実性は国際共同研究を始めるきっかけを作るのに特に重要である。

予定外国人客員教官をメンバーに加えた所外との共同研究を奨励するために課題研究で申請してもらうようにし，共同研究専門委員会で申請内容を審議してから採用計画のリストに候補者を加えるというようなプロセスをとることが望ましい。その際，課題研究の申請を後期（６月中旬締切）も認める必要が出てくる。つまり，現在，課題研究の申請は前期（前年12月中旬締切）だけしか認められておらず，これでは次年度の採用計画の調整に間に合わないため。

(3)　若手研究者奨励策

若手研究者が最も支援を必要としている。若手研究者が中心になって組織する研究会を奨励する姿勢が必要である。また，中堅以上の研究者が組織する研究会であっても，その当事者の研究室に属さない若手研究者（院生を含む）の参加を広く募ることを世話人に義務づけ，そのための旅費枠も適宜，設定する。このような研究会に要請される条件を公募の段階で明確にすべきである。さらに，直接，所内研究者から所外の院生等に共同研究への参加を呼びかけることも重要である（博士後期課程の院生は協力研究の申請代表者になることができる）。若手研究者とのチャンネルを作る方法として，メーリングリストのサーバーを分子研に設置し，若手研究者（各種若手の会メンバーを含む）が自由に加入脱退できるようにすればよい。

(4)　高等学術研究機関構想への方策（共同研究の観点で）

概算要求項目として数年，要求してきた多国間国際共同研究協力事業を早急に実現し，人を中心とした所内と所外（海外が主ではあるが）との双方向の共同研究を実現することが強く望まれる。なお，共同研究のための員等旅費枠を持っている共同利用研究所（直轄研や大学付置研）間ではすでに双方向の共同研究が可能なので，研究所間で行う新しい共同研究を打ち出して行くべきである。

5-4-3　今後の課題

2000年１月24日開催の共同研究専門委員会で共同研究の見直しについて議論した。上記，問題点の洗い出し，現時点での改善策の内容には，その際の意見を含めている。さらに，2000年２月７日開催の運営協議員会においても議論した。これら二つの委員会では所外委員から以下のような今後の課題についての意見をいただいた。引き続き，共同研究専門委員会，運営協議員会等の場を使って，共同研究を見直し，より実際的かつ有効な施策を考えて行かねばならない。

- 現状の改善ということではなく，分子研の将来構想のビジョンの中で分子研が主導的に行う共同研究の新しい枠組みを考えることが重要である。
- 旧来の共同研究と新しい共同研究のバランスをどうするか，考えなければならない。
- 研究系の行う共同研究は人中心になっているので，新しい共同研究に向けていろいろな試みがすぐにでもできるはずである。そのために課題研究があるのではないか。
- 施設の行う共同研究も人中心の方向で考えてよいのではないか。
- 外国人客員部門ばかりでなく日本人の客員部門をもっと生かした特長ある共同研究を考えるべきではないか。

以上。

5-5　教官停年制検討小委員会報告

平成９年度，本委員会では停年延長に係わる諸問題について討議し，その後の将来構想委員会等での議論を踏まえて，両論併記の形で最終報告書を作成した（分子研リポート '97参照）。その後，約一年にわたって冷静にこの問題を考えるための期間を設けてきた。その間，岡崎国立共同研究機構では生命環境科学研究センターの発足に伴い，分子科学研究所から出向する教授の停年が63になる等，新たな状況が生まれた。こうした状況の下，伊藤所長（当時）が平成11年１月８日の主幹・施設長会議において「停年問題検討委員会」の再開を提案し，議論の結果，当委員会に議論再開の要請が出された。これを受けて，本小委員会では５回にわたる検討を行い，平成11年２月15日（月）に開催された将来計画委員会に「教官の停年年齢延長とそれに伴う制度改革に関する提言」を提案した。

提言案は，前文，これまでの経緯，検討結果及び提案で構成され，その内容を補足する形で付属文書が加わる形となった。討議の結果，付属文書を含めて提言案は採択され，平成11年５月７日及び８月２日に開催された運営協議会において議論され，最終的には，同10月１日に開催さた運営協議会において投票を行い，承認された。なお，平成11年４月に就任された茅所長は，本提案の運用に関して，下記のような立場を教授会議において表明されたので，下記にその内容を再録し，記録として留めるものである。

> 分子科学研究所は，平成11年度より，教官の停年を65歳とすることを提案する。創造的な科学研究が比較的若い年齢層から生まれているという歴史的事実の下で，共同利用研究機関である分子科学研究所において，先導的研究者として教官に常に求められている責務が，この延長によって弱められるという批判もある。
>
> では，分子科学研究は本当に朝から晩まで，休日もなく研究に没頭する若手研究者のみが受け入れられる世界なのであろうか。わが国のすべての分野において，過去の歴史は，欧米に追いつけ追い越せであったし，そのために，効率を重んじ，日夜学問に仕事に没頭する風習が尊ばれてきた。分子科学研究所においても，その創立以来，休日もなく研究する若い研究者の献身的な努力もあって，世界の最先端と自負できる研究分野が展開されている。このような成熟した分子科学の今後の灯りが輝く方向の模索には，理念あるいは哲学そして文化といった，効率一筋では済まされない，人間としての成熟度からくる思想が重要になる。21世紀において100億に達しようとする人口のもとで，人類の豊かな生活は，もはや効率だけの物質生産では解決できない。自然と調和した新しい物質感を創造することが，科学者とくに物質科学の重要な基礎としての分子科学に求められている。このような立場から，創造力ある若手研究者と，いままでの先導的研究実績に基づきこれからの科学を考える成熟した科学者との共存は，重要な意義がある。成熟した研究者が，ますます自己の研究を発展させることに没頭するか，また教育に専念する，あるいは分子科学をより高い見地から先導する立場をとるなど，いくつかの道筋があり得るし，それらは本人が選択すべきものである。

教官の停年延長とそれに伴う制度改革に関する提言

平成11年２月15日

将来計画委員会

分子科学研究所は2000年に創設25年を迎えようとしている。開所以来の活発な研究活動によって，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の役割を果たしてきた。その高い研究活力は，これまでの研

究成果が如実に物語っているが，ここで育った多くの若い研究者が全国の大学等で活躍していることにもその一端が現れている。このように分子科学研究所は，学問上世界に誇れる成果を出すために不断の努力を行っている。さらに，優秀な若い人材を積極的に発掘し，育て，COEとして誇れるような環境を整えるべく様々な努力を行っている。

近年の社会の高齢化やそれに伴う制度改革は，大学に限らず様々な組織で停年の延長を必然的に促しつつある。社会的に活躍する年齢も高くなっているのが多くの分野における近年の傾向である。身近な例では,60歳停年制のために分子科学研究所から大学等へ転出した諸先輩は，新しい環境の中で活躍の場を切り開かれておられる。しかしながら，研究者としての能力・活力が高いレベルにある年齢で研究を停止せざるを得ない状況が生まれるとするならば，それは分子科学研究の発展を阻害する大きな要因となるであろう。

分子科学研究所では，助教授の内部昇進を禁止するという人事方針から，必然的に教授は外部から迎えなければならない状況にある。しかしながら，前述のような最近の社会情勢の変化に伴い，分子科学研究所の60歳停年制が，新しい教授招へいの環境としてふさわしいものではなくなりつつある。こうした現状を踏まえて，昨年度，本委員会では停年延長に係わる諸問題について討議し，その後の将来計画委員会等での議論を経て，両論併記の形で最終報告書を作成した（分子研リポート '97，教官停年制検討小委員会報告参照）。その概要は，以下の２点である。

1）現在の停年は，研究者としての能力・活力が高いレベルにある年齢に設定されている。実際，停年で研究所を去られた教授の方々や，2—3年で停年を迎えられる教授の方々は，研究面での活躍ぶりや国内外での専門分野におけるリーダーシップの面で決して衰えてはいない。

2）しかしながら，停年延長の結果として研究活動のマンネリ化や教授交代頻度の減少が起こること，必ずしも全ての教授が60歳過ぎまで高い研究活動を保てるわけではないこと等が懸念される。

その後，約一年にわたって冷静にこの問題を考えるための期間を設けてきた。その間の諸情勢の変化を受けて，平成11年１月８日の主幹・施設長会議の要請に基づき，「教官停年制検討小委員会」を再開した。

本委員会は，分子科学研究所の大きな役割が「高いレベルでの研究活動と活発な人事交流・教官の流動性」にあると認識している。研究系助手・助教授の内部昇進の禁止が，教官の流動化に重要な役割を果たしていることは明かである。同時に，赴任後十数年を経て一定の成果を上げた教授に対して，大学等に転出し人事の流動化に積極的に寄与する努力を期待している。一方，比較的長期間在職している教授には，自らの高いレベルでの研究の推進のみならず，研究所の発展に対し大きく寄与することが要求されている点を忘れてはならない。本委員会では，従来以上に研究活動が緊張を保ちながら活発に展開されることを願い，慎重に議論を重ね，停年の延長に係わる諸問題を検討した結論として，以下の提案を行う。

1）分子科学研究所の教官の停年を65歳とする。

2）教授に対して，就任後概ね10年毎に，国内外の専門家による厳しい外部評価を行う。所長は，評価を参考に当該教授に対し適切な指導・助言を行う。

付属文書

平成11年２月15日

教官停年制検討小委員会

教官停年制検討小委員会（以下小委員会）は，平成11年２月15日に「教官の停年延長とそれに伴う制度改革に関する提言（以下提言）」をまとめた。提言を起草するにあたり，停年延長により懸念される種々の問題点と，それを解消するような制度的対策に及ぶ議論を行った。ある意味で，分子科学研究所の人事政策にまで踏み込んでしまった感が

否めず，教授・助教授懇談会においても同様の指摘がなされた。しかしながら，小委員会で議論された内容は，分子科学研究所の教授が常に規範とすべき研究活動に対する基本姿勢を述べたものであり，今後の分子科学研究所の制度を拘束するものではないが，記録に留めるためにあえて提言の付属文書としてまとめた。

分子科学研究所では現在，研究系・施設の外部評価を３年毎に行っている。これと同様な外部評価を60歳直前（例えば57―58歳の時点）に行っても，単なる手続きに終わるのではないかという懸念が出てくる。本委員会では，外部の専門家による点検・評価について詳細な検討を行い，現在実施している点検・評価とは独立に，停年延長と直接係わる外部評価制度について以下のような形態を考えた。ここで想定している外部評価は，国内外の専門家からの忌憚のない意見が良い意味で研究活動を刺激し，常に緊張感を持って教授の任に当たる環境を維持することを目的としている。

１）教授は，就任後概ね10年に一度，4―5名の国内外の専門家による厳しい外部評価を受ける。

２）所長は，当該教授から提出される，これまでの研究の総括・これからの研究の展望等に関するレポート（数頁程度）や業績リスト等の資料を添付して，国内外の評価委員に対し，当該教授の研究に関する評価を親展の形で依頼する。所長は，評価内容を当該教授以外には一切公開してはならない。

３）所長は，評価を参考にして当該教授に対して適切な指導・助言を行う。

外部評価に関しては，一定の期間を目安に親展の形で国内外の専門家に依頼するという点で概ね全所的理解が得られた。また，その後の評価の取り扱いに関しては，所長の見識で対応すべきであり細部まで明文化すべきではないとの意見が多数であったため，小委員会では，上記項目３）においてあえて細かい規定を設ける必要はないと判断した。

なお，外部評価とは別に，十数年にわたり在職している教授については，一定の成果を上げた段階で大学等へ転出する努力を行い，人事の流動化に積極的に寄与するべきであると考える。また，50代以降の教授や，長期にわたり在職している教授は，それぞれの専門分野を先導する独創的研究を行い，博士研究員を日本学術振興会等の予算で獲得するばかりでなく，一般の科研費以外に特別推進や特定研究を主宰する等の積極的努力が要求される。こうした努力によって，若手教官へのより一層の支援が可能となる。停年延長の実施が，教授のこれまで以上の研究所への多様な形での寄与を期待していることを決して忘れてはならない。

6．資料

6-1　歴代の評議員（1976～1981）

氏名・所属（当時）	1976.1.10～ 1978.1.9	1978.1.10～ 1980.1.9	1980.1.10～ 1981.4.13
小谷　正雄　東京理科大学長	○	○	○
長倉　三郎　東京大物性研教授	○	○	○
石塚　直隆　名古屋大学長	○	○	○
梅棹　忠夫　国立民族学博物館長	○	○	○
岡村　総吾　東京大工教授	○	○	○ (日本学術振興会理事)
ハインツ・ゲリシャー　マックス・プランク財団 フリッツ・ハーバー研究所長	○	○	
柴田　承二　東京大薬教授	○	○ (東京大名誉教授)	○
関　　集三　大阪大理教授	○		
田島弥太郎　国立遺伝学研究所長	○	○	○
田中　信行　東北大理教授	○		
福井　謙一　京都大工教授	○	○	○
伏見　康治　名古屋大名誉教授	○	○ (日本学術会議会長)	○
ゲルハルト・ヘルツベルグ カナダ国立研究所 ヘルツベルグ天体物理学研究所長	○		
森野　米三　相模中央化学研究所長	○	○	○ （相模中央化学研究所 最高顧問理事）
山下　次郎　東京大物性研究所長	○		
湯川　泰秀　大阪大産業科学研教授	○	○ (大阪大名誉教授)	○ (大阪女子大学長)
渡辺　　格　慶應義塾大医教授	○	○	○
植村　泰忠　東京大理教授		○	○
メルビン・カルビン カリフォルニア大学 ケミカル・ヴィオダイナミックス研究所長		○	○
神田　慶也　九州大理学部長		○	○ (九州大学長)
齋藤　一夫　東北大理教授		○	○
ジョージ・ポーター　英国王立研究所教授化学部長			○

歴代の評議員（1981～）

氏　名	所　属	第1期 '81.6.1～ '83.5.31	第2期 '83.6.1～ '85.5.31	第3期 '85.6.1～ '87.5.31	第4期 '87.6.1～ '89.5.31	第5期 '89.6.1～ '91.5.31	第6期 '91.6.1～ '93.5.31	第7期 '93.6.1～ '95.5.31	第8期 '95.6.1～ '97.5.31	第9期 '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					
石川　忠雄	慶應大学長	○								
石塚　直隆	名大学長	○～'81.7.22								
飯島　宗一	名大学長	○'81.9.1～	○	○	○～'87.7.21					
植村　泰忠	東大理教授，東京理大教授	○	○	○						
神田　慶也	九大学長	○								
小谷　正雄	東京理科大学長	○								
小松　　登	豊田中研所長	○	○							
齋藤　一夫	東北大理教授，国際基督教大教授	○	○～'84.5.15			○	○	○		
榊　米一郎	豊橋技科大学長	○	○～'84.3.31							
島村　　修	相模中央研最高顧問理事	○	○							
田島弥太郎	遺伝研所長	○								
馬場　宏明	北大応電研所長	○	○	○	○					
福井　謙一	京大工教授，京都工繊大学長，基礎化学研究所長	○	○	○	○	○	○			
藤巻　正生	お茶女大家政教授，お茶女大学長	○	○	○						
向坊　　隆	東大名誉教授	○								
森　大吉郎	宇宙研所長	○	○'83.11.25 死亡							
亀谷　哲治	星薬科大学長		○	○						
角戸　正夫	姫路工大学長		○	○						
本多　波雄	豊橋技科大学長		○'84.4.16～	○	○	○				
田中　郁三	東工大理教授，理学部長，学長，学位授与機構長		○	○	○	○	○			
中嶋　貞雄	東大物性研所長		○							
小田　　稔	宇宙研所長		○'84.2.16～	○	○					
斎藤　喜彦	慶應大理工教授			○	○					
森田　正俊	豊田中研代表取締役			○	○	○				

氏　　名	所　　属	第1期 '81.6.1～ '83.5.31	第2期 '83.6.1～ '85.5.31	第3期 '85.6.1～ '87.5.31	第4期 '87.6.1～ '89.5.31	第5期 '89.6.1～ '91.5.31	第6期 '91.6.1～ '93.5.31	第7期 '93.6.1～ '95.5.31	第8期 '95.6.1～ '97.5.31	第9期 '97.6.1～ '99.5.31
伊東　　椒	東北大理教授，徳島文理大薬教授			○	○	○				
鈴木　　進	東北大金材研所長			○						
豊沢　　豊	東大物性研所長，中央大理工教授			○	○	○	○			
平野　龍一	東大名誉教授			○	○					
藤田　栄一	大阪薬科大学長，京大名誉教授				○	○	○			
西原　春夫	早稲田大学総長				○	○				
倉田　道夫	三菱瓦斯化学(株)顧問				○	○				
朽津　耕三	長岡技科大教授，城西大理教授				○	○	○	○		
田丸　謙二	東京理科大理教授				○	○	○			
早川　幸男	名古屋大学長				○'87.7.22～	○	○'92.2.5 死亡			
千原　秀昭	阪大理教授，(社)化学情報協会専務理事				○	○	○	○		
米澤貞次郎	近畿大理工学総合研教授，近畿大理工教授				○	○	○	○		
赤池　弘次	統計数理研究所長					○	○	○		
三ヶ月　章	日本学術振興会学術相談役，東大名誉教授					○	○			
伊藤　昌壽	東レ(株)相談役最高顧問						○	○	○	
佐々木慎一	サイエンスクリエイト(株)常任顧問						○	○	○	
佐野　博敏	東京都立大学長						○			
櫻井　英樹	東北大理学部長，東北大理教授						○	○		
松永　義夫	神奈川大理教授						○	○	○	
秋本　俊一	学士院会員							○	○	
岩村　　秀	九大有機化学基礎研究センター教授							○	○	
加藤　延夫	名大総長							○	○	○
黒田　晴雄	東京理科大総合研教授							○	○	○
塩野　　宏	成蹊大法教授							○	○	○
田中　　久	前京都薬科大学長							○	○	

氏　名	所　属	第1期 '81.6.1～ '83.5.31	第2期 '83.6.1～ '85.5.31	第3期 '85.6.1～ '87.5.31	第4期 '87.6.1～ '89.5.31	第5期 '89.6.1～ '91.5.31	第6期 '91.6.1～ '93.5.31	第7期 '93.6.1～ '95.5.31	第8期 '95.6.1～ '97.5.31	第9期 '97.6.1～ '99.5.31
堀　幸夫	金沢工業大副学長							○	○	
森本　英武	(株)豊田中央研顧問							○	○	
守谷　亨	東京理科大理工教授							○	○	
大瀧　仁志	立命館大理工教授								○	○
清水　良一	統数研所長								○	○
田隅　三生	埼玉大理教授，理学部長								○	○
土屋　荘次	日本女子大理教授								○	○
又賀　昇	(財)レーザー技術総合研第5研究部長								○	○
丸山　和博	京都工繊大学長								○	○
大塚　榮子	北海道大薬教授									○
京極　好正	大阪大たんぱく質研所長									○
後藤　圭司	豊橋技科大学長									○
高橋　理一	(株)豊田中央研取締役副所長									○
中西　敦男	(社)日本化学会常務理事									○
細矢　治夫	お茶の水女子大理教授									○
本多　健一	東京工芸大学長									○
安岡　弘志	東京大物性研所長									○
山崎　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 ～ '99.5
Charles S. Parmenter（インディアナ大学教授）'97.6 ～ '99.5

Wolfgang Kiefer（ビュルツブルク大学教授）'99.6 ～
Richard N. Zare（スタンフォード大学教授）'99.6 ～

6-2　歴代の運営に関する委員会委員（1975 ～ 1981）

氏　名・所　属（当　時）	'75.7.15～ '77.3.31	'77.4.1～ '78.3.31	'78.4.1～ '79.3.31	'79.4.1～ '80.3.31	'80.4.1～ '81.3.31
浅原　照三　芝浦工大工教授	○	○			
伊藤　光男　東北大理教授	○				
井口　洋夫　分子研教授	○	○	○	○	○
大野　公男　北大理教授	○	○	○	○	○
角戸　正夫　阪大たんぱく研所長	○	○	○		
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　　昇　阪大基礎工教授	○				
村田　好正　学習院大理教授	○	○ (東大物性研助教授)	○	○	
山寺　秀雄　名大理教授	○				
吉田　善一　京大工教授	○				
和田　昭充　東大理教授	○	○			
廣田　榮治　分子研教授		○ (委員長)	○ (委員長)	○ (委員長)	○ (委員長)
伊東　　椒　東北大理教授		○	○		
大木　道則　東大理教授		○	○		
大瀧　仁志　東工大総合工研教授		○	○		
馬場　宏明　北大応用電研教授		○	○		
福井　謙一　京大工教授		○	○	○	
齋藤　喜彦　東大理教授		○		○	○
諸熊　奎治　分子研教授		○	○	○	
吉原經太郎　分子研教授		○			
霜田　光一　東大理教授			○	○	
武内　次夫　豊橋技大教授			○	○	
山本　常信　京大理教授			○	○	
岩村　　秀　分子研教授			○		
坂田　忠良　分子研助教授			○		
木下　　実　東大物性研助教授				○	
黒田　晴雄　東大理教授				○	○
山下　雄也　名大工教授				○	○
高谷　秀正　分子研助教授				○	
花崎　一郎　分子研教授				○	○
安積　　徹　東北大理助教授					○
志田　忠正　京大理助教授					○
鈴木　　洋　上智大理工教授					○
伊達　宗行　阪大理教授					○
田仲　二郎　名大理教授					○
千原　秀昭　阪大理教授					○
土屋　荘次　東大教養助教授					○
永沢　　満　名大工教授					○
務台　　潔　東大教養助教授					○
藤田純之佑　名大理教授					○
塚田　　捷　分子研助教授					○

6-3　歴代の運営協議員（1981～）

◎　会長（議長）　　人－人事選考部会に属する運営協議員

（副）　副会長（副議長）　共－共同研究専門委員会

氏　　名	所　　属	第1期 '81.5.1～ '83.4.30	第2期 '83.5.1～ '85.4.30	第3期 '85.5.1～ '87.4.30	第4期 '87.5.1～ '89.4.30	第5期 '89.5.1～ '91.4.30	第6期 '91.5.1～ '93.4.30	第7期 '93.5.1～ '95.4.30	第8期 '95.5.1～ '97.4.30	第9期 '97.5.1～ '99.4.30
伊藤　憲昭	名大工教授	○共								
大野　公男	北大理教授	○人	○							
角戸　正夫	阪大たんぱく研所長	○(副)								
朽津　耕三	東大理教授	○人	○人							
鈴木　　洋	上智大理工教授	○								
千原　秀昭	阪大理教授	○人	○							
土屋　荘次	東大教養学教授	○共 (共～'82.4.30)		○						
豊沢　　豊	東大物性研教授	○人								
廣田　　襄	京大理教授	○人 (人～'82.3.31)		○人	○(副)・人					
米澤貞次郎	京大工教授	○共 (共～'82.5.1)								
井口　洋夫	分子研教授	◎人	◎人	◎						
岩村　　秀	分子研教授	○人・共	○人	○人	○～'87.5.31					
木村　克美	分子研教授	○共	○共	○人・共	○人・共	○ (◎'90.1.29～)	○ (◎～'92.3.31)			
花崎　一郎	分子研教授	○	○	○	○	○共	○人・共	○人・共	○	
廣田　榮治	分子研教授	○人	○人	○人	○	○ (◎～'90.1.16)				
藤山　常毅	分子研教授	○ ('82.4.30死亡)								
諸熊　奎治	分子研教授	○人・共 (共～'82.4.30)	○人	○人	○共	○人	○人 (◎～'92.2.14)			
吉原經太郎	分子研教授	○人・共	○人・共	○人・共	○人	○人		○人	◎	
田中　郁三	分子研教授(客員)(東工大理教授)	○								
笛野　高之	分子研教授(客員)(阪大基礎工教授)	○	○人							

氏　名	所　属	第1期 '81.5.1～ '83.4.30	第2期 '83.5.1～ '85.4.30	第3期 '85.5.1～ '87.4.30	第4期 '87.5.1～ '89.4.30	第5期 '89.5.1～ '91.4.30	第6期 '91.5.1～ '93.4.30	第7期 '93.5.1～ '95.4.30	第8期 '95.5.1～ '97.4.30	第9期 '97.5.1～ '99.4.30
山寺　秀雄	分子研教授(客員)(名大理教授)	○								
田仲　二朗	名大理教授	○ (共～'82.5.1)	○人							
伊藤　光男	東北大理教授		○	○(副) 人						
木村　雅男	北大理教授		○○共							
黒田　晴雄	東大理教授		○共							
高柳　和夫	宇宙研教授		○	○						
中島　　威	東北大理教授		○人							
中村　宏樹	分子研教授	○ (共～'82.5.1)	○共	○	○人	○人	○共	○人	○	○
丸山　有成	分子研教授(客員)(お茶女大理教授)		○	○	○	○人	○人	◎○		
山本　明夫	分子研教授(客員)(東工大名誉教授)		○		○	○				
茅　　幸二	慶應大理工教授			○共	○共	○共				
菅野　　暁	東大物性研教授			○	○					
坪村　　宏	阪大基礎工教授			○人						
細矢　治夫	お茶女子理教授			○人	○人					
又賀　　昇	阪大基礎工教授			○共	○～'88.3.31					
松永　義夫	北大理教授			○人	○人					
北川　禎三	分子研教授			○共	○人・共	○人・共	○	○人	○人	○
齋藤　一夫	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　　徹	東北大理教授				○人	○人				
原田　義也	東大教養学教授				○人	○(副)人				
松尾　　拓	九大工教授				○共					
丸山　和博	分子研教授(客員)(京大理教授)			○	○'88.6.1～					
大瀧　仁志	分子研教授				○'88.4.1～	○	○共			
薬師　久彌	分子研教授				○'88.9.1～	○共	○人	○人	○共	○共
木田　茂夫	分子研教授				○～'88.3.31					
岩田　末廣	分子研教授					○人	○人	○'94.4.1～	○人	○人
志田　忠正	京大理教授					○人	○人			
田隅　三生	東大理教授					○人	○			
仁科雄一郎	東北大金材研教授					○共	○			

氏　　名	所　　属	第1期 '81.5.1～ '83.4.30	第2期 '83.5.1～ '85.4.30	第3期 '85.5.1～ '87.4.30	第4期 '87.5.1～ '89.4.30	第5期 '89.5.1～ '91.4.30	第6期 '91.5.1～ '93.4.30	第7期 '93.5.1～ '95.4.30	第8期 '95.5.1～ '97.4.30	第9期 '97.5.1～ '99.4.30
村田　好正	東大物性研教授					○	○(副)			
中筋　一弘	分子研教授					○	○人	○人 (～'94.3.31)		
飯島　孝夫	学習院大理教授						○人	○(副)		
伊藤　公一	大阪市立大理教授						○人	○人		
小川禎一郎	九大総合理工教授						○共	○共		
小尾　欣一	東工大理教授						○共	○		
京極　好正	阪大蛋白研教授						○人	○人		
田中　晃二	分子研教授						○	○共	○人	○人
齋藤　修二	分子研教授						○～'92.4.1	○共	○共	◎共
川崎　昌博	北大電子科学研教授							○人	○人	
近藤　　保	東大理教授							○人	○(副)人	
斎藤　軍治	京大理教授							○	○	
塚田　　捷	東大理教授							○共	○共	
山口　　兆	阪大理教授							○人	○人	
宇理須恆雄	分子研教授							○	○共	○共
中村　　晃	分子研教授							○		
小杉　信博	分子研教授								○人	○人
渡辺　芳人	分子研教授								○共	○共
大澤　映二	豊橋技科大工教授								○	○共
生越　久靖	福井高専校長								○	○
小谷　正博	学習院大理教授								○人	○人
西　　信之	分子研教授								○人	○人
三上　直彦	東北大大学院理教授								○共	○人
岡田　　正	阪大大学院基礎工教授									○
加藤　重樹	京大大学院理教授									○人
小谷野猪之助	姫路工業大理教授									○共
関　　一彦	名大大学院理教授									○人
田中　武彦	九大理教授									○人
籏野　嘉彦	東工大理学部長									○(副)
小林　速男	分子研教授									○人

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 相関領域研究系 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。

6-6　岡崎国立共同研究機構分子科学研究所点検評価規則

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。

6-7　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。