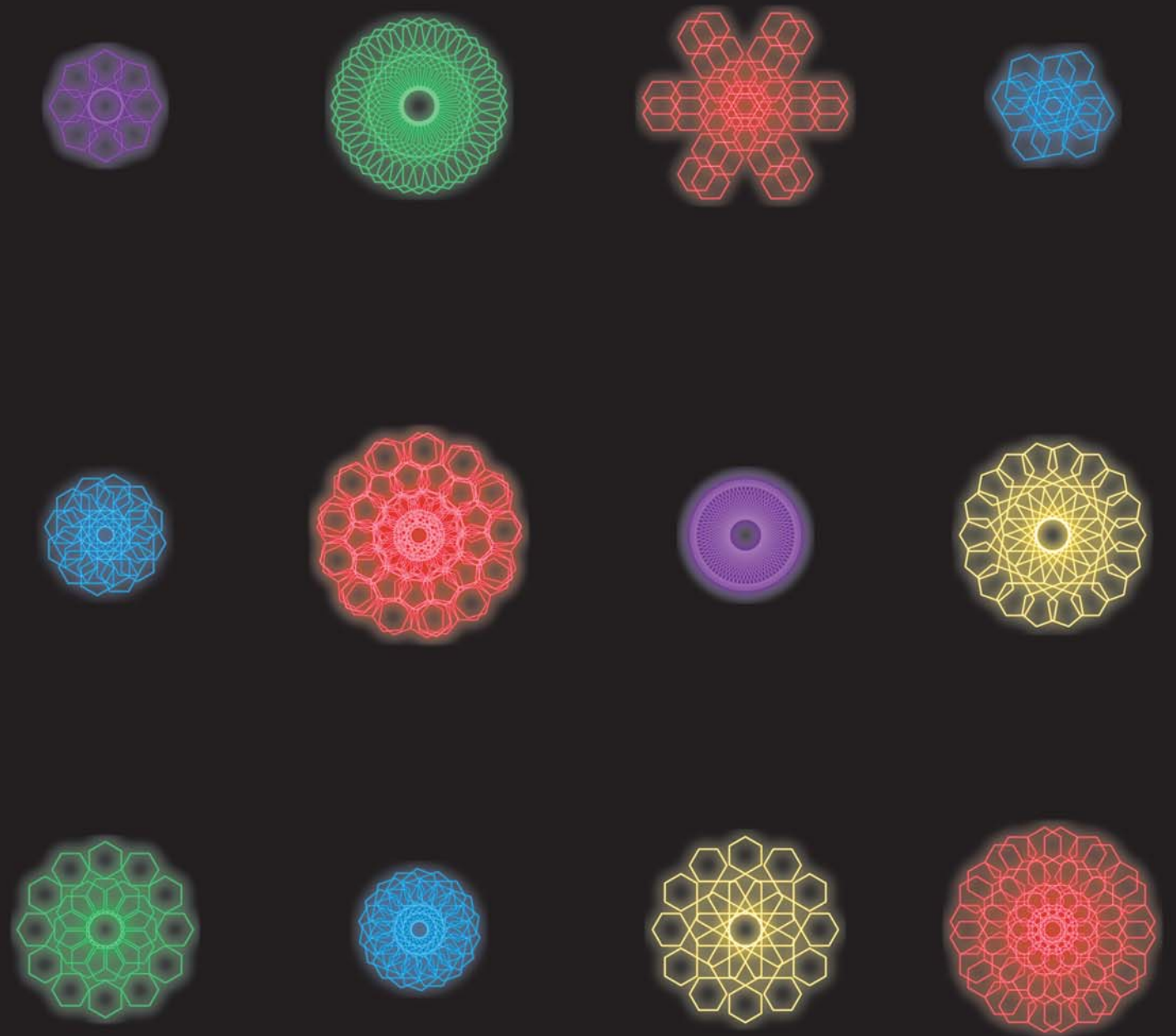


NATIONAL INSTITUTES OF NATURAL SCIENCES
IMS [Institute for Molecular Science]

大学共同利用機関法人 自然科学研究機構

分子科学研究所



限りなき分子の謎に挑み 分子の可能性を広げ続けます

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す。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ます。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、その正しい利用を図るのみでなく、さらに進んで物質循環の原理を取り入れなければなりません。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ります。



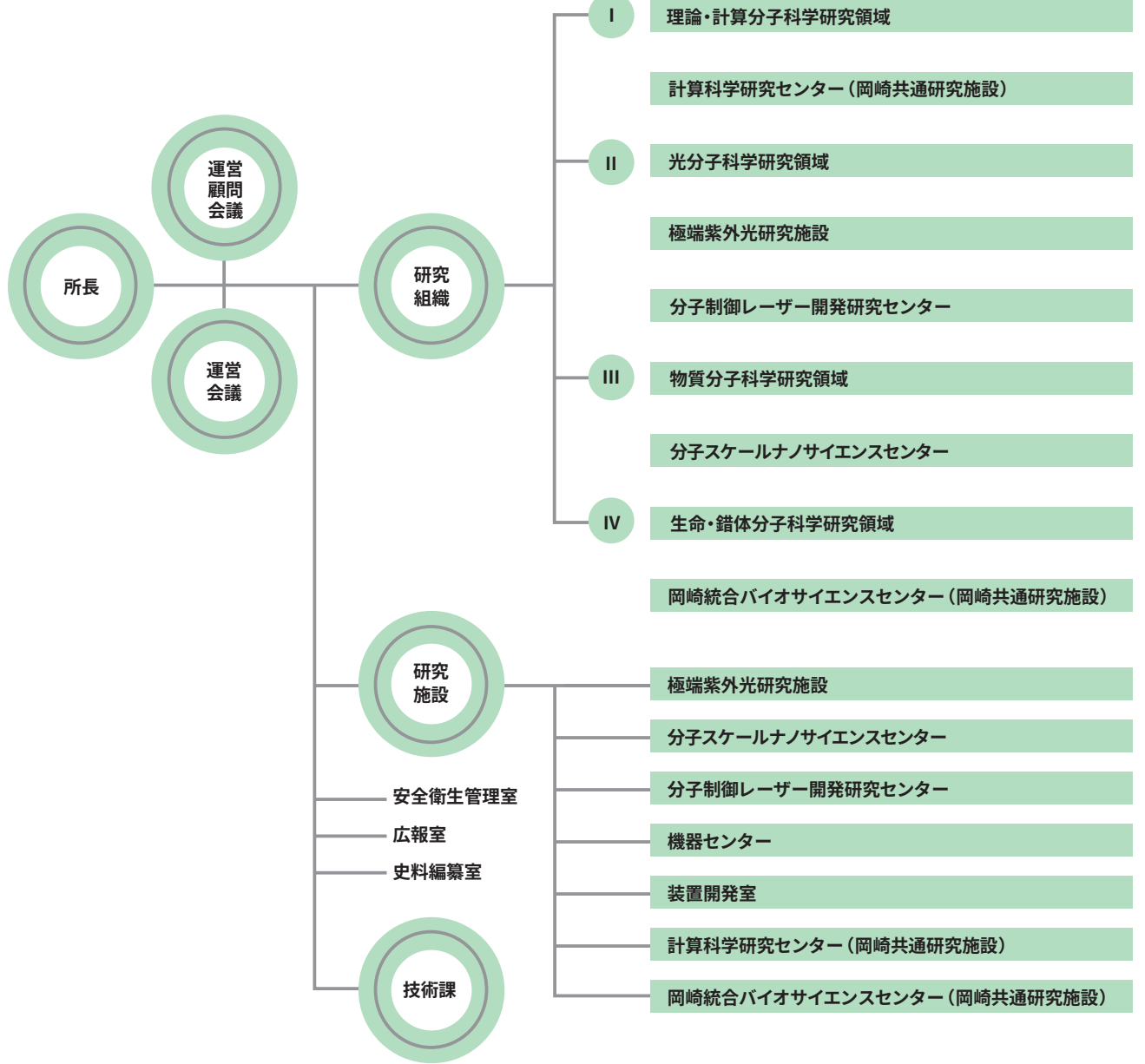
法人化が実施されてから4年目に入りましたが、様々な反省の上に立って、将来の国家100年の計にとって最も基本的である「学術と文化の発展」の観点から再検討を行う必要があるでしょう。現在の日本の学術政策は些か深刻な状況にあると言わざるを得ません。これを改善する努力をすると共に、研究者はこの逆境をバネとして独創性ある研究に励まねばなりません。

分子研 から概算要求していました「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」は調査費相当の予算しか付きませんでした。平成19年度より新しい事業項目として認められ立ち上がることとなりました。将来の有効なシステム構築を目指した体制作りを進めていく所存です。分子研が責任を持って進めているその他の特別プログラムも順調に成果を上げてきています。平成18年度からは Asian Core Program in Molecular Science が新たにスタートし、中国、韓国、台湾との連携を深め、共同研究の推進と共に若手研究者の育成をも目指した活動が始まっています。

また、30年以上続いた分子研の組織が平成19年4月から再編されました。研究施設と研究系との間の協力体制を一層深めると共に、領域間の連携をも促進し活性を高めていくことが狙いです。第一期中期計画の評価作業も始まり、分子研においても、研究所全体の自己点検評価の準備が進められています。世界における分子科学の中核として更なる発展を期するために、各方面の皆様方のなお一層のご支援を心よりお願い申し上げます。

平成19年4月
自然科学研究機構分子科学研究所
所長 中村 宏樹

[分子科学研究所の組織図]



●研究体制

分子科学研究所の研究職員は研究領域あるいは研究施設に所属しています。技術課に属する技術職員は主に研究施設に配置されています。また、共同利用とは異なる安全衛生や広報などの活動は、平成16年度の法人化後、順次、専任職員を配置して、組織化しつつあります。さらに、同じく大学共同利用機関法人自然科学研究機構に属する基礎生物学研究所、生理学研究所とともに、岡崎キャンパス内に岡崎共通研究施設を設置しています。共通施設のうち、計算科学研究センターに属する3研究グループと岡崎統合バイオサイエンスセンターに属する4研究グループは、分子科学研究所に併任しており、大学共同利用機関分子科学研究所の一員として等しく大学等の研究者の共同研究・共同利用を推進・支援する体制をとっています。

●沿革

■ 昭和50年4月
分子科学研究所創設(昭和50年4月22日)
機器センター設置(～平成9年3月)
装置開発室設置

■ 昭和51年5月
化学試料室設置(～平成9年3月)

■ 昭和52年4月
電子計算機センター設置(～平成12年3月)
極低温センター設置(～平成9年3月)

■ 昭和56年4月
岡崎国立共同研究機構創設

■ 昭和57年4月
極端紫外光実験施設設置

■ 昭和59年4月
錯体化学実験施設設置(～平成19年3月)

■ 昭和63年10月
総合研究大学院大学開学
数物科学研究所(～平成16年3月、以降は物理科学研究所)
構造分子科学専攻、機能分子科学専攻

■ 平成9年4月
分子制御レーザー開発研究センター設置
分子物質開発研究センター設置(～平成14年3月)

■ 平成12年4月
共通研究施設設置(統合バイオサイエンスセンター、計算科学研究センター)

■ 平成14年4月
分子スケールナノサイエンスセンター設置

■ 平成16年4月
大学共同利用機関法人自然科学研究機構創設

■ 平成19年4月
4研究領域に研究組織再編
機器センター再設置

見えない複雑な分子を描き出す

理論・計算分子科学

分子およびその集合体（気相、液相、固相）、さらには生体分子やナノ物質など複雑系や複合系に関する構造および機能を量子力学、統計力学、分子シミュレーションを中心とした理論・計算分子科学の方法により解明します。

液体や生体系のダイナミクスの理論解析

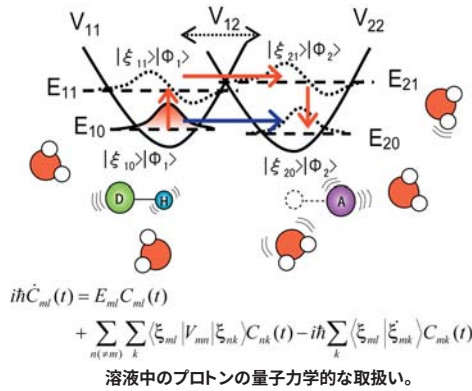
液体や生体系の運動は非常に複雑であり、これらの特徴は系の柔らかさと幅広い時間スケールをもつ運動の階層性にあります。これらの特徴を理解することは、凝縮系の運動だけでなく、溶液や生体内の化学反応や機能発現の理解にも不可欠です。分子動力学計算や電子状態理論などを駆使し、液体のダイナミクス、生体系における反応機構の解析を行っています。また、多次元分光法に基づき複雑なダイナミクスの解析も行っています。



シグナル伝達タンパク質 Ras。

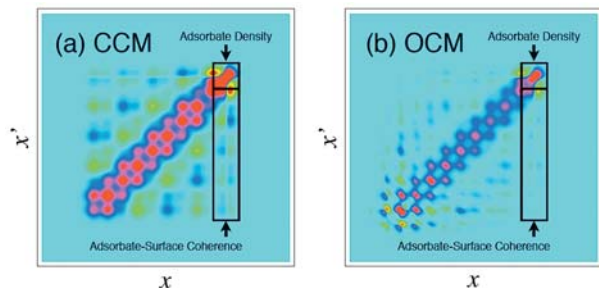
溶液中のプロトン移動の量子動力学

水素は最も軽い原子種のひとつであり、水溶液中におけるプロトン移動反応など、プロトンの運動が関わる動力学においては量子効果を無視することができません。このため、トンネリングはもちろんのこと、化学反応をゼロ点振動、振動励起と反応、それに続く振動緩和といった量子力学的概念で記述するために、プロトンに対しては量子力学的な運動方程式を導出する一方で溶媒に対しては古典的に取り扱う量子古典混合系近似の下での計算機シミュレーションを行っています。



電子ダイナミクスの理論的研究

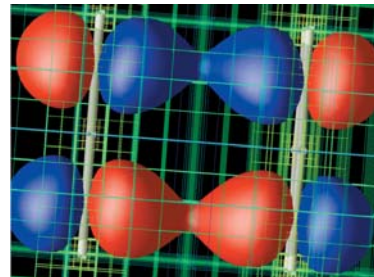
ナノメートルサイズ（ 10^{-9} m）の分子や半導体ナノ構造物質における電子の動的な変化（電子ダイナミクスと呼ぶ）は、このサイズ特有の線形・非線形光学応答や分子レベルでの伝導性、磁性等の興味深い物理的・化学的性質に強く関係します。私たちは、電子ダイナミクスを理論的・数値計算的手法を用いて解析し、ナノ構造物質の持つ新しい性質を明らかにすべく研究を進めています。



表面吸着原子系をクラスターモデルで近似した場合の1体縮約密度行列の実空間表示。

プレディクティブな量子化学計算の先進的理論開発

現代量子化学の電子状態理論は、コンピュータの高性能化とあいまって、実験事実の解明のみならず、気相化学反応を十分に予測しようとする手法として発展しています。最先端の理論開発として、共役分子や金属化合物に現れる複雑な電子状態を、根源的な量子多体問題として捉え、第一原理に基づき、先進的な理論と洗練された計算技術を駆使し、プレディクティブな計算精度で記述できる手法の開発を行い、リアルな分子科学の電子状態シミュレーションの実現を目指しています。



マルチ分解能表現による、スタックしたベンゼン二量体の分子軌道。

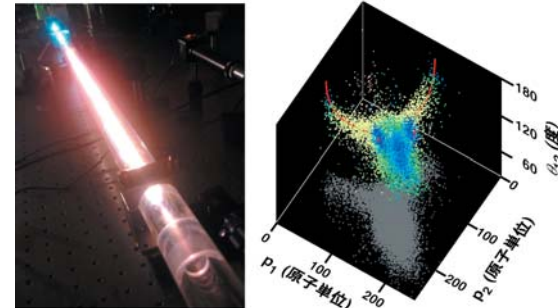
光を造る、光で観る、光で制御する

光分子科学

分子に光をあてると様々な興味深い性質を現したり、化学反応を起こしたりします。分子科学研究所では、分子の構造や性質を光で調べ、反応や物性を光で制御する研究を行っています。そのために必要となる高度な光源の開発も行っています。

強い光のパルスで分子を観る・操る

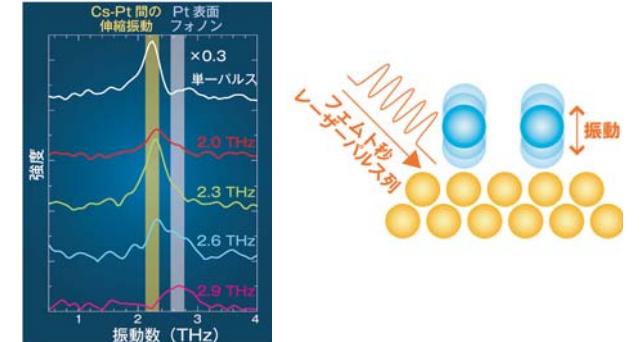
高出力かつ極めて短い時間幅をもつレーザーパルスを集光することによって、分子内のクーロン場に匹敵するほどの強い光の場（ $\sim 10^{15}$ W/cm²）を発生させることができます。このような強レーザー場における分子は、その核間ポテンシャル形状が時間によって変化するなど、弱い光と相互作用した場合には観測されないような極めて特異なふるまいを示します。「分子が強い光とどのように相互作用するか」を明らかにすることによって、化学反応の可視化や制御へむけた新たなアプローチへの展開が期待されます。



10フェムト秒以下の極めて短い時間幅をもつ高強度レーザーパルス発生（左）と、強レーザー場におけるCS₂の運動量相関図（右）。

光で固体表面上の原子の運動を観る

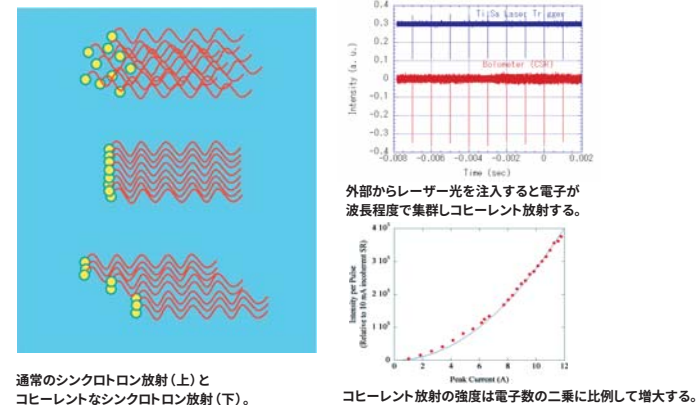
固体表面は化学反応における触媒作用など重要な反応の舞台ですが、そのメカニズムを理解するためには、そこでの原子・分子の動きを知ることが重要です。固体表面にたいへん短い光パルス（100兆分の1秒程度）を照射することにより表面に衝撃力を与えると、吸着した原子・分子はいっせいに時を同じくして運動を始めます。この様子を時々刻々と調べる手法を開拓しました。さらに、単独の衝撃光パルスを多数の光パルス列にすることにより、どのような吸着種の運動を開始させるかを選ぶことにも成功しました。



光パルス列を用いた固体表面での振動モードの制御。

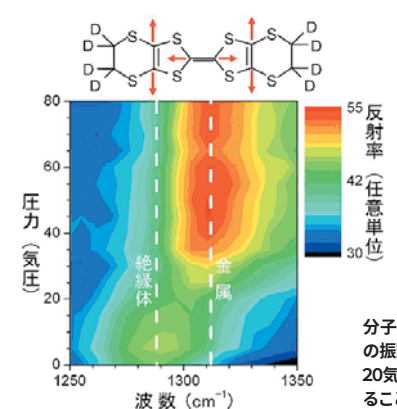
相対論的電子ビームを用いた光発生の研究

高エネルギー電子が磁場中で放出するシンクロトロン光は、ミリ波からX線にいたる広い波長域で質のよい光として幅広く利用されています。我々は広い波長域という特徴はそのままに、レーザーのような、コヒーレントという特徴をあわせ持ったシンクロトロン光を発生しようと研究を進めています。テラヘルツ波、可視光、紫外線の領域でそのようなシンクロトロン光の発生に成功し、今後はより短波長の領域で実現しようとしています。



放射光で物質の機能を探る

加速器から作り出される放射光は、テラヘルツ・遠赤外からX線までの広い波長範囲をカバーする非常に指向性のよい光です。最近の放射光の高輝度化によって、これまで不可能と考えられてきた極限環境下で現れる物質機能出現の起源を調べることが可能になりました。特に、分子性半導体等の高圧・高磁場・低温の環境下で現れる金属と絶縁体間の転移の起源を調べることで、電子相関を起源とした物質設計に重要な情報を提供することができます。



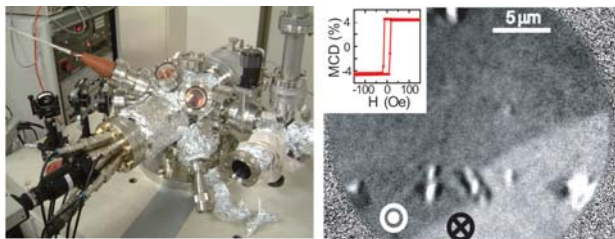
物質創成、機能制御、新しい観測手法の開発

物質分子科学

新たな現象や有用な機能の発見を目指して、新規分子の開発やそれらの高次集積化と、電気・光物性、反応性、触媒能などの研究を行っています。

新しいナノ磁気構造の観測手法開発

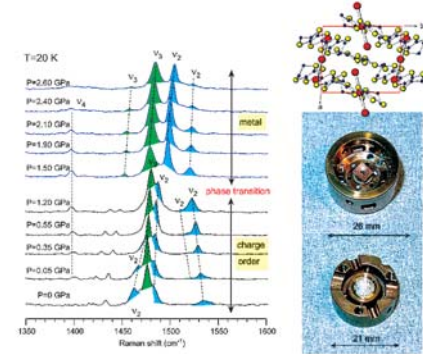
数10nmの空間分解能をもつナノ磁気構造の直接観測手段である磁気円二色性光電子顕微鏡法は、これまで専らシンクロトン放射X線を光源として広く利用されてきましたが、紫外光でも波長を適切に選ぶことで通常に比べて2桁程度も感度が向上することを発見し、実験室におけるレーザー利用でも放射光利用と同程度の感度でナノスケールでの磁区・磁壁観測が可能であることがわかりました。現在、パルスレーザーを用いて、放射光では到達困難なフェムト秒超高速時間分解装置を開発中です。



高感度紫外レーザー磁気円二色性光電子顕微鏡装置(左)と、これを用いたCs被覆12原子層Ni/Cu(001)薄膜の紫外磁気円二色性光電子顕微鏡像。光源はHeCdレーザー(波長325 nm)を利用し、視野は25 μmである。暗部・明部がそれぞれ上下磁区(N極が上向きか下向き)に対応している。

ラマン分光法で電子相を観る

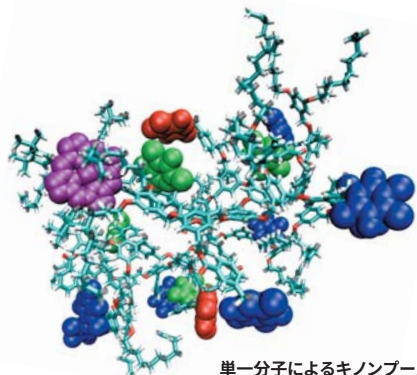
温度や圧力を変えると物質の性質は大きく変わることがあります。温度と圧力を変えて物質の性質がどのように変わるかを調べると、電子状態の地図(電子相図)を作ることができます。電子相図は物質の性質を理解し、新たな物質を開発する上で大変重要な役割を果たします。電子相図を作成するには様々な手法を組み合わせる必要がありますが、私たちはラマン分光法を用いて電気を流す有機物質(分子導体)の電子相図を研究しています。とくに、超伝導相の隣にどのような電子相が接しているかを調べています。



20 Kにおける分子導体のラマンスペクトルの圧力依存性。1 GPaは一万気圧。1.5万気圧以上で金属相へ相転移する。右図は高圧力を発生するための装置。

人工分子で光合成系を組み立てる

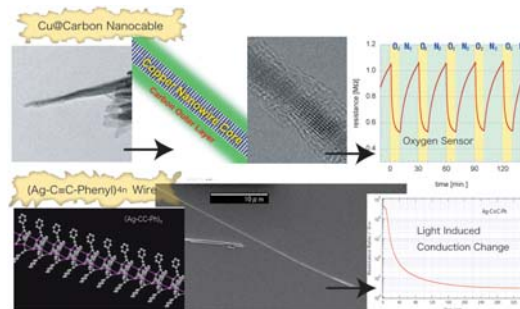
植物の光合成は、化学反応を組み合わせる太陽のエネルギーを見事に活用しています。その仕掛けは気が遠くなるほど複雑ですが、すべて分子でできています。こんな挑戦を突きつけられたら、分子科学者たるもの、受けて立たざるをえないでしょう。私たちは、いろいろな分子を使って、光合成系を人工的に組み立てるための部品作りをしています。その研究は、生命と物質の境界には何があるのか、という深い問いにもつながっていくのです。



単一分子によるキノープール。化学変換によって、光のエネルギーを分子内にためこむ。

金属-炭素、金属-有機分子ナノ構造体の創成

ワイヤーや粒子状のナノ金属と炭素集団やπ電子に富む有機分子を接合させると様々な機能が現れます。この界面は、ショットキー障壁という界面準位のギャップの発生により、大きな電位勾配を生じ気体分子の吸着や電気の伝導性に大きな影響を与えます。直径方向に10個程度の銅原子を持つミクロンの長さの金属銅ワイヤーの周りの炭素原子は、構造の乱れた炭素層を形成しこの中に酸素分子を吸着します。これは系にホールを供給し伝導度を増加させます。この過程は可逆的であるため酸素センサーとして機能します。



炭素被覆された銅ナノケーブル積層体の酸素と窒素の交互導入に伴う室温での電気抵抗値の変化(上)。フェニルエチニル銀超長分子ナノワイヤー結晶の積層体の光照射に伴う電気抵抗値の劇的減少効果(下)。

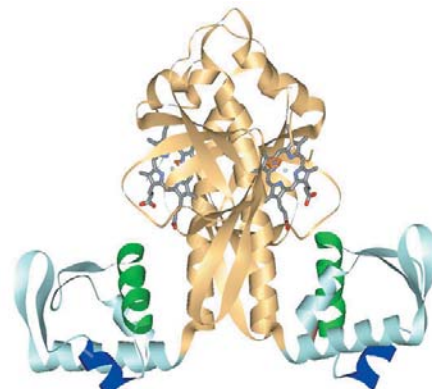
生体機能の実現と無駄のない化学反応へ

生命・錯体分子科学

生物が示す多彩な生体機能の発現が、どのような機構で行われているか分子レベルで解明するための研究を行っています。中心金属と配位子の組み合わせで金属錯体は多種多彩な機能を発現します。その特色を生かしてエネルギー・環境問題軽減のための高効率エネルギー変換、水中での有機化合物の分子変換、無機小分子の活性化を行っています。

金属タンパク質による生体機能の制御

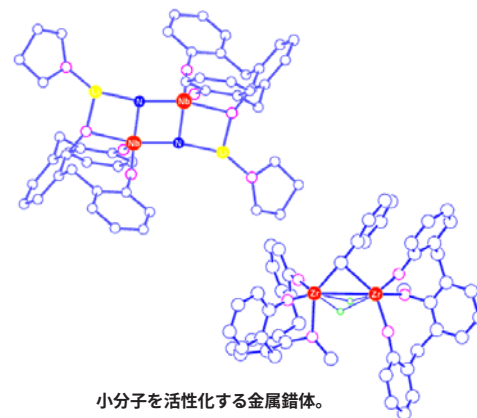
遷移金属イオンを含んだ金属タンパク質は、生体中におけるエネルギー代謝、物質代謝、情報伝達などに重要な役割を果たしています。このような様々な機能をもつ金属タンパク質の構造と機能を分子レベルで理解することなしに、生体機能の制御機構を解明することはできません。我々は、生化学、分子生物学、合成化学、無機化学、物理化学など多様な研究手法を駆使することにより、金属タンパク質の構造機能相関の解明を目指した研究を行っています。



鉄ポルフィリン錯体を含む一酸化炭素センサータンパク質の構造。

小分子活性化能をもつ金属錯体の設計

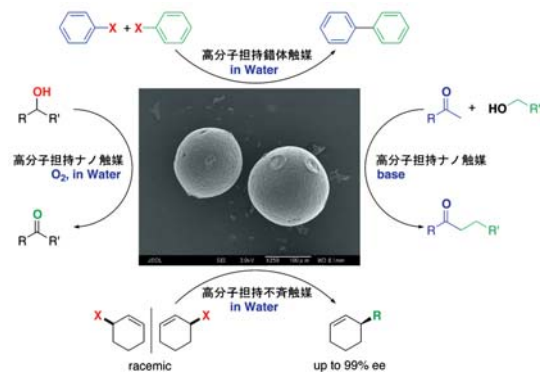
反応性の乏しい窒素分子、一酸化炭素、二酸化炭素などの小分子を穏和な条件下で活性化する方法の開拓は化学者に課せられた重要な研究課題です。私達は新しい金属錯体や有機金属化合物の合成および構造に関して実験を行っています。現在は、特異な分子変換反応を行う金属錯体の設計に着目して研究を進めています。例えば、窒素や一酸化炭素の安定な多重結合を簡単に切断できる前周期遷移金属ヒドリド錯体の合成に成功しています。



小分子を活性化する金属錯体。

水中不均一触媒システム

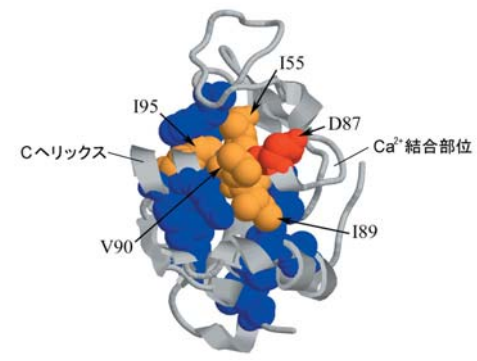
種々の触媒的有機分子変換工程(炭素-炭素結合形成、炭素-複素結合形成、アルコール酸素酸化等を含む)が、両親媒性高分子に担持した遷移金属錯体や遷移金属ナノ粒子を開発・利用することで、完全水系中で不均一条件下で達成されました。有機基質が疎水性相互作用に立脚し、両親媒性高分子の反応場の中に自発的に濃縮していく分子挙動が水中触媒システム駆動の鍵を握っています。



両親媒性高分子触媒のSEM像と代表的な水中触媒反応。

蛋白質の天然三次元構造が作られる仕組みを探る

蛋白質は、そのアミノ酸配列(=遺伝情報)に基づいて、どのようにしてその機能を持った立体構造を作り上げるのでしょうか。私たちは、このような興味から、(1)試験管内での蛋白質の巻き戻り過程の解析、(2)蛋白質の構造形成に関わる分子シャペロンの作用機構の解析などを行っています。これらの研究を達成するため、NMRを始めとする各種分光学的測定法、熱的測定法などの物理的測定手段とともに、遺伝子操作実験などの分子生物学的手法も用いています。



モデル蛋白質γイグロブリンの構造形成開始部位(オレンジと赤の実体積モデル)。

先端を走る研究者たち

理論・計算分子科学研究領域



永瀬 茂 教授
分子の設計と反応の理論と計算



平田 文男 教授
溶液中化学過程の統計力学に基づく理論的研究



斉藤 真司 教授
凝縮系におけるダイナミクスと分光に関する理論解析



信定 克幸 准教授
量子開放系分子における多電子ダイナミクスの理論



柳井 毅 准教授
量子化学の先進的電子状態モデリングの開拓と分子科学シミュレーション



米満 賢治 准教授
低次元分子性導体の物性理論

計算科学研究センター



岡崎 進 教授
複雑な古典凝集系並びに量子化された系の計算機シミュレーション

極端紫外光研究施設(UVSOR)



加藤 政博 教授
相対論的電子ビームを用いた光発生



木村 真一 准教授
シンクロトロン光による物質の物性発現メカニズムの研究



繁政 英治 准教授
分子の内殻光励起に起因する諸過程のダイナミクス

光分子科学研究領域



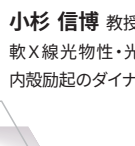
岡本 裕巳 教授
ナノ構造体の励起状態の動的イメージング



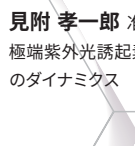
大島 康裕 教授
分子運動の量子状態操作法の開拓



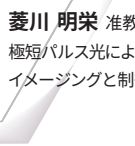
大森 賢治 教授
アト秒量子エンジニアリング



小杉 信博 教授
軟X線光物性・光化学：内殻励起のダイナミクス



見附 孝一郎 准教授
極端紫外光誘起素反応のダイナミクス



菱川 明栄 准教授
極短パルス光による反応イメージングと制御

分子制御レーザー開発研究センター



平等 拓範 准教授
分子科学応用を目指した全固体新型レーザーの研究

物質分子科学研究領域



西 信之 教授
クラスター化学から機能性ナノ複合体の構築へ



横山 利彦 教授
表面科学的制御を基にした新規磁性薄膜の創製・評価と新しい磁気光学測定手法の開発



薬師 久彌 教授
分子導体の物性化学



佃 達哉 准教授
ナノクラスターの構造と機能発現機構の解明



中村 敏和 准教授
磁気共鳴法による分子性固体の電子物性研究



江 東林 准教授
人工プログラム分子を用いたナノ構造体の構築と機能開拓



西村 勝之 准教授
新規固体核磁気共鳴法の開発と生体分子の構造・物性解析への適用



櫻井 英博 准教授
お椀型共役化合物「バッキーボール」の化学



加藤 晃一 客員教授
超高磁場核磁気共鳴法による生体高分子の高次構造解析

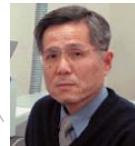
生命・錯体分子科学研究領域



宇理須 恒雄 教授
ナノ加工と生体分子情報受素子の研究



魚住 泰広 教授
遷移金属を基盤とする共働作用的触媒系の開発



田中 晃二 教授
化学エネルギーと電気エネルギーの相互変換を目指した錯体触媒の設計と合成



小澤 岳昌 准教授
生体分子の細胞内動態を解析する分析法の開発



川口 博之 准教授
機能性金属錯体分子の設計と合成

分子スケールナノサイエンスセンター



小川 琢治 教授
分子エレクトロニクスのための分子ナノ構造体の構築



鈴木 敏泰 准教授
新しい電子物性を目指した分子物質開発



永田 央 准教授
光合成を規範とする化学反応複合システムの構築

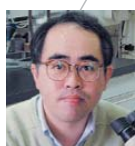
岡崎統合バイオサイエンスセンター



青野 重利 教授
新規な機能を有する金属タンパク質の構造と機能



桑島 邦博 教授
蛋白質の天然立体構造が形成される仕組みを解き明かす



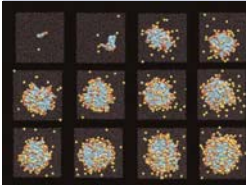
藤井 浩 准教授
金属酵素の機能発現の分子機構

文部科学省 最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用・次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 — ナノ分野グランドチャレンジ —

分子科学研究所は、平成18年度に始まった文部科学省「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトのアプリケーション開発拠点（ナノ分野）として研究を推進しています。私どもは、本プロジェクトにおけるナノ分野のグランドチャレンジとして、将来の社会や科学技術基盤を支える重要な要素となり得る次の3つの領域に取り組んでいます。(1) 太陽エネルギー等の「次世代エネルギー」、(2) 難病克服につながる「次世代ナノ生体物質」、(3) 分子デバイスなどの「次世代情報機能・材料」。これらの領域において、触媒（酵素）などナノスケールで機能が発現する物質の開発と物性の解明を可能とするために、次世代スーパーコンピュータを駆使する新しい計算科学の方法論やソフトウェアの開発を行います。

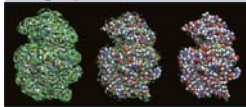
[次世代ナノ情報機能・材料]

[次世代ナノ生体物質]

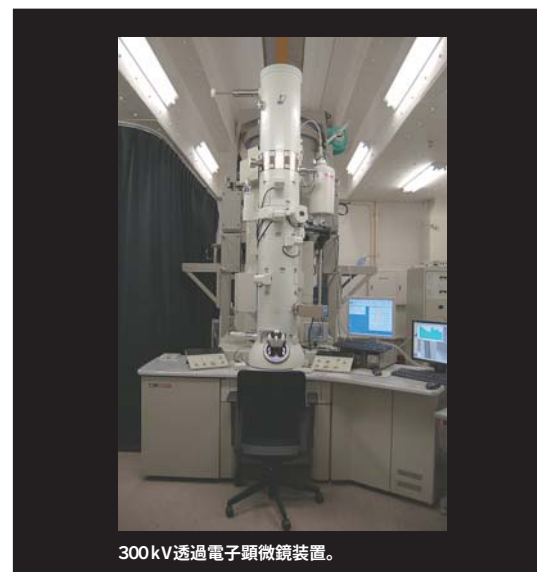


ドラッグデリバリー
(ミセルの分子動力学)

[次世代エネルギー]



タンパク質の周りの水の分布
(3D-RISMによって検出)



300 kV透過電子顕微鏡装置。



アト秒精度のコヒーレント制御実験。

文部科学省先端研究施設共用イノベーション創出事業ナノテクノロジー・ネットワーク 中部地区ナノテク総合支援： ナノ材料創製加工と先端機器分析

本プロジェクト（平成19～23年度）では、分子科学研究所が中核機関となっており、名古屋大学、名古屋工業大学、豊田工業大学の愛知県内3機関と連携することにより、中部地区ナノテクノロジー総合支援拠点を形成します。ナノ計測・分析、超微細加工、分子・物質合成の3領域において、最先端ナノ計測機器の利用支援、有機・生体関連分子等の多彩な物質群の設計合成評価支援、最先端設備技術による半導体超微細加工支援等を総合的に実施します。各要素単体の支援に留まらず、4機関の特徴を活かした連携融合支援を推進する予定です。

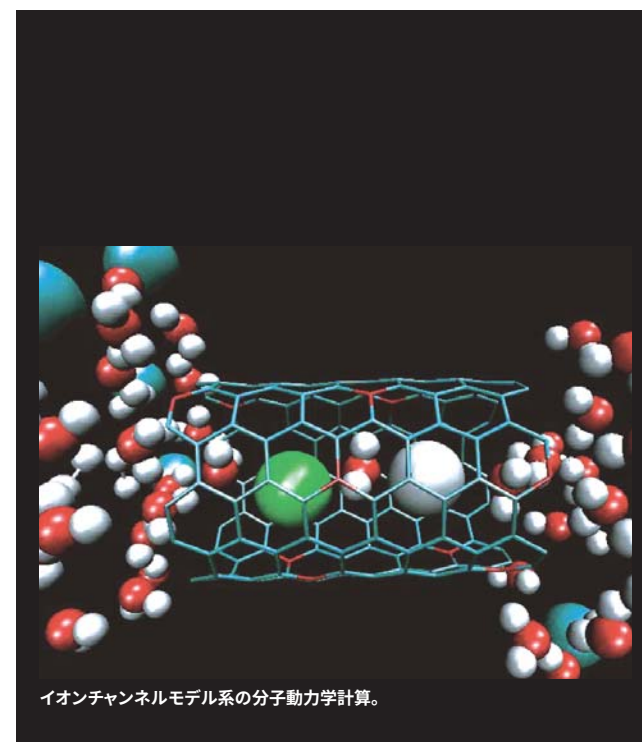
エクストリームフォトニクス

植物における光合成をはじめとして、光と分子との関わりは私たちの身近な自然の中で重要な役割を果たしています。そこで、ナノサイエンスから生命科学などの様々な分野に新たな方法論を提供し、光分子科学をさらに進展させるために「光を造る」、「光で観る」、「光で制御する」という観点から、理化学研究所と連携して本プロジェクトを遂行しています。研究の柱としては、新しいコヒーレント光源の開発、新しい顕微分光法の開発、光位相の精密制御による物質波のマニピュレーションや化学反応制御の研究があります。

巨大計算新手法の開発と
分子・物質シミュレーション中核拠点の形成

分野間連携による 学際的・国際的研究拠点形成

方法論の開発からそれに基づいた巨大計算にいたるまで、分子・物質の第一原理から出発した計算科学研究の中核拠点の形成を目的として、分子科学、核融合科学、生命科学、天文学といった異なる自然科学階層に属する各分野での異なる物質観、異なる方法論を互いに共有した融合することにより、特に大規模複雑系を構成する分子・物質に対する計算科学研究にブレークスルーを実現し、一方でそれぞれの分野においても新機軸を確立し、学際的新分野の形成を目指しています。具体的には、自然科学研究機構の各研究機関ならびに他大学、他研究機関と連携して、電子状態理論、分子動力学法、また統計力学等々の様々な理論に基づいた分子・物質に関わるシミュレーション研究を行い、ナノ物質や生体系などに代表される大規模複雑系の長時間動力学をも記述し得る新たな方法論開発を行うとともに、超並列演算など高度な計算科学手法の確立を目指しています。



イオンチャンネルモデル系の分子動力学計算。

化学系研究設備有効活用ネットワークの構築

80年代から90年代前半にかけて、日本政府はいわゆる「米百俵」の事例に習い、国家の学術的基盤の充実と社会的貢献の為に補正予算などを通して研究設備への投資を行ってきました。しかしながら、時の流れとともに、これら設備の老朽化が進み研究教育面に大きな障害が出て、深刻な問題となってきています。残念ながら、現在の国の財政状況でこれらすべてを新しいものに置き換えるのは不可能であり、有効な対策が望まれていました。幸い、多くの機器類は組み込まれているコンピューターを最新のものと入れ替える等の比較的安価な改良で生き返らせることが出来ます。こうして多くの設備を復活再生させると共に、全国の研究者が色々な大学の設備を、インターネットを通じて有効に活用出来るようにするためのネットワークの構築計画を立案しました。文部科学省はこれを認め平成19年度からの5ヶ年計画としてスタートさせてくれました。

平成19年4月7日に、全国72大学からの代表が岡崎コンファレンスセンターに集まり、「化学系研究設備有効活用ネットワーク協議会」を発足させ、規約の制定や今後の概算要求、及びネットワークの試行運用の方針などを決定しました。これによって、19年度は、まず全国119台の研究設備を相互利用として公開し、インターネットを通じた予約・課金システムをスタートさせます。5月2日の段階で約3000人のユーザー登録が行われ、全国の機器管理者による予約・管理システムのチェックを経て、全国利用がスタートします。39種類の多様な研究設備が公開され、宅急便による依頼計測も有効に活用されると思われます。

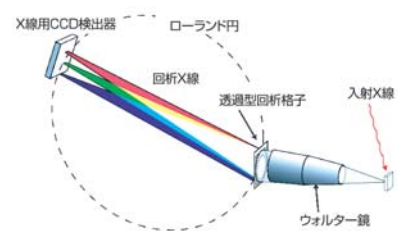


最先端の研究をささえる最先端の研究設備

研究施設 ■

極端紫外光研究施設 (UVSOR)

太陽光が地上に届いたときには、大気中の分子との相互作用の大きな極端紫外光（紫外線より波長が短く、X線よりは波長が長い）成分はなくなっています。このように極端紫外光は分子の光科学研究に不可欠な波長の光であり、地上では真空中で人工的に作り出す必要があります。分子科学研究所では、昭和58年にシンクロトロン放射の原理に従う円形加速器を建設して、分子科学研究に利用しています。平成15年に加速器を大改造し、20年を越えた現在も小型の放射光源施設として世界トップの高輝度性を誇っています。最近、その高輝度特性を活かして、他に先駆けて次世代型軟X線分光器の開発にも成功しています。UVSORという愛称で世界の研究者によく知られた先端施設です。



UVSOR施設。



UVSORで開発した次世代透過型軟X線分光器。

分子スケールナノサイエンスセンター

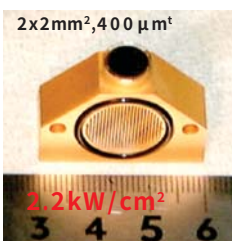
化学のフロンティアである「分子スケールナノサイエンス」を集中的に研究推進するセンターとして平成14年に発足しました。1つの専任部門、2つの併任部門、1つの客員流動部門から構成されており、新規分子・ナノ構造体の作成から、特異な化学反応や物理化学的性質を体系的に研究する組織になっています。世界最高性能を誇る920MHz核磁気共鳴(NMR)装置を共同利用に供している他、19年度より始まったナノテクノロジーネットワークプロジェクトを担当し、多くのナノサイエンス関連支援プログラムを提供しています。



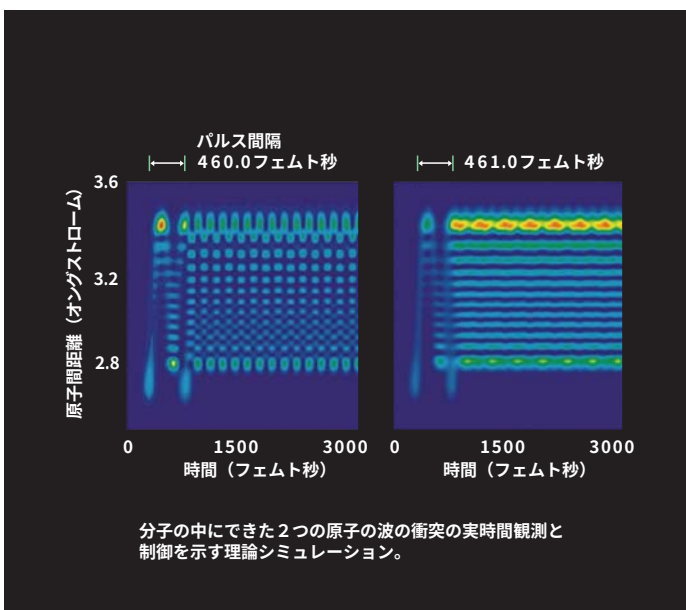
920MHz NMR装置。

分子制御レーザー開発研究センター

本センターは、光分子科学研究領域との連携のもとに、分子科学の新分野を切り拓くための装置、方法論の開発研究を行なう施設です。新たに開発される装置や方法論は、所内外の分子科学者との先進的な共同研究のリソースとして提供される予定です。主な開発研究分野としては、(1)テラヘルツから軟X線にいたる先端光源の開発、(2)高出力超短パルスレーザーを用いた量子制御法の開発、(3)高分解能光イメージングとナノ領域顕微分光法の開発などが挙げられます。また、本センターは理化学研究所との連携融合事業であるエクストリームフォトリクスの中核センターとしての役割を果たしています。

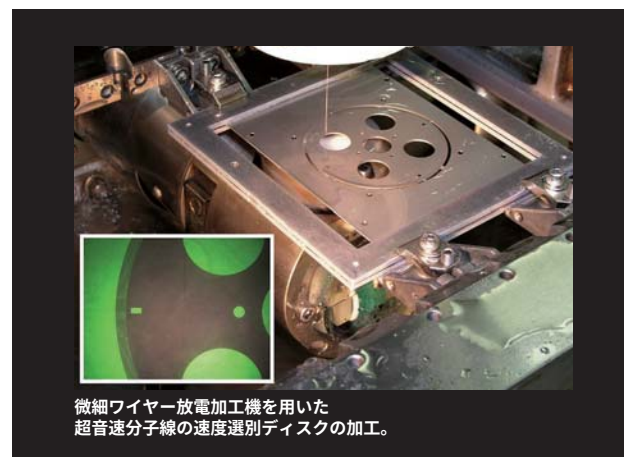


当センターで開発した手のひらサイズの高輝度レーザー光源。



CCD単結晶X線解析計。

高感度蛍光分光光度計。



微細ワイヤー放電加工機を用いた超音速分子線の速度選別ディスクの加工。

機器センター

機器センターは分子スケールナノサイエンスセンターと分子制御レーザー開発センターの汎用機器を統合して、平成19年4月に新たに発足しました。機器センターでの主たる汎用機器は山手地区のNMR、質量分析装置、粉末X線回折装置、明大寺地区のESR、SQUID磁束計、X線回折装置（粉末、単結晶）、希釈冷凍機、蛍光分光装置、紫外可視近赤外分光装置、円二色性分光装置などです。共同利用の形態は施設利用が主ですが、レーザーと上記の汎用機器を組み合わせた特殊仕様の実験も支援する予定です。この他、山手地区と明大寺地区にある液体ヘリウム液化装置や液体窒素貯蔵槽を用いて、液体ヘリウム・液体窒素の供給を行っています。また、平成19年4月に発足した化学系研究設備有効活用ネットワークの汎用機器の共同利用も支援します。

装置開発室

装置開発室では、分子科学研究に必要な実験装置を、所内外の研究者との協力によって、研究開発を進めています。施設内には実験装置の開発・製作のための、機械、エレクトロニクス、ガラス加工などの設備が配置され、分子科学研究所創設当初から研究者と共に様々な実験装置の開発によって高度な装置開発技術を蓄積し、分子科学の新たな研究に向けて支援しています。このように開発技術者と研究者との密接な対話により、独創的実験のできる研究環境を整備することを使命としています。

岡崎共通研究施設 ■

岡崎統合バイオサイエンスセンター

本センターは、分子科学、基礎生物学、生理学などの学際領域にまたがる諸問題に対し、総合的な視点と方法論を適用、駆使することにより、新しいバイオサイエンスを切り開くことを目的とし、分子研、基生研、生理研の三研究所の共通研究施設として設立されました。分子科学研究所に関連する教員として、教授3名、助教授1名が所属しています。

計算科学研究センター

我が国唯一の分子科学計算のための共同利用基盤センターとして、先進的な学術研究の発信はもとより岡崎地区の3研究所と全国の分子科学とバイオサイエンスの研究者に対して大学等では不可能な大規模計算を実行できるハード環境と様々なプログラムソフトを提供しています。平成18年度導入の「超高速分子シミュレータ」に加え、平成19年度はさらに「高性能分子シミュレータ」を導入予定であり、格段に大規模な計算が実行できる環境を提供します。



超高速分子シミュレータ。

国内での研究連携の中核として

共同利用研究

分子科学研究所は、極端紫外光研究施設、及び、計算科学研究センターなどの大型施設を「施設利用」という形で当該分野コミュニティの研究者の利用に供しています。また、分子制御レーザー開発研究センター、分子スケールナノサイエンスセンターなどの研究センターにおいて、先端的な装置を共同利用に供すると共に、測定法や物質合成手法の開発、共同研究の実施等を当該分野の研究者との連携の下で行う「課題研究」を支援し

■共同利用研究実施一覧 平成18年度

実施内容	件数	人数
課題研究	1	8
協力研究	84	208
所長招へい	140	140
研究会	14	347
電子計算機施設利用	137	547
UVSOR施設利用	113	494
その他施設利用	45	87
合 計	534	1831

ています。さらに、これらセンターならびに各研究系における研究資源を広く解放し、研究者の個別なニーズに応じて共同利用研究を行う「協力研究」があります。これらのハードウェアを中心とした共同利用と共に、当該分野の特定の課題に関する討論を深め、更なる新しい発展を探るための有効な手段として、所外の研究者の提案を基にしたワークショップである「分子研究会」を毎年複数回開催しています。

大学共同利用機関とは

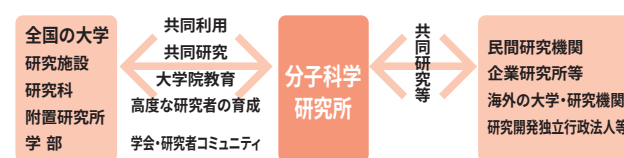
大学共同利用機関は、世界に誇る我が国独自の「研究者コミュニティによって運営される研究機関」であり、全国の研究者に共同利用・共同研究の場を提供する中核拠点として組織されました。このような機関としては、京都大学の一施設であった基礎物理学研究所（湯川記念館）が昭和28年に全国の理論物理学者の要望に応じて開放され、共同利用施設となったのが最初です。重要な研究課題に関する先導的研究を進めるのみならず、全国の最先端の研究者が一堂に会し、未来の学問分野を切り拓くと共に新しい理念の創出をも目指した活動を行う拠点として、個別の大学では実施困難な機能と場を提供するのがその特色です。その後、自然な流れとして、「大型施設の共同利用」や「学術資料等の知的基盤の整備」など、共同利用の新しい概念が加わり、研究者コミュニティによる運営方式を堅持しつつ、特定の大学には属

さない多くの大学共同利用機関が設立されました。このような発展過程を経てきた大学共同利用機関は、世界最高水準の学術研究を行う中核拠点として、以下に掲げる役割のいずれかを担っているのです。

- 独創的・先端的な学術研究を推進すると共に、全国の大学等の研究者コミュニティの高等研究機関として学術の進展に資する。
- 個別の大学では持ち得ない大規模な施設や設備を設置・運営し、先導的研究を推進すると共に、全国の大学等の研究者の利用に供する。
- 学術資料・情報の組織的調査・研究、収集、整理、提供を行い、知的基盤の充実に貢献する。

各機関が独自性と多様性を持ちながら上記の役割を担い、それぞれの研究分野における中核的研究拠点（COE:Center of Excellence）として、我が国の学術研究の発展に重要な貢献をしています。また、海外の研究機関や研究者との協力・交流を推進し国際的中核拠点としての役割をも果たしています。

■自然科学研究の中核的研究拠点



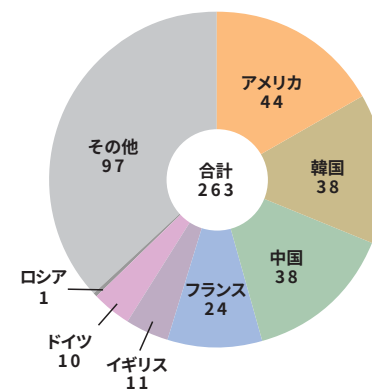
世界との交流連携

国際共同研究

分子科学研究所は創設以来、多くの国際会議の開催、多数の外国人研究員の受け入れ、および国際共同研究事業の積極的推進等を通して、国際的に開かれた研究所として高い評価を受けてきました。また、国際共同研究を更に推進するために、平成16年度より独自の国際共同研究プログラムを開始しています。このプログラムでは、(1) 海外の教授、准教授クラスの研究者の10日間程度の招へい、(2) 分子研側からの共同研究に関わる教員の海外出張、(3) アジアを中心とする若手外国人研究者の6ヶ月以内の滞在、等が可能です。

更に分子科学研究所では平成18年度より5カ年の計画で、日本学術振興会アジア研究教育拠点事業、「物質・光・理論分子科学のフロンティア（アジア・コア・プログラム）」を開始しました。ここでは分子科学研究所を中心に中国科学院化学研究所、韓国科学技術院自然科学部および台湾科学院原子分子科学研究所を中心とした研究交流を通して、分子科学の世界的研究教育拠点の構築、先端的若手研究者の育成に努めます。

外国人研究者の国別内訳（平成18年度）



豊かな研究資源が育む高度な人材

人材育成・大学院教育

本研究所は、分子科学における最先端の研究を推進するだけでなく、大学院学生の教育を行い、明日の分子科学を担っていく人材を育成することにも力を入れています。



総合研究大学院大学（総研大）は優れた設備や資料を持つ大学共同利用機関ならではの環境をフルに活かし、深い専門性と大きな視野を持つ研究者を育成するための大学院大学です。本研究所も総研大の基盤機関として物理科学研究科の基幹専攻として構造分子科学専攻と機能分子科学専攻を持ち、大学院学生の教育と研究を積極的に担っています。これらの専攻では学生一人当たりのスタッフが他大学に見られないほど多く、きめの細かい研究指導を行っています。大学院生は本研究所の優れた設備を利用することにより、世界第一線の研究を自ら行うことにより、研究者として必要とされる能力や技術を自分のものとしています。また、本研究所が

分子科学における世界とのインターフェイスを担う中核拠点であることから海外から多くの研究者が共同研究やセミナーを行うために日常的に訪れるため、きわめて国際的な環境の下で教育が行われています。この環境は国際的な発信能力を鍛える上でもたいへん役に立っています。これらの専攻で学び、学位を取得した卒業生の多くは、国立大学の教員、公的機関の研究員、日本学術振興会などを含む様々な機関の博士研究員、民間企業の研究員として活躍しています。

また、この他にも全国の大学から大学院学生を特別共同利用研究員として受け入れ、共同研究を通じた教育も行っています。

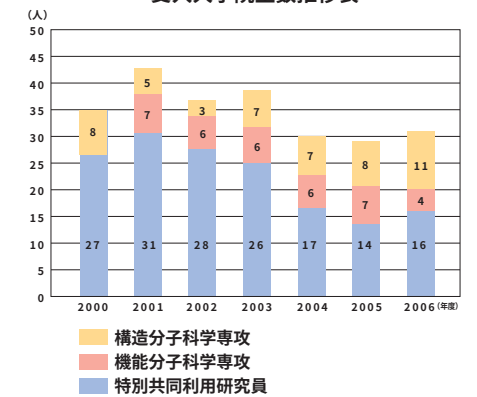
総合研究大学院大学（SOKENDAI）とは？

総合研究大学院大学（総研大）は昭和63年に、全国の大学共同利用機関を基盤機関として、新しい理念と組織の下に創設された学部を持たない大学院のみの大学です。本部を神奈川県葉山町に置き、学生のみならず研究者自身の総合性と学際性を高めることを目指して、学生セミナー、国際シンポジウム、共同研究等々のユニークな活動を本部で行いつつ、平素の授業や研究活動は各基盤研究機関において行っています。

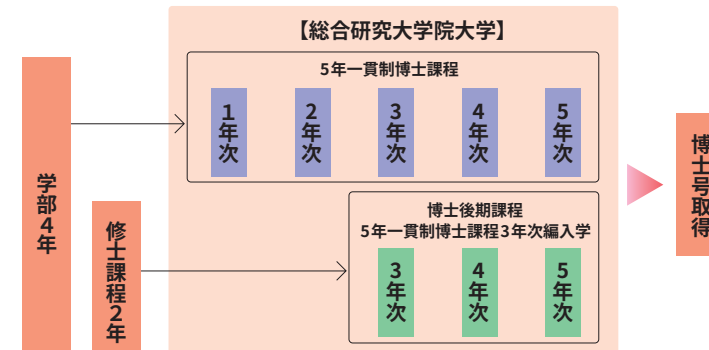


総研大葉山キャンパス。

受入大学院生数推移表



平成18年度より5年一貫制博士課程を導入しました。
詳細は<http://www.ims.ac.jp/as/>をご覧ください。



分子研では年間を通じて学生向けの催しを行っています。詳しくは分子研ホームページ www.ims.ac.jp をご覧ください。

分子科学研究所オープンキャンパス
(6月上旬)

夏の体験入学
(8月上旬)

大学院生のための公開講座
(夏季・冬季休暇中)



■岡崎共通施設

岡崎情報図書館

<http://www.lib.orion.ac.jp/>

岡崎情報図書館は、岡崎3研究所の図書、雑誌等を収集・整理・保存し、機構の職員、共同利用研究者等の利用に供しています。

【主な機能】

◎ライブラリーカードによる24時間利用

◎情報検索サービス

Web of Science、SciFinder Scholar 等



岡崎コンファレンスセンター

<http://www.orion.ac.jp/occ/>

学術の国際的及び国内的交流を回り、機構の研究、教育の進展に資するとともに、社会との連携、交流に寄与することを目的に平成9年2月に竣工しました。大会議室250名収容、中会議室150名収容、小会議室（2室）各50名収容出来ます。

岡崎共同利用研究者宿泊施設

<http://www.orion.ac.jp/lodge/>

日本全国及び世界各国の大学や研究機関から共同研究等のために訪れる研究者のために三島ロッジという共同利用研究者宿泊施設があります。三島ロッジは明大寺地区から徒歩10分の場所にあります。



運営

■顧問

研究所の研究、事業計画その他の管理運営に関して、研究所長の諮問に応じて助言等に当たります。

【運営顧問】

江崎信芳 京都大学化学研究所長

加藤伸一 豊田中央研究所代表取締役

土屋莊次 東京大学名誉教授

野口 宏 中日新聞編集局文化部長

【外国人運営顧問】

William H. Miller

米国カリフォルニア大学バークレー校教授

Alfred Laubereau

ドイツミュンヘン工科大学教授

【研究顧問】

廣田 襄 京都大学名誉教授

近藤 保 豊田工業大学招聘教授

玉尾皓平 理化学研究所フロンティア研究システム長

■運営会議

研究教育職員の人事等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ます。

【運営会議委員】◎…議長 ○副議長

阿波賀邦夫 名古屋大学物質科学国際研究センター教授

榎 敏明 東京工業大学大学院理工学研究科教授

加藤 昌子 北海道大学大学院理学研究院教授

関谷 博 九州大学大学院理学研究院教授

○田中健一郎 広島大学大学院理学研究科教授

寺嶋 正秀 京都大学大学院理学研究科教授

中嶋 敦 慶應義塾大学理工学部教授

藤田 誠 東京大学大学院工学系研究科教授

前川 禎通 東北大学金属材料研究所教授

山下 晃一 東京大学大学院工学系研究科教授

宇理須恒雄 生命・錯体分子科学研究領域教授

大森 賢治 光分子科学研究領域教授

岡本 裕巳 光分子科学研究領域教授

小川 琢治 分子スケールナノサイエンスセンター教授

小杉 信博 光分子科学研究領域教授

田中 晃二 生命・錯体分子科学研究領域教授

永瀬 茂 理論・計算分子科学研究領域教授

西 信之 物質分子科学研究領域教授

平田 文男 理論・計算分子科学研究領域教授

◎薬師 久彌 物質分子科学研究領域教授

横山 利彦 物質分子科学研究領域教授

運営会議に、次の人事選考部会及び共同研究専門委員会を置きます。

【人事選考部会】

阿波賀邦夫（名大院教授）

榎 敏明（東工大院教授）

田中健一郎（広大院教授）

寺嶋 正秀（京大院教授）

山下 晃一（東大院教授）

岡本 裕巳（分子研教授）

田中 晃二（分子研教授）

永瀬 茂（分子研教授）

西 信之（分子研教授）

横山 利彦（分子研教授）

【共同研究専門委員会】

加藤 晃一（名市大教授）

加藤 昌子（北大院教授）

中原 勝（京大化学研教授）

藤井 正明（東工大資源研教授）

宇理須恒雄（分子研教授）

西 信之（分子研教授）

薬師 久彌（分子研教授）

中村 敏和（分子研准教授）

信定 克幸（分子研准教授）

見附孝一郎（分子研准教授）

田中 晃二（分子研教授）

■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の連絡、共同研究専門委員会委員候補者等の推薦等に関することについて検討し、意見を述べます。

青木 秀夫（東大院教授）

雨宮 慶幸（東大院教授）

上村 大輔（名大院教授）

榎 敏明（東工大院教授）

加藤 礼三（理研主任研究員）

鈴木 俊法（理研主任研究員）

竜田 邦明（早大院理工学研究科長）

田原 太平（理研主任研究員）

寺嶋 正秀（京大院教授）

戸部 義人（阪大院教授）

中嶋 敦（慶應大教授）

藤井 正明（東工大教授）

山下 晃一（東大院教授）

山下 正廣（東北大院教授）

岡本 裕巳（分子研教授）

田中 晃二（分子研教授）

西 信之（分子研教授）

平田 文男（分子研教授）

見附孝一郎（分子研准教授）

■教授会議

専任・兼任・客員の教授・准教授で構成し、研究及び運営に関する事項について調査審議します。

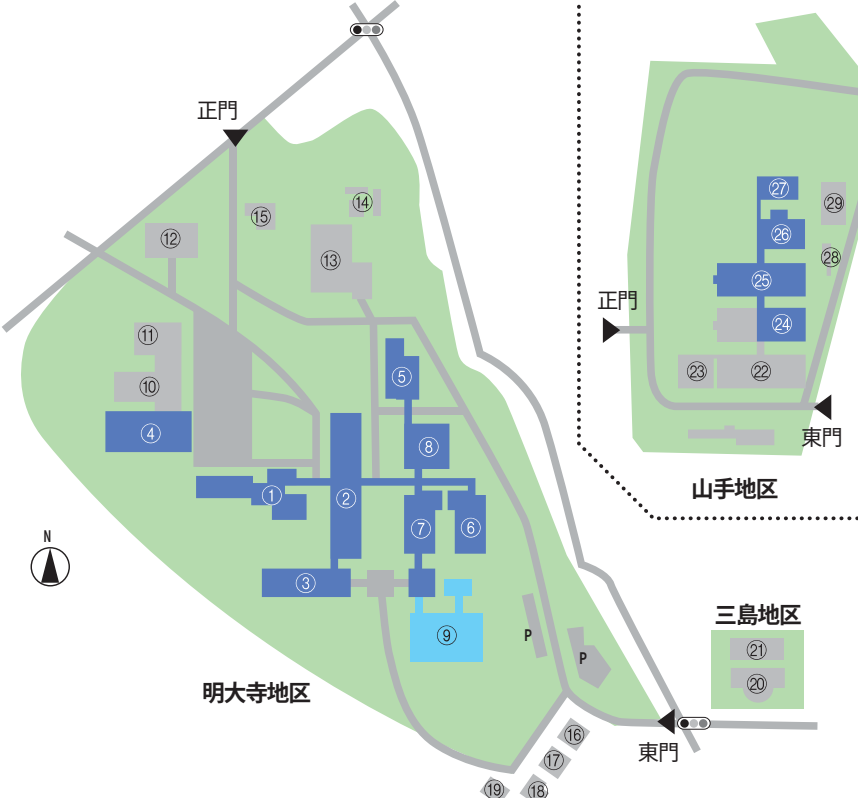
中期計画

文部科学大臣から提示された平成16年度から平成21年度までの中期目標に対して、自然科学研究機構として6年間で行う中期計画を立てました。中期計画を着実にを行うために毎年、年度計画を立て、年度終了後、実績報告書を文部科学省に提出することになっています。分子科学研究所は研究者個人の自由な発想に基づく基礎学術研究を中心に据えた研究所です。研究の神髄は計画通りに行かない意外性にあります。そのため、分子科学研究を支えている種々の研究設備も、限定した目的のためのものではなく、学問の多様性に対応できるものになっています。以下は、このような背景で立案した分子科学分野の中期計画(抜粋)です。

- 分子科学分野において、光・X線・電子線・磁場等の外場、極低温等を利用する最先端の物理化学的方法、分子物質の設計・合成手法、超高速計算機による理論シミュレーション等を駆使し、分子及び分子集合体の構造・機能等に関する実験研究並びに理論研究を行います。
- (1) 化学反応や分子物性を支配する普遍的な因子を理論的に解明し、反応予測や新物性の設計を可能とする分子理論を構築します。
 - (2) 精緻で高度な分子分光法を発展させ、分子や分子集合体の状態評価手法としての確立を図ります。併せて、実用的な物性評価装置、計測装置を提案します。
 - (3) 分光学や光化学反応の光源として、新しいレーザーの開発及び放射光による極端紫外光源の開発を行い、さらに化学反応動力学や新物質創成等の利用研究を推進します。
 - (4) 新しい機能を有する分子、ナノスケール分子素子、分子性固体等を開発し、物質開発の指針を確立するための物性研究を行います。
 - (5) 実験では解明不可能な化学現象・物理現象の根本的な理解を深めるため、理論及びコンピュータシミュレーションによる研究を進めます。

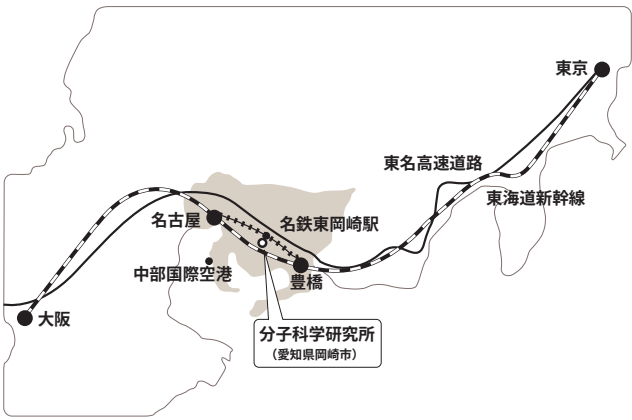
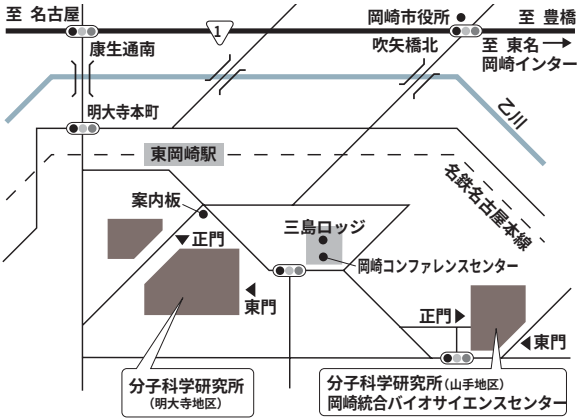


所内案内



施設	面積 m ²
① 研究棟	2,752
② 実験棟	8,857
③ 南実験棟	3,935
④ 計算科学研究センター棟	2,474
⑤ 極低温棟	1,527
⑥ 化学試料棟	1,063
⑦ レーザーセンサー棟	1,053
⑧ 装置開発棟	1,260
⑨ 極端紫外光実験棟	3,097
⑩ 事務センター棟	2,371
⑪ 図書館	2,002
⑫ 職員会館	1,575
⑬ エネルギーセンター	1,255
⑭ 廃棄物貯蔵庫	60
⑮ 警備員室	74
⑯ さくら保育園	97
⑰～⑱ 職員住宅	287
⑳ 岡崎コンファレンスセンター	2,863
㉑ 三島ロッジ	4,079
㉒ 山手1号館A	4,674
㉓ 山手1号館B	2,303
㉔ 山手2号館	8,453
㉕ 山手3号館	10,757
㉖ 山手4号館	3,813
㉗ 山手5号館	664
㉘ 実験排水処理施設	111
㉙ 高圧配電施設	440

アクセス



- 東京方面から
豊橋駅下車、名鉄(名古屋鉄道)に乗り換えて、東岡崎駅下車(豊橋―東岡崎間約20分)、南(改札出て左側)へ徒歩で約7分。
- 大阪方面から
名古屋駅下車、名鉄に乗り換え、東岡崎駅下車(名鉄名古屋―東岡崎間約30分)、南(改札出て左側)へ徒歩で約7分。

- 中部国際空港から
名鉄空港線: 中部国際空港駅から「特急」豊橋・東岡崎方面に乗り東岡崎駅下車(中部国際空港―東岡崎間約65分)、南(改札出て左側)へ徒歩で約7分。名鉄空港バス: JR岡崎駅に乗り、東岡崎駅下車(中部国際空港―東岡崎間約65分)、南へ徒歩で約7分。
- 自動車利用の場合
東名高速道路の岡崎ICを下りて国道1号線を名古屋方面に1.5km、吹矢橋北信号を左折。ICから約10分。

人員・予算

人員 (平成19年4月1日現在)							
区分	所長	教授	准教授	助教	小計	技術職員	合計
所長	1	—	—	—	1	—	1
研究領域	—	13 (5)	11 (8)	27	51 (13)	—	51 (13)
研究施設	—	2 (1)	6	12	20 (1)	—	20 (1)
技術課	—	—	—	—	—	37	37
合計	1	15 (6)	17 (8)	39	72 (14)	37	109 (14)

平成18年度決算額 (単位: 千円)	
区分	決算額
人件費	1,295,705
運営費・設備費	1,859,207
合計	3,154,912

平成18年度外部資金受入状況 ※1 (単位: 千円)	
区分	合計
科学研究費補助金 ※2	395,364
共同研究	40,832
受託研究 ※2	32,500
戦略的創造研究推進事業 (JST)	509,507
科学技術振興調整費等 (文科省等)	21,000
その他	563,007
小計	999,203
合計	999,203

※1 左記決算学を含む
※2 間接経費を含む