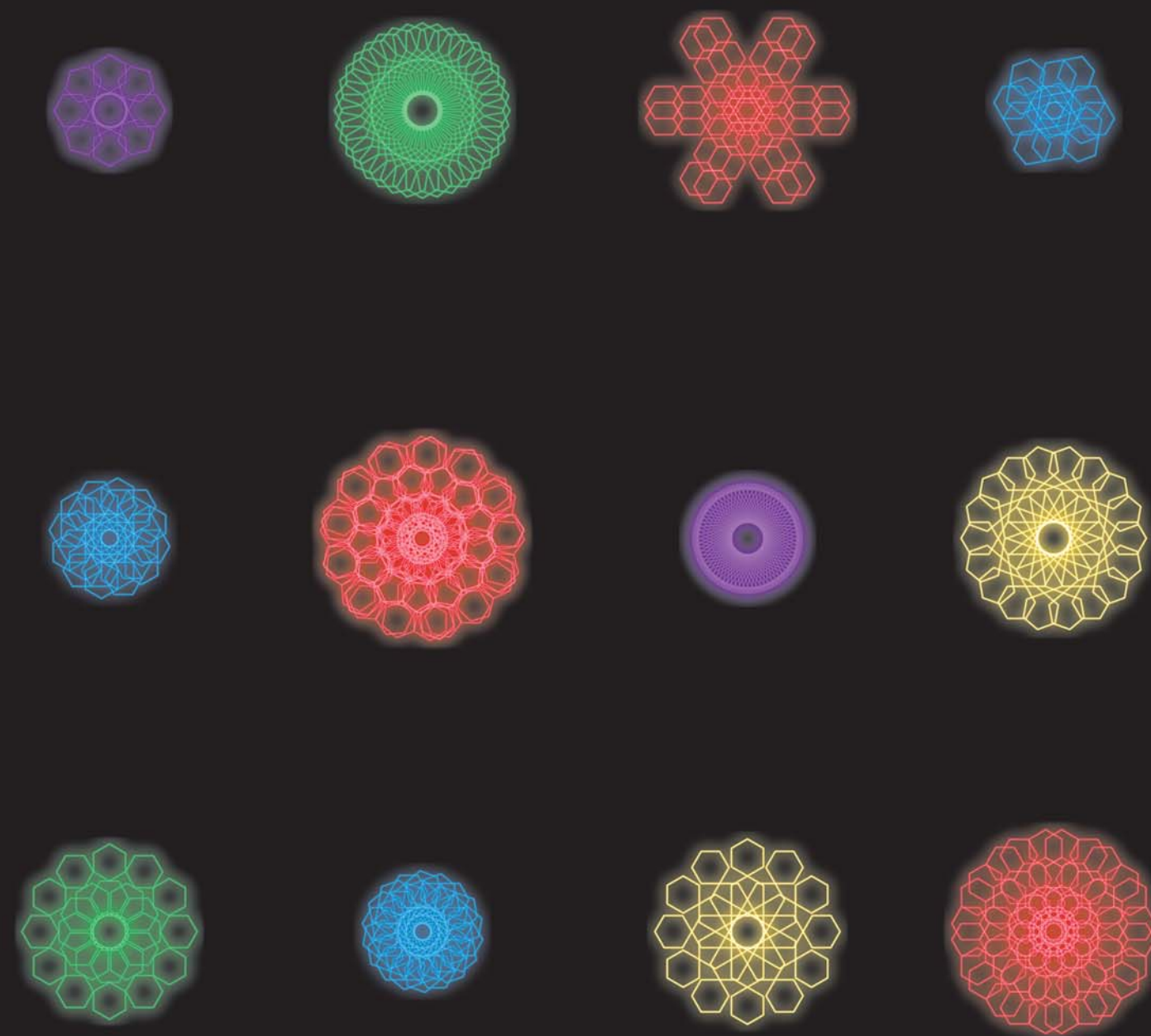


NATIONAL INSTITUTES OF NATURAL SCIENCES
IMS [Institute for Molecular Science]

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



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

明大寺地区:〒444-8585 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地
山手地区:〒444-8787 愛知県岡崎市明大寺町字東山5-1
TEL.0564-55-7000 FAX.0564-54-2254
<http://www.ims.ac.jp/>

2008.7

2008

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。



法人化されてから5年目となり、第一期中期計画に関する評価が本格的に始まっています。これら評価作業に伴ういわゆる評価疲れを始め、日本の学術行政には依然として極めて厳しいものがあります。日本が真の先進文化国家となるためには、「学術と文化」の発展のありようについて真剣に考え直す必要があるのではないのでしょうか。

学術研究の基盤崩壊を防ぐために考案し、全国72の大学が参加して構築された「化学系研究設備有効活用ネットワーク」は依然として僅かな予算しかついておりませんが、しっかりとした体制の構築を目指して行きます。将来は、一機関の通常の概算要求枠を越えた幅の広い取り扱いを考える必要があるでしょう。他分野においてもかかるシステムは有効だと考えますし、国の予算が潤沢なときであっても、これは予算を有効に活用できる意義深いシステムであると信じています。

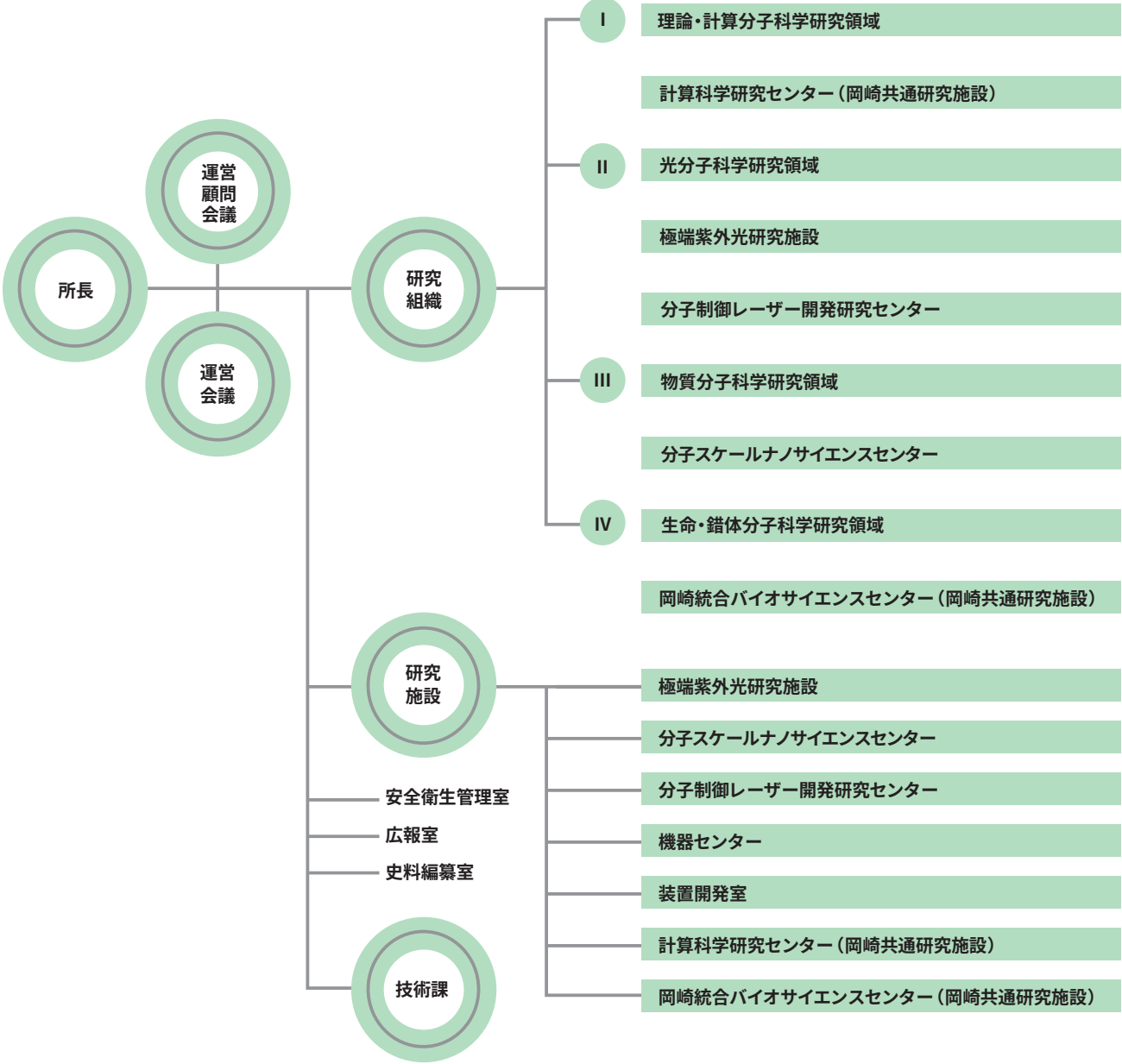
分子研が責任を持って遂行している特別プログラムは順調に成果を上げつつあります。中部地区ナノネット総合支援事業は順調なスタートを切りましたし、Asian Core Programでは協力研究と共に若手を啓発する活動も定期的で開催されています。また、国家基幹事業としての次期スパコン計画に係わるナノ統合シミュレーションソフトウェア開発事業「ナノ分野グランドチャレンジ」がいよいよ本格的な開発活動に入ります。

平成19年度には、研究所の全研究部門と全施設に関する外部評価を実施し、その結果が「分子研レポート2007」に纏められます。研究所の運営等に関する評価結果については、研究所内でも議論を重ね、やるべきことについては改善策を検討しています。

技術開発的イノベーションや短期的視野に基づくプロジェクト研究に偏りがちな国の施策の中にあって、我々基礎学術研究者は、長期的視野に立った「学術と文化」の振興が国家100年の計にとって如何に重要であるかを訴え続けると共に、この逆境をバネとして、物真似でない我が国独自の真に独創的な研究に励まねばなりません。いつも言っています様に、「真善美」の意識を、更にはその上にあると言う「妙」の意識を目指して精進することが肝要です。

平成20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（～平成16年3月）
- 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
数物科学研究科（～平成16年3月、以降は物理科学研究科）
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

分子科学研究所の研究分野は、理論・計算分子科学、光分子科学、物質分子科学、生命・錯体分子科学の4大分野に大別され、それぞれにおいて、教授もしくは准教授の独立した研究グループが、自由な発想に基づいて世界最先端の研究を進めています。さらに、最先端の施設を利用した共同研究の場を国内外の多数の研究者へ提供し、また、東アジア地域の研究拠点と密接な研究協力ネットワークを形成するなど、世界規模での分子科学の振興に力を尽くしています。

理論・計算分子
科学研究領域

光分子
科学研究領域

物質分子
科学研究領域

生命・錯体分子
科学研究領域

理論・計算分子科学研究領域

見えない複雑な分子を描き出す

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。

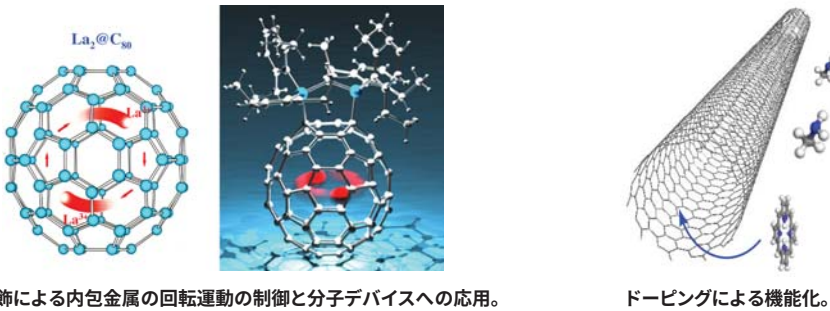
理論分子科学第一研究部門

分子の構造、電子状態、機能の理論と計算

永瀬 茂(教授)

mail:nagase@ims.ac.jp http://snl.ims.ac.jp/

分子科学の限らない夢は、分子を電子レベルで統一的に理解して、望む構造、電子状態、機能をもつ分子を自由にデザインして反応させることです。この実現のために、元素の組み合わせとナノ構造の特性を利用した分子の設計と反応の理論と計算およびコンピュータシミュレーションを行っています。また、内外の数多くの実験グループとは密に連携して実際の合成の可能性と予測した特性の実証を行っています。このために、簡略化したモデル計算ではなく、現実の系をそのままに取り扱えるように、大きい分子系にも精度の高い量子化学計算を高速に実行できる理論と計算法の開発を行っています。



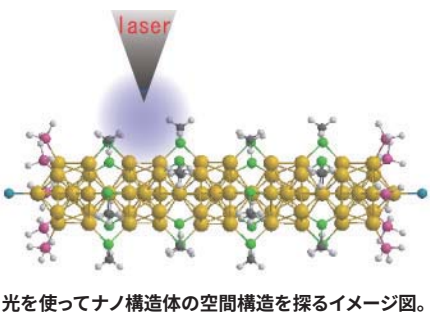
理論分子科学第一研究部門

ナノ構造体における光誘起量子ダイナミクス

信定 克幸(准教授)

mail:nobusada@ims.ac.jp http://raphael.ims.ac.jp/

身の周りにある物質は原子や分子の“粒(つぶ)”が沢山集って出来たものですが、そのような粒が数十個から数百個程度集ってできるナノメートル(10億分の1メートル)サイズの物質は、独特の形(肉眼で見えることはできませんが)、性質、機能を持つことが多く、応用科学的な観点からも注目を集めています。しかしながら、なぜそのような形の物質が出来るのか、なぜ独特の性質や機能を持つのか、その理由は良く分かっていません。我々のグループでは、そのような物質を対象として、特に光を照射することによって引き起こされる動的な変化(ダイナミクス)を理論的・数値計算的に調べています。



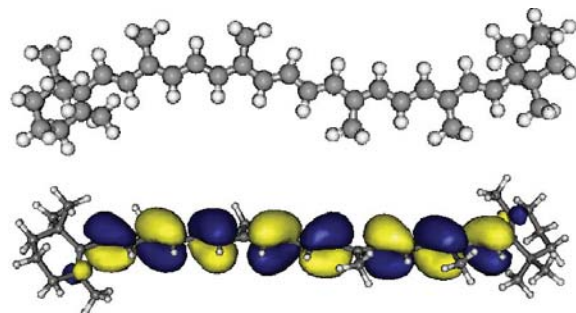
理論分子科学第一研究部門

プレディクティブな量子化学計算の先進的理論開発

柳井 毅 (准教授)

mail:yanait@ims.ac.jp

電子やエネルギーの移動が化学の基本であるなら、私たちはそれらの化学プロセスをどのように記述できるでしょうか？ 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うるような手法として発展しています。私たちのグループでは、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、未解明な複雑な電子状態の問題をプレディクティブな計算精度で記述できる量子化学的手法の開発を行い、リアルな分子科学のシミュレーションの実現を目指しています。



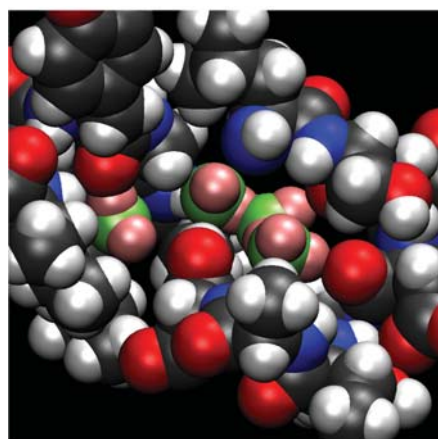
βカロテンの分子構造とそのπ共役分子軌道。

理論分子科学第二研究部門

統計力学で「検出」した蛋白質の中の水

平田 文男 (教授)

mail:hirata@ims.ac.jp http://daisy.ims.ac.jp/



蛋白質内部の水 (3次元RISM)。

多くの蛋白質は空孔をもっておりそこには水や他の化学物質が取り込まれていて機能に重要な役割を果たしています。例えば、酵素 (蛋白質) の助けを借りてセルロースから糖を作るプロセスは加水分解反応ですが、この場合もその反応が起きるためには水分子とセルロースが酵素の中に取り込まれる必要があります。そのような水分子のいくらかは低温X線などで実験的に検出されていますが、最近、これを統計力学 (3次元RISM) の方法によって「検出」することに成功しました。この方法で溶媒 (水) を有機分子やイオンとの溶液 (混合系) に変えることは容易なので、例えば、レセプターによるリガンドの認識やイオンチャネルなどへの応用が期待されます。

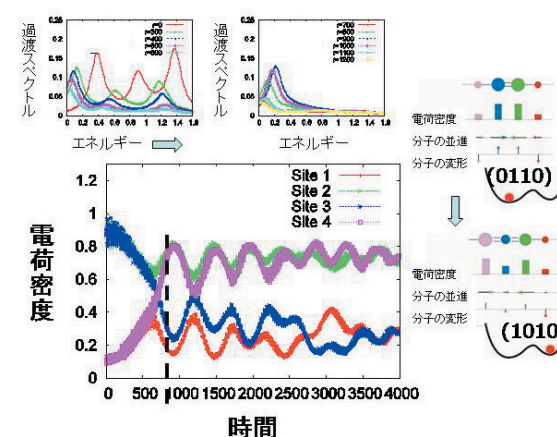


理論分子科学第二研究部門

分子性物質の光誘起相転移

米満 賢治 (准教授)

mail:kxy@ims.ac.jp http://magellan.ims.ac.jp/



(EDO-TTF)₂PF₆を光照射して電荷秩序パターンを変える。

光を当てて物質の性質 (物性) がどう変わるかを理論的に明らかにすれば、誘電性や伝導性を光によって制御したり短時間でスイッチしたりすることができます。これらの物性を支配する多数の電子と分子を扱う理論計算を行っています。分子が集まってできる物質には電子運動の方向や分子配置の変わりやすさに特徴があります。相互作用する電子の協調性をうまく引き出すと、光によって一斉に電荷が移動したり、スピンの向きが変わったりする“光誘起相転移”という現象が起こります。



計算分子科学研究部門

凝縮系におけるダイナミクスと分光に関する理論研究

斉藤 真司 (教授)

mail:shinji@ims.ac.jp http://dyna.ims.ac.jp



細胞増殖に関わる低分子量Gタンパク質Ras。

溶液や生体をはじめとする凝縮系の運動は、様々な空間・時間スケールで変化または反応を引き起こし、多様な物性や機能を発現します。そのため、凝縮系のダイナミクスを解析することは、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。我々は、液体や過冷却液体のダイナミクスや細胞増殖に関わるタンパク質における化学反応の機構について、分子動力学計算や電子状態理論などを用いた理論解析を進めています。また、多次元分光法の理論計算を通して、通常の1次元分光法では分からない液体のダイナミクスの詳細についても研究を行っています。



光を造る、光で観る、光で制御する

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。

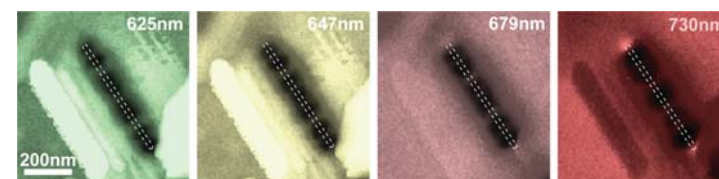
光分子科学第一研究部門

新しい光学顕微鏡でナノ構造を探る

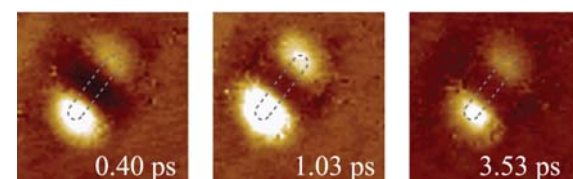
岡本 裕巳(教授)

mail:aho@ims.ac.jp http://groups.ims.ac.jp/organization/okamoto_g/

従来の光学顕微鏡では、光の波長(可視光で0.5 μ m程度)より小さい形を見ることはできませんでした。最近、近接場光学顕微鏡という新しい方法が開発され、それによってナノメートルサイズの物質の観察が可能になりました。ナノサイズ物質のカラー写真(スペクトル情報)を撮ることができ、また10兆分の1秒単位の短時間内に起きる変化を、刻一刻、場所ごとに調べることもできます。私たちは、ある種のナノ物質では、物質の特性に深く関わる「波動関数」がこの方法で観察できることも見いだしました。このような方法でナノ物質の新しい性質を光で調べ、光で制御する基礎的な研究を行っています。



ナノサイズ(長さ510nm)の金属棒の近接場イメージ。観察波長によって異なる「波動関数」が観察されている。



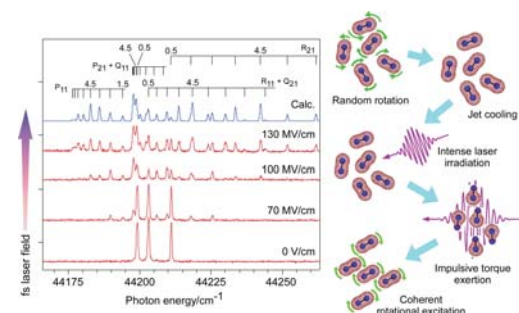
ナノサイズ(長さ300nm)の金属棒の超高速時間変化のイメージ。1ピコ秒(1ps)は1兆分の1秒。

光分子科学第一研究部門

分子運動の量子状態操作法の開拓

大島 康裕(教授)

mail:ohshima@ims.ac.jp



高強度の極短パルスレーザーによりNO分子の回転を励起した実験結果と、対応する運動状態の模式図。

実際の分子は空間を飛行し、回転し、振動しています。室温の条件でも、典型的な分子で1秒間に300m飛び回り、 10^{11} 回も回転し、振動は 10^{12} ~ 10^{13} 回に達します。本研究グループは、このような分子の運動を自在に操作するという分子科学の1つの夢を、レーザーに代表される様々なアイテムを活用して実現しようと目指しています。具体的には、①回転や振動と同程度の時間スケールの極短光パルスを用いて「瞬間的に」分子に撃力を加え、分子の運動を励起・制御する、②周波数分解能が高いパルス光によって特定の振動・回転量子状態へ分布を完全に移動する、などの方法論の開発を進めています。このように、時間とエネルギーという相補的な領域で極限的な性能を持つ「光」を組み合わせる利用する、世界的に見てもユニークなアプローチが特徴です。



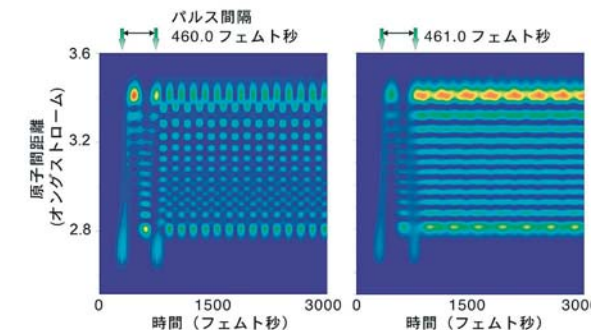
光分子科学第二研究部門

アト秒量子エンジニアリング

大森 賢治(教授)

mail:ohmori@ims.ac.jp http://groups.ims.ac.jp/organization/ohmori_g/

「物体は見方によって粒子になったり波になったりする」。量子の世界の本質はここにあります。量子力学が確立してから既に70年以上が経ち、我々の日常生活において、コンピューターやCDプレーヤー等、量子力学の応用製品はなくてはならない存在になりました。しかし、私達はまだ量子の世界を完全には理解し切れておらず、その応用の余地も膨大に残されています。我々は、量子の世界をより良く理解するために、原子や分子の波としての性質を光で完全に制御するというテーマに挑戦しています。それが可能になれば、1個の分子に大量の情報を記録するなことや、ナノテクを超える精度で物質内の化学結合を操作することもできるようになるかもしれません。



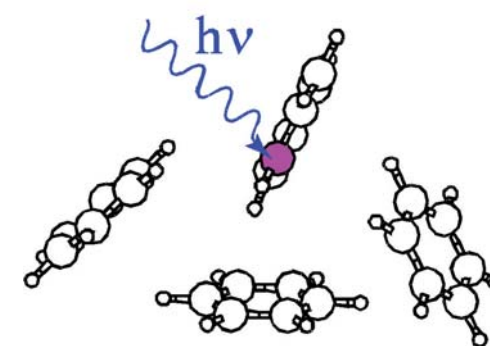
アト秒(10^{-18} 秒)レベルで時間差を制御した二つのレーザーパルスを分子に照射した時に発生する干渉模様を示すシミュレーション。

光分子科学第三研究部門

分子の内殻スペクトロスコピー

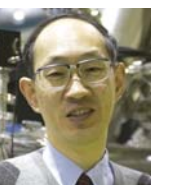
小杉 信博(教授)

mail:kosugi@ims.ac.jp



分子クラスター内の原子サイトを選択して内殻励起。

物質中の電子には、構成原子の原子核の近くに強く拘束されている内殻電子と、原子同士や構成分子同士を結びつける糊の働きをしている価電子があります。内殻電子は価電子と違って、X線でなければ励起できません。X線のように目に見えない光やエネルギーが低く目に見える光(可視光)で物質中の電子が励起される程度は光吸収スペクトルから分かります。励起した内殻電子、価電子の行き先は物質中に広がって存在している同じ状態ですが、吸収スペクトルは随分違います。それは、X線吸収スペクトルでは内殻電子が拘束されていた原子のごく近くの成分だけ抽出されるからです。このように分子クラスターの中の特定原子の内殻電子を次々選んで励起させ、物質の電子構造を局所的に切り出して調べる手段が内殻スペクトロスコピーです。実験、理論両面からその確立と応用を目指しています。

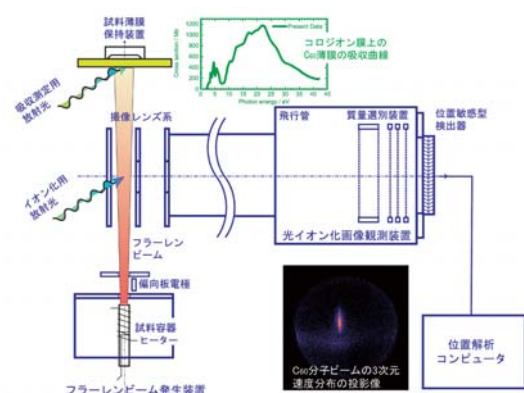


光分子科学第三研究部門

極端紫外光誘起素反応のダイナミクス

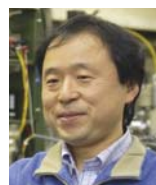
見附 孝一郎 (准教授)

mail:mitsuke@ims.ac.jp http://www.ims.ac.jp/organization/mitsuke_g/



C₆₀ビームの速度分布可視化装置とのC₆₀薄膜の光吸収測定装置。どちらも我々によって開発され、2008年に世界初のデータが公表された。

紫外線よりも短波長の光は極端紫外光と呼ばれ、高層大気を透過しないため地表まで到達しません。私達は波長が6から200nm (ナノメートル) の極端紫外光を利用して、イオン生成や化学反応の研究に携わっています。極端紫外光のエネルギーと分子の化学結合のエネルギーは同じくらいなので、分子は光を効率的に吸収し、元の安定状態に戻ろうとして、電子、イオン、光、ラジカルなどの粒子を放出します。それらの信号は分子中の原子の配置と微小運動、電子のダイナミクスを研究する際の絶好の手懸りとなります。本研究所のUVSOR施設で作り出されるシンクロトン放射 (放射光) は理想的な極端紫外光源です。ここで私達は、気体分子、クラスター、フラレンの基本的性質を調べることはもちろん、新規反応経路の開発や機能性物質の創生を目指した挑戦的なテーマに取り組んでいます。



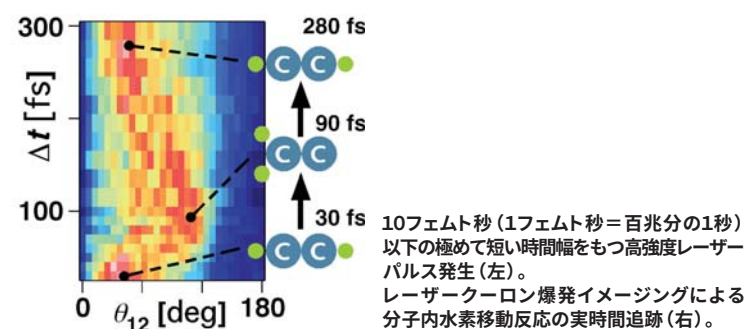
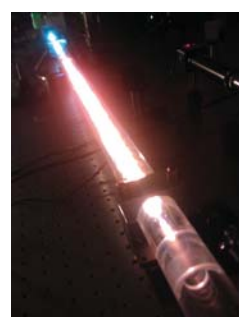
光分子科学第三研究部門

強レーザー場における分子ダイナミクス

菱川 明栄 (准教授)

mail:hishi@ims.ac.jp http://groups.ims.ac.jp/organization/hishikawa_g/Welcome.html

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を発生させることができます。この「強レーザー場」における分子は、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性質を示します。私たちのグループでは、強レーザー場における分子のふるまいを調べることによって、分子が光とどのように相互作用するかを明らかにするとともに、そこで発現する新奇な現象を利用した、化学反応過程の実時間追跡や制御について研究を進めています。



光源加速器開発研究部門

相対論的電子ビームを用いた光発生

加藤 政博 (教授)

mail:mkatoh@ims.ac.jp

分子科学研究所の保有する電子加速器UVSOR-IIはおよそ25年も前に建設された装置ですが、断続的に改良を施すことで、現在でも、同種の装置の中では世界的にも最高レベルの高い性能を誇っています。私たちの研究グループでは、このUVSOR-IIの作り出す高品質の高エネルギー電子ビームを使って、光を作る研究を行っています。高エネルギー電子を強磁場中を走らせることで強力な白色光を作り出すシンクロトン光源に関する技術開発、シンクロトン光を種にレーザー光を作り出す自由電子レーザー技術、レーザーと電子ビームの相互作用を利用した新しい光発生法の開拓などに取り組んでいます。私たちの作り出す光は、分子科学を始め幅広く学術研究に利用されます。



UVSOR-II電子蓄積リング。

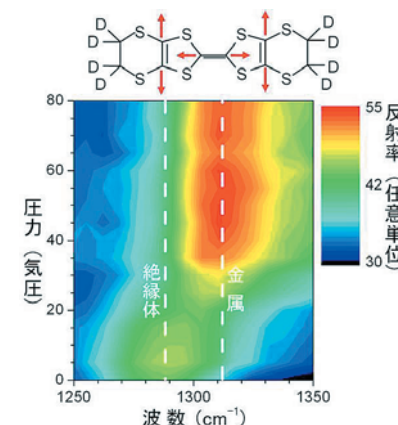
光物性測定器開発研究部門

放射光で物質の機能を探る

木村 真一 (准教授)

mail:kimura@ims.ac.jp <http://www.uvsor.ims.ac.jp/staff/skimura/indexj.htm>

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事が可能になってきました。特に、分子性導体等の高圧・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。

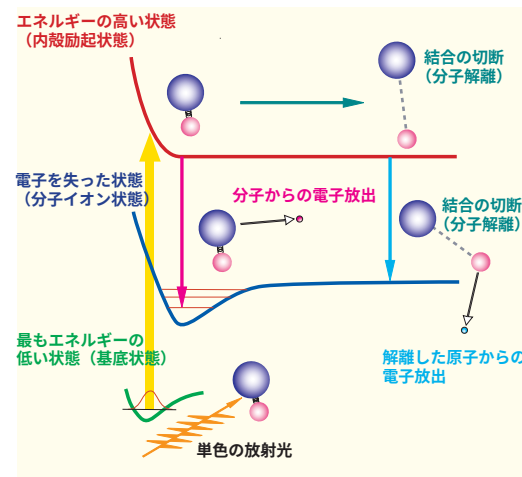


分子性導体の圧力による絶縁体・金属転移に伴って変化するBEDT-TTF分子 (上図) 内の振動モードの光反射率の圧力依存性。20気圧を境に絶縁体から金属へ転移することがわかる。

光化学測定器開発研究部門

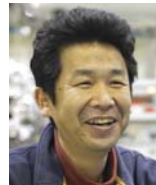
分子の内殻光励起に起因する諸過程のダイナミクス

繁政 英治 (准教授) mail:sigemasa@ims.ac.jp http://www.uvsor.ims.ac.jp/staff/shigemasa/homepage/index.htm



分子の内殻励起状態の生成と後続する様々な崩壊過程の概念図。

分子には、化学結合を担わず、特定の原子の周りに拘束されている、内殻電子と呼ばれる電子が存在します。レントゲン写真に用いられるX線のようなエネルギーの高い電磁波を分子に照射すると、この内殻電子の状態を変えることが出来ます。この際、分子は非常に高いエネルギーを内部に蓄えた不安定な状態になりますので、電子や光を放出して、安定な状態に戻ろうとしますが、結合が切れてしまうこともしばしばです。どのような電磁波を吸収し、どのような状態になり、どのように緩和して行くのか、それは分子の種類にも、また、分子内のどの内殻電子が関わるのかによっても大きく異なります。私たちは、シンクロトロンと呼ばれる加速器によって作られるエネルギーの高い電磁波を分子に照射して、多様な振る舞いを見せる光分子反応の詳細を研究しています。

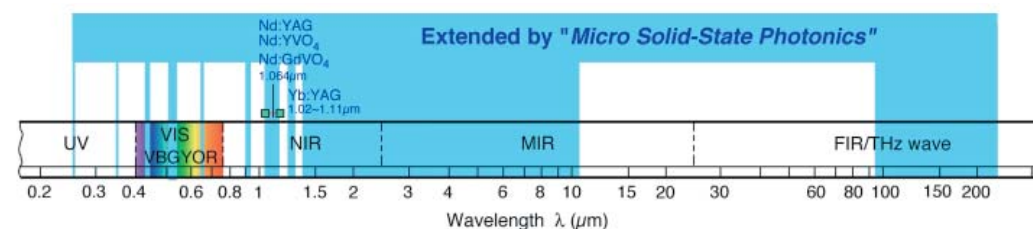


先端レーザー開発研究部門

マイクロ固体フォトニクス

平等 拓範 (准教授) mail:taira@ims.ac.jp

光は選択的・遠隔的に物質と直接相互作用できるという特長を持つため分子を含めた物質制御に対する大きな可能性を持っていますが、その前に光を高度に制御することその物が大変難しい問題でありました。本研究室では、性質の揃った固体の小さな単位「マイクロドメイン」の特長を利用し、固体レーザーの高輝度化、波長域の拡大、小型化を図る「マイクロ固体フォトニクス」を推進しています。すでにマイクロチップレーザー、セラミックレーザーの高輝度性とバルクQPMによる多機能・高効率波長変換法により、紫外線からテラヘルツ波領域にまで至る高輝度光発生が実証され、種々の応用も展開されつつあります。今後も学術研究を通して広く社会に貢献する事を目指しています。



マイクロ固体フォトニクスにより展開された波長域。

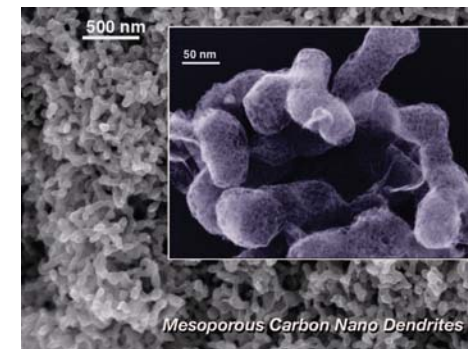
物質創成、機能制御、新しい観測手法の開発

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。

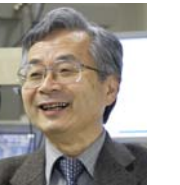
電子構造研究部門

金属アセチリドの機能性ナノ構造体への変換

西 信之 (教授) mail:nishi@ims.ac.jp http://nishi-group.ims.ac.jp/

Ag₂C₂から合成されたBET表面積が1500m²/g以上を持つ「多孔性炭素ナノデンドライト」。

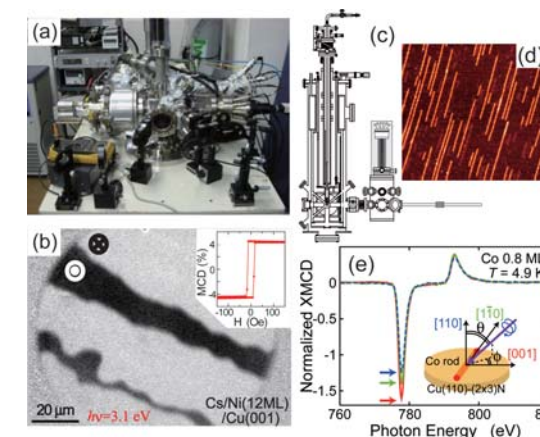
炭素分子(C≡C)と金属原子が繋がった金属アセチリドは、光や熱によって金属部分と炭素(又は有機物)部分へのナノスケールの分離が起こる事によって様々なナノ構造を発生し、金属と炭素の間にショットキー障壁による電場勾配を生じたり、光が照射された部分のみ連続的に金属ナノシートを形成したり、グラファイト膜を金属粒子のまわりに完全に結合させ酸化をブロックしたり、酸素分子の吸着によって電気伝導性が倍近くに増加したり、といった様々な機能を発現します。また、通常の活性炭より大きな表面積を有し、液体や気体の流動性が高いため優れた電極や触媒担体としての機能を持つ電子顕微鏡写真のような革新的な炭素材料の合成に成功しました。



電子構造研究部門

光を用いた磁性薄膜の評価

横山 利彦 (教授) mail:yokoyama@ims.ac.jp http://msmd.ims.ac.jp/yokoyama_g/



(a) 紫外磁気円二色性光電子顕微鏡装置。
(b) 世界初の紫外磁気円二色性光電子顕微鏡像。
試料は12原子層Ni薄膜で、上下向きの磁区がはっきり区別されている。
(c) 超伝導磁石極低温X線磁気円二色性測定装置。
(d) CoナノロッドのSTM像。
(e) CoナノロッドのX線磁気円二色性スペクトルの角度依存性。
磁化は表面平行、ロッド垂直に向きやすいことを示している。

当グループでは、薄膜や表面の磁気的性質を主に光を使って調べる研究を行っています。最近、全く新しい磁気顕微鏡として、紫外レーザーを用いた磁気円二色性光電子顕微鏡という手法を新たに開発し、実測することに成功しました。この方法は普通の光学的磁気顕微鏡と比べて空間分解能で勝り、また従来の第3世代放射光源を利用したX線磁気円二色性光電子顕微鏡と比べても、実験室で測定が行えるだけでなく、超高速時間分解測定も可能であるという長所があります。一方、分子研放射光施設UVSOR-IIを利用して、高磁場(7テスラ)極低温(5K)で軟X線磁気円二色性という装置を新たに製作し、国内だけでなく海外にも広く共同研究に供しています。

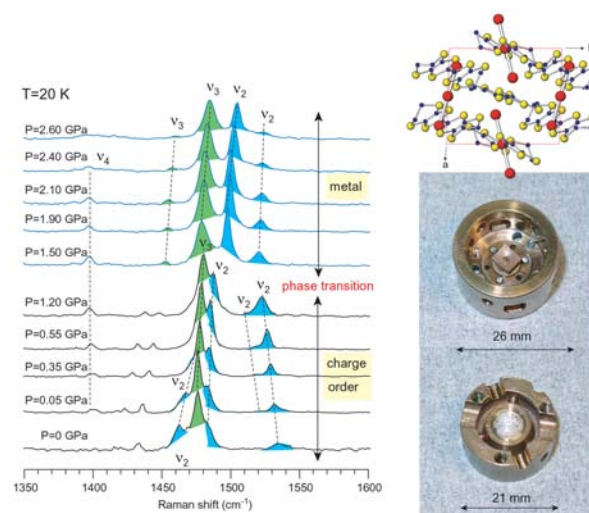


電子物性研究部門

ラマン分光法で電子相を観る

薬師 久彌 (教授)

mail:yakushi@ims.ac.jp



20Kにおける分子導体のラマンスペクトルの圧力依存性。1GPaは1万気圧。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。

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。



電子物性研究部門

磁気共鳴法による分子性導体の電子物性研究

中村 敏和 (准教授)

mail:t-nk@ims.ac.jp <http://naka-w.ims.ac.jp/>

私たちは、分子性導体の示す特異な電子状態を、NMR（核磁気共鳴）やESR（電子スピン共鳴）という実験手法を用いて研究しています。プラスチックは絶縁体の代表格ですが、ある化学処理をすることで電気を流すようになります。分子性物質が電気を流すことが知られてから半世紀以上たち超伝導体も発見されていますが、まだ未解決の問題が多く残っています。加えて、分子性導体は金属、絶縁体、強誘電、反強磁性など種々の物性を示し、その機能が注目されています。磁気共鳴法は、原子核磁石や電子磁石を深針として、物質の性質を非接触・非破壊で理解出来る実験手法です。我々は分子性導体における多種多様な物性起源の理解を目指しています。



パルスフーリエ変換NMR分光器。



多周波パルスESR分光器。

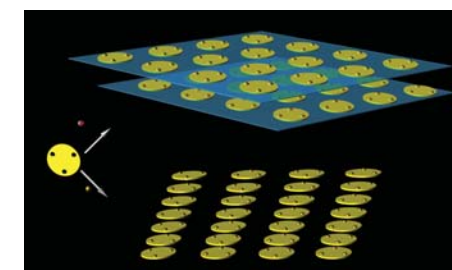
分子機能研究部門

超分子および高分子の機能設計

江 東林 (准教授)

mail:jiang@ims.ac.jp

超分子・高分子の機能発現には分子組成、分子配列、そして分子間の協同作用をいかに制御するかが鍵となります。本グループでは、巨大 π 電子系に着目し、『分子デザイン』・『精密集積化』・『光・電子・スピンの探索』のシームレスな融合により、外部刺激に対し応答可能なインテリジェント「光・電子・スピン機能性超分子および高分子」の創出を目指しています。『スピン機能性』に関して、集積型金属錯体を空間特異的に配列したナノ構造体を構築し、スピンサイト間の相互作用を制御することで、光によるスピン転移や磁性制御が可能なソフトマテリアル群の創出を目標としています。『光機能性』に関して、「 π 電子系が二次元的に広がったシート状巨大共役分子」を化学的に構築し、前例のないナノサイズ空孔を有する機能性高分子の創出を目指します。



金属イオンによるナノ構造のチューニング。



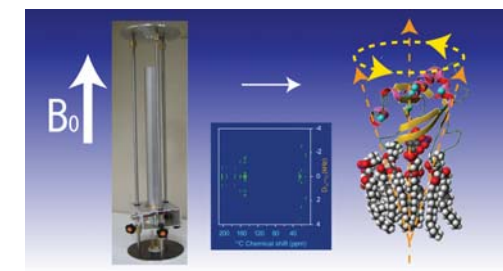
分子機能研究部門

生体分子を対象とした固体NMR測定法開発

西村 勝之 (准教授)

mail:nishimur@ims.ac.jp

磁場中に分子が置かれた分子の原子核には微小磁石として振る舞う核スピが存在し、外部から適切な周波数の電磁波を照射することによりその振舞いを制御することが可能性です。これを核磁気共鳴法（NMR）と呼び、原子間距離や原子対のなす角度を精密に決定でき、非破壊で分子の構造や運動性に関する情報を取り出すことが可能です。膜タンパク質に代表される重要な生体分子や有用な先端機能性材料など、多くの重要な分子は不溶性であり、非晶状態で機能します。固体NMRはこれら重要な分子の構造、物性解析には必要不可欠な技術となっており、我々は主に新規固体NMR測定技術の開発、および、それらを利用した分子の構造、運動を解析する手法開発研究を行っています。



(左)開発した固体NMRプローブと2次元NMRスペクトル。(右)膜表面性タンパク質の脂質膜上での挙動の解析。



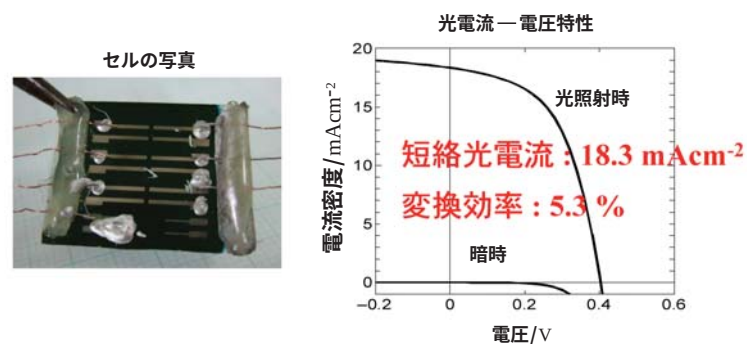
ナノ分子科学研究部門

有機エレクトロニクスデバイス

平本 昌宏 (教授)

mail:hiramoto@ims.ac.jp

分子の集合体を取り扱う有機半導体エレクトロニクスでは、昨年、有機ELテレビが商品化され、有機太陽電池が次のターゲットとして精力的に研究されています。この分野でブレイクスルーを起こすには、純度、有機／金属界面、pn制御技術などの、有機半導体の基礎科学をデバイス応用との両輪として推進することが必要不可欠です。私たちは、このような考えに基づき、C₆₀をセブンナイン以上に超高純度化する技術を開発して、有機太陽電池のp-i-nバルクヘテロ接合 (図) に組み込み、5.3%の世界最高効率 (図) を観測しています。



有機半導体、有機太陽電池、超高純度化、ナノ構造設計。

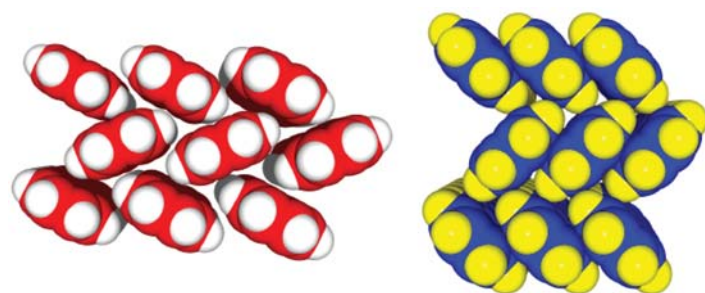
ナノ分子科学研究部門

有機半導体の合成とデバイスへの応用

鈴木 敏泰 (准教授)

mail:toshy@ims.ac.jp

半導体といえばシリコンなどの無機物を思い浮かべますが、最近では有機物の半導体による発光素子 (有機EL)、トランジスタ、太陽電池が開発されています。これらの有機デバイスは、薄い、フレキシブルといったシリコンデバイスにはない優れた特徴を持っています。我々のグループでは、未だ基礎研究が必要なトランジスタおよび太陽電池のために、新しい有機半導体を設計、合成しています。新たに開発された材料は、直ちに共同研究グループによりデバイス化され性能評価を受けます。有望な材料については、国内外の大学や企業にサンプル提供し、基礎および応用研究に役立てることを努めています。



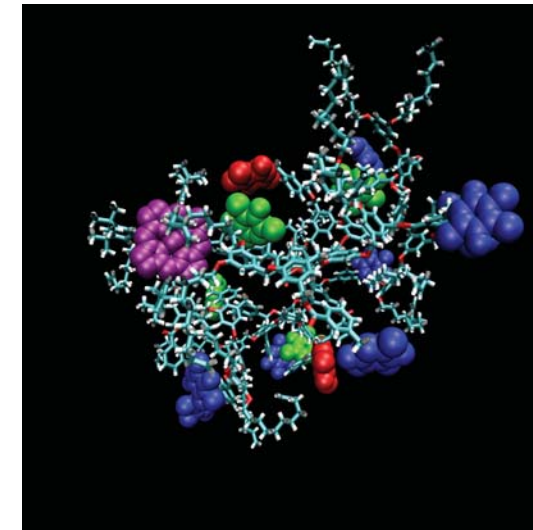
有機半導体であるペンタセン (左) とフッ素化ペンタセン (右) の結晶構造。

ナノ分子科学研究部門

光合成を人工分子で組み立てる

永田 央 (准教授)

mail:toshi-n@ims.ac.jp http://licht.ims.ac.jp/



単一分子によるキノンプール。化学変換によって、光のエネルギーを分子内にためこみます。

光合成は、太陽エネルギーを化学エネルギーに変換することで、地球上のすべての生命活動を支えています。その仕組みは、複雑な生命分子が巧みに組み合わせられてできている、自然の生んだエネルギー変換装置の最高傑作です。この傑作を、恐れ多くも人工分子の組み合わせで模写してみよう、というのが私たちのテーマです。最終目標は、植物の光合成と同じように、光のエネルギーで二酸化炭素から有用な有機化合物を作ること。道ははるかに遠いのですが、生命が長い進化で獲得した光合成のメカニズムと、人類が積み上げてきた合成化学の知識を組み合わせれば、新しい形の光合成が実現できるに違いありません。



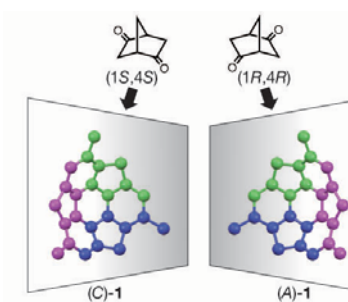
ナノ分子科学研究部門

バッキーボウルの科学と金属ナノクラスター触媒の開発

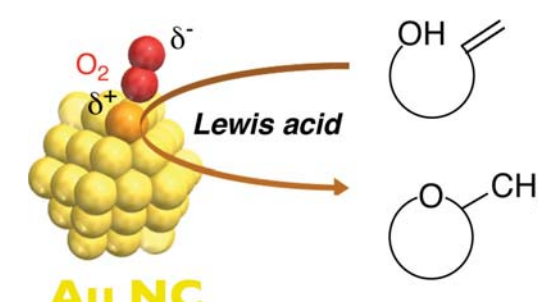
櫻井 英博 (准教授)

mail:hsakurai@ims.ac.jp http://groups.ims.ac.jp/organization/sakurai_g/home.html

私たちは、「逐次合成 (有機合成)」の手法、いわゆるボトムアップアプローチによるナノサイエンスに関する研究を行っています。特に最近では、フラレンの部分構造、ナノチューブの先端構造に相当するお椀型共役化合物「バッキーボール」に注目し、革新的な合成方法の開発と、物性研究に取り組んでいます。一方、金属をナノメートルサイズまで微小化した粒子 (クラスター) が、バルク状態とは全く異なる触媒機能を発現する現象を利用した、新しい反応の開発にも取り組んでいます。



キラリティを持つバッキーボウルの合成。



金ナノクラスターの特異な触媒活性。

生体機能の実現と無駄のない化学反応へ

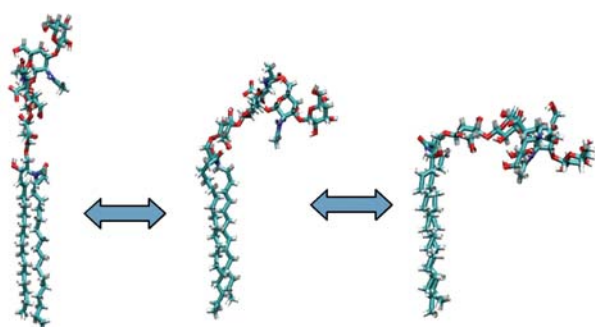
生物が示す多彩な生体機能の発現が、どのような機構で行われているか分子レベルで解明するための研究を行っています。中心金属と配位子の組み合わせで金属錯体は多種多彩な機能を発現します。その特色を生かしてエネルギー・環境問題軽減のための高効率エネルギー変換、水中での有機化合物の分子変換、無機小分子の活性化を行っています。

生体分子情報研究部門

神経細胞ネットワーク解析素子の開発と医療分子科学開拓

宇理須 恒雄 (教授)

mail:urisu@ims.ac.jp



シナプス細胞膜表面に多く局在する分子GM1は分子構造によって反応性が大きく変化する。

アルツハイマーなどの神経変性疾患とよばれる病気は、現在世界中で何千万人もの患者がおり、その人数はますます増えつつありますが、その発症原因も治療法も不明の難病中の難病です。私たちは、その病気の原因の解明や治療法の開発には生体内での分子の構造や機能を解明することが必要であると考え、このような研究を医療分子科学という新しい学術領域と位置づけて、脳神経細胞のネットワーク解析素子の開発や、この素子やマウスの脳内でのシナプス細胞膜での病原体関連分子の分子構造を解明する研究を進めています。生体内という非常に複雑な難しい問題に取り組むため、よく定義された人工細胞膜の模倣的系での詳細な分子構造や動態を解明することも基礎的な知見を得るために進めています。

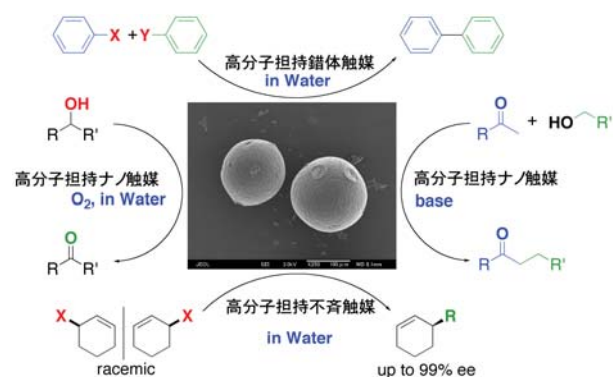


錯体触媒研究部門

理想の化学プロセスを実現する不均一触媒システムの開発

魚住 泰広 (教授)

mail:uo@ims.ac.jp http://groups.ims.ac.jp/organization/uozumi_g/



両親媒性高分子担持金属錯体あるいは金属ナノ粒子を用いた不均一水中触媒の典型例:典型的高分子触媒の走査電子顕微鏡像(中央)、炭素-炭素結合形成触媒(上)、アルコール類の酸素酸化(左)、ケトンのアルコールによるα-アルキル化、不斉アリル位置置換反応。

魚住研究室では理想的(高度な効率、選択性、環境調和性、安全性、簡便性等)な有機分子変換工程を実現する新しい遷移金属触媒システムの構築に取り組んでいます。典型的には不均一条件下にて水中で機能する触媒システムの開発研究があげられます。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。



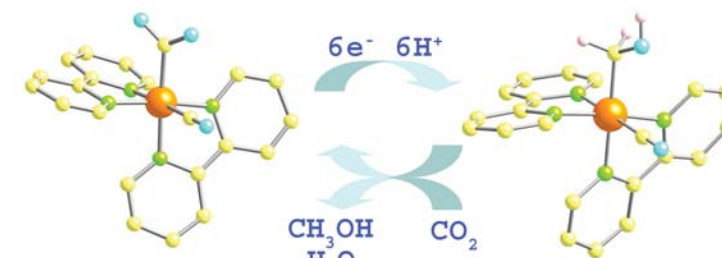
錯体物性研究部門

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合成

田中 晃二 (教授)

mail:ktanaka@ims.ac.jp http://sakutai.ims.ac.jp/lab/tanaka-G/

深刻な環境・エネルギー問題に直面している現在、新たなエネルギー変換システムを構築することは現代科学に架せられた最重要課題です。我々のグループでは、光及び電気化学的な二酸化炭素の多電子還元(エネルギーの貯蔵)と有機化合物の電気化学的酸化(エネルギーの再生)を可能にする遷移金属錯体触媒の開発を行っています。これまでにルテニウム錯体に配位した二酸化炭素が極めて容易に一酸化炭素へ変換されること、またpH変化を利用することによりルテニウム錯体上にオキシラジカルおよびアミノラジカルが誘起することを明らかにしました。これらの結果に基づいて、化学エネルギーと電気エネルギーの相互変換を可能にする触媒を探索しています。



二酸化炭素の多電子還元反応。

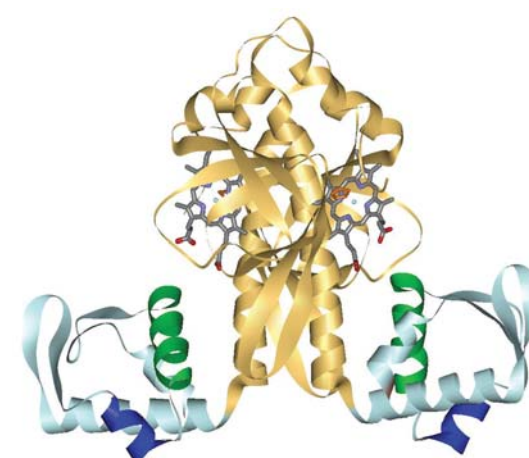


生体分子機能研究部門

金属タンパク質による生体機能の制御

青野 重利 (教授)

mail:aono@ims.ac.jp http://groups.ims.ac.jp/organization/aono_g/



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。

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。

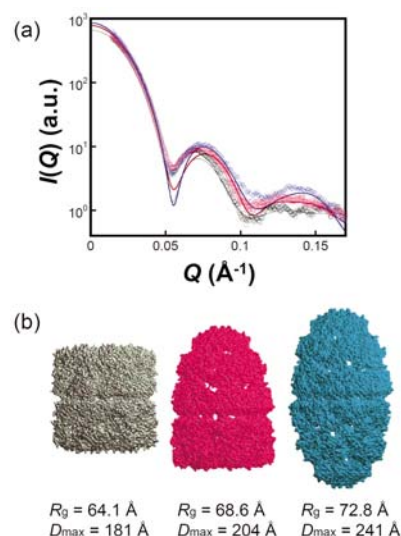


生体分子機能研究部門

蛋白質の天然三次元構造が作られる仕組みを探る

桑島 邦博(教授)

mail:kuwajima@ims.ac.jp http://gagliano.ims.ac.jp/Welcome.html



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、X線小角散乱や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。



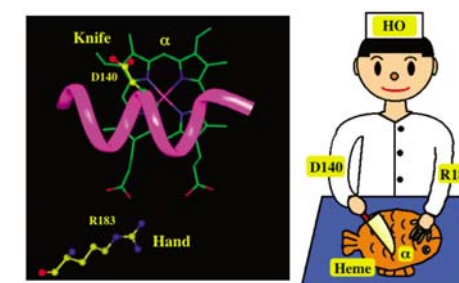
生体分子機能研究部門

金属酵素の機能発現の分子機構

藤井 浩(准教授)

mail:hiro@ims.ac.jp http://groups.ims.ac.jp/organization/fuji_h_g/

私たちの体の中にはたくさんの金属酵素と呼ばれるタンパク質が存在し、生命活動を支えています。金属酵素は、金属イオンを含む酵素を意味し、多くの場合、この金属イオンが酵素反応と直接関係しています。例えば、体の中の鉄分が足りなくなると貧血を起こすのも、金属酵素(タンパク質)の関与するところ。私たちが必要とする金属イオンは、鉄、銅などわずか十数種類ですが、金属酵素が行う反応の種類は莫大な数になります。どうしてわずかな金属イオンからこんなにたくさんの種類の反応ができるようになるのでしょうか。私たちの研究グループでは、この問題に答えるため金属酵素の機能がどのような機構で発現されているのかを分子レベルで研究しています。



ヘムオキシゲナーゼの機能発現機構。

生体分子機能研究部門

生命分子の動的構造解析による生体機能発現メカニズムの探究

加藤 晃一(教授)

mail:kkatonmr@ims.ac.jp



NMRで生命分子の動的構造を探る。

生命体を構成する多種多様な高分子は、長い進化の過程を経て固有の3次元構造を獲得し、生命活動を支える高度な機能を実現しています。私たちは、主に核磁気共鳴(NMR)を利用して、様々な生体高分子およびそれらの複合体を対象に原子レベルの立体構造・ダイナミクスの精密解析を行い、それを基盤とする生命分子科学研究に取り組んでいます。特に、糖鎖とタンパク質のダイナミックな構造を解明することを通じて、それらの生物学的機能の発現メカニズムを分子科学の観点から統合的に理解することを目指しています。そのために、私たちは、分子分光学に加えて、分子生物学、細胞生物学、ナノサイエンスによる多面的な生命分子へのアプローチを展開しています。

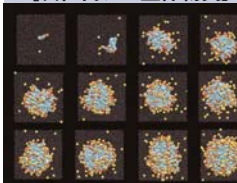


文部科学省 最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用・次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 —ナノ分野グランドチャレンジ—

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。

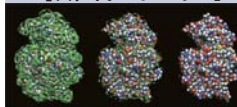
[次世代ナノ情報機能・材料]

[次世代ナノ生体物質]

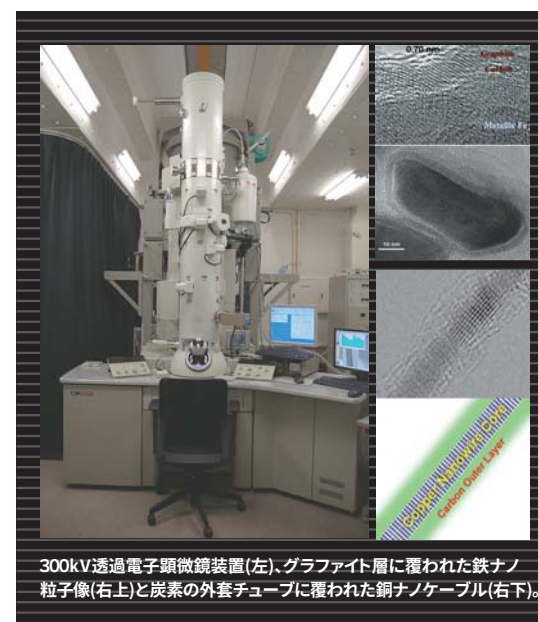


ドラッグデリバリー
(ミセルの分子動力学)

[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)



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、国立大学法人・名古屋大学、国立大学法人・名古屋工業大学、学校法人・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ています。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ています。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します。



エクストリームフォトリクス

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。

分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成

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

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います。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・融合することにより、特に大規模複雑系に関する計算科学研究におけるブレークスルーの実現、さらにそれぞれの分野における新機軸の確立、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や他研究機関と連携して、電子状態理論、分子動力学法、統計力学等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の大規模複雑系の計算に有効な新たな方法論の開発、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。



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、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した。平成20年1月末の段階で約5,500人のユーザー登録が行われ、インターネットによる相互利用が行われています。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ています。

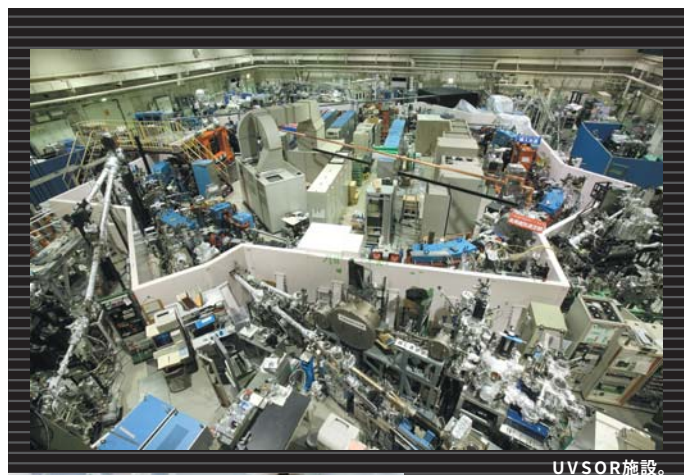
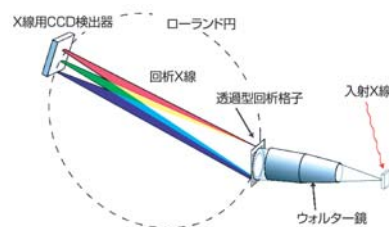


最先端の研究をささえる最先端の研究設備

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。



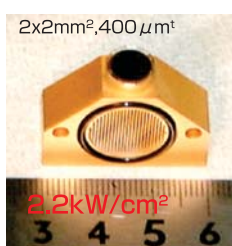
UVSORで開発した次世代透過型軟X線分光器。

分子スケールナノサイエンスセンター

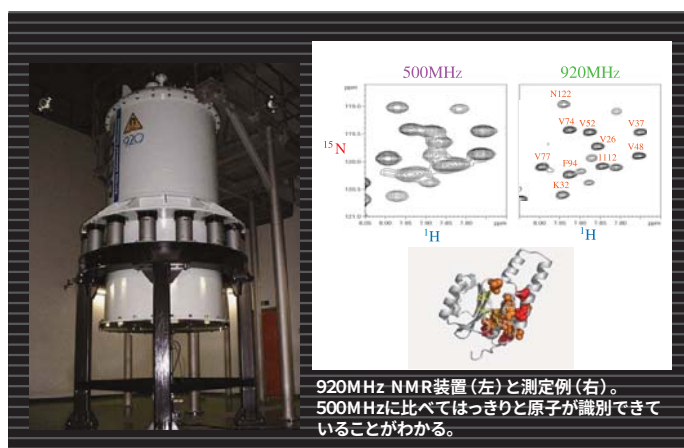
化学のフロンティアである「分子スケールナノサイエンス」を集中的に研究推進するセンターとして2002年に発足しました。1つの専任部門、2つの併任部門から構成されており、新規分子・ナノ構造体の作成から、特異な化学反応や物理化学的性質を体系的に研究する組織になっています。世界最高性能を誇る920MHz核磁気共鳴(NMR)装置を共同利用に供している他、19年度より始まったナノテクノロジーネットワークプロジェクトを担当し、多くのナノサイエンス関連支援プログラムを提供しています。

分子制御レーザー開発研究センター

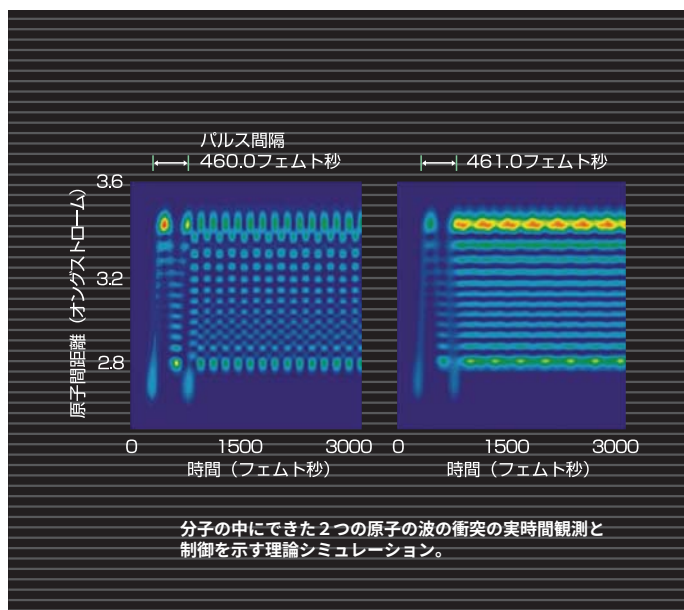
本センターは、光分子科学研究領域との連携のもとに、分子科学の新分野を切り拓くための装置、方法論の開発研究を行なう施設です。新たに開発される装置や方法論は、所内外の分子科学者との先端的な共同研究のリソースとして提供される予定です。主な開発研究分野としては、(1)テラヘルツから軟X線にいたる先端光源の開発、(2)高出力超短パルスレーザーを用いた量子制御法の開発、(3)高分解能光イメージングとナノ領域顕微分光法の開発などが挙げられます。また、本センターは理化学研究所との連携融合事業であるエクストリームフォトニクスの中核センターとしての役割を果たしています。



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。



920MHz NMR装置(左)と測定例(右)。500MHzに比べてはっきりと原子が識別できていることがわかる。



分子の中にできた2つの原子の波の衝突の実時間観測と制御を示す理論シミュレーション。

機器センター

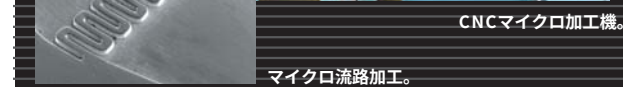
機器センターは分子スケールナノサイエンスセンターと分子制御レーザー開発研究センターの汎用機器を統合して、平成19年4月に新たに発足しました。機器センターでの主たる汎用機器は山手地区のNMR、質量分析装置、粉末X線回折装置、明大寺地区のESR、SQUID磁束計、X線回折装置(粉末、単結晶)、希釈冷凍機、蛍光分光装置、紫外可視近赤外分光装置、円二色性分光装置などです。共同利用の形態は施設利用が主ですが、レーザーと上記の汎用機器を組み合わせた特殊仕様の実験も支援する予定です。この他、山手地区と明大寺地区にある液体ヘリウム液化装置や液体窒素貯蔵槽を用いて、液体ヘリウム・液体窒素の供給を行っています。ま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



CCD単結晶X線解析計。



高感度蛍光分光光度計。



CNCマイクロ加工機。

マイクロ流路加工。

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、独創的な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 ■

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、先導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」を導入し、格段に大規模な計算が実行できる環境を提供します。

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、生命科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、准教授1名が所属しています。



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19年度

実施内容	件数	人数
課題研究	2	61
協力研究	91	248
所長招へい	132	132
研究会	9	226
電子計算機施設利用	143	550
UVSOR施設利用	146	631
その他施設利用	58	89
合 計	581	1937

ています。さらに、これらセンターならびに各研究領域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」と「若手研究会等」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

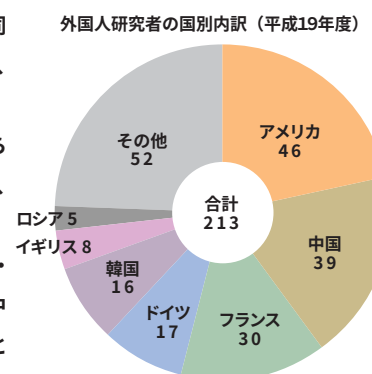


世界との交流連携

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。



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。

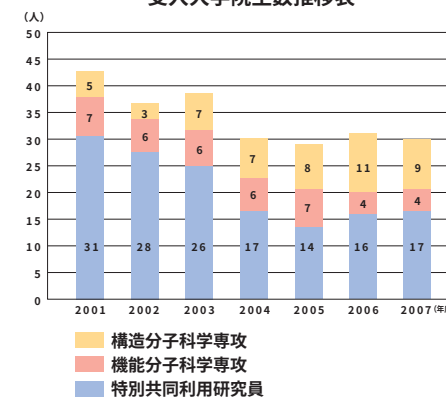
総合研究大学院大学（SOKENDAI）とは？

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。

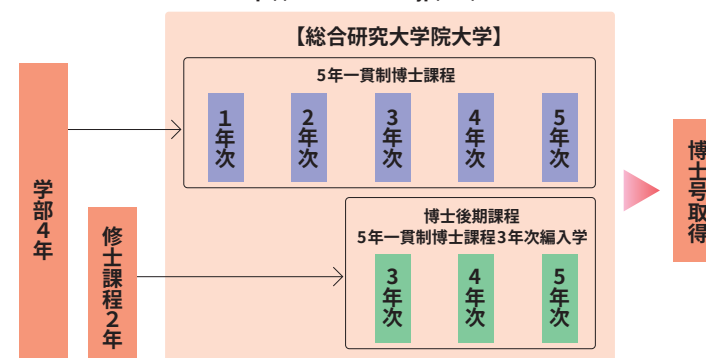


総研大葉山キャンパス。

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。

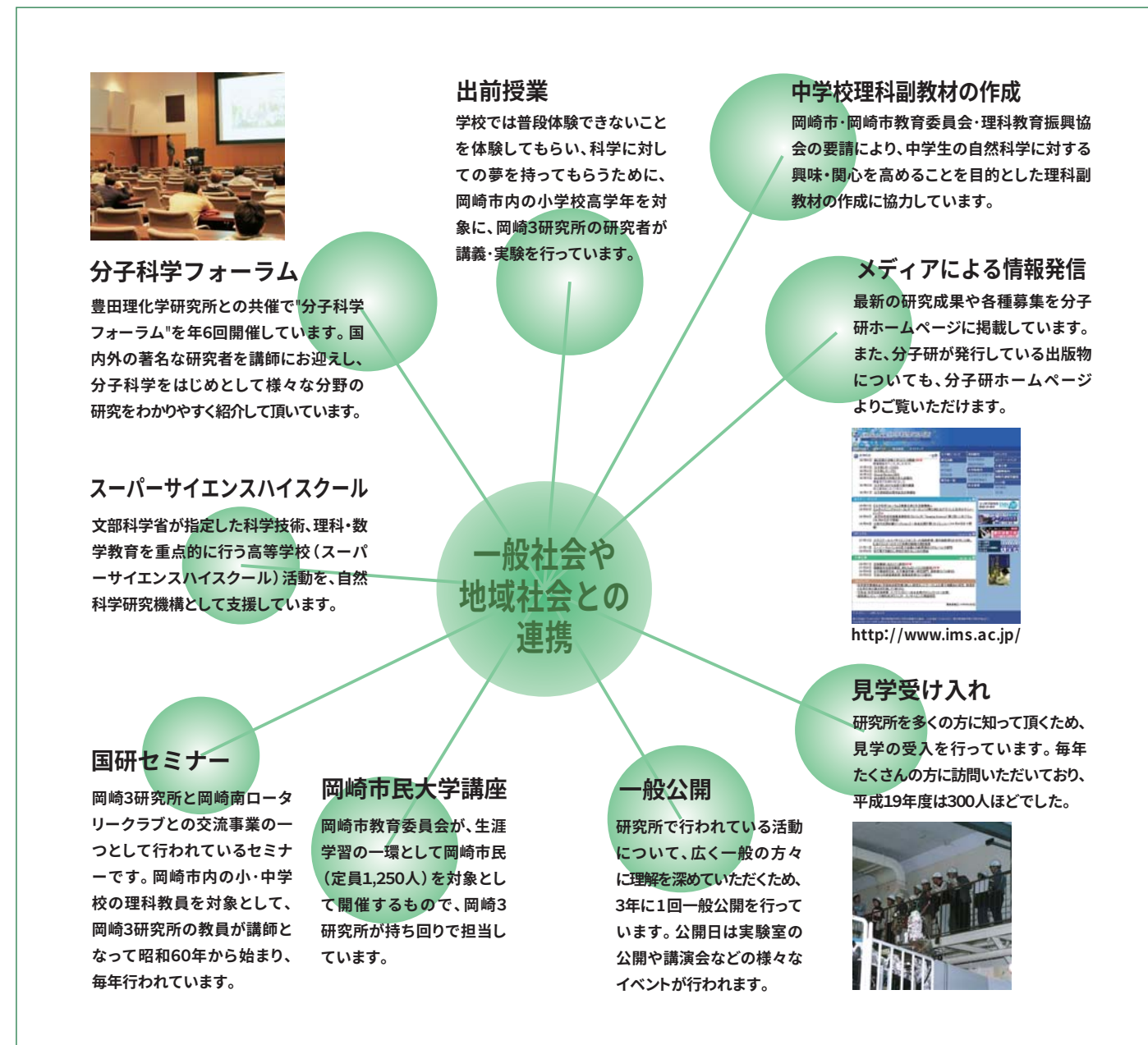


分子研では年間を通じて学生向けの催しを行っています。詳しくは分子研ホームページ www.ims.ac.jp をご覧ください。

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図り、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利用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〕

時任宣博 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

(台湾) 国立交通大学講座教授

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パークレー校教授

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

入江正浩 立教大学教授

■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

榎 敏明 東京工業大学大学院理工学研究科教授

江幡 孝之 広島大学大学院理学研究科教授

加藤 昌子 北海道大学大学院理学研究科教授

篠原 久典 名古屋大学大学院理学研究科/高等研究院教授

関谷 博 九州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

○ 富宅喜代一 神戸大学大学院理学研究科教授

山下 晃一 東京大学大学院工学系研究科教授

山下 正廣 東北大学大学院理学研究科教授

渡辺 芳人 名古屋大学物質科学国際研究センター教授

◎ 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〕

榎 敏明 (東工大院教授)

江幡 孝之 (広大院教授)

富宅喜代一 (神大院教授)

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)

小杉 信博 (分子研教授)

西 信之 (分子研教授)

平田 文男 (分子研教授)

横山 利彦 (分子研教授)

〔共同研究専門委員会〕

関谷 博 (九大院教授)

岩佐 義宏 (東北大金研教授)

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)

櫻井 英博 (分子研准教授)

見附孝一郎 (分子研准教授)

米満 賢治 (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 (早大院教授)

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・併任・客員の教授及び准教授で構成し、研究及び運営に関する事項について所長を補佐します。

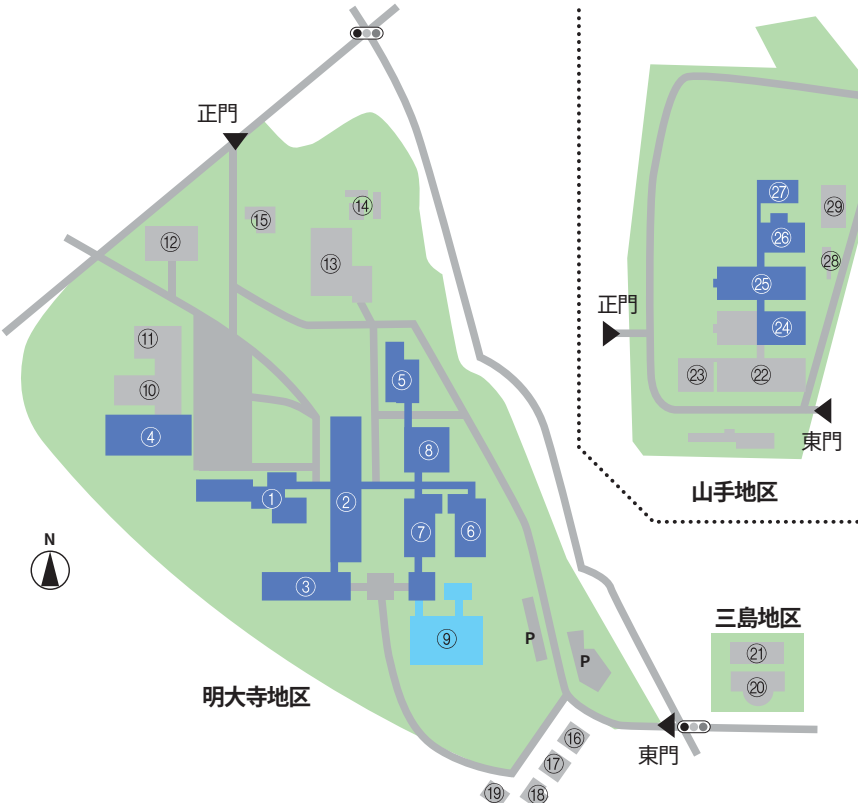
中期計画

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
⑰～⑲ 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

人員・予算

人員（平成20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 (7)	8 (7)	30	51 (14)	—	51 (14)
研究施設	—	2 (3)	6	8	16 (3)	—	16 (3)
技 術 課	—	—	—	—	—	36	36
合 計	1	15 (10)	14 (7)	38	68 (17)	36	104 (17)

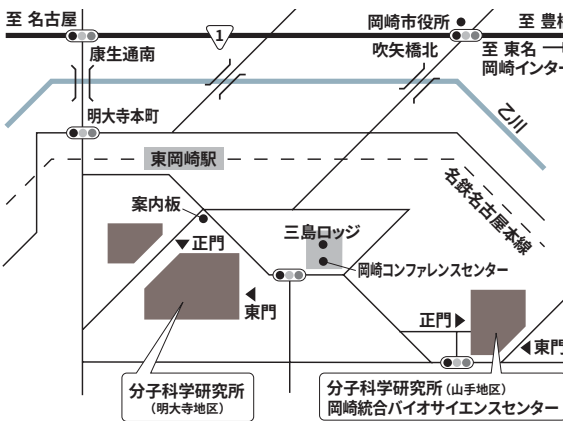
※（ ）内は客員及び兼任、併任の合計で外数。
※休職者含む。

平成19年度決算額（単位:千円）	
区 分	決算額
人 件 費	1,230,465
運営費・設備費	2,000,248
合 計	3,230,713

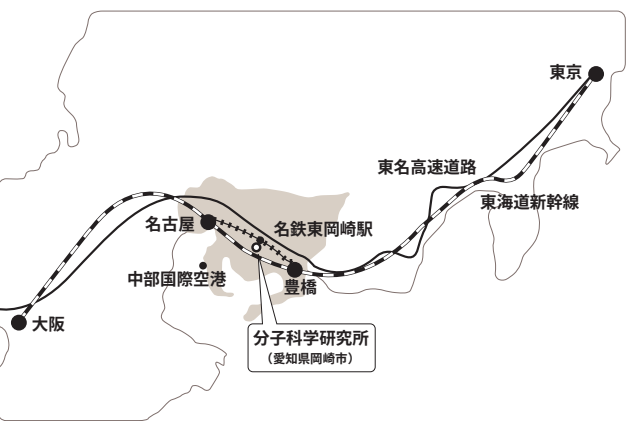
平成19年度外部資金受入状況 ^{※1}		（単位:千円）
区 分		合計
科学研究費補助金 ^{※2}		334,258
共同研究		26,371
受託研究 ^{※2}	戦略的創造研究推進事業（JST）	84,864
	科学技術振興調整費等（文科省等）	590,576
	その他	29,006
	小計	704,446
合計		1,065,075

※1左記決算額に含む
※2受託事業及び間接経費を含む

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）、南口より徒歩約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）、南口より徒歩約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下車（中部国際空港—東岡崎間約65分）、南口より徒歩約7分。
名鉄空港バス：JR岡崎駅行に乗り、東岡崎駅下車（中部国際空港—東岡崎間約65分）、南口より徒歩約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。