

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から生命科学にまでまたが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・自然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。生体分子をも含む広範な分子の形成と変化に関する原理、分子と光の相互作用、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

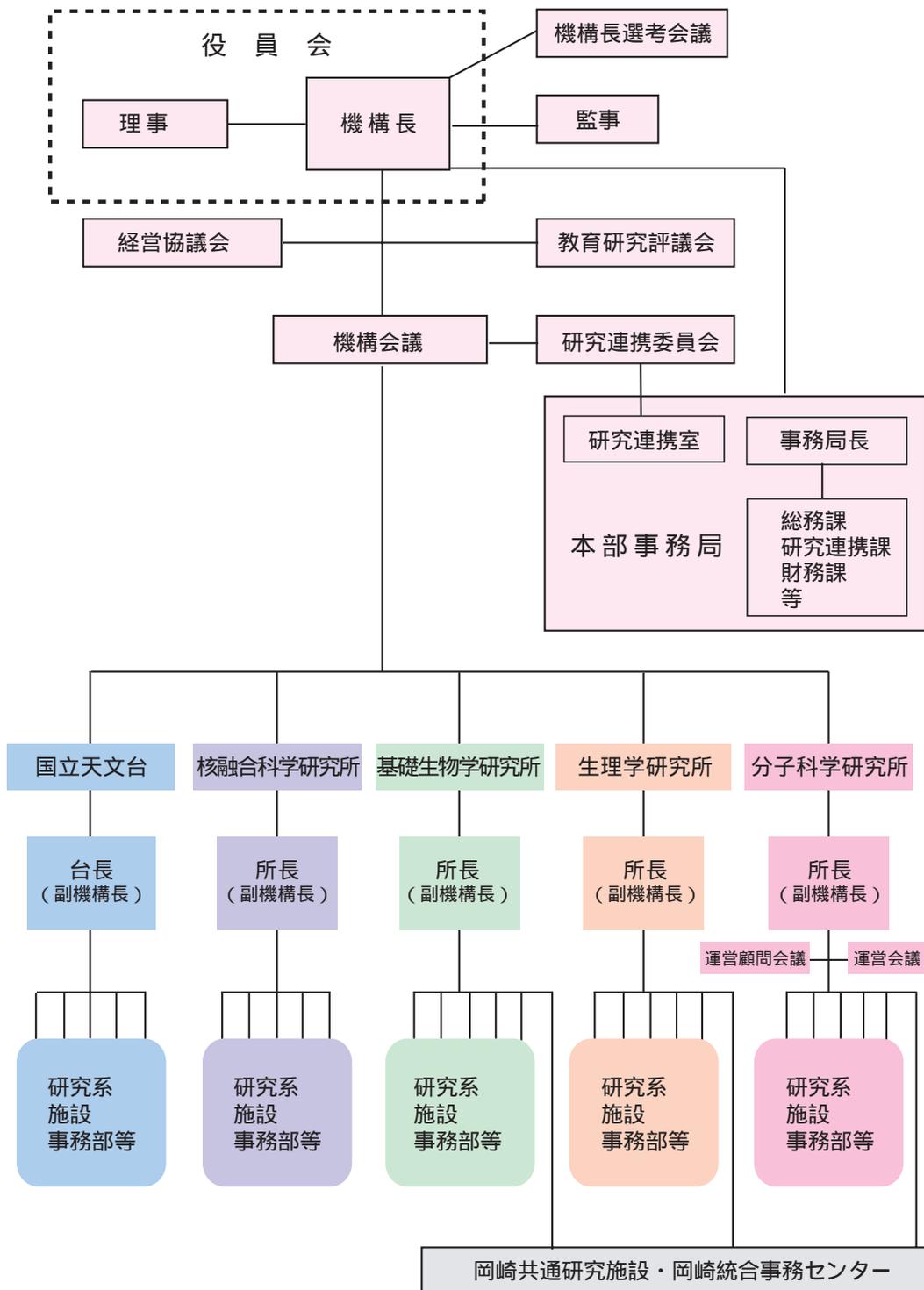
1960年頃から分子科学研究者の間に研究所設立の要望が高まり、社団法人日本化学会の化学研究将来計画委員会においてその検討が進められた。

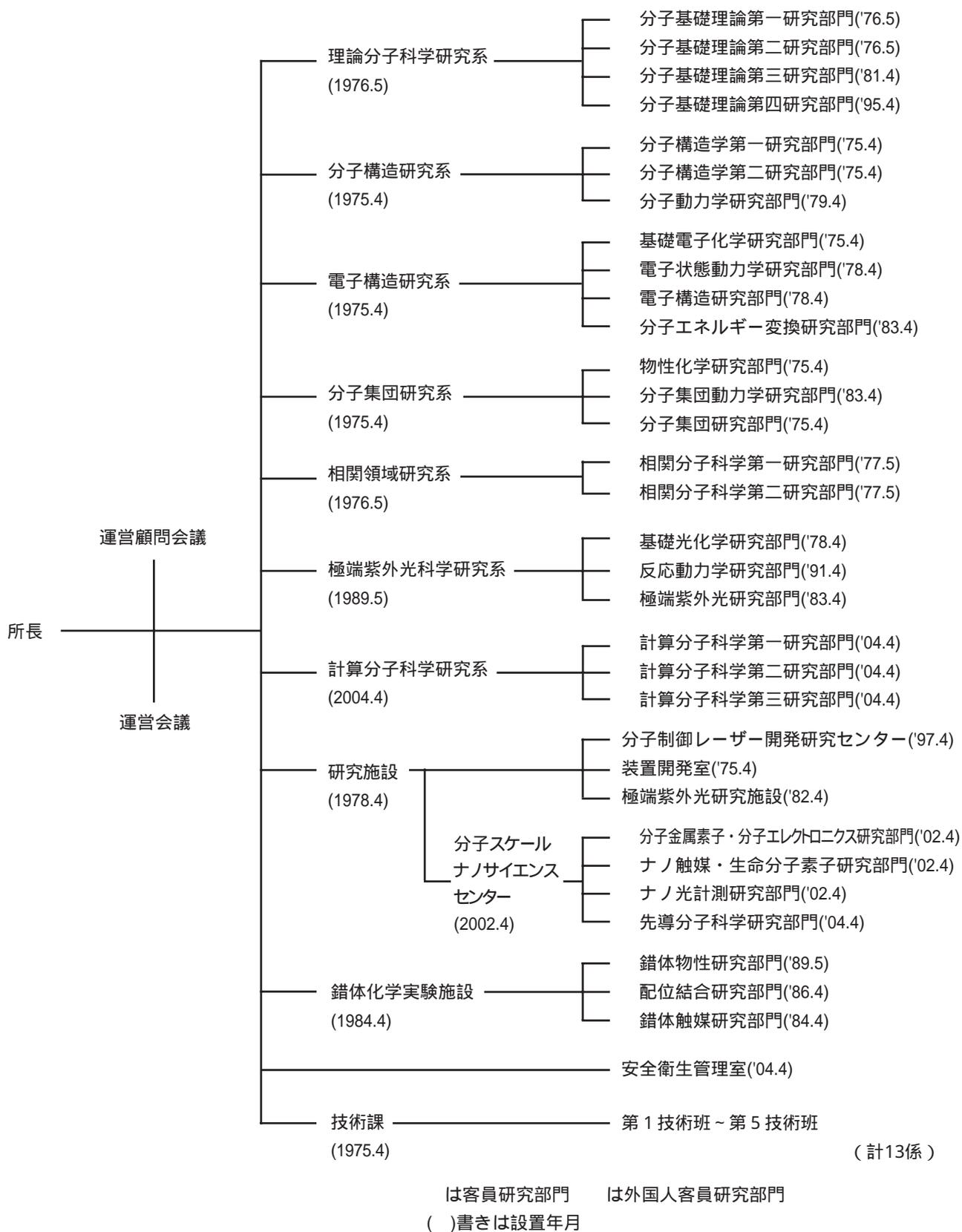
1965. 12.13 日本学術会議は、「分子科学研究所」(仮称)の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
1973. 10.31 学術審議会は、「分子科学研究所」(仮称)を緊急に設立することが適当である旨、文部大臣に報告した。
1974. 4.11 文部大臣裁定により、東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室(室長:井口洋夫前東京大学物性研究所教授,定員3名)及び分子科学研究所創設準備会議(座長:山下次郎前東京大学物性研究所長,学識経験者35人により構成)が設置された。
1974. 7. 6 分子科学研究所創設準備会議において、研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
1975. 4.22 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),関連領域研究系(関連分子科学研究部門),化学試料室が設置された。
1976. 11.30 実験棟第1期工事(5,115 m²)が竣工した。
1977. 4.18 関連領域研究系関連分子科学研究部門が廃止され、関連領域研究系(関連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 m²)が竣工した。
1978. 3.11 装置開発棟(1,260 m²),機器センター棟(1,053 m²),化学試料棟(1,063 m²)が竣工した。
1978. 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 m²)が竣工した。
1979. 3.24 実験棟第2期工事(3,742 m²),極低温センター棟(1,444 m²)が竣工した。
1979. 4. 1 分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され,管理局が総務部(庶務課,人事課,国際研究協力課),経理部(主計課,経理課,建築課,設備課),技術課に改組された。

1979. 11. 8 分子科学研究所創設披露式が挙行された。
1981. 4. 1 第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4.14 国立学校設置法の一部を改正する法律により，分子科学研究所と生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所，生理学研究所）は総合化され，岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され，管理局が岡崎国立共同研究機構管理局となり，技術課が研究所所属となった。
1982. 4. 1 研究施設として極端紫外光実験施設（UVSOR）が設置された。
1982. 6.30 極端紫外光実験棟第1期工事（1,281 m²）が竣工した。
1983. 3.30 極端紫外光実験棟第2期工事（1,463 m²）が竣工した。
1983. 4. 1 電子構造研究系に分子エネルギー変換研究部門が，分子集団研究系に分子集団動力学研究部門，極端紫外光研究部門が設置された。
1983. 11.10 極端紫外光実験施設ストレージリング装置に電子貯蔵が成功した。
1984. 2.28 極端紫外光実験施設の披露が行われた。
1984. 4.11 研究施設として，錯体化学実験施設（錯体合成研究部門，錯体触媒研究部門）が設置された。流動研究部門制度が発足し錯体化学実験施設に錯体合成研究部門が設置された。
1985. 5.10 分子科学研究所創設10周年記念式典を挙行した。
1987. 4. 1 第三代研究所長に井口洋夫分子科学研究所教授が任命された。
1989. 2.28 分子科学研究所南実験棟（3,935 m²）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，関連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 m²）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 m²）が竣工した。
1995. 3.31 関連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 関連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。
2000. 4. 1 電子計算機センター，錯体化学実験施設錯体合成研究部門が廃止され，電子計算機室が設置された。共通研究施設として，統合バイオサイエンスセンター，計算科学研究センター，動物実験センター，アイソトープ実験センターが設置された。
2002. 2.28 山手2号館（統合バイオサイエンスセンター，計算科学研究センター）（5,149 m²）が竣工した。
2002. 3.11 山手1号館A（動物実験センター，アイソトープ実験センター）（4,674 m²）が竣工した。
2002. 4. 1 関連領域研究系分子クラスター研究部門（流動），極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門（流動），分子物質開発研究センターが廃止され，分子スケールナノサイエンスセンター（分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門，ナノ触媒・生命分子素子研究部門，ナノ光計測研究部門，界面分子科学研究部門（流動），分子クラスター研究部門（流動））が設置された。
2003. 8.20 山手4号館（分子科学研究所分子スケールナノサイエンスセンター）（3,813 m²）が竣工した。
2004. 3. 1 山手5号館（NMR）（664 m²）が竣工した。
2004. 3. 8 山手3号館（統合バイオサイエンスセンター）（10,757 m²）が竣工した。
2004. 4. 1 国立大学法人法により，国立天文台，核融合科学研究所，基礎生物学研究所，生理学研究所，分子科学研究所が統合再編され，大学共同利用機関法人自然科学研究機構が創設された。理論研究系が理論分子科学研究系に改組された。計算分子科学研究系（計算分子科学第一研究部門，計算分子科学第二研究部門，計算分子科学第三研究部門）が設置された。分子スケールナノサイエンスセンターに，先導分子科学研究部門が設置され，界面分子科学研究部門，分子クラスター研究部門が廃止された。極端紫外光実験施設が，極端紫外光研究施設に改組された。安全衛生管理室が設置された。岡崎共同研究機構管理局が，大学共同利用機関法人自然科学研究機構岡崎統合事務センターとなり，総務部（総務課，国際研究協力課），財務部（財務課，調達課，施設課）に改組された。第六代研究所長に中村宏樹分子科学研究所教授が任命された。

2-3 現在の組織とその発足

大学共同利用機関法人自然科学研究機構





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、これらに関する研究所運営の組織とそれぞれの機能について説明する。

2-4-1 運営顧問会議

法人組織となって、法律上は分子科学研究所の属する自然科学研究機構にだけ研究と教育に関する（教育研究）評議会（機構外委員，機構内委員，約半数ずつ）が置かれるようになった。また、機構の経営に関する（経営）協議会（機構外委員，機構内委員，約半数ずつ）も機構に置かれるようになった。その影響で、法人化前に法律上、各研究所に置かれていた評議員会（所外委員のみから構成）や運営協議員会（所外委員，所内委員，約半数ずつ）は消滅した。各研究所では内部組織について法律上の規定はなく、独自の判断での設置が可能であるが、それらの内部組織はすべて所長の諮問組織でしかない。法人化前、研究所に置かれていた評議員会の主な機能は、所長選考、事業計画その他の管理運営に関する重要事項の検討、であったが、法人化後はこれらは基本的には機構長・役員会が評議会・協議会に諮る事項になってしまった。

自然科学研究機構では創設準備の段階から各研究所の自律性を保つことを基本原則として、機構憲章を作成した。その精神に基づき、上記の機能は法律上の組織だけに任せるのではなく、各研究所別に適切な内部組織を置くことになった。ただし、機能については、所長の諮問組織で審議するのは不適當なため、形式的には機構長の諮問組織的な位置付けで、その都度、各研究所別に大学共同利用機関長選考委員会を設置することにした。その委員には評議会・協議会の各機構外委員を含めることになっている。一方、機能については必要に応じて各研究所で適当な内部組織（所長の諮問組織）を構成することになった。その結果、分子科学研究所では運営顧問制度を発足させた。現在、機構の評議会・協議会から分子科学研究所に関わりを持つ機構外委員各2名に運営顧問をお願いしている。また、外国人評議員に代わる外国人運営顧問も引き続き2名をお願いしている。

運営顧問（任期 2004.4-2006.3）

加藤伸一	豊田中央研究所代表取締役
小間篤	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所長
土屋莊次	城西大学招聘教授，東京大学名誉教授
益田隆司	電気通信大学長

外国人運営顧問（任期 2003.4-2005.3）

FLEMING, Graham R.	米国カリフォルニア大学バークレー校教授
JORTNER, Joshua	イスラエルテルアビブ大学教授

2-4-2 運営会議

運営顧問の項で説明したように、法人化後は各研究所に置かれていた運営協議員会は消滅した。そのため、各研究所に運営会議なるものを内部組織（所長の諮問組織）として設置することになった。委員構成は以前と同じで、所外委員10名，所内委員11名の合計21名の組織である。学会等連絡会議で所外委員候補を決めるプロセスも全く同じである。分子科学研究所では教授会議も堅持しており、運営会議は教授会議と連携をとりながら法人化前と同じ方式に従って所長候補，研究者人事，共同研究について審議，検討することになっている。つまり、運営会議側では以前と同様，人事選考部会（運営会議委員の中で所外5名，所内5名から成る）で人事について審議し，共同研究専門委員会で共

同研究について審議する。所長候補検討も同様に運営会議で行われる予定である（大学共同利用機関長選考委員会から依頼を受けて）。

運営会議委員（任期 2004.4-2006.3）

阿久津 秀 雄	大阪大学たんばく質研究所所長
阿波賀 邦 夫	名古屋大学大学院理学研究科教授
太 田 信 廣	北海道大学電子科学研究所教授
加 藤 隆 子	核融合科学研究所教授
神 茂 好	京都大学大学院工学研究科教授
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
西 川 恵 子	千葉大学大学院自然科学研究科教授
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
宇理須 恆 雄	極端紫外光科学研究系教授
小 川 琢 治	分子スケールナノサイエンスセンター教授
北 川 禎 三	岡崎統合バイオサイエンスセンター教授
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
永 瀬 茂	理論分子科学研究系教授
西 信 之	電子構造研究系教授
平 田 文 男	理論分子科学研究系教授
松 本 吉 泰	分子スケールナノサイエンスセンター教授
薬 師 久 彌	分子集団研究系教授

2-4-3 人事選考部会

人事選考部会は運営会議のもとに設置され、研究教育職員候補者の選考に関する事項の調査審議を行う。委員は運営会議の所内委員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。平成12年度より、人事が分子科学の周辺に広く及びかつ深い専門性を伴いつつある現状に対応し、人事選考部会は必要に応じて構成員以外の者を専門委員として加えることが出来るようになった。また、岡崎統合バイオサイエンスセンター（分子研兼務）教授・助教授の人事選考については、同センターの特殊性に鑑み、独自の専門委員会制度を取り入れることとした。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、1名の最終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研究教育職員候補者は、“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。ただし、技術職員又は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。平成11年1月から平成16年3月までに採用された研究系の助手（平成15年4月以降研究系だけではなく、施設に採用された助手にも適用された）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。ただし、平成16年4月以降助手の任期制を見直し、分子研本来の制度に戻した。

人事選考部会委員（2004年度）

阿波賀 邦 夫（名大教授）	小 杉 信 博（分子研教授）
太 田 信 廣（北大教授）	田 中 晃 二（分子研教授）
榊 茂 好（京大教授）	永 瀬 茂（分子研教授）
田 中 健一郎（広大教授）	松 本 吉 泰（分子研教授）
寺 嶋 正 秀（京大教授）	薬 師 久 彌（分子研教授）

2-4-4 運営会議共同研究専門委員会

全国の大学等との共同利用研究は分子研の共同利用機関としての最も重要な機能の一つである。本委員会では、共同利用研究計画（課題研究、協力研究、招へい協力研究、研究会等）に関する事項等の調査を行う。半年毎（前、後期）に、申請された共同利用研究に対して、その採択及び予算について審議し、運営会議に提案する。また、UVSOR施設（極端紫外光研究施設）に関する共同利用研究については、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、運営委員会に提案する。

運営会議共同研究専門委員会の委員は、運営会議委員6名以内と運営会議の議を経て所長が委嘱する運営会議委員以外の者6名以内によって構成される。

運営会議共同研究専門委員会委員（2004年度）

伊 藤 翼（東北大名誉教授）	西 信 之（分子研教授）
阿久津 秀 雄（大阪大教授）	中 村 敏 和（分子研助教授）
富 宅 喜代一（神戸大教授）	見 附 孝一郎（分子研助教授）
宇理須 恆 雄（分子研教授）	米 満 賢 治（分子研助教授）
小 林 速 男（分子研教授）	高 橋 正 彦（分子研助教授）
田 中 晃 二（分子研教授）	

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（2004年度）

市 川 行 和（宇宙研名誉教授）	平 尾 公 彦（東大院教授）
榎 敏 明（東工大教授）	平 岡 賢 三（山梨大教授）
太 田 信 廣（北大教授）	山 内 薫（東大院教授）
小 林 昭 子（東大院教授）	山 下 晃 一（東大院教授）
高 塚 和 夫（東大院教授）	北 川 禎 三（統合バイオセ教授）
張 紀久夫（福井大非常勤講師）	小 林 速 男（分子研教授）
寺 嶋 正 秀（京大院教授）	西 信 之（分子研教授）
富 岡 秀 雄（三重大教授）	平 田 文 男（分子研教授）
永 田 敬（東大院教授）	見 附 孝一郎（分子研助教授）
西 川 恵 子（千葉大院教授）	

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、運営会議に提案しその審議に委ねる。また、研究教育職員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	実施日
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，研究総主幹，研究主幹，研究施設の長，本部研究連携室の研究所所属の研究教育職員，技術課長，他	点検評価規則	研究施設ごとに外部評価を実施
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，研究総主幹，教授数名，助教授数名	委員会規則	なし
放射線安全委員会	放射線障害の防止に関する重要事項，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	2004.7.27
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	センター規則 委員会規則	2005.1.19
分子スケールナノサイエンスセンター運営委員会	分子スケールナノサイエンス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 センターの教授及び助教授 センター以外の分子研の教授又は助教授若干 職員以外の研究者若干		2004.7.28
極端紫外光研究施設運営委員会	研究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。	研究施設長 研究施設の教授及び助教授 教授又は助教授 4 職員以外の研究者 7	研究施設規則 委員会規則	2004.8.4 2005.2.
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 施設の教授及び助教授 施設以外の教授又は助教授 2 職員以外の研究者 4	実験施設規則 委員会規則	なし
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		2005.1.31
分子研安全衛生委員会	安全衛生管理に関する事項。	(原則) 各研究室から各 1	安全衛生委員会規則	2004.11.1
図書委員会	購入図書の選定。他	施設から必要数		2004.10.15
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事。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		2004.12.2
情報ネットワーク管理運営専門委員会	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		2004.5.13, 7.22, 9.15, 11.10

設置根拠の欄 分子科学研究所で定めた規則，略式で記載。記載なきは規定文なし。
表以外に，分子研コキウム係，自衛消防隊組織がある。

(2) 岡崎 3 機関の各種委員会等

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	実施日
岡崎 3 機関研究所長会議	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	所長会議運営規則	2004.4.21, 5.18, 6.15, 7.20, 9.28, 10.19, 11.16, 12.21
岡崎 3 機関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	研究教育職員 1 技術職員 1	委員会規則	
岡崎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。	副所長又は研究総主幹, 教授 1 計算科学研究センター長	委員会規則	2004.3.11
岡崎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)	岡崎情報ネットワーク管理運営委員会規則第 7 条	
岡崎情報ネットワーク管理運営専門委員会	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) 教授 1 技術職員 1	同上	2004.3.17, 5.13, 7.22, 9.15, 11.10
岡崎 3 機関スペース・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	委員会規則	なし
岡崎 3 機関スペース・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, 研究教育職員 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則第 6 条 委員会要項	なし
岡崎共同利用研究者宿泊施設委員会	宿泊施設 (ロジ) の運営方針・運営費に関すること。	担当責任所長 教授 1	委員会規則	2004.6.3
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。	担当責任所長 教授 1	センター規則第 5 条	2004.9.17
岡崎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	情報図書館規則第 4 条 委員会規則	2005.2
岡崎 3 機関安全衛生委員会	岡崎 3 機関の安全衛生に関し必要な事項について。		安全衛生管理規則	2004.4.19, 5.18, 6.15, 7.20, 8.17, 9.28, 10.19, 11.16
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	委員会規則	なし
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	研究教育職員 2 技術課長	動物実験に関する指針 委員会規則	2004.12.10 2005.3
岡崎統合バイオサイエンスセンター運営委員会	センターの管理運営に関する重要事項を審議するため。	教授又は助教授 2	センター規則	2004.6.30 2005.2.22

計算科学研究センター運営委員会	センターの管理運営に関する重要事項を審議するため。	教授又は助教授 2	センター規則	2004.8.18 2005.3.1
動物実験センター運営委員会	センターの管理運営に関する重要事項を審議するため。	教授又は助教授 2	センター規則	2004.6.17, 9.16
アイソトープ実験センター運営委員会	センターの管理運営に関する重要事項を審議するため。	教授又は助教授 2 技術課長	センター規則	2004.7.7
セクシュアル・ハラスメント防止委員会	セクシュアル・ハラスメントの防止並びにその苦情の申出及び相談に対応するため。 セクシュアル・ハラスメントの防止等適切な実施を期すため。	所長が指名する者 2	委員会等に関する規則	2004.9.3
文部科学省共済組合自然科学研究機構支部岡崎 3 機関食堂運営委員会	営業種目, 営業時間。他	教授 1 技術課長	委員会規則	なし
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	研究教育職員 1		2004.6.9, 8.17
アイソトープ実験センター明大寺地区実験施設放射線安全委員会	明大寺地区実験施設における放射線障害の防止に関し必要な事項を企画審議する。	教授 3 技術課長	センター明大寺地区実験施設放射線障害予防規則	2004.7.22
アイソトープ実験センター山手地区実験施設放射線安全委員会	山手地区実験施設における放射線障害の防止に関し必要な事項を企画審議する。	教授 3 技術課長	センター山手地区実験施設放射線障害予防規則	2004.7.22
機構の広報に関する打合せ会	機構の広報活動に関する検討を行う。	教授 1		なし
施設整備委員会	機構の山手地区及び明大寺地区の施設整備に関する事項の立案を行い, 所長会議に報告する。	教授 2	所長会議申合せ	持ち回り 会議に実施
自然科学研究機構岡崎情報公開委員会	「独立行政法人等の保有する情報の公開に関する法律」を円滑に実施するため。	所長又は研究総主幹 教授 1	委員会規則	2004.7.14, 8.26, 10. 13, 11.30
生命倫理審査委員会	機構におけるヒトゲノム・遺伝子解析研究を, 倫理的配慮のもとに適正に推進するため。	教授又は助教授 2	委員会規則	2005.3.18

設置根拠の欄 岡崎 3 機関が定めた規則, 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

中村宏樹	所長
小杉信博	研究総主幹(併)
伊藤光男	研究顧問, 名誉教授
井口洋夫	研究顧問, 名誉教授
茅幸二	研究顧問, 名誉教授
近藤保	研究顧問
玉尾皓平	研究顧問
土屋莊次	研究顧問
廣田襄	研究顧問
岩田末廣	名誉教授
岩村秀	名誉教授
木村克美	名誉教授
齋藤修二	名誉教授
長倉三郎	名誉教授
花崎一郎	名誉教授
廣田榮治	名誉教授
丸山有成	名誉教授
諸熊奎治	名誉教授
吉原經太郎	名誉教授

理論分子科学研究系 研究主幹(併) 平田文男

分子基礎理論第一研究部門

永瀬茂	教授
岡本祐幸	助教授
小林郁	助手
奥村久士	助手
西野正理	研究員
河東田道夫	専門研究職員
李秀榮	専門研究職員
小久保裕功	専門研究職員
眞木淳	専門研究職員
石田豊和	専門研究職員
秋永宣伸	専門研究職員
SLANIA, Zdenek	専門研究職員
小野ゆり子	専門研究職員
土屋敬史	専門研究職員
KULKAUNI, Anant	専門研究職員
高木望	学振特別研究員

分子基礎理論第二研究部門

中村宏樹	教授(併)
信定克幸	助教授
MIL'NIKOV, Gennady V.	助手
ZOU, Shiyang	研究員
近角真平	研究員

趙 聖 行	研究員
田 村 宏 之	研究員
KONDORSKIY, Alexey	専門研究職員
ZHAO, Yi	学振外国人特別研究員 '03.11.2 ~ '05.11.1
PARK, Tae Jun	外国人研究職員 '04.7.1 ~ '04.8.31 '04.12.7 ~ '05.2.6

分子基礎理論第三研究部門

平 田 文 男	教 授
米 満 賢 治	助教授
山 下 靖 文	助 手
鄭 誠 虎	助 手
KOBRYN, Oleksandr	研究員
丸 山 豊	研究員
宮 田 竜 彦	研究員
前 島 展 也	研究員
吉 田 紀 生	専門研究職員
谷 村 あゆみ	専門研究職員
生 田 靖 弘	専門研究職員
井 上 仁	特別訪問研究員

分子基礎理論第四研究部門 (客員研究部門)

波 田 雅 彦	教 授 (東都大理)
中 嶋 隆	助教授 (京大工ネ理工研)

分子構造研究系 研究主幹(併) 北 川 禎 三

分子構造学第一研究部門

岡 本 裕 巳	教 授
森 田 紀 夫	教 授 (福井大工)
井 村 考 平	助 手
永 原 哲 彦	研究員

分子構造学第二研究部門 (客員研究部門)

太 田 俊 明	教 授 (東大院理)
石 森 浩一郎	助教授 (京大工)

分子動力学研究部門

横 山 利 彦	教 授
北 川 禎 三	教 授 (兼) (岡崎統合バイオサイエンスセンター)
内 田 毅	助 手
中 川 剛 志	助 手
丸 山 耕 一	研究員
松 岡 秀 人	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
十 代 健	助 手
西 條 純 一	助 手
岡 部 智 絵	研究員

渡辺 三千雄 研究員
BOO, Bong Hyun 外国人研究職員 '04.7.8 ~ '04.8.26
'04.12.20 ~ '05.2.28

電子状態動力学研究部門

大森 賢治 教授
大島 康裕 教授
香月 浩之 助手

電子構造研究部門 (客員研究部門)

市村 禎次郎 教授 (東工大理)
高木 紀明 助教授 (東大院新領域創成)

分子エネルギー変換研究部門 (外国人客員研究部門)

KWON, Yong-Seung 教授 (成均館大学 教授) '03.10.3 ~ '04.9.2
OSHEROV, Vladimir, Iosiphovich 教授 (ロシア科学アカデミー化学物理研究所 教授) '04.9.15 ~ '05.1.14
STANKEVICH, Vladimir, G. 教授 (クルチャトフ放射光研究所室長, モスクワ工科大学 教授)
'05.1.20 ~ '05.7.19
VAROTSIS, Constantinos 助教授 (クレタ大学 教授) '04.10.1 ~ '05.1.31
PULAY, Peter 助教授 (アーカンソー大学 教授) '04.1.1 ~ '04.5.31
COUPRIE, Marie, Emmanuelle 助教授 (原子力委員会 主任研究員) '04.6.10 ~ '04.9.9
TANATAR, Makariy 助教授 (ウクライナ科学アカデミー表面化学研究所 シニア科学研究員)
'05.2.1 ~ '06.1.31

分子集団研究系 研究主幹(併) 小林 速男

物性化学研究部門

薬師 久彌 教授
中村 敏和 助教授
山本 薫 助手
古川 貢 助手
山本 貴 研究員
原 俊文 研究員
DROZDOVA, Olga 研究員
中野 千賀子 特別協力研究員
SIMONYAN, Mkhitar 特別訪問研究員

分子集団動力学研究部門

小林 速男 教授
高橋 一志 助手
LEE, Ha-Jin 学振外国人特別研究員 '02.6.15 ~ '04.6.14
大塚 岳夫 学振特別研究員
宮本 明人 共同研究員

分子集団研究部門 (客員研究部門)

榎 敏明 教授 (東工大院理)
内藤 俊雄 助教授 (北大院理)

相關領域研究系 研究主幹(併) 薬師 久彌

相關分子科学第一研究部門

木下 一彦 教授(兼) 岡崎統合バイオサイエンスセンター)
青野 重利 教授(兼) 岡崎統合バイオサイエンスセンター)

秋 田 素 子 助 手
吉 岡 資 郎 助 手 (岡崎統合バイオサイエンスセンター)
足 立 健 吾 助 手 (岡崎統合バイオサイエンスセンター)

相関分子科学第二研究部門 (客員研究部門)

齋 藤 正 男 教 授 (東北大多元研)
中 村 一 隆 助 教授 (東工大応用セラミック研)

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
菱 川 明 栄 助 教授
初 井 宇 記 助 手
樋 山 みやび 助 手
高 橋 栄 治 助 手
瀬 戸 山 寛 之 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
野 々 垣 陽 一 助 手
片 柳 英 樹 助 手
吉 村 大 介 特 別 訪 問 研 究 員
須 賀 康 裕 共 同 研 究 員
鈴 木 晃 共 同 研 究 員
伊 藤 雅 幸 共 同 研 究 員

極端紫外光研究部門 (外国人客員研究部門)

RÜHL, Eckart, Gunther Adolf 教 授 (ブルツブルグ大学 教授) '04.4.6 ~ '04.7.5
WAN, Lijun 教 授 (中国科学院化学研究所 教授) '04.7.10 ~ '04.10.9
SUN, Wei-Yin 教 授 (南京大学錯体化学研究所 教授) '04.11.1 ~ '05.10.31
DROZDOVA, Olga 助 教授 (ヨッフエ物理工学研究所 上級研究員) '03.8.1 ~ '04.7.31
LABLANQUIE, Pascal 助 教授 (フランス放射光研究所 CNRS 主任研究員) '04.9.1 ~ '05.2.28
AKA, Gerard, Philippe 助 教授 (パリ国立高等化学院 教授) '05.3.1 ~ '05.5.31

計算分子科学研究系 研究主幹(併)

計算分子科学第一研究部門

岡 崎 進 教 授 (兼) (計算科学研究センター)
森 田 明 弘 助 教授 (兼) (計算科学研究センター)
南 部 伸 孝 助 手
三 浦 伸 一 助 手 (計算科学研究センター)
石 田 干 城 助 手 (計算科学研究センター)

計算分子科学第二研究部門

計算分子科学第三研究部門 (客員研究部門)

研究施設

分子制御レーザー開発研究センター センター長(併) 松本吉泰

分子位相制御レーザー開発研究部

放射光同期レーザー開発研究部

猿倉信彦	助教授
小野晋吾	助手
村上英利	専門研究職員
QUEMA, Alex	学振外国人特別研究員 '04.4.1 ~ '06.3.31

特殊波長レーザー開発研究部

平等拓範	助教授
石月秀貴	助手
佐藤庸一	専門研究職員
齋川次郎	専門研究職員
PAVEL, Nicolaie	専門研究職員
曽根明弘	共同研究員
酒井博	共同研究員
DASCALU, Traian	共同研究員
バンダリラケシュ	共同研究員
常包正樹	共同研究員
佐藤康弘	共同研究員
金原賢治	共同研究員
姉崎幸信	共同研究員

分子スケールナノサイエンスセンター 施設長(併) 小川琢治

分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門

小川琢治	教授
多田博一	助教授
鈴木敏泰	助教授
田中彰治	助手
阪元洋一	助手
田中啓文	助手
山田亮	助手
HUANG, Wei	研究員
中尾聡	専門研究職員
ZHANG, Fapei	学振外国人特別研究員 '04.4.2 ~ '06.4.1
荒木幸一	特別訪問研究員

ナノ触媒・生命分子素子研究部門

魚住泰広	教授
永田央	助教授
櫻井英博	助教授
藤井浩	助教授(兼) 岡崎統合バイオサイエンスセンター)
長澤賢幸	助手
倉橋拓也	助手
山田陽一	助手
東林修平	助手

榎 優	研究員
ナノ光計測研究部門	
松本吉泰	教授
佃達哉	助教授
渡邊一也	助手
根岸雄一	助手
松本健俊	助手
角山寛規	研究員
長尾昌志	研究員
澤田健	共同研究員
猪野大輔	共同研究員

先導分子科学研究部門	
加藤晃一	教授 (名市大薬)
高橋正彦	助教授
渡邊昇	助手
解良聡	助手
KHAJURIA, Yugal	研究員

装置開発室 室長(併) 宇理須 恆 雄

極端紫外光研究施設	施設長(併)	小 杉 信 博
加藤政博		教授
木村真一		助教授
繁政英治		助教授
伊藤健二		助教授 (高工ネ物質構造科学研)
保坂将人		助手
持箸晃		助手
伊藤孝寛		助手
彦坂泰正		助手
櫻井陽子		研究員
BIELAWSKI, Serge		特別訪問研究員
SZWAJ, Christophe		特別訪問研究員
COUPRIE, Marie, Emmanuelle		特別訪問研究員

錯体化学実験施設 施設長(併) 田 中 晃 二

錯体物性研究部門	
田中晃二	教授
川口博之	助教授
和田亨	助手
松尾司	助手
ZHANG, Dao	専門研究職員
小室貴士	学振特別研究員

配位結合研究部門 (客員研究部門)	
松坂裕之	教授 (大阪府立大総合科学)
上野圭司	助教授 (群馬大工)

錯体触媒研究部門（客員研究部門）

真島和志 教授（阪大基礎工）
栗原正人 助教授（山形大理）

安全衛生管理室 室長(併) 小川琢治
戸村正章 助手

岡崎共通研究施設（分子科学研究所関連）

岡崎統合バイオサイエンスセンター

戦略的方法論研究領域

木下一彦 教授
青野重利 教授
藤井浩 助教授
小林克彰 研究員
鬮目理人 研究員
古池晶 専門研究職員
岡本哲明 専門研究職員
PATRA, Digambara 学振外国人特別研究員 '04.9.1 ~ '06.8.31
城口克之 学振特別研究員
藤原郁子 学振特別研究員

生命環境研究領域

北川禎三 教授
林崎良英 教授（客員）(理化研)
久保稔 研究員
KOZLOWSKI, Pawel, Michal 学振外国人招へい研究者（長期） '04.4.23 ~ '04.8.21
VAROTSIS, C. 学振外国人招へい研究者（短期） '05.2.18 ~ '05.4.17
XAVIER, Antonio, V. 学振外国人招へい研究者（短期） '05.2.21 ~ '05.3.13
MAHINAY, Myrna, Sillero 学振外国人特別研究員 '03.6.3 ~ '05.6.2
GU, Yuzong 学振外国人特別研究員 '04.7.21 ~ '06.7.20
EL-MASHTOLY, S. F. -M. 学振外国人特別研究員 '04.10.1 ~ '06.9.30
當舎武彦 学振特別研究員
太田雄大 学振特別研究員
長野恭朋 学振特別研究員
平松弘嗣 学振特別研究員

計算科学研究センター 施設長(併) 永瀬 茂

岡崎進 教授
森田明弘 助教授
大野人侍 助手
岩橋建輔 専門研究職員
松田茂信 専門研究職員
吉井範行 専門研究職員
篠田恵子 専門研究職員
山田篤志 専門研究職員
三上泰治 専門研究職員
LIANG, Kuokan 専門研究職員

村 越 稔 専門研究職員
金城 友之 特別協力研究員

技術課 課長 加藤 清則

第1技術班 班長 吉田 久史

理論分子科学研究系技術係

技術職員 石村 和也

分子構造研究系技術係

技術職員 渡邊 廣憲

電子構造研究系技術係

係長 中村 永研

第2技術班 班長 山中 孝弥

分子集団研究系技術係

技術職員 賣市 幹大

技術職員 大石 修

技術職員 岡野 芳則

相關領域研究系技術係

極端紫外光科学研究系技術係

係長 水谷 伸雄

技術職員 手老 龍吾

第3技術班 班長 鈴木 光一

電子計算機技術係

技術職員 手島 史綱

技術職員 南野 智

技術職員 内藤 茂樹

技術職員 澤 昌孝

装置開発技術係

技術職員 内山 功一

技術職員 豊田 朋範

技術職員 矢野 隆行

技術職員 青山 正樹

技術職員 近藤 聖彦

第4技術班 班長 堀米 利夫

分子制御レーザー開発技術係

係長 山崎 潤一郎

技術職員 上田 正

極端紫外光実験技術係

係長 蓮本 正美

技術職員 近藤 直範

技術職員 林 憲志

第5技術班 班長 水谷文保

分子スケールナノサイエンス技術第一係

係長	永田正明
技術職員	牧田誠二
技術職員	千葉寿

分子スケールナノサイエンス技術第二係

係長	高山敬史
主任	酒井雅弘

錯体化学実験技術係

技術職員	水川哲徳
------	------

広報担当

技術職員	原田美幸
------	------

- * 整理日付は2004年12月1日現在。ただし、外国人研究者で2004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員等で、本務校を記載している。

2-5-2 人事異動状況

(1) 分子科学研究所の人事政策

分子科学研究所では創立以来、研究教育職員(教授、助教授、助手)の採用に関しては厳密に公募の方針を守り、しかもその審議は全て所内5名、所外5名の委員で構成される運営会議人事選考部会に委ねられている。さらに、厳密な選考を経て採用された助教授および助手は分子科学研究所教員の流動性を保つため内部昇格が禁止されている。施設の助教授・助手については例外規定が設けられているが、実際には分野の特殊性から同じ施設で、助手から助教授と助教授から教授への昇格が認められた例があるだけである。また、助手が6年を越えて勤務する際には毎年、本人の属する研究系の主幹あるいは施設長が主幹・施設長会議においてそれまでの研究活動と転出の努力を報告し、同会議で承認された後、教授会議でも同様の手続きを行い承認を得るという手続きをとっている。

教授と助教授の研究グループの研究活動に関しては、毎年教授・助教授全員が所長と研究顧問によるヒアリング、また3年おきには研究系あるいは施設ごとに国内委員と国外委員による点検・評価を受けている。さらに、教授と助教授の個人評価は国外委員により confidential report の形で所長に報告されている。このように完全な公募による教員の採用、国内外の外部研究者による評価ならびに内部昇格禁止等の内部措置により、分子科学研究所に勤務する助教授および助手は研究業績を上げて、大学や研究機関に転出していくことを当然のこととしている。教員の流動性とは、全ての研究者が等しく、その能力に応じて研究環境が整った大学や研究機関で研究する機会が与えられることであり、その結果、個々の研究者がさらに研究能力をのばして各研究分野で指導者としての人材に成長することに大きな貢献をするものである。

(2) 創立以来の人事異動状況(2005年1月1日現在)

専任研究部門等

職名 区分	所長	教授	助教授	助手	技術職員	非常勤研究員 (IMSフェロー)
就任者数	6	42	68	217	145	166
転出者数	5	25	50	169	110	148
現員	1	17(1)	18(1)	48	35	18

()は併任で外数。

流動研究部門

部門名	錯体合成研究部門			先導分子科学研究部門		
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	7	9	13
転出者数	8	9	18	7	8	11
現員				0	1	2

錯体合成研究部門は、平成12年3月31日限りをもって廃止。
先導分子科学研究部門は、平成16年4月1日に界面分子科学研究部門を名称変更したもの。

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	4	5	7	1	4	4
転出者数	4	5	7	1	4	4
現員						

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。
分子クラスター研究部門は、平成16年3月31日限りをもって廃止。

客員研究部門

職名 区分	教授	助教授
就任者数	107	119
現員	9	7

外国人客員研究部門

職名 区分	分子エネルギー変換研究部門		極端紫外光研究部門	
	教授	助教授	教授	助教授
就任者数	27	28	29	21
現員	1	1	1	1

人数は、延べ招へい人数(招へい決定者を含む。継続は除く。)

2-6 研究系及び研究施設の概要

理論分子科学研究系

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構造の理論的研究

研究課題 1 ,分子の設計と反応の理論計算
2 ,分子シミュレーションにおける新手法の開発と生体高分子の立体構造の理論的研究

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

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 ,界面における液体の統計力学的研究
5 ,分子性物質の電子物性における次元性と電子相関に関する理論的研究
6 ,光誘起非線型ダイナミクスと秩序形成過程に関する理論的研究

分子基礎理論第四研究部門（客員）

研究目的 1 ,凝縮系における化学反応ダイナミクスに関する理論的・計算科学的研究
2 ,凝縮系における光と分子の相互作用および分子間相互作用に関する理論的研究

研究課題 1 ,凝縮系化学反応における分子エネルギー移動過程の理論的研究
2 ,自由エネルギー勾配法の開発、溶質分子の構造最適化プログラムの開発と個別反応への適用
3 ,液体および生体分子系における分子間振動相互作用と振動励起移動および光学的性質に関する理論的研究
4 ,分子振動の諸性質と理論的に解析するためのソフトウェアの開発と応用

分子構造研究系

研究目的 分子科学では原子・分子の立体配置及び動きを知ること,またそれらと電子状態の相関を解明す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分光法およ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,高精密化するとともに時間・空間分解能を高めることも含め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,分子及び分子集団の時間的・空間的挙動を通じた化学的性質の解明
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,極めて高い空間分解能をもつ高速分光法による分子ダイナミクスの研究
2,微粒子系における素励起の空間分解分光の研究
3,液体ヘリウム中の原子・分子・イオンの分光学的研究
4,ヘリウム原子のレーザー冷却・トラッピングの研究

分子構造学第二研究部門(客員)

研究目的 1,X線吸収分光法による固体表面化学反応過程の追跡
2,鉄センサー蛋白質の構造化学的研究

研究課題 1,独自に開発したエネルギー分散型X線吸収スペクトル測定法を用いて,固体表面における化学反応過程を追跡する
2,鉄センサー蛋白質(IRP)が鉄を検出するとDNAに結合し転写活性を示す事が知られているが,その構造化学的研究を振動分光法で進める。

分子動力学研究部門

研究目的 磁性薄膜における表面分子化学的磁化制御

研究課題 X線磁気円二色性と磁気光学Kerr効果による新規磁性薄膜の探索と表面分子化学的な磁化制御の検討

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 ,内殻励起・イオンの量子化学
2 ,多次元系における非断熱動力学の理論的研究
3 ,ヘム蛋白質及びその関連モデル化合物の電子状態
4 ,分子性磁性体の単結晶の磁気物性研究
5 ,放射光を利用した極端紫外域の分光学と動力学

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。分子と分子集合体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 ,磁性有機超伝導体・単一分子金属の開発と物性
2 ,新規な機能性分子システムの開発

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 1 ,興味ある物性を持つ新物質の開発と物性
2 ,分子素子の基礎研究

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 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 ヘムタンパクの構造 - 機能相関の解明

研究課題 ヘムオキシゲナーゼの反応機構解明と新規ヘムタンパクのクローニング、発現系の構築

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、ナノ物性、ナノバイオマテリアル創製などを旨と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、短パルス光による分子ダイナミクス研究

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STMによるその場観察の研究

2、気相における光イオン化及び光解離のダイナミクス

3、放射光に同期した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シリコン表面ナノ構造の形成と生体情報伝達受信素子製作

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、化学反応動力学の理論的研究

2、分子および分子集合系の分子構造・電子構造と物性

3、極端紫外光分子科学の研究

- 4 ,金属原子を含む化合物 , 新物質創成
- 5 ,ナノスケール分子科学の研究

計算分子科学研究系

研究目的 分子および分子集合体の計算科学的研究

計算分子科学第一研究部門

研究目的 分子および分子集合体の構造と動力学に関する計算科学的研究

- 研究課題
- 1 ,凝集系における溶質 , 溶媒の量子力学シミュレーション
 - 2 ,複雑な古典凝集系の分子力学シミュレーション
 - 3 ,界面和周波発生分光の計算手法の開発

計算分子科学第二研究部門

研究目的 分子および分子集合体の機能と物性に関する計算科学的研究

研究課題 (公募中)

研究施設

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 , 新しいレーザーシステムを開発し , 光分子科学における新しい分野の開拓を目指す。

- 研究課題
- 1 ,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
 - 2 ,赤外パルスレーザーシステムの開発とその分子科学研究への応用

分子スケールナノサイエンスセンター

研究目的 原子・分子サイズでの物質の構造および形状の解明と制御 , さらに新しい機能を備えたナノレベルでの新分子系「分子素子」の開発とその電子物性の解明を行うとともに , このような研究を進展させる新しい方法論の開発を行う。

分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門

研究目的 分子スケール電子物性研究の基礎となる機能性分子の開発およびその電子物性計測技術の確立を目指す

- 研究課題
- 1 ,分子電子素子のための分子設計と合成およびナノデバイスの作成
 - 2 ,巨大分子系合成の研究
 - 3 ,非伝統的手法による無機ナノ構造体の作成
 - 4 ,分子スケールプローパーの開発
 - 5 ,有機電界効果トランジスターの作成と特性評価

6 ,シリコン - 炭素共有結合性ナノインターフェースの構築

7 ,分子エレクトロニクス素子のための有機半導体の開発

ナノ触媒・生命分子素子研究部門

研究目的 触媒機能発現機構の解明と理解の上立った新しい機能を発現する新触媒の創成および生体分子が示す特徴を活用した反応制御, エネルギー変換, 情報伝達系などの新たな設計指針の確立を目指す

- 研究課題
- 1 ,両親媒性レジタン持ナノパラジウム触媒の創成: 設計・調整および水中触媒作用
 - 2 ,光励起電子移動を利用した触媒反応の開発
 - 3 ,大型有機分子を用いたナノ反応場の設計と制御
 - 4 ,新規不斉錯体触媒の開発
 - 5 ,ポウル型共益分子の設計・合成および機能
 - 6 ,金属ナノ粒子を用いた触媒反応の開発

ナノ光計測研究部門

研究目的 新たなナノ空間・ナノ構造体の計測手法を用いて, ナノ空間内の現象解明とその分子科学的応用を行う

- 研究課題
- 1 ,ナノサイエンス研究に適した極端紫外光源の開発
 - 2 ,非線形分光による固体・ナノ構造体表面でのダイナミクス
 - 3 ,サブナノ金属クラスターの調整と構造, 電子状態, 反応性評価
 - 4 ,有機単分子膜によって保護された金属クラスターの構造解析

先導分子科学研究部門 (流動)

研究目的

- 1 ,分子軌道イメージング分光法の開発と運動量分光の構築
- 2 ,超高磁場核磁気共鳴 (NMR) 法を用いて生体高分子の作動機構を原子分解能で解明する

- 研究課題
- 1 ,マルチパラメータ同時計測装置の開発
 - 2 ,電子線コンプトン散乱の衝突立体ダイナミクス
 - 3 ,配向分子の電子運動量分光
 - 4 ,高分解能 NMR 計測による複合糖質・タンパク質の精密構造解析
 - 5 ,NMR を利用した生体高分子の相互作用と内部運動の解析
 - 6 ,超高磁場固体 NMR 法の生体分子への応用

装置開発室

研究目的 実験装置の設計・製作および技術開発

- 研究課題
- 1 ,放電加工, 切削加工, レーザー加工による微細加工の開発と応用
 - 2 ,ワンチップ MCU を使った自動制御装置の開発
 - 3 ,CPLD, FPGA を用いた高速デジタル回路の開発

極端紫外光研究施設

- 研究目的 電子蓄積リングを利用した極端紫外光源の研究・開発とシンクロトン放射を用いた分子科学の研究
- 研究課題 1 ,極端紫外光源の高度化と先進放射光源に関する開発研究
2 ,相対論的電子ビームを用いた光発生法の開発研究,及びビーム物理学研究
3 ,極端紫外光を用いた光物性実験用の観測システムの開発とそれを用いた分光学的研究
4 ,極端紫外光を用いた光化学実験用の観測システムの開発とそれを用いた分光学的研究
5 ,極端紫外光用高性能分光器及び挿入光源を含めた制御システムの開発研究

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,反応性等を探索することにより,新物質創造のための設計指針ならびに新規反応系を開発することを目的とする。

錯体触媒研究部門

- 研究目的 遷移金属錯体触媒による有機分子変換反応の開発
- 研究課題 1 ,完全水系メディア中での触媒反応
2 ,新規不斉触媒の開発
3 ,錯体触媒の固定化と新機能

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 ,酸塩基中和反応を駆動力とする化学エネルギーと電気エネルギーの相互変換
3 ,自己組織性精密分子システムの設計・創成・機能発現
4 ,金属カルコゲニド化合物の合成と多核機能化

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

安全衛生管理室

- 業務目的 研究所における快適な職場環境の実現と労働条件の改善を通じて職場における職員の安全と健康を確保するための専門的業務を行う

2-7 岡崎共通研究施設（分子科学研究所関連）の概要

岡崎統合バイオサイエンスセンター

研究目的 生命現象の基本に関する諸問題を分子レベルから細胞，組織，個体レベルまで統合的に捉える新しいバイオサイエンスの基礎的研究を展開する

- 研究課題
- 1 ,蛋白質の機能と高次構造ダイナミクス
 - 2 ,一分子生理学：生体分子機械の動作機構を光学顕微鏡下で探る
 - 3 ,センサー機能を有する金属タンパク質の構造と機能
 - 4 ,酸素分子を活性化する金属酵素の機能発現の分子メカニズム

計算科学研究センター

研究目的 分子および分子集合体の計算科学的研究

- 研究課題
- 1 ,化学反応動力学の基礎的研究
 - 2 ,凝集系の計算機シミュレーション
 - 3 ,界面和周波発生分光の計算手法の開発

2-8 技術課

技術課は所長に直属した技術職員の組織で、2004年4月1日の構成員は、34名である。2005年4月には、3名が加わり、37名になる。技術職員は、6研究系及び6付属施設に配属され、それぞれの持つ高い専門技術で、分子科学の研究を支援している。研究室に配属された技術職員は、研究教育職員と共同して研究を行ううちに、博士号を取得し、他機関へ研究者として転出して行く。一方、付属施設に配属された職員は、先端的装置を駆使し、研究教育職員から依頼された業務をこなす、装置の維持管理を行っている。また、研究教育職員と協力し、施設の運営も行っている。

施設に配属された技術職員が対応する技術分野も幅が広く、依頼を受けて製作・測定する分野としては、機械工作、回路工作、理化学ガラス製作、計算機プログラミング、広報ポスター・出版物作成、化学分析などがあり、機器の管理分野では、ネットワークシステム、レーザーシステム、X線解析装置、電子顕微鏡、ESR、SQUID、NMR装置などの維持管理があり、また施設の管理分野としては、計算機施設、装置開発施設、高圧ガス製造施設、放射光施設の維持管理業務がある。

分子研は2004年4月、自然科学研究機構に改変され大学共同利用機関法人となった。研究所への安全関係の適用法令が、人事院規則から、労働安全衛生法に変わったのに伴い、安全衛生面でも支援をしている。安全衛生分野では、基礎生物学研究所並びに生理学研究所とともに、岡崎3機関の安全衛生委員会に安全衛生管理者として加わった。分子研に於いては、安全衛生管理室に所属し（併任）、4名の技術課所属衛生管理者が、毎週職場巡視を行い、分子研の安全衛生管理に寄与している。また、放射線・電気/レーザー・高圧ガス担当の作業主任者としても安全衛生管理室に加わり、研究教育職員とともに安全衛生を担当している。

技術職員（法人前は技官という名称だった）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ある。技術職員が組織化したことで、直接待遇改善につながったが、組織化の効果はそれだけでなく、施設や研究室の狭い枠に留まっていた支援を、広く分子科学分野全体の研究支援を行うことができるようになり、強力な研究支援体制ができあがった。支援体制の横のつながりを利用して、分子研への見学・視察の際の見学先との交渉、スケジュールの作成も技術課が行っている。

しかし、分子研の場合、施設に配属された技術職員は、研究室に配属された技術職員に比較すると、流動性に乏しいので、組織と個人の活性化を図るために、積極的に次のような事項を推進している。

2-8-1 技術研究会

施設系技術職員が他の大学、研究所の技術職員と技術的交流を行うことにより、技術職員相互の技術向上に繋がることを期待し、1975年度、分子研技術課が他の大学、研究所の技術職員を招き、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失敗、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、1982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。1996年度より国立天文台や大学も交代で開催するようになった。表1に今までの技術研究会開催場所及び経緯を示す。

表 1 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 貴
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
平成12	福井大学	平成12年9月28-29日	機器・分析	
	東北大学	平成13年3月1-2日	工作、装置、回路、極低温、情報・ネット ワーク、材料・物性開発、地球物理観測	

平成13	大阪大学	平成13年11月15-16日	機器・分析	
	核融合科学研究所	平成14年3月14-15日	工作、装置、計測・制御、低温、計算機・データ処理	
平成14	東京大学	平成15年3月6-7日	工作、装置、回路、極低温、情報・ネットワーク、生物科学、機器・分析、地球物理観測、文化財保存、教育実験・実習	
平成15	三重大学	平成15年11月20-21日	機器・分析	
	高エネルギー加速器研究機構	平成16年2月26-27日	工作、低温、回路・制御、装置、計算機	
平成16	佐賀大学	平成16年9月16-17日	機器分析を主とし全分野	
平成16	大阪大学	平成16年3月3-4日	工作、装置、回路・計測制御、低温、情報ネットワーク、生物科学、教育実験・演習・実習	

2-8-2 技術研修

1995年度より、施設に配属されている技術職員を対象として、他研究所・大学の技術職員を一定期間、分子研の付属施設に受け入れ技術研修を行っている。分子研のような大学共同利用機関では、研究者同士の交流が日常的に行われているが、技術者同士の交流はほとんどなかった。他機関の技術職員と交流が行われれば、組織の活性化、技術の向上が図れるであろうという目的で始めた。この研修は派遣側、受け入れ側ともに好評だった。そこで、一歩進めて、他研究機関に働きかけ、受け入れ研修体制を作っていただいた。そうした働きかけの結果、1996年度より国立天文台が実施し、1997年度には高エネルギー加速器研究機構、1998年度からは核融合科学研究所が受け入れを開始した。法人になった今年度は、相互の受け入れ体制が整っていないためにまだ実施件数は少ないが、今後活発になるものと考えている。表2、3に分子研での受け入れ状況を示す。

表2 過去の技術研修受入状況

年度	受入人数
平成7年度	6
平成8年度	12
平成9年度	13
平成10年度	7
平成11年度	6
平成12年度	13
平成13年度	47
平成14年度	96
平成15年度	59

表3 技術研修受入状況（平成16年度）

氏名	所属	研修期間	受入施設
増田 忠志	名古屋大学全学技術センター	5/7/04	装置開発室
松下 幸司	名古屋大学全学技術センター	7/9/04	装置開発室
松下 幸司	名古屋大学全学技術センター	7/12/04	装置開発室
松下 幸司	名古屋大学全学技術センター	7/23/04 ~ 7/29/04	装置開発室
松下 幸司	名古屋大学全学技術センター	8/9/04 ~ 8/13/04	装置開発室
松下 幸司	名古屋大学全学技術センター	8/24/04 ~ 8/27/04	装置開発室
宮林 恵子	北陸先端科学技術大学院大学	2/2/05 ~ 2/4/05	分子スケールナノサイエンスセンター
中村 修	核融合科学研究所	3/10/05 ~ 3/11/05	計算科学研究センター

2-8-3 人事

人事の活性化を図るために、人事交流を行ってきた。法人になってからは、変化をもたせた技術職員の採用を行うために、公募採用も取り入れた。

人事交流

長期間、同一職場に勤務すると、慢性のために活力が低下しがちである。転勤が少ない職場での人事異動は、組織と個人の活性化に不可欠である。1995年3月から、一定の期間、所属を移して勤務する人事交流を行っている。今年度は法人に移行したため、手続きが不明のため一時的に停止している。

人事交流実績

装置開発室 / 名古屋大学理学部

極端紫外光実験施設 / 北陸先端科学技術大学院大学

大学からの採用

2004年4月1日、大学から2名の中堅技術職員を採用した。

装置開発室 1名（名古屋大学）

分子制御レーザー開発研究センター 1名（東北大学）

公募採用

2004年10月16日、公募により中堅技術職員を採用した。

広報担当技術職員 1名

2004年11月、技術職員を公募により内定した。

分子スケールナノサイエンスセンター 2名

2-8-4 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（2004年定年退官） 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（2002年辞職） 日本化学会化学技術有功賞（1999）

山中孝弥 日本化学会化学技術有功賞（2004）

石村一也 WATOC2005 Best Poster Diamond Certificate（2005）

2-9 文部科学省国際シンポジウム

分子科学研究所では創設の翌年の1976年から2000年まで「岡崎コンファレンス」を65回開催し、それぞれの分野のトップクラスの研究者を招へいし相互の経験や情報を交換することによって研究所の研究を国際的な最高レベルに高め、また参加された国内の研究者の招待研究者と交流を通して当該分野の更なる活性化に貢献してきた。1997年以後、分子科学研究所がCOE機関として指定されたことに伴い、COEコンファレンスとして年1回開催された。2002年からは、文部科学省国際シンポジウムとして、公募に応募する形でこれが継承され、さらに独立法人化に伴い、2004年度からは日本学術振興会に於いて募集・選考が行われることとなった。募集の機関や対象の変化にもかかわらず、分子科学研究所は2003年までに8回の国際シンポジウムを開催している。

この国際シンポジウムは毎年研究所でテーマを決定し、代表者がこのテーマに従って応募し審査を受ける。採択された場合は、岡崎コンファレンスと同様に代表者が所内や外部の関係者と準備委員会を作り、サーキュラーの作成、講演者の選定、プログラムの編成などを実行する。2003年度はこの国際集会在が知名度の高い「岡崎コンファレンス」として定着する願いを込めて、「岡崎コンファレンス2003」としてアナウンスされた。このシンポジウムはかつての岡崎コンファレンスと比べて規模が大きく、2003年度は参加外国人が26名、国内参加者は丁度100名であり、計126名の参加者があった。このような会議を通して形成された国際的な繋がりは、研究面のみならず他の国際会議の組織など大きな影響を及ぼしている。また、国際会議に参加する機会の少ない国内の若い研究者を刺激し彼らの研究意欲をかきたてることも重要である。この岡崎コンファレンス方式の国際シンポジウムは、長期的視野からの展望を議論する国際的な場を提供するものであり、内外の研究者からその成果に対して高い評価を得ている。

このような形での岡崎コンファレンスは、共同利用機関の重要な機能の一つとして、独立法人化後に自然科学研究機構の一員として独立法人化されても継続することが望まれる。

開催一覧（回 課題，開催日，提案代表者）

1. 「金属蛋白質の動的構造と分子設計」2002.11.18 ~ 11.21
北川禎三（統合バイオサイエンスセンター教授）
2. 「機能性クラスター・自己組織化ナノ粒子国際会議」2003.12.15 ~ 12.17
西 信之（分子研教授）

2-10 共同研究

2-10-1 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利用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、運営会議で採択されたテーマには、旅費及び研究費の一部を支給する。次の5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) 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。
- (5) 施設利用：研究施設に設置された機器の個別的利用。

2-10-2 2004 年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名	提案代表者
内殻励起における交換相互作用とスピン軌道相互作用	分子科学研究所
固体表面上の生体分子認識反応系の構築と構造解析	分子科学研究所
自由電子レーザーの短波長化とその応用	分子科学研究所

小杉 信博
宇理須恆雄
加藤 政博

(2) 協力研究

課 題 名(前期)	代 表 者
ビニルラジカルのポテンシャル曲面と運動の理論的研究	九州大学大学院理学研究院
金属原子・有機分子クラスターイオンの赤外光解離分光	東北大学大学院理学研究科
気相中における金属イオンの溶媒和構造の研究	九州大学大学院理学研究院
ピコ秒時間分解分光による重水素置換された7-アザインドールダイマーの励起状態ダブルプロトン移動反応機構の解明	九州大学大学院理学研究院
パラジウム錯体の電子スペクトルのせん断応力効果	室蘭工業大学工学部
光学スペクトルによるずれ応力効果の検証	山口東京理科大学基礎工学部
極低温微量試料磁気測定法開発	岡山大学大学院自然科学研究科
分子性機能物質の極小結晶による構造決定、および物性測定	(独)産業技術総合研究所
分子性伝導体の極低温伝導度・磁化率測定	東京大学大学院理学系研究科
型有機導体の低温X線構造解析	大阪市立大学大学院理学研究科
折れ曲がった骨格を有するドナーに基づく磁性伝導体の構造と物性	大阪府立大学先端科学研究所
有機強磁性体構成母体のデザインと合成ならびに評価	法政大学工学部
光磁気機能性遷移金属錯体の創製と磁気物性評価	慶應義塾大学理工学部
光応答性部位を対カチオンとして有する分子性導体の合成とその基底状態・準安定状態における結晶構造ならびに電気伝導性質	静岡大学工学部
キラルおよび誘電性を有する金属錯体の磁気特性	九州大学大学院理学研究院
化学ドーブしたDNA鎖の電子状態測定	東京大学大学院新領域創成科学研究科
シリコン表面吸着分子の分光と反応の理論的解析	九州大学情報基盤センター
金属内包フラーレンの極端紫外光吸収	岡山大学理学部
多核種NMRによるシアン配位型ペルオキシダーゼのヘム環境の解析	九州大学大学院生物資源環境科学府
カスケード非線形効果を用いたパルス制御に関する研究	東京大学生産技術研究所
半導体レーザー励起マイクロチップ固体レーザーの物性と応用	東海大学大学院工学研究科
Yb系固体レーザーの分光特性の研究	福井大学大学院工学研究科
Yb:GdYCOB単一素子による紫外光発生に関する研究	大阪大学大学院工学研究科
半導体・金属ナノ界面の制御	北陸先端科学技術大学院大学材料科学研究科

田中 桂一
美齊津文典
大橋 和彦
迫田 憲治
城谷 一民
井口 眞
大嶋 孝吉
田中 寿
小林 昭子
村田 恵三
藤原 秀紀
中村 暢男
秋津 貴城
植田 一正
速水 真也
川合 真紀
青柳 睦
久保園芳博
野中 大輔
芦原 聡
大塚 建樹
川戸 栄
佐々木孝友
三谷 忠興

高共役 分子修飾電極の作成と評価	愛媛大学総合科学研究支援センター	宇野 英満
芳香族化合物の直接官能基化を経る 共役多環式芳香族化合物合成	大阪大学大学院工学研究科	垣内 史敏
生体関連分子巨大クラスター負イオンの質量スペクトルおよび光電子スペクトルの測定	東北大学大学院理学研究センター	前山 俊彦
金属微粒子の微細配列とデバイス構築	東京大学大学院理学系研究科	米澤 徹
電子運動量分光の研究	東北大学多元物質科学研究所	宇田川康夫
散乱電子 - 放出電子 - 生成イオン 3 重同時測定による簡単な分子の電子運動量分布の 3 次元測定	東邦大学理学部	酒井 康弘
近藤半導体 FeSi の電子構造の圧力効果	岡山理科大学	森 嘉久
レドックス活性なアゾ基を有するルテニウム錯体の合成と反応	福島大学教育学部	大山 大
ジオキソモリブデン錯体の酸化能と反応機構の解明	大阪市立大学大学院理学研究科	杉本 秀樹
混合 (貴) 金属クラスター分子の創製と機能開拓	大阪府立大学総合科学部	竹本 真
胆汁酸ミセルの MD シミュレーション	大分大学教育福祉科学部	中島 俊男
計算機実験による液体相分離ダイナミクスに関する研究	東北大学大学院理学研究科	福村 裕史
ヘムセンサー蛋白質 NPAS2 のラマン分光法を用いた構造解析	京都府立大学大学院農学研究科	佐上 郁子
金属錯体による酸素 - 酸素結合の生成と開裂機構の解明	金沢大学理学部	鈴木 正樹
共鳴ラマン分光法を用いたセンサー蛋白質の構造と機能に関する研究	京都大学大学院工学研究科	鶴澤 尊規
ピコ・フェムト秒レーザーを用いたマイクロリアクター中の反応ダイナミクスの研究	東京工業大学大学院理工学研究科	鈴木 正
芳香族分子のピコ、フェムト秒励起状態ダイナミクス	東京工業大学大学院理工学研究科	松下 慶寿
ヘムオキシゲナーゼ反応機構の解明	東北大学多元物質科学研究所	松井 敏高
角度分解紫外光電子分光法によるフッ素化フタロシアン薄膜と電子状態と分子配向	千葉大学大学院自然科学研究科	奥平 幸司
フラウンホーフェン類の光電子分光	千葉大学工学部	日野 照純
シリコン基板上に有機分子配向膜に関する紫外角度分解光電子分光による研究	名古屋大学物質科学国際研究センター	関 一彦
Zn Sc 系正二十面体準結晶の光電子分光	名古屋大学大学院情報科学研究科	森 昌弘
紫外光電子分光法による Li-Ni 系複合酸化物の電子状態の研究	愛媛大学工学部	宮崎 隆文

課 題 名 (後期)

代 表 者

カーボンナノチューブネットワーク上への生体超分子の固定	横浜国立大学大学院工学研究院	荻野 俊郎
極低温強電場中の分子ダイナミクス	東京農工大学大学院共生科学技術研究部	中田 宗隆
放射光を用いたカーボンナノチューブの加工制御に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	今泉 吉明
磁性薄膜における表面気体吸着誘起スピン再配列の磁気光学 Kerr 効果	東京大学大学院理学系研究科	雨宮 健太
ジオキソレン錯体の界面制御と水分子の活性化に関する研究	山形大学大学院理工学研究科	近藤 展征
金属内包フラウンホーフェンの極端紫外光吸収	岡山大学理学部	久保園芳博
電子運動量分光の研究	東北大学多元物質科学研究所	宇田川康夫
散乱電子 - 放出電子 - 生成イオン 3 重同時測定による簡単な分子の電子運動量分布の 3 次元測定	東邦大学理学部	酒井 康弘
芳香族分子のピコ、フェムト秒励起状態ダイナミクス	東京工業大学大学院理工学研究科	松下 慶寿
ピコ・フェムト秒レーザーを用いたマイクロリアクター中の反応ダイナミクスの研究	東京工業大学大学院理工学研究科	鈴木 正
化学ドーピングした DNA 鎖の電子状態測定	東京大学大学院新領域創成科学研究科	川合 真紀
分子定規を用いたナノデバイス作製とその特性評価	(独)物質・材料研究機構	長谷川 剛
分子性伝導体の極低温伝導度・磁化率測定	東京大学大学院理学系研究科	小林 昭子
分子機能物質の極小結晶による構造決定、および物性測定	(独)産業技術総合研究所	田中 寿
光応答性部位を対カチオンとして有する分子性伝導体の合成とその基底状態 - 準安定状態における結晶構造ならびに電気伝導性質	静岡大学工学部	植田 一正
折れ曲がった骨格を有するドナーに基づく磁性伝導体の構造と物性	大阪府立大学先端科学研究所	藤原 秀紀
型有機伝導体の低温 X 線構造解析	大阪市立大学大学院理学研究科	村田 恵三
混合 (貴) 金属クラスター分子の創製と機能開拓	大阪府立大学総合科学部	竹本 真
アルカリ土類金属原子と低温ヘリウムガスとの衝突に関する研究	富山大学理学部	森脇 喜紀
多量体分子クラスターの分子間ポテンシャル	九州大学大学院理学研究院	原田 賢介
金属原子 - 有機分子クラスターイオンの赤外光解離分光	東北大学大学院理学研究科	美齊津文典
溶媒和金属イオンにおけるイオン対状態生成に関する研究	九州大学大学院理学研究院	大橋 和彦
ヘムオキシゲナーゼ反応機構の解明	東北大学多元物質科学研究所	松井 敏高
低原子価前周期金属錯体をユニットとした新規不均一系触媒の開発	静岡大学理学部	近藤 満
固体コヒーレントフォノン励起における光パルス位相制御の効果	(独)物質・材料研究機構	北島 正弘

W および Q-band ESR による有機導体におけるスピンドYNAMIX等電子状態の研究	東京都立大学大学院理学研究科	溝口 憲治
TDAE-C ₆₀ 単結晶の W バンド ESR	岡山大学大学院自然科学研究科	神戸 高志
常磁性金属を有するポルフィリン類縁体の合成と物性	京都大学大学院理学研究科	大須賀篤弘
化学修飾された金属内包フラーレン単結晶の示す磁気測定	城西大学理学部	加藤 立久
生体関連分子巨大クラスター負イオンの質量スペクトルおよび光電子スペクトルの測定	東北大学高等教育開発推進センター	前山 俊彦
錯体分子内における金属 - カルボニル結合強度の制御	福島大学教育学部	大山 大
NMR によるシアン配位型ペルオキシダーゼのヘム環境の解析	九州大学大学院農学研究院	野中 大輔
しきい電子・オージェ電子同時計測による分子 2 重イオン化の研究	高エネルギー加速器研究機構	青戸 智浩
RISM - モード結合理論を用いて調べる溶媒ゆらぎの時間変化と溶媒和構造変化	大阪大学先端科学イノベーションセンター	西山 桂
化合物半導体擬似位相整合波長変換デバイスの開発	東京大学大学院工学系研究科	近藤 高志
Yb 系固体レーザーの分光特性の研究	福井大学大学院工学研究科	川戸 栄
超小型高出力赤外光源の開発	東北大学電気通信研究所	水津 光司
Yb:YAG を用いた増幅システムの開発	(独) 理化学研究所中央研究所	小川 貴代
積層プレート構造半導体波長変換素子の開発	中央大学理工学部	庄司 一郎
ヘモグロビンの協同的酸素結合の調節機構の解明	筑波大学大学院数理物質科学研究科	長友 重紀
酸素活性種を含む金属錯体の創製と機能制御	金沢大学大学院自然科学研究科	鈴木 正樹
ヘムセンサー蛋白質 NPAS2 のラマン分光を用いた構造解析	京都府立大学大学院農学研究科	佐上 郁子
近藤半導体 FeSi の電子構造の圧力効果	岡山理科大学理学部	森 嘉久
一次元ニッケル錯体の剪断応力効果のその場観察	室蘭工業大学工学部	城谷 一民
(BEDT-TTF) ₂ Cl ₂ ·2H ₂ O の電荷量の決定	北海道大学大学院理学研究科	河本 充司
有機導体における電荷整列と物性についての研究	京都大学低温物質科学研究センター	矢持 秀起
金属錯体液晶の誘電性および非線形光学特性	九州大学大学院理学研究院	速水 真也
芳香族化合物の直接官能基化を経る 共役多環式芳香族化合物合成	大阪大学大学院工学研究科	垣内 史敏
角度分解紫外光電子分光法をもちいた、極性をもつタロシアン分子超薄膜の価電子帯の電子構造に関する研究	千葉大学工学部	奥平 幸司
金属原子内包フラーレンの光電子分光	千葉大学工学部	岩崎賢太郎
紫外光電子分光法による Li-Ni 系複合酸化物の電子状態の研究	愛媛大学工学部	宮崎 隆文
ZnSc 系正二十面体準結晶の光電子分光	名古屋大学大学院情報科学研究科	森 昌弘
シリコン及び電極金属上に成長させた有機薄膜の紫外角度分解光電子分光による研究	名古屋大学大学院理学研究科	金井 要

(3) 研究会

分子機能の物理化学 理論・計算化学と分光学による新展開
2004年7月21日(水)～23日(金) 岡崎コンファレンスセンター

7月21日(水)

13:30-13:40	石田俊正(分子研)	趣旨説明
基調講演(座長:石田俊正)		
13:40-14:10	永瀬 茂(分子研)	分子機能とナノ構造
Session I 分子機能を支配する反応ダイナミクス(座長:石田俊正)		
14:10-14:40	南部伸孝(分子研)	非断熱現象を利用した分子設計
14:40-15:10	田原太平(理化研)	二転三転するアゾベンゼンの光異性化機構:実験と理論の不整合
15:40-16:10	長澤 裕(阪大)	超高速分光法による生物の耐乾燥性・耐凍結性の分子ダイナミクスの研究
16:10-16:40	小松崎民樹(神戸大)	生体分子ダイナミクスの状態空間幾何学:1分子時系列情報からわかること
16:40-17:10	富永圭介(神戸大)	最近の時間分解振動分光について 理論と実験についてのコメント
17:30-19:00	ポスターセッション	

7月22日(木)

Session II 分子機能発現における凝縮系効果(座長:鳥居 肇)		
09:30-10:00	木村佳文(京大)	デザイナー流体中での色素の電子状態に対する溶媒効果
10:00-10:30	谷村吉隆(京大)	凝縮相中にある二重戸系系の2次元分光
11:00-11:30	志賀基之(原研)	経路積分法の基礎理論と理論化学への応用
11:30-12:00	奥村久士(分子研)	液体のマルチパーリック・マルチサーマルアンサンブルシミュレーション
12:00-12:30	鄭 誠虎(分子研)	Mode-coupling theory for liquid-state dynamics

Session III 分子機能制御の電子論 (座長: 杉本 学)

- 14:00-14:30 村田昌樹 (東大) 光・プロトン応答性金属錯体の応答機能と電気的性質
14:30-15:00 野崎浩一 (阪大) 遷移金属錯体の MLCT 状態の構造と光物理
15:30-16:00 中村振一郎 (三菱化学) 工業的有機材料の計算科学による解析と設計 ~ 実用的な分子の励起状態デザインをめざして ~
16:00-16:30 長谷川淳也 (京大) 生体分子の SAC-CI スペクトロスコピー
16:30-17:00 今堀 博 (京大) 人工光合成系構築への実験的アプローチ

7月23日(金)

Session IV 生体分子における分子機能 (座長: 鳥居 肇)

- 09:30-10:00 海野雅司 (東北大) 振動分光法と量子化学計算で探る光受容タンパク質の動きと機能
10:00-10:30 中島 聡 (阪大) 電子移動反応におけるコヒーレンシー モデル系から蛋白質まで
11:00-11:30 熊崎茂一 (京大) 光合成超高速電子移動に関する知見と課題
11:30-12:00 林 重彦 (京大) ロドプシン光受容タンパク質の分子機能に関する理論的研究
12:00-12:30 田中成典 (神戸大) 核酸および蛋白質系の分子計算からマクロな機能発現へ向けて
12:30-12:40 総括: 鳥居 肇

先端分子科学と境界領域への進展

2004年5月21日(金) ~ 22日(土) 岡崎コンファレンスセンター

5月21日(金)

- 10:00-10:10 はじめに 寺嶋正秀 (京大)
10:10-12:10 セッション・時間分解分光と回析
中村一隆 (東工大), 星名賢之助 (東大), 腰原伸也 (東工大)
13:30-15:30 セッション・生体分子系の電子状態理論
山下晃一 (東大), 佐藤文俊 (東大), 中野達也 (国立医薬品食品衛生研)
16:00-18:00 セッション・分子デバイス
関 一彦 (名大), 塚田 捷 (早大), 小川琢治 (分子研)

5月22日(土)

- 09:00-11:00 セッション・極限環境下での分子物性
森 健彦 (東工大), 鹿野田一司 (東大), 宇治進也 (ナノマテリアル研)
11:30-13:30 セッション・大気化学と分子科学
梶井克純 (都立大), 高橋けんし (名大), 廣川 淳 (北大)
13:30-13:40 おわりに 鈴木俊法 (理研)

キラル磁性体の磁気構造と磁気光学効果

2004年7月17日(土) ~ 18日(日) 岡崎コンファレンスセンター

7月17日(土)

- 13:00-13:10 井上克也 (広大理) はじめに (趣旨説明)
Session I 座長 井上克也 (広大理)
13:10-13:55 十倉好紀 (東大工) マルチフェロイクスの物質設計と巨大電気磁気応答
13:55-14:40 有馬孝尚 (東北大多元) 多重強秩序系、不斉磁性体の非相対的磁気光学
Session II 座長 藤山茂樹 (東大工)
14:55-15:40 東 正樹 (京大化研) Bi、Pb-3d 遷移金属ペロブスカイト
15:40-16:25 小口多美夫 (広大先端物質) マルチフェロイック BiMnO₃ の第一原理計算
Session III 座長 岸根順一郎 (九工大工)
16:30-17:15 小島憲道 (東大総合文化) スピン構造の空間制御とその光学的性質
17:15-17:45 石川忠彦 (東工大物質科学) 量子常誘電体 SrTiO₃ における光伝導効果
17:45-18:30 福山秀敏 (東北大金研) 分子系と金属イオン

7月18日(日)

- Session IV 座長 美藤正樹 (九工大工)
09:00-09:30 菊地耕一 (都立大理) キラル磁性体の構造と磁性
09:30-10:10 細越裕子 (大阪府大総合科学) 量子スピン系とキラル磁性 現状と展望

Session V 座長 菊地耕一 (都立大理)

10:30-11:00	神山 崇 (KEK)	TBA
11:00-11:20	中村哲也 (SPring8)	円偏光軟X線によるキラル分子磁性体のMCDおよびMChDの検出
11:20-11:40	大隅寛幸 (SPring8)	キラル磁性体の非共鳴X線磁気散乱
11:40-12:00	朝日 透 (早大生医工研)	ハウブによる強誘電体のキラル光学的研究

Session VI 円卓自由討論 (Round Table Discussion)

若手分子科学研究者のための物理化学研究会

2004年6月2日(水) 分子科学研究所研究棟302号室

14:00-14:10	菱川明栄 (分子研)	開会の辞
14:10-14:40	長岡正隆 (名大院情報科学)	凝縮系化学反応の理論的アプローチ 現状と展開
14:40-15:10	畑中耕治 (東北大院理)	超短パルスX線の発生と応用
15:30-16:00	山口 毅 (名大院工)	液体の流れの分子論
16:00-16:30	長澤 裕 (阪大基礎工)	超高速分光による凝縮相中の分子ダイナミクスの研究
16:30-17:00	梅本宏信 (北陸先端大材料)	CVD過程における気相診断と反応過程の解明

原子・分子反応素過程における粒子相関

2004年6月1日(火)~2日(水) 岡崎コンファレンスセンター

6月1日(火)

13:20-13:30	東 俊行 (都立大院理)	はじめに
13:30-14:00	金安達夫 (都立大院理)	多重同時計測法を用いた多価イオン・分子衝突ダイナミクスの研究
14:00-14:30	高口博志 (理化研)	交差分子線画像法による励起酸素原子の化学動力学
14:30-15:00	星野正光 (理化研)	低速C ⁴⁺ とHe原子の衝突による二電子捕獲機構の研究
15:00-15:30	季村峯生 (九大院理)	多価イオン衝撃による解離分子種生成の相関
16:00-16:30	ヴェシャピゼ ギオルギ (都立大院理)	Dissociation of multiply charged benzene
16:30-17:00	G. V. Milnikov (分子研)	Semiclassical methods in molecular dynamics. Nonadiabatic transition and tunneling
17:00-17:30	森下 亨 (電通大量子・物質工)	超球座標法による原子の多電子励起状態の記述: 基準モードによる分類とアト秒光パルスを用いた実時間分析の試み

6月2日(水)

09:00-09:30	高橋正彦 (分子研)	電子線コンプトン散乱実験の新展開: 二電子系原子分子の(e,2e+M)と(e,3-1e)
09:30-10:00	小田切 丈 (東工大院化)	電子-分子衝突過程における2電子励起分子ダイナミクス研究のための第二世代コインシデンス電子エネルギー損失分光システムの開発
10:00-10:30	中島信昭 (大阪市大院理)	高強度フェムト秒レーザーによるC ₆₀ および有機分子のイオン化・クーロン爆発
11:00-11:30	見附孝一郎 (分子研)	フラレンのイオン化と解離: フラグメントの出現エネルギーに関する統計論的取扱い
11:30-12:00	間嶋拓也 (コンボン研)	高速重イオン-C ₆₀ 分子衝突: 多重電離と多重分解過程の相関測定
13:00-13:30	彦坂泰正 (分子研)	しきい電子とオージェ電子の同時計測に見られるPCI効果
13:30-14:00	穂坂綱一 (東大院理)	同時計測画像分光法による配向分子からの光電子の角度分布測定
14:00-14:30	繁政英治 (分子研)	分子の内殻電離しきい値近傍における多電子励起状態の探索
15:00-15:30	北島昌史 (上智大理工)	高分解能角度分解内殻共鳴オージェスペクトルに現れるドップラー効果
15:30-16:00	菱川明栄 (分子研)	コインシデンス運動量画像法による強光子場中分子過程
16:00-16:20	河内宣之 (東工大院化)	まとめ

分子スケールエレクトロニクス研究会

2004年4月8日(木)~9日(金) 岡崎コンファレンスセンター

4月8日(木)

13:00	小川琢治 (分子研)	開会
13:05-13:40	和田恭雄 (早大ナノテクノロジー研)	分子コンピュータへの道
13:40-14:15	徳本洋志 (北大電子研)	分子デバイス研究開発の動向と将来
14:15-14:25	討論	

- I. 分子ナノスケール構造の構築 座長 古川一暁
- 14:40-15:15 芳賀正明(中央大理工) 錯体分子モジュールを用いる表面ナノ積層系の構築と電子移動過程
- 15:15-15:50 中村貴義(北大電子研) 分子性導体の自己組織化ナノパターンニング
- 15:50-16:25 大川祐司(物材機構ナノマテリアル研) 連鎖重合反応を用いた導電性高分子ナノワイヤーの作成
- 16:25-16:40 池田太一(産総研) 分子テンプレート法を用いた単一分子の配列固定化
- II. 走査プローブ顕微鏡による分子観察, 物性計測 座長 石田敬雄
- 16:55-17:30 藤平正道(東工大院生命理工) 我々の最近の走査プローブ顕微鏡に関する研究の紹介
- 17:30-18:05 桑原裕司(阪大院工) 分子スケール機能計測手法の開発とその応用
- 18:05-18:40 松本卓也(阪大産研) 分子系ナノスケール構造の電気・電子特性計測

4月9日(金)

- III. ナノスケール電気伝導の理論 座長 松本卓也
- 09:00-09:35 塚田 捷(早大理工) 原子細線および分子架橋の量子伝導
- 09:35-10:10 広瀬喜久治(阪大院工) 第一原理計算によるナノスケール構造の電子輸送予測
- 10:10-10:45 渡邊 聡(東大院工) 単分子 - 電極複合系の電気伝導に関連した理論計算のいくつかの話題
- IV. 分子設計と合成 I 座長 谷口正輝
- 11:00-11:35 田中一義(京大工) 分子スピンエレクトロニクスを目指した分子設計
- 11:35-11:50 西長 亨(京大化研) (話題提供) 分子導線の新規被覆法の開発
- 11:50-12:05 小松直樹(滋賀医大) (話題提供) ナノ炭素化合物製造法における産学連携と特許戦略
- V. ポスターセッション
- 13:00-14:20
- VI. 分子設計と合成 II 座長 中村貴義
- 14:20-14:55 大須賀篤弘(京大理) ポルフィリノイド化学の最近の展開
- 14:55-15:30 小夫家芳明(奈良先端大) ポルフィリンのナノ配位組織体
- 15:30-16:05 大坪徹夫(広大院工) ナノ共役分子の開発と機能
- VII. ナノスケール電極を用いた分子の電気伝導計測 座長 桑原裕司
- 16:20-16:55 橋詰富博(日立基礎研) 極微細電極の加工と単分子の電気伝導測定
- 16:55-17:30 小川琢治(分子研) 単一・少数有機分子の電気特性計測のための有機化学的アプローチ
- 17:30-17:45 谷口正輝(阪大産研) (話題提供) 分子ワイヤーの電気伝導とナノ電極上における分子ワイヤーの合成

生体金属分子科学の展望

2004年10月1日(金)~3日(日) 岡崎コンファレンスセンター

10月1日(金)

座長 城 宜嗣

- 13:00 菊地和也(東大院・薬) 生物応用可能な Zn²⁺ 可視化プローブ
- 13:40 浜地 格(九大・先端物質研) 金属錯体によるタンパク質・ペプチド表面分子認識: センシングと制御
- 14:20 塩谷光彦(東大院・理) 金属配列プログラミングのための人工バイオ分子の創製
- 15:00 樋口芳樹(兵庫県立大院・生命理学) ヒドロゲナーゼの Ni-Fe 活性部位の X線結晶構造化学
- 座長 千田俊哉
- 16:10 加藤康夫(富山県立大・工) 新規ヘム酵素「アルドキシム脱水酵素」の発見と有機合成への応用
- 16:50 尾高雅文(東京農工大・工) ニトリルヒドラーゼファミリーの新規酵素: チオシアネート加水分解酵素
- 17:30 植木龍也(広島大院・理) パナジウム結合タンパク質の構造と機能
- 18:00 大久保忠恭(阪大院・薬) 大腸菌 DNA 修復タンパク質 Ada の Zn 配位 Cys38 メチル化による転写制御機構

10月2日(土)

座長 齋藤正男

- 09:20 青野重利(岡崎総合バイオ) ヘムを活性中心とする気体分子センサータンパク質の生物無機化学的研究
- 10:00 清水 透(東北大・多元研) ヘム制御タンパク質の構造と機能: EcDOS、HRI、SOUL 及び NPAS2 について
- 10:40 内田 毅(岡崎総合バイオ) CO 濃度を感知し、遺伝子の発現を制御するセンサー蛋白質 (NPAS2) の制御メカニズムに関する研究
- 11:20 石森浩一郎(京大院・工) ヘムを情報伝達分子とする制御蛋白質のヘム結合特性とその機能発現の分子機構

座長 石森浩一郎

13:45 宇野公之(熊本大・薬) ヒトニューログロビンの外来性配位子結合性に関わるアミノ酸残基
14:25 神取秀樹(名工大・工) 生物における光情報変換の分子科学
15:05 高橋 聡(阪大・蛋白研) 蛋白質の折り畳運動の実時間観察による研究

座長 藤井 浩

16:15 城 宣嗣(理研播磨研究所) ヘム型酸素添加酵素の構造と機能
16:55 渡辺芳人(名大院・理) 蛋白質空間を利用した物質変換系 金属酵素の分子設計
17:35 林 高史(九大院・工) 非天然ヘム再構成によるヘムタンパク質による機能変換

10月3日(日)

座長 渡辺芳人

09:20 伊東 忍(阪市大院・理) チロシナーゼによる酸素の活性化機構
10:00 千田俊哉(産総研) 芳香族化合物分解に関するジオキシゲナーゼ群の構造と機能
10:40 齋藤正男(東北大・多元研) Control Mechanism of Heme Oxygenase Catalysis
11:20 藤井 浩(岡崎統合バイオ) 基質の配向制御による酵素反応選択性の制御

表面磁性の最近の展開

2004年11月5日(金)~6日(土) 岡崎コンファレンスセンター

11月5日(金)

13:00-13:10 太田俊明(東大院・理) はじめに

座長 今田 真(阪大・基礎工)

13:10-13:40 小口多美夫(広大院・先端物質)
X線磁気円二色性の第一原理計算

13:40-14:10 小野寛太(高工研・物構研)
放射光電子顕微鏡を用いたメゾスコピック磁性体の観察

14:10-14:40 永松伸一(千葉大院・自然)
多重散乱理論による Co/Cu 多層膜の Cu K-edge XMCD 解析

座長 奥田太一(東大・物性研)

15:00-15:30 倉橋光紀、鈴木 拓、山内 泰(物材機構)
スピン偏極安定ヘリウム原子ビームによる最表面磁性研究

15:30-16:00 橋爪弘雄(奈良先端大)
X線磁気分光・散乱による磁性/非磁性多層膜の電子構造研究

16:00-16:30 小出常晴(高工研・物構研)
低次元磁性体における Longitudinal/Transverse 配置角度分解軟 X 線内殻磁気円二色性

座長 澤田正博(広大・放射光)

16:50-17:20 小池和幸^{1,2}、松山秀生¹、孝橋照生³、甲野藤真⁴、十倉好紀^{2,4,5}(¹北大理、²CERC-AIST、³日立、⁴ERATO-JST、⁵東大院工)
スピン偏極 SEM

17:20-17:50 今田 真、山崎篤志、菅 滋正(阪大・基礎工)
鉄のナノ構造のスピン偏極 STM と単原子層の XMCD

17:50-18:20 川越 毅(大教大・教養)
スピン偏極トンネル分光法によるエピタキシャル磁性薄膜の磁気ナノ物性

18:20-18:50 木下豊彦(東大・物性研)
放射光による、磁性薄膜と反強磁性基板における磁区観察

座長 木下豊彦(東大・物性研)

19:20-19:50 松村大樹¹、横山利彦²、雨宮健太¹、太田俊明¹(¹東大院・理、²分子研)
磁性薄膜スピン再配列転移に及ぼす分子吸着の効果

19:50-20:20 針谷喜久雄¹、小林陽介²、高井和之²、榎 敏明²(¹産総研、²東工大)
積層ナノグラファイト系における磁性と電子波干渉現象

20:20-20:50 柿崎明人(東大・物性研)
遷移金属薄膜のスピン分解光電子スペクトル

11月6日(土)

座長 倉橋光紀(物材機構)

09:00-09:30 中川剛志、横山利彦(分子研)
磁性薄膜のスピン再配列転移に関する MOKE, XMCD

09:30-10:00 中村哲也(JASRI)
元素選択磁気ヒステリシス測定の磁性研究への応用

10:00-10:30 中辻 寛、小森文夫(東大・物性研)
窒素吸着銅(001)面上コバルトドットの MCD

座長 中村哲也 (JASRI)

10:50-11:20 高梨弘毅^{1,2}、葉師寺啓^{1,2}、F. Ernult¹、三谷誠司^{1,2} (¹ 東北大・金研、²CREST-JST)
磁性ナノ粒子系におけるスピン依存単一電子トンネル現象

11:20-11:50 岸 智弥、中西 寛、笠井秀明 (阪大院・工)
表面スピントロニクス・デバイスデザイン

11:50-12:20 喜多英治、柳原英人 (筑波大・物工)
Co/Rh 多層膜における磁気異方性と界面歪み

座長 柳原英人 (筑波大・物工)

12:50-13:20 奥野拓也、壬生攻 (京大・低温セ)
ナノ磁性体における磁気渦構造および吹き出し磁化の磁気力顕微鏡観察

13:20-13:50 小嗣真人 (広大・放射光)
光電子顕微鏡 (PEEM) を用いた鉄隕石 (FeNi) の局所構造解析と磁区構造解析

13:50-14:20 雨宮健太 (東大院・理)
深さ分解 XMCD による磁性薄膜の表面・界面の研究

14:20-14:50 木村真一 (分子研)
赤外放射光を用いた磁気光学効果

14:50-15:00 横山利彦 (分子研) おわりに

有機固体の電子的物性・機能およびその応用に関する研究会
2004 年 11 月 12 日 (金) ~ 14 日 (日) 岡崎コンファレンスセンター

November 12 (Friday)

9:00 - 9:10 Opening address

Chairperson: Zhu, Daoben (Institute of Chemistry)

9:10 - 9:50 **Inokuchi, Hiroo** (JAXA) and **Liu, Minghua** (Institute of Chemistry)
Memorial Talk for Prof. Renyuang Qian and Prof. Haruo Kuroda

9:50-10:10 **Qin, Jingui** (Wuhan University)
Intercalation approach for molecular conductive magnet

10:10-10:30 **Kobayashi, Akiko** (University of Tokyo)
Recent progress in development of single-component molecular metals

Chairperson: Sugimoto, Toyonari (Osaka Prefecture University)

10:50-11:10 **Liu, Caiming** (Institute of Chemistry, CAS)
The first metallic conducting ET radical cation salt of polyoxoanion containing tris(alkoxo)ligand: $\beta^{2-}(\text{ET})_5\{\text{MnMo}_6\text{O}_{18}[(\text{OCH}_2)_5\text{CCH}_2\text{OH}]_2\}5\text{H}_2\text{O}$

11:10-11:30 **Kobayashi, Hayao** (Institute for Molecular Science)
Single-component molecular metals—Molecular design and characterization of nano-sized crystals

11:30-11:50 **Shi, Huahong** (South China University of Technology)
Synthesis of rigidly dendric β -diketones and their sensitization of lanthanide ions

11:50-12:10 **Enoki, Toshiaki** (Tokyo Institute of Technology)
Alkanethiol-SAM-coated metal nanoparticles and their electronic properties

Chairperson: Seki, Kazuhiko (Nagoya University)

13:40-14:00 **Jiang, Lei** (Institute of Chemistry, CAS)
Super-hydrophobic surfaces; from natural to artificial

14:00-14:20 **Yamada, Junichi** (University of Hyogo)
Development of new organic conductors by destabilization of the stable metallic state

14:20-14:40 **Liu, Minghua** (Institute of Chemistry, CAS)
Functionalization and supramolecular chirality of some interfacially organized molecular films

14:40-15:00 **Murata, Keizo** (Osaka City University)
Band-filling control and its precise measurement in the two-dimensional organic conductor, τ -(EDO-S,S-DMEDT-TTF)₂AuBr₂ by use of an extremely high magnetic field

Chairperson: Yonemitsu, Kenji (Institute for Molecular Science)

15:20-15:40 **Yang, Chunhe** (Institute of Chemistry, CAS)
High efficiency polymer solar cells

15:40-16:00 **Nasu, Keiichiro** (Institute of Materials Structure Science, KEK)
Photogeneration of charged and conductive ferroelectric domains in quantum dielectric SrTiO₃

16:00-16:20 **Guo, Zhixin** (Institute of Chemistry, CAS)
Electrical properties of soluble carbon nanotube/polymer composite films

16:20-16:40 **Hino, Shoju** (Chiba University)
Ultraviolet photoelectron spectroscopy of multiple atoms encapsulated metallofullerenes

Chairperson: Bai, Fenglian (Institute of Chemistry, CAS)

17:00-17:20 **Ma, Yuguang** (Jilin University)
Experimental and theoretical studies of 2,5-diphenyl-1,4-distyrylbenzenes with all cis- and trans-double bonds: Chemical structure determination and optical properties

- 17:20-17:40 **Kojima, Norimichi** (University of Tokyo)
Pressure- and photo-induced charge transfer phase transition in photo-sensitive iron mixed-valence system,
(SP)[Fe^{II}Fe^{III}(dt)₃](SP = spiropyran, dt = C₂O₂S₂)
- 17:40-18:00 **Shi, Gaoquan** (Tsinghua University)
Electrochemical actuator based on anisotropy polypyrrole film
- 18:00-18:20 **Nakamura, Takayoshi** (Hokkaido University)
Molecular systems for novel molecular devices
- November 13** (*Saturday*)
Chairperson: Wang, Fosong (Chinese Academy of Sciences)
- 9:00 - 9:20 **Peng, Junbiao** (South China University of Technology)
Alcohol/water soluble conjugated polymers for light-emitting device and biosensor
- 9:20 - 9:40 **Sato, Naoki** (Kyoto University)
Electronic structure of 2,5-diarylsilole derivative thin films studied with ultraviolet photoemission and inverse photoemission spectroscopies
- 9:40-10:00 **Pei, Jian** (Peking University)
Rigid star-shaped donor-acceptor molecules with multifullerenes
- 10:00-10:20 **Takimiya, Kazuo** (Hiroshima University)
Synthetic chemical approach to novel materials for organic field-effect transistors
- Chairperson:* Furukawa, Yukio (Waseda University)
- 10:40-11:00 **Hu, Wenping** (Institute of Chemistry, CAS)
Self-assembled conjugated polymer nanojunction
- 11:00-11:20 **Yamashita, Yoshiro** (Tokyo Institute of Technology)
Novel organic field-effect transistors based on unusual heterocyclic compounds
- 11:20-11:40 **Shuai, Zhigang** (Institute of Chemistry, CAS)
Theoretical investigation of organic light-emitting materials
- 11:40-12:00 **Yonemitsu, Kenji** (Institute of Molecular Science)
Theory of field effects on one-dimensional organic Mott insulators
- Chairperson:* Nakasuji, Kazuhiro (Osaka University)
- 13:40-14:00 **Wang, Lixiang** (Institute of Chemistry, CAS)
Highly efficient white electroluminescence from a single polyfluorene containing naphthalimide moieties
- 14:00-14:20 **Tokumoto, Madoka** (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)
Nonlinear optical property of carbon nanotubes and its application as saturable absorbing device for optical fiber communication
- 14:20-14:40 **Yan, Donghang** (Changchun Institute of Applied Chemistry)
Organic transistors having a buffer layer of LiPc
- 14:40-15:00 **Kanai, Kaname** (Nagoya University)
Electronic structure of doped organic semiconducting film
- Chairperson:* Li, Yongfang (Institute of Chemistry)
- 15:20-15:40 **Tian, He** (East China University of Science and Technology)
A novel fluorescent naphthalimide chemodosimeter for mercury based on thiourea
- 15:40-16:00 **Yamashita, Masahiro** (Tohoku University)
Gigantic optical nonlinearity in Mott-Hubbard nano-wires
- 16:00-16:20 **Zhang, Deqing** (Institute of Chemistry, CAS)
New molecular switches and logic gates based on TTF and photochromic spiropyrans
- 16:20-16:40 **Shirota, Yasuhiko** (Osaka University)
Amorphous molecular materials for organic electroluminescent devices
- 16:40-17:00 **Li, Yuliang** (Institute of Chemistry, CAS)
Synthesis and properties of one-dimensional organic nanomaterials
- 17:00-17:20 **Naito, Toshio** (Hokkaido University)
A new way of conversion of molecular crystals into molecular devices using optical doping method
- 19:00-21:00 *poster session*
- November 14** (*Sunday*)
Chairperson: Yakushi, Kyuya (Institute for Molecular Science)
- 9:00 - 9:20 **Song, Yanlin** (Institute of Chemistry, CAS)
Organic thin films for ultrahigh density information storage
- 9:20 - 9:40 **Ogawa, Takuji** (Institute for Molecular Science)
Preparation of nano-structures for molecular electronics
- 9:40-10:00 **Chen, Hongzheng** (Zhejiang University)
Organic n-type semiconductor based on fluorinated perylene diimides
- 10:00-10:20 **Tada, Hirokazu** (Institute for Molecular Science)
Visible light emission from polymer-based field-effect transistors

10:20-10:40	Liu, Yunqi (Institute of Chemistry, CAS) Electronic devices based on multiwalled carbon nanotubes
10:40-11:00	Maruyama, Yusei (Hosei University) DNA, fullerene/CNT hybrid materials studied by STM/STS
11:00-11:10	<i>closing remark</i> Zhu, Daoben (Institute of Chemistry, CAS)

(4) UVSOR 施設利用

(前期)

低級炭化水素の脱水素触媒に有効な担持モリブデン触媒活性種の L-XANES による微細構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
窒化学半導体の Al-K 内殻励起による可視・紫外発光 2	金沢大学工学部	直江 俊一
粒子線照射によるシリカの照射損傷過程の解明 (2)	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
岩塩型 MgO-ZnO 固溶体に形成される短範囲秩序の ZnO-L3 端 XANES による評価	京都大学大学院工学研究科	田中 功
ZnO:Al 過飽和固溶体からの相分離過程の XANES	京都大学大学院工学研究科	田中 功
陽極酸化により Ti 表面に生成する低結晶リン酸カルシウムの局所構造解明	京都工芸繊維大学工学部	中平 敦
XAFS 測定によるハロゲン架橋白金混合原子価錯体の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
多孔性シリコン・カーバイドの局所構造に関する研究	佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター	東 純平
ワイドバンドギャップを有する無機・有機絶縁材料の吸収・発光および寿命測定	早稲田大学理工学部	大木 義路
極紫外光照射による無機蛍光体の励起現象	新潟大学工学部	太田 雅壽
希土類イオンを添加したイオン結晶の真空紫外分光	岐阜大学工学部	山家 光男
放射光とレーザーを用いた Cs 化合物の内殻 2 光子励起	大阪歯科大学歯学部	辻林 徹
真空紫外光用蛍光材料の発光・励起スペクトルの測定	大阪女子大学理学部	河相 武利
水素結合型強誘電体の真空紫外分光	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
酸素高圧凝集相の紫外分光と光化学反応	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	赤浜 裕一
タングステン酸塩における励起子帯の微細構造の研究	海上保安大学校	藤田 正実
表面修飾単分散金属ナノ粒子の高分解能光電子分光	神戸大学工学部	田中 章順
Fe-V-Al 合金および Zr-Al-Ni-Cu 合金の価電子帯電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
酸化物高温超伝導体の超伝導遷移温度におよぼす電子構造の次元性に関する研究	名古屋大学難処理人工物研究センター	竹内 恒博
UVSOR 光によるアミノ酸の絶対不斉合成	(独) 科学技術振興機構	井上 佳久
Fe/Cs/GaAs を中心とした金属 / 半導体薄膜の表面状態の研究 II	香川大学教育学部	高橋 尚志
擬一次元有機導体(TMTCF) ₂ X の低エネルギー励起角度分解光電子分光	分子科学研究所	伊藤 孝寛
BL5U におけるビームライン高精度化とそれに伴う整備	分子科学研究所	伊藤 孝寛
広帯域(200 ~ 25 nm)多層膜の熱負荷安定性の評価	東北大学多元物質科学研究所	江島 丈雄
広帯域反射多層膜回折格子の性能評価	秋田県高度技術研究所	近藤 祐治
希ガス固体表面に形成される水クラスターの光励起脱離機構の解明	学習院大学理学部	荒川 一郎
水星探査衛星搭載用多層膜グレーティングと光検出器の開発	宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究本部	吉川 一朗
窒化物半導体の内殻励起による可視・紫外発光	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
アモルファス半導体の光誘起透過スペクトル変化に関する研究	岐阜大学工学部	林 浩司
GaN 系紫外線受光素子の軟 X 線領域での受光特性研究	三重大学工学部	元垣内敦司
アミノ酸の XAES スペクトル測定	神戸大学発達科学部	中川 和道
ピスマスクラスターの金属 - 半導体転移	富山大学理学部	池本 弘之
ミリ波分光による Li 2 次電池材料の研究	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	太田 仁
金属絶縁体物質 FeS の赤外スペクトル	神戸大学大学院自然科学研究科	難波 孝夫
量子常誘電体 SrTiO ₃ 及び KTaO ₃ のミリ波分光	神戸大学大学院自然科学研究科	岡村 英一
有機超伝導体のキャリアダイナミクス	分子科学研究所	木村 真一
BL6B の立ち上げ・整備	分子科学研究所	木村 真一
拡散接合化合物半導体の界面制御	分子科学研究所	庄司 一郎
AlN 及び AlGaN の発光励起と時間分解測定	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
ヨウ素酸リチウム結晶における超イオン相転移と発光の温度相関	福井工業高等専門学校	北浦 守
GaN 系紫外線受光素子の受光特性研究	三重大学工学部	平松 和政
紫外光ナノフォトニック結晶の光学的特性評価	三重大学工学部	元垣内敦司
コロジオン法によるアミノ酸の VUV 吸収スペクトル測定	神戸大学発達科学部	蛭名 邦植

金属絶縁体物質 FeS の可視 - 真空紫外スペクトル	神戸大学大学院自然科学研究科	難波 孝夫
希土類強相関物質の真空紫外反射分光	神戸大学大学院自然科学研究科	岡村 英一
イオン運動量観測装置の調整と性能評価	分子科学研究所	彦坂 泰正
SR 光を用いたナノ構造体の形成及び評価	名古屋大学大学院工学研究科	堀 勝
シンクロトロン光を用いた化合物半導体のエッチング特性	佐賀大学理工学部	西尾 光弘
窒化物半導体の N-K 内殻励起による可視・紫外発光	金沢大学工学部	直江 俊一
アモルファスカーボンおよびカーボンナイトライドの局所構造評価	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所	神田 一浩
遷移金属を含む強相関電子系の真空紫外分光	東京大学大学院工学系研究科	十倉 好紀
VUV 光シンチレーターの評価	分子科学研究所	猿倉 信彦
XAFS 測定によるポルフィリン化合物の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
VUV 光シンチレータの評価	分子科学研究所	猿倉 信彦
高出力型リチウム二次電池の長期試験後の正極材料の表面構造変化の解析	(独) 産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
高出力型リチウム二次電池の長期試験後の正極材料の表面構造変化の解析	(独) 産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
CeNi _{1-x} Co _x Ge ₂ の電子状態の X 依存性	分子科学研究所	KWON, Yong-seung
BL8B1 整備	分子科学研究所	彦坂 泰正
フォトマスク付着物質の真空紫外吸収スペクトル (2)	神戸大学発達科学部	中川 和道
ヨウ素酸リチウム結晶における光キャリアダイナミクス	福井工業高等専門学校	北浦 守
イオン運動量観測装置を用いた分子光イオン化研究	分子科学研究所	彦坂 泰正
Li-Ni-Mn-O 系層状酸化物のリチウム脱離に伴う電子状態変化の解明	(独) 産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
Li-Ni-Mn-O 系層状酸化物のリチウム脱離に伴う電子状態変化の解明	(独) 産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
(後期)		
低級炭化水素の脱水素触媒に有効な担持モリブデン触媒活性種の L-XANES による微細構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
窒化学半導体の Al-K 内殻励起による可視・紫外発光 2	金沢大学工学部	直江 俊一
粒子線照射によるシリカの照射損傷過程の解明 (2)	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
岩塩型 MgO-ZnO 固溶体に形成される短範囲秩序の ZnO-L3 端 XANES による評価	京都大学大学院工学研究科	田中 功
陽極酸化により Ti 表面に生成する低結晶リン酸カルシウムの局所構造解明	京都工芸繊維大学工学部	中平 敦
XAFS 測定によるハロゲン架橋白金混合原子価錯体の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
ワイドバンドギャップを有する無機・有機絶縁材料の吸収・発光および寿命測定	早稲田大学理工学部	大木 義路
極紫外光照射による無機蛍光体の励起現象	新潟大学工学部	太田 雅壽
希土類イオンを添加したイオン結晶の真空紫外分光	岐阜大学工学部	山家 光男
真空紫外光用蛍光材料の発光・励起スペクトルの測定	大阪女子大学理学部	河相 武利
水素結合型強誘電体の真空紫外分光	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
Fe-V-Al 合金および Zr-Al-Ni-Cu 合金の価電子帯電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
酸化物高温超伝導体の超伝導遷移温度におよぼす電子構造の次元性に関する研究	名古屋大学難処理人工物研究センター	竹内 恒博
UVSOR 光によるアミノ酸の絶対不斉合成	(独) 科学技術振興機構	井上 佳久
TM/GaAs(100)(TM = Ti, Cr)における表面光誘起起電力効果	佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター	鎌田 雅夫
擬一次元有機導体(TMTCF) ₂ X の低エネルギー励起角度分解光電子分光	分子科学研究所	伊藤 孝寛
BL5U におけるビームライン高精度化とそれに伴う整備	分子科学研究所	伊藤 孝寛
希ガス固体表面に形成される水クラスターの光励起脱離機構の解明	学習院大学理学部	荒川 一郎
水星探査衛星搭載用多層膜グレーティングと光検出器の開発	宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究本部	吉川 一朗
窒化物半導体の内殻励起による可視・紫外発光	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
アモルファス半導体の光誘起透過スペクトル変化に関する研究	岐阜大学工学部	林 浩司
GaN 系紫外線受光素子の軟 X 線領域での受光特性研究	三重大学工学部	元垣内敦司
アミノ酸の XAES スペクトル測定	神戸大学発達科学部	中川 和道
ピスマスクラスタの金属・半導体転移	富山大学理学部	池本 弘之
ミリ波分光による Li 2 次電池材料の研究	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	太田 仁
量子常誘電体 SrTiO ₃ 及び KTaO ₃ のミリ波分光	神戸大学大学院自然科学研究科	岡村 英一
BL6B の立ち上げ・整備	分子科学研究所	木村 真一
AlN 及び AlGaIn の発光励起と時間分解測定	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
GaN 系紫外線受光素子の受光特性研究	三重大学工学部	平松 和政
紫外光ナノフォトニック結晶の光学的特性評価	三重大学工学部	元垣内敦司

コロジオン法によるアミノ酸のVUV吸収スペクトル測定	神戸大学発達科学部	蛭名 邦禎
希土類強相関物質の真空紫外反射分光	神戸大学大学院自然科学研究科	岡村 英一
イオン運動量観測装置の調整と性能評価	分子科学研究所	彦坂 泰正
SR光を用いたナノ構造体の形成及び評価	名古屋大学大学院工学研究科	堀 勝
シンクロトロン光を用いた化合物半導体のエッチング特性	佐賀大学理工学部	西尾 光弘
窒化物半導体のN-K内殻励起による可視・紫外発光	金沢大学工学部	直江 俊一
遷移金属を含む強相関電子系の真空紫外分光	東京大学大学院工学系研究科	十倉 好紀
XAFS測定によるポルフィリン化合物の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
高出力型リチウム二次電池の長期試験後の正極材料の表面構造変化の解析	(独)産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
高出力型リチウム二次電池の長期試験後の正極材料の表面構造変化の解析	(独)産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
Li-Ni-Mn-O系層状酸化物のリチウム脱離に伴う電子状態変化の解明	(独)産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
Li-Ni-Mn-O系層状酸化物のリチウム脱離に伴う電子状態変化の解明	(独)産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
AlInNの構造解析に関する研究	佐賀大学理工学部	郭 其新
陽極酸化によりTi表面に生成するチタニア中のPの局所構造解明	京都工芸繊維大学工学部	中平 敦
モリブデン酸塩の真空紫外分光	海上保安大学校	藤田 正実
表面修飾単分散Siナノ粒子の高分解能光電子分光	神戸大学工学部	田中 章順
Fe/Cu(001)超薄膜へのK吸着による磁性変化	分子科学研究所	中川 剛志
25~35nm用反射多層膜の耐熱安定性及び経年変化安定性の評価	東北大学多元物質科学研究所	江島 丈雄
回折格子多層膜の評価	佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター	東 純平
反強磁性転移物質GdRu ₄ P ₁₂ の遠赤外スペクトル	神戸大学大学院自然科学研究科	難波 孝夫
高圧下テラヘルツ分光法の開発	分子科学研究所	木村 真一
フォトマスク付着物質の真空紫外吸収スペクトルの絶対値校正	神戸大学発達科学部	中川 和道
PZT薄膜の光学特性計測	静岡大学電子工学研究所	Jan MISTRİK
酸素高圧凝集相の紫外分光と光化学反応	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	赤浜 裕一
金属絶縁体物質CuRh ₂ S ₄ の可視-真空紫外スペクトル	神戸大学大学院自然科学研究科	難波 孝夫
カドミウムハライド結晶における真空紫外領域でのエネルギー緩和過程の研究	福井大学工学部	中川 英之
アパタイト関連化合物の真空紫外分光	福井工業高等専門学校	北浦 守
反応性スパッタリング法により作製した酸化物薄膜のVUV吸収スペクトルの測定	明治大学理工学部	松本 節子
分子ラジカルの内殻励起状態の分光を目指した測定システムの調整	広島大学大学院理学研究科	和田 真一
カーボン含有構造物および薄膜の構造解析	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所	神田 一浩
赤外反射吸収分光によるAlq ₃ 薄膜と金属界面の相互作用の研究	分子科学研究所	櫻井 陽子
InNのフォノンモード測定	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
水溶液表面での光イオン化	九州大学大学院総合理工学研究院	原田 明

(5) 施設利用

分子制御レーザー開発研究センター

(前期)

芳香族有機分子の高分解能超音速ジェット分光 京都大学大学院理学研究科 馬場 正昭

(後期)

芳香族有機分子の高分解能超音速ジェット分光 京都大学大学院理学研究科 馬場 正昭

分子スケールナノサイエンスセンター

(前期)

光学活性なシリルおよびゲルミル置換遷移金属錯体の構造と反応性に関する研究 学習院大学理学部 南条真佐人

電子スピン共鳴による(DMe-DCNQI)₂Aなどのスピンドイナミクス 東京都立大学大学院理学研究科 溝口 憲治

歪んだポルフィリン鉄錯体における磁気的性質に関する研究 東邦大学医学部 中村 幹夫

新規ナノ炭素系物質の構造と電子物性の解明 法政大学工学部 緒方 啓典

複雑系金属酵素の活性中心と反応 金沢大学理学部 櫻井 武

ランガサイト型圧電単結晶の構造解析に基づく圧電特性発現機構の解明 名古屋工業大学大学院工学研究科 大里 齊

アモルファス合金の磁気特性および熱的安定性に関する研究 名古屋工業大学大学院工学研究科 山田 正明

機能性金属錯体の構造決定	愛知教育大学教育学部	中島 清彦
希土類マンガナイトの物性研究	豊橋技術科学大学工学部	亀頭 直樹
ワイドバンドギャップ半導体薄膜の物性評価	豊橋技術科学大学工学部	若原 昭浩
有機分子および錯体のX線結晶構造解析	兵庫県立大学大学院工学研究科	北村 千寿
フラーレン化合物 $K_xCs_{3-x}C_{70}$ ($x = 0, 1, 2, 3$) の ESR と SQUID	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	小林 本忠
新規 系拡張ポルフィリン誘導体の合成と構造に関する研究	愛媛大学理学部	小野 昇
Co 超微粒子系の磁性	三重大学教育学部	佐光三四郎
準結晶の磁性	名古屋大学大学院情報科学研究科	松尾 進
金属酵素活性中心モデル錯体の構造と機能	名古屋工業大学大学院工学研究科	山口 修平
相溶性ポリマーブレンド中における動的不均一性	名古屋工業大学大学院工学研究科	嶋田 繁隆
スピンプローブ法による氷中水分子の運動性の評価	名古屋経済大学短期大学部	坂口 真人
新規なキャリア輸送材料の合成と電子デバイスへの応用	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 克彦
常磁性金属を有するポルフィリン多量体の合成と物性	京都大学大学院理学研究科	大須賀篤弘
食品に含まれる抗酸化機能成分の精製・単離と構造解析および抗酸化機能評価	名古屋経済大学短期大学部	長島 万弓
高次構造を有する金属錯体の合成とその動的構造に関する研究	静岡大学理学部	近藤 満
有機金属含有タンパク質における金属イオンの構造と電子状態の解析	名古屋大学大学院理学研究科	中島 洋
有機伝導体、有機磁性体、および磁性有機伝導体の磁気的性質の研究	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	坏 広樹
希土類薄膜磁石の磁気特性に関する研究	名古屋工業大学セラミックス基盤工学研究センター	安達 信泰
光合成タンパク質結晶の電子スピン共鳴測定	城西大学理学部	加藤 立久
(R, A)CoO ₃ (R = La, Pr, Nd, Sm; A = Ca, Sr, Ba) および $A_{n+2}Co_{n+1}O_{3n+3}$ (A = Ca, Sr, Ba, $n = 1 \sim 5$) の Co のスピン状態と価数	名古屋大学大学院工学研究科	高見 剛
光合成タンパク質結晶の電子スピン共鳴測定	岡山大学理学部	沈 建仁
水分解酵素 Mn クラスターの構造と磁性の多重周波数 EPR による研究	関西学院大学理工学部	河盛阿佐子
(後期)		
ケイ素およびゲルマニウムを主骨格または配位子に用いた自己集合型分子の構造解析	学習院大学理学部	南条真佐人
(R, A)CoO ₃ (R = La, Pr, Nd, Sm; A = Ca, Sr, Ba) および $A_{n+2}Co_{n+1}O_{3n+3}$ (A = Ca, Sr, Ba) のコバルトスピン状態と熱電特性に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	高見 剛
機能性金属錯体の構造と反応性の制御	愛知教育大学教育学部	中島 清彦
希土類マンガナイトの物性研究	豊橋技術科学大学工学部	亀頭 直樹
有機化合物および金属錯体のX線結晶構造解析	兵庫県立大学大学院工学研究科	北村 千寿
新規 系拡張ポルフィリン誘導体の合成と構造に関する研究	愛媛大学理学部	小野 昇
歪んだポルフィリン鉄(III)錯体における $S = 3/2$ 、 $S = 1/2$ 間のスピントラップの研究	東邦大学医学部	中村 幹夫
局所的トポロジカル構造を持つ準結晶及びその関連結晶の磁性	北海道大学大学院工学研究科	柏本 史郎
ナノ炭素状物質の合成と構造および物性研究	法政大学工学部	緒方 啓典
マイクロ波材料用磁性ガーネット薄膜の合成と評価	名古屋工業大学セラミックス基盤工学研究センター	安達 信泰
相溶性ポリマーブレンド中における動的不均一性の検出	名古屋工業大学大学院つくり領域	嶋田 繁隆
有機金属含有タンパク質における金属イオンの構造と電子状態の解析	名古屋大学大学院理学研究科	中島 洋
Co 超微粒子の磁性	三重大学教育学部	佐光三四郎
金属酵素活性中心モデル錯体の構造と機能	名古屋工業大学	奥村 健志
ポリフィリンオリゴマーの合成と構造	愛媛大学総合科学研究支援センター	宇野 英満
Q-band EPR 分光器を使用し、紫外レーザーを照射したシリカガラスに生じた点欠陥の EPR シグナルの g 値と超微細構造テンソルを正確に決定する	東京工業大学フロンティア創造共同研究センター	細野 秀雄
アモルファス合金の磁気特性と熱的安定性に関する研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	山田 正明
金属酵素による窒素酸化物の変換メカニズム	金沢大学大学院自然科学研究科	櫻井 武
食品に含まれる機能性成分の精製・単離と構造解析および機能性評価	名古屋経済大学短期大学部	長島 万弓
機能性有機材料の磁化率測定	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	坏 広樹
装置開発室		
(前期)		
有機 EL 変調素子の開発	北陸先端科学技術大学院大学	三谷 忠興

計算機利用

分子内および分子間電荷移動の分子軌道法による研究	神奈川大学理学部	田仲 二郎
生体分子の機能発現反応に関する理論的研究	千葉大学大学院薬学研究院	星野 忠次
分子、生物、表面の量子化学：励起状態と化学反応	京都大学大学院工学研究科	中辻 博
複合電子系の構造、電子状態、反応過程、溶媒和構造に関する理論的研究	京都大学大学院工学研究科	榊 茂好
化学反応の分類および分子設計に関する理論的研究	大阪産業大学工学部	酒井 章吾
生体分子の構造と機能に関する理論的研究	広島大学大学院理学研究科	相田美砂子
遷移金属化合物および合金の電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	森永 正彦
ナノ構造体の原子構造と伝導現象	筑波大学物理学系	押山 淳
有機反応の経路と微視的機構	大阪大学産業科学研究所	山高 博
活性アルキル基の反応性の分子軌道法による検討	福岡大学薬学部	新矢 時寛
計算化学による加水分解経路の追跡	奈良教育大学教育学部	山邊 信一
分子の励起状態とその動的挙動の研究	大学評価・学位授与機構評価研究部	岩田 末廣
面選択性に関する理論研究、エノラートのアルキル化反応、求電子付加反応	東京大学大学院総合文化研究科	友田 修司
シクロデキストリンのウラシル系分子の包接効果に関する研究	茨城大学理学部	寺阪 利孝
水溶液中におけるイオンの構造	岡山大学歯学部	正村真佐雄
低次元強相関電子系物質の特異な電子状態に関する数値的研究	千葉大学理学部	太田 幸則
気相および液相における化学反応の理論的研究	京都大学大学院理学研究科	加藤 重樹
DNA 素子自己組織化の第一原理計算	鳥取大学工学部	石井 晃
メゾスコピック系における量子干渉効果及び電子相関	山形大学教育学部	野々山信二
分子の構造、力場と内部回転エネルギーの ab initio 計算	北海道大学大学院理学研究科	竹内 浩
層状人口格子における磁気円二色性	奈良県立医科大学医学部	平井 國友
分子軌道法による反応予測を基盤とする新有機反応の開発	東京大学大学院理学研究科	中村 栄一
熱化学反応及び光化学反応に関する理論的研究	広島大学大学院理学研究科	齊藤 昊
化合反応の量子ダイナミクスに関する理論的研究	東京大学大学院工学研究科	山下 晃一
第一原理電子構造理論の拡張と物質設計	東京大学工学系研究科	藤原 毅夫
分子軌道計算による有機反応設計および分子構造設計のための電子構造予測	東京大学大学院薬学系研究科	大和田智彦
分子磁性体の分子軌道法による理論解析及び新規手法の開発	大阪大学大学院理学研究科	山口 兆
気相及び凝縮相における光化学反応に関する理論的研究	秋田大学工学資源学部	天辰 禎晃
分子の電子状態と化学反応のポテンシャル面の理論的研究	名古屋大学大学院人間情報学研究所	古賀 伸明
溶液内化学反応の理論研究	名古屋大学大学院理学研究科	大峰 巖
フラーレン・ナノチューブ系の分子物性と固体物性の総合研究	東京工業大学理工学研究科	斎藤 晋
励起状態とその緩和過程に関する理論的研究	慶應義塾大学理工学部	藪下 聡
金属原子・分子相互系の幾何構造・電子構造の解明とポテンシャル曲面の解析	東北大学大学院理学研究科	大野 公一
遷移系列イオンを含む化合物の反応制御に関する理論研究	岐阜大学地域科学部	和佐田裕昭
気相および星間空間での多原子分子が関与する化学反応の量子化学的・反応動力学的研究	静岡大学理学部	相原 惇一
超純水と相互作用する材料表面現象の第一原理シミュレーション	大阪大学大学院工学研究科	後藤 英和
新規なケイ素化合物の ab initio 分子軌道法による研究	群馬大学工学部	工藤 貴子
第一原理電子論による新奇量子材料の計算物質探索	早稲田大学理工学部	武田京三郎
種々の分子及び分子集合体の赤外・ラマン強度と電子・振動相互作用および分子間相互作用	静岡大学教育学部	鳥居 肇
金属錯体ナノ空孔内での有機反応に関する理論研究	琉球大学教育学部	安藤 香織
固体触媒および生体分子における励起ダイナミクスと反応メカニズムに関する理論的研究	早稲田大学理工学部	中井 浩巳
単一アミノ酸ポテンシャル (SAAP) 力場の開発	東海大学理学部	岩岡 道夫
ナノネットワーク炭素系物質の構造と電子状態についての第一原理的研究	筑波大学物理学系	岡田 晋
分子動力学シミュレーションに基づく自由エネルギー計算法による蛋白質と核酸の機能と物性の物理化学的研究	弘前大学理工学部	斎藤 稔
アクチノイドイオンの水和反応の量子化学的検討	名古屋大学大学院工学研究科	津島 悟
環境関連有機化学および有機金属化学反応の設計および開発	茨城大学理学部	森 聖治
金属フタロシアニンの分子構造と電子状態に関する理論的研究	熊本大学理学部	藤本 斉
機能性有機材料の電子物性解析に関する理論的研究	京都大学大学院工学系研究科	田中 一義
高分子濃厚系における 1 本の高分子鎖の動的性質	慶應義塾大学理工学部	萩田 克美
開口部にメチレン炭素ユニットを導入した開口 C ₆₀ 誘導体の構造決定、及び物性の予測	名古屋大学大学院環境学研究所	岩松 将一

第一原理計算によるナノクラスターの新しい側面	横浜国立大学工学研究院	大野かおる
拡張アンサンブルシミュレーションによる高分子系の研究	慶應義塾大学理工学部	光武亜代理
シッフ塩基遷移金属錯体を触媒とする反応機構の理論解析	慶應義塾大学理工学部	池野 健人
蛋白質の動的構造と機能の解析	横浜市立大学大学院総合理学研究科	木寺 詔紀
分子軌道計算による不斉活性化機構の解明及び自己集合性不斉活性化触媒の開発	東京工業大学大学院理工学研究科	三上 幸一
重原子を含む化合物の基底・励起電子状態と分子物性に関する量子化学計算	東京都立大学理学研究科	波田 雅彦
溶液系およびイオン液体の電子および分子構造に関する研究	東京大学大学院理学系研究科	浜口 宏夫
半導体ナノ構造形成機構の解明と新機能ナノ構造体の設計	筑波大学物理学系	白石 賢二
機能性複合化金属錯体の励起状態と光応答機能に関する電子論的研究	熊本大学大学院自然科学研究科	杉本 学
第一原理分子動力学法による液体金属及び液体半導体の物性研究	(独)産業技術総合研究所計算科学研究部門	森下 徹也
フェレドキシンタンパク活性部位の電子状態および磁性	金沢大学理学部	小田 竜樹
Pt(111)上におけるシクロヘキサンの脱水素反応に関する理論的研究	大阪大学大学院工学研究科	津田 宗幸
光酸化還元反応によるプロトントンネルの制御を利用した新規光スイッチ分子の理論設計	九州大学大学院総合理工学研究科	三好 永作
生体超分子の立体構造変化と機能	東京大学分子細胞生物学研究所	北尾 彰朗
半導体ナノ構造における酸化反応の理論的研究	三重大学工学部	秋山 亨
気相(分子)・固相(半導体)界面での分子ヘテロ成長過程の第一原理電子論	早稲田大学理工学部	宮城島 規
第一遷移系金属イオンを中心とする配位化合物の反応におけるd電子の効果に関する理論的研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	和佐田祐子
ベンザインを用いる有機合成反応における機構解明	東京工業大学大学院理工学研究科	鈴木 啓介
低原子価六族金属カルボニル錯体を触媒とする炭素骨格構築反応の機構解明	東京工業大学大学院理工学研究科	岩澤 伸治
タンパク質・生体関連巨大分子系の量子化学計算に基づくアプローチ	(独)産業技術総合研究所計算科学研究部門	Dmitri Fedorov
分子軌道計算を基盤とする複核金属触媒の設計と開発	東京工業大学大学院理工学研究科	山中 正浩
生体分子の構造と機能に関する理論化学的研究	東京工業大学大学院生命理工学研究科	櫻井 実
固体表面上の生体分子認識反応系の構築と構造解析	分子科学研究所	宇理須恒雄
胆汁酸ミセルのMDシミュレーション	大分大学教育福祉学部	中島 俊男
計算機実験による液体の相分離ダイナミクス	東北大学大学院理学研究科	福村 裕史
シリコン表面吸着分子の分光と反応の理論的解析	九州大学情報基盤センター	青柳 睦
タンパク質の折り畳みに対する溶媒効果の分子論的研究	福岡大学理学部	山口 敏男
ビニルラジカルのポテンシャル曲面と運動の理論的研究	九州大学大学院理学研究院	田中 桂一
分子の電子状態と反応動力学に関する理論的研究	分子科学研究所	南部 伸孝
分子の動的諸過程の理論的研究	分子科学研究所	中村 宏樹
クラスターの電子構造と幾何構造	分子科学研究所	西 信之
導電性有機物質の構造と物性の研究	分子科学研究所	葉師 久弥
拡張アンサンブル法による蛋白質分子の折り畳みシミュレーション	分子科学研究所	岡本 祐幸
分子性伝導体の構造と電子状態	分子科学研究所	小林 速男
量子および古典凝集系に対する計算機シミュレーション	計算科学研究センター	岡崎 進
内部官能基を持つかご状化合物の分子動力学	分子科学研究所	永田 央
ポウル型共役化合物の物性調査	分子科学研究所	櫻井 英博
界面非線形分光の理論	計算科学研究センター	森田 明弘
偏光赤外吸収分光法を用いたアミロイドフィブリルの分子構造の解明	岡崎総合バイオサイエンスセンター	平松 弘嗣
透過型電子顕微鏡による1分子DNA配列解析のための人工核酸塩基プローブの開発	計算科学研究センター	片岡 正典
近赤外分光顕微鏡と核磁気共鳴画像を用いた、光刺激に対するヘモグロビン濃度とBOLD信号応答の同時計測	生理学研究所	豊田 浩士
金属錯体に関する理論的研究	静岡理工科大学理工学部	関山 秀雄
ヘモグロビンの構造と機能の研究	東海大学総合科学技術研究所	妹尾 康喜
有機ラジカルの電子状態のab initio MO計算	奈良女子大学理学部	竹内 孝江
有機分子を用いた単分子素子の量子輸送特性の理論的研究	東京大学大学院理学系研究科	田上 勝規
励起状態を生成するペニングイオン化の生成過程	新潟大学理学部	徳江 郁雄
電子状態も考慮した分子動力学シミュレーションによる固体物性の研究	慶應義塾大学理工学部	能勢 修一
非線形量子系におけるソリトンとカオス	鈴鹿国際大学国際学部	大野 稔彦
化学反応のab initio計算による研究	愛媛大学理学部	長岡 伸一
表面・薄膜・クラスターの電子状態と反応過程	姫路工業大学理学部	島 信幸

金属クラスターイオンの構造解明と反応性の解釈	豊田工業大学	近藤 保
分子シミュレーションによる分子集合体の研究	名古屋文理大学情報文化学部	本多 一彦
プラズマおよび熱 CVD の非経験的分子軌道法及び実験による研究	横浜国立大学工学部	佐藤 浩太
負イオンラジカル反応における反応試剤と生成物の構造と安定性	東京大学大学院総合文化研究科	永田 敬
炭素系星間分子の分子構造および生成機構に関する理論的研究	明治学院大学法学部	高橋 順子
チオキナクリドン誘導体の結晶構造と電子構造	横浜国立大学大学院工学研究院	千住 孝俊
内部回転を持つ分子の回転スペクトルの解析	明治大学理工学部	小田島仁司
ab initio MO 法による芳香族クラスターの研究	日本原子力研究所物質科学研究部	佐伯 盛久
有機単原子層の電子構造	東京農工大学工学部	尾崎 弘行
ピノキシ型ラジカルの励起状態における無輻射遷移機構	(財)産業創造研究所柏研究所	山口 真
ab initio 分子軌道法による - シアル酸、 - ガラクトース、及びシアリル ガラクトースのコンホメーション解析	岐阜大学大学院連合農学研究科	澤田 敏彦
電子状態計算によるタンパク質・低分子間相互作用解析	京都大学大学院薬学研究科	仲西 功
動的クラスター近似を用いた強相関電子系の研究	名古屋大学大学院理学研究科	平島 大
ジオキセタノンの分解に伴うホタルオキシシフェリンの高効率電子励起 生成反応素過程の量子化学計算	湖北短期大学情報メディア学科	小田井 圭
芳香族カルボニル分子の回転異性体	宮崎大学医学部	伊藤 隆夫
ナノサイズ・チャンネルを透過する荷電高分子の分子動力学研究	核融合科学研究所研究・企画情報セン ター	田中 基彦
円偏光軟 X 線のアミノ酸への作用に関する理論的研究	神戸大学大学院人間科学研究科	沖山 佳生
固相・液相・ガス相ヘリウム中の原子・イオンの分光	富山大学理学部	森脇 喜紀
分子の電子状態と分子スペクトル	岐阜薬科大学薬学部	宇野 文二
分子のひずみを介した有機固相反応の計算機シミュレーション	慶應義塾大学理工学部	フジヤール 芳代
蛋白質の構造機能相関計算	立命館大学情報理工学部	高橋 卓也
シトクロム c 酸化酵素の P 中間体の電子状態の理論的研究	岡崎統合バイオサイエンスセンター	太田 雄大
シトクロム c 酸化酵素の高原子価中間体に関する理論的研究	岡崎統合バイオサイエンスセンター	バウエル コロアスキー
有機導体の電子物性とスピン構造	分子科学研究所	古川 貢
シトクロム c 酸化酵素 Cu _B サイトモデル錯体の紫外共鳴ラマンスペクトル 生体分子の量子化学的、情報化学的研究	岡崎統合バイオサイエンスセンター	長野 恭朋
大規模系の分子軌道計算法の開発と金属を含む小さな分子の精密非経験的 分子軌道計算	東京大学生産技術研究所	佐藤 文俊
ビニルアントラセンの基底・励起状態における揺れ運動に関する量子化学 計算	(独)産業技術総合研究所グリッド研究 センター	長嶋 雲兵
動的界面の存在する非平衡現象の研究	星薬科大学薬学部	坂田 健
分子内水素結合の研究	名古屋大学大学院情報学研究科	渡辺 宙志
金属錯体の構造・反応・電子遷移に関する理論的研究	弘前大学理工学部	須藤 進
溶媒和クラスターの微視的構造と反応ダイナミックスの研究	お茶の水女子大学理学部	鷹野 景子
数理モデルによる生物の分岐パターン形成機構の解明	神戸大学理学部	富宅喜代一
フラビン酵素の反応機構に関する研究	基礎生物学研究所	遠矢 周作
Tight Binding 分子動力学によるカーボンナノチューブの構造欠陥のシミュ レーション	(独)産業技術総合研究所計算科学部門	崔 隆基
QM/MM 法によるタンパク質全原子計算から振動スペクトルを解析する	横浜市立大学総合理学研究科	若生 啓
数理モデルによる生物の分岐パターン形成機構の解明	東北大学多元物質科学研究所	海野 雅司
密度汎関数法を用いた半導体薄膜の電子状態と輸送特性の第一原理的研究	横浜市立大学総合理学研究科	岡田 勇
多量体分子クラスターの分子間ポテンシャル	慶應義塾大学理工学部	山内 淳
安定な発生分化を作り出す遺伝子ネットワーク構造の数理的解明	九州大学理学研究院	原田 賢介
一次元格子熱伝導系における定常速度の漸近的振舞いと局所平衡	基礎生物学研究所	望月 敦史
数値シミュレーションによる分光スペクトルの計算	大阪府立大学大学院工学研究科	上田 彰
	京都大学大学院理学研究科	谷村 吉隆

2-10-3 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~'97		'98		'99		'00		'01		'02		'03		'04		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	77	612	1	5	1	5	2	12	7	41	5	36	5	70	3	33	人数： 登録人数
協力研究	2,697	2,984	107	157	115	212	119	249	100	223	125	253	101	246	100	265	"
招へい 協力研究	186	186	0	0	0	0	2	3	5	6	1	1	1	1	0	0	"
所長 招へい	1,711	1,711	139	139	321	321	264	264	385	3857	313	313	308	308	67	67	人数： 旅費支給者
研究会	219	3,068	5	84	12	194	13	276	6	129	11	332	8	229	13	241	"
施設利用 I	1,322	2,802	50	151	49	135	54	142	49	139	63	188	54	150	50	145	件数： 許可件数 人数： 許可人数
電子計算機 施設利用 (施設利用II)	3,121	9,271	174	680	167	654	156	631	144	584	134	558	120	525	143	556	"
合計	9,333	20,634	476	1,216	665	1,521	610	1,577	696	1,507	652	1,681	598	1,529	376	1,307	
経費	363,695		18,645		30,898		32,080		30,994		37,896		30,794		-		千円

* 施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用

('04 年度の数値は, 2004.12 末現在)

分子科学研究所UVSOR共同研究実施一覧

年度 項目	'85~'96		'98		'99		'00		'01		'02		'03		'04		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	34	371	3	41	1	11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	人数： 登録人数
協力研究	280	970	24	104	8	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
招へい 協力研究	68	68	2	2	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	"
研究会	27	386	1	23	1	26	1	29	1	13	0	0	1	51	0	0	人数： 旅費支給者
施設利用	1,250	6,197	157	769	150	699	160	820	157	707	160	805	129	715	126	586	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	1,659	7,992	187	939	162	773	161	849	158	720	160	805	130	766	126	586	
経費	140,882		14,027		12,951		16,441		16,512		15,780		13,884		-		千円

('04 年度の数値は, 2004.12 末現在)

2-11 学術創成研究（新プログラム）

学術創成研究費

「新しい研究ネットワークによる電子相関係の研究

物理と化学の真の融合を目指して」

20世紀後半のエレクトロニクス産業を支えた半導体は、電子の遍歴性に基づいた物性を基盤としているが、分子の持つ電子の局在性とこの遍歴性の中間的な性質を持つ物質群は「多様な電子相関係物質」として近年物理の分野で大きなトピックとなっている。電子間の相互作用が強くなると、電子の運動はお互いに強く相関するようになる。これを強電子相関係と呼んでいる。この強相関は、外部パラメーターのわずかな変化によって様々な相を生じ、これが多機能性の起源となっている。このため、「強電子相関」の概念は次世代の材料開発に不可欠と言われている。これは、ナノ構造体のように電子相関を恣意的に強めた系で本質的な役割を示す。物理学と化学は、「実空間であれ運動量空間であれ、各々の旧来のやり方では表現できない電子系」を未開拓領域として持ってあり、それぞれ協力・融合して、次世代の物質科学の基礎を支える新概念を構築する必要性が強く認識されるようになった。このような背景から、我が国の物性科学に関連する五つの研究所、即ち分子科学研究所の他に北から、東北大学金属材料研究所、高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所、東京大学物性研究所、京都大学化学研究所が一体となって上記の学術創成研究を実行している。

まず、共同研究体制を有形の形で実現するために、5カ所の研究室間ネットワーク“コラボラトリー”の構築が重点課題の一つとして取り上げられた。新しい研究協力システムである“コラボラトリー”とは、各研究室の持つ資源（ブレイン、ハードウェア、ソフトウェア）を研究ネットワーク上の研究室の間で共有することにより、各研究室があたかも隣にあるかのような研究環境を提供するものである。具体的には、高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所の精密構造解析システムを分子研のオフィスからマシンの状況と計測データを表示する2台のパソコンの画面を通して、制御と計測を行うものである。分子研では、中村敏和助教授によってこのシステムの運用が実現されている。

本学術創成研究では、今年度から班編制を修正して、主として強相関係の電気伝導性や磁性を取り扱う第一班、ソフトマテリアルやナノシステム、界面や複合物質系を対象として5研究所間のネットワークを利用した物理学と化学の融合によって初めて可能となる精密構造解析を行う第二班、高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所を中心としてコラボシステムの活用とヒューマンインターフェースの益々の充実を図る第三班から構成されている。

今年度は、7月5日から7月6日にホテルラヴィエ川良で、12月10日から11日に大仁ホテルで研究会が開催され、3月11日から15日まで、淡路夢舞台国際会議場で国際会議 International Symposium on “Frontier in Materials Design, Synthesis and Measurements”(Creative Scientific Research on Collaboratory on Electron Correlations—Toward a New Research Network between Physics and Chemistry) が開催された。

様々な形の研究会や個人的な議論を通して、実験家と理論家との交流による問題解決の道が開けたり、このプログラムの有効性が大いに認識されて来たと言えるのではないだろうか。更なる成果を目指して積極的な取り組みを推進したい。

2-12 ナノサイエンス支援

2-12-1 ナノサイエンス支援「分子・物質総合合成・解析支援プログラム」による協力研究・施設利用について

分子科学研究所では文部科学省のナノテクノロジー総合支援プロジェクトを受託し、その一環として、分子スケールナノサイエンスセンターや関連する研究系を中心として、ナノ物質創製・物性評価・構造決定・ナノスケール分子観察・分子物質操作加工などを行うための8種の装置群の開放と理論計算支援のプログラムを実行している。今年度は、利用申請課題数も100件を超え、多くのナノサイエンス研究者に参加して頂いている。17年度からの新しい共同利用に向けて、920MHz核磁気共鳴吸収装置には炭素や窒素の軽元素では初めての固体プローブが導入され、幅広い応用が期待されている。

表1に各装置群とプログラムを示す。支援は、担当研究者と共に研究を進めてゆく協力研究と、装置に関する十分な知識と経験を有する研究者が随時の申し込みによって当該装置を利用する施設利用の何れかの申し込みを通して行われる。研究所ホームページ(<http://www.ims.ac.jp/joint/>)にある公募要領に沿って通常の共同研究と同じように年2回の公募を行い、分子・物質ナノサイエンス支援実行委員会で申請内容を審査し採択課題を決定している。また、施設利用は随時実行し機動性を高めている。顕微鏡関係の施設利用は、学、産、官を問わず増加している。

表1 支援装置・プログラム一覧

支援装置・プログラム	装置・プログラムの概要
有機エレクトロニクス素子作製・評価システム	有機半導体を用いた素子の作製と評価を行うための、電極パターン描画装置、高配向有機薄膜作成装置、電子物性測定装置から構成される。
分子電子素子のための分子合成の全自動化システム	全自動化しないと合成が困難な分子を全自動合成装置で合成する。
分子電子素子のための、素子作成と電気特性計測システム	ムービングウオールLB膜作成装置、マグネトロンスパッター、定フォトン照射装置、アルゴンレーザー、高倍率高感度CCDカメラ付金属顕微鏡、極低温真空プローパー、微少電流計測システム、点接触電流イメージング原子間顕微鏡等を用いた分子電子素子の作成と、その電気特性の計測が可能である。
光誘起反応観測装置	レーザーと極低温走査型トンネル顕微鏡を組み合わせ、光による分子構造の変化やレーザー誘起された試料表面の強電磁場による変化の観測の支援を行う。共鳴ラマン(時間分解)分光器および極低温走査型トンネル顕微鏡単体としての使用も可能である。
ナノクラスター飛行時間型質量分析装置	金属クラスターなど種々のクラスターを適切な方法(ESI、LDI、MALDI、EI)によってイオン化し、その質量を最高質量10万Daの範囲で計測する。
分子結合状態解析システム	MicroESCA：必要とする微小領域に絞れるX線源を用いたX線光電子分光装置であり、ナノサイエンスに必須のナノ領域の分子の結合状態を診断する装置。 920MHz NMR：現在利用可能な最高の分解能を誇る核磁気共鳴装置。C/Hプローブ、HCNプローブによる ¹ H核、 ¹³ C核の溶液試料測定に対応。平成17年後期より固体試料(¹³ C核)測定を試行。
高感度磁気物性測定装置	振動式高感度磁化率測定装置(RSO)を装備した、微量試料用7テスラ超低磁場連続低温制御および温度スイープ型磁気物性測定装置。
分子設計用大型計算支援プログラム	大型コンピューターを用いた理論計算によって、分子設計および生成物のスペクトル予測を行い、有機合成の指針を与えるための支援プログラム。専門家の適切な指導により、大型分子設計の理論計算手法を修得する。
電子顕微鏡	300kV透過型分析電子顕微鏡(EELS装置、EDS装置付TEM)電界放出型走査電子顕微鏡(SEM)、集束イオンビーム加工観察装置(FIB)による構造解析・分析。

2-12-2 2004 年度の実施状況 (2月28日まで)

(1) 協力研究

課 題 名 (前期)	代 表 者
シングルグレイン有機 FET の特性解析	京都大学化学研究所教授 磯田 正二
共役高分子電界効果トランジスターの製作と評価	早稲田大学理工学部教授 古川 行夫
和周波分光とプローブ顕微鏡による有機分子 - シリコン界面の研究	(財)神奈川科学技術アカデミー研究室長 大西 洋
共役オリゴマーを用いた分子素子に関する研究	大阪市立大学講師 小寺 正敏
新規な有機 FET の開発	東京工業大学大学院総合理工学研究科助手 西田 純一
電析法による酸化亜鉛 / 色素複合薄膜素子の作製と評価	岐阜大学大学院工学研究科助手 吉田 司
ロジウムおよびパラジウム上の N ₂ O 分子の配向と分解	北海道大学触媒化学研究センター教授 松島 龍夫
有機金属ナノクラスターの創製: 構造と機能制御	愛知教育大学教育学部助手 日野 和之
Au・Ag・Si ナノサイズクラスターの構造評価	姫路工業大学大学院理学研究科教授 木村 啓作
質量分析による超微細金属ナノ粒子の構造解析	北陸先端科学技術大学院大学助教授 寺西 利治
フェルダジラジカル分子性錯体を用いた磁気伝導体の開発	愛媛大学理学部教授 向井 和男
ナノサイズインテリジェント分子クラスターの創成	名古屋工業大学大学院工学研究科教授 尾中 証
シリコン上自己組織化積層膜のナノ集積と機能発現	北海道大学教授 魚崎 浩平
高周期元素の特性を活かした新規ナノスケール分子の開発	京都大学化学研究所教授 時任 宣博
自己組織化ナノサイズ金属クラスターの分子設計	近畿大学理工学部教授 藤原 尚
金属内包フラレンの構造と金属の動的挙動	筑波大学先端学際領域研究センター教授 赤阪 健
f 電子を有する金属内包フラレンの反応性の解明	筑波大学先端学際領域研究センター講師 若原 孝次
新規なナノスケール分子キャビティを活用した高反応性化学種安定化に関する理論研究	東京大学大学院理学系研究科講師 後藤 敬
ナノクラスターの電子状態計算の効率化とその応用	早稲田大学理工学部助教授 中井 浩巳
スタンノールアニオン類の電子状態の解明とスタンノール骨格を主鎖に有する高分子化合物の物性探索	埼玉大学理学部助教授 斎藤 雅一
フラレン類の構造と NMR 結合定数の関係	東京都立大学理学研究科助手 矢田 洋子
開口部にメチレン炭素ユニットを導入した開口 C ₆₀ 誘導体の構造決定、及び構造・電子的特性の解明	名古屋大学大学院環境学研究科助手 岩松 将一
ナノサイズの分子の大規模計算	大阪府立大学総合科学部助手 麻田 俊雄
緑茶カテキン類 / カフェイン錯体における分子認識機構の解明	独立行政法人農業・生物系特定産業技術研究機構野菜茶業研究所研究員 林 宣之
課 題 名 (後期)	代 表 者
プローブ顕微鏡と界面ラマン分光による有機分子 - シリコン界面の研究	神戸大学理学部教授 大西 洋
新規な有機 FET の開発	東京工業大学大学院総合理工学研究科助手 西田 純一
電析法によって作製した酸化亜鉛 / 色素ハイブリット薄膜のナノ構造観察	岐阜大学大学院工学研究科助手 吉田 司
単一グレイン有機 FET の特性評価	京都大学化学研究所教授 磯田 正二
有機トランジスタにおける構造欠陥の役割	学習院大学理学部教授 小谷 正博
有機金属ナノクラスターの創製: 構造と機能制御	愛知教育大学教育学部助手 日野 和之
1次元水素結合ナノワイヤークラスタにおける多重プロトン移動反応の協同効果と量子性	九州大学大学院理学研究院助手 迫田 憲治
ナノハイブリット材料の合成とキャラクタリゼーション	(株)豊田中央研究所第2特別研究室室長 福嶋 喜章
Nanotechnology-Lubrication	日本工業大学先端材料技術研究センター教授 三好 和壽
金属及びシリコンクラスターのサイズ評価	兵庫県立大学大学院物質理学研究科教授 木村 啓作
質量分析による超微細金属ナノ粒子の構造解析	筑波大学教授 寺西 利治
レーザーアニーリングによる安定金属クラスターの生成	東京大学大学院総合文化研究科助教授 真船 文隆
パルスアーク放電法およびイオン移動能法を用いたナノカーボンの研究	名古屋大学物質科学国際研究センター助手 菅井 俊樹
光磁性金属錯体の機能集積化	慶應義塾大学理工学部助手 秋津 貴城
磁性カンチレバーの消磁次状態における微弱磁化評価	大阪大学産業科学研究所助教授 松本 卓也
扇型有機分子で覆われた金属ナノワイヤの電子状態評価	静岡大学工学部助教授 植田 一正
高周期元素の特性を活かした新規ナノスケール分子の開発	京都大学化学研究所教授 時任 宣博
自己組織化ナノサイズ金属クラスターの分子設計	近畿大学理工学部教授 藤原 尚
金属内包フラレンにおける内包金属の動的制御	筑波大学先端学際領域研究センター教授 赤阪 健
常磁性フラレンを鍵物質とする超分子の創製	筑波大学先端学際領域研究センター講師 若原 孝次

新規なナノスケール分子キャビティーを活用した高反応性化学種安定化に関する理論研究	東京大学大学院理学系研究科助教授	後藤 敬
スタンノールアニオン類の電子状態の解明とスタンノール骨格を主鎖に有する高分子化合物の物性探索	埼玉大学理学部助教授	斎藤 雅一
開口部にメチレン炭素ユニットを導入した開口 C ₆₀ 誘導体の構造決定、及び構造・電子的特性の解明	名古屋大学大学院環境学研究科助手	岩松 将一
緑茶カテキン類 / カフェイン錯体における分子認識機構の解明	独立行政法人農業・生物系特定産業技術研究機構野菜茶業研究所研究員	林 宣之
水素結合性ヘテロダイマーカプセルの分子自己集合と内包ゲスト分子の配向制御の理論的考察	静岡大学理学部助教授	小林 健二
単層カーボンナノチューブの高分散化	東京学芸大学教育学部助手	前田 優
ナノサイズ分子の大規模計算	大阪府立大学総合科学部助手	麻田 俊雄
ポルフィリンナノロッドの光電子特性	大阪大学産業科学研究所助教授	松本 卓也
メゾ・メゾ結合ポルフィリン多量体の大量合成法の開拓	京都大学大学院理学研究科教授	大須賀篤弘
メゾ・メゾ結合ポルフィリン多量体を基軸とした分子素子開発	京都大学大学院理学研究科教授	大須賀篤弘
ポルフィリンを用いた鎖状金属錯体の合成研究	東京都立大学大学院理学研究科教授	杉浦 健一
ナノ球リソグラフィーによる磁性ドット形成	大阪大学産業科学研究所助手	佐藤 和久
N- 混乱ポルフィリンを基本骨格とする鎖状ポリマーの合成とその電気特性の評価	九州大学大学院工学研究院教授	古田 弘幸
高共役ポルフィリンオリゴマー修飾電極の作成	愛媛大学総合科学研究支援センター教授	宇野 英満
錯体分子ユニットを用いた表面ナノ分子素子の合成	中央大学理工学部教授	芳賀 正明
パイ共役架橋配位子を有するルテニウム錯体ユニットを基本とするナノ集積体の電気特性評価	中央大学理工学部教授	芳賀 正明
(2) 施設利用		
(前期)		
Au 錯体をベースとした機能性ナノ分子の創製 Zn,Ni 錯体を格子点とするナノリアクターの創製 Mn イオンをコア金属とする分子性磁石の創製	名古屋工業大学大学院工学研究科教授	尾中 証
開口部にメチレン炭素ユニットを導入した開口 C ₆₀ 誘導体の構造決定、及び構造・電子的特性の解明	名古屋大学大学院環境学研究科助手	岩松 将一
フェムト秒レーザーを用いたクロムポルフィリン錯体の光化学反応初期過程の研究	愛知教育大学教育学部助教授	稲毛 正彦
SiC 表面の分子結合状態の研究	名城大学理工学部講師	丸山 隆浩
短パルスレーザーによる金属・分子ハイブリットナノクラスター - の光誘起解離反応の観察及びレーザー分光構造解析	東京大学大学院総合文化研究科助手	井口 佳哉
分子結合状態解析システムを用いた半導体表面層の分析	石川工業高等専門学校電子情報工学科助教授	山田 健二
FIB 加工による機能性セラミックス上のカーボンナノチューブの構造制御	名古屋工業大学ながれ領域機能工学専攻教授	市川 洋
機能性セラミックス上のカーボンナノチューブの構造制御	名古屋工業大学ながれ領域機能工学専攻教授	市川 洋
ナノギャップ電極を用いた芳香族アセチレン化合物の電気特性の研究	岡山理科大学大学院工学研究科博士課程	叶 方国
金属内包フラーレン Tm ₂ @C ₈₂ における Tm の磁気緩和過程の研究	東京都立大学大学院理学研究科教授	菊池 耕一
(後期)		
コバルトナノ粒子系の磁性	三重大学教育学部教授	佐光三四郎
短パルスレーザーによる金属・分子ハイブリットナノクラスターの光誘起解離反応の観察及びレーザー分光構造解析	東京大学大学院総合文化研究科助手	井口 佳哉
ポリマー上にマイクロ波プラズマ CDV 法で作成した酸化ケイ素薄膜 (SiO _x 膜) の構造	東洋製罐グループ総合研究所主任研究員	細野 寛子
開口部にメチレン炭素ユニットを導入した開口 C ₆₀ 誘導体の構造決定、及び構造・電子的特性の解明	名古屋大学大学院環境学研究科助手	岩松 将一
新規導電性潤滑剤の全自動合成システムを利用した開発	住鋤潤滑剤 (株) 三重工場開発センター	児玉 竜二
新規導電性潤滑剤の電気特性計測	開発二課長	
絶縁被覆化ナノ分子ワイヤの開発	大阪大学産業科学研究所教授	安蘇 芳雄
ナノ分子ワイヤの電気特性計測に関する研究		
分子ワイヤの合成	大阪大学産業科学研究所助手	谷口 正輝
二次元自己組織化分子ナノパターンニングの創製と電気特性解明	(独)物質・材料研究機構物質研究所任期付研究員	中西 尚志

二次元自己組織可能を持つ新規導電性オリゴマー分子の合成	(独)物質・材料研究機構物質研究所任期付研究員	中西 尚志
光化学反応によりドーブされた導電性薄膜の表面観測と特性計測	山口大学理学部教授	石黒 勝也
機能性セラミックス上のカーボンナノチューブの構造制御	名古屋工業大学大学院工学研究科教授	市川 洋
高磁気力による擬似微小重力場・過重力場中の対流のその場観察	広島大学大学院理学研究科教授	谷本 能文
分子結合状態解析システムを用いた半導体表面層の分析	石川工業高等専門学校電子情報工学科助教	山田 健二
SiC(0001)C面の分子結合状態の影響	名城大学理工学部講師	丸山 隆浩
海洋生物由来の生物活性ナノ有機分子の構造解析	北海道大学大学院薬学研究科助教	津田 正志
特異な磁性を示す一次元ロジウム(I) セミキノネート錯体の磁気特性の解明—一次元ロジウム-ジオキソレン錯体の原子価状態の解明	兵庫県立大学大学院物質理学研究科助手	満身 稔
新規ナノチューブ状物質の局所構造解析	法政大学工学部助教	緒方 啓典
920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いたタンパク質・複合糖質の構造解析	名古屋市立大学大学院薬学研究科講師	山口 芳樹
希土類マンガナイトの物性研究	豊橋技術科学大学教授	亀頭 直樹
フェムト秒レーザーを用いたクロムポルフィリン錯体の光化学反応初期過程の研究	愛知教育大学教授	稲毛 正彦
カーボンナノチューブの大量合成と分子内包カーボンなチューブの作製	法政大学マイクロナノテクノロジー研究センター PD	鈴木 研二
ロジウム上の亜酸化窒素分子の配向と活性サイト近傍の分布の STM による評価	北海道大学触媒化学研究センター	松島 龍夫
有機磁性体および有機磁性伝導体の磁化率測定	兵庫県立大学大学院物質理学研究科助手	坏 広樹
貴金属及び酸化ナノクラスターの高分解能 TEM を用いた微構造解析	(株)豊田中央研究所触媒研究室主任研究員	須田 明彦
キラル磁性体の構築と物性研究	広島大学大学院理学研究科助手	大木 寛
酸化鉄サブマイクロ球殻マグネットの構造決定	名古屋大学大学院理学研究科教授	阿波賀邦夫
パラ置換フェニレン-エチニレンの合成研究	岡山理科大学助教	折田 明浩

2-13 超高速コンピュータ網形成 (NAREGI) プロジェクト

2-13-1 NAREGI「ナノサイエンス実証研究」拠点の現状と課題

NAREGI プロジェクトが開始して2年目が終了しつつある。分子科学研究所は「ナノ実証」の拠点としてこのプロジェクトを推進しており、ナノサイエンス分野の計算科学において、着実に成果をあげつつある。(これらの成果については「ナノサイエンス実証研究」第3回公開シンポジウム講演要旨集を参照のこと。)また、産学官連携プロジェクトとして進めている産業界からの「ナノ設計実証」公募研究への参加も本年2月15日現在で16社19件と着実に増えている。(添付資料参照)一方、2年が経過した現在、プロジェクトを成功に導く上で、早急に解決すべき問題点も出て来ている。本稿ではそれらの中で(1)プロジェクトの位置付け、(2)産学連携、(3)グリッドナノシミュレータ、の3つについて拠点としての見解を述べる。

(1) プロジェクトの位置付け

本プロジェクトの特徴のひとつは「グリッド環境」というIT分野と「ナノサイエンス」という分子・物質科学分野の共同研究にある。これら二つの分野はこれまでほとんど接触がなく、これほど広範にしかも緊密に共同を行うのはおそらく国際的にも初めてのことであろう。プロジェクトのこの性格のために、当初、両分野の研究者の間に様々なとまどいと疑問が生じた。特に、計算分子科学者の間では「何故、グリッドなのだ?」、「何故、従来型のスパコンではいけないのだ?」という疑問が生じた。この疑問は「我が国の将来の計算分子科学がどうあるべきか」という問題とも密接に関係しており、目をつぶって通り過ぎるわけにはいかない。ここでは「ナノサイエンス」に特化して、この問題に関する考えを述べる。

ナノサイエンスが対象とする物質のサイズは 10^{-9} – 10^{-6} m程度のスケールであり、このスケールの問題はいわゆる現象論的理論(熱力学、弾性体力学、流体力学、電磁気学など)とミクロの理論(分子動力学、量子力学)の中間のスケールでどちらの側からも極めて取り扱いが難しいスケールである。現象論の側からは単に難しいだけではなく、本質的に不可能である。何故なら現象論的世界とナノの世界を支配する法則が全く異なっているからである。一方、ミクロ(原子、分子)の世界とナノの世界を支配する法則は本質的に同じである。しかしながら、ミクロの理論にとってもこの問題は極めて難しい。それは分子サイズ(電子数や構造空間の自由度)が大きくなったために計算量が飛躍的に増大するというだけではない。さらに深刻な理論的問題が横たわっているのである。ナノ現象の典型例は、例えば、分子デバイスや溶液中の蛋白質のフォールディングである。これらの系は「有限系」と「無限系」あるいは別の見方をすれば「均質系」と「不均質系」とが入り混じっていることが特徴である。例えば、溶液中の蛋白質や分子集合体(ミセル、ベシクル、リポソーム)の場合蛋白質のサイズは有限、不均質系であるが、溶液は無限、均質系である。分子デバイスの場合、分子スイッチは有限、不均質系であるがそれを埋め込む固体基盤は無限、均質系である。伝統的な理論化学物理においてこれまで無限系・均質系を扱う理論と有限系・不均質系を扱う理論とは概ね独立に発展を遂げ、それらはそれぞれ得手、不得手をもっている。無限系・均質系を取り扱う理論では例えば液体の統計力学がある。この理論は熱力学的安定性(自由エネルギー)を求めるには有利であるが、局所的構造や揺らぎを扱うには適していない。一方、比較的少数の多体系を扱うことを目的に考案された「分子シミュレーション」は局所構造をミクロレベルで詳細に扱うのに便利であるが、熱力学的安定性を扱うには極めて不利である。また、同様のことは電子構造を扱う理論にも当てはまる。バンド理論に代表される固体電子論は比較的小さな平面波基底で扱うことができる非局在化した電子は得意とするが局在化した電子は不得手である。一方、分子の電子状態を扱う量子化学はガウス基底などで記述できる局在化した電子の取り扱いに威力を発揮するが、無限に広がった金属内の電子に対してはあまり有

効とは言えない。ナノサイエンスが対象とする物質はまさに均質と不均質，あるいは無限系と有限系が入り混じった系であり，このような系を分子・原子レベルで取り扱う理論は今のところ存在しない。

グリッド計算環境がナノサイエンスに有効であるとする根拠は，この「均質」と「不均質」および「有限系」と「無限系」の混在というナノ現象に特有の「複雑性」にある。このような複雑系の個々の要素に関わる研究者は全国あるいは全世界に散在しており，また，それぞれの計算環境（ハード，ソフト）を自分自身の研究に最適化して使っている。グリッドはこれらの研究者を超高速ネットワークで結び付け，彼らの共同研究を「実時間」で実現する環境を提供する。このプロジェクトが成功した暁には，個々の方法論やプログラムの開発者は（市販のものも含めて）他のプログラム開発者とライセンス契約を結ぶだけで，それらのプログラムを，直接，自分自身のプログラムにインテグレートして使用することができるようになるだろう。

(2) 産学官連携について

本プロジェクトはもうひとつの性格をもっている。それは国の「産業再生プログラム」の一環としての「産学官連携」という性格である。プロジェクト開始後2年が経過した現在，この「産学官連携」をめぐるいくつかの問題が生じている。法人化後の大学や公的研究機関と産業界との連携プロジェクトの機会が多くなると予想される現在，それらは決して見過ごすことのできない問題を孕んでいる。すなわち，「産」の側からは「もっと直接的に個々の企業利益につながる産学連携」を希望する声が出てきており，一方，「学」の側ではそれに対する強い反撥が生まれている。

本プロジェクトの第一のミッションがグリッド計算環境の実証研究であり，その目的を達成するためにナノサイエンスの分野を先導する理論的方法論を構築することにあることはいうまでもないが，このような方法論が，将来，実際の生産や医療活動に活かされるとすればそれは我々研究者にとっても大きな喜びである。そして，そのために産学官が連携して研究活動を行うことの重要性について全く異論を挟む余地はない。しかしながら，そのことは「産学官連携」が無原則的に行われてよいということを決して意味しない。

本プロジェクトの全費用は国からの公的資金で賄われている。また，「学」の側の研究者は国費で雇われているだけでなく，個々の研究者が本プロジェクトに提供することを期待されている研究成果の多くはプロジェクトに参加した個人が開発した部分だけではなく，多くの先達によって行われたものを基礎にしており，その意味でも公的な性格をもっている。すなわち，本プロジェクトは2重，3重に「公的」性格を帯びているのである。したがって，「学」側の研究者は個々の一企業だけの私利私欲に直接結びつくような援助や研究テーマの選定には慎重にならざるを得ない。一方，個々の企業の本来の目的は「利潤追求」にあり，私利私欲を帯びざるを得ない。したがって，その研究テーマはできるだけ企業の当面の利益に直接結びつくようなものが理想的である。上に述べた問題はこの「公」と「私」の間の矛盾であるとも言える。

ここで，この点について拠点としての基本的なスタンスを改めて表明したい。

産学官連携には三つの原則が必要である。それは 公正であること，研究成果の公開，学問の自由，の三つである。

まず，公正でなければならない。すなわち，本プロジェクトに参加する資格や本プロジェクトの成果を享受する権利は広く社会に開かれていなければならない。これは特定の企業がその利益を追求するためのプロジェクトではないからである。もし，プロジェクトに参加した学側の研究者が特定の企業の利益だけを優先すれば，それは他の企業にとって不利益になる可能性が高い。それは「産」の中に抜き差し成らぬ不信感を生み出し，プロジェクト崩壊の危険にもつながりかねない。

次に、このプロジェクトで行われた研究の成果はすべて公開される必要がある。これは本プロジェクトが公的資金、すなわち、国民の血税を使って実施される以上絶対に守られるべき原則である。もちろん、個々の企業がプロジェクト終了後にその成果をその技術開発や生産活動などに活用することは大いに奨励されるべきであるが、それを本プロジェクトの参加企業のみ限定する根拠はない。これはプロジェクト全体の「説明責任」に関わる問題である。

最後に、学問の自由、すなわち、「研究テーマ」や「研究方法」などの選定および研究の発表については研究者に完全に任せられなければならない。もし、どのような研究であれ「学問的動機」以外の何らかの強制が働く場合、研究者の自発的な研究意欲は殺がれ、プロジェクトの成功自身が保証されないからである。このことは先に述べた「公正」および「公開」の原則とも密接に関係している。もし、個々の企業が自己の利益の追求に急なあまり、研究者にとって興味のない研究テーマを押し付けようとしても、それはお互いにとって不幸な結果を招くだけである。また、企業秘密を守ることを優先するために論文発表を妨げることなどは研究者の「学問的動機」と真っ向から対立する発想である。

(3) グリッドナノシミュレータ

本プロジェクトの目的はグリッド計算環境の有効性をナノサイエンス分野の計算科学において実証することである。この目的を果たすため、開発された各シミュレーションプログラムをグリッド環境下で統合、実行するツールとして、グリッドナノシミュレータを計画している。特に metacomputing, high throughput, real-time collaboration を考えた時、このシミュレータは次のような要求を満足しなければならない。まず第一に、グリッドミドルウェアを用いることにより、各ソフトが単独で稼動することに加えて、各サイトの様々なソフトを結合、連成し、多様な使用形態、実行パターンに対応できる機能を持つことである。MPI 並列化後のアプリケーションのグリッド化機能はこのシミュレータが受け持つこととなる。そのため第二には、このシミュレータは汎用性に富んでいなければならない。もちろん、NAREGI 開発のシミュレーションソフトに加えて、それ以外の既存のフリーウェア、市販ソフトも個々のソフトの著作権を侵すことなく実行可能でなければならない。このため個々のプログラムの個別性、特殊性を認めた上で、任意のプログラムに対しこれらを修正することなく、互いに必要データの受け渡しを行いながら任意の結合、連成、任意の実行パターンを実現することが不可欠となる。第三に、研究の作業効率を高めるために、シミュレータは利便性の高いものでなければならない。

これらの要件を実現するために、シミュレータの機能とそれを受け持つシミュレータツールの部品化を進め、これらの部品をワークフロー GUI などのグリッドミドルウェアを用いて統合し実行するという形式を選択する。ここで開発するツールとしては、まず第二の要求を満足するために、各プログラム固有の入出力書式に従って作成した個別の入出力テンプレートを通して、他の任意のプログラムの入出力との受け渡しを行うアプリケーション間データ変換ツール (GIANT) の開発を進める。このとき BMSML, CML などの標準データ形式を採用することとする。また、第三の要求を満足するために、上述の入力テンプレートに従って温度や基底など計算に必要な数値データや文字データを含む入力ファイルを作成するための入力 GUI を開発し、さらにはタンパク質や DNA、また dendrimer など複雑な構造を持つナノ分子系および分子集合体の初期構造を自動的に生成するためのナノ初期情報生成ツールの開発も行う。

2-13-2 2004 年度の実施状況 「ナノ設計実証」公募テーマ一覧

課 題 名	実施企業
タンパク質立体構造解析システム superFAMS のグリッド化と ab initio 構造解析手法によるゲノムスケールへの適用	日立ソフトウェアエンジニアリング(株)(共同研究者・北里大、日本 SGI(株)、味の素(株))
ナノスケールにおける触媒反応の解析と新規触媒の開発	旭化成(株)
RISM-SCF 法を用いた分子物性および化学反応に対する溶媒効果への適用	三井化学(株)
拡張アンサンブル分子動力学シミュレーションプログラムの開発と酵素触媒の活性コンフォーメーション探索	三井化学(株)
アスパラギン酸プロテアーゼのリガンド結合形式に関する研究	住友製薬(株)
核内レセプターのシグナル伝達に関する分子メカニズム解析	住友製薬(株)
メソポーラス材料ナノ空間 吸着分子相互作用の解析	(株)日立製作所
ナノ磁性粒子集合体の磁化分布解析	日立金属(株)
シリコンナノデバイス用高誘電率ゲート絶縁膜材料の劣化過程の研究	(株)富士通研究所
時間依存解析に基づく物性量の算出	住友化学工業(株)
光励起・緩和過程における多体効果の量子動力学的解析	(株)東芝
ナノ領域における希薄混合流体の動的挙動解析	(株)東芝
RISM 法による溶液中の物性推算手法の研究 酸強度の推算	旭硝子(株)
RISM 法による溶媒 - 溶質相互作用を取り入れた物性推算手法の研究	昭和電工(株)
RISM 法による溶液中の物性推算手法の研究 溶解度の推算	日本ゼオン(株)
RISM 法による溶液中の物性推算手法の研究 溶媒和の pKa への効果の推算	(株)日本触媒
RISM 法による溶液中の物性推算手法の研究 反応および活性化自由エネルギーの推算	ダイセル化学工業(株)
RISM 法を用いた pKa、log Pow の算出	出光石油化学(株)
RISM 法を用いた pKa、log Pow の算出	JSR(株)

2-14 国際交流と国際共同研究

2-14-1 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滞在者を合わせて、毎年100名以上の外国人研究者が訪れている。前者には文部科学省外国人研究員（客員分、教授2名・助教授2名）、文部科学省外国人研究員（COE分、毎年5名程度）、日本学術振興会招へい外国人研究者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（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）

年度	長期滞在者			短期滞在者		合計
	文部科学省外国人研究員	日本学術振興会招へい外国人研究者	特別協力研究員	研究会	訪問者	
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
99	16	16	16	92	53	193
00	13	9	12	43	23	100
01	16	14	10	69	68	177
02	15	9	13	125	110	272
03	14	8	56	20	22	120
合計	158	147	228	756	440	1,729

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
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
99	53	16	20	8	15	13	15	53	193
00	26	8	8	7	13	10	7	21	100
01	45	14	20	8	23	13	8	46	177
02	31	8	22	10	45	40	9	107	272
03	27	3	10	8	14	5	6	47	120
合計	364	122	145	85	200	156	123	534	1,729

2-14-2 国際共同研究

2004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) 分子科学研究所国際共同研究

分子科学研究所は、創設以来多くの国際共同研究を主催するとともに客員を始めとする多数の外国人研究員を受け入れ、国際共同研究事業を積極的に推進し、国際的に開かれた研究所として高い評価を得ている。このような背景を基に、分子科学研究所は1994年以降、分子研リポートに置いて多国間国際共同研究協力事業の必要性を指摘してきた。

近年、科学研究のグローバル化が進み、また、東アジア地区における科学研究の急速な活性化の流れの中で、新世紀にふさわしい国際共同研究拠点としての体制を構築することが急務となっている。しかし、従来の国際共同事業は殆ど二国間に限られており、グローバルな国際共同研究を機動的に推進するためには必ずしも適していない。1994年の提言から10年を経た本年度、分子科学研究所は「物質分子科学」、「光分子科学」、「化学反応ダイナミクス」の3つの重点分野について、多国間国際共同研究の推進プログラムを自主的に試行し、分子科学研究所を中心とした分子科学分野の国際共同研究の輪を広げる試みを開始した。具体的には、本年度この国際共同研究の実施要項の整備を進めると共に、研究所内の教員による国際共同研究の提案を受け、試行的に7件の共同研究計画を採択した。中国および韓国の若手研究者の長期（6ヶ月）滞在やフランス、ドイツ、イタリア、スウェーデン等からの約8名の研究者の短期訪問による共同研究の推進が予定されている。一方、研究所の独自の努力で遂行できる共同研究の範囲には限界がある。今後、国際共同研究プログラムを更に拡充し、定着させていく事が重要であり、引き続き予算的裏付けを求めていく必要がある。

(2) 日韓共同研究

分子科学研究所と韓国高等科学技術院（KAIST、Korea Advanced Institute of Science and Technology）の間で、1984年に分子科学分野での共同研究プロジェクトの覚書き（2004年にも更新）がかわされて以来、シンポジウムおよび韓国研究者の分子科学研究所への招聘と研究交流が行われてきている。

日韓合同シンポジウムは、第1回目を1984年5月に分子科学研究所で開催して以来、2年毎に日韓両国間で交互に実施している。最近では、2001年1月に分子科学研究所で第9回合同シンポジウム「気相、凝縮相および生体系の光化学過程：実験と理論の協力的展開」を、2003年1月に浦項工科大学で第10回合同シンポジウム「理論化学と計算化学：分子の構造、性質、設計」が開催されて、活発な研究発表と研究交流はもとより両国の研究者間の親睦が高められてきている。次回の第11回合同シンポジウム「分子科学の最前線」は、2005年3月に分子科学研究所で開催される。

また、1991年から韓国の様々な大学および研究所から毎年3名の韓国の研究者を4ヶ月間ずつ招聘して共同研究を実施している。

(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科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。2004年中国科学院化学研究所と覚書きの更新を行い、上記4分野を(1)物質科学、(2)光科学、(3)理論および計算科学の3分野に整理した。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、引き続いて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。中国からは若手研究者10名をふくむ34名が、日本からは80名が参加し、盛況のうちに終了した。第7回は2001年11月19日 - 23日に広州の華南理工大学で開催され、日本からは井口洋夫教授や白川英樹教授をふくむ26名が参加し、中国からは90名が参加した。第8回は2004年11月11日 - 14日に岡崎コンファレンスセンターで開催した。中国からは40名が日本からは70名が参加した。

(4) 日中拠点大学交流事業（加速器分野）

本国際共同研究は加速器分野における日中の交流事業であり、日本学術振興機構の拠点大学方式による学術交流事業として2000年度より継続して行われている。日本側の拠点機関は高エネルギー加速器研究機構であり、中国側は中国科学院高能物理研究所である。本事業に参加している日本側研究機関には、高エネルギー加速器研究機構の他、分子科学研究所など15の大学・研究所が含まれている。研究テーマは、(A) 加速器物理及び加速器工学、(B) JLC（リニアコライダ）実験・BELLE（Bファクトリー）実験・素粒子理論、(C) 放射光加速器及び放射光科学の3つであり、電子・陽電子加速器に関する幅広い内容が含まれている。それぞれのテーマで複数の共同研究やセミナーが活発に行われている。分子科学研究所からは極端紫外光研究施設の職員が、上記（C）の放射光分野での共同研究、より具体的には（1）既設シンクロトロン放射光源用加速器及びビームラインの高度化に関する共同研究、（2）SSRF（上海放射光施設）加速器とビームラインのR&Dに関する共同研究、の2つの共同研究に参加している。

2-15 大学院教育

2-15-1 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っている。また、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 ~94	95	96	97	98	99	00	01	02	03	04
北海道大学	10										1
室蘭工業大学	2										
東北大学	11				1	1					
山形大学					6						
筑波大学					1		1				
宇都宮大学									2	2	
群馬大学	1										
埼玉大学	2										
千葉大学				1	1	1		1	1		
東京大学	28		1	1	1						
東京工業大学	17	3	4					4	6	6	2
お茶の水女子大学	6										
横浜国立大学	1										
金沢大学	3		3	3			1	1			
新潟大学	4										
福井大学	2	1	1		1	3	2				
信州大学	2			1				1			
岐阜大学	2										
名古屋大学	57	1	3	3	3	1	2	6	2	2	
名古屋工業大学	6				1	4	3	1			2
豊橋技術科学大学	30									7	2
三重大学			2	2	2	1					
京都大学	22	4	4	2	2	1	3	1	1		
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	24						1	1			
神戸大学				1	1	1	1		1		
奈良教育大学	1										
奈良女子大学	2	1	1								
島根大学									1		
岡山大学	7	2	1	1				2	2		
広島大学	25	6	1			1	1		2	1	1
山口大学	1										
愛媛大学	3									5	1
高知大学	2										
九州大学	33		1	2	1	1	2	2	2	1	
佐賀大学	12	1									
長崎大学											2
熊本大学	6										

宮崎大学						2	4				
琉球大学					1						
北陸先端科学技術 大学院大学									4		2
東京都立大学	17										2
名古屋市立大学							4				
大阪市立大学	3					1					
大阪府立大学								1	1		
姫路工業大学								1			
学習院大学				1							
北里大学			1	1							
慶應義塾大学	4			1	1			2	1		
上智大学	1										
東海大学	1							1	1		
東京理科大学					1	1	1	4		1	1
東邦大学			1				1	1			
星薬科大学	1										
早稲田大学	1		1	5	2			1	1	1	1
名城大学				2	2						
計	356	19	25	27	28	19	27	31	28	26	17

2-15-2 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専攻の入学人数、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。

担当教員（2004年度） 単位：人

専攻	教授	助教授	助手
構造分子科学専攻	9	7	16
機能分子科学専攻	9	9	17
計	18	16	33

在籍学生数（2004年12月現在） 単位：人

入学年度専攻	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	計	定員
構造分子科学専攻	1	0	3	7	7	18	6
機能分子科学専攻	0	1	5	6	5	17	6

学位取得状況 単位：人

（年度別）

専攻	1991	92	93	94	95	96	97	98	99	2000	2001	2002	2003	2004 (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)	7(2)	8(1)	3	11	6	2	82(11)
機能分子科学専攻	5	5	4(1)	8(1)	4	7(1)	3(2)	6	6(1)	6	5	5(4)	1	(2)	65(12)

() 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	1989～94	95	96	97	98	99	2000	2001	2002	2003	2004
構造分子科学専攻	41	4	10	10	12	5	8	5	3	7	7
機能分子科学専攻	40	6	8	9	7	6	0	7	6	6	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		
	1989-2002年度	2003年度	2004年度	1989-2002年度	2003年度	2004年度
中国	9		1	4		
フランス				1		
ロシア				1		
バングラディッシュ	4			1		
インド	1					
チェコ				1		
韓国	1	1				
ナイジェリア				1		
ネパール			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～'02	'03年度	'04年度	'89～'02	'03年度	'04年度	
北海道大学				2			2
室蘭工業大学				1			1
東北大学		1		1			2
山形大学				2			2
筑波大学	1			1			2
群馬大学				1			1
千葉大学	5			2			7
東京大学	6			6	1	1	14
東京農工大学		1					1
東京工業大学				2	1		3
お茶の水女子大学	4			1			5
電気通信大学	1			2			3
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	2			2			4
信州大学	3						3
静岡大学	1		1		1		3
名古屋大学	2			2		2	6
名古屋工業大学	1						1
豊橋技術科学大学	3						3
三重大学	1						1
京都大学	8	1		13			22
京都工芸繊維大学	1			1			2
大阪大学	5			3		1	9
神戸大学	1	2					3
奈良女子大学				1			1
鳥取大学	1						1
岡山大学	2			2			4
広島大学	1			3			4
山口大学				1			1
愛媛大学	1	1				1	3
九州大学	2			2			4
佐賀大学					1		1
熊本大学	2						2
鹿児島大学				1			1
琉球大学	1						1
北陸先端科学技術大学院大学	3		1		1	1	6
東京都立大学				1			1
名古屋市立大学				2			2
大阪市立大学	1						1
大阪府立大学	2			2			4
姫路工業大学			1	1			2
石巻専修大学	1						1
青山学院大学					1		1
学習院大学	3			2			5
北里大学	1						1
慶應義塾大学	1			3	1		5
国際基督教大学				1			1
中央大学			1	1			2

東京電機大学	1					1
東京理科大学	3			1		4
東邦大学				2		2
日本大学				1		1
法政大学	1					1
明星大学	1					1
早稲田大学	3			4		7
名城大学	2					2
立命館大学				2		2
龍谷大学	1					1
関西大学	1					1
岡山理科大学				1		1
* その他	15	1	3	10		29

* 外国の大学等

現職身分別進路 (2003年5月現在)

現 職 身 分	構造分子科学専攻	機能分子科学専攻
教 授	0	1
助教授	8	5
講 師	1	3
助 手	15	15
任期付研究員	38	31
企業等 (研究職)	9	10
企業等 (研究職以外)	0	1
退学・除籍・在学	17	10

2-16 現員と財政

2-16-1 現員

2004.12.1

区分	所長	教授	助教授	助手	小計	技術職員	合計
所長	1				1		1
理論分子科学研究系		2(1)	3(1)	4	9(2)		9(2)
分子構造研究系		3(1)	0(1)	3	6(2)		6(2)
電子構造研究系		3(1)	0(1)	3	6(2)		6(2)
分子集団研究系		2(1)	1(1)	3	6(2)		6(2)
関連領域研究系		0(1)	0(1)	3	3(2)		3(2)
極端紫外光科学研究系		2(0)	2(0)	5	9(0)		9(0)
計算分子科学研究系		1(0)	1(0)	3	5(0)		5(0)
研究施設		5(4)	11(2)	22	38(6)		38(6)
技術課						35	35
合計	1	18(9)	19(17)	48	83(16)	35	118(16)

()内は客員数で外数である。

2-16-2 財政

(単位：千円)

科目等 \ 年度	1999年度	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度
人件費	1,288,291	1,209,813	1,266,910	1,247,966	1,274,750
運営費, 設備費	2,567,439	2,520,521	2,606,583	3,958,941	2,654,747
施設整備費	178,698	519,665	18,481	1,378,504	8,027,621
合計	4,034,428	4,249,999	3,891,974	6,585,411	11,957,118

* 岡崎統合事務センター経費が按分として含まれている。

* 2001年度に岡崎共通研究施設に改組された計算科学研究センターが含まれている。

委任経理金

区分	1998年度	1999年度	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度
件数(件)	20	14	14	16	15	17	14
金額(千円)	27,100	12,450	18,350	14,950	18,350	15,300	9,257

*2004年度は2004年12月24日現在

共通研究施設を除く

科学研究費補助金

区 分	1998年度	1999年度	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度
件数 (件)	74	91	82	82	59	62	59
金額 (千円)	220,460	493,030	384,803	506,564	434,556	728,415	249,900

* 2004年度は2004年12月21日 現在

岡崎共通研究施設を除く

2004年度科学研究費補助金

2004年12月21日現在

採択者数一覧

研究種目		分子科学研究所	岡崎共通研究施設	合計
特別推進研究	(1)	0	1	1
特別推進研究	(2)	1	1	2
特定領域研究	(1)	0	0	0
特定領域研究	(2)	16	1	17
萌芽研究		4	0	4
若手研究	(A)	4	0	4
若手研究	(B)	13	0	13
基盤研究	(S)	0	0	0
基盤研究	(A)	5	0	5
基盤研究	(B)	8	2	10
基盤研究	(C)	2	1	3
特別研究員奨励費		3	6	9
特別研究員奨励費	外国人	3	3	6
合計		59	15	74

配分額一覧

(単位：千円)

研究種目		分子科学研究所	岡崎共通研究施設	合計
特別推進研究	(1)	0	57,000	57,000
特別推進研究	(2)	63,000	89,600	152,600
特定領域研究	(1)	0	0	0
特定領域研究	(2)	73,300	7,400	80,700
萌芽研究		7,800	0	7,800
若手研究	(A)	11,600	0	11,600
若手研究	(B)	20,800	0	20,800
基盤研究	(S)	0	0	0
基盤研究	(A)	36,200	0	36,200
基盤研究	(B)	27,300	13,700	41,000
基盤研究	(C)	3,000	1,000	4,000
特別研究員奨励費		3,500	7,000	10,500
特別研究員奨励費	外国人	3,400	3,600	7,000
合計		249,900	179,300	429,200

共同研究

(単位：千円)

区 分	1998年度	1999年度	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度
件数(件)	0	0	5	6	7	8	13
金額(千円)	0	0	14,240	11,980	17,120	10,590	14,740

受託研究

(上段：件数、下段：金額(単位：千円))

区 分	1998年度	1999年度	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度
戦略的創造研究推進事業(JST)	1 9,900	0 0	1 1,100	1 7,700	5 13,000	7 19,206	7 21,827
主要5分野の研究開発委託事業(文科省)	0 0	0 0	0 0	0 0	1 263,000	2 540,574	2 916,847
その他	3 109,991	8 225,207	12 199,491	5 232,625	3 6,800	1 4,200	6 163,792
合計	4 119,891	8 225,207	13 200,591	6 240,325	9 282,800	10 563,980	15 1,102,466

2-17 岡崎共通施設

2-17-1 岡崎情報図書館

岡崎情報図書館は機構（岡崎3機関）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（岡崎3機関）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1,467種（和283、洋1,184）、単行本35,121冊（和6,325、洋28,796）を所蔵している。

また、学術雑誌の電子ジャーナル化の趨勢にいち早く対応するよう努めており、現在、機構（岡崎3機関）として約2,800誌の電子ジャーナルが機構内部からアクセスできるようになっている。

岡崎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Web of Science、SciFinder Scholar等のデータベース検索や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。

2-17-2 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、国内外の学会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岡崎3機関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。

岡崎3機関内の公募によって「岡崎コンファレンスセンター」と命名された建物は、延べ床面積2,863m²、鉄筋コンクリート造2階建てで、大型スクリーン及び最新のAV機器等を備えた250人が参加可能な大会議室、150人の中会議室、50人の小会議2室などが設けられている。中会議室は会議等の目的に応じて2分割して使用することもでき、小会議室は1室としての使用も可能である。

2-17-3 岡崎共同利用研究者宿泊施設

自然科学研究機構岡崎3機関には、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山手ロッジの二つの共同利用研究者宿泊施設がある。それぞれの施設概要は下記のとおりで、宿泊の申込みは、訪問する研究室の承認を得て、web上の専用ロッジ予約システムで予約する。空室状況も同システムで確認することができる。

三島ロッジ 室数 シングル：60室 ツイン：14室 ファミリー：20室

共同設備：炊事場、洗濯室、公衆電話、情報コンセント

山手ロッジ 室数 シングル：11室 ダブル：4室 ファミリー：2室

共同設備：共同浴室、炊事場、洗濯室、公衆電話

2-17-4 職員会館

職員会館は機構（岡崎3機関）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。

2-18 地域社会との交流

2-18-1 国研セミナー

このセミナーは、岡崎3機関と岡崎南口ター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、岡崎3機関の研究教育職員が講師となって1985(昭和60)年12月から始まり、毎年行われている。

分子科学研究所が担当したものは以下のとおりである。

回	開催日	テーマ	講師
2	1986. 1.18	分子研の紹介	諸熊 奎治 教授
3	1986. 6. 7	シンクロトロン放射とは (加速器・分光器・測定器の見学)	渡邊 誠 助教授 春日 俊夫 助教授
6	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
9	1987. 6.13	レーザーの応用について	吉原經太郎 教授
12	1987. 9.26	コンピュータで探る分子の世界	柏木 浩 助教授
15	1988. 7. 2	目で見える低温実験・発光現象と光酸化現象	木村 克美 教授
18	1988.10.29	人工光合成とは何か	坂田 忠良 助教授
21	1989. 6.24	星間分子と水 生命を育む分子環境	西 信之 助教授
24	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
27	1990. 6.23	目で見え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
30	1990.10.20	電気と化学	井口 洋夫 所長
33	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
37	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
39	1992. 7. 7	サッカーボール分子の世界	加藤 立久 助教授
42	1992.11.13	炭酸ガスの化学的な利用法	田中 晃二 教授
45	1993. 6.22	化学反応はどのように進むか?	正畠 宏祐 助教授
48	1993.10. 1	宇宙にひろがる分子の世界	齋藤 修二 教授
51	1994. 6.21	分子の動き	伊藤 光男 所長
54	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
57	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
60	1997. 6.13	生体系と水の分子科学	平田 文男 教授
63	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 (UVSOR見学)	宇理須恆雄 教授
66	1999. 6. 8	レーザー光で、何が見える? 何が出来る?	猿倉 信彦 助教授
69	2000. 6. 6	マイクロチップレーザーの可能性	平等 拓範 助教授
72	2001. 6. 5	ナノメートルの世界を創る・視る	冨田 博一 助教授
75	2002. 6. 4	クラスターの科学 原子・分子集団が織りなす機能	佃 達哉 助教授
78	2003. 6.24	科学のフロンティア ナノサイエンスで何が出来るか?	小川 琢治 教授
81	2004. 6.22	生命をささえる分子の世界 金属酵素のしくみを探る	藤井 浩 助教授

2-18-2 分子科学フォーラム

分子科学研究所では『分子研コロキウム』という名前で所員に向けた分子科学のセミナーを開催し、2003年12月で763回目を終った。これとは別に、分子科学の内容を他の分野の方々や一般市民にも知らせ、また分子研コロキウムよりはもう少し幅広い科学の話をもつ分子研の研究者が聞き、自分の研究の展開に資するようにすることを目的としたセミナーも有益であろうという考えの元に、豊田理化学研究所の協力を得て開催するに到ったのが『分子科学フォーラム』である。豊田理化学研究所の理事を長年つとめておられる井口洋夫先生の紹介によりこれが可能になり、実際の運営はコロキウム委員が担当している。各年度毎に年間計画を前年度末に豊田理化学研究所の理事会に提出し、承諾を得てから実施している。

分子科学フォーラムは年6回開催することを原則にしており、第1回は1996年9月にシカゴ大学教授の岡武史先生、第2回は同年10月に生理学研究所名誉教授の江橋節郎先生に講演をお願いし、最近では2003年12月に第48回の東北大金材研福山秀敏先生のセミナーを聞いた。文学部の先生の講演(高野陽太郎東大助教授、第37回)も1回あったが、他は自然科学の先生方の話であった。その中には、ノーベル賞に輝く白川英樹先生のセミナー(第32回)も含まれる。年6回の定例の会以外に、2000年9月には豊田理化学研究所創立60周年を記念して『科学と技術』と題する特別例会を開催し、分子科学研究所名誉教授の井口洋夫先生と、豊田理化学研究所理事長の豊田章一郎先生に御講演していただいた。またもう一つの特別例会は2000年10月に開催され、理化学研究所の伊藤正男先生から脳のお話をうかがった。

この様に、分子科学フォーラムは分子研コロキウムより幅広い人を対象にしたセミナーで、大学院生や社会人も含めた多くの方々に対して、分子科学やその関連分野の最先端の研究成果をわかりやすく紹介する事を基本趣旨として、講演者に努力をお願いしてきた。毎回簡単な講演要旨を事前に講演者に書いてもらい、それを愛知県内の大学や岡崎市内の色々な機関に送ると共に、分子研ホームページにも載せている。一般市民の参加数は会毎に大幅に変るので、開催案内はかなりいきわたっていると思われる。テーマや講演者の選考、広報の仕方等にコロキウム委員のアイデアが大いに入ってくるので、委員には負担ではあるが、その時毎に結果の出るやりがいのある仕事であろうと思っている。これが分子研と一般社会とのつながりにより大きく貢献するものになっていけばよいと願ってやまない。

回	開催日	テーマ	講演者
1	1996. 9.12	星間H ₃ ⁺ の発見	岡 武史 (シカゴ大学教授)
2	1996.10.23	無機イオンと生命	江橋節郎 (生理学研究所名誉教授)
3	1997. 1. 8	人類は元素をいかに利用してきたか	K. P. Dinse (ゲームスタット工科大学教授)
4	1997. 2. 6	超伝導研究における基本コンセプトの発展	中嶋貞雄 (超伝導工学研究所)
5	1997. 2.26	核酸の損傷が遺伝情報に及ぼす影響	大塚榮子 (北海道大学教授)
6	1997. 3.14	Probing Elementary Chemical Reactions at Surfaces With Molecular Beams	Daniel Auerbach (IBM)
7	1997. 6. 4	物質探索 有機半導体、導体、及び超伝導体を例題として	井口洋夫 (分子科学研究所名誉教授)
8	1997.10.15	生体分子の1分子イメージング・ナノ操作 生物分子機械のやわらかさ	柳田敏雄 (大阪大学教授)
9	1997.11.12	カスケード光化学反応と生命の起源	豊沢 豊 (東京大学名誉教授)
10	1997.12. 3	有機固体化学の進歩	戸田英三夫 (愛媛大学教授)

11	1998. 2.18	密の甘さと蜂の一刺し	Ian Munro (マンチェスター大学教授)
12	1998. 3. 4	高感度マイクロ波分光でみる分子の世界	齋藤修二 (分子科学研究所教授)
13	1998. 4. 2	分子スピン科学 第3世代の分子性・有機磁性研究	工位武治 (大阪市立大学)
14	1998. 6.10	タンパク質の成り立ちと遺伝子の世界	郷 通子 (名古屋大学教授)
15	1998.10.21	複雑分子の正確な計算にチャレンジする	諸熊奎治 (エモリー大学教授)
16	1998.11.18	有機フォトクロミズムの化学	入江正浩 (九州大学教授)
17	1998.12.16	あまのじゃくは技術革新の母	霜田光一 (東京大学名誉教授)
18	1999. 3.25	漫談III	伊藤光男 (分子科学研究所長)
19	1999. 7.14	数学的発想について 代数多様体とは	森 重文 (京都大学教授)
20	1999.10.13	計算機で化学する	岩田末廣 (分子科学研究所教授)
21	1999.11.10	物質と時空	益川敏英 (京都大学基礎物理学研究所長)
22	1999.11.24	科学研究は凡才にもできる カーボンナノチューブの発見	飯島澄男 (NEC)
23	2000. 1.12	ミクロな世界の集団心理 原子・分子クラスターの科学	近藤 保 (豊田工業大学教授)
24	2000. 3. 1	超高压下の超伝導探索	天谷喜一 (大阪大学教授)
25	2000. 6. 7	すばる望遠鏡でみる宇宙	家 正則 (国立天文台教授)
26	2000. 6.28	質量ゼロの素粒子の話	西島和彦 (仁科記念財団理事長)
27	2000. 9. 6	数学で化学する 次世紀の日本のために哲学性を取り戻そう	中村宏樹 (分子科学研究所教授)
28	2000. 9.20	物質(もの)とは何か? 炭素物語	井口洋夫 (分子科学研究所名誉教授)
		匠の心 ものづくりの道	豊田章一郎 (理化学研究所理事長)
29	2000.10.25	21世紀・脳科学への期待	伊藤正男 (理化学研究所)
30	2001. 1.24	フリーラジカルの科学	廣田榮治 (総合研究大学院大学長)
31	2001. 1.31	赤外自由電子レーザーとそれを用いる光科学	黒田晴雄 (東京理科大学教授)
32	2001. 3.14	私の研究と物質科学	白川英樹 (筑波大学名誉教授)
33	2001. 5. 9	ゲノムとは何か? 自然が出した分子科学の知恵と 予想される技術発展について	和田昭允 (理化学研究所)
34	2001. 6.13	新しい超伝導体MgB ₂ の発見物語	秋光 純 (青山学院大学教授)
35	2001. 7. 4	強相関電子の科学と技術	十倉好紀 (東京大学教授)
36	2001.10.24	SPring-8の拓く新しい科学技術の世界	上坪宏道 (高輝度光科学研究センター)
37	2001.12.19	なぜ鏡の中では左右が反対に見えるのか?	高野陽太郎 (東京大学助教授)
38	2002. 2.13	顕微鏡の感性 ミクロ宇宙とナノ宇宙の美学	永山國昭 (岡崎国立共同研究機構統合バイオサイエンスセンター教授)
39	2002. 6.26	蛋白質が働くメカニズムをレーザー光で解明する	北川禎三 (岡崎国立共同研究機構統合バイオサイエンスセンター教授)

40	2002. 7.10	分子で磁石を作る	木下 實（東京大学名誉教授）
41	2003. 1.15	相転移とその周辺 臨界現象からガラス転移まで	川崎恭治 （九州大学名誉教授、中部大学名誉教授）
42	2003. 1.29	一技術者として20世紀の反省と21世紀への課題	石丸典生 （（株）デンソー相談役）
43	2003. 2.12	発見の方法論 アブダクションとセレンディピティ	立花 隆
44	2003. 3.26	分子と超伝導体	小林速男（分子科学研究所教授）
45	2003. 5.28	極微の魔法、ナノテクノロジー	Heinrich Rohrer （元IBMフェロー）
46	2003. 7.16	ナノテクノロジーの魅力：ヒューマンボディビルディングにむけて	川合知二（大阪大学教授）
47	2003.11.12	エントロピーは環境問題に役立つか？	坂東昌子（愛知大学教授）
48	2003.12.10	物質科学への招待	福山秀敏（東北大学教授）
49	2004. 1.21	元素科学：新機能発現を目指した有機典型元素化学	玉尾皓平（京都大学教授）
50	2004. 3. 3	電子・イオンビームで作るナノテクノロジーの世界	松井真二（姫路工業大学教授）
51	2004. 7. 7	大気環境化学の最近の話題と研究	鷲田伸明（豊橋技術科学大学教授）
52	2004.12.22	地球に優しいナノテクでつくるフィルム型カラフル太陽電池	箕浦秀樹（岐阜大学教授）
53	2004.12.15	レーザーマイクロ・ナノ化学 光の圧力を使って分子系を動かし並べる	増原 宏（大阪大学教授）

2-18-3 岡崎市民大学講座

岡崎市教育委員会が、生涯学習の一環として岡崎市民（定員1,250人）を対象として開講するもので、岡崎3機関の研究所が持ち回りで担当している。

分子科学研究所が担当して行ったものは以下のとおりである。

開催年度	講 師	テーマ
1976年度	井口 洋夫	分子の科学
1980年度	廣田 榮治	分子・その形とふるまい
1981年度	山崎 朋子	女性史の窓から
1982年度	長倉 三郎	分子の世界
1983年度	岩村 秀	物の性質は何でできるか
1987年度	齋藤 一夫	生活を変える新材料
1988年度	井口 洋夫	分子の世界
1991年度	吉原経太郎	光とくらし
1994年度	伊藤 光男	分子の動き
1997年度	齋藤 修二	分子で宇宙を見る
2000年度	茅 幸二	原子・分子から生命体までの科学
2003年度	北川 禎三	からだで活躍する金属イオン

2-18-4 安城市民公開講座等

安城市教育委員会が、生涯学習の一環として安城市民（公開講座は、一般市民約100名、シルバーカレッジ（2年間）は、熟年者約50名）を対象として開講しているもので、岡崎3機関の研究所が協力して、講師を派遣している。

分子科学研究所が担当して行ったものは、以下のとおりである。

安城市民公開講座

開催日	テーマ等	講師
2002. 8.10	ナノテクノロジーの話	夢田 博一 助教授
2003. 7.19	レーザー入門～光の基礎からレーザー研究の最前線まで～	平等 拓範 助教授

安城市シルバーカレッジ

開催日	テーマ等	講師
2002. 6. 6	鏡に写った分子の話	魚住 泰広 教授
2003. 6. 5	分子の振動を観測して蛋白質のメカニズムを明らかにする	北川 禎三 教授
2004. 7. 6	原子のさざ波と不思議な量子の世界	大森 賢治 教授

2-18-5 おかざき寺子屋教室

岡崎市内の小学校高学年を対象に、岡崎3機関の研究者が講義・実験を行い、学校では普段体験できないことを体験してもらい、小学生に科学に対するの夢や憧れを持ってもらうために実施するものである。1995年より年1回行われ、岡崎3機関の研究所が順に担当している。

分子科学研究所が担当したものは以下のとおりである。

回	開催日時	会場	講師	テーマ
1	1995.11.11（土） 13:00-16:00	岡崎地域職業訓練センター	井口 洋夫 名誉教授 加藤 立久 助教授	めざそう理科博士
2	1996.10.26（土） 12:30-15:00	岡崎商工会議所中ホール	鹿野田一司 助教授	低温物理学実験
5	1999.10.23（土） 13:30-16:00	岡崎コンファレンスセンター 分子科学研究所	谷村 吉隆 助教授	目指せ！ 科学者
8	2002.10.19（土） 13:30-16:30	分子科学研究所	魚住 泰広 教授	僕も私も名探偵

備考

（社）岡崎青年会議所との共催

参加者：小学校5～6年生 40～50名程度

2-18-6 地域の理科教育への協力

(1) スーパーサイエンスハイスクール

文部科学省が「科学技術、理科・数学教育を重点的に行う学校をスーパーサイエンスハイスクールとして指定し、高等学校及び中高一貫教育校における理科・数学に重点を置いたカリキュラムの開発、大学や研究機関との効果的な連携方策についての研究を推進し、将来有為な科学技術系人材の育成に資する」事を趣旨に平成14年度から始めた本活動を、自然科学研究機構として平成16年度も引き続き支援した（分子研レポート2002及び2003参照）。分子科学研究

所が平成16年度に行った支援活動は以下の通りである。

[I] 岡崎高等学校「文化祭」における講演

演 者： 北川禎三教授
 演 題： ヘム蛋白質の構造と機能

[I] スーパーサイエンス部活動の支援

テーマ I： 「人工光合成、水素伝達剤の検討」
 担当者： 永田 央助教授のグループ（長澤賢幸氏が支援）
 内 容： 電子論に基づいた人工光合成材料物質の模索とその検定
 受 賞： 愛知県学生科学賞 「最優秀賞」、愛知県議会議長賞
 日本学生科学賞 全国入選3位

テーマ II： 「やっぱオーロラみたくなー」

担当者： 岡本裕巳教授
 内 容： 発表に当たってのアドバイスを行った。
 受 賞： 愛知工業大学（AIT）サイエンス大賞「最優秀賞」、来年度国際大会へ招待

テーマ III： 「人間の立体映像に関する Research & Development」

担当者： 岡本裕巳教授
 内 容： 活動の進め方に関するアドバイス、疑問点等の質問への答やヒントの提示、発表に当たってのアドバイス等を行った。
 受 賞： 来年度国際大会へ招待

(2) 小中学校への協力

岡崎市内の小中学校を対象に、物理・化学・生物・地学に関わる科学実験や観察を通して、科学への興味・関心を高めることを目的に、岡崎市教育委員会や各小中学校が企画する理科教育に協力している。

分子科学研究所が担当したものは以下のとおりである。

岡崎市教育委員会（出前授業）

対象校	開催日	テーマ	講 師
六ツ美北中 東海中	2002. 1. 25	光学異性体とその活用	魚住 泰広 教授
東海中	2003. 2. 18	計算機を使って分子を見る	谷村 吉隆 助教授

岡崎市立小豆坂小学校（親子おもしろ科学教室）

回	開催日	テーマ	講 師
1	1996.12. 5	極低温の世界（液体窒素）	加藤 清則 技官
3	1997.12. 4	いろいろな光（紫外線、赤外線、レーザー光）	大竹 秀行 助手
17	2004.11.30	波と粒の話	大森 賢治 教授

岡崎市立竜海中学校（授業研究協議会）

回	開催日	テーマ	講師
18	1999. 11. 30	物体の運動：斜面を転がり落ちる運動を調べよう	黒澤 宏 教授
19	2000. 6. 14	クリーンエネルギー：環境を考えた電池を作ろう	鎌田 雅夫 助教授

2-18-7 中学校理科副教材の作成

岡崎市・岡崎市教育委員会・理科教育振興協会の要請により、市内の中学生に、岡崎3機関の研究内容を知らせることで、生徒の自然科学に対する興味、関心を高めることを目的とした、理科副教材の作成に協力している。一般公開を行った研究所が、翌年に協力し作成することが慣例になっている。作成にあたっては、各項目ごとに市内中学校の理科担当教諭及び中学生徒2名程度が、分子科学研究所の担当教官を訪問して、インタビューを行い、両者が協力して、資料を作成する。

中学校理科副教材（冊子）

「分子のしくみ」

1998年9月発行

中学校理科副教材（パネル）

「分子で見る物質の世界」、「光で分子を見る」、「鏡に映った形の分子（光学異性体）」

「ナノサイエンス 10億分の1の世界」

2001年10月作成

2-18-8 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2000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)	
第9回	2000.10.21 (Sat)	
第10回	2003.10.25 (Sat)	入場者 1600人

2-18-9 見学受け入れ状況

年度	受入件数	見学者数	見学受入機関名
1990	10	250	(財)レーザー技術総合研究所 東京工業大学理学部応用物理学科学生 ほか
1991	3	110	静岡県新材料応用研究会 名古屋大学工学部電気・電子工学科学生 ほか
1992	7	162	三重大学技術職員研修会 慶応義塾大学理工学部化学科学生 ほか
1993	9	211	(財)名古屋産業科学研究所超伝導調査研究会 東京工業大学化学科学生 ほか
1994	7	145	(社)日本化学工業界技術部 慶応義塾大学理工学部化学科学生 ほか
1995	4	122	日本電気工業会名古屋支部 静岡県高等学校理科研究会 ほか
1996	7	180	(財)新機能素子研究開発協会 明治大学附属中野中学・高等学校理科教員 ほか
1997	9	436	(財)科学技術交流財団 慶応義塾大学理工学部化学科学生 ほか
1998	6	184	東京地方裁判所司法修習生 開成高等学校 ほか
1999	8	206	愛知県商工部 愛知県高等学校視聴覚教育研究協議会 ほか
2000	12	225	(財)衛星通信教育振興協会 東京農工大留学生 ほか
2001	8	196	中部経済産業局統計調査員協会 愛知県立豊田西高等学校 ほか
2002	5	118	関西工業教育協会 静岡県立浜松西高等学校 ほか
2003	8	146	中部経済連合会 一宮高等学校 ほか
2004	11	198	愛知県総務部知事公室秘書室、アレバグループ、中部電力(株)電力技術研究会、三島小学校、南山高等学校、安城北中学校、豊田西高等学校、星和中学校、岡崎市広報課、竜海中学校、立命館高等学校、東海流体熱工学研究会

2004年度は2004年11月現在