

## 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わた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。

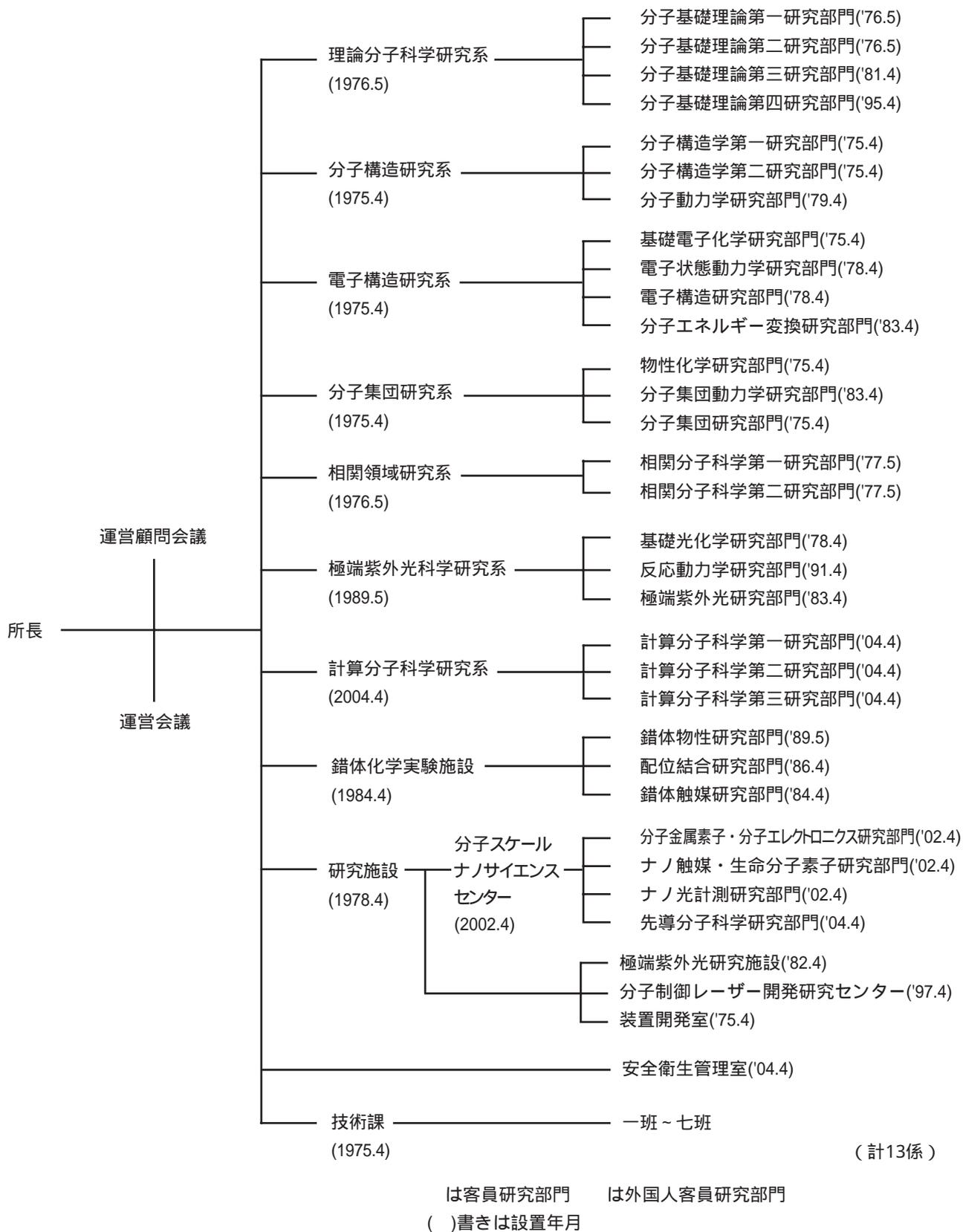
### 2-2 沿 革

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 m<sup>2</sup>)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 m<sup>2</sup>)が竣工した。
1978. 3.11 装置開発棟(1,260 m<sup>2</sup>),機器センター棟(1,053 m<sup>2</sup>),化学試料棟(1,063 m<sup>2</sup>)が竣工した。
1978. 4. 1 電子構造研究系に電子状態動力学研究部門,電子構造研究部門が,分子集団研究系に基礎光化学研究部門が設置された。
1979. 3. 1 電子計算機センター棟(1,429 m<sup>2</sup>)が竣工した。
1979. 3.24 実験棟第2期工事(3,742 m<sup>2</sup>),極低温センター棟(1,444 m<sup>2</sup>)が竣工した。
1979. 4. 1 分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され,管理局が総務部(庶務課,人事課,国際研究協力課),経理部(主計課,経理課,建築課,設備課),技術課に改組された。
1979. 11. 8 分子科学研究所創設披露式が挙行された。

1981. 4. 1 第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4.14 国立学校設置法の一部を改正する法律により，分子科学研究所と生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所，生理学研究所）は総合化され，岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され，管理局が岡崎国立共同研究機構管理局となり，技術課が研究所所属となった。
1982. 4. 1 研究施設として極端紫外光実験施設（UVSOR）が設置された。
1982. 6.30 極端紫外光実験棟第1期工事（1,281 m<sup>2</sup>）が竣工した。
1983. 3.30 極端紫外光実験棟第2期工事（1,463 m<sup>2</sup>）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周年記念式典が挙行された。
1987. 4. 1 第三代研究所長に井口洋夫分子科学研究所教授が任命された。
1989. 2.28 分子科学研究所南実験棟（3,935 m<sup>2</sup>）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 m<sup>2</sup>）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東北大学教授が任命された。
1994. 1.31 電子計算機センター棟（増築）（951 m<sup>2</sup>）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 分子科学研究所創設20周年記念式典が挙行された。
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 m<sup>2</sup>）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 m<sup>2</sup>）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 m<sup>2</sup>）が竣工した。
2004. 3. 1 山手5号館（NMR）（664 m<sup>2</sup>）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 m<sup>2</sup>）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。
2005. 5.20 分子科学研究所創設30周年記念式典が挙行された。





## 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となる。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 2005.4-2007.3）

NORDGREN, Joseph	スウェーデン国ウプサラ大学教授
CASTLEMAN, A. Worford Jr.	米国ペンシルバニア州立大学教授

### 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。委員構成は運営協議員と同じで、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
榊 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(2005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(2005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(2005年度)

伊 藤 翼 (東北大名誉教授)	戸 部 義 人 (大阪大院教授)
上 村 大 輔 (名大院教授)	中 嶋 敦 (慶大教授)
榎 敏 明 (東工大院教授)	山 下 晃 一 (東大院教授)
太 田 信 廣 (北大教授)	山 内 薫 (東大院教授)
加 藤 隆 子 (核融合研教授)	岡 本 裕 巳 (分子研教授)
下 村 理 (高輝度センター審議役)	小 林 速 男 (分子研教授)
鈴 木 俊 法 (理化研主任研究員)	西 信 之 (分子研教授)
竜 田 邦 明 (早大院研究科長)	平 田 文 男 (分子研教授)
谷 村 吉 隆 (京大院教授)	見 附 孝一郎 (分子研助教授)
寺 嶋 正 秀 (京大院教授)	

#### 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、審議の上、決定する。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	研究系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な事項，改善措置の勧告。	放射線取扱主任者，研究所の職員 6 技術課長，他	放射線障害予防規則	なし
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	2006.1.25
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		2005.9.13
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	2005.8.4 2006.2.10
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		2006.2.9
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 施設から必要数	安全衛生委 管理規則	2006.3.16
図書委員会	購入図書の選定。他			なし
広報委員会	Annual Review，分子研レターズ等の研究所出版物作成に関すること。研究所公式ホームページの管理運営。	関係研究者のうちから 7		2005.11.1 2006.3.7
分子研ネットワーク委員会	情報ネットワークの維持，管理運営。	(原則) 各研究系から各 1 施設から必要数		なし
情報ネットワークセキュリティ委員会	分子研情報ネットワークセキュリティに関する必要な事項。	各研究系教授各 1 各研究施設教授各 1 技術課長 分子研広報委員長 分子研ネットワーク委員長		なし

知的財産委員会	研究所における知的財産の創出，取得，管理及び活用を戦略的に実施するとともに，知的財産の一元的な管理及び活用を行うことにより，研究所における教育研究活動の活性化を図り，先端科学分野の進展に資することを目的とする。	研究所長が指名した研究教育職員 1，研究系及び研究施設の研究教育職員若干名，岡崎共通研究施設の研究教育職員若干名，技術課長，財務課長，国際研究協力課長，知的財産及び産学連携マネージメントできる者で，研究所長が委嘱した者若干名，その他研究所長が必要と認めた者	知的財産委員会規則	2005.4.11, 5.13, 6.1, 6.27, 7.13, 10.31, 11.25, 2006.1.18, 3.10
---------	---	--	-----------	---

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，分子研コロキウム係，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	2005.4.19, 5.24, 6.21, 7.19, 9.20, 10.18, 11.15, 12.20, 2006.1.17, 2.21, 3.28
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	2005.7.22
岡崎情報ネットワーク管理運営委員会	岡崎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 責任担当所長 岡崎情報ネットワーク管理室次長（教授）	委員会規則	2005.3.2 2005.12.6 2006.3.22
岡崎情報ネットワーク管理運営専門委員会	岡崎情報ネットワークの日常の管理。将来における岡崎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	岡崎情報ネットワーク管理運営委員会規則第 7 条	2005.4.27, 6.1, 7.20, 9.21, 11.2, 2006.1.11, 3.8
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 岡崎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 岡崎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（ロッジ）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	なし
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	なし
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	2006.3.22

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。		岡崎 3 機関安全衛生委員会規則	2005.4.19, 5.24, 6.21, 7.14, 8.16, 9.20, 10.18, 11.15, 12.20, 2006.1.17, 2.21, 3.28
防火防災対策委員会	防火防災管理に関する内部規定の制定改廃, 防火防災施設及び設備の改善強化。防火防災教育。訓練の実施計画, 防火思想の普及及び高揚。他	所長 防火防災管理者(技術課長) 高圧ガス保安員統括者	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	2006.1.18 2006.3.23
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	なし
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	2005.8.19 2006.3.8
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	2005.8.3 2005.11.21
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	2005.6.10
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	2005.9.26
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		なし
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。	研究教育職員 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	2005.10.3
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。	研究教育職員 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	2005.10.3
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	なし
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	
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	2005.10.28

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)
長倉三郎	特別顧問, 名誉教授
井口洋夫	特別顧問, 名誉教授
伊藤光男	特別顧問, 名誉教授
茅幸二	特別顧問, 名誉教授
近藤保	研究顧問
玉尾皓平	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
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
河東田道夫	専門研究職員
石田豊和	専門研究職員
SLANIA, Zdenek	専門研究職員
高木望	専門研究職員
梶田理恵	専門研究職員
WANG, Baolin	専門研究職員
奥村久士	助手

#### 分子基礎理論第二研究部門

中村宏樹	教授(併)
KONDORSKIY, Alexey	専門研究職員
田村宏之	研究員
近角真平	研究員
MIL'NIKOV, Gennady V.	研究員
信定克幸	助教授
安池智一	助手

#### 分子基礎理論第三研究部門

平田文男	教授
鄭誠虎	助手
吉田紀生	専門研究職員
丸山豊	専門研究職員
宮田竜彦	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
久保田 陽 二	専門研究職員
GOPAKUMAR, Geetha	専門研究職員
KOBRYN, Oleksandr	研究員
米 満 賢 治	助教授
山 下 靖 文	助 手
前 島 展 也	特別訪問研究員
宮 下 哲	特別訪問研究員
LEE, Jin Yong	外国人研究職員 '05.6.23 ~ '05.8.22 (全南大助教授) '05.12.24 ~ '06.2.23

分子基礎理論第四研究部門(客員研究部門)

淵 崎 員 弘	教 授(愛媛大理)
小松崎 民 樹	助教授(神戸大理)

分子構造研究系 研究主幹(併) 岡 本 裕 巳

分子構造学第一研究部門

岡 本 裕 巳	教 授
井 村 考 平	助 手
堀 本 訓 子	研究員

分子構造学第二研究部門(客員研究部門)

寺 嶋 正 秀	教 授(京大院理)
石 森 浩一郎	教 授(北大院理)

分子動力学研究部門

北 川 禎 三	教 授(兼)(岡崎統合バイオサイエンスセンター)
横 山 利 彦	教 授
中 川 剛 志	助 手
丸 山 耕 一	研究員
小 澤 岳 昌	助教授
竹 内 雅 宜	助 手

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

電子状態動力学研究部門

大 森 賢 治	教 授
香 月 浩 之	助 手
穂 坂 綱 一	研究員
大 島 康 裕	教 授
長谷川 宗 良	助 手

電子構造研究部門(客員研究部門)

市 村 禎次郎	教 授(東工大院理工)
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)

STANKEVICH, Vladimir, G.	外国人研究職員 (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
TANATAR, Makariy	外国人研究職員 (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
PULAY, Peter	外国人研究職員 (アーカンソー大学 教授)
	'05.5.16 ~ '06.8.15

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
山 本 薫	助 手
中 野 千賀子	特別協力研究員
中 村 敏 和	助教授
古 川 貢	助 手
原 俊 文	研究員
松 岡 秀 人	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
宮 本 明 人	共同研究員
CUI, Heng-Bo	共同研究員
SUN, Hao-Ling	共同研究員

分子集団研究部門 (客員研究部門)

小 島 憲 道	教 授 (東大院総合文化)
河 本 充 司	助教授 (北大院理)

関連領域研究系 研究主幹(併) 薬 師 久 彌

関連分子科学第一研究部門

青 野 重 利	教 授(兼) (岡崎統合バイオサイエンスセンター)
吉 岡 資 郎	助 手 (岡崎統合バイオサイエンスセンター)
江 東 林	助教授

関連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
初 井 宇 記	助 手
樋 山 みやび	助 手
BRADEANU, Ioana Lavinia	研究員
菱 川 明 栄	助教授
高 橋 栄 治	助 手
松 田 晃 孝	研究員

## 反応動力学研究部門

宇理須 恆 雄	教 授
手 老 龍 吾	助 手
鈴 木 晃	共同研究員
伊 藤 雅 幸	共同研究員
見 附 孝一郎	助教授
片 柳 英 樹	助 手

## 極端紫外光研究部門（外国人客員研究部門）

SUN, Wei-Yin	外国人研究職員（南京大学錯体化学研究所 教授） '05.6.1 ~ '05.8.31
AKA, Gerard, Philippe	外国人研究職員（パリ国立高等化学院 教授） '05.3.1 ~ '05.5.31
荒 木 幸 一	外国人研究職員（サンパウロ大学 教授） '05.11.1 ~ '06.1.31
LONG, La-Sheng	外国人研究職員（廈門大学 助教授） '05.5.1 ~ '06.4.30

## 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)
三 浦 伸 一	助 手(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)
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

齋 藤 真 司	教 授(計算科学研究センター)
---------	-----------------

### 計算分子科学第三研究部門（客員研究部門）

## 研究施設

### 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
和 田 亨	助 手
宮 里 裕 二	研究員
岡 村 玲	共同研究員
丹 内 秀 典	共同研究員
日 野 貴 美	共同研究員
筒 井 香奈子	共同研究員
川 口 博 之	助教授
松 尾 司	助 手
渡 邊 孝 仁	研究員
田 熊 元 紀	研究員
藤 田 光 晴	研究員
赤 木 史 生	研究員

#### 配位結合研究部門（客員研究部門）

石 井 洋 一	教 授(中央大理工)
林 高 史	教 授(阪大院工)

#### 錯体触媒研究部門（客員研究部門）

真 島 和 志	教 授(阪大院基礎工)
栗 原 正 人	助教授(山形大理)

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
田 中 啓 文	助 手
HUANG, Wei	研究員
佐 藤 弘 一	共同研究員
冨 田 博 一	教授(委嘱)( 阪大院基礎工 )
鈴 木 敏 泰	助教授
阪 元 洋 一	助 手
田 中 彰 治	助 手

ナノ触媒・生命分子素子研究部門

魚 住 泰 広	教 授
山 田 陽 一	助 手
木 村 力	共同研究員
竹 中 和 浩	共同研究員
前 田 泰 成	共同研究員
大 高 敦	共同研究員
鈴 鹿 俊 雅	共同研究員
永 田 央	助教授
長 澤 賢 幸	助 手
櫻 井 英 博	助教授
東 林 修 平	助 手
神 谷 育 代	研究員
藤 井 浩	助教授(兼)( 岡崎統合バイオサイエンスセンター )
倉 橋 拓 也	助 手 ( 岡崎統合バイオサイエンスセンター )

ナノ光計測研究部門

松 本 吉 泰	教 授
渡 邊 一 也	助 手
松 本 健 俊	助 手
長 尾 昌 志	研究員
佃 達 哉	助教授
根 岸 雄 一	助 手
中 尾 聡	専門研究職員
角 山 寛 規	研究員
NICKUT, Patricia	特別訪問研究員

先導分子科学研究部門

加 藤 晃 一	教 授 ( 名市大薬 )
笹 川 拓 明	助 手
杉 原 隆 広	特別訪問研究員

極端紫外光研究施設 施設長(併) 小 杉 信 博

加 藤 政 博	教 授
保 坂 将 人	助 手
持 箸 晃	助 手
木 村 真 一	助教授
伊 藤 孝 寛	助 手
櫻 井 陽 子	研究員

隅井良平	特別訪問研究員
繁政英治	助教授
彦坂泰正	助手
金安達夫	研究員
原徹	助教授(理研)

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	研究員
ESTACIO, Elmer	研究員
QUEMA, Alex, Villareal	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
常包正樹	研究員
曾根明弘	共同研究員
酒井博	共同研究員
バンダリ ラケシュ	共同研究員
金原賢治	共同研究員
阿部亜紀	共同研究員
堀米秀嘉	共同研究員
高御堂哲司	共同研究員
玉置善紀	共同研究員
鈴木剛	共同研究員
齋川次郎	特別訪問研究員

装置開発室 室長(併) 宇理須 恆 雄

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

青野重利	教授
吉岡資郎	助手
小林克彰	研究員
小澤一道	研究員
藤井浩	助教授
倉橋拓也	助手
鬮目理人	研究員

生命環境研究領域

北川 禎三	教授
久保 稔	研究員
長野 恭朋	研究員
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
KOUTSOUPAKIS, Constantinos	学振外国人特別研究員 '05.10.23 ~ '07.10.22
當 舎 武彦	学振特別研究員
平 松 弘嗣	学振特別研究員
高 木 淳一	教授 (阪大蛋白研)

計算科学研究センター 施設長(併) 永瀬 茂

岡崎 進	教授
齋藤 真司	教授(兼)
森田 明弘	助教授
大野 人侍	助手
三浦 伸一	助手(兼)
石田 干城	助手(兼)
岩橋 建輔	専門研究職員
松田 成信	専門研究職員
篠田 恵子	専門研究職員
吉井 範行	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
村越 稔	専門研究職員
伊藤 暁	専門研究職員
山田 清志	専門研究職員
石山 達也	専門研究職員
李 洪珍	研究員

技術課 課長 加藤 清則

一班 (機器開発技術班) 班長 吉田 久史

機器開発技術一係

係長	水谷 伸雄
技術職員	矢野 隆行

機器開発技術二係

係長	青山 正樹
技術職員	近藤 聖彦

二班 (電子回路・ガラス機器開発技術班) 班長 鈴井 光一

電子機器開発技術係

技術職員	内山 功一
技術職員	豊田 朋範

ガラス機器開発技術係

係長	永田 正明
----	-------

三班（極端紫外光技術班）班 長 堀 米 利 夫

極端紫外光技術一係

係 長	蓮 本 正 美
技術職員	近 藤 直 範

極端紫外光技術二係

係 長	山 崎 潤一郎
技術職員	林 憲 志

極端紫外光技術三係

係 長	中 村 永 研
主 任	酒 井 雅 弘

四班（光計測技術班）班 長 山 中 孝 弥

光計測技術係

技術職員	上 田 正
技術職員	千 葉 寿

五班（計算科学技術班）班 長 水 谷 文 保

計算科学技術一係

技術職員	澤 昌 孝
------	-------

計算科学技術二係

技術職員	内 藤 茂 樹
技術職員	手 島 史 綱
技術職員	南 野 智

六班（ナノサイエンス技術班）

ナノサイエンス技術一係

係 長	高 山 敬 史
主 任	水 川 哲 徳
技術職員	藤 原 基 靖

ナノサイエンス技術二係

技術職員	牧 田 誠 二
技術職員	中 野 路 子

七班（研究・広報技術班）

研究・広報技術係

技術職員	石 村 和 也
技術職員	渡 邊 廣 憲
技術職員	賣 市 幹 大
技術職員	岡 野 芳 則
技術職員	大 石 修
技術職員	原 田 美 幸

\* 整理日付は2005年12月1日現在。ただし、外国人研究者で2005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（2006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	43	70	222	147	177
転出者数	5	26	55	181	111	159
現員	1	17(2)	15	41	36	18

( )は委嘱で外数。

#### 客員研究部門

職名 区分	教授	助教授
就任者数	112	122
現員	10	6

#### 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	29	29	31	22
現員	2	0	2	0

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および統計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,高精密度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 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  
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

### 分子構造学第二研究部門(客員)

研究目的 1 ,蛋白質ダイナミクスの解明  
2 ,鉄センサー蛋白質の構造化学的研究  
研究課題 1 ,レーザー分光を手段として,機能性蛋白質の反応過程における,エネルギーや構造ダイナミクスを時間分解で明らかにする  
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 1 ,磁性薄膜における表面分子化学的磁化制御  
2 ,低侵襲的生体分子イメージング法に関する研究  
研究課題 1 ,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  
2 ,蛍光・発光蛋白質を利用した蛋白質オルガネラ移行と遺伝子発現の時空間解析法の開発

## 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 無機化学，有機化学，高分子化学，超分子科学を含む分子科学関連分野の諸問題を，特に分子の構造とその機能という分子科学の観点から研究

研究課題 1 ,樹木状金属集積体を用いたスピン空間の構築と機能開拓  
2 ,分子プログラムに基づいた光機能性ナノ構造体の構築  
3 ,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進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の研究

## 反応動力学研究部門

研究目的 極端紫外光を用いた化学反応動力学の研究

研究課題 1 ,気相における光イオン化及び光解離のダイナミクス  
2 ,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  
3 ,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
- 1 ,凝縮系におけるダイナミクス・多次元分光法の理論および数値解析
  - 2 ,生体高分子の構造変化と機能発現に関する分子力学計算

#### 研究施設

##### 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

#### 錯体触媒研究部門

研究目的 遷移金属錯体による有機分子変換反応の開発

- 研究課題
- 1 ,多重応答型錯体の合成と外場応答
  - 2 ,新規不斉触媒の開発
  - 3 ,錯体触媒の固定化と新機能
  - 4 ,機能性ナノ錯体分子の開発

#### 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バーの開発
  - 5 ,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 ,ポウル型共役分子の設計・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 ,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
  - 2 ,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
  - 3 ,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 ( 客員 )

- 研究目的 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 ,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
  - 2 ,NMR を利用した生体高分子の相互作用と内部運動の解析
  - 3 ,超高磁場固体 NMR 法の生体分子への応用

#### 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・開発とシンクロトロ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

#### 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

#### 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

#### 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 ,センサー機能を有する金属タンパク質の構造と機能
  - 3 ,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 ,複雑凝集系の計算機シミュレーション
  - 2 ,界面和周波発生分光の計算手法の開発
  - 3 ,凝縮系のダイナミクスと多次元分光法の解析

## 2-8 技術課

技術課は所長に直属した技術職員の組織で、2005年4月1日の構成員は、37名である。技術職員は、研究系及び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、先端の装置を駆使し、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。

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	平成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	
平成9	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	
	大阪大学	平成17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	
平成17	分子科学研究所	平成18年3月2-3日	機械・ガラス工作、回路、低温、計算機、装置	
	岩手大学	平成17年9月15-16日	機器・分析	

## 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
平成16年度	8

表3 技術研修受入状況(2005.1.1 ~ 12.31)

氏名	所属	研修期間	備考
宗本 久弥	琉球大学低温センター	1/25/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
土屋 光	東京大学物性研究所	1/26/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
鷲山 玲子	東京大学物性研究所	1/26/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
中道 功	広島大学自然科学研究支援開発センター	1/26/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
河野 賢悟	熊本大学理学部	1/26/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
楠田 敏之	京都大学化学研究所	1/26/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
池田 博	筑波大学研究基盤総合センター	1/26/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
宮田 清美	京都大学原子炉実験所	1/26/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
吉本 佐紀	千葉大学理学部	1/26/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会

伊東 竟	北海道大学極低温液化センター	1/25/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
黒川 俊和	名古屋大学全学技術センター	1/26/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
田中 峰雄	大阪市立大学事務局	1/26/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
中本 聡美	大阪市立大学事務局	1/26/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
小田嶋 豊	東京大学大学院総合文化研究科	1/26/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
吉田 辰彦	(独)理化学研究所加速器基盤研究部	1/26/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
増沢 隆久	東京大学生産技術研究所	3/10/05 ~ 3/11/05	教授 セミナー講師
百地 武	東芝機械(株)精密機械営業部	3/10/05 ~ 3/11/05	参事 セミナー講師
吉田 睦	アイシン精機(株)新規事業企画室	3/10/05	グループマネージャー セミナー講師
吉田 基	ヨシダ工業(株)	3/10/05	マイクロ加工技術セミナー
谷田貝悦男	東京大学生産技術研究所	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
加賀谷孝三郎	東北大学多元物質科学研究所	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
佐々木英一	東北大学多元物質科学研究所	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
谷川 慎一	タニワカプロダクト	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
大石 和泉	株式会社オオイシ	3/10/05	マイクロ加工技術セミナー
森 紀年	(財)東京都中小企業振興公社	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
岡田 則夫	国立天文台	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
杉戸 正治	核融合科学研究所	3/10/05	マイクロ加工技術セミナー
増田 忠志	名古屋大学全学技術センター	3/10/05	マイクロ加工技術セミナー
鈴木 和司	名古屋大学全学技術センター	3/10/05	マイクロ加工技術セミナー
鳥居 龍晴	名古屋大学全学技術センター	3/10/05	マイクロ加工技術セミナー
松下 幸司	名古屋大学全学技術センター	3/10/05	マイクロ加工技術セミナー
千田 進幸	名古屋大学全学技術センター	3/10/05	マイクロ加工技術セミナー
小田嶋 豊	東京大学大学院総合文化研究科	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
中島 教雄	東京大学教養学部	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
星野 英夫	長岡技術科学大学工作センター	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
宇野 宗則	北陸先端科学技術大学院大学	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
嶺岸 宏治	東北大学多元物質科学研究所	6/14/05 ~ 6/15/05	受入研修 装置開発室
柳田 里見	東北大学多元物質科学研究所	6/14/05 ~ 6/15/05	受入研修 装置開発室
三浦 和浩	東北大学多元物質科学研究所	6/14/05 ~ 6/15/05	受入研修 装置開発室
小田嶋 豊	東京大学教養学部	10/12/05	受入研修(EBW) 装置開発室
滝澤 勉	東京大学教養学部	10/12/05	受入研修(EBW) 装置開発室
加賀谷孝三郎	東北大学多元物質科学研究所	10/20/05 ~ 10/21/05	放電加工技術研究会
森 紀年	(財)東京都中小企業振興公社	10/20/05 ~ 10/21/05	放電加工技術研究会
高橋 庸夫	北海道大学	11/22/05 ~ 11/23/05	教授 セミナー講師
小中 信典	徳島大学	11/22/05 ~ 11/23/05	教授 セミナー講師
増田 忠志	名古屋大学全学技術センター	11/22/05	エレクトロニクス最先端技術セミナー
北 宏之	北陸先端科学技術大学院大学	11/22/05	エレクトロニクス最先端技術セミナー

表4 研修受講実績(平成17年度)

研修名	開催機関	日程	参加者
東海・北陸地区国立大学法人等技術専門職員研修(情報処理コース)	名古屋大学	8/31/05 ~ 9/2/05	内藤茂樹
東海・北陸地区国立大学法人等教室系技術職員研修(電気・電子コース)	静岡大学	9/7/05 ~ 9/9/05	内山功一、酒井雅弘
東海・北陸地区国立大学法人等技術専門職員研修(物理・化学コース)	三重大学	9/26/05 ~ 9/28/05	高山敬史
平成17年度前期放送大学	愛知学習センター	4/05 ~ 9/05	永田、蓮本、千葉、水川、原田
平成17年度後期放送大学	愛知学習センター	10/05 ~ 3/06	山中、高山、中村、藤原、中野

### 2-8-3 見学者の受入れについて

自然科学研究機構岡崎3機関の見学者受入は、事務センター総務課企画評価係が窓口になって行われており、その中で分子科学研究所の見学分については、技術課が中心となってその対応にあっている。年間およそ300名が来訪している。

近年は中学生の職場体験学習「生徒自身が短期間ながらも自ら体験した仕事と人間関係から希望に満ちた勤労観を育ませ、それを進路選択の一助にしてもらおう」という取り組みにも積極的に協力している。

#### 平成16年度

受入日	見学受入機関名	見学者数等
4月27日	愛知県庁	知事公室4名
5月17日	フランスアレヴァ社	アジア研修視察団20名
5月18日	中部電力(株)	電力技術研究会25名
6月8日	三島小学校	3年生94名(総合学習)
7月15日	南山高校	女子部生徒27名
8月5日	愛知県立豊田西高等学校	職場訪問27名
8月10日	中学生職場体験学習	2年生4名
8月23日	竜海中学校	生徒・教諭5名岡崎市職員1名
8月25日	立命館高校(スーパーサイエンスH.S.)	高校生24名
11月5日	東海流体熱工学研究会	会員15名
11月16日	岡崎市火曜会	会員24名
12月9日	アジア冬の学校	参加者30名
3月11日	異業種・異分野交流会	会員40名
平成16年度見学受入者総数		340名

#### 平成17年度

受入日	見学受入機関名	見学者数等
8月9日	岐阜西濃地区理科教諭	岐阜西濃地区理科教諭22名
9月7日	東京都立工業高等専門学校	電子情報工科学科学生40名
9月8日～9日	岡崎市立岩津中学校職場体験	2年生2名
9月13日	社団法人自動車技術会中部支部	会員70名
11月1日	名古屋高年大学	鯨城学園OB中川鯨城会35名
11月8日	岐阜工業高等専門学校	電気情報工科学科学生40名
1月10日	韓国慶熙大学	環境・応用科学学科の学生20名
1月25日～26日	宝飯郡音羽中学校	2年生1名
3月15日	若狭高等学校	1年38名
平成17年度見学受入者総数(12月20日現在、予定を含む)		268名

### 2-8-4 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。現在、手続きが確定していないため停止している。

## 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)

## 転任

2005年12月, 7班技術職員 手老龍吾

## 採用

2004年10月16日, 技術職員を公募により採用した。

7班 (広報担当) 1名

2005年4月1日, 技術職員を公募により採用した。

6班 (分子スケールナノサイエンスセンター) 2名

2006年2月1日, 技術職員を公募により採用した。

5班 (計算科学研究センター) 1名

## 2-8-5 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)

石村和也 WATOC2005 Best Poster Diamond Certificate (2005)

堀米利夫 日本化学会化学技術有功賞 (2005)

## 2-9 共同利用研究

### 2-9-1 共同利用研究の概要

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。

### 2-9-2 2005 年度の実施状況

#### (1) 課題研究

課 題 名	提案代表者
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 宇理須恆雄

#### (2) 協力研究

課 題 名(前期)	代 表 者
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と構造変化	島根大学教育学部 西山 桂
金ナノ微粒子膜の近接場光学顕微鏡による光学測定	(独)物質・材料研究機構 北島 正弘
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 鷺澤 尊規
SMOKEによる Ru(0001)基板上的 Co 薄膜の磁性研究	東京大学大学院理学系研究科 雨宮 健太
純液体及び2成分混合溶液中のクラスター構造	福岡教育大学教育学部 小杉健太郎
DNA 塩基誘導体の光反応ダイナミクス	東京工業大学大学院理工学研究科 鈴木 正
ナノキャピティ内の芳香族分子のピコ、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
(ET) <sub>2</sub> MHg(SCN) <sub>4</sub> の電荷秩序相に関する振動分光学的研究	東京工芸大学工学部 比江島俊浩
光学スペクトルによるずれ応力効果の研究	山口東京理科大学基礎工学部 井口 眞
W および Q-band ESR による有機導体等の電子状態の研究	首都大学東京都市教養学部 溝口 憲治
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 田中 寿
分子性伝導体の微小結晶の構造決定と極低温伝導度・磁化率測定	東京大学大学院理学系研究科 小林 昭子
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	大阪府立大学大学院理学系研究科 藤原 秀紀
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
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
軟X線による無機透明物質のアブレーション	筑波大学大学院数理工学系研究科 村上 浩一
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
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 今泉 吉明
放射光励起表面光化学反応の STM を用いた実空間“その場”観察	日本原子力研究所関西研究所放射光科学研究センター 吉越 章隆
ZnTe 表面構造の照射による変化	佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター 小川 博司
金属内包フラーレンの極端紫外光吸収	岡山大学大学院自然科学研究科 久保園芳博
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
マイクロチップ固体レーザーの紫外高調波発生に関する研究	大阪大学大学院工学研究科 佐々木孝友
レーザーによって構造・サイズ制御された金属微粒子の反応性	東京大学大学院総合文化研究科 真船 文隆
同時計測法による分子2重イオン化のダイナミクスと2価イオン状態の研究	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 伊藤 健二

分子ラジカルの内殻励起状態の分光とその崩壊ダイナミクスの研究	広島大学大学院理学研究科	和田 真一
Fe 基ホイスラー型合金の紫外線角度分解光電子分光	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
テラヘルツ領域における銅スピネル化合物の電子状態の研究	神戸大学大学院自然科学研究科	難波 孝夫
計算機実験による液体の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
巨大 電子系化合物の効率的合成法の開発	名古屋大学大学院理学研究科	山口 茂弘
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	慶應義塾大学理工学部	垣内 史敏
ジオキソレン錯体の多電子酸化還元系の構築と水分子の活性化	山形大学大学院理工学研究科	近藤 展征
オキソスルフィドタングステン錯体の生成と同定	大阪市立大学大学院理学研究科	杉本 秀樹
多核 NMR による FixL センサー機構の解明	(独) 理化学研究所	城 宜嗣
常磁性 NMR による活性部位近傍変異体ヘムタンパク質の解析	九州大学大学院農学研究院	野中 大輔
赤外振動分光法によるヘムタンパク質補欠分子の変形と配位子結合特性の解析	千葉大学大学院薬学研究院	根矢 三郎
ヘムセンサー蛋白質 NPAS2 のラマン分光を用いた構造解析と機能相関	京都府立大学大学院農学研究科	佐上 郁子
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	石岡 邦江
リチウム二次電池用正極活物質の粒子表面と内部における充放電機構の研究	(独) 産業技術総合研究所	小林 弘典
超分子構造体の示すスピン状態スイッチング測定	城西大学理学部	加藤 立久
環状拡張ポルフィリン金属錯体の磁気特性の解明	京都大学大学院理学研究科	清水 宗治
$\alpha'$ -(BEDT-TTF) <sub>2</sub> IBr <sub>2</sub> の電荷秩序転移に伴う電子状態の変化	岡山大学大学院自然科学研究科	神戸 高志
分子機能物質の極小結晶による構造決定、および物質測定	(独) 産業技術総合研究所	田中 寿
環状チアジラジカル結晶の構造解析と磁気特性評価	名古屋大学物質科学国際研究センター	藤田 涉
TTP 系分子性導体の合成と構造・物性に関する研究	愛媛大学工学部	御崎 洋二
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
テラヘルツコヒーレント放射光の発生と分光研究への応用	京都大学原子炉実験所	高橋 俊晴

課 題 名 (後期)

代 表 者

SMOKEによる Ru(0001)基板上の Co 薄膜の磁性研究	東京大学大学院理学系研究科	雨宮 健太
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
振動分光学的手法による dmit 塩の電荷整列現象の研究、及び、分子性導体の引張り環境下における光学測定の開発	(独) 理化学研究所	山本 貴
有機導電体の電荷整列相に対する圧力効果の研究	京都大学大学院理学研究科	前里 光彦
環状拡張ポルフィリン金属錯体の磁気特性の解明	京都大学大学院理学研究科	清水 宗治
W および Q-band ESR による有機導体等の電子状態の研究	首都大学東京大学院理学研究科	溝口 憲治
金属内包フラーレン単結晶やウィスカーの示すスピン状態決定	城西大学理学部	加藤 立久
シアノバクテリア由来光化学系 II 複合体の単結晶 W-band EPR 研究	関西学院大学	河盛亜佐子
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	大阪府立大学大学院理学系研究科	藤原 秀紀
TTP 系分子性導体の合成と構造・物性に関する研究	愛媛大学工学部	御崎 洋二
遷移金属イオンの配位・溶媒と構造に関する研究	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
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科	荻野 俊郎
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
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の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
半導体レーザ励起マイクロチップ固体レーザの物性と応用	東海大学大学院工学研究科	大塚 建樹
単一縦モードマイクロチップYAGレーザーを用いた小型テラヘルツ波光源の開発	(独) 理化学研究所	渋谷 孝幸
マイクロチップ固体レーザーの紫外高調派発生に関する研究	大阪大学大学院工学研究科	佐々木孝友
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
単結晶二酸化チタンを用いた可視光応答光触媒反応の実現	東京大学大学院理学系研究科	守川 春雲
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	石岡 邦江
テラヘルツ領域における希土類化合物 CeB <sub>6</sub> の電子状態の研究	神戸大学大学院自然科学研究科	難波 孝夫
巨大 電子系化合物の効率的合成法の開発	名古屋大学大学院理学研究科	山口 茂弘
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	慶應義塾大学理工学部	垣内 史敏
タングステン錯体の可逆的硫黄化反応と金属 - 硫黄結合の特性解明	大阪市立大学大学院理学研究科	杉本 秀樹
ジオキソレン錯体の高酸化電位系の構築と水分子の活性化	山形大学大学院理工学研究科	近藤 展征
CooA タンパク質の結晶解析	兵庫県立大学大学院生命科学研究科	樋口 芳樹
紫外共鳴ラマン分光法によるチトクロム c 酸化酵素の反応追跡	兵庫県立大学大学院生命科学研究科	小倉 尚志
共鳴ラマン分光法によるヘモグロビンのヘムの配向に関する研究	法政大学工学部	長井 雅子

ヘムセンサー蛋白質 NPAS2 のラマン分光を用いた構造解析と機能相関  
 様々な酸素活性種を含む金属錯体の構造と反応性相関  
 レーザーパンチスライスによるコヒーレント放射光発生基礎研究  
 オゾン分子の内殻励起状態の研究  
 分子ラジカルの内殻励起状態の分光とその崩壊ダイナミクスの研究  
 軟X線による無機透明物質のアブレーション  
 溶液中のクラスターに関する研究  
 ESR による複核金属内包フラレンのスピンの状態の研究  
 刺激応答性ブロックポリマーを用いた金ナノ微粒子の作製と触媒活性  
 フェノール分子の高振動状態ダイナミクスの実時間測定  
 ベンゼンを含むクラスターのレーザー分光学的研究  
 高出力型リチウム二次電池の正極活物質のナノ界面に関する研究  
 放射光励起シリコン表面化学反応の実空間観察技術の開発

アシルフェニルアラニンにより誘起されるリン脂質二分子膜の形態変化  
 シトクロム c 翻訳後修飾酵素の作用機構の解明  
 マイクロリアクターを用いた光反応の研究  
 光励起した芳香族分子の励起状態ダイナミクス  
 放射光源加速器の超高真空に関する研究  
 誘起導体におけるダイナミクスの ESR による研究  
 生細胞内におけるミトコンドリア RNA の可視化検出法の開発

京都府立大学大学院農学研究科  
 金沢大学大学院自然科学研究科  
 名古屋大学大学院工学研究科  
 新潟大学教育研究院自然科学系  
 広島大学大学院理学研究科  
 筑波大学大学院数理物質科学研究科  
 福岡教育大学教育学部  
 首都大学東京都市教養学部  
 大阪大学大学院理学研究科  
 東京工業大学資源化学研究所  
 東京大学大学院総合文化研究科  
 (独)産業技術総合研究所  
 日本原子力研究所関西研究所放射光科学研究センター  
 金沢大学大学院自然科学研究科  
 北海道大学大学院理学研究科  
 東京工業大学大学院理工学研究科  
 東京工業大学大学院理工学研究科  
 高エネルギー加速器研究機構  
 中央大学大学院理工学研究科  
 東京大学大学院理学系研究科

佐上 郁子  
 鈴木 正樹  
 高嶋 圭史  
 副島 浩一  
 和田 真一  
 村上 浩一  
 小杉健太郎  
 兒玉 健  
 青島 貞人  
 藤井 正明  
 住吉 吉英  
 小林 弘典  
 寺岡 有殿  
 太田 明雄  
 内田 毅  
 松下 慶寿  
 鈴木 正  
 堀 洋一郎  
 風間 重雄  
 名取 穰

### (3) 研究会

#### 分子科学コア領域と関連領域の最先端

2005年6月4日(土)～5日(日) 岡崎コンファレンスセンター

6月4日(土)

9:00-9:05 はじめに  
 9:05-11:05 セッション1:水素結合の物理化学  
 ディスカッションリーダー 橋本健朗(首都大)  
 講師  
 藤井朱鳥(東北大) 気相分子クラスターから観る水素結合 ネットワーク構造と新奇性  
 大峰 巖(名大) 水、水、水 水の多様なすがた  
 11:05-13:30 セッション2:新しい液体とその科学  
 ディスカッションリーダー 平田文男(分子研)  
 講師  
 浜口宏夫(東大) イオン液体:この不思議なもの  
 西川恵子(千葉大) ゆらぎが超臨界流体の物性を決める!

6月5日(日)

9:00-11:00 セッション3:より複雑な表面・界面における分子ダイナミクスと反応へのアプローチ  
 ディスカッションリーダー 松本吉泰(分子研)  
 講師  
 大西 洋(神戸大) 二次元開放系の化学反応  
 渡會 仁(阪大) 液液界面反応の新規計測法と機能解析  
 12:15-14:15 セッション4:生体分子情報の生成と伝達  
 ディスカッションリーダー 笹井理生(名大)  
 講師  
 田口英樹(東大) 「時計仕掛けのゆりかご」シャペロン GroEL の作用機構  
 北尾彰朗(東大) 生体超分子の機能を生み出す分子間相互作用とダイナミクス  
 14:45-16:45 セッション5:アト秒への道  
 ディスカッションリーダー 大森賢治(分子研)  
 講師  
 鳥塚健二(産総研) 時間領域から見たキャリアエンベロープ位相制御技術  
 渡部俊太郎(東大) アト秒パルスの発生と今後の展開

ロドプシンの仲間・G蛋白質共役型レセプターの機能と構造  
2005年6月15日(水)～17日(金) 岡崎コンファレンスセンター

6月15日(水)

- 13:25-13:30 開会の挨拶
- 13:30-13:50 日下部岳広(兵庫県大)  
ホヤの新奇光受容器とオプシンファミリーの多様性
- 13:50-14:10 小島大輔(東大)  
ゼブラフィッシュ幼生におけるVAL オプシン遺伝子の役割
- 14:10-14:30 今井啓雄(京大)  
ノックインマウスを用いた光情報伝達の解析
- 14:30-14:50 今元 泰(奈良先端大)  
ロドプシンの情報伝達における蛋白質間相互作用の直接観測
- 15:05-15:25 井上圭一, 寺嶋正秀(京大)  
レチナルタンパク質のエネルギーと構造変化を観る
- 15:25-15:45 古谷祐詞<sup>1,2</sup>, 寺北明久<sup>2,3</sup>, 七田芳則<sup>2,3</sup>, 神取秀樹<sup>1,2</sup> (1. 名大, 2. CREST・JST, 3. 京大)  
赤外分光法による視物質ロドプシンの情報伝達過程におけるタンパク質の構造変化解析
- 15:45-16:05 石黒正路(サントリー生物有機研)  
ロドプシン光活性化モデルによる機能的GPCR構造
- 16:05-16:25 諏訪牧子(産総研)  
Computational system for predicting function of Orphan receptors
- 16:40-17:00 倭 剛久(名大)  
イエロープロテインの吸収波長制御・光異性化・エネルギー流の解析
- 17:00-17:20 櫻井 実(東工大)  
分子動力学シミュレーションによるロドプシンの活性化機構の研究
- 17:20-17:40 美宅成樹(名大)  
膜貫通ヘリックス本数分布のシミュレーションから見た7本膜貫通ヘリックス型膜タンパク質の進化要因
- 18:00-19:00 レチナルタンパク質国際会議組織委員会

6月16日(木)

- 9:00-9:20 針山孝彦(浜松医大)  
魚類視物質に存在する2種の発色団 淡水が生んだ視覚の多様性?
- 9:20-9:40 入江俊明(秋田大), 梶原昌五(岩手大), 東 眞美(阪教大), 妹尾春樹(秋田大), 関 隆晴(阪教大)  
貯蔵レチノイドとしてのレチナルの生物学的意義: その進化的背景
- 9:40-10:00 岩佐達郎, 浦野和雄, 高島大貴(室蘭工大), 岡野恵子, 中村 整(電通大)  
イモリ嗅上皮に発現するリポカリン類と嗅覚受容体
- 10:00-10:20 宮下洋子, 山田大邦, 山田恵子, 森谷常生(札幌医大)  
皮膚色素細胞の光受容
- 10:40-11:00 寺北明久(京大)  
ロドプシンファミリーの多様性: アゴニストとして全トランス型レチナルの結合能を持つロドプシン類
- 11:00-11:20 津田基之(兵庫県立大)  
GPCRモデルとしてのタコロドプシン
- 11:20-11:40 武田茂樹(群馬大)  
ランダムペプチドライブラリーを用いたGPCRに対するペプチドリガンドの同定
- 11:40-12:00 斎藤祐見子, 丸山 敬(埼玉医大)  
Structure and functional relationship of melanin-concentrating hormone receptor
- 13:20-13:40 上田昌宏(阪大)  
走化性情報伝達系の細胞内1分子可視化解析
- 13:40-14:00 林 文夫(神戸大)  
円板膜におけるロドプシンのブラウン運動
- 14:00-14:20 中田裕康(東京都神経研)  
アデノシン受容体とP2受容体のヘテロダイマー形成
- 14:20-14:40 黒瀬 等(九大)  
アンジオテンシン受容体を介したシグナル伝達
- 15:00-15:20 佐藤元康(学習院大)  
PaeI受容体による細胞死とmRNAの品質管理
- 15:20-15:40 齊藤 修(長浜バイオ大), 伊藤政之(東邦大), 久保義弘(生理研)  
RGS8によるGタンパク質共役受容体系の制御
- 15:40-16:00 久富 修(阪大)  
魚類のフォスフェーションとGタンパク質
- 16:00-16:20 深田吉孝(東大)  
網膜視細胞Gタンパク質の脂質修飾の生理的役割
- 16:20-18:00 ポスターセッション

- 6月17日(金)
- 9:00-9:20 神取秀樹(名工大)  
古細菌ロドプシンの赤外分光
- 9:20-9:40 須藤雄気(名工大)  
膜蛋白質複合体の分子間認識機構:古細菌ロドプシンと情報伝達蛋白質との相互作用
- 9:40-10:00 内藤 晶、川村 出(横国大) 池田陽一、須藤雄気、岩本真幸、下野和美、加茂直樹(北大) 齊藤 肇(広大)  
固体NMRによるセンサリーロドプシンIIとトランスデューサーの相互作用にともなう局所構造及び局所運動変化の検出
- 10:15-10:35 大谷弘之(東工大)  
トランス体ならびにシス体を発色団とするレチナル蛋白類の蛍光特性から見た励起状態緩和過程
- 10:35-10:55 佐々木裕次(高輝度研)  
膜タンパク質分子のピコレベル運動1分子計測:バクテリオロドプシンの場合
- 10:55-11:15 光岡 薫(産総研)  
pH10.0でのバクテリオロドプシンの立体構造とプロトン放出機構
- 11:30-11:50 神山 勉(名大)  
バクテリオロドプシンのプロトン輸送サイクルにおける水分子の動き
- 11:50-12:10 前田章夫(イリノイ大)  
バクテリオロドプシンの分子内水分子の役割
- 12:10-12:30 加茂直樹、橋 場剛、奈良敏文(北大) 菊川峰志、荒磯恒久(北大) 井原邦夫(名大)  
*H.turkmenica*の光プロトンポンプ
- 12:30-12:50 辻本和雄(北陸先端大)  
HalorubrumのNa<sup>+</sup>/H<sup>+</sup> アンチポーター阻害剤耐性を持つ菌株の単離と光学的性質
- 12:50 閉会

### 多様な水素結合系と量子効果

2005年7月8日(金)~9日(土) 岡崎コンファレンスセンター

7月8日(金)

- 13:20-13:30 関谷 博(九大院理) Opening remarks
- 13:30-15:00 座長: 富宅喜代一  
大島康裕(分子研)  
ベンゼン-水クラスターの内部運動ダイナミクス: - 水素結合の分子間ポテンシャル決定を目指して  
江幡孝之(広島大院理)  
水素結合クラスターのX-H伸縮振動の緩和ダイナミクス  
迫田憲治, 岡部智絵, 西信之, 関谷博(九大院理・分子研)  
7-アザインドール2量体における励起状態2重プロトン移動ダイナミクス
- 15:15-16:45 座長: 藤井朱鳥  
栗原和枝(東北大多元研)  
固-液界面において水素結合により形成する分子マクロクラスター  
常行真司, 赤木和人(東大院理)  
凝集水に見られるプロトンリレー型反応  
三枝洋之(横浜市立大)  
DNA塩基の微細水和構造とダイナミクス
- 17:00-18:30 座長: 藤井正明  
立川仁典(横浜市立大)  
核・電子の量子効果を考慮した水和クラスターの理論的研究  
富宅喜代一(神戸大院理)  
溶解過程における水和構造の役割  
阿部肇・井上将彦(富山医薬大薬)  
糖質との水素結合によりらせんを形成する人工ポリピリジン分子の開発

7月9日(土)

- 9:00-10:30 座長: 大島康裕  
池田進(KEK)  
中性子プローブの革新と水素量子効果  
杉本秀彦(中大理工)  
水素結合系プロトンの量子絡み合い状態  
牛山浩, 高塚和夫(東大院総合文化)  
水素移動反応における多次元・多体効果
- 10:45-12:45 座長: 大橋和彦  
田原太平(理研)  
水和電子からの共鳴ラマン散乱:e-水素結合系の振動スペクトル

酒井誠、大森努、藤井正明（東工大資源研）  
溶液・気相両面から見た水素結合クラスターの振動緩和

佐藤春実、尾崎幸洋（関西学院大理工）  
赤外分光法と量子化学計算法による生分解性ポリマーのC-H...O水素結合の研究

藤井朱鳥、宮崎充彦、榎本怜子、須原健一郎、水瀬健太、江幡孝之、三上直彦（東北大院理）  
大サイズクラスターカチオンにおける3次元水素結合ネットワークの成長

12:45-12:55 藤井正明（東工大資源研） Closing remarks

### 若手分子科学研究者のための物理化学研究会

2005年6月8日（水） 分子科学研究所 研究棟302号室

13:20-13:30 挨拶  
13:30-17:00 講演  
13:30-14:10 「テラヘルツ電磁波の発生・検出とその応用」  
大阪大学レーザーエネルギー学研究中心 谷 正彦助教授  
14:10-14:50 「有機化学反応の量子化学シミュレーション」  
広島大学大学院理学研究科 相田美砂子教授  
15:00-15:40 「非平衡物理と分子科学」  
九州大学大学院理学研究院 吉森 明助教授  
15:40-16:20 「金属クラスター・金属ナノ粒子研究の基礎と最前線」  
分子科学研究所 佃 達哉助教授

### 凝縮系のコヒーレンス制御と超高速ダイナミクス

2006年3月2日（木）～3日（金） 岡崎コンファレンスセンター

3月2日（木）

13:00-13:10 挨拶  
セッション1 (13:10-15:10) 座長：香月浩之（分子研）  
13:10-13:50 宗像利明（大阪大） 吸着分子の振動励起状態  
13:50-14:30 大西 洋（神戸大） 四次元ラマン効果を利用した埋没界面の時間領域振動分光  
14:30-15:10 渡邊一也（分子研） 表面吸着種の振動コヒーレンスとコヒーレント表面フォノンのダイナミクス  
セッション2 (15:40-17:40) 座長：渡邊一也（分子研）  
15:40-16:20 オリバーライト（北大） 超短光パルスレーザーによるコヒーレントフォノンの発生/検出  
16:20-17:00 北島正弘（物材機構） 半導体/半金属におけるコヒーレントフォノンダイナミクス  
17:00-17:40 中村一隆（東工大） フェムト秒時間分解X線回折によるコヒーレントフォノン測定

3月3日（金）

セッション3 (9:30-10:50) 座長：石岡邦江（物材機構）  
9:30-10:10 菱川明栄（分子研） 極短パルス強光子場による反応イメージング  
10:10-10:50 大森賢治（分子研） アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御  
セッション4 (11:10-12:30) 座長：長谷宗明（物材機構）  
11:10-11:50 大槻幸義（東北大） 凝縮相における分子コヒーレントダイナミクスの最適制御シミュレーション  
11:50-12:30 萱沼洋輔（大阪府大） 超高速ポンプ・プローブ分光に見る波束振動と、フォノンの真空中に刻む分子メモリー  
セッション5 (13:30-14:50) 座長：松田晃孝（分子研）  
13:30-14:10 岡本裕巳（分子研） プラズモンモードの光学的可視化とコヒーレンス  
14:10-14:50 中野秀俊（NTT） フェムト秒レーザープラズマ軟X線による光照射シリコンの時間分解 XAFS 計測  
セッション6 (15:10-16:20) 座長：千葉 寿（分子研）  
15:10-15:40 恩田 健（東工大） 有機伝導体の超高速光誘起相転移とコヒーレンス制御の可能性  
15:40-16:20 岡本 博（東大） 有機半導体の光誘起相転移におけるコヒーレント振動とその制御  
16:20-16:30 まとめ

### 未来型分子触媒の創製

2005年12月6日（火）～7日（水） 岡崎コンファレンスセンター

12月6日（火）

13:00-13:10 澤村正也（北大） 趣旨説明

- 13:10-14:55 表面分子触媒【part 1】  
 魚住泰広(分子研) 両親媒性高分子担持遷移金属触媒による水中有機変換反応  
 尾中篤(東大) ゼオライト極性ナノ空間での不安定化学種の安定貯蔵と反応加速  
 小林修(東大) 高分子カルセラント型触媒の開発
- 15:25-17:45 表面分子触媒【part 2】  
 海老谷幸喜(阪大) 超効率的化学変換に向けた固体表面への触媒機能の集積  
 原賢二(北大) 単結晶シリコン表面を基盤とする単分子層触媒の開発  
 和田健司(京大) シルセスキオキサンを活用した固体触媒の開発  
 水野哲孝(東大) 構造・機能の精密制御による環境調和型選択酸化触媒反応系の開発

12月7日(水)

- 9:00-10:10 クラスター分子触媒【part 1】  
 川口博之(分子研) 前周期金属ヒドリド錯体反応場による分子変換反応の開拓  
 永島英夫(九大) 高分子ゲル反応場はクラスター触媒のブレークスルーになるか?
- 10:40-12:25 クラスター分子触媒【part 2】  
 佃達哉(分子研) 金ナノクラスターの空気酸化触媒作用に対するサイズ効果  
 上野隆史(名大) 蛋白質超分子空間を用いたクラスター触媒制御  
 藤原尚(近大) 有機分子機能化金属ナノクラスターの界面制御とキラルナノ分子触媒
- 13:45-16:05 超分子触媒  
 江東林(分子研) デンドリマーを用いた水の光還元および水素発生  
 寺田眞浩(東北大) 基質認識型 Brønsted 酸触媒による不斉合成  
 徳永信(北大) 均一系触媒反応における剛直なナノサイズ配位子の効果  
 笹井宏明(阪大) 不均一系不斉触媒構築の新機軸
- 16:05-16:10 櫻井英博(分子研) 総括・事務連絡

### 金属内包フラーレン研究の新展開 基礎と応用

2005年11月7日(月)～8日(火) 岡崎コンファレンスセンター

11月7日(月)

- 9:55-10:00 久保園芳博(岡山大院自然) 研究会の主旨説明
- 10:00-11:00 金属内包フラーレンの生成、構造評価【座長 加藤立久】  
 鈴木信三(首都大東京) フラーレン及び単層カーボンナノチューブの生成過程  
 菅井俊樹(名大院理) 気相移動能法を用いた金属内包フラーレンの構造測定と反応
- 11:00-12:00 金属内包フラーレンの分光学I【座長 赤坂 健】  
 兒玉健(首都大東京) 磁気共鳴分光法からみた金属内包フラーレン  
 加藤立久(城西大理) 金属内包フラーレンの分子磁性
- 13:00-14:00 フラーレン物質の構造・物性・デバイス応用I【座長 斎藤 晋】  
 Valery N. Khabashesku (Rice University) Functionalized fullerene materials: synthesis, characterization and Applications  
 岩佐義宏(東北大金研) 分子性固体としてのフラーレン
- 14:00-15:00 フラーレン物質の構造・物性・デバイス応用II【座長 篠原久典】  
 斎藤 晋(東工大院理) 金属内包ナノチューブ系の電子構造と物性  
 Kosmas Prassides (University of Durham) Temperature- and pressure-induced negative thermal expansion in rare-earth fullerenes
- 15:30-17:00 新しい内包フラーレンの発見・合成と物性の発現【座長 岩佐義宏】  
 篠原久典(名大院理) 金属カーバイド内包フラーレンの発見とダイナミックス  
 村田靖次郎(京大化研) 内包フラーレン合成への有機化学的アプローチ  
 谷垣勝己(東北大院理) C<sub>60</sub> および H<sub>2</sub>@C<sub>60</sub> を利用したフォノンと電子物性に関する研究
- 17:00-18:30 フラーレンの電界効果デバイス応用【座長 谷垣勝己】  
 藤原明比古(北陸先端大) フラーレン FET の輸送特性: サイズ・温度依存性から  
 近松真之(産総研) フラーレン誘導体のデバイス応用  
 久保園芳博(岡山大院自然) フラーレンを使った電界効果デバイスの可能性

11月8日(火)

- 9:00-10:00 金属内包フラーレン, フラーレン誘導体の材料化学【座長 村田靖次郎】  
 赤坂 健(筑波大 TARA セ) フラーレン科学の新展開: 金属内包フラーレンの化学  
 高口 豊(岡山大院環境) フラロデンドロンを用いた機能性材料開発

10:30-12:00	金属内包フラーレンの分光学 II 【座長 鈴木信三】 見附孝一郎 (分子研) 金属内包フラーレンの軟 X 線吸収とイオン化 日野照純 (千葉大工・院自然) 複核金属内包フラーレンの光電子分光 山岡人志 (理研播磨研) Pr@C <sub>82</sub> の Pr L <sub>III</sub> 吸収端における高分解能共鳴 X 線非弾性散乱
13:00-14:30	フラーレンの構造, 反応, ナノテク利用 【座長 日野照純】 永瀬 茂 (分子研) 金属内包フラーレンの構造と電子状態 野内 亮 (岡山大理, JST-CREST) フラーレンのナノマニピュレーション 井上 崇 (豊田中研) C <sub>2</sub> 分子内包金属内包フラーレン
14:30-15:30	金属内包フラーレンの精密構造と動的特性解明 【座長 永瀬 茂】 下谷秀和 (東北大金研) La <sub>2</sub> @C <sub>80</sub> における La イオンの運動 西堀英治 (名大院工) 放射光粉末法による金属内包フラーレン構造研究の現状
15:30-15:40	見附孝一郎 (分子研) 研究会のまとめと事務連絡

第 3 回分子科学研究所高磁場 NMR フォーラム「超高磁場 NMR によるナノサイエンス研究の最先端と展望」  
2005 年 11 月 15 日 (火) 分子科学研究所 山手 3 号館 2 階

10:00-10:10	Opening remarks
10:10-10:50	榛葉信久 (味の素) ヘルペスウイルスプロテアーゼの二量体形成機構の解析と阻害剤の設計
10:50-11:30	津田正史 (北大) LC-NMR と DOSY 法を用いた天然有機分子の構造解析と新規化合物探索ストラテジーの開発
13:00-13:40	菊地 淳 (理化研 / 横浜市立大) 動植物の均一安定同位体標識化に基づく多次元 NMR メタボローム基盤技術構築
13:40-14:20	村田道雄 (阪大) 脂質膜中に形成される分子集合体 NMR による立体配座と分子認識機構の解明
14:40-15:20	齋藤公児 (新日本製鐵) 超高磁場固体 NMR で益々発展する無機材料分野での展望
15:20-16:20	伊倉光彦 (トロント大学) 特別講演「蛋白質 - 蛋白質複合体の NMR 攻略法: 転写制御因子を例として」
16:20-16:30	Closing remarks

生体における金属イオンの役割とその利用  
2006 年 3 月 18 日 (土) ~ 20 日 (月) 岡崎コンファレンスセンター

3 月 18 日 (土)

	【座長: 渡辺芳人 (名大院理)】
13:30 - 14:00	田中健太郎 (東大院理, JST さきがけ) バイオインスパイアード・テンプレートを利用した金属イオンの精密集積
14:00 - 14:30	山口和也 (阪大院理) 金属酵素モデル錯体を利用した亜硝酸イオン還元系の構築
14:30 - 15:20	福住俊一 (阪大院工) 特別講演「生体関連電子移動反応における金属イオンの役割とその利用」
	【座長: 青野重利 (岡崎統合バイオ)】
15:40 - 16:10	吉澤一成 (九大先端物質化学研) Enzymatic Function of Dopamine b-monooxygenase Mediated by Cu(III)-oxo Species
16:10 - 16:40	伊東 忍 (阪市大院理) 酸素運搬タンパク質ヘモシアニンによるフェノール類の酸化反応
16:40 - 17:10	樋口恒彦 (名市大院薬) シトクロム P450 中心構造錯体の行う酵素機能に関連した O-O 結合開裂反応
17:10 - 17:40	小倉尚志 (兵庫県大院生命) ミトコンドリア中のチトクロム c 酸化酵素の反応機構

3 月 19 日 (日)

	【座長: 城 宜嗣 (理研播磨研究所)】
9:00 - 9:30	當舎武彦 (岡崎統合バイオ) 珊瑚由来アレンオキサイド合成酵素における構造機能相関: 類似した構造をもつカタラーゼとの比較
9:30 - 10:00	榊 利之 (富山県大工) ビタミン D を代謝するシトクロム P450 の構造と機能
10:00 - 10:30	松井敏高 (東北大多元研) ヘムオキシゲナーゼによるヘム分解機構

- 10:30 - 11:00 小林克彰 (岡崎統合バイオ)  
ヘムを活性中心とするフェニルアセトアルドキシム脱水酵素の反応機構と軸配位子の効果  
【座長：伊東 忍 (阪大院理)】
- 11:20 - 12:10 鈴木正樹 (金沢大自然)  
特別講演「金属錯体による酸素分子活性化の化学」  
【座長：齋藤正男 (東北大多元研)】
- 13:30 - 14:00 石森浩一郎 (北大院理)  
鉄代謝制御蛋白質におけるヘム結合様式とその機能発現の分子機構
- 14:00 - 14:30 小森博文 (兵庫県大院生命)  
一酸化炭素センサーとして働く転写制御因子 CooA の X 線結晶構造解析
- 14:30 - 15:20 桜井 弘 (京都薬大)  
特別講演「生体関連金属による血糖制御 パナジウムやジンク錯体による糖尿病治療は可能か？」  
【座長：林 高史 (阪大院工)】
- 15:40 - 16:10 菊地和也 (阪大院工)  
錯体化学を応用した生体機能可視化センサー分子のデザイン・合成・応用
- 16:10 - 16:40 秋山修志 (JST さきがけ)  
蛋白質の研究に X 線小角散乱が貢献できること
- 16:40 - 17:10 菊地晶裕 (理研播磨研究所)  
BioXAS による金属タンパク質の構造解析
- 17:10 - 17:40 高妻孝光 (茨城大院理工)  
Aromatic Ring Interaction in a Blue Copper Protein, Pseudoazurin

3月20日(月)

- 【座長：樋口芳樹 (兵庫県立大院生命)】
- 9:00 - 9:30 水谷泰久 (神戸大・分子フォトサイエンスセンター)  
リガンド脱離に伴うヘムタンパク質の構造ダイナミクス：時間分解共鳴ラマン分光法による研究
- 9:30 - 10:00 廣田 俊 (京都薬大、JST さきがけ)  
一酸化炭素を利用した金属蛋白質の構造 機能相関の研究
- 10:00 - 10:30 上野隆史 (名大・物質科学国際研究センター)  
蛋白質複合化による金属錯体の精密反応制御
- 10:30 - 11:00 林 高史 (阪大院工)  
ミオグロビン及びシトクロム P450cam の補欠分子ヘムにおけるプロピオン酸側鎖の役割解明

第 1 回ナノメディスン討論会～分子科学から医学まで (2nd MB-ITR) ～  
2006年2月12日(日)～13日(月) 岡崎コンファレンスセンター

2月12日(日)

- |             |                                   |  |
|-------------|-----------------------------------|--|
| 13:00-13:10 | 宇理須恒雄                             | 開会挨拶   |
| 13:10-13:50 | Chiming Wei (Johns Hopkins Univ.) | Future Development of Nanomedicine: From Basic to Clinical |
| 13:50-14:30 | 飯島澄男 (名城大、NEC)                    | ナノカーボン材料の科学と応用   |
| 14:30-15:10 | 大内憲明 (東北大院医学)                     | がん医療を目指した機能性ナノ粒子と一分子可視化技術の開発                               |
| 15:30-16:00 | 片岡一則 (東大院工学)                      | ナノバイオテクノロジーが拓く未来医療<br>～ピンポイント診断・治療のためのナノデバイス設計～            |
| 16:00-16:30 | 梅澤喜夫 (東大院理学)                      | 細胞シグナルの可視化プローブ   |
| 16:30-17:00 | 濱口宏夫 (東大院理学)                      | ラマン分光法による単一酵母生細胞の生物活性と分子イメージング                             |
| 17:00-17:30 | 庭野道夫 (東北大電通研)                     | 半導体表面赤外分光で見る溶液中の生体分子                                       |
| 17:50-18:20 | 松本和子 (早稲田大)                       | 蛍光性希土類錯体が拓くバイオテクノロジー                                       |
| 18:20-19:00 | 井原康夫 (東大医学)                       | セクレターゼの謎   |

2月13日(月)

- |             |                         |                                      |
|-------------|-------------------------|--------------------------------------|
| 9:00-9:40   | 和田昭允 (理化研ゲノム科学融合研究センター) | “井の中の蛙”と“井の外の蛙”                      |
| 10:00-10:30 | 永井健治 (北大電子科学研)          | 生理機能イメージング技術とその医学応用                  |
| 10:30-11:00 | 小澤岳昌 (分子研)              | 細胞内オルガネラに局在するタンパク質の新たな可視化技術          |
| 11:00-11:30 | 水野 彰 (豊橋技科大)            | DNA-分子を対象とする反応・計測のための要素技術の開発         |
| 11:30-12:00 | 富永真琴 (岡崎統合バイオ)          | 温度感受性 TRP チャネルの構造・機能と生理学的意義          |
| 13:00-13:30 | 塩谷光彦 (東大院理学)            | 精密金属配列に基づく分子機能創成 人工 DNA から動的ナノカプセルまで |
| 13:30-14:00 | 江 東林 (分子研)              | 機能性 dendritic 高分子の設計と医薬分野への応用        |
| 14:00-14:30 | 竹中繁織 (九州工大)             | ガンを電気チップで調べる                         |
| 14:30-15:00 | 湯田坂雅子 (JST, NEC 基礎研)    | カーボンナノホーンのドラッグキャリアー応用の可能性            |

15:00-15:30	芝 清隆 (癌研究所)	ナノメディスンにおける人工タンパク質の役割
15:50-16:30	盛 英三 (国立循環器病センター)	次世代循環器疾患治療を実現するためのナノメディスンプロジェクトの概要
16:30-17:00	宇理須恒雄 (分子研)	膜タンパクバイオセンサーの開発と応用
17:00-17:30	菅原正雄 (日大)	チャンネル型情報変換と生体分子センシング
17:30-18:00	井出 徹 (阪大院生命機能)	チャンネルタンパクの光学的、電気生理学的 1 分子測定
18:00-18:30	野田昌晴 (基生研)	体液塩濃度恒常性制御の脳内機構
18:30	宇理須恒雄	閉会挨拶

#### (4) UVSOR 施設利用

(前期)

Ti 表面に生成する陽極酸化チタニア中の S の局所構造解析	大阪府立大学工学部	中平 敦
軟 X 線照射誘起発光を利用したセラミックス照射効果に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
L 殻 XANES による MFI 担持 Mo 触媒の還元活性種の評価	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
リチウムイオン電池正極材料であるポリアニオン系鉄化合物の電子構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	中山 将伸
XAFS 測定による金属フタロシアニン錯体の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
XANES による AlN 薄膜中のナノ構造解析	京都大学大学院工学研究科	田中 功
窒化物半導体の Al-K 内殻励起による可視・紫外発光 3	金沢大学工学部	直江 俊一
層状及びスピネル酸化物のアルミニウムの電子状態の解明	(独) 産業技術総合研究所	小林 弘典
アミノ酸のイオウ K 殻および水晶のシリコン K 殻スペクトル測定	神戸大学発達科学部	中川 和道
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
3d 遷移金属酸化物の真空紫外分光	東京大学大学院工学系研究科	十倉 好紀
極端紫外光照射による無機蛍光体の励起現象 (2)	新潟大学工学部	太田 雅壽
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・発光及び寿命測定	早稲田大学理工学部	大木 義路
真空紫外励起新規蛍光体の発光・励起スペクトル	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
複合フッ化物の真空紫外発光特性評価	分子科学研究所	猿倉 信彦
酸素高圧凝集相の紫外分光と励起状態の圧力効果	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	赤浜 裕一
圧電性 LGS 系物質の反射・発光・励起スペクトルの測定	信州大学工学部	伊藤 稔
誘電体結晶中の T1+ 型不純物センターの光学特性の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
窒化物半導体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
光収量によるアモルファス半導体の光誘起現象に関する研究	岐阜大学大学院工学研究科	林 浩司
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
表面修飾単分散 Si ナノ粒子の高分解能光電子分光 II	神戸大学工学部	田中 章順
アルカリ金属吸着による鉄超薄膜の磁性変化	分子科学研究所	中川 剛志
Electronic structure of CeNiGe <sub>2-x</sub> Si <sub>x</sub> studied by Ce 4d-4f resonant and angle-resolved photoemission spectroscopy	分子科学研究所	木村 真一
BL-5U におけるユーザータイム前調整および整備作業	分子科学研究所	伊藤 孝寛
低次元 CDW 化合物の低励起エネルギー角度分解光電子分光	分子科学研究所	伊藤 孝寛
Fe-V-Al 合金および Zr-Al-Cu-Ni 合金の価電子帯電子構造 II	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
UVSOR (FEL) 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
ピスマスクラスターの相転移	富山大学理学部	池本 弘之
誘電体および f 電子系のミリ波分光	神戸大学大学院自然科学研究科	岡村 英一
赤外反射吸収分光による有機/金属界面の研究	分子科学研究所	櫻井 陽子
高周波誘電体の遠赤外スペクトル	名古屋工業大学しくみ領域環境材料教育類	大里 齊
高圧下テラヘルツ分光による強相関系のキャリアダイナミクス	分子科学研究所	木村 真一
BL6B の調整とテラヘルツ顕微鏡の設置	分子科学研究所	木村 真一
紫外及び可視用ナノフォトニック結晶の光学的特性評価に関する研究	三重大学工学部	元垣内敦司
コロジオン法とサリチル酸ソーダ法併用によるアミノ酸薄膜の吸収スペクトル	神戸大学発達科学部	中川 和道
AlN 及び AlGaIn の発光励起と時間分解測定 (II)	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
反応性スパッタリング法により作成した酸化物薄膜の VUV 吸収スペクトルの測定	明治大学理工学部	松本 皓永
Tm 及び Sm カルコゲナイドの可視・真空紫外反射スペクトル	神戸大学大学院自然科学研究科	難波 孝夫
真空紫外光励起による長残光性物質の熱発光・光伝導特性	福井工業高等専門学校	北浦 守
シンクロトロン光を用いた ZnTe 系半導体材料のエッチング特性	佐賀大学理工学部	西尾 光弘
XAFS 法を用いた金属酸化物中のリチウムの状態	福岡大学理学部	栗崎 敏

アモルファスカーボン系薄膜の構造解析	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所	神田 一浩
スピネル酸化物の粒子表面における電子構造の解明	(独)産業技術総合研究所	小林 弘典
リチウムイオン電池正極材料であるポリアニオン系鉄化合物の電子構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	中山 将伸
窒化物半導体の N-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
フラーレン類の光電子分光	千葉大学工学部	日野 照純
角度分解紫外光電子分光法を用いたペンタセン分子超薄膜の分子配向と電子構造に関する研究	千葉大学工学部	奥平 幸司
バンド構造・薄膜構造からみたフタロシアニン薄膜に対するドーピング効果	名古屋大学物質科学国際研究センター	関 一彦
含イオウ平面 共役分子薄膜の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
金属 / 有機物半導体界面の電子構造研究	島根大学総合科学研究支援センター	田中 仙君
Li-Ni 系複合酸化物の真空紫外光電子分光	愛媛大学工学部	宮崎 隆文
放射光を用いた有機薄膜中のフェルミ準位シフトの可能性	千葉大学大学院自然科学研究科	小野 正樹
角度分解光電子分光法による 6P 薄膜のバンド構造に関する研究	千葉大学工学部	上野 信雄
イオン運動量画像法を用いた分子の光イオン化の研究	分子科学研究所	彦坂 泰正
中性励起フォトフラグメント用検出器の性能評価	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	下條 竜夫
PZT 薄膜の光学特性計画	静岡大学電子工学研究所	MISTRIK, JAN
クラスレート化合物の真空紫外分光	分子科学研究所	櫻井 陽子
全光電子収量法による反射多層膜の位相評価の試み	東北大学多元物質科学研究所	江島 文雄
層状 Co 酸化物の 3 次元電子構造と熱電能	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
ラミナー回析格子の回析効率測定	高エネルギー加速器研究機構	伊藤 健二
(後期)		
Ti 表面に生成する陽極酸化チタニア中の S の局所構造解析	大阪府立大学工学部	中平 敦
軟 X 線照射誘起発光を利用したセラミックス照射効果に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
L 殻 XANES による MFI 担持 Mo 触媒の還元活性種の評価	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
リチウムイオン電池正極材料であるポリアニオン系鉄化合物の電子構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	中山 将伸
XAFS 測定による金属フタロシアニン錯体の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
窒化物半導体の Al-K 内殻励起による可視・紫外発光 3	金沢大学工学部	直江 俊一
層状及びスピネル酸化物のアルミニウムの電子状態の解明	(独)産業技術総合研究所	小林 弘典
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
極端紫外光照射による無機蛍光体の励起現象 (2)	新潟大学工学部	太田 雅壽
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・発光及び寿命測定	早稲田大学理工学部	大木 義路
真空紫外励起新規蛍光体の発光・励起スペクトル	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
複合フッ化物の真空紫外発光特性評価	分子科学研究所	猿倉 信彦
圧電性 LGS 系物質の反射・発光・励起スペクトルの測定	信州大学工学部	伊藤 稔
誘電体結晶中の T1+ 型不純物センターの光学特性の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
窒化物半導体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
光収量によるアモルファス半導体の光誘起現象に関する研究	岐阜大学大学院工学研究科	林 浩司
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
アルカリ金属吸着による鉄超薄膜の磁性変化	分子科学研究所	中川 剛志
Electronic structure of CeNiGe <sub>2-x</sub> Si <sub>x</sub> studied by Ce 4d-4f resonant and angle-resolved photoemission spectroscopy	分子科学研究所	木村 真一
BL-5U におけるユーザータイム前調整および整備作業	分子科学研究所	伊藤 孝寛
低次元 CDW 化合物の低励起エネルギー角度分解光電子分光	分子科学研究所	伊藤 孝寛
Fe-V-Al 合金および Zr-Al-Cu-Ni 合金の価電子帯電子構造 II	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
UVSOR (FEL) 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
ピスマスクラスターの相転移	富山大学理学部	池本 弘之
誘電体および f 電子系のミリ波分光	神戸大学大学院自然科学研究科	岡村 英一
赤外反射吸収分光による有機 / 金属界面の研究	分子科学研究所	櫻井 陽子
高周波誘電体の遠赤外スペクトル	名古屋工業大学しくみ領域環境材料教育類	大里 齊
高圧下テラヘルツ分光による強相関係のキャリアダイナミクス	分子科学研究所	木村 真一
BL6B の調整とテラヘルツ顕微鏡の設置	分子科学研究所	木村 真一
紫外及び可視用ナノフォトニック結晶の光学的特性評価に関する研究	三重大学工学部	元垣内敦司
コロジオン法とサリチル酸ソーダ法併用によるアミノ酸薄膜の吸収スペクトル	神戸大学発達科学部	中川 和道
AlN 及び AlGa <sub>N</sub> の発光励起と時間分解測定 (II)	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊

Tm 及び Sm カルコゲナイドの可視・真空紫外反射スペクトル	神戸大学大学院自然科学研究科	難波 孝夫
シンクロトロン光を用いた ZnTe 系半導体材料のエッチング特性	佐賀大学理工学部	西尾 光弘
XAFS法を用いた金属酸化物中のリチウムの状態	福岡大学理学部	栗崎 敏
スピネル酸化物の粒子表面における電子構造の解明	(独)産業技術総合研究所	小林 弘典
リチウムイオン電池正極材料であるポリアニオン系鉄化合物の電子構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	中山 将伸
窒化物半導体の N-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
フラーレン類の光電子分光	千葉大学工学部	日野 照純
角度分解紫外光電子分光法を用いたペンタセン分子超薄膜の分子配向と電子構造に関する研究	千葉大学工学部	奥平 幸司
バンド構造・薄膜構造からみたフタロシアニン薄膜に対するドーピング効果	名古屋大学物質科学国際研究センター	関 一彦
含イオウ平面 共役分子薄膜の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
Li-Ni 系複合酸化物の真空紫外光電子分光	愛媛大学工学部	宮崎 隆文
放射光を用いた有機薄膜中のフェルミ準位シフトの可能性	千葉大学大学院自然科学研究科	小野 正樹
角度分解光電子分光法による 6P 薄膜のバンド構造に関する研究	千葉大学工学部	上野 信雄
改良型タルサイト年度の局所構造解明	大阪府立大学工学部	中平 敦
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
Xe 放電蛍光ランプに適した真空紫外励起用蛍光体 $YAl_3(BO_3)_4$ の励起発光特性	関西学院大学理工学部	小笠原一禎
全光電子収量法による反射多層膜の位相評価	東北大学多元物質科学研究所	江島 文雄
$Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ の電子構造の三次元性の解明	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
デンドリマー分子カプセル内包金属ナノクラスターの光電子分光	神戸大学工学部	田中 章順
遠赤外分光法による白金クラスターの電子状態の解明	北陸先端科学技術大学院大学材料科学研究科	三谷 忠興
Optical investigation on $Ca_2RuO_4$ under pressures	分子科学研究所	木村 真一
反応性スパッタリング法により作成した酸化物薄膜の VUV 吸収スペクトルの測定	明治大学理工学部	松本 皓永
Sr 欠損及び Gd をドーピングした $SrAl_2O_4:Eu$ セラミックスの長残光特性	福井工業高等専門学校	北浦 守
UV Reflectance Spectroscopy of Ta, Ni and NiFe Films	静岡大学電子工学研究所	青山 満
イオン運動量画像法を用いた分子からの負イオン生成の研究	分子科学研究所	彦坂 泰正
機能性アモルファスカーボン薄膜の構造解析	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所	神田 一浩
有機物半導体 / 金属界面修飾による電子状態への影響の研究	島根大学総合科学研究支援センター	田中 仙君
ラミナー回析格子の回析効率測定	高エネルギー加速器研究機構	伊藤 健二
エピタキシャル磁性薄膜の紫外磁気円二色性測定	分子科学研究所	中川 剛志
HCl 分子の K 殻電離しきい値近傍における PCI 効果	分子科学研究所	繁政 英治
強相関物質の真空紫外分光	神戸大学大学院自然科学研究科	岡村 英一
深紫外～低エネルギー軟 X 線領域におけるダイヤモンド検出器の性能評価	大阪大学大学院工学研究科	伊藤 利道

## (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
2 波長蛍光 dip 分光法を用いたローダミン 6G の蛍光消光過程の研究	東京工業大学資源化学研究所	渡邊 武史

#### (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
パルスレーザーと超音速ジェットを用いた多原子分子の振電バンドの分光	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	笠原 俊二
円二色性スペクトルによる立体規則性置換ポリアセチレンの溶液中における高次構造解析	北海道大学大学院工学研究科	馬渡 康輝
Nd:YAG レーザーを用いた Z スキャン法による新光学材料の評価	九州大学大学院システム情報科学研究院	中田 芳樹

### 分子スケールナノサイエンスセンター

#### (前期)

ポル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
金属イオンのホメオスタシスを実現する分子機構	金沢大学大学院自然科学研究科	櫻井 武
アザポルフィリンおよび関連化合物の鉄錯体の磁気特異性の解明	千葉大学大学院薬学研究院	根矢 三郎

相溶性ブロック共重合体の動的不均一性に関する研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	山本 勝宏
希土類マンガナイトの物性研究	豊橋技術科学大学	佐藤 裕久
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
希土類置換型磁性薄膜の磁気特性の評価	名古屋工業大学セラミックス基盤研究センター	安達 信泰
有機分子および金属錯体の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
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
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
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	奥村 健志
高分子固体表面における無触媒・無溶媒ラジカル重合反応	静岡県立大学環境科学研究所	坂口 真人
ESRによる複核金属内包フラーレンのスピン状態の研究	首都大学東京都市教養学部	児玉 健
シアノバクテリア由来光化学系II複合体の単結晶EPR研究	関西学院大学理工学部	河盛阿佐子
集積型金属錯体によるナノチャンネルの構築	名古屋工業大学大学院工学研究科	伊藤 光宏
コバルト錯体[Co(C <sub>12</sub> -terpy) <sub>2</sub> ](BF <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> の相転移現象	九州大学大学院理学研究院	速水 真也
希土類元素を含むZn基P型正二十面体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
温度にตอบสนองしてナノ細孔を変化させる動的ニッケル錯体の合成	静岡大学理学部	近藤 満
食品の加工工程中に生成する機能性成分の精製、単離と構造解析	名古屋経済大学人間生活科学部	長島 万弓
イオン結晶中の希土類イオンの電子スピン共鳴法による電子状態の解明	岐阜大学工学部	山家 光男
有機化合物の構造決定	愛知教育大学教育学部	日野 和之
(後期)		
ポル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
非対称性ABA型トリブロック共重合体の短い末端A鎖のB成分への相溶化挙動の観察	名古屋工業大学大学院工学研究科	山本 勝宏
高分子固体表面における無触媒・無溶媒ラジカル重合反応および生成物の分子運動性について	静岡県立大学環境科学研究所	坂口 真人
温度にตอบสนองしてナノ細孔を変化させる動的ニッケル錯体の構造変化に関する研究	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
有機分子及び金属錯体の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
有機化合物の構造決定	愛知教育大学教育学部	日野 和之
イオン結晶中の希土類イオンの電子スピン共鳴法による電子状態の解明	岐阜大学工学部	山家 光男
希土類永久磁石薄膜の垂直磁気異方性	名古屋工業大学セラミックス基盤研究センター	安達 信泰
金属含有酵素および蛋白質を模倣したバイオミメティック錯体の合成とその機能	名古屋工業大学大学院工学研究科	奥村 健志
Zn-Sc基正二十面体相準結晶中における4f希土類元素の磁性	北海道大学大学院工学研究科	柏本 史郎
集積型金属錯体によるナノチャンネルの構築	名古屋工業大学大学院工学研究科	伊藤 光宏
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
可逆な構造変化を示す酸化還元応答性ホストの開発	信州大学理学部	太田 哲
Mn <sub>12</sub> 誘導体の磁気特性の研究	広島大学大学院理学研究科	谷本 能文
ゴマの登熟過程に生成する機能性成分の精製、単離と構造解析	名古屋経済大学人間生活科学部	長島 万弓

#### 装置開発室

(前期)		
低次元系機能性材料開拓のための固体NMRプローブ技術開発	九州大学大学院理学研究院	北川 宏
(後期)		
レーザー電場により配向した極低温孤立分子の電子運動量分光装置の開発	東北大学多元物質科学研究所	高橋 正彦
複合機能性を有する分子性伝導体の結晶作製のための定電流電源の製作	大阪府立大学大学院理学系研究科	藤原 秀紀
神経軸索の軸索ガイダンス分子に対する応答性の解析	基礎生物学研究所	野田 昌晴
高等植物における表皮細胞の形態形成	基礎生物学研究所	星野 敦
衝突アライメント配向分子ビーム発生用超小型メカニカル速度選択デスクの開発	大阪大学大学院理学研究科	笠井 俊夫
飛行時間型メカニカル速度選択装置の特殊駆動電子回路の開発	大阪大学大学院理学研究科	岡田美智雄
新規な交流変調型単色吸光度測定装置に用いる電子回路の開発	大阪大学大学院理学研究科	蔡 徳七
超高真空中で試料交換可能な極低温用保持機構の開発	千葉大学工学部	日野 照純
錯体作成用水熱合成容器の制作	広島大学大学院理学研究科	秋田 素子

## 計算機利用

フラレンやカーボンナノチューブの構造欠陥の分子動力学計算	横浜市立大学総合理学研究科	岡田 勇
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	慶応義塾大学理工学部	山内 淳
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科	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	岐阜大学工学部	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
ナノバイオ物質の電子状態・構造・機能の相関	筑波大学物理学系	押山 淳
量子化学計算によるタンパク質の insilico 構造・機能予測	東京工業大学大学院生命理工学研究科	櫻井 実
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
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
分子の励起状態とその動的挙動の研究	広島大学大学院理学研究科	岩田 末廣
鎖状化合物の安定化効果に関する理論研究	東京大学大学院総合文化研究科	友田 修司
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
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
微小半導体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
層状人工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系研究科	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	田林 清彦
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系研究科	山下 晃一
第一原理電子構造理論の拡張と物質設計	東京大学大学院工学系研究科	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
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	名古屋大学大学院情報学研究科	古賀 伸明
フラレン・ナノチューブ系の分子物性と固体物性の総合研究	東京工業大学大学院理工学研究科	斎藤 晋
励起状態とその緩和過程に関する理論的研究	慶応義塾大学理工学部	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
金属錯体の構造・反応・電子遷移に関する理論的研究	お茶の水女子大学理学部	鷹野 景子
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
大環状人造蛋白質における両極性イオン捕捉機構の第一原理電子論とホスト・ゲスト・ナノ科学	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
核酸合成における保護・脱保護法の開発	琉球大学教育学部	安藤 香織
二酸化炭素・水負イオン系のミクロ溶媒和のメカニズム	東京大学大学院総合文化研究科	永田 敬
量子化学計算によるナノ科学へのアプローチ	九州大学先端物質化学研究所	吉澤 一成
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
溶媒和クラスターの微視的構造と反応ダイナミクスの研究	神戸大学理学部	富宅喜代一
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
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
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	慶応義塾大学理工学部	萩田 克美
穴のあいたフラレンの構造および分子包接特性に関する理論的研究	名古屋大学大学院環境学研究科	岩松 将一
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	慶応義塾大学理工学部	光武亜代理
シッフ塩基遷移金属錯体を触媒とする不斉反応の理論的解析	慶応義塾大学理工学部	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含フッ素有機化合物の反応機構解明	東京工業大学大学院理工学研究科	三上 幸一

次世代 LSI 用高誘電率絶縁膜とそのゲート電極用金属材料の第一原理計算による設計	筑波大学大学院数理物質科学研究科	白石 賢二
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	森下 徹也
フレドキシントンバ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
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	佐伯 盛久
P-セレクチンやヒトインフルエンザ認識される Neu5Aca-3Galb の理論的研究	岐阜大学大学院連合農学研究科	澤田 敏彦
光酸化還元反応によるプロト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院	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
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
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	石田 豊和
分子軌道計算を基盤とする単核及び二核金属不斉触媒の設計と開発	立教大学理学部	山中 正浩
ナノサイズ膜孔を通過する荷電高分子 DNA の分子動力学研究	核融合科学研究所	田中 基彦
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
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	名古屋大学大学院理学研究科	岡本 祐幸
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
クラスター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	薬師 久弥
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
量子および古典擬集系に対する計算機シミュレーション	分子科学研究所	岡崎 進
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	岡崎統合バイオサイエンスセンター	平松 弘嗣
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
ボ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	分子科学研究所	森田 明弘
シトクロム c 酸化酵素 Cu <sub>B</sub> サイトモデル錯体の紫外共鳴ラマンスペクトル	岡崎統合バイオサイエンスセンター	長野 恭朋
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	東北大学多元物質科学研究所	海野 雅司
数値シミュレーションによる分光スペクトルの計算	京都大学大学院理学研究科	谷村 吉隆
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
分子内水素結合の研究	弘前大学理工学部	須藤 進
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
ウラシル系分子に対するシクロデキストン包接効果に関する研究	茨城大学理学部	寺阪 利孝
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
有機分子の電子励起状態における大振幅振動ポテンシャルの分子軌道計算	北海道大学大学院理学研究科	竹内 浩
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
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
溶液内化学反応の理論的研究	名古屋大学大学院理学研究科	大峰 巖
金属クラスターイオンの幾何・電子構造の反応機構	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
静電ポテンシャルフィット法を用いた原子電荷パラメーターの自動決定法の開発	北里大学理学部	米田 茂隆
モデルペプチドの二次構造安定性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
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
転写因子 CREB の CRE 配列認識機構におけるマグネシウムイオンの役割	湖北短期大学情報メディア学科	小田井 圭
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
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
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	ファジャール ブラディプタ
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
置換アントラセンの基底・励起状態に関する量子化学計算	星薬科大学薬学部	坂田 健
イオンの選択と透過に果たす水のナノ構造と機能の理論的研究	関東学院大学工学部	杉本 徹
タンパク質励起状態計算の新技术	名古屋大学大学院理学研究科	川口 一朋
Photoactive Yellow Protein の時間分解蛍光スペクトルの解析	名古屋大学大学院理学研究科	小池 香奈
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

量子ダイナミクスによる動的物性量の理論的研究	大阪大学大学院基礎工学研究科	中野 雅由
非経験的分子軌道法によるチタン表面酸化過程	岡山理科大学大学院理学研究科	中川 幸子
古典スピン系の分子動力学計算による物理量の計算	大阪教育大学教育学部	喜綿 洋人
金属タンパク質の性質に関する量子化学計算	岡崎総合バイオサイエンスセンター	北川 禎三
フッ素を含むフェロモン活性物質の分子配座と生理活性との関係	鳥取大学工学部	早瀬 修一
非経験的分子軌道計算による有機ラジカルの電子状態の研究	広島大学大学院工学研究科	太田 信昭
グラフェンシートにおける原子空孔の第一原理計算	金沢大学大学院自然科学研究科	斎藤 峯雄
生命関連星間分子の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
梯子形ハロゲン架橋白金錯体の光学伝導度の第1原理計算	高エネルギー加速器研究機構	岩野 薫
酸化クロム結晶表面上に吸着した水分子の量子化学計算	岡山理科大学理学部	橋高 茂治
新規ジオキセタンおよびジオキセタン型化学発光性分子創製のためのモデリング	東洋大学生命科学部	和田 直久
有機ナノ分子の溶媒中における熱力学的安定性の理論的研究	分子科学研究所	丸山 豊
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	京都大学福井謙一記念研究センター	石田 俊正
有機反応の経路と微視的機構	立教大学理学部	山高 博
Rigged QED 理論および領域密度汎関数理論計算プログラムの開発	京都大学大学院工学研究科	立花 明知
分子衝突の動力学の理論的研究	日本大学理工学部	中村 正人
低配位型ホウ酸アニオン種ボラニドの合成に向けた分子デザインと生成物の物性解明	東京大学大学院工学系研究科	山下 誠
ハロゲン架橋金属錯体の電子状態シミュレーション	分子科学研究所	前島 展也
アセチレン架橋を有するドナー・アクセプター・ポルフィリンの非線形光学特性	京都大学大学院理学研究科	勝田 貴之
量子科学計算に基づく分子認識と自己組織化に関する理論的研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	麻田 俊雄
遷移金属錯体触媒反応に関する理論研究	分子科学研究所	木村 将浩
分子の電子状態と反応動力学に関する理論的研究	九州大学情報基盤センター	南部 伸孝
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
凝縮系のダイナミクスと化学反応の理論研究	分子科学研究所	斉藤 真司
分子の電子状態とスペクトルについての ab initio 計算	大阪市立大学理学系研究科	西本 吉助
2,9-ジクロロキナクリドンの黒色相の電子構造	横浜国立大学大学院工学研究院	千住 孝俊
分子多体系における量子移動化学過程の理論的研究	京都大学理学部	安藤 耕司

## 2-9-3 共同利用研究実施件数一覧

分子科学研究所共同利用研究実施一覧

年度 項目	'76~'98		'99		'00		'01		'02		'03		'04		'05		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	78	617	1	5	2	12	7	41	5	36	5	70	3	33	1	13	人数： 登録人数
協力研究	2,804	3,141	115	212	119	249	100	223	125	253	101	246	100	265	96	225	"
招へい 協力研究	186	186	0	0	2	3	5	6	1	1	1	1	0	0	0	0	"
所長 招へい	1,850	1,850	321	321	264	264	385	3857	313	313	308	308	160	160	63	63	人数： 旅費支給者
研究会	224	3,152	12	194	13	276	6	129	11	332	8	229	13	304	10	205	"
施設利用 I	1,372	2,953	49	135	54	142	49	139	63	188	54	150	55	149	53	108	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)	3,295	9,951	167	654	156	631	144	584	134	558	120	525	154	581	132	511	"
合計	9,809	21,850	665	1,521	610	1,577	696	1,507	652	1,681	598	1,529	485	1,492	355	1,125	
経費	382,340		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

( '05 年度の数値は，2005.12 未現在 )

分子科学研究所UVSOR共同利用研究実施一覧

年度 項目	'85~'98		'99		'00		'01		'02		'03		'04		'05		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	37	412	1	11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	人数： 登録人数
協力研究	304	1,074	8	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
招へい 協力研究	70	70	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	"
研究会	28	409	1	26	1	29	1	13	0	0	1	51	1	16	0	0	人数： 旅費支給者
施設利用	1,407	6,966	150	699	160	820	157	707	160	805	129	715	128	582	125	578	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	1,846	8,931	162	773	161	849	158	720	160	805	130	766	129	598	125	578	
経費	154,909		12,951		16,441		16,512		15,780		13,884		-		-		千円

( '05 年度の数値は，2005.12 未現在 )

## 2-10 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おり、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化することにより、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、昨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、8月26日に第1回総括班等会議を理研東京事務所で、10月6日と7日に蒲郡で第6回若手の会を開催した。更に、10月18日から19日にテーマ会議を、これに併せて、18日に第2回総括班等会議を開催した。最後の全体会議は、1月30日から2月1日の3日間、名鉄犬山ホテルで開催され、参加者全員が成果発表を行った。1月30日には、第3回総括班等会議が開催され、成果の総括と今後の方針が話し合われた。

このプロジェクトは物理と化学の研究者が多く集まり、共通した対象から周辺の対象に至る広範囲の問題を共に議論しあい更に多くの共同研究の成果が生まれ、この広い分野の進展に大きな貢献があったと言える。このような異分野ネットワークの形成が科学の発展に必要であることが痛感された。

## 2-11 ナノサイエンス支援

### 2-11-1 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130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920MHz核磁気共鳴吸収装置が共同利用に供され、また、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た。

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	支援責任者	所属
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	ムービングウォール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、極低温真空プローバー、微小電流計測システム、点接触電流イメージング原子間力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。	小川琢治教授	分子スケールナノサイエンスセンター
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。	小川琢治教授 永田 央助教授	分子スケールナノサイエンスセンター
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。	西 信之教授	電子構造研究系
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。	佃 達哉助教授	分子スケールナノサイエンスセンター

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。	横山利彦教授	分子構造研究系
	920MHzNMR：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 <sup>1</sup> H核， <sup>13</sup> C核の溶液試料測定に対応。平成17年後期より固体試料（ <sup>13</sup> C核）測定を試行。	魚住泰広教授	分子スケールナノサイエンスセンター
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。	西條純一助手	電子構造研究系
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。	永瀬 茂教授	理論分子科学研究系
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。	西 信之教授 佃 達哉助教授	電子構造研究系 分子スケールナノサイエンスセンター

## 2-11-2 2005年度の実施状況（1月31日まで）

### (1) 協力研究

課 題 名 (前期)	代 表 者
窒化物半導体の光電子分光	名城大学理工学部 丸山 隆浩
リボソーム上に形成されるアシルアミノ酸ナノチャンネルの構造評価	金沢大学自然科学研究科 太田 明雄
海洋微細藻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 久保田高明
窒化物半導体の光電子分光	名城大学理工学部 丸山 隆浩
窒化物半導体の光電子分光	名城大学理工学部 河村 康之
ナノサイズの分子の大規模計算	大阪府立大学理学研究科 麻田 俊雄
磁場配向膜を用いた強磁場 NMR による膜結合分子の構造と機能の解明	大阪大学大学院理学研究科 山本 仁
磁場配向膜を用いた強磁場 NMR による膜結合分子の構造と機能の解明	大阪大学大学院理学研究科 安達 清治
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共同効果と量子性	九州大学大学院理学研究院 迫田 憲治
開口フラレン誘導体（穴のあいたフラレン）への小分子封入・排出に関する理論的研究	名古屋大学大学院環境学研究科 岩松 将一
金属内包フラレンのピンゲル反応による化学修飾	筑波大学大学院数理物質科学研究科 赤阪 健
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 斎藤 雅一
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共同効果と量子性	九州大学大学院理学府 河本 裕介
dendリマー分子カプセル内包金属ナノクラスタの質量分析	神戸大学工学部 田中 章順
dendリマー分子カプセル内包金属ナノクラスタの質量分析	東北大学大学院理学研究科 今村 真幸
dendリマー分子カプセル内包金属ナノクラスタの質量分析	神戸大学大学院自然科学研究科 上掛 惟史
dendリマー分子カプセル内包金属ナノクラスタの質量分析	東北大学大学院理学研究科 今村 真幸
新規な金属内包フラレンの構造決定	筑波大学大学院数理物質科学研究科 若原 孝次
新規な金属内包フラレンの構造決定	筑波大学大学院数理物質科学研究科 飯塚 裕子
新規な金属内包フラレンの構造決定	筑波大学大学院数理物質科学研究科 二川 秀史
金属内包フラレンのピンゲル反応による化学修飾	筑波大学大学院数理物質科学研究科 山田 道夫
金属内包フラレンのピンゲル反応による化学修飾	筑波大学大学院数理物質科学研究科 佐藤久美子

磁場配向膜を用いた強磁場 NMR による膜結合分子の構造と機能の解明	大阪大学大学院理学研究科	村田 道雄
金属イオンを核とするナノクラスターの構造解析と光誘起反応	九州大学大学院理学研究院	大橋 和彦
金属イオンを核とするナノクラスターの構造解析と光誘起反応	九州大学大学院理学研究院	宗 豊
金属イオンを核とするナノクラスターの構造解析と光誘起反応	九州大学大学院理学研究院	飯野 拓郎
拡張ポルフィリン自動合成法の開発	九州大学工学研究院応用科学部門	古田 弘幸
有機金属ナノクラスターの創製：構造と機能制御	愛知教育大学自然科学系	日野 和之
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	荒谷 直樹
導電性中性単一成分モレキュラーナノワイヤー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	満身 稔
導電性中性単一成分モレキュラーナノワイヤー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	末次 晃
導電性中性単一成分モレキュラーナノワイヤー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	降旗 洋子
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
Nanotechnology - Lubrication ナノテクノロジーによるナノ潤滑材料	日本工業大先端材料技術研究センター	竹内 貞雄
Nanotechnology - Lubrication ナノテクノロジーによるナノ潤滑材料	日本工業大先端材料技術研究センター	鈴木 学
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研究科	後藤 敬
拡張ポルフィリン自動合成法の開発	九州大学工学研究院応用科学部門	池田 慎也
拡張ポルフィリン自動合成法の開発	九州大学工学研究院応用科学部門	岡 康孝
単層カーボンナノチューブとアミンの相互作用	東京学芸大学教育学部	前田 優
磁場配向膜を用いた強磁場 NMR による膜結合分子の構造と機能の解明	大阪大学大学院理学研究科	土居 幹嗣

### 課 題 名 (後期)

### 代 表 者

ロジウム(110)上の亜酸化窒素分子の吸着配向と活性サイト近傍の分布の STM 観測	北海道大学触媒化学研究センター	中越 修
フォトミック反応を用いたナノ光素子の基礎研究	九州大学大学院理学研究院	迫田 憲治
二重 N- 混乱ヘキサフィリンの大量合成	大阪大学大学院理学研究科	安達 清治
海洋微細藻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	久保田高明
SiC 表面からのカーボンナノチューブ生成過程の研究	名城大学理工学部	丸山 隆浩
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	坂田 絵里
SiC 表面からのカーボンナノチューブ生成過程の研究	名城大学理工学部	丸山 隆浩
シゾフィラン - 金ナノ粒子複合体の近接場分光	科学技術振興機構	沼田 宗典
電気化学析出法によって得られる化合物半導体薄膜のナノ構造観察	岐阜大学大学院工学研究科	市瀬 圭吾
電気化学析出法によって得られる化合物半導体薄膜のナノ構造観察	岐阜大学大学院工学研究科	B. R. Sankapal
ポリジアセチレン LB 膜の色相転移に関する顕微分光学的研究	埼玉大学理学部	坂本 章
ポリジアセチレン LB 膜の色相転移に関する顕微分光学的研究	埼玉大学理学部	森 和彦
結晶成長により作製した量子構造上への脂質膜の形成	名古屋大学大学院工学研究科	宇治原 徹
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	栗本 英治
金属内包フラーレンの電荷移動錯体の合成と構造	筑波大学大学院数理物質科学研究科	佐藤久美子
金属内包フラーレンの電荷移動錯体の合成と構造	筑波大学大学院数理物質科学研究科	河野 孝佳
金属内包フラーレンの電荷移動錯体の合成と構造	筑波大学大学院数理物質科学研究科	栗原 広樹
Ce@C <sub>82</sub> アニオンの <sup>13</sup> C NMR における常磁性シフトの解析	筑波大学大学院数理物質科学研究科	高野 勇太
Ce@C <sub>82</sub> アニオンの <sup>13</sup> C NMR における常磁性シフトの解析	筑波大学大学院数理物質科学研究科	二川 秀史
Ce@C <sub>82</sub> アニオンの <sup>13</sup> C NMR における常磁性シフトの解析	筑波大学大学院数理物質科学研究科	菊池 隆
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	斎藤 雅一
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
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	田中 洋輔

## (2) 施設利用

### (前期)

単パルスレーザーによる二酸化炭素 - 水及びアルコール 2 成分ナノクラスターイオンのレーザー分光構造解析とクラスター内電荷移動反応の研究	東京大学大学院総合文化研究科	井口 佳哉
単パルスレーザーによる二酸化炭素 - 水及びアルコール 2 成分ナノクラスターイオンのレーザー分光構造解析とクラスター内電荷移動反応の研究	東京大学大学院総合文化研究科	村岡 梓
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 基板表面の元素結合状態	名古屋工業大学大学院	小島 寛之
ナノサイズで構造の制御された含フッ素高分子の精密合成	東京大学大学院工学系研究科	中野 幸司
ナノサイズで構造の制御された含フッ素高分子の精密合成	東京大学大学院工学系研究科	藤田 智行

銀ビバレート錯体の構造決定	名古屋大学大学院理学研究科	吉川 浩史
透明キラル分子磁性体の構築と物性	広島大学大学院理学研究科	井上 克也
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	北海道大学電子科学研究所	中林 孝和
配位子置換によるクラスターの大量合成法の開拓	筑波大学大学院数理物質科学研究科	七分 勇勝
ナノギャップ電極による金微粒子の電気伝導測定	科学技術振興機構	根岸 良太
シアノ架橋分子磁性体の分子設計	慶応義塾大学理工学部	秋津 貴城
赤外光解離分光による金属原子イオンの局所溶媒和構造の研究	東北大学大学院理学研究科	古谷 亜理
赤外光解離分光による金属原子イオンの局所溶媒和構造の研究	東北大学大学院理学研究科	鶴田 譲
ポリジアセチレン LB 膜の色相転移に関する顕微分光学的研究	埼玉大学理学部基礎化学科	坂本 章
ポリジアセチレン LB 膜の色相転移に関する顕微分光学的研究	埼玉大学理学部基礎化学科	森 和彦
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	愛知教育大学自然科学系	稲毛 正彦
貴金属及び酸化物ナノクラスターの高分解能 TEM を用いた微構造解析	豊田中央研究所触媒研究室	須田 明彦
低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	中西 尚志
自動車部品用途への適用を狙ったポリマー系ナノコンポジット材料の開発	東海興業(株)研究開発部	前川美穂子
(後期)		
タンパク質を電子顕微鏡観察するための吸着基板検討と位相板開発	岡崎統合バイオサイエンスセンター	永山 國昭
自動車部品用途への適用を狙ったポリマー系ナノコンポジット材料の開発	東海興業(株)	前川美穂子
銀ナノクラスターの質量分析	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	清水 悠子
液体金属のホール効果と磁気抵抗効果の同時測定	静岡大学大学院理工学	伊藤 孝典
液体金属のホール効果と磁気抵抗効果の同時測定	静岡大学大学院理工学	荻田 正巳
磁気機能性遷移金属錯体の磁性評価	慶応義塾大学理工学部	秋津 貴城
キラルな金属ポルフィリン環状ホストを用いたキラルなキラルな炭素クラスターの不斉骨格センシング	東京大学工学系研究科	庄子 良晃
ナノギャップ電極による金微粒子の電気伝導測定	(独)科学技術振興機構	根岸 良太
キラル磁性体の構築と物性研究	総合研究大学院大学(広島大学)	沼田 陽平
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	秋田 素子
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	増原 直治
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	井上 克也
超高磁場固体 $^{17}\text{O}$ NMR を用いたペプチド・ポリペプチドの構造研究	東京工業大学大学院理工学研究科	黒木 重樹
分子内に電位勾配を有するピレン連結ポルフィリンの合成と物性評価	東京都立大学大学院理学研究科	三宅 雄介
一次元混合原子価イリジウム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	満身 稔
一次元混合原子価イリジウム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	末次 晃
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 基板表面の微細構造観察	名古屋工業大学大学院工学研究科	小島 寛之
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 基板表面の微細構造観察	名古屋工業大学大学院工学研究科	園部 宗孝
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 基板表面の微細構造観察	名古屋工業大学大学院工学研究科	梅澤 良介

## 2-12 超高速コンピュータ網形成 (NAREGI) プロジェクト

NAREGI プロジェクト開始後、本年度(2005年度)は中間の年にあたり、プロジェクトの中間的なまとめとして、二つの大きな事業を行った。ひとつはナノ分野における計算科学の国際会議(1<sup>st</sup> NAREGI International Nanoscience Conference)である。この会議は「NAREGI ナノサイエンス実証拠点」の過去2年半におよぶ研究成果を国際コミュニティにアピールするとともに、ナノサイエンス分野における国際的な研究交流の場として、6月14日より17日まで奈良県新公会堂において開催したものである。会議には国外よりこの分野の国際的なリーダー25名を招待し、基調講演5件、キーノート講演6件、招待講演45件、ポスター発表134件を含む参加総数280名の盛況なものとなった。

本年度行ったもうひとつの活動は総合科学技術会議による中間評価への取り組みである。本稿では主としてこの活動について報告を行う。(昨年9月以降は2006年度よりスタートする「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用プロジェクト」のグランドチャレンジ課題(ナノ分野)予定実施拠点として、プロジェクト立ち上げに協力してきたが、この取り組みについては別項で述べる。)

### 2-12-1 中間評価への取り組み

NAREGI プロジェクトに対する中間評価は、昨年7月12日、科学技術・学術審議会に置かれた「情報科学技術委員会」(委員長:土居慶応大学教授)のもとで行われた。評価項目は(1)プロジェクトの実施体制、(2)学術上の成果、(3)産・学・官連携への取り組み、(4)ミッションの達成状況、(5)社会への情報発信など多岐にわたって行われた。その結果、NAREGI プロジェクトは全体として下記のような高い評価(まとめ)を受けた。

「本プロジェクトは、国際標準化を目指したグリッド技術により、100テラフロップス級の高速サイエンスグリッド環境を実現する情報通信技術とナノサイエンス技術との融合により、先端科学技術の研究と製品開発を目指している。

プロジェクト推進には、国立情報学研究所を集中拠点に、日本を代表するグリッド研究者、ナノサイエンス研究者と産業界企業による適切な実施体制のもと、個々の特徴的な研究開発をベースに、世界標準化を目指したグリッド基板ソフトウェアのプロトタイプ版が予定どおり完成するなど高く評価できる。」

ここでは分子研拠点の取り組みのなかで項目(2)-(4)について活動とまとめを述べる。

#### (1) 学術上の成果

本プロジェクトにおける分子研拠点の基本的なミッションは「グリッド計算環境をナノ分野の計算科学によって実証する」というものであるが、われわれはこのミッションを達成するためには、単に「既存の計算プログラムをグリッド上で動かす」だけでは不十分であり、ナノ現象に対応できる新しい方法論を開発し、その方法論とアプリケーションソフトによってグリッド計算環境の有効性を実証することを企図した。ナノ現象はいくつかの点で従来の分子科学計算の守備範囲を大きく越えている。例えば、蛋白質という分子の電子状態を考えた場合、それは従来の量子化学計算の対象を遥かに越えているし、また、それが水溶液内に存在する場合、これまでの計算科学では全く不可能と言ってよい。したがって、水溶液中の蛋白質の電子状態を求めようとする場合、まず、蛋白質自身の電子状態を計算できる方法論をつくる必要があり、さらに、それを溶液中で計算する新しい道具立てを構築する必要がある。すなわち、ナノ現象を解明するにはこれまでの枠組みを越えた新しい理論をつくるか、これまでの方法論を組み合わせたいわば複合的な方法論を構築する以外にない。NAREGI ナノ実証拠点ではいわゆる「ハードナノ」から「ソフトナノ」までの

すべてのナノ現象に対応できる計算科学方法論の構築を目指して研究を行ってきた。その主な成果は下記のとおりである。(これらの研究成果は346報の学術論文と80報の総説・解説として発表済みである。)

## (2) 主な学術的研究成果

ナノスケールの巨大分子の電子状態を計算する新しい方法論の開発および改良

3D-RISM/FMO 法 (新規提案)

FMO による蛋白質 (1000 原子) の全電子計算 (世界記録)

溶液内の生体分子の折り畳み, およびナノ分子集合体形成をシミュレートする新しい方法論の構築および巨大計算

3D-RISM/ レプリカ MC 法 (新規提案)

1000 万原子系の分子動力学計算 (世界記録)

ナノ電子デバイスへの応用の基礎となる理論・方法論の開発および巨大計算

ハッバード模型の厳密対角化計算コードの開発と計算 (世界記録)

密度行列繰り込み群法によるスペクトル計算 (世界最高規模)

ナノ磁気デバイスへの応用の基礎となる理論・方法論の開発および巨大計算

磁気双極子系の磁気秩序形成における新奇な協力現象を発見

光誘起強誘電転移機構の解明 (国際賞を受賞)

ナノ電子・磁気デバイスへの直接の応用を目指した方法論の構築および巨大計算

半無限固体の表面からの電子放出の計算手法を提案 (世界初)

電子レベルからマクロな相に至るマルチスケールシミュレーションに成功 (世界初)

## (3) プロジェクトミッションの達成状況

NAREGI プロジェクトのミッションは我が国に自然科学分野の「高速コンピュータ網(グリッド)」を構築することであり, 分子科学研究所拠点のそれは国立情報学研究所 (国情) 拠点で開発したグリッドミドルウェア (科学のアプリケーションソフトをグリッド環境上で動かすための中間的ソフトウェア群) の有効性をナノサイエンス分野の計算科学によって実証することである。もちろん, 今回は中間評価であるから, 完成されたミドルウェアに関する「実証計算」を行うわけではなく, 国情拠点より提供された試行版 (アルファ版と呼ばれる) の実証研究を行った。行った実証研究の項目は下記のとおり。

### ハイスループット

ジョブをグリッド環境内のコンピュータに無駄なく割り付けることにより, 計算のスループットを上げる。

### メタコンピューティング

超高速ネットワークによって連結された異サイトあるいは異機種間の並列計算により大規模計算を実現。

### リアルタイムコラボレーション

異なる計算機環境で研究を行っている研究者がそれぞれの開発プログラムをリアルタイムで共有することを可能にする。(現在は異なるオペレーティングシステムで動いているプログラムを使おうとする場合, コード変換などのいわゆる移植作業を伴うため, 数ヶ月の労力と共同研究の遅延は免れない。)

#### (4) 産・学・官連携への取り組み

本プロジェクトのもうひとつの性格は国の「産業再生プログラム」の一貫としての「産学官連携」であり、この側面での成果も評価の対象となった。分子研拠点では分担研究者としていくつかの企業からの直接の参加を得ると同時に、「産業応用協議会」との連携のもとに、主にふたつの活動を行った。ひとつは公募形式で行った企業研究者による実証研究(公募実証研究)、他は企業研究者のグリッド利用を容易にする「グリッドナノシミュレータ」の開発である。

公募実証研究への応募企業と研究課題は以下の表にまとめてある。

### 2-12-2 2005年度「ナノ設計実証」公募研究テーマ一覧(16社19件)

ナノサイエンス実証研究拠点

分子科学研究所

2005年2月15日(火)

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)

この中で特筆すべき活動のひとつは「RISM ワーキンググループ」である。そもそも「産学連携」の心は「学」で開発された研究成果を「産」に移転し、産業の活性化に役立てることにある。しかしながら、学問分野によっては「産」の側に「学」の成果を受け入れる土壌が存在しない場合も少なくない。そのような場合には「産」の中にその「土壌」形成していく活動も「産学連携」の重要な一部でなければならない。液体の統計力学である RISM 理論がまさにこの場合にあたる。RISM 理論は溶液中の様々な「ナノ現象」を解明していく上で非常に有効な方法論であることが明らかになりつつあり、企業の関心も高まりつつある。しかしながら、この理論的方法論は、現在、大学の学部はおろか大学院においてすらもその教育課程に含まれていない学問である。このような状況のもとで、いくつかの化学企業が合同して「RISM 理論」の勉強と研修を当面の目的に公募実証研究に参加してきた。これらの企業研究者は約 1 年間の講義と研修を経て、現在、研究レベルの計算を行うまでに成長してきている。

我々が「産学連携」に関して行ったもうひとつの重要な貢献は「グリッドナノシミュレータ」の構築である。別項で述べたように、「グリッド計算環境」の最も重要な利点は研究者間の「リアルタイムコラボレーション」を実現することにある。従来の計算機環境ではある研究者が別の計算機環境下にある他の研究者と計算プログラムを共有しようとする場合、プログラムコードの変換というやっかいな作業が不可欠であり、それによって、数ヶ月の遅延は免れなかった。しかも、そのような変換作業が可能なのも自作のプログラムに限られており、Gaussianに代表されるような多くの市販プログラムはコードの変換そのものを許していない。後者の事情は Gaussian など市販のプログラムに依存している多くの化学企業にとって致命的とも言える欠陥である。グリッドナノシミュレータはこの欠陥を本質的に克服し、研究者がグリッド計算環境下において(コード変換などによる遅延なく)「リアルタイム」でプログラムを共有することを可能にする。グリッドナノシミュレータの骨格部分は(a)初期データ生成ツール(シミュレーション初期データの入力生成プログラム)、および(b)GIANT(個別プログラム間のデータ変換やヒューマンインターフェース)からなる。このGIANTによって、異機種コンピュータに存在するプログラム間のコミュニケーションが可能になったのである。このことによって、企業研究者はコードを変換することなく Gaussian を他のプログラムと連成して使うことが可能となった。

## 2-13 エクストリームフォトリクス

今年度から理化学研究所との連携融合事業として「エクストリーム・フォトリクス」を開始した。「光を造る」、「光で観る」、「光で制御する」という3つの観点から、両研究所で相補的にレーザー光科学のより一層の進展を図ろうとするプログラムである。分子研側からは、「光を造る」という観点から

「光波特性制御マイクロチップレーザーの開発」(平等)

「新複合フッ化物の真空紫外発光デバイスとしての探索と新 VUV フェムト秒光源の実現」(猿倉),

「光で観る」という観点から

「時間・空間分解分光による固体表面・ナノ構造物質表面における反応研究」(松本)

「エクストリーム近接場時間分解分光法の開発」(岡本)

「タンパク質立体構造に基づく機能性発光分子の開発と生体機能解析システム」(小澤),

「光で制御する」という観点から

「アト秒コヒーレント制御法の開発と応用」(大森)

「紫外強光子場による反応コヒーレントコントロール」(菱川)

「高強度極短パルス紫外光を用いた超高速光励起ダイナミックスの観測と制御」(大島)

の合計8課題を選定し、実行に移している。

まず、両方の組織をあわせて4月に理化学研究所にて第1回の合同研究会を開催した。この研究会は、全体的に各グループの今までの研究成果を中心に今後の研究計画を披露し、これを中心に議論を行った。これに対して、11月には「分子イメージングとスペクトロスコピーの接点」を主題とした研究会を行い、より突っ込んだ議論を進めた。また、このプログラムを中心に所内に日常的な議論の場としての光分子科学フォーラムを設け、光分子科学の進展を図ることとした。

## 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4名、特別分毎年3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	特別協力研究員等	研究会	訪問者	
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
04	15	6	55	16	133	225
合計	158	141	236	686	556	1,777

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
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
04	20	5	7	17	47	45	5	79	225
合計	344	111	137	97	223	181	105	579	1,777

表3 海外からの研究者(2005年度)

1. 外国人運営顧問			
NORDGREN, Joseph	スウェーデン	ウプサラ大学教授	
CASTLEMAN, A. Worford Jr.	アメリカ	ペンシルバニア州立大学教授	
2. 外国人客員研究部門			
STANKEVICH, Vladimir, G	ロシア	クルチャトフ放射光研究所室長, モスクワ工科大学教授	17. 1.20-17. 7.19
AKA, Gerard, Philippe	フランス	パリ国立高等化学院教授	17. 3. 1-17. 5.31
TANATRA, Makariy	ウクライナ	ウクライナ科学アカデミー表面化学研究所シニア科学者	17. 2. 1-17. 1.31
SUN, Wei-Yin	中国	南京大学錯体化学研究所教授	17. 6. 1-17. 8.31
PULAY, Peter	アメリカ	アーカンソー大学教授	17. 5.16-17. 8.15
荒木 幸一	ブラジル	サンパウロ大学教授	17.11. 1-18. 1.31
LONG, La-Sheng	中国	廈門大学助教授	17. 5. 1-18. 4.30
ROMAN, Swietlik	ポーランド	分子物理学研究所教授	18. 3. 1-18. 8.31
3. 分子科学研究所外国人研究職員			
LEE, Jin Yong	韓国	全南大学助教授	17. 6.23-17. 8.22 17.12.24-18. 2.23
4. 日本学術振興会招へい外国人研究者			
MAHINAY, Myrna Sillero	フィリピン	MSU - イリガン工科大学	15. 6. 3-17. 6. 2
QUEMA, Alex, Villareal	フィリピン	分子科学研究所研究員	16. 4. 1-18. 3.31
ZHANG, Fapei	中国	ドレスデン固体材料研究所研究員	16. 4. 1-18. 3.31
GU, Yuzong	中国	河南大学物理学科準教授	16. 7.10-18. 7. 9
PATRA, Digambara	インド	ユーリッヒリサーチセンター生物情報処理研究所フンボルト研究員	16. 9. 1-18. 8.31
VAROTSIS, C.	ギリシャ	クレタ大学化学科教授	17. 2.18-17. 4.17
5. 国際共同研究			
DELAGNES, Jean-Christophe	フランス	ポールサバティエ大学大学院生	17. 4. 1-17. 6.27 18. 2.15-18. 3.20
MEIYER, Christophe	フランス	ポールサバティエ大学教授	17. 5.28-17. 6. 4
LE, Hoang Hai	アメリカ	カンタム・エレクトロニクス研究員	17. 7. 1-17. 8.31
PETEK, Hrvoje	アメリカ	ピッツバーグ大学教授	17. 7. 5-17. 7. 8
LAMBERT, Guillaume	フランス	Commissariat for Atomic Energy 大学院生	17. 7. 7-17. 7.26
COUPRIE, Marie Emmanuelle	フランス	Commissariat for Atomic Energy 主任研究員	17. 7. 9-17. 8.15 17.11.14-17.11.29
LABAT, Marie	フランス	Commissariat for Atomic Energy 大学院生	17. 7. 9-17. 8.15
KWON, Yong Seung	韓国	成均館大学教授	17. 8. 4-17. 8.19 18. 3.25-18. 3.31
HONG, Jong Beom	韓国	成均館大学大学院生	17. 8. 4-17. 8.25
KIM, Jeong Woon	韓国	成均館大学大学院生	17. 8. 4-17. 8.24
SALVADOR, Arnel	フィリピン	University of Philippines 副部長	17. 9.23-17.10. 2
QUIROGA, Reuben V.	フィリピン	De La Salle University 助教授	17.11. 5-17.12. 5
藤田恵津子	アメリカ	Brookhaven National Research Chemist	17.11.25-17.12. 1
RUELE, Eckart, Gunther Adolf	ドイツ	Wuerzburg 大学教授	17.11.26-17.12. 5
BIELAWSKI, Serge	フランス	Universite des Sciences et Technologies de Lille 助教授	17.11.28-17.12.23
PLENGE, Juergen	ドイツ	Wuerzburg 大学大学院生	17.12. 3-17.12.11
GYILLEMEN, Renand	フランス	CNRS 大学院生	18. 1. 5-18. 1.15
SIMON, Marc	フランス	CNRS 研究員	18. 1. 8-18. 1.15
PETIT, Yannick	フランス	ジョセフ・フーリエ大学研究員	18. 2. 6-18. 3. 2
HOLLAND, Andrew	ブルネイ	Brunei University 教授	18. 3. 1-18. 3.11
INGLEY, Richard	ブルネイ	Brunei University 大学院生	18. 3. 1-18. 3.11
HOLLAND, Karen	ブルネイ	Brunei University 大学院生	18. 3. 6-18. 3.13
AKA, Gerard Philippe	フランス	パリ国立高等化学院教授	18. 3.11-18. 3.29

6 . 科学研究費補助金			
DASKALAKIS, Evangelos	ギリシャ	University of Crete Department of Chemistry 大学院生	17. 4. 1-17. 6. 8
GWATKIN, Ralph	アメリカ	Case Western Reserve University 教授	17. 5. 9-17. 5.18
BOYKO, Sergiy	カナダ	University of Ontario Institute fo Technology Technician	17. 7. 1-17. 8.31
KIM, Younkyoo	韓国	韓国外国語大学教授	17. 7.11-17. 8.26
中川 康	アメリカ	University of Minnesota Medical School 助教授	17. 7.23-17. 7.28
OLOYEDE, Oluwaponmile			17.10. 1-17.11.30
VAROTSIS, Constantinos	ギリシャ	University of Crete Department of Chemistry 教授	17.10. 2-17.11. 2
McCORMACK, Thomas James	アメリカ		17.10. 2-18. 3.31
LI, Zhengqiang	中国	Jilin University 教授	17. 9.30-17.12.28
友安 慶典	アメリカ	Kansas State University Research Asst. Professor	17.10.30-17.11. 7
POBRE, Romeric Ferrer	フィリピン	De La Salle University 助教授	17.11. 5-17.12. 5
GARDNER, Kevin	アメリカ	University of Texas Southwestern Medical Center at Dallas 助教授	17.11.15-17.11.20
WANG, Yi	中国	Institute of Biophysics Chinese Academy of Sciences 教授	17.12.12-17.12.17
PAL, Biswajit	インド	Centre for Cellular and Molecular Biology Scientist	17.12.16-18. 1.30
LEVY, Ronald	アメリカ	Rutgers University 教授	18. 1. 3-18. 1. 8
WOLFGANG, Doster	ドイツ	Techische Universitat Munchen 教授	18. 1. 3-18. 1.11
MARTIN, Karplus	フランス	Universite Louis Pasteur 教授	
		Harvard University 教授	18. 1. 4-18. 1. 8
CHRISTOPHER, Dobson	イギリス	University of Cambridge 教授	18. 1. 4-18. 1. 8
JOOYOUNG, Lee	韓国	Korea Institute for Advanced Study 教授	18. 1. 5-18. 1.13
LEE, Jinwoo	韓国	Korea Institute for Advanced Study 研究員	18. 1. 5-18. 1.13
JOO, Keehyoung	韓国	Korea Institute for Advanced Study 研究員	18. 1. 5-18. 1.13
7 . 所長招へい協力研究員			
FEJER, Martin	アメリカ	スタンフォード大学教授	17. 7.16-17. 7.19
SEAN, Campbell Smith	オーストラリア	クイーンズランド大学教授	17. 9.11-17. 9.12
石塚 智也	アメリカ	ペンシルバニア大学特別研究員	17.10. 4-17.10. 7
PRADEEP, T.	インド	Indian Institute of Technology Madras 教授	17.11.12-17.11.15
WEI, Chiming	アメリカ	ジョーンズホプキンス大学教授	17.11.23-17.11.24
LEE, Yuan Tseh	中国	台湾科学院院長	18. 2. 8-18. 2. 9
KAMINSKII, Alexander	ロシア	ロシア科学アカデミー結晶学研究所教授	18. 2.15-18. 2.16
保木 邦仁	カナダ	University of Tronto 研究員	18. 2.16-18. 2.19
伏谷 瑞穂	ロシア	ベルリン自由大学物理学研究所博士研究員	18. 3. 3-18. 3. 6
8 . 招へい研究員			
趙翔	中国	Xi'an Jiaotong University 教授	17. 7.20-17. 8.25
			18. 1.17-18. 2.18
KUSHCH, Natalia	ロシア	ロシア科学技術研究所	17.10. 2-17.10.12
LUIS, Fernand de Oliveira	ブラジル	University of Sao Paulo 大学院生	17.11. 6-18. 1.10
FRENKING, Gernot	ドイツ	Fachbereich Chemie Philipps-University 教授	17.11.12-17.11.19
YARWOOD, Jack	イギリス	Sheffield Hallam University 名誉教授	17.11.13-17.11.15
Quiroga Reuben V	フィリピン	De La Salle University 助教授	17.11.23-17.11.23
			17.11.26-17.11.27
香川 憲夫	アメリカ	Vanderbit University 助教授	17.12. 5-17.12. 5
BARANOV, Nikolai	ロシア	ウラル州立大学教授	18. 2.17-18. 2.19

## 2-14-2 国際共同研究

2005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者を受け入れ、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。近年、東アジア地区における科学研究の急激な発展の潮流の中で、分子科学研究所が従来にもまして国際的リーダーシップを確立して行くためには、新たな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二国間に限られており、それが、急速に活性化しつつある国際的な共同研究の推進にややもすれば障害となっている。

このような状況に鑑み、平成16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、国際共同研究の推進プログラムを独自に試行し、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、研究所内の教員による分子科学研究所国際共同研究の提案を受け、初年度は7件の共同研究計画を採択した。この新規な分子研国際共同研究によって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研究者の短期訪問による共同研究が実施された。また、本年度は10件の共同研究計画の課題が採択され、4名の若手研究者の1 - 3ヶ月の滞在、欧米およびアジアの諸国の研究者との間の共同研究・相互訪問が実施されている。この新規な国際共同研究プログラムを通して、分子科学研究所が近隣アジア諸国は勿論、広く世界の分子科学研究の国際共同研究拠点としての新たな役割を果たすための環境が整えられていくものと思われる。一方、分子科学研究所の独自努力により遂行できる共同研究には限界がある。今後、新規な国際共同研究プログラムを定着させ、アジアを初めとする世界の研究者を受け入れ、分子科学研究者の交流と共同研究の実施を効率よく行うために分子研の国際共同研究事業に対する予算的裏付けを確保することが益々重要となっている。

### 2005年度実施状況

代表者	研究課題名
宇理須恒雄	シリコン基盤上への生体情報伝達システムの構築と分子レベル機能解析
大森 賢治	超高精度コヒーレント制御法の開発と応用
平等 拓範	複屈折性による擬似位相整合非線形波長変換の多機能化
繁政 英治	分子の内核励起ダイナミクスの研究
木村 真一	量子臨界点近傍の電子状態の光学的・光電的研究
猿倉 信彦	テラワット紫外全固体超短パルスレーザーの開発
加藤 政博	蓄積リング自由電子レーザーの研究
松本 吉泰	固体表面における電子-フォノンダイナミクスの研究
小杉 信博	軟X線共鳴ラマン分光による価電子状態の研究
田中 晃二	オキシラジカル金属錯体の電子状態の解明

## (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え書きが交わされ、日韓合同シンポジウムや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。この覚え書きは2004年に更新されている。

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年ごと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」が、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、2005年3月に分子科学研究所で第11回合同シンポジウム「分子科学の最前線」開催され、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。2005年の第11回合同シンポジウムは、文部科学省の「日韓友情年2005（進もう未来へ、一緒に世界へ）」記念事業としても認定された。次回は、韓国で開催される。

また、1991年以降韓国のさまざまな大学および研究所から毎年3名の研究者を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え書きの更新を行い、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。

### 2-14-3 国際シンポジウム

分子科学研究所では1976年（1975年研究所創設の翌年）より2000年まで全国の分子科学研究者からの申請を受けて小規模国際研究集会「岡崎コンファレンス」を年2～3回、合計65回開催し、それぞれの分野で世界トップクラスの研究者を数名招へいし、情報を相互に交換することによって分子科学研究所における研究活動を核にした当該分野の研究を国際的に最高レベルに高める努力をしてきた。これは大学共同利用機関としての重要な活動であり、予算的にも文部省から特別に支えられていた。しかし、1997年以降、COEという考え方が大学共同利用機関以外の国立大学等にも広く適用されることとなり、大学共同利用機関として行う公募型の「岡崎コンファレンス」は、予算的には新しく認定されるようになったCOE各機関がそれぞれ行う独自企画の中規模の国際シンポジウムの予算に切り替わった。これに伴い、分子科学研究所主催で「岡崎 COE コンファレンス」を開催することになった。一方、所外の分子科学研究者は分子科学研究所に申請するのではなく、所属している各 COE 機関から文部省に申請することになった。しかし、「岡崎コンファレンス」では可能であった助手クラスを含む若手研究者からは事実上提案できなくなるなど、各 COE 機関が行う中規模国際研究集会は小規模国際研究集会「岡崎コンファレンス」が果たしてきた役割を発展的に解消するものにはなり得なかった。その後、COEは認定機関だけのものではないなどの考えからいろいろなCOE予算枠が生み出され、その中で国際研究集会は、2004年からの法人化に伴い日本学術振興会において一本化され、全国的に募集・選考が行われることになった。ただし、この枠はシリーズになっている大規模国際会議を日本に誘致したりする際にも申請できるなど、公募内容がかなり異なっている。一方、法人化後、各法人で小～中規模の国際研究集会が独自の判断で開催できるようになり、分子科学研究所が属する自然科学研究機構や総合研究大学院大学でその枠が整備されつつある。ただし、所属している複数の機関がお互い連携して開催するのが主たる目的となっている。

以上のようにこれまでいろいろな動きがある中で、全国の分子科学研究者からの申請を受けて開催する「岡崎コンファレンス」が果たしてきたような役割を引き継ぐものを分子科学研究所は探してきたが、結果的には独自で再開するしか、方法がないということがわかった。そのため、分子科学研究所では小規模国際研究集会「岡崎コンファレンス」を平成18年度から復活すべく、現在、検討を始めているところである。

なお、以下では、2005年に総合研究大学院大学の予算で開催した国際会議を簡単に報告する。

会議名：総合研究大学院大学国際シンポジウム

“Molecule-Based Information Transmission and Reception—Application of Membrane Protein Biofunction—(MB-ITR2005)”

期 間：2005年3月3日～7日

場 所：岡崎コンファレンスセンター

世話人：分子科学研究所 宇理須恆雄

内 容：

生体内の情報伝達においては、脱分極信号、イオンチャンネル電流などの電気信号と神経伝達物質やホルモンなどの分子の信号が巧みに使われて、複雑かつ大容量の信号処理が外部擾乱の影響も殆ど受けずに達成されている。このような情報処理系において、膜タンパク質は信号受信の最も重要なキーパーツであり、これを用いたバイオセンサーを構築することは、電気通信、光通信と並ぶ、分子通信とも言える新しい科学技術領域の開拓の端緒を開くことを意味すると言っても過言ではない。

関連する学術分野は、分子科学のみならず、生命科学、薬学、医学、電子工学と非常にボーダーレスな総合科学技

術領域と言える。本会議は、このような未開の学術領域の開拓においては、関連する多くの学術分野の専門家の間のコミュニケーションを通じたネットワークづくりが分野の発展において重要であるとの観点から開催されたもので、以下の課題について討論をした。

- (A) Basis for membrane-protein, structure, theory, *etc.*
- (B) Construction of membrane-protein system.
- (C) Biophysics and chemistry of membrane-protein system.
- (D) Bio-organic and surface chemistry
- (E) Membrane protein array and applications
- (F) Quantum probes for structure analysis of supported membrane system.
- (G) Molecular recognition reaction and protein-protein interaction.
- (H) Membrane-protein devices.

招待講演者：

内外の研究者約150名が参加し活発な討論がなされた。参加者のうち、招待講演者は、以下の方々である。

Shigetoshi AONO (SOKENDAI/OIIB)	Cindy BERRIE (Univ. Kansas)
Steven G. BOXER (Stanford Univ.)	Stephen D. EVANS (Univ. Leeds)
Takashi FUYUKI (NAIST)	Ning GU (Southeast Univ.)
Hiroo HAMAGUCHI (Univ. Tokyo)	Takao HAMAKUBO (Univ. Tokyo)
Robert J. HAMERS (Univ. Wisconsin-Madison)	Masahiko HARA (Tokyo Inst. Tech.)
Yoshihide HAYASHIZAKI (RIKEN)	Stanislav HUCEK (Univ. South Bohemia)
Takanori ICHIKI (Univ. Tokyo)	Toru IDE (Osaka Univ.)
Kouji IIDA (NMIRI)	Atsushi IKAI (Tokyo Inst. Tech.)
Hisao ISHII (Tohoku Univ.)	Takashi ITO (Univ. Tokyo)
Lars JEUKEN (Univ. Leeds)	Hideki KAMBARA (Central Res. Lab. Hitachi)
Hideki KANDORI (Nagoya Inst. Tech.)	Wolfgang KNOLL (Max Planck Inst.)
Joydeep LAHIRI (Corning Inc.)	Hea Yeon LEE (Osaka Univ.)
Akira MIZUNO (Toyohashi Univ. Tech.)	Iwao OHDOMARI (Waseda Univ.)
Yuko OKAMOTO (SOKENDAI/IMS)	Yasushi OKAMURA (SOKENDAI/OIIB)
Ken RITCHIE (Nagoya Univ.)	Ichio SHIMADA (Univ. Tokyo)
Masao SUGAWARA (Nihon Univ.)	Tadashi.SUGAWARA (Univ. Tokyo)
Mizuki TADA (Univ. Tokyo)	Haruo TAKAHASHI (TOYOTA Central Res. Lab.)
Samuel TERRETTAZ (Swiss Fed. Inst.Tech. Lausanne)	Keiichi TORIMITSU (NTT)
Trevor J. THORNTON (Arizona State Univ.)	Takuya UEDA (Univ. Tokyo)
Yoshio UMEZAWA (Univ. Tokyo)	Kohei.UOSAKI (Hokkaido Univ.)
Costantinos VAROTSIS (Univ. Crete)	Li-Jun WAN (Chinese Academy Sci.)
MasahitoYAMAZAKI (Shizuoka Univ.)	Toshio YANAGIDA (Osaka Univ.)
Shigeo YOSHII (Matsushita Elec.Indust.)	Tatsuo YOSHINOBU (Osaka Univ.)

## 2-14-4 総研大アジア冬の学校

### (1) 総研大岡崎レクチャーズ：アジア冬の学校 2004

総合研究大学院大学の2004年度特定教育研究経費を得て、2004年12月6日(月)～9日(木)に岡崎コンファレンスセンターで、「総研大岡崎レクチャーズ：アジア冬の学校」を開催した。これは、2002年3月に谷村吉隆助教授と北原和夫教授(国際基督教大学)の企画で開かれた「岡崎レクチャー(アジア冬の学校)」と2003年3月に北川禎三教授の企画で開かれた「総研大・岡崎レクチャー」に続くものと言える。国内ばかりでなく、アジアの国々の学生や若手研究者を対象としているので、講義は全て英語で行われたが、今回の特徴は、講師を全て分子研の教員にしたことである。分子科学研究の幅広い分野をカバーしたが、集中講義1件とセミナー8件を用意した。

正式に登録した参加者は合計110名であった。その内訳は、アジア諸国(インド、インドネシア、韓国、シンガポール、タイ、台湾、中国、マレーシアなど)からの大学院生など37名、国内の大学の大学院生など63名、分子研の総研大生10名であった。以下にプログラムを掲載した。

### TIMETABLE

	12月6日(月)	7日(火)	8日(水)	9日(木)
9:30-10:30	L1	L4	L7	森田
10:30-11:00	Coffee Break	Coffee Break	Coffee Break	Coffee Break
11:00-12:00	L2	L5	L8	宇理須
12:00-14:00	Lunch Break	Lunch Break	Lunch Break	End of School
14:00-15:00	L3	L6	L9	
15:00-15:30	Coffee Break	Coffee Break	Coffee Break	
15:30-16:30	多田	岡崎	大森	
16:30-17:30	薬師	岡本(裕)	木下	

### Lectures (L1~L9)

岡本祐幸, "Basics of molecular simulations and protein folding."

### Topical Reviews

宇理須恒雄, "Integration of membrane proteins on the silicon surface and application to a biosensor."

大森賢治, "High-precision quantum processing of molecules."

岡崎進, "Molecular dynamics calculation of vibrational relaxation of solute molecule in solution."

岡本裕巳, "Nanometric wavefunction imaging and dynamics by near-field spectroscopy."

木下一彦, "A rotary molecular motor that works in your body."

多田博一, "Recent progress in molecular-based and molecular-scale electronics."

森田明弘, "Sum frequency generation spectroscopy: theory and application to surface analyses."

薬師久彌, "Infrared and Raman study of a metal-insulator transition in organic conductors."

## (2) 総研大岡崎レクチャーズ：アジア冬の学校 2005

総合研究大学院大学の2005年度特定教育研究経費を得て、2006年2月20日(月)～23日(木)に岡崎コンファレンスセンターで、「総研大岡崎レクチャーズ：アジア冬の学校」を開催した。岡本祐幸名古屋大学教授による昨年度冬の学校の報告にあるように、この企画は2002年から続くものであり、今回で4回目を迎える。本年度もアジア諸国の学生や若手研究者を対象として4日間の講義(全て英語)を行った。今回の特徴は、テーマを分子ダイナミクスに絞り、各先生方の講演時間を多めにとり、集中的かつ深く講義をして頂いた点である。

参加者は合計72名であった。その内訳は、アジア諸国(タイ、大韓民国、台湾など)からの大学院生など14名、国内の大学院生など50名、総研大生8名であった。以下に講義タイトルとプログラムを掲載した。

### Lectures

- 1) Professor Shaul Mukamel (University of California, Irvine, USA)  
Nonlinear Optical Spectroscopy
- 2) Professor Kopin Liu (Institute of Atomic and Molecular Sciences, Taiwan)  
Crossed-Beam Studies of Elementary Reactions

### Topical Reviews

- 1) Professor Fumio Hirata (Institute for Molecular Science)  
Dynamics and Relaxation in Liquid
- 2) Professor Yoshiyasu Matsumoto (Institute for Molecular Science)  
Photo-Induced Surface Dynamics
- 3) Professor Yasuhiro Ohshima (Institute for Molecular Science)  
Intermolecular Interaction Unveiled via Spectroscopic Studies on Gas-Phase Clusters
- 4) Professor Koji Ando (Kyoto University)  
Quantum Transfer Processes in Chemical Many-Body Systems

### TIMETABLE

#### Monday, 20

- 13:20 - 13:30 Opening Remarks Prof. H. Nakamura (IMS Director-General)  
13:30 - 15:30 Prof. S. Mukamel, I  
15:30 - 15:50 Coffee Break  
15:50 - 17:50 Prof. K. Liu, I

#### Tuesday, 21

- 9:00 - 10:10 Prof. Y. Matsumoto  
10:10 - 10:30 Coffee Break  
10:30 - 12:30 Prof. S. Mukamel, II  
12:30 - 14:00 Lunch  
14:00 - 16:00 Prof. K. Liu, II  
16:00 - 16:20 Coffee Break  
16:20 - 17:30 Prof. Y. Ohshima

*Wednesday, 22*

9:00 - 10:10 Prof. F. Hirata  
10:10 - 10:30 Coffee Break  
10:30 - 12:30 Prof. S. Mukamel, III  
12:30 - 14:00 Lunch  
14:00 - 16:00 Prof. K. Liu, III  
16:00 - 16:20 Coffee Break  
16:20 - 17:30 Prof. K. Ando

*Thursday, 23*

9:00 - 10:30 Prof. S. Mukamel, IV  
10:30 - 10:50 Coffee Break  
10:50 - 12:20 Prof. K. Liu, IV

## 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 ~ 95	96	97	98	99	00	01	02	03	04	05
北海道大学	10									1	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	20	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	3	1		1	3	2					
信州大学	2		1				1				
岐阜大学	2										
名古屋大学	58	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	26	4	2	2	1	3	1	1			2
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	3	1									
島根大学								1			
岡山大学	9	1	1				2	2			1
広島大学	31	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	13										
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					9
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							
岡山理科大学											1
計	375	25	27	28	19	27	31	28	26	17	14

## 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。なお、所属研究科は2004年4月より数物科学研究科から物理科学研究科に再編された。

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（2005年12月現在） 単位：人

専攻	教授	助教授	助手
構造分子科学専攻	10	9	19
機能分子科学専攻	9	9	19
計	19	18	38

在籍学生数（2005年12月現在） 単位：人

入学年度専攻	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度	計	定員
構造分子科学専攻	0	7	6	8	21	6
機能分子科学専攻	1	5	5	6	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	2005 (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	3	3	86(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	5(4)	1	71(14)

( ) 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	1989～95	96	97	98	99	2000	2001	2002	2003	2004	2005
構造分子科学専攻	45	10	10	12	5	8	5	3	7	7	8
機能分子科学専攻	46	8	9	7	6	0	7	6	6	6	7

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		
	1989-2003年度	2004年度	2005年度	1989-2003年度	2004年度	2005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		2	1		
インド	1					
チェコ				1		
韓国	2					
ナイジェリア				1		
ネパール		1				
フィリピン						2
ベトナム						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～'03	'04年度	'05年度	'89～'03	'04年度	'05年度	
北海道大学			1	2			3
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			7	1		14
東京農工大学	1						1
東京工業大学				3			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		1				4
三重大学	1						1
京都大学	9			13		1	23
京都工芸繊維大学	1			1			2
大阪大学	5			3	1		9
神戸大学	3						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			2
愛媛大学	2				1	1	4
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	1	7
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		1	2			6
北里大学	1						1
慶應義塾大学	1			4			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			2
明星大学	1					1
早稲田大学	3			4		7
静岡理工科大学					1	1
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
甲南大学			1			1
岡山理科大学				1		1
* その他	16	3	2	10	3	34

\* 外国の大学等

修士生の現職身分別進路（2005年12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	1	1
助教授	7	13
講 師	3	4
助 手	14	13
大学以外の研究職	4	5
博士研究員等	23	19
企業等（研究職等）	10	13
企業等（研究職以外）	7	3

### 2-15-3 オープンハウス

2005年6月4日（土）に第15回分子科学研究所オープンハウスを開催した。これは、全国の大学院生、学部学生および社会人を対象に、総合研究大学院大学の基盤機関としての分子研での教育活動を外部に発信することを目的とし、年に1度開催される分子研見学会である。1月頃から分子研ホームページで告知を始めた。特に今回は、5年一貫制博士課程が構造および機能分子科学の両専攻で導入されるため、学部学生への周知を目的に、平成18年度入学学生募集ポスターにオープンハウスの告知を併記し、広報委員会を通して全国の大学の生協に掲示を依頼した。参加者の内訳は下記の表の通りである。

	学部学生	修士課程	博士課程	その他
北海道・東北（北海道、宮城）	3	1	2	1
関東（東京、神奈川、千葉、茨城、埼玉）	4	17	5	6
信越・北陸（石川）	0	2	0	0
東海（愛知、静岡、岐阜、三重）	21	12	4	7
関西（大阪、京都、兵庫、奈良）	6	8	2	2
中国（広島）	0	1	0	1
四国	0	0	0	0
九州・沖縄（福岡、鹿児島）	0	8	1	1
合計 115名	34	49	14	18

（都道府県名は参加者がいるところのみ記載）

## 2-15-4 夏の体験入学

2005年8月2日（火）から5日（金）の4日間にわたり「夏の体験入学」が開催された。2006年度から始まる大学院5年一貫制に備え、全国の大学の学部生と大学院修士課程学生を対象に、総研大での研究活動を分子研で体験させ、研究所を基盤とする大学院の特色を知る機会を与えることを目的としている。総研大本部から特定教育研究経費として予算の援助を受け、総研大物理科学研究科の主催行事として2004年に始まった。今回は国立天文台、核融合科学研究所、宇宙航空研究開発機構とともに広報活動やアンケート項目の共通化などを図った。しかし実際の研究体験は各研究所で独自に行われた。分子研での参加者の内訳は以下のとおりで、専門は物理・化学・生物・薬学・電気／情報・知能／機械にわたった。

所 属	1年	2年	3年	4年	修1年	修2年	計
室蘭工業大学						1	1
筑波大学				1			1
お茶の水女子大学	1						1
東京工業大学					1		1
東京大学			3				3
東京農業大学	1						1
東京理科大学				1			1
首都大学東京	3		3			1	7
早稲田大学	1		1				2
神奈川大学		2					2
金沢大学						1	1
福井大学		1					1
豊橋技術科学大学			1				1
名古屋工業大学				1			1
立命館大学	1						1
京都大学				1			1
神戸大学				1			1
福岡工業大学		1					1
計	7	4	8	5	1	3	28

研究室での体験については以下の各研究グループが対応した。

魚住教授、宇理須教授、大島教授、大森教授、小川教授、小澤助教授、櫻井助教授、田中教授、江助教授、佃助教授、永瀬教授、永田助教授、菱川助教授、藤井助教授、薬師教授、米満助教授。

## 2-16 財政

### 2-16-1 現員

2005.12.1

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)	2(1)	4	8(2)		8(2)
分子構造研究系		2(2)	1(0)	3	6(2)		6(2)
電子構造研究系		3(1)	0(1)	4	7(2)		7(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)	1(1)	1	2(2)		2(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		2(0)	1(0)	2	5(0)		5(0)
研究施設		5(5)	9(2)	20	34(7)		34(7)
技術課						35	35
計	1	18(11)	17(6)	42	78(17)	35	113(17)
岡崎統合バイオサイエンスセンター		2(1)	1(0)	0	3(1)		3(1)
合計	1	20(12)	18(6)	42	81(18)	35	116(18)

( )内は客員及び委嘱数で外数である。

### 2-16-2 財政

(単位：千円)

科目等 \ 年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度
人件費	1,266,910	1,247,966	1,274,750	1,264,647	1,298,382
運営費, 設備費	2,606,583	3,958,941	2,654,747	2,374,388	2,011,607
施設整備費	18,481	1,378,504	8,027,621	5,577	539,444
合計	3,891,974	6,585,411	11,957,118	3,644,612	3,849,433

\* 2003年度までは岡崎統合事務センター経費が按分として含まれている。

\* 2003年度までは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。

#### 寄付金

区分	1999年度	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度
件数(件)	14	14	16	15	17	14	24
金額(千円)	12,450	18,350	14,950	18,350	15,300	9,257	35,622

共通研究施設を除く

科学研究費補助金

区 分	1999年度	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度
件数 ( 件 )	91	82	82	59	62	59	59
金額 ( 千円 )	493,030	384,803	506,564	434,556	728,415	249,900	240,200

\* 2005年度は2005年12月31日 現在  
岡崎共通研究施設を除く

2005年度科学研究費補助金

2005年12月31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	1	2
特定領域研究		19	2	21
萌芽研究		4	0	4
若手研究	( A )	1	0	1
若手研究	( B )	18	0	18
基盤研究	( S )	1	0	1
基盤研究	( A )	5	0	5
基盤研究	( B )	6	2	8
基盤研究	( C )	3	1	4
特別研究員奨励費		0	2	2
特別研究員奨励費	外国人	1	1	2
合計		59	9	68

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		30,000	55,200	85,200
特定領域研究		78,000	2,800	80,800
萌芽研究		5,800	0	5,800
若手研究	( A )	6,000	0	6,000
若手研究	( B )	25,000	0	25,000
基盤研究	( S )	28,500	0	28,500
基盤研究	( A )	31,200	0	31,200
基盤研究	( B )	31,200	9,000	40,200
基盤研究	( C )	3,300	1,000	4,300
特別研究員奨励費		0	1,100	1,100
特別研究員奨励費	外国人	1,200	2,400	3,600
合計		240,200	71,500	311,700

## 共同研究

(単位：千円)

区 分	1999年度	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度
件数(件)	0	5	6	7	8	13	14
金額(千円)	0	14,240	11,980	17,120	10,590	14,740	33,084

## 受託研究

(上段：件数、下段：金額(単位：千円))

区 分	1999年度	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度
戦略的創造研究推進事業(JST)	0	1	1	5	7	7	10
	0	1,100	7,700	13,000	19,206	21,827	24,115
主要5分野の研究開発委託事業(文科省)	0	0	0	1	2	2	3
	0	0	0	263,000	540,574	916,847	584,312
その他	8	12	5	3	1	6	6
	225,207	199,491	232,625	6,800	4,200	163,792	64,907
合計	8	13	6	9	10	15	19
	225,207	200,591	240,325	282,800	563,980	1,102,466	673,334

## 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。

現在岡崎情報図書館は雑誌1,467種（和283、洋1,184）、単行本91,451冊（和13,145、洋78,306）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5,500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、岡崎情報図書館は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、国内外の学術会議はもとより研究教育活動にかかる各種行事に利用できる岡崎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2,863m<sup>2</sup>、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機関と岡崎南ロータリークラブとの交流事業の一つとして行われているもので、岡崎市内の小・中学校の理科教員を対象として、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	吉原経太郎 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	からだと酸素,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?	正嶋 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? 何ができる?	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	畠田 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できるか?	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
84	2005. 6.28	環境に優しい理想の化学合成	魚住 泰広 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、2005年12月で778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た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。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2005年11月に第59回の東大理学部山内薫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わるので、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
54	2005. 1.25	量子コンピューティングと物性科学	井元信之（大阪大学教授）
55	2005. 2. 2	科学と社会	平田光司 （総合研究大学院大学教授）
56	2005. 3. 2	循環型エネルギー資源の創生を目指した 二酸化炭素の還元反応と有機物の酸化反応の開発	田中晃二（分子科学研究所教授）
57	2005. 7.20	ヒトゲノムを極める	清水信義（慶應義塾大学教授）
58	2005. 9. 7	微量元素と生活習慣病	桜井 弘（京都薬科大学教授）
59	2005.11. 9	強光子場科学の最前線 光をまとった分子の世界	山内 薫（東京大学教授）
60	2005.12.14	フォトリック結晶の現状と将来展望	野田 進（京都大学教授）

### 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 1,500 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
1975年度	赤松 秀雄	化学と文明
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	諸熊 奎治	くらしの中のコンピュータ
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	畠田 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
2005. 9. 9	動物の進化	宇理須恆雄 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) 14:00-16:30	分子科学研究所	魚住 泰広 教授	僕も私も名探偵
11	2005. 5.29(日) 14:00-16:30	山手3号館大会議室	宇理須恆雄 教授	アトム誕生 ナノテクノロジーの世界

### 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17年度も引き続き支援した(分子研レポート2002-2004参照)。分子科学研究所が平成17年度に行った支援活動は以下の通りである。

### 愛知県立岡崎高等学校スーパーサイエンス部活動の支援

テーマ：「三層系を用いた光合成型光反応モデル系の実験」

担当者：永田 央助教授

内容：実験方法に関するアドバイス、疑問点への回答や背景となる化学の解説、発表に関するアドバイス等を行った。

受賞：愛知県学生科学賞「最優秀賞」

### (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
常磐南小	2005. 2. 7	光の不思議	岡本 裕巳 教授
東海中	2006. 2. 8	モルフォ蝶とナノ化粧品秘密	小川 琢治 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 秀幸 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2,000人の見学者が分子研を訪れる。

回数	実施月日	備考
第1回	1979.11.9 (Fri)	創設記念一般公開
第2回	1980.11.15 (Sat)	
第3回	1981.11.14 (Sat)	3研究所同時公開
第4回	1985.5.11 (Sat)	10周年記念一般公開
第5回	1988.11.5 (Sat)	
第6回	1991.10.26 (Sat)	
第7回	1994.11.12 (Sat)	
第8回	1997.11.15 (Sat)	
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 明治大学付属中野中学・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	中部電力(株) 立命館高等学校 ほか
2005	10	317	核融合科学研究所、岐阜県高等学校西濃地区理化教育研究会、東京都立工業高等専門学校、自動車技術会中部支部、名古屋市高年大学鯉城学園OB中川鯉城会、岐阜工業高等専門学校、慶熙大学(Kyung hee University)、音羽町立音羽中学校、福井県立若狭高等学校、岡崎ものづくり推進協議会

## 2-19 安全衛生管理室

安全衛生管理室は、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業務を行うことを目的として、平成16年4月に設置された。安全衛生管理室には、室長、専任及び併任の安全衛生管理者、安全衛生管理担当者、化学物質・放射線・高圧ガス・電気・レーザーなどのそれぞれの分野を担当する作業主任者が置かれている。安全衛生管理者は、少なくとも毎週1回明大寺・山手両地区を巡視し、設備、作業方法又は衛生状態に危険及び有害のおそれがあるときは、直ちに、職員の健康障害を防止するための必要な措置を講じている。また、安全衛生管理室は、分子科学研究所全職員に対する安全衛生教育も行っており、そのための資料作成、各種資格取得の促進、専門家の養成などを行っている。さらに、職場の安全衛生を推進するために必要な、保護具、各種の計測機器、文献・資料、各種情報の集中管理を行い、分子研における安全衛生管理の中心としての活動を行っている。

また、安全生成に必要な情報は、管理室のWEBページ (<http://info.ims.ac.jp/safety/>) に集中しており、必要な規則や書式に即座にアクセス可能である。また、管理室員全員のメールアドレスが入っているメイリングリスト ([safety@ims.ac.jp](mailto:safety@ims.ac.jp)) も設定しており、各種の質問などに機動的に対応できる体制になっている。

## 2-20 広報委員会

ホームページの全面的改訂を行い、5月には一般に公開をした。単に見栄えを変えたのではなく、その構成を大幅に変更した。特に、留意した点としては、まず所内の職員や学生が活用できることを重視した上で、所外への情報発信のプラットフォームとして機能するように工夫した。前者においては、所内でのセミナーなどの一覧を整備することや、後者においては、本研究所での顕著な成果を専門家以外の人にも理解できるように配慮してトピックス（下記リスト参照）として取り上げ、また、人事公募要領を公開して広く候補者を募るなどの努力を行っている。

出版物としては、従来から発行してきた「分子科学研究所要覧」が必要以上に大部になった割には所外への情報発信力が弱いので、これを補うように、新たに「分子科学研究所」という冊子を別に刊行し、本研究所の研究面の取組や運営をより簡潔に紹介するものとした。まだ、不十分な点はあるが、これが従来の要覧に代わるものと位置づけている。その他の出版物である一年間の研究面での活動を伝える英文誌「Annual Review」、研究所の現状・評価・将来計画は「分子研レポート」、学生を対象とした「総研大パンフレット（総合研究大学院大学物理科学研究科構造分子科学専攻/機能分子科学専攻パンフレット）」、上記のものではカバーできない研究所関係者の日常的な事柄については「分子研レターズ」を刊行した。この他にも、総研大の出版物である「総研大ジャーナル」の特集として「光分子科学」の特集の企画・製作に協力した。

本年度は本研究所創立30周年を迎え、広報委員会も30周年記念事業におけるホームページ、パネル作成などを通してこれに寄与すると共に、記念事業の報告集を編纂した。また、岡崎市の依頼により「施設へGo」というシリーズにおける本研究所の紹介番組に全面的に協力し、この作品はケーブルテレビにて放映されている。

この他にも、研究所主催の種々の研究会をできるだけ広く周知するためにポスターを作製・配布し、所員や学生の研究会などでのポスター発表のためのポスター印刷などの手助けも日常業務として行っている。

今後、各種出版物のそれぞれの役割をはっきりさせることにより、整理統合をはかること、また今までほとんどなされてこなかったこれら刊行物の英語版の刊行などを行っていかねばならない。広報に関する組織としては本委員会が行っているが、より効率的に業務を遂行していく集団としての広報室の整備も今後の課題である。

### 採用したトピックス

掲載日	件名
2005. 6.30	光で電子を動かし物性が変わるしくみの理論
2005. 7.11	ス・パ・キャパシタの巨大容量と作動原理をマイクロレベルで解明
2005.11. 2	波形変調パルスによる表面振動コヒーレンスのモード選択励起
2005.12.21	高速な光解離を利用した内殻励起状態及び光電離ダイナミクスの研究
2006. 3.23	量子のさざ波を世界最高精度で観測・制御 大森グループらが成功 【サイエンス、フィジカルレヴューレターズに相次いで発表】

## 2-21 知的財産

分子科学研究所では、外部委員を含めた知的財産委員会を構成し、特許出願、特許権の帰属、利益相反等に関する審議を行っている。

法人化によって知的財産の研究機関による保有が円滑に行われるようになり、独創的な技術や物質開発に対する権利が相応に保証されるシステムが確立してきたことと知的財産権の保有に対する評価が根付いてきたこともあって、研究所に於ける特許申請件数が著しく増加している。内容は、基礎研究から生まれた新しい材料の創成、光学的あるいは電氣的デバイスの開発、さらに、小型大出力セラミックスレーザーの開発関連など多岐にわたっている。この中には、企業との共同出願も含まれている。これらを基にした企業との共同研究も盛んであり、基礎科学の成果が企業を通して社会に還元される道を作っている。平成16年度の特許申請件数は、個人有としたもの3件、機構有としたもの10件（出願10件）であったが、17年度は、個人有2件、機構有15件（実出願13件）であった。審査は、ほぼ毎月行われている。