

## 2．分子科学研究所の概要

### 2-1 研究所の目的

分子科学研究所は、物質の基礎である分子の構造とその機能に関する実験的研究並びに理論的研究を行うとともに、化学と物理学の境界から生命科学にまでまたがる分子科学の研究を推進するための中核として、広く研究者の共同利用に供することを目的として設立された大学共同利用機関である。物質観・自然観の基礎を培う研究機関として、広く物質科学の諸分野に共通の知識と方法論を提供することを意図している。

限られた資源のなかで、生産と消費の上に成り立つ物質文明が健全に保持されるためには、諸物質の機能を深く理解し、その正しい利用をはかるのみでなく、さらに進んで物質循環の原理を取り入れなければならない。生体分子をも含む広範な分子の形成と変化に関する原理、分子と光の相互作用、分子を通じて行われるエネルギー変換の機構等に関する研究は、いずれも物質循環の原理に立つ新しい科学・技術の開発に貢献するものである。

### 2-2 沿革

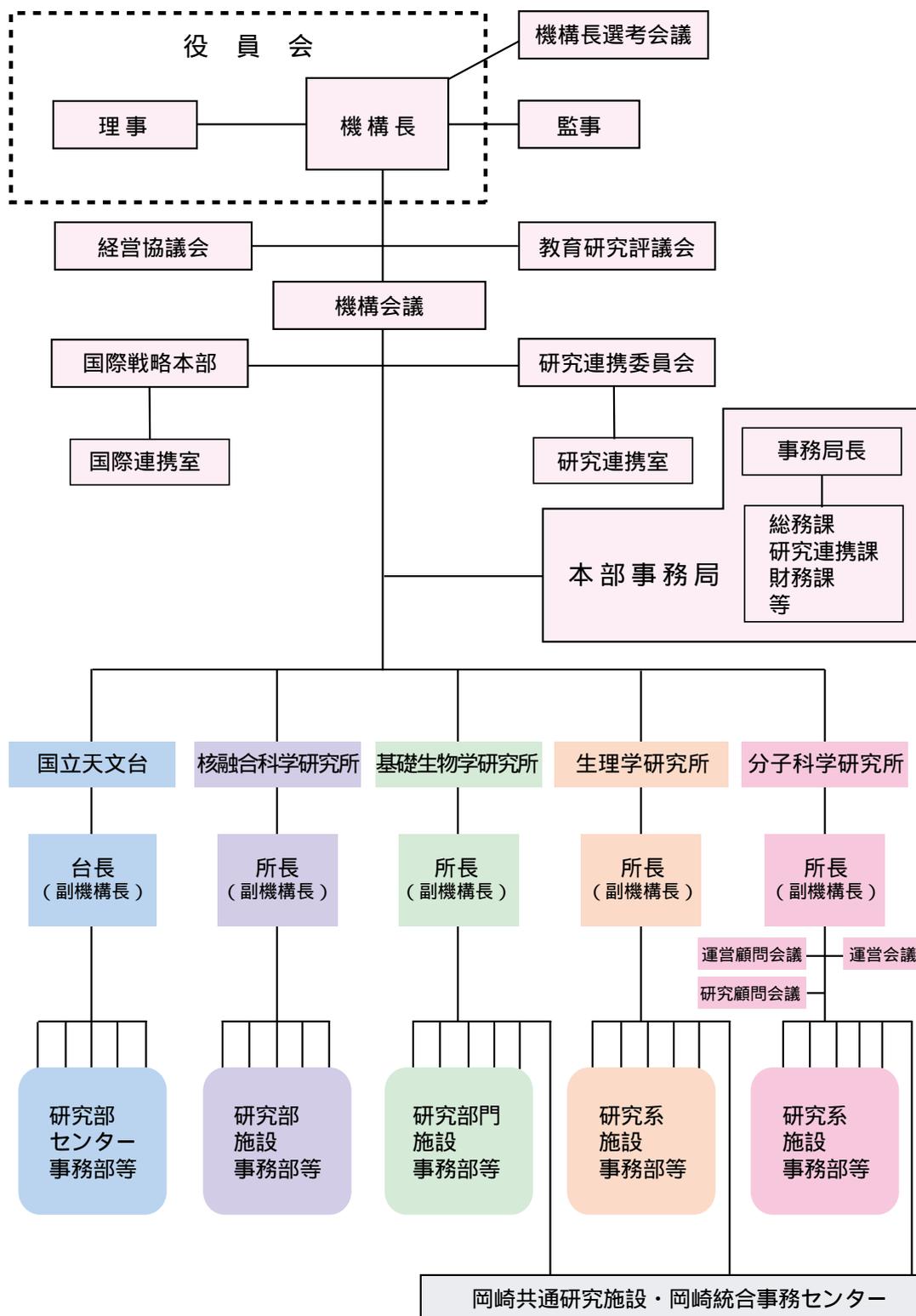
1960年頃から分子科学研究者の間に研究所設立の要望が高まり、社団法人日本化学会の化学研究将来計画委員会においてその検討が進められた。

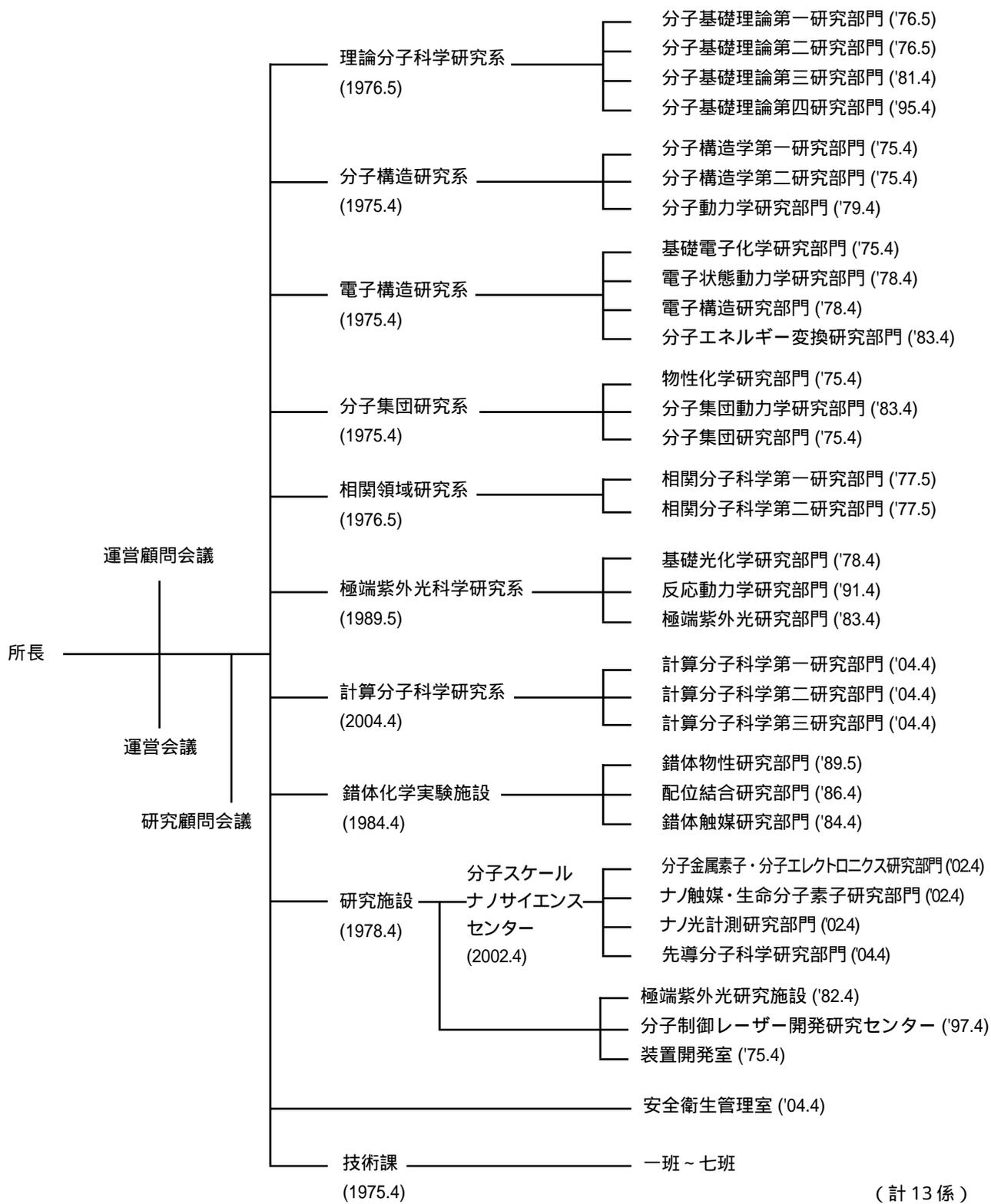
1965. 12.13 日本学術会議は、「分子科学研究所」(仮称)の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
1973. 10.31 学術審議会は「分子科学研究所」(仮称)を緊急に設立することが適当である旨 文部大臣に報告した。
1974. 4.11 文部大臣裁定により、東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室(室長：井口洋夫前東京大学物性研究所教授、定員3名)及び分子科学研究所創設準備会議(座長：山下次郎前東京大学物性研究所長、学識経験者35人により構成)が設置された。
1974. 7. 6 分子科学研究所創設準備会議において、研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
1975. 4.22 国立学校設置法の一部を改正する法律(昭50年法律第27号)により「分子科学研究所」が創設され、初代所長に赤松秀雄前横浜国立大学工学部長が任命された。同時に、分子構造研究系(分子構造学第一研究部門、同第二研究部門)、電子構造研究系(基礎電子化学研究部門)、分子集団研究系(物性化学研究部門、分子集団研究部門)、機器センター、装置開発室、管理部(庶務課、会計課、施設課、技術課)が設置された。
1975. 12.22 外国人評議員の設置が制度化された。
1976. 5.10 理論研究系(分子基礎理論第一研究部門、同第二研究部門) 相関領域研究系(相関分子科学研究部門)、化学試料室が設置された。
1976. 11.30 実験棟第1期工事(5,115 m<sup>2</sup>)が竣工した。
1977. 4.18 相関領域研究系相関分子科学研究部門が廃止され、相関領域研究系(相関分子科学第一研究部門、同第二研究部門)、電子計算機センター、極低温センターが設置された。
1977. 4. 大学院特別研究学生の受入れが始まる。
1977. 5. 2 国立学校設置法の一部を改正する法律により生物科学総合研究機構(基礎生物学研究所、生理学研究所)が設置されたことに伴い、管理部を改組して分子科学研究所管理局とし、生物科学総合研究機構の事務を併せ処理することとなった。管理局に庶務課、人事課、主計課、経理課、建築課、設備課、技術課が置かれた。
1978. 3. 7 分子科学研究所研究棟(2,752 m<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，先端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。

## 2-3 組織\*

大学共同利用機関法人自然科学研究機構





は客員研究部門      は外国人客員研究部門  
 ( ) 書きは設置年月

\* 分子科学研究所の組織は、2007年3月までの組織  
 2007年4月以降の組織については、第5章将来計画及び運営方針を参照のこと

## 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）や運営協議委員会（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 2006.4-2008.3）

加藤 伸一	豊田中央研究所代表取締役
土屋 荘次	城西大学招聘教授，東京大学名誉教授
江崎 信芳	京都大学化学研究所長
野口 宏	中日新聞編集局文化部長

#### 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委員会は消滅した。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 2006.4-2008.3）

阿波賀 邦 夫	名古屋大学物質科学国際研究センター教授
榎 敏 明	東京工業大学大学院理工学研究科教授
加 藤 昌 子	北海道大学大学院理学研究院教授
関 谷 博	九州大学大学院理学研究院教授
田 中 健一郎	広島大学大学院理学研究科教授
寺 嶋 正 秀	京都大学大学院理学研究科教授
中 嶋 敦	慶應義塾大学理工学部教授
藤 田 誠	東京大学大学院工学系研究科教授
前 川 禎 通	東北大学金属材料研究所教授
山 下 晃 一	東京大学大学院工学系研究科教授
宇理須 恆 雄	極端紫外光科学研究系教授
岡 本 裕 巳	分子構造研究系教授
小 川 琢 治	分子スケールナノサイエンスセンター教授
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 研究顧問会議

分子科学研究所では、所長の諮問委員として研究顧問を3名ほど依頼している。研究顧問は、所内の各研究グループによる予算申請ヒアリングに参加し、それぞれについて採点し、所長に報告する。所長は採点結果を参照しつつ各研究グループに配分する研究費を決定する。現在の研究顧問は以下の通りである。

#### 研究顧問（任期 2004.4-2008.3）

廣 田 襄	京都大学名誉教授
近 藤 保	豊田工業大学招聘教授
玉 尾 皓 平	理化学研究所プロジェクトリーダー

### 2-4-4 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（2006年度）

阿波賀 邦夫（名大教授）	岡本 裕巳（分子研教授）
榎 敏明（東工大教授）	田中 晃二（分子研教授）
田中 健一郎（広大教授）	永瀬 茂（分子研教授）
寺嶋 正秀（京大教授）	西 信之（分子研教授）
山下 晃一（東大教授）	松本 吉泰（分子研教授）

#### 2-4-5 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、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。

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（2006年度）

加藤 晃一（名市大教授）	田中 晃二（分子研教授）
加藤 昌子（北大教授）	西 信之（分子研教授）
中原 勝（京大教授）	中村 敏和（分子研助教授）
藤井 正明（東工大教授）	信定 克幸（分子研助教授）
宇理須 恆雄（分子研教授）	見附 孝一郎（分子研助教授）
小林 速男（分子研教授）	

#### 2-4-6 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（2006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（高工ネ機構物構研所長）	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）	

#### 2-4-7 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。

#### 2-4-8 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。

#### 2-4-9 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。

#### 2-4-10 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。

## 2-4-11 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。施設利用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	2007.3.8
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。施設利用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	委員会規則	2006.7.14
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。施設利用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	2006.7.25 2007.2.14
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		2007.1.23
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		なし
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管理及び活用に関する事項。	研究教育職員（所長指名）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	知的財産委員会規則	2006.4.27, 6.2, 7.25, 10.30, 12.5, 2007.3.6
利益相反委員会	研究所構成員の利益相反に関する事項。	所長，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	利益相反委員会規則	2007.3.30

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	2006.4.18, 5.16, 6.20, 7.18, 9.19, 10.17, 11.21, 12.19, 2007.1.16, 2.20
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	2006.5.24, 11.22
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	2007.3.8
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	2006.5.10, 7.5, 9.13, 11.8, 2007.1.10
岡崎3機関スペース・コラボレーション・システム事業委員会	事業計画，事業の運営方法に関すること。他	所長，教授1 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	2007.1.16
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	2006.10.17
岡崎 3 機関動物実験委員会	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	動物実験規程 委員会規則	2007.1.15, 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	2006.5.25 2007.1.30
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	2006.8.28 2007.2.23
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	2006.6.27 2006.11.22
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	2006.6.30
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懇談会	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		2006.6.13
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	なし
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	なし
施設整備委員会	機構の山手地区及び明大寺地区の施設整備に関する事項の立案を行い, 所長会議に報告する。	研究総主幹 教授 1 計算科学研究センター長 技術課長	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	なし

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 構成員\*

中 村 宏 樹	所長
西 信 之	研究總主幹(併)
長 倉 三 郎	特別顧問, 名譽教授
井 口 洋 夫	特別顧問, 名譽教授
伊 藤 光 男	特別顧問, 名譽教授
茅 幸 二	特別顧問, 名譽教授
岩 田 末 廣	名譽教授
岩 村 秀	名譽教授
木 村 克 美	名譽教授
齋 藤 修 二	名譽教授
花 崎 一 郎	名譽教授
廣 田 榮 治	名譽教授
丸 山 有 成	名譽教授
諸 熊 奎 治	名譽教授
吉 原 經太郎	名譽教授
北 川 禎 三	名譽教授

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
大 塚 勇 起	助 手
河東田 道 夫	專門研究職員
SLANINA, Zdenek	專門研究職員
高 木 望	專門研究職員
梶 田 理 恵	專門研究職員
GAO, Xingfa	專門研究職員

#### 分子基礎理論第二研究部門

信 定 克 幸	助教授
安 池 智 一	助 手
久保田 陽 二	專門研究職員

#### 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	專門研究職員
丸 山 豊	專門研究職員
宮 田 竜 彦	專門研究職員
生 田 靖 弘	專門研究職員
KOBRYN, Oleksandr	專門研究職員
米 満 賢 治	助教授
山 下 靖 文	助 手
田 中 康 寛	專門研究職員
前 島 展 也	特別訪問研究員
宮 下 哲	特別訪問研究員

分子基礎理論第四研究部門(客員研究部門)

木 寺 詔 紀            教 授 (横浜市大院国際総合科学)  
佐 藤 啓 文            助 教 授 (京大院工)

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  
西 村 勝 之            助 教 授

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)  
片 山 睦            助 教 授 (理研ゲノム科学総合研究セ)

分子動力学研究部門

横 山 利 彦            教 授  
中 川 剛 志            助 手  
小 澤 岳 昌            助 教 授  
竹 内 雅 宜            助 手  
比 田 直 輝            研 究 員  
MUHAMMAD, Awais    研 究 員

電子構造研究系 研究主幹(併) 西 信 之

基礎電子化学研究部門

西 信 之            教 授  
十 代 健            助 手  
西 條 純 一            助 手  
岡 部 智 絵            研 究 員

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  
須 磨 航 介            学 振 特 別 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)

北 島 正 弘            教 授 (物材機構材料研)  
馬 場 正 昭            助 教 授 (京大院理)

分子エネルギー変換研究部門(外国人客員研究部門)

ALLAKHVERDIEV, Suleyman I. 外国人研究職員(ロシア科学アカデミー基礎生物学研究所 主席研究員)  
'06.10.2 ~ '07.6.30

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

KOWALSKA, Aneta, Aniela 学振外国人特別研究員 '06.10.25 ~ '08.10.24  
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

分子集団動力学研究部門

小 林 速 男 教 授  
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)

相關領域研究系 研究主幹(併) 薬 師 久 彌

相關分子科学第一研究部門

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  
石 塚 智 也 助 手  
HE, Zheng 研 究 員

相關分子科学第二研究部門(客員研究部門)

曾 田 一 雄 教 授 (名大院工)  
前 田 大 光 助 教 授 (立命館大理工)

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  
KIMBERG, Victor 学振外国人特別研究員 '06.8.7 ~ '08.8.6  
菱 川 明 栄 助 教 授  
伏 谷 瑞 穂 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  
MAO, Yanli 研 究 員  
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  
八 木 創 研 究 員  
黄 超 群 研 究 員

極端紫外光研究部門(外国人客員研究部門)

王 文 平 外国人研究職員(合肥工業大学 助教授) '06.4.1 ~ '07.3.31  
DASCALU, Traian, Eugeniu 外国人研究職員(レーザーとプラズマ物理国立研究所 研究主任)  
'06.10.1 ~ '07.2.28

## 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)
WANG, Jianyi	専門研究職員
千葉真人	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
安藤嘉倫	専門研究職員
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)
SOKOLOV, Vladimir	研究員
石山達也	専門研究職員

### 計算分子科学第二研究部門

齊藤真司	教授(計算科学研究センター)
金鋼	助手(計算科学研究センター)
矢ヶ崎琢磨	研究員
小林千草	専門研究職員

### 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
木村将浩	研究員
丹内秀典	研究員
岡村玲	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
赤木史生	研究員
富川友秀	研究員
有井秀和	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)

北川宏	教授(九大院理)
近藤満	助教授(静大理)

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
日 野 貴 美	研 究 員
菅 原 由 隆	研 究 員
多 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
大 江 洋 平	研 究 員
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
杉 原 隆 広	特 別 訪 問 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
中 井 郁 代	専 門 研 究 職 員
佃 達 哉	助 教 授
根 岸 雄 一	助 手
角 山 寛 規	研 究 員
CHAKI, Nirmalya Kumar	研 究 員
七 分 勇 勝	研 究 員
中 尾 聡	専 門 研 究 職 員
柳 本 泰	特 別 協 力 研 究 員

先導分子科学研究部門(客員研究部門)

加 藤 晃 一	教 授(名市大薬)
笹 川 拓 明	助 手

極端紫外光研究施設 施設長(併) 小杉 信 博

加 藤 政 博	教 授
持 箸 晃	助 手
島 田 美 帆	研 究 員
木 村 真 一	助 教 授

伊藤孝寛	助手
櫻井陽子	研究員
BIELAWSKI, Serge	学振外国人招へい研究者 '06.11.28 ~ '06.12.23
隅井良平	特別訪問研究員
IM, Hojun	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 教授(委嘱)(阪大レーザーエネルギー学研究セ)

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
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
大石裕	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(兼)
澤井仁美	研究員
李江	特別協力研究員
桑島邦博	教授(委嘱)(東大院理)
藤井浩	助教授

倉橋拓也 助手(兼)  
關目理人 研究員

生命環境研究領域

當舎武彦 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) 岡崎 進

岡崎 進 教授  
齊藤真司 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)  
金 鋼 助手(兼)  
松田成信 専門研究職員  
篠田恵子 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

技術課 課長 加藤清則

一班(機器開発技術班) 班長 鈴井光一

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(電子機器・ガラス機器開発技術班) 班長 吉田久史

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

主任	手島史綱
技術職員	澤昌孝
技術職員	岩橋建輔

計算科学技術二係

主任	内藤茂樹
----	------

計算科学技術三係

六班（ナノサイエンス技術班） 班長 高山敬史

ナノサイエンス技術一係

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
技術職員	南野智

\* 整理日付は2006年12月1日現在。ただし、外国人研究者で2006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（2007年1月1日現在）

#### 専任研究部門等

区分 \ 職名	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	72	227	149	184
転出者数	5	26	55	188	111	166
現員	1	17(2)	17	39	38	18

( ) は委嘱で外数。

#### 客員研究部門

区分 \ 職名	教授	助教授
就任者数	117	127
現員	9	7

#### 外国人客員研究部門

区分 \ 職名	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	34	29	34	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、更に生体機能との関連等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及び時間分解分光法が用いられる。これらの方法を高感度化、高精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** 1 ,分子及び分子集団の時間的・空間的挙動を通じた物理化学的性質の解明  
2 ,固体高分解能 NMR による生体分子の構造・運動性解析

**研究課題** 1 ,極めて高い空間分解能を持つ先端的分光法による、分子集団の励起ダイナミクス、微粒子系における励起状態と増強電場の研究  
2 ,分子配向を決定するための配向試料用新規固体 NMR 測定法の開発  
3 ,生体脂質膜と相互作用するペプチドの脂質二重膜上での構造・運動性の固体 NMR による解析

### 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 ,タンパク質と RNA の相互作用の解析

**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 ,生体内に多数存在することが明らかになった noncoding RNA の機能解明のため、タンパク質との相互作用に焦点をあて、解析技術の開発を行う

### 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

### 相関分子科学第二研究部門（客員）

研究目的 新しい機能をもつ無機・有機物質の開発研究

研究課題 1 ,熱電素子や触媒機能をもつ遷移金属の化合物・合金・ナノ構造の電子構造・物性相関の研究  
2 ,生体関連分子の特徴を生かした機能性分子の合成，それらの金属錯化挙動やアニオン認識能，光物性などの検証，さらに，分子間相互作用を利用したナノ・マイクロメータースケール超分子組織体の構築

## 極端紫外光科学研究系

研究目的 極端紫外光実験施設のシンクロトロン光源は，軟X線領域から遠赤外光までの広範囲な光を安定に供給している。本研究系では，この放射光源を用いて，放射光分子科学の新分野を発展させる中核としての役割を果たす。特に放射光及び放射光とレーザーの同期などによる気相・液相・固体・固体表面の光化学，ナノ物性，ナノバイオマテリアル創製などを旨とした研究を展開する。

### 基礎光化学研究部門

研究目的 分子及び分子集合体の光化学並びに化学反応素過程の所究

研究課題 1 ,軟X線分光による分子及び分子集合体の光化学・光物性研究  
2 ,レーザー光及び放射光を用いた光化学反応の研究  
3 ,短パルス光による分子ダイナミクスの研究

### 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, 溶媒の量子動力学シミュレーション
  - 2 ,複雑な古典凝集系の分子動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と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動力学計算

#### 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パーの開発
  - 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に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 ,両親媒性レジン担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

#### 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、2006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、先端的装置を駆使し、研究教育職員から依頼された業務をこなす、装置の維持管理を行っている。また、研究教育職員と協力し、施設の運営も行っている。

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

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）、専任助手に加えて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日本で最初である。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にこれ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 實
平成元	分子科学研究所	平成 2 年 3 月 19-20 日	機械、回路、低温、電子計算機、総合技術	2ヶ所で懇談会
平成 2	核融合科学研究所	平成 3 年 3 月 19-20 日	機械、低温、計測制御、電子計算機、装置技術	
平成 3	高エネルギー物理学研究所	平成 4 年 2 月 6-7 日	機械、低温、計測制御、電子計算機、装置技術	
平成 4	分子科学研究所	平成 5 年 3 月 11-12 日	装置 I、装置 II、低温、電子計算機	実行委員長 酒井 楠雄 3 研究機関代表者会議
平成 5	核融合科学研究所	平成 6 年 3 月 23-24 日	機械、低温、計測制御、電子計算機、装置技術	技術部長 村井 勝治 研究所間討論会
平成 6	高エネルギー物理学研究所	平成 7 年 2 月 16-17 日	機械、低温、計測制御、電子計算機、装置技術	技術部長 三国 晃 研究所間討論会
平成 7	分子科学研究所	平成 8 年 3 月 18-19 日	機械、回路、計測制御、電子計算機、化学分析	技術課長 酒井楠雄 研究所間懇談会 化学分析を創設
平成 8	国立天文台・電気通信大学共催	平成 8 年 9 月 19-20 日	計測・制御、装置・回路計算機・データ処理	初めての分散開催
	大阪大学産業科学研究所	平成 8 年 11 月 14-15 日	機器分析	
	名古屋大学理学部	平成 9 年 2 月 6-7 日	装置開発 A,B、ガラス工作	
	北海道大学理学部	平成 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	工学部、情報学部、電子工学研究所 各技術部の共催
	静岡大学	平成 9 年 11 月 27-28 日	機器分析	
平成 10	名古屋工業大学	平成 10 年 11 月 26-27 日	機器・分析	インターネット討論会
	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	
平成 11	東北大学	平成 11 年 11 月 11 日	機器・分析	インターネット技術討論会
	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	
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	技術部長 大竹 勲
	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	岩手大学	平成 17 年 9 月 15-16 日	機器・分析	
	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	技術課長 加藤 清則
平成 18	広島大学	平成 18 年 9 月 14-15 日	安全衛生、計測制御、機器・分析など全分野	
	名古屋大学	平成 19 年 3 月 1-2 日	機械・ガラス工作、装置技術、回路・計測・制御、低温、情報ネットワーク、生物、分析・環境、実験・実習	

## 2-8-2 技術研修

1995 年度より、施設に配属されている技術職員を対象として、他研究所・大学の技術職員を一定期間、分子研の付属施設に受け入れ技術研修を行っている。分子研のような大学共同利用機関では、研究者同士の交流が日常的に行われているが、技術者同士の交流はほとんどなかった。他機関の技術職員と交流が行われれば、組織の活性化、技術の向上が図れるであろうという目的で始めた。この研修は派遣側、受け入れ側ともに好評だった。そこで、一歩進めて、他研究機関に働きかけ、受け入れ研修体制を作っていただいた。そうした働きかけの結果、1996 年度より国立天文台が実施し、1997 年度には高エネルギー加速器研究機構、1998 年度からは核融合科学研究所が受け入れを開始した。法人化後は、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(延)
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
平成 17 年度	6

表3 技術研修受入状況(2006.1.1～12.31)

氏名	所属	受入期間	備考
熊谷 宜久	神戸大学工学部応用化学科	平成18年2月6日	理化学ガラス機器の製作実習
福嶋美津広	国立天文台 先端技術センター	平成18年7月10日-7月14日	装置開発室機械工作研修
福嶋美津広	国立天文台 先端技術センター	平成18年7月18日-7月21日	装置開発室機械工作研修
福嶋美津広	国立天文台 先端技術センター	平成18年8月21日-8月25日	装置開発室機械工作研修
熊谷 宜久	神戸大学工学部応用化学科	平成18年11月20日-11月21日	理化学ガラス実験機器製作研修

表4 研修受講実績(平成18年度)

研修名	開催機関	日程	参加者
平成18年度前期放送大学	愛知学習センター	4/06～9/06	酒井、内山、矢野、澤、上田
平成18年度後期放送大学	愛知学習センター	10/06～3/07	水谷(文)、水谷(伸)、山崎、近藤(直)、岩橋

### 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。(詳細は「2-21 地域社会との交流」を参照)

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。

### 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

法人化後の技術課人事

年月日	事項	配属班	備考
2004年4月1日	採用	機器開発技術班	名古屋大学
2004年4月1日	採用	光計測技術班	東北大学
2004年10月16日	採用(公募選考)	研究・広報技術班	広報
2005年4月1日	採用(公募選考)	ナノサイエンス技術班	
2005年4月1日	採用(公募選考)	ナノサイエンス技術班	
2005年12月	転出	研究・広報技術班	極端紫外光科学研究系助手
2006年2月1日	採用(公募選考)	計算科学技術班	

### 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)
- 鈴井光一 日本化学会化学技術有功賞(2006)

## 2-9 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。英文の安全衛生講習会テキスト、英語字幕の入った講習会 DVD の作成などを行い、外国人研究者への配慮も行っている。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。

## 2-10 広報室

従来から広報委員会の中の実行部隊として活動していた組織を、今年度から広報室と名称を改め、名実とも広報活動の中心組織とした。したがって、広報室が日常的な広報活動や広報に関する企画を行い、広報委員会を必要に応じてこれらに関する意見を聴取し、また、議論する場とすることとした。今年度の広報室のメンバーは、広報室長、広報室長補佐（両方とも教授の兼任）、技術職員、技術支援員の各1名である。

分子研公式ホームページに関しては、昨年度の全面的改訂に引き続き、より見やすい、また、コンテンツの充実を図るべく逐次見直しを行っている。ホームページのアクセス状況の解析も始めたが、今後これをどこまで行い、改訂に結び付けるかは今後の課題である。

出版物としては、昨年度の「分子科学研究所要覧」に代わるパンフレット「分子科学研究所」を更新し2006 - 2007年版として、また、この英語版も刊行した。分子研の英文の出版物はAnnual Reviewのみであり、分子研の概要を英文で要領よくまとめたものとしてはこれが開所以来初めての出版物となる。この他に、「分子研レターズ」を大幅に改訂した。この出版物は、分子科学のコミュニティー誌として昭和51年に誕生したが、最後のリニューアルから7年近くが経過していた。そこで、分子研と分子研OBを含むコミュニティーの研究者との絆をより強くするコミュニティー誌として内容と装丁を改訂した。コンテンツには「OBの今」、「@総研大」などの新たなコンテンツを導入すると共に、立花隆氏と中村宏樹所長の基礎科学についての意見を組み込んだ。装丁は、従来からの単調なデザインを一新し、2色刷り（部分的には4色刷り）を基本としたデザイン性のある紙面とした。

本年度は分子科学研究所の一般公開があり、広報室は「展示班」と「広報班」における業務を担当し、主にポスターなどの製作を行った。「モノのはじまり～ナノの世界へようこそ」のキャッチコピーのもとにポスター、当日配布の案内図、一般公開公式ホームページなどを統一したデザインで作成した。

3月と9月に東京で行われた一般市民を対象とした自然科学研究機構シンポジウムにおいて、展示ブースにおいて広報室がパネルや映像を使って研究所とその研究内容の概要を紹介した。特に、9月は分子科学研究所が主体となったシンポジウムであったため、展示ブースのみならず、シンポジウムの企画にも深く関わった。

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、広報室はますます重要な役割を担うことになる。広報室が単に様々な行事に受身的な業務執行機関としてではなく、より積極的な広報の企画とその実行をする力をつけなくてはならない。また、自然科学研究機構の広報や機構内の他研究所との広報との連携強化も今後の課題である。また、さらに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も必要である。

分子研レターズ 54  
表紙



一般公開ポスター

## 2-11 史料編纂室

分子科学研究所創設30周年記念(平成17年5月)を受けて、分子研に史料編纂室が平成18年1月に設置され、いわゆる「アーカイブズ活動」を始めている。昭和50年代初め国立共同利用研究所の代表として設立された分子研がどのような経緯で創設に至ったか、また「分子科学」がいかなる経緯で発展してきたかなど、最近のアーカイブズの手法に基づいて、多数の貴重な史料を収集、保存、整理を行うことを目的としている。その一環として、全国の分子科学者が一般に閲覧できるような検索機能をもたせることも計画している。

分子研設立に関する史料は、次の三つの時代に分けられる。日本学術会議による分子研設立の勧告(昭和40年)以前の動向、日本学術会議の勧告から準備室に至るまでの期間、分子研創設準備室の時代、分子研創設第一期(十周年に至るまでの期間)などに分類できる。

現在までに本史料編纂室で収集・保存している主な史料は、長倉三郎先生(第2代所長)から最近いただいた史料(約60件、学術会議勧告以前の昭和38年頃から分子研準備室までの期間)、井口洋夫先生(第3代所長)からいただいた史料(約180件、分子研準備室時代および創設期)、岡崎統合事務センター(旧機構管理局)から史料編纂室に移管された写真アルバム(約30冊、分子研件竣工、創設披露宴、十周年記念式典、評議会、一般公開など)、図書館に保管されていた冊子(5件、「分子研設立要望書ならびに設立案」、「分子科学特定研究中間報告」、「分子科学特定研究報告」、「分子科学研究所要項」など)、その他の関連の書類(分子研設立に関する日本学術会議の勧告書、十周年記念誌など、多数)。以下、「長倉史料」と「井口史料」の内容について簡単に紹介する。

### (1) 長倉先生の史料

化学研究将来計画委員会の議事録など(昭和38-40年)  
化学研究将来計画——シンポジウム報告(昭和40年)  
分子研を含む化学系6研究所設立案要旨  
分子科学研究所(仮称)設立要望書ならびに設立案(手書き原稿を含む)  
化学研究連絡委員会の「化学研究第一次5ヵ年計画案」  
分子科学研究所小委員会議事録(昭和40-44年)  
「分子科学」特定研究課題(昭和45年、化学研究連絡委員会の申請書類)  
その他、関連の史料

### (2) 井口先生の史料

分子科学研究所創設準備室時代(昭和49年)の人事関係の書類(選考を含む)および土地、施設の部会議事録(岡田修一氏メモ)。  
準備室の書類(昭和50年、分子研評議会規則など多数)ならびに岡崎への移行および引越の書類(岡田修一氏の記録、主に手書きメモ)。  
昭和51年度の創設協力者会議の書類(創設協力者会議が教授会議に代わって運営に協力。岡田修一氏ファイル)。  
分子研創設期の資料(創設の目的、要望、組織等の記録および発足から2年目にかけての報告など)。  
大学院問題懇談会報告(昭和55年、総合研究大学院大学に発展した大学院構想の恐らく最初の岡崎での懇談会の記録)。  
分子研第1回外国人招聘研究員(招聘期間は3ヶ月以上)の記録および日米協力事業ハワイ会議など。  
その他、関連の史料

## 2-12 共同利用研究

### 2-12-1 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。

### 2-12-2 2006年度の実施状況

#### (1) 課題研究

課 題 名	提案代表者
パルスおよび高周波ESRを用いたスピン科学研究の新しい展開	城西大学理学部 加藤 立久

#### (2) 協力研究

課 題 名 (前期)	代 表 者
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	埼玉大学大学院理工学研究科 坂本 章
表面磁気光学カー効果による表面3元規則合金の磁性の研究	九州大学大学院総合理工学研究院 柘原 浩
遷移金属イオン水和クラスターの光解離分光	広島大学大学院理学研究科 江幡 孝之
気相中における貴金属イオンの配位構造	九州大学大学院理学研究院 大橋 和彦
金属原子・分子気相クラスターイオンの赤外光解離分光	東北大学大学院理学研究科 美津津文典
低振動数ラマン分光法による溶液相クラスターに関する研究	福岡教育大学教育学部 小杉健太郎
フェノールおよびその誘導体の高振動状態ダイナミクスの実時間測定	東京工業大学資源化学研究所 酒井 誠
ベンゼンを含むクラスターのレーザー分光学的研究	東京大学大学院総合文化研究科 住吉 吉英
スピロピランに対す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
dmit塩を始めとする分子性伝導体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法の開発	(独)理化学研究所中央研究所 山本 貴
分子性導体の光誘起相転移の研究	東北大学大学院理学研究科 岩井伸一郎
環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 田中 泰央
ESRによる複核金属内包フラーレンのスピンの状態の研究	首都大学東京都市教養学部 兒玉 健
電界による有機分子薄膜へのキャリア注入と電子状態変化	東京大学大学院新領域創成科学研究科 川合 真紀
原子間顕微鏡を用いた脂質二分子膜の構造・物性評価	(独)産業技術総合研究所関西センター 森垣 憲一
赤外反射吸収分光法による膜タンパク質の極微構造解析	九州大学大学院理学研究院 田中 桂一
神経細胞シナプス機能センシングのためのマイクロ流路構成法の検討	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所 内海 裕一
単一縦モードマイクロチップYAGレーザーを用いた小型is-TPG光源の開発	(独)理化学研究所和光研究所 林 伸一郎
擬位相整合素子による中赤外超短光パルスの発生	東京大学生産技術研究所 志村 努
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
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
バイオ共役ナノシステムに利用するナノ粒子の単分散化とその質量測定	東京大学大学院理学系研究科 米澤 徹
配位交換反応による金属クラスターの選択的大量合成	筑波大学大学院数理物質科学研究科 寺西 利治
テラヘルツコヒーレント放射光の光伝導アンテナを用いた時間領域分光	大阪大学大学院基礎工学研究科 芦田 昌明
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の基礎研究	名古屋大学大学院工学研究科 高嶋 圭史
分子ラジカルの内殻励起分光と崩壊ダイナミクス研究	広島大学大学院理学研究科 和田 真一
三元混晶半導体 AlGaIn の紫外発光効率の励起エネルギー依存性	福井大学遠赤外領域開発研究センター 福井 一俊
軟X線照射によるオゾン分子の解離過程の解明	新潟大学理学部 副島 浩一

リチウム含有酸化物の Li-K 吸収端近傍の電子状態に関する研究	(独)産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
ピーナッツ型ナノカーボンの in situ 高分解能光電子分光研究	東京工業大学原子炉工学研究所	尾上 順
テラヘルツ領域におけるスピネル化合物 NaRh <sub>2</sub> O <sub>4</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
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
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
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	大阪大学大学院理学研究科	青島 貞人
ナノ粒子のレーザー励起による局所的超高温高压反応場の化学	東京大学大学院総合文化研究科	真船 文隆
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
酸素活性種を含む金属錯体の電子状態と反応性相関	金沢大学理学部	鈴木 正樹
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
シトクロム c 翻訳後修飾酵素の構造化学的研究	北海道大学大学院理学研究科	内田 毅
共鳴ラマン分光法を用いたハイパーポルフィリンの電子状態の解析	奈良工業高等専門学校	石丸 裕士
TTP 系分子性導体の合成と構造・物性に関する研究	愛媛大学大学院理工学研究科	御崎 洋二
相互作用点モデル/モード結合理論による溶液緩和の研究	島根大学教育学部	西山 桂
軟 X 線による無透明物質のアブレーション	筑波大学大学院数理解物質科学研究科	牧村 哲也
ヘモシアニン発現系の構築とその分子機構解明	大阪市立大学大学院理学研究科	伊東 忍
ベンゾポルフィリン薄膜の磁気特性的研究	愛媛大学大学院理工学研究科	山田 容子

課 題 名 (後期)

代 表 者

相互作用点モデル/モード結合理論による溶液緩和の研究	島根大学教育学部	西山 桂
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	埼玉大学大学院理工学研究科	坂本 章
表面磁気光学カー効果及び XMCD による表面 3 元規則合金の磁性の研究	九州大学総合理工学研究院	栃原 浩
金属原子-分子気相クラスターイオンの赤外光解離分光	東北大学大学院理学研究科	美津津文典
気相中における貴金属イオンの配位構造	九州大学大学院理学研究院	大橋 和彦
凝縮系物質におけるコヒーレンスの計測と制御	東京工業大学応用セラミックス研究所	中村 一隆
テトラセン薄膜の電子スペクトルの圧力及び剪断応力効果	室蘭工業大学工学部	城谷 一民
量子化学計算に基づく電子構造制御型配位子の開発	立教大学理学部	山中 正浩
屈曲型ドナーに基づく磁性伝導体の微少結晶構造解析と物性解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	藤原 秀紀
単一分子性金属の合成と物性	日本大学文理学部	小林 昭子
電界による有機分子薄膜へのキャリア注入と電子状態変化	東京大学大学院新領域創成科学研究科	川合 真紀
カーボンナノチューブシート上の細胞活性	横浜国立大学大学院工学研究院	荻野 俊郎
イオンチャンネルバイオセンサー用集積回路の設計	徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部	小中 信典
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解物質科学研究科	牧村 哲也
原子間力顕微鏡を用いたパターン化モデル生体膜の構造・物性評価	(独)産業技術総合研究所関西センター	森垣 憲一
量子光学的手法を用いた量子情報処理のための光源開発に関する研究	東京大学大学院工学系研究科	古澤 明
擬似位相整合素子による中赤外超短光パルスの発生	東京大学生産技術研究所	志村 努
ナノシステムに利用する金属ナノ粒子の単分散化とその質量測定	東京大学大学院理学系研究科	米澤 徹
テラヘルツコヒーレント放射光の光伝導アンテナを用いた時間領域分光	大阪大学大学院基礎工学研究科	芦田 昌明
UVSOR-FEL を用いたアミノ酸の合成および不斉分解	横浜国立大学大学院工学研究院	小林 憲正
真空紫外発光測定用真空紫外 CCD 分光器の評価	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
リチウム二次電池用電極内の活物質粒子の深さ方向分析	(独)産業技術総合研究所関西センター	鹿野 昌弘
軟 X 線照射によるオゾン分子の解離過程の解明	新潟大学理学部	副島 浩一
ピーナッツ型ナノカーボンの in situ 高分解能光電子分光研究	東京工業大学原子炉工学研究所	尾上 順
テラヘルツ領域における重い電子系 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
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
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
スピנקロスオーバー錯体を含有した高分子ミクロスフェアの双安定性スピン転移挙動の解明とその応用	滋賀県立大学工学部	鈴木 厚志
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	大阪大学大学院理学研究科	青島 貞人
ナノ粒子のレーザー励起による局所的超高温高压反応場の化学	東京大学大学院総合文化研究科	真船 文隆
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
白金(II)錯体を用いるプロトンと共役した電子移動反応	福島大学共生システム理工学類	大山 大
ヘモシアニン発現系の構築とその分子機構解明	大阪市立大学大学院理学研究科	伊東 忍
シトクロム c 翻訳後修飾酵素の構造化学的研究	北海道大学大学院理学研究院	内田 毅
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

TTP系分子性導体の合成と構造・物性に関する研究  
磁性分子導体の構造と磁気的性質  
分子クラスターの光電子分光

愛媛大学大学院理工学研究科  
東京大学物性研究所  
東京大学大学院理学系研究科

御崎 洋二  
高橋 一志  
長坂 将成

### (3) 研究会

分子科学のフロンティア領域へ  
2006年6月2日(金)～3日(土) 岡崎コンファレンスセンター

6月2日(金)

10:00-10:10 はじめに  
10:10-12:10 セッション1:クールな原子・分子の科学  
13:30-15:30 セッション2:微小重力化学  
16:00-18:00 セッション3:蛋白質と揺らぎ

6月3日(土)

8:45-10:45 セッション4:金属ナノ粒子  
11:15-13:15 セッション5:ディスプレイに役立つ分子たち

若手分子科学研究者のための物理化学  
2006年6月12日(月) 分子科学研究所 研究棟301号室

13:30-13:40 開会の辞  
13:40-14:15 ミクロからマクロへの展開と緩和現象  
14:25-15:00 ラジカル分子の反応と分光の基礎  
15:00-15:35 原子・分子過程論の基礎  
15:45-16:20 分光学の基礎 a la carte  
16:20-16:30 閉会の辞

金属機能中心をもつ高性能分子システムの創成——その構造と機能——  
2006年6月15日(木)～16日(金) 分子科学研究所 山手3号館大会議室

6月15日(木)

10:30-10:40 開会の挨拶、趣旨説明 小寺政人(同志社大工)  
10:40-11:40 座長 小寺政人(同志社大工)  
上野隆史(名大物質国際研) 蛋白質分子システムによる金属機能の制御  
植村卓史(京大院工) 金属錯体ナノ空間内での高分子合成  
13:00-14:00 座長 大場正昭(京大院工)  
今野巧(大阪大院工) 単一の含硫アミノ酸から多彩な金属化合物を創る  
秋根茂久(筑波大化学系) オリゴオキシム多核錯体によるイオン認識とらせん構造の構築  
14:00-15:00 座長 酒井健(九大院理)  
森川全章(九大院工) 水溶性金属錯体によるナノ構造形成とレドックス・発光特性  
竹内正之(九大院工) 超分子化学的手法による共役系高分子の配列制御  
15:10-16:10 座長 田中晃二(分子研錯体)  
松本尚英(熊大理) イミダゾール基を含む多座配位子金属錯体の多用な構造と機能  
栗原正人(山形大理) 配位高分子結晶の表面配位不飽和サイトに注目した機能発現と材料応用  
16:10-17:10 座長 増田秀樹(名工大院工)  
田中晃二(分子研錯体) エネルギー変換を目指したアルコール酸化反応の開発  
田所誠(東京理科大理) 新しい有機アクセプターTANCを用いた配位高分子錯体の構造と性質  
17:20-18:20 座長 松本尚英(熊大理)  
山下正廣(東北大院理) 次世代型高次機能性ナノ金属錯体の科学

6月16日(金)

8:30-9:30 座長 増田秀樹(名工大院工)  
磯辺清(金沢大院理工) 結晶相光応答錯体の反応ダイナミクス  
石谷治(東工大院理工) レニウム錯体を中核とした光機能性分子の構築

9:30-10:30	座長 山下正廣(東北大院理) 増田秀樹(名工大院工) $\mu$ -パーオキシニ核鉄錯体における酸素種のトランス-シス配位の自在制御 古館英樹(金沢大院自然) 酸素活性種を含む鉄錯体の合成と反応性
10:40-11:40	座長 水田 勉(広大院理) 島崎優一(九大先導研) 高原子価金属錯体の構造と反応性 藤井 浩(岡崎統合バイオ) 立体障害を導入した新規サレン錯体による単核非ヘム酵素の構造と機能の研究
11:40-12:40	座長 磯辺 清(金沢大院自然) 王子田彰夫(京大院工) 金属錯体型プローブの生体機能解析への応用 菊池和也(大阪大院工) 金属錯体を応用した生体機能可視化センサー分子
12:40-12:50	閉会の挨拶

New Frontiers of NMR Molecular Science  
2006年7月31日(月) 分子科学研究所 山手3号館大会議室

オーガナイザー: 加藤晃一(分子研/名市大) 魚住泰広(分子研)

7月31日(月)

10:00-10:10	中村宏樹(分子研) Opening remarks
10:10-10:50	北原 亮(理研・播磨) A new paradigm of protein structures by variable pressure NMR 座長 加藤晃一(分子研・名市大)
10:50-11:30	藤田 誠(東京大学) NMR behavior of organic guests enclathrated in a self-assembled coordination host 座長 田中晃二(分子研)
11:30-12:10	Christian Griesinger (Max Planck Institute for Biophysical Chemistry) Parkinson's disease and more: and NMR spectroscopic view 座長 永山國昭(生理研)
13:30-14:10	竹腰清乃理(京都大学) Advantages of high magnetic fields in solids NMR 座長 西村勝之(分子研)
14:10-14:50	阿久津秀雄(大阪大学) Exploring biomolecular science by MAS solid-state NMR 座長 北川禎三(分子研)
15:10-15:50	Anne S. Ulrich (University of Karlsruhe) Solid state NMR of membrane-active peptides 座長 村田道雄(大阪大学)
15:50-16:30	甲斐荘正恒(名古屋大学) Optimal isotope labeling for protein NMR spectroscopy 座長 魚住泰広(分子研)
16:30-16:40	魚住泰広(分子研) Closing remarks

物性分子科学の新展開

2007年3月11日(日)~12日(月) 岡崎コンファレンスセンター

3月11日(日)(1日目)

13:00-13:10	薬師久彌 挨拶
13:10-13:40	加藤礼三 シリコン基板上における分子性導体の微小単結晶成長
13:40-14:10	杉本豊成 屈曲型ドナー分子の $\text{FeX}_4^-$ ( $X = \text{Cl}, \text{Br}$ ) 塩における $\pi$ -d 相互作用
14:10-14:40	山下正廣 Multi-Functional Molecular Nano-Magnets of Advanced Metal Complexes: Photo-Induced Switching Quantum Molecular Magnets and Conducting Single-Molecule Magnets
14:40-15:10	御崎洋二 セレン原子を含む新規 TTP 系分子の合成と分子性導体への展開
15:30-16:00	鹿野田一司 型 ET 塩が挑む物理学の問題
16:00-16:30	宇治進也 BETS 系有機導体研究の進展
16:30-17:00	中村敏和 磁気共鳴測定による一次元電子系 $(\text{TMTTF})_2\text{X}$ 系の低温電子状態考察
17:00-17:30	田島裕之 有機ナノ電子物性——新たなパラダイムへの挑戦——
17:30-18:00	腰原伸也 分子物質科学とレーザー・放射光結合計測技術開発

3月12日(月)(2日目)

9:00-9:30	小島憲道 光・スピン・電荷の相乗効果による動的スピנקロスオーバー現象
9:30-10:00	中村貴義 超分子構造を利用した分子性導体・磁性体の複合化
10:00-10:30	尋田博一 Magneto-resistance of Metal/Organic/Metal Structures: Toward Molecular Spintronics
10:50-11:10	山本 薫 光第二高調波観測による $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2\text{I}_3$ の強誘電性

11:10-11:40	矢持秀起	エチレンジオキシ TTF 誘導体とその錯体
11:40-12:10	山田順一	分子性導体における化学修飾と相転移の発現
特別講演		
13:20-13:55	Lachene Ouahab	Multifunctional Molecular Materials: From "through space" to "through bond" interactions
13:55-14:30	James Brooks	Kobayashi's home run strategy

ヘム代謝に関わる酵素の分子科学  
2007年3月19日(月)~20日(火) 岡崎コンファレンスセンター

3月19日(月)

12:45 ~ 12:50	開会の挨拶、趣旨説明 座長 齋藤 正男	藤井 浩(岡崎統合バイオ)
12:50 ~ 13:20	杉島 正一(久留米大医)	ラット由来ヘムオキシゲナーゼ-1を用いた構造生物学的研究
13:20 ~ 13:50	高橋 聡(大阪大蛋白研)	レーザーラマン錯乱法とX線小角錯乱法によるヘムオキシゲナーゼの研究
13:50 ~ 14:20	野口 正人(久留米大医) 座長 渡辺 芳人	ヘムオキシゲナーゼ反応における電子授受機構——表面プラズモン共鳴およびFMN 欠失 NADPH- シトクロム P450 還元酵素による検討——
14:35 ~ 15:05	海野 昌喜(東北大多元研)	原子レベル分解能でヘム分解反応を“見る”
15:05 ~ 15:35	坂本 寛(九州工大情報工学)	ヘムオキシゲナーゼ反応中間過程の速度論的解析
15:35 ~ 16:05	松井 敏高(東北大多元研)	ヘムオキシゲナーゼにおけるベルドヘムの反応
16:05 ~ 16:35	右田 たい子(山口大農) 座長 野口 正人	高等植物ヘムオキシゲナーゼ-1:ヘム複合体の特性とヘム分解特性
16:50 ~ 17:20	福山 恵一(大阪大理)	ラン藻のヘムオキシゲナーゼと光合成色素合成酵素の構造生物学研究
17:20 ~ 17:50	城 宜嗣(理研播磨)	酵素添加酵素による物質変換の分子科学
17:50 ~ 18:20	林 高史(大阪大工)	ヘムオキシゲナーゼと非天然ヘムとの反応性に関する考察
18:20 ~ 18:50	渡辺 芳人(名古屋大理)	有機金属酵素の創成
19:00 ~	懇親会	

3月20日(火)

	座長 城 宜嗣	
8:30 ~ 8:50	高橋 昭博、藤井 浩 (岡崎統合バイオ)	高原子価ヘム酵素反応中間体の反応選択性
8:50 ~ 9:20	青野 重利(岡崎統合バイオ)	ヘムを活性中心とする気体分子センサータンパク質の構造と機能
9:20 ~ 9:50	中村 寛夫(理研播磨/横市大院)	ジフテリア菌のヘムセンシングの分子基盤
	座長 北川禎三	
10:05 ~ 10:35	岩井 一宏(大阪市大医)	鉄代謝制タンパク質 IRP2 のヘム依存性分解メカニズム
10:35 ~ 11:05	柴原 茂樹(東北大医)	低酸素環境におけるヘムオキシゲナーゼの発現制御
11:05 ~ 11:35	竹谷 茂(京都工繊大応用生物)	ヘム合成と photodynamic therapy
11:35 ~ 12:05	末松 誠(慶応大医) 座長 藤井 浩	網羅的代謝解析によるガス分子を介した情報伝達機構の系統的探索と医学応用
12:15 ~ 12:45	吉田 匡(山形大医)	ヘム分解反応を巡る90年代前半迄の状況について
12:45 ~ 12:50	開会の挨拶	藤井 浩(岡崎統合バイオ)

ホモキラリティーの起源に関する星間科学・分子科学  
2006年11月7日(火)~8日(水) 岡崎コンファレンスセンター

11月7日(火)

13:00-13:10	川口健太郎(岡山大)	開会挨拶 (座長:川口健太郎)
13:10-13:55	小林憲正(横国大)	星間の複雑高分子状有機物とホモキラリティーの起源
13:55-14:40	香内 晃(北大) (座長:唐 健)	分子雲での表面原子反応および光化学反応による有機物の生成
15:00-15:45	中川和道(神戸大)	円偏向アンジュレータを用いたアミノ酸固体の真空紫外・軟X線円二色性測定と不斉反応の実験
15:45-16:30	濱田嘉昭(放送大)	光活性分子のVCDおよびROA測定と解釈

- (座長：福島勝)  
 16:50-17:25 江幡孝之(広大) アミノ酸のコンフォーマー安定性と水和構造  
 17:25-18:00 藤竹正晴(金沢大) キラル分子 - 水錯体のフーリエ変換マイクロ波分光

11月8日(水)

- (座長：平原靖大)  
 9:00-9:45 佐藤修二(名大) 星間および星周放射場における散乱と偏光  
 9:45-10:30 奈良岡浩(岡山大) 隕石有機物の光学活性と同位体  
 (座長：川嶋良章)  
 10:50-11:25 遠藤泰樹(東大) キラルな不安定分子種のマイクロ波分光  
 11:25-12:00 廣田榮治(総研大) 高分解能分光法による分子キラリテの研究2つの例題：イソプロピルアルコールとプロピレンオキシド  
 (座長：金森英人)  
 13:00-13:45 宇理須恒雄(分子研) 膜タンパク構造解析と赤外反射吸収分光  
 13:45-14:00 田中桂一(九大) 光解離反応によるL体 - D体の変換  
 14:00-14:30 山田耕一(産総研) 量子トンネル効果とキラリテ  
 14:30-14:35 大島康裕(分子研) 閉会挨拶

### 高分解能分子分光で見る大振幅振動

2006年11月29日(水)～30日(木) 岡崎コンファレンスセンター

11月29日(水)

- 13:00-13:10 馬場正昭(京大) Baba, Masaaki  
 Opening remark  
 (座長：馬場正昭 Baba, Masaaki)  
 13:10-13:50 Anthony Merer (IAMS & UBC)  
 Large amplitude bending motion in the  $A^1\text{Au}$  state of acetylene  
 13:50-14:15 福島勝(広島市大) Fukushima, Masaru  
 The  $\nu_2$  bending vibrational structure of the  $X^2\Sigma^+$  state of MgNC  
 (座長：笠原俊二 Kasahara, shunji)  
 14:15-14:40 徳江郁雄(新潟大) Tokue, Ikuo  
 Theoretical calculations on vibrational structures of MCN/MNC, (M=Al, Si) and isomerization reactions  
 14:40-15:05 石川春樹(神戸大) Ishikawa, Haruki  
 Large amplitude bending motion of highly vibrationally excited HCP: HCP/CPH isomerization  
 (座長：大島康裕 Ohshima, Yasuhiro)  
 15:35-16:15 Yen-Chu Hsu (IAMS)  
 Laser spectroscopy of  $\text{C}_3$  and its application to the study of  $\text{C}_3$ -rare gas complexes  
 16:15-16:40 遠藤泰樹(東大) Endo, Yasuki  
 Large amplitude motions of free radicals complexes  
 (座長：須磨航介 Suma, Kohsuke)  
 16:40-17:05 原田賢介(九大) Harada, Kensuke  
 Millimeter-wave Spectroscopy of the Intermolecular Stretching and Internal Rotation Bands of the He-HCN Complex  
 17:05-17:30 川嶋良章(神奈川工大) Kawashima, Yoshiyuki  
 Fourier transform microwave spectra of  $\text{N}_2$ -dimethyl ether  
 17:30-17:55 廣田榮治(総研大) Hirota, Eizi  
 Rotational spectra of molecular complexes: their significance in clarifying intermolecular potential

11月30日(木)

- (座長：遠藤泰樹 Endo, Yasuki)  
 9:00-9:40 Jon T. Hougen (NIST)  
 Some ab initio questions and answers concerning methanol vibrations during the internal rotation motion  
 9:40-10:05 田中桂一(九大) Tanaka, Keiichi  
 Proton tunneling of the vinyl radical observed by millimeter-wave spectroscopy  
 (座長：長谷川宗良 Hasegawa, Hirokazu)  
 10:35-11:00 市村禎二郎(東工大) Ichimura, Teijiro  
 Large amplitude vibrational motions of some benzene derivatives  
 11:00-11:25 関谷博(九大) Sekiya, Hiroshi  
 Spectroscopic studies on internal rotation of the methyl group and proton transfer in aromatic molecules in the gas phase  
 11:25-11:50 奥山克彦(日大) Okuyama, Katsuhiko  
 Two-dimensional Franck-Condon analysis of the large-amplitude motions of bicyclic compounds

- (座長：大島康裕 Ohshima, Yasuhiro)
- 13:10-13:35 大橋信喜美 (金沢大) Ohashi, Nobukimi  
FTMW spectroscopy of N,N-dimethylacetamide and its internal rotation problem
- 13:35-14:00 大島康裕 (分子研) Ohshima, Yasuhiro  
Methyl internal-rotation wavepackets probed by femtosecond time-resolved spectroscopy
- 14:00-14:25 馬場正昭 (京大) Baba, Masaaki  
CH<sub>3</sub> internal rotation levels in methylantracene
- 14:25-14:40 伏谷瑞穂 (分子研) Fushitani, Mizuho  
Reaction Imaging with 9 fs Intense Laser Pulses: Direct Observation of Ultrafast Hydrogen Migration in Acetylene Di-Cation
- 14:40-14:45 大島康裕 (分子研) Ohshima, Yasuhiro  
Closing remark

無機 - 有機複合体のナノ構造制御による機能・物性発現  
2007年3月14日(水)～15日(木) 分子科学研究所 山手3号館大会議室

3月14日(水)(1日目)

- 12:30-12:40 開会の挨拶、趣旨説明 大場正昭(京都大院工)
- 12:40-13:10 講演1 竹延大志(東北大金材研)
- 13:10-13:40 講演2 川俣 純(山口大理)
- 13:40-14:10 講演3 崔 亨波(分子研)
- 14:30-15:00 講演4 速水真也(広島大院理)
- 15:00-15:30 講演5 中 健介(京都大院工)
- 15:30-16:20 講演特1 山元公寿(慶應大理工)
- 16:40-17:10 講演6 酒井 健(九州大院理)
- 17:10-18:00 講演特2 田中 晃二(分子研錯体)

3月15日(木)(2日目)

- 9:00-9:30 講演7 大場正昭(京都大院工)
- 9:30-10:00 講演8 満身 稔(兵庫県大理)
- 10:00-10:30 講演9 久米晶子(東京大院理)
- 10:30-11:00 講演10 長谷川美貴(青山学院大理工)
- 11:20-11:50 講演11 鳶越 恒(九州大院工)
- 11:50-12:40 講演特3 南部宏暢(太陽化学(株))
- 12:40-12:50 閉会の挨拶

和周波分光で拓く分子科学の新展開  
2006年12月5日(火)～6日(水) 岡崎コンファレンスセンター

12月5日(火)

チュートリアル

- 10:30-11:30 森田明弘(分子研) 「界面 SFG の理論」  
界面での和周波発生(SFG)の理論的背景を、大学院生レベルを対象に解説する。特に分子レベルの界面構造情報と和周波シグナルの関係についての基礎的な理解を与える。
- 11:30-12:30 大江昌人(JST、日立) 「SFG スペクトロスコピーの基礎」  
Sum-frequency generation (SFG) spectroscopy の実験、解釈、解析について、その実際を大学院生レベルを対象に解説する。スペクトルの解釈や解析に必要な基礎を解説し、いくつかの研究例を通して理解を深める。

研究会

- 14:00-14:45 M. Himmelhaus (Univ. Heidelberg)  
An Approach to Real-Time Time-Resolved Sum Frequency Generation Using Broadband Femtosecond Laser Source
- 14:45-15:15 H. Onishi (Kobe Univ.)  
Fourth-order Raman spectroscopy in a time domain
- 15:30-16:00 S. Ye (Hokkaido Univ.)  
Molecular Structures on the Organic Thin Film Interfaces Studied by SFG Vibrational Spectroscopy
- 16:00-16:30 T. Miyamae (AIST)  
Sum frequency generation vibrational spectroscopy studies of water-soluble polymers and related interfaces
- 16:30-16:50 H. Sano (JAIST)  
SFG study of effect of polymer adsorption on water structure at the quartz/water interface
- 17:00-17:30 J. Kubota (Tokyo Inst. Tech.)  
Dynamics of surface molecules under the irradiation with NIR pulses probed by time-resolved SFG spectroscopy
- 17:30-18:00 Y. Matsumoto (IMS)  
Ultrafast vibrational relaxation and energy transfer at ice/CO/metal interfaces

12月6日(水)

- 9:00-11:00 Y. R. Shen (UC Berkeley)  
TBA
- 11:15-11:45 M. Hayashi (National Taiwan Univ.)  
Quantum chemistry study of SFG chiral responses
- 11:45-12:15 A. Morita (IMS)  
Computational SFG analysis of aqueous interfaces
- 13:45-14:30 T. Tahara (Riken)  
Electronic Spectroscopy at Liquid Interfaces
- 14:30-15:00 T. Ishibashi (Hiroshima Univ.)  
Doubly resonant SFG spectroscopy of organic monolayers on metal substrates
- 15:15-15:45 H. Noguchi (Hokkaido Univ.)  
Electrochemical interfaces investigated by sum frequency generation spectroscopy
- 15:45-16:15 K. Ito (Waseda Univ.)  
Sum Frequency Generation Spectroscopic Study on Photo-induced Transition of a Poly(vinyl alcohol) Containing Azobenzene Side Chains at the Air-water Interface
- 16:15-16:45 Y. Ouchi (Nagoya Univ.)  
MAES and IV-SFG studies on the air/ionic-liquid interface

ナノクラスター・ナノ粒子科学の深化——物性、反応性、構造とダイナミクス  
2007年3月19日(月)～20日(火) 分子科学研究所 研究棟201号室

3月19日(月)

座長 根岸雄一

- 13:10-13:50 配位・吸着を利用した金属ナノ粒子の構造および配列制御  
(北陸先端大) 三宅幹夫
- 13:50-14:30 ゼオライト中の配列アルカリ金属クラスターと種々の磁気相転移  
(大阪大院理) 野末泰夫
- 14:30-15:10 カーボンナノチューブ内の水：アイスナノチューブと交換転移  
(首都大学東京) 真庭 豊

座長 十代健

- 15:30-16:10 金ナノ粒子の単一電子計測とエレクトロンシャトル素子  
(東工大院理工) 真島 豊
- 16:10-16:50 金属クラスターの溶媒和構造と溶解過程  
(神戸大理) 富宅喜代一
- 16:50-17:30 アルゴンクラスターの蒸発ダイナミクスと統計論  
(東大院総合文化) 藤井幹也

3月20日(火)

座長 宮島 謙

- 9:00-9:40 巨大分子クラスターの光電子分光：協同効果による電子・幾何構造転移  
(慶応大理工) 三井正明
- 9:40-10:20 カーボンナノ構造の成長機構と選択的作成  
(首都大学東京) 阿知波洋次

- 10:40-11:20 移動度分析法によって異性体分離されたクラスターイオンの分光と動力学  
(東北大院理) 美斎津文典
- 11:20-12:00 シリコン表面に担持された単一サイズ白金クラスターの幾何構造と電子構造  
(豊田工業大クラスター研究室) 安松久登

座長 三井正明

- 13:00-13:40 ポリマー保護金クラスターの空気酸化触媒作用：サイズ効果と反応機構  
(分子研) 角山寛規
- 13:40-14:20 貴金属クラスターの電子状態とその特性に関する理論的研究  
(大阪大院理) 奥村光隆
- 14:40-15:20 金属ナノ粒子の気相熱処理による構造形態制御  
(産総研ナノテクノロジー研究部門) 古賀健司
- 15:20-16:00 有機ナノ結晶の分光特性：大きな粒子のサイズ効果  
(大阪大院工) 朝日 剛

生体機能理解の基礎としての複雑分子系の階層構造的分子間相互作用  
2006年12月21日(木)～22日(金) 岡崎コンファレンスセンター

12月21日(木)(1日目)

- 13:20-13:30 Opening Remarks (理研) 田原太平
- 分子高次系セッション
- 13:30-14:00 (九大院理) 関谷博・迫田憲治・河本裕介・石川渉・井上尚子  
孤立気相中の水素結合クラスター内多重プロトン/水素原子移動  
～気相と凝縮相の反応メカニズムの違いの解明を目指して～
- 14:00-14:30 (神戸大) 富宅喜代一・石川春樹  
気相クラスターイオンの温度可変分光解析装置の開発と生体分子への応用
- 14:30-15:00 (阪大院工) 鈴木幸子・粟津邦男・佐藤出  
赤外レーザーによるタンパク質イオン化と波長依存性
- 15:00-15:30 (東工大資源研/統合院) 藤井正明  
励起状態水素原子移動反応と生体機能ビルディングブロックの光化学安定性

複合高次系セッション

- 15:50-16:20 (理研) 田原太平  
界面研究のための新しい非線形分光
- 16:20-16:50 (広大院理) 石橋孝章・前田俊樹・永原哲彦・相田美砂子  
有機単分子膜の電子振動二重共鳴和周波分光
- 16:50-17:20 (首都大東京) 藤野竜也  
ポリアクリルアミド系高分子ナノ微粒子の溶媒和ダイナミクス測定
- 17:20-17:50 (分子研) 森田明弘・石山達也  
溶液界面解析のための和周波分光の理論

12月22日(金)(2日目)

- 9:00-9:30 (神戸大) 大西 洋  
走査プローブ顕微鏡による界面物性計測
- 9:30-10:00 (東大院) 岩田耕一  
複雑系部分秩序の動力学
- 生体高次系セッション
- 10:00-10:30 (阪大院理) 水谷泰久  
機能を生み出すタンパク質の構造変化
- 10:30-11:00 (京大院理) 熊崎茂一・長谷川慎・Mohammad Ghoneim・西山雅祥・寺嶋正秀・岡本憲二・大岡宏造・椎名隆  
3次元顕微分光画像で理解する葉緑体とシアノバクテリアの光合成膜の環境応答
- 11:15-11:45 (東工大院理工) 松下道雄・藤芳 暁  
液体ヘリウム温度における光合成アンテナ複合体の単一分子分光
- 11:45-12:15 (東大院理) 加納英明・浜口宏夫  
スーパーコンティニューム光による分子バイオイメージング
- 12:15-12:45 (名大院工) 神取秀樹・古谷祐詞  
1個の水分子が光駆動プロトンポンプ機能を決める？
- 12:45-12:50 Closing Remarks (東工大) 藤井正明

## 真空紫外域発光の探索

2006年11月17日(金)～18日(土) 岡崎コンファレンスセンター

11月17日(金) 座長：吉川 彰

- 13:30-13:45 開会の挨拶(真空紫外発光の探索)  
伊藤 稔(信州大学工学部)
- 13:45-14:25 UVSORでのUV/VUV発光測定  
福井一俊(福井大学遠赤外領域開発研究センター)
- 14:25-15:05 高平均出力レーザー励起EUV光源の動向  
小森 浩(EUVA)
- 15:20-16:00 沃素イオンをドープしたアルカリ塩化物における深紫外発光  
秋元郁子(和歌山大学システム工学部)
- 16:00-16:40 Ti酸化物の(軟)X線発光  
手塚泰久(弘前大学理工学部)
- 16:40-17:20 内殻励起が引起す凝縮相中の超高速緩和ダイナミクス：局在化と非局在化の相克  
田中 智(大阪府立大学理学部)

11月18日(土)

- 9:30-10:10 アモルファスUVU透明材料  
梶原浩一(科学技術振興機構ERATO-SORST細野プロジェクト)
- 10:10-10:50 VUV発光材料としてのフッ化物単結晶の作製  
吉川 彰(東北大学多元物質科学研究所)
- 10:50-11:30 ナノストリップガスカウンタの開発とVUV領域への応用について  
高橋浩之(東京大学大学院工学系研究科)
- 13:00-13:40 極端真空紫外光励起による電子遷移現象を利用した物性評価  
太田雅壽(新潟大学工学部)
- 13:40-14:20 軸方向放電励起紫外・真空紫外レーザーと希ガスダイマーレーザーの可能性  
實野孝久(大阪大学レーザーエネルギー学研究中心)
- 14:20-15:00 VUV発光材料の可能性  
猿倉信彦(大阪大学レーザーエネルギー学研究中心)
- 15:00-15:10 研究会総括  
伊藤 稔(信州大学工学部)

### (4) UVSOR 施設利用

(前期)

X線照射誘起発行及びXAFSを利用したセラミックス欠陥種の状態解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
XANESによる水熱合成ゼオライト修飾触媒の活性点構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
高出力型リチウム二次電池の正極表面近傍の電子状態の検討	(独)産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
窒化物半導体のAl-K内殻励起による可視・紫外発光4	金沢大学大学院自然科学研究科	直江 俊一
改良型タルサイト粘土のSiとAl局所構造解明	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
モリブデン酸塩結晶における自己束縛励起子発光の時間分解測定	信州大学工学部	伊藤 稔
ワイドバンドギャップを有する無機・有機絶縁材料の吸収・発光および寿命測定	早稲田大学理工学術院	大木 義路
極端紫外光照射による無機蛍光体の励起現象(3)	新潟大学工学部	太田 雅壽
希土類イオンを添加したイオン結晶の真空紫外分光	岐阜大学工学部	山家 光男
青色蛍光体BAM:Euの極低温下での励起発光特性	関西学院大学理工学部	小笠原一禎
真空紫外光励起フッ化物蛍光体の発光・励起スペクトル	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
誘電体結晶中のTi <sup>+</sup> 型不純物センターの真空紫外領域の光学特性の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
アモルファス半導体の光誘起現象に関する研究	岐阜大学工学部	林 浩司
水星探査衛星搭載用検出器の開発	東京大学大学院理学系研究科	吉川 一朗
アミノ酸の光学吸収における振動子強度総和則の検証	神戸大学発達科学部	中川 和道
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
Fe基ホイスラー型合金およびバルク金属ガラスの価電子帯電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
強相関電子系の3次元角度分解光電子分光：相転移に伴う電子状態変化の直接観測	分子科学研究所	伊藤 孝寛
BL5Uにおけるユーザータイム前調整および整備作業	東北大学多元物質科学研究所	江島 丈雄
定在波電子分光を用いた磁性多層膜界面の電子状態	分子科学研究所	木村 真一
Angle-resolved photoemission on CeCoGe <sub>3-x</sub> Si <sub>x</sub> (x=1,1.2,3)	神戸大学工学部	田中 章順
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II	分子科学研究所	木村 真一
強相関半導体のエネルギーギャップの圧力依存性	分子科学研究所	

BL6B の整備	分子科学研究所	木村 真一
超イオン導電体におけるコヒーレントイオン伝導の研究	東北学院大学工学部	淡野 照義
赤外反射吸収分光法による有機 / 金属界面の研究	分子科学研究所	櫻井 陽子
テルルクラスターの相転移	富山大学理学部	池本 弘之
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
YPO <sub>4</sub> 系新規蛍光体の真空紫外分光	福井工業高等専門学校	北浦 守
反応性スパッタリング法により作製した酸化物薄膜の VUV 吸収スペクトルの測定	明治大学理工学部	松本 節子
複合フッ化物結晶の真空紫外発光・吸収測定	分子科学研究所	小野 晋吾
窒化物半導体系紫外線受光素子の受光特性研究	三重大学大学院工学研究科	元垣内敦司
AlN 及び AlGa <sub>N</sub> の発光励起と時間分解測定 ( III )	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
アミノ酸蒸着膜の真空紫外吸収スペクトル ( 5 )	神戸大学発達科学部	中川 和道
NaRh <sub>2</sub> O <sub>4</sub> および CaRh <sub>2</sub> O <sub>4</sub> 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
炭素系薄膜の局所構造解析	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所	神田 一浩
高出力型リチウム二次電池の正極表面近傍の電子状態の検討	( 独 ) 産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
フラーレン類の光電子分光	愛媛大学大学院理工学研究科	日野 照純
有機分子ドーピングによる導電性高分子の電子状態変化の観測	島根大学総合科学研究支援センター	田中 仙君
紫外光電子分光によるイオン液体の電子構造	( 財 ) 佐賀県地域産業支援センター九州シンクロトロン光研究センター	吉村 大介
シリコン - 炭素共有結合性有機単分子膜の膜構造、および電子構造の研究	名古屋大学大学院理学研究科	金井 要
角度分解紫外光電子分光法による F4-TCNQ 分子超薄膜の分子配向評価	千葉大学工学部	奥平 幸司
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
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 ( 2 )	千葉大学工学部	上野 信雄
高配向有機薄膜からの光電子放出強度角度依存性とその散乱因子	千葉大学大学院自然科学研究科	解良 聡
電子・イオン多重同時計測装置の開発と同時計測実験 ( 1 )	分子科学研究所	彦坂 泰正
電子・イオン多重同時計測装置の開発と同時計測実験 ( 2 )	分子科学研究所	繁政 英治
電子・イオン多重同時計測装置の開発と同時計測実験 ( 3 )	分子科学研究所	金安 達夫
XAFS 測定によるアルミニウム錯体の局所構造解析	福岡大学理学部	栗原 敏
極紫外用分光器の光学素子および蛍光体の校正実験	大阪大学大学院工学研究科	田中 和夫
TiO <sub>2</sub> 中に注入された窒素種の局所構造解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
( 後期 )		
X 線照射誘起発光及び XAFS を利用したセラミックス欠陥種の状態解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
XANES による水熱合成ゼオライト修飾触媒の活性点構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
高出力型リチウム二次電池の正極表面近傍の電子状態の検討	( 独 ) 産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
窒化物半導体の Al-K 内殻励起による可視・紫外発光 4	金沢大学大学院自然科学研究科	直江 俊一
改良型タルサイト粘土の Si と Al 局所構造解明	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
モリブデン酸塩結晶における自己束縛励起子発光の時間分解測定	信州大学工学部	伊藤 稔
ワイドバンドギャップを有する無機・有機絶縁材料の吸収・発光および寿命測定	早稲田大学理工学術院	大木 義路
極端紫外光照射による無機蛍光体の励起現象 ( 3 )	新潟大学工学部	太田 雅壽
希土類イオンを添加したイオン結晶の真空紫外分光	岐阜大学工学部	山家 光男
真空紫外光励起フッ化物蛍光体の発光・励起スペクトル	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
誘電体結晶中の TI+ 型不純物センターの真空紫外領域の光学特性の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
アモルファス半導体の光誘起現象に関する研究	岐阜大学工学部	林 浩司
水星探査衛星搭載用 検出器の開発	東京大学大学院理学系研究科	吉川 一朗
アミノ酸の光学吸収における振動子強度総和則の検証	神戸大学発達科学部	中川 和道
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
Fe 基ホイスラー型合金およびバルク金属ガラスの価電子帯電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
強相関電子系の 3 次元角度分解光電子分光 : 相転移に伴う電子状態変化の直接観測	分子科学研究所	伊藤 孝寛
BL5U 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
定在波電子分光を用いた磁性多層膜界面の電子状態	東北大学多元物質科学研究所	江島 丈雄
Angle-resolved photoemission on CeCoGe <sub>3-x</sub> Si <sub>x</sub> ( x = 1,1.2,3 )	分子科学研究所	木村 真一
dend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 II	神戸大学工学部	田中 章順
強相関半導体のエネルギーギャップの圧力依存性	分子科学研究所	木村 真一
BL6B の整備	分子科学研究所	木村 真一
超イオン導電体におけるコヒーレントイオン伝導の研究	東北学院大学工学部	淡野 照義

テルルクラスターの相転移	富山大学理学部	池本 弘之
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
複合フッ化物結晶の真空紫外発光・吸収測定	分子科学研究所	小野 晋吾
窒化物半導体系紫外線受光素子の受光特性研究	三重大学大学院工学研究科	元垣内 敦司
AlN 及び AlGaIn の発光励起と時間分解測定 (III)	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
アミノ酸蒸着膜の真空紫外吸収スペクトル (5)	神戸大学発達科学部	中川 和道
NaRh <sub>2</sub> O <sub>4</sub> および CaRh <sub>2</sub> O <sub>4</sub> 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
炭素系薄膜の局所構造解析	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所	神田 一浩
高出力型リチウム二次電池の正極表面近傍の電子状態の検討	(独) 産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
フラーレン類の光電子分光	愛媛大学大学院理工学研究科	日野 照純
有機分子ドーピングによる導電性高分子の電子状態変化の観測	島根大学総合科学研究支援センター	田中 仙君
紫外光電子分光によるイオン液体の電子構造	(財) 佐賀県地域産業支援センター九州 シンクロトロン光研究センター	吉村 大介
シリコン・炭素共有結合性有機単分子膜の膜構造、および電子構造の研究	名古屋大学大学院理学研究科	金井 要
角度分解紫外光電子分光法による F4-TCNQ 分子超薄膜の分子配向評価	千葉大学工学部	奥平 幸司
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
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 (2)	千葉大学工学部	上野 信雄
高配向有機薄膜からの光電子放出強度角度依存性とその散乱因子	千葉大学大学院自然科学研究科	解良 聡
XAFS 法による金属ナフタロシアニン錯体の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
水熱固化されたメソポーラスシリカバルク体の局所構造解析	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
LiYF <sub>4</sub> 単結晶中の希土類イオンの吸収スペクトル	関西学院大学理工学部	小笠原一 禎
軌道秩序を示すペロブスカイト型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
水溶液表面での光イオン化	九州大学大学院総合理工学府	原田 明
真空紫外励起による YPO <sub>4</sub> および置換型化合物の発光分光	福井工業高等専門学校	北浦 守
2次元電気伝導性材料における巨大熱電能発現機構の解明	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
金属・有機分子界面の光電子分光測定	名古屋大学大学院工学研究科	柚原 淳司
蛋白質のテラヘルツ領域での吸収スペクトル測定	関西医科大学	木原 裕
赤外反射吸収分光法による有機/金属界面の研究	分子科学研究所	櫻井 陽子
反応性スパッタリング法により作製した酸化物薄膜の VUV スペクトルの測定	明治大学理工学部	松本 節子
FEL と放射光による 2光子イオン化実験のための予備実験	分子科学研究所	彦坂 泰正
強相関物質の VUV 反射スペクトル	神戸大学大学院自然科学研究科	岡村 英一
XAFS 法を用いたリチウム錯体およびリチウム化合物の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
電子ビームによる OPERA film の性能評価	名古屋大学大学院理学研究科	星野 香
UVSOR BL8B2 ビームライン及び末端装置の調整	分子科学研究所	木村 真一
TiO <sub>2</sub> 中に注入された窒素種の局所構造解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
層状構造を有する Li 二次電池用正極材料の表面化学状態観察	関西大学工学部	荒地 良典
AlN 及び AlGaIn の時間分解測定	福井大学遠赤外領域研究センター	福井 一俊

## (5) 施設利用

### 分子制御レーザー開発研究センター

#### (前期)

Attachment of heavy metal to DNA molecules for rapid analysis	豊橋技術科学大学	ラーマン モハマ ド マスウデル
磁気円二色性スペクトルによる共役系ポリマーの構造解析	北海道大学大学院工学研究科	馬渡 康輝
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

#### (後期)

可逆的共有結合で塩基対を形成する DNA の構造評価	静岡理工科大学理工学部	幡野 明彦
----------------------------	-------------	-------

### 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
有機化合物の構造決定	愛知教育大学教育学部	日野 和之
弱偏析カジブロック共重合体の相挙動解析	名古屋工業大学大学院工学研究科	山本 勝宏
新規複合型ナノマテリアルの構造および電子状態の解析	法政大学工学部	緒方 啓典

錯体および有機化合物の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
生体クラスター触媒部位の磁気的性質	金沢大学大学院自然科学研究科	櫻井 武
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
高分子固体表面における“孤立”高分子鎖末端の分子運動性	静岡県立大学環境科学研究所	坂口 真人
熱処理結晶化による希土類永久磁石薄膜の磁気特性	名古屋工業大学セラミックス基盤工学研究センター	安達 信泰
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
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
Tsai 型正二十面体準結晶 Zn-Fe-Sc-L (L = lanthanoids) の磁気特性	北海道大学大学院工学研究科	柏本 史郎
金属錯体の自己集積化を利用した分子性材料の開発	名古屋工業大学大学院工学研究科	奥村 建志
長鎖を有するコバルト(II)錯体逆スピン転移挙動に関する件研究	九州大学大学院理学研究院	速水 真也
電気伝導性有機金属化合物の磁気特性の研究	広島大学大学院理学研究科	谷本 能文
周期構造を有するナノ磁性体の磁気特性に関する研究	茨城県立医療大学保健医療学部	丸山 耕一
(後期)		
弱偏析カジブロック共重合体の相分離構造と界面構造の解析	名古屋工業大学大学院工学研究科	山本 勝宏
硫酸転移酵素の生物学的機能解明を目的とした糖鎖合成	愛知教育大学	中野 博文
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
1次元系コバルト酸化物 $A_{n+2}Co_{n+1}O_{3n+3}$ (A = Ca, Sr, Ba) の高温磁化測定	名古屋大学大学院工学研究科	高見 剛
磁性ガーネット薄膜の磁気異方性	名古屋工業大学セラミックス基盤工学研究センター	安達 信泰
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
周期構造を有するナノ磁性体の磁気特性に関する研究	茨城県立医療大学保健医療学部	丸山 耕一
有機分子および錯体のX線結晶構造解析	兵庫県立大学大学院工学研究科	北村 千寿
金属イオン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
高分子固体表面に存在する分子鎖の運動性	静岡県立大学環境科学研究所	坂口 真人
ポルフィリンやフタロシアニン類縁体鉄錯体の磁気物性	島根大学総合理工学部	池上 崇久
新規ナノカーボン物質の構造評価	法政大学工学部	緒方 啓典
Zn-Sc 基正二十面体準結晶中の低温磁気特性異常の解明	北海道大学大学院工学研究科	柏本 史郎
遷移元素をドーブしたナノワイヤーの磁気特性の研究	広島大学大学院理学研究科	谷本 能文
装置開発室		
(前期)		
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
(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
非磁性高圧力セルの開発	大阪府立大学大学院理学系研究科	細越 裕子
位相差電子顕微鏡の位相板開発における微細工作法の検討	生理学研究所	大河原 浩
超高真空中で試料交換可能な極低温用保持機構の開発	愛媛大学大学院理工学研究科	日野 照純
X線反射鏡用レプリカマンドレルの研磨加工	名古屋大学エコトピア科学研究所	田原 譲
計算機利用		
第一原理分子動力学計算による液体及びアモルファスのポリモルフィズムの研究	(独)産業技術総合研究所計算科学研究部門	森下 徹也
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
凝縮系ダイナミクスの多次元測定的解析と生体高分子の構造変化ダイナミクスに関する理論研究	分子科学研究所	斉藤 真司
密度汎関数法を用いた半導体薄膜の電子状態と輸送特性の第一原理的研究	慶應義塾大学理工学部	山内 淳
QM/MM 法による量子化学計算から生体分子の動的構造を解明する	佐賀大学理工学部	海野 雅司
分子内および分子間電荷移動の分子軌道法による研究	神奈川大学理学部	田仲 二郎
生体分子の機能発現反応に関する理論的研究	千葉大学大学院薬学研究院	星野 忠次
分子、生物、表面の量子化学：励起状態と化学反応	京都大学大学院工学研究科	中辻 博
生体分子を含むナノ物質の構造と機能に関する第一原理計算	金沢大学大学院自然科学研究科	斎藤 峯雄
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
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
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
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
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 未廣
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ゲ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
大規模第一原理計算のための KKR グリーン関数法の開発	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
分子軌道計算による有機反応設計および分子構造設計のための電子構造予測	東京大学大学院薬学系研究科	大和田 智彦
分子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
ナノチューブ・フラーレン・ナノカーボン系の分子物性と固体物性の総合研究	東京工業大学理工学研究科	斎藤 晋
励起状態とその緩和過程に関する理論的研究	慶応義塾大学理工学部	藪下 聡
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
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
- d 相互作用によるペプチドナノチューブの金属イオン捕捉過程	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
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
ナノネットワーク炭素系物質の構造と電子状態についての第一原理的研究	筑波大学物理学系	岡田 晋
分子動力学シミュレーションに基づく自由エネルギー計算法による蛋白質と核酸の機能と物性の物理化学的研究	弘前大学理工学部	斎藤 稔
環境中および生体内の有機化学反応機構の解明	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	防衛大学理工学専攻	萩田 克美
蛋白質の動的構造と機能の解析	横浜市立大学大学院国際総合科学研究科	木寺 詔紀
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工学系研究科	白石 賢二
フェレドキシンタンパク活性部位の電子状態および磁性	金沢大学理学部	小田 竜樹
光酸化還元反応によるプロトントンネルの制御を利用した新規光スイッチ分子の理論設計	九州大学大学院総合理工学研究院	三好 永作
シリコンナノ構造およびその酸化反応に関する理論的研究	三重大学工学部	秋山 亨
タンパク質・生体関連巨大分子系の量子化学計算に基づくアプローチ	(独)産業技術総合研究所計算科学研究部門	石田 豊和
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
生体分子の光化学反応と希土類錯体の化学反応に関する量子化学計算とシミュレーション	東京大学大学院工学系研究科	常田 貴夫
金属含有タンパク質の反応制御機構に包接特性に関する理論的研究	大阪大学蛋白質研究所	鷹野 優
胆汁酸塩の分子動力学シミュレーション	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
金属原子-分子気相クラスターイオンの赤外光解離分光	東北大学大学院理学研究科	美津津文典
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
分子の動的諸過程の理論的研究	分子科学研究所	中村 宏樹
金属アセチリドクラスターの電子構造と幾何構造	分子科学研究所	西 信之
導電性有機物質の構造と物性の研究	分子科学研究所	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
量子および古典凝集系に対する計算機シミュレーション	計算科学研究センター	岡崎 進
内部官能基を持つ合成ナノサイズ分子動力学	分子科学研究所	永田 央
ポウル型共役化合物の物性調査	分子科学研究所	櫻井 英博
界面非線形分光の理論	計算科学研究センター	森田 明弘
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

フッ素を含むフェロモン活性物質の分子配座と EAG 活性との関係	鳥取大学工学部	早瀬 修一
イオンの選択と透過におけるイオンの水和・脱水和の理論的研究	関東学院大学工学部	杉本 徹
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
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
梯子形ハロゲン架橋白金錯体の光学伝導度および電荷秩序パタンの第 1 原理計算	高工エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	岩野 薫
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
蛋白質・酵素の計算機シミュレーション	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
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
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
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
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
有機分子の構造と大振幅振動ポテンシャルの分子軌道計算と密度汎関数計算	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
第一原理電子構造理論の拡張と物質設計	東京大学工学系研究科	藤原 毅夫
分子磁性体の分子軌道法による理論解析及び新規手法の開発	大阪大学大学院理学研究科	山口 兆
気相及び凝縮相における光化学反応に関する理論的研究	秋田大学工学資源学部	天辰 禎晃
タンパク質中のエネルギー流の解析	名古屋大学大学院理学研究科	倭 剛久
溶液内化学反応の理論研究	名古屋大学大学院理学研究科	大峰 巖
金属クラスターの反応性解明へ向けての幾何・電子構造計算	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
キラルリン酸触媒を用いた Mannich 反応の立体選択性制御因子の解明	琉球大学教育学部	安藤 香織
不安定な原子価負イオンのマイクロ溶媒和による安定化メカニズム	東京大学大学院総合文化研究科	永田 敬
穴のあいたフラー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
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
ab initio MO 法による芳香族クラスターの研究	日本原子力研究機構量子ビーム応用研究部	佐伯 盛久
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	湘北短期大学情報メディア学科	小田 井圭
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
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	慶応義塾大学理工学部	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
アントシアニン色素に関する量子化学的研究	星薬科大学薬学部	坂田 健
ポリマーとゲルのシミュレーション	金沢大学理学部	高須 昌子
過渡赤外分光法を用いたシアノフェニルジシランの溶媒和型クラスターにおける分子内電荷移動反応の研究	神戸大学大学院自然科学研究科	石川 春樹
レプリカ交換 MD によるペプチドフラグメントのシミュレーション	(独)物質・材料研究機構計算材料科学研究センター	西野 正理
ポリ塩化ビフェニルの励起状態のエネルギーおよび構造最適化	金沢大学大学院自然科学研究科	徳村 邦弘
多成分分子理論の開発および水素結合系への応用	横浜市立大学大学院国際総合科学研究科	立川 仁典
コヒーレントフォノン分光による破壊の数値的研究	京都大学大学院理学研究科	國仲 寛人
タンパク質中の補酵素の 1 電子還元に伴う自由エネルギー変化の量子化学計算	大阪大学大学院基礎工学研究科	高橋 英明
高分子コロイド系における分子シミュレーション	岐阜大学工学部	寺尾 貴道
ホタル生物発光における酵素ルシフェラーゼの触媒作用についての理論的研究	東洋大学大学院生命科学研究科	酒井 博則
分子の電子状態とスペクトルおよびフラビン酵素の反応機構についての ab initio 計算	大阪市立大学理学部	西本 吉助
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
SiO <sub>2</sub> /Si 表面上の水分子を介した生体分子相互作用の解明	分子科学研究所	宇理 須恒雄
光応答性有機材料の理論設計	(独)産業技術総合研究所関西センター	太田 浩二
ジクロロキナクリドンの結晶構造と電子構造	横浜国立大学大学院工学研究院	千住 孝俊
生命現象の時空間ダイナミクス	基礎生物学研究所	望月 敦史

ニトロソ化合物を利用した有機化学反応に関する理論化学的研究	愛知教育大学教育学部	赤倉松次郎
界面および凝縮相における分子ダイナミクス等の理論的解析	(独)理化学研究所中央研究所	田原 太平
非経験的分子軌道法によるクラスターの構造について	岡山理科大学大学院理学研究科	中川 幸子
たんぱく質のフォールディングにおける溶媒効果の研究	福岡大学理学部	山口 敏男
MD法によるLiPF <sub>6</sub> とLiBF <sub>4</sub> 塩のPC溶液のイオン間相互作用の研究	名古屋大学環境学研究科	佐野 充
臨界水中のイオンの分子動力学シミュレーション	上智大学理工学部	由井 和子
化学修飾されたカーボンナノチューブとフラレンの量子化学計算	分子科学研究所	呂 金
新規ホウ素核種ボリルリチウムの性質の解明	東京大学大学院工学系研究科	山下 誠
実空間差分法に基づくナノ構造の第一原理電子状態・電気伝導特性計算手法の開発	大阪大学大学院工学研究科	小野 倫也
複雑分子系の複合分子理論シミュレーション	京都大学福井謙一記念研究センター	諸熊 奎治
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
金属原子・分子気相クラスターイオンの赤外光解離分光	東北大学大学院理学研究科	美齊津文典
ピロール環を基盤とした超分子集合体の構築	分子科学研究所	前田 大光
Rigged QED理論に基づく非平衡過程の電子構造	京都大学大学院工学研究科	立花 明知
節自由度を緩和させる第一原理量子モンテカルロ計算	(独)物質・材料研究機構計算材料科学研究センター	前園 涼
計算科学による加水分解経路の追跡	奈良教育大学教育学部	山邊 信一
固体表面吸着分子と入射イオンとの相互作用による吸着分子解離・脱離過程	九州大学大学院理学研究院	季村 峯生
マルチドメインタンパク質のダイナミクス解析	分子科学研究所	笹川 拓明
凝縮系における分子ダイナミクス	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
密度汎関数法及びモンテカルロ法を用いたAg(110)表面上のAgO一次元鎖の構造、反応性に関する研究	分子科学研究所	中井 郁代
低次元シリコンナノ材料の電子状態解析	立命館大学理工リサーチオフィス	中村 康一
フォトクロミック、エレクトロクロミック分子の構造変化及び電子状態の解明	信州大学工学部	田中 伸明
界面活性粒子混合系のメゾスケールシミュレーション	京都大学大学院工学研究科	新戸 浩幸
フェノール・希ガスクラスターにおけるイオン化誘起異性化反応	東京工業大学資源化学研究所	藤井 正明

## 2-12-3 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 ~ '99		'00		'01		'02		'03		'04		'05		'06		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	79	622	2	12	7	41	5	36	5	70	3	26	1	13	1	8	人数： 登録人数
協力研究	2,919	3,353	119	249	100	223	125	253	101	246	100	263	96	232	84	208	"
招へい 協力研究	186	186	2	3	5	6	1	1	1	1	-	-	-	-	-	-	"
所長 招へい	2,171	2,171	264	264	385	385	313	313	308	308	160	160	100	100	140	140	人数： 旅費支給者
研究会	236	3,345	13	276	6	129	11	332	8	229	13	304	11	206	13	310	"
施設利用 I	1,421	3,088	54	142	49	139	63	188	54	150	55	154	53	106	45	87	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)	3,462	10,605	156	631	144	584	134	558	120	525	154	587	132	510	137	547	"
合計	10,474	23,370	610	1,577	696	1,507	652	1,681	597	1,529	485	1,494	393	1,167	420	1300	
経費	413,340		32,080		30,994		37,986		30,794		-		-		-		千円

\* 施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用

分子科学研究所 UVSOR 共同利用研究実施一覧

年度 項目	'85 ~ '99		'00		'01		'02		'03		'04		'05		'06		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	38	423	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	人数： 登録人数
協力研究	312	1,109	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
招へい 協力研究	72	72	0	0	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	"
研究会	29	435	1	29	1	13	0	0	1	51	1	16	1	59	1	37	人数： 旅費支給者
施設利用	1,557	7,665	160	820	157	707	160	805	129	715	128	582	126	643	113	494	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	2,008	9,704	161	849	158	720	160	805	130	766	129	598	127	702	114	531	
経費	167,860		16,441		16,512		15,780		13,884		-		-		-		千円

## 2-13 ナノサイエンス支援

### 2-13-1 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10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。18年度から時空間分解近接場光学顕微鏡が共同利用に供され、ナノ構造観察・分光特性評価の他、動的性質の測定が可能になった。

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、極低温真空プローパー、微少電流計測システム、点接触電流イメージング原子間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	
時空間分解近接場光学顕微鏡	開口型近接場光学顕微鏡に超短パルスレーザーによる時間分解。分光測定系等を組み合わせ、光学測定によるナノ構造観察・分光特性評価の他、動的性質の測定を行う。	岡本裕巳教授	分子構造研究系
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

## 2-13-2 2006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
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
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 大須賀篤弘
混乱型拡張ポルフィリンの合成	九州大学工学研究院応用化学部門 古田 弘幸
有機酸とアミノ酸からなる集合体のキャラクタリゼーションと応用	愛媛大学工学部応用化学科 渡辺 裕
ナノギャップ電極を用いたナノ構造物の電気伝導測定	(独)物質・材料研究機構 長谷川 剛
導電性潤滑剤の電気物性の研究	住鋺潤滑剤(株)開発センター調査・解析グループ 児玉 竜二
制御された金属ナノ構造におけるプラズモンの空間特性	北海道大学電子科学研究所 三澤 弘明
金ナノ微粒子膜の近接場光学顕微鏡による光学的測定	(独)物質・材料研究機構，筑波大学大学院数理物質科学研究科 北島 正弘
シソフィランによるナノ組織体の近接場分光	科学技術振興機構 沼田 宗典
分子素子としての光合成系膜タンパク質/色素複合体の基板上へのパターニングによる組織化とその評価	名古屋工業大学 南後 守
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
ロジウム表面上の亜酸化窒素分子の吸着配向と共存する一酸化炭素の影響のSTM観測	北海道大学触媒化学研究センター 松島 龍夫
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 関谷 博
有機金属ナノクラスターの創製：構造と機能制御	愛知教育大学教育学部 日野 和之
導電性基板上へ固定化したナノ粒子・ナノ薄膜の高分解観察	東京大学大学院理学系研究科 米澤 徹
dendリマー分子カプセル内包単分散金属ナノクラスターの合成と質量分析	神戸大学工学部機械工学科 田中 章順
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
磁性遷移金属錯体の構造物性	慶應義塾大学理工学部 秋津 貴城
高周期元素の特性を活かした新規ナノスケール分子の開発	京都大学化学研究所 時任 宣博
金属ナノクラスターの分子設計および機能発現	近畿大学理工学部 藤原 尚

金属内包フラーレンの Prato 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
Ce@C <sub>82</sub> の高選択的化学修飾	筑波大学大学院数理物質科学研究科	土屋 敬広
新規なナノスケール分子キャビティを活用した高反応性化学種安定化に関する理論研究	東京大学大学院理学系研究科	後藤 敬
スタンノールアニオン類の電子状態の解明とスタンノール骨格を主鎖に有する高分子化合物の物性探索	埼玉大学理学部	斎藤 雅一
開口フラーレン誘導体(穴のあいたフラーレン)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
ナノサイズの分子の大規模計算	大阪府立大学理学部	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	村田 道雄
海洋生物由来の生物活性ナノ有機分子の構造解析	北海道大学大学院薬学研究科	小林 淳一
超高磁場 NMR を用いたポリアセチレン誘導体の動的構造の研究	北海道大学大学院工学研究科	平沖 敏文
超高磁場固体 <sup>17</sup> O NMR 法のポリペプチドおよびオリゴペプチド構造解析への展開	東京工業大学大学院理工学部	黒木 重樹
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	山口 芳樹
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	吉田 司
新規な有機 FET の開発	東京工業大学大学院総合理工学研究科	西田 純一
DBC (ジベンゾクリセン) および周辺物質のトランジスタ特性計測	名古屋大学工学研究科	木村 真

課 題 名 (後期)

代 表 者

導電性潤滑剤の電気物性の研究	北海道大学触媒化学研究センター	中越 修
高共役 分子修飾電極	九州大学大学院理学研究院	迫田 憲治
ナノギャップ電極を用いたナノ構造物の電気伝導測定	大阪大学大学院理学研究科	安達 清治
ベンゾポルフィリン類を用いた有機薄膜太陽電池の構築	北海道大学大学院薬学研究科	久保田高明
三次元マイクロ流体回路のナノ構造評価	名城大学理工学部	丸山 隆浩
分子素子としての光合成系膜タンパク質 / 色素複合体の基板上への組織化	名古屋市立大学大学院薬学研究科	坂田 絵里
カーボンナノチューブシートを用いた細胞工学	名城大学理工学部	丸山 隆浩
結晶成長により作製した量子構造上への脂質膜の形成	科学技術振興機構	沼田 宗典
微細電極基板上におけるパターン化モデル生体膜作製	岐阜大学大学院工学研究科	市瀬 圭吾
極端紫外光エッチングしたシリカガラスの形状評価	岐阜大学大学院工学研究科	B. R. Sankapal
制御された金属ナノ構造におけるプラズモンの空間特性	埼玉大学理学部	坂本 章
金属ナノ配列構造における局在プラズモン励起と表面増強ラマンの研究	埼玉大学理学部	森 和彦
シゾフィランによるナノ組織体の近接場分光	名古屋大学大学院工学研究科	宇治原 徹
ロジウム結晶表面上の亜酸化窒素分子の配向の STM による観測	名古屋市立大学大学院薬学研究科	栗本 英治
光異性反応を用いたナノ素子開発のための基礎研究	筑波大学大学院数理物質科学研究科	佐藤久美子
有機金属ナノクラスターの創製: 構造と機能制御	筑波大学大学院数理物質科学研究科	河野 孝佳
金属及びシリコンクラスターのサイズ評価	筑波大学大学院数理物質科学研究科	栗原 広樹
精密調製した dendrimer 内包単分散金属ナノクラスターの質量分析と物性評価	筑波大学大学院数理物質科学研究科	高野 勇太
積層分子膜およびその材料の電子顕微鏡観察	筑波大学大学院数理物質科学研究科	二川 秀史
SiC 表面からのカーボンナノチューブ生成過程の研究	筑波大学大学院数理物質科学研究科	菊池 隆
液体金属、強磁性体、半導体の電流磁気効果に関する厚さとナノ磁性体構造の研究	埼玉大学理学部	斎藤 雅一
多核クラスター金属錯体の構造 - 磁性相関	愛媛大学総合科学研究支援センター	宇野 英満
ナノサイズの分子の大規模計算	愛媛大学総合科学研究支援センター	田中 洋輔
高周期元素の特性を活かした新規ナノスケール分子の開発	京都大学化学研究所	時任 宣博
金属ナノクラスターの分子設計および機能発現	近畿大学理工学部応用化学科	藤原 尚
La@C <sub>82</sub> の Bingel の反応による化学修飾	筑波大学先端学際領域研究センター	赤阪 健
金属内包フラーレンに基づくスピンサイト交換システムの構築	筑波大学先端学際領域研究センター	土屋 敬広
開口フラーレン誘導体(穴のあいたフラーレン)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
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	埼玉大学大学院理工学研究科	斎藤 雅一
単層カーボンナノチューブの 共役系溶媒への分散	東京学芸大学教育学部	前田 優
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	東京工業大学大学院理工学研究科	後藤 敬
海洋生物由来の生物活性ナノ有機分子の構造解析	北海道大学大学院薬学研究科	小林 淳一
強磁場 NMR による分子複合体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
超高磁場 NMR を用いた新規ラセン高分子の動的構造の研究	北海道大学大学院工学研究科	平沖 敏文

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	山口 芳樹
超高磁場固体 <sup>17</sup> O NMR 法のポリペプチドおよびオリゴペプチド構造解析への展開	東京工業大学大学院理工学研究科	黒木 重樹
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	吉田 司
新規な有機 FET の開発	東京工業大学大学院総合理工学研究科	西田 純一
DBC (ジベンゾクリセン) および周辺物質のトランジスタ特性計測	名古屋大学工学研究科	木村 真

(2) 施設利用

(前期)

新規ナノマテリアルの合成と局所構造解析	法政大学工学部	緒方 啓典
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	東海興業株式会社研究開発部	前川美穂子
有機・無機ハイブリッドデバイスの特性評価	ユーテック株式会社	遠藤 弘章
次元規制型自己組織化能を持つ新規導電性分子モジュールの合成及び機能評価	(独)物質・材料研究機構ナノ有機センター	中西 尚志
水素終端シリコン表面の調整と原子間力顕微鏡による表面構造評価	名古屋大学大学院理学研究科	関 一彦
亜硝酸・一酸化窒素より生ずる DNA 塩基損傷の構造・活性相関。カイク由来プロテアーゼインヒビターの溶液構造解析	京都工芸繊維大学繊維学部	金折 賢二
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次世代位相板開発	岡崎総合バイオサイエンスセンター	永山 國昭
有機カルコゲン化合物・単層カーボンナノチューブ複合化と物性評価	東京学芸大学	前田 優
分子結合状態解析システムを用いたシリサイド表面層の分析	石川工業高等専門学校	山田 健二
超音波応答性メタル化ペプチドゲル化剤の構造解析およびゲル化機構の解明	大阪大学大学院基礎工学研究科	高谷 光
9-アルキルアミノアクリジンのシトシン塩基選択的な相互作用の解析	名古屋市立大学大学院薬学研究科	白井 直洋
点接触電流イメージング原子間力顕微鏡をもちいた直鎖ポルフィリン多量体の電気伝導度測定	大阪大学産業科学研究所	松本 卓也
拡張化合物の溶液プロセスによる薄膜作成と薄膜構造及び導電特性の検討	愛媛大学大学院理工学研究科	山田 容子
周期構造を有するナノ磁性体の電気化学的な作製に関する研究	茨城県立医療大学保健医療学部	丸山 耕一

(後期)

有機・無機ハイブリッドデバイスの特性評価	ユーテック株式会社	遠藤 弘章
次元規制型自己組織化能を持つ新規導電性分子モジュールの合成及び機能評価	(独)物質・材料研究機構ナノ有機センター	中西 尚志
両親媒性ポルフィリン誘導体の合成と自己集合挙動制御	東京農工大学工学部	道信 剛志
炭素被覆磁性ナノ粒子の研究	戸田工業株式会社 創造本部	柿原 康男
有期系ナノ構造体の局所構造解析	法政大学工学部	緒方 啓典
水素終端シリコン表面の調製と原子間力顕微鏡による表面構造評価	名古屋大学大学院理学研究科	関 一彦
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次世代位相板開発の基礎的検討	岡崎総合バイオサイエンスセンター	永山 國昭
半導体あるいは金属ナノ粒子の溶液合成における初期構造の解析	(独)産業技術総合研究所	上原 雅人
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	市川 洋
メタル化ペプチド分子による金属集積化機構の解明	大阪大学大学院基礎工学研究科	高谷 光
周期構造を有するナノ磁性体の電気化学的な作製に関する研究	茨城県立医療大学保険医療学部	丸山 耕一
輪が一方向に並進するロタキサンの合成	大阪大学大学院理学研究科	原田 明
分子定規法を利用したナノ電極形成、およびナノ電極による分子(DNA)の電気特性評価	名古屋大学大学院工学研究科電子情報システム専攻	中里 和郎
ステンレス表面へのTi粉末ショットピーニングによる表面TiO <sub>2</sub> 生成の調査	フタバ産業株式会社技術部	小林 新
ステンレス表面にTiO <sub>2</sub> 層が生成できるが、活性力のあるアナターゼ型カルチル型かを格子状態から調査する		
920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いた高分解能 NOESY によるタンパク質の構造解析	奈良先端科学技術大学院大学	児嶋長次郎
Co とキラルなラジカルから成る、有機無機ハイブリッド磁性体の交流磁場中における磁性のダイナミクスに関する研究	広島大学大学院理学研究科	井上 克也
ナノカーボン物質中の Mn <sub>12</sub> クラスターの電子状態解析	名古屋大学大学院理学研究	吉川 浩史
刺激応答性星型ポリマーを用いた金ナノ微粒子の作製	大阪大学大学院理学研究科	青島 真人
一次元ロジウム(1)——セスキネート錯体の磁気特性の解明ロジウム-ジオキソレン錯体の原子価状態の解明	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	満身 稔
金属ナノクラスターの分子設計および機能発現	近畿大学	仲程 司

## 2-14 最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

分子科学研究所は昨年度まで「超高速コンピュータ網形成 (NAREGI) プロジェクト」のナノ分野におけるグリッド実証拠点として、過去3年間、研究活動を行ってきたが、昨年4月より表記の「最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトにおける「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」拠点としてナノ分野の「グランドチャレンジアプリケーション研究」を担当することになった。同時に、NAREGI プロジェクトは2007年度を最終年度としており、2006年度は引き続き「グリッド実証研究」を行ってきた。本項では「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」拠点の概要、研究体制、研究開発スケジュールについて以下に述べる。

### 2-14-1 「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 (ナノ統合)」拠点の概要

次世代スパコンプロジェクトは我が国がIT分野における国際的なリーダーシップを確保ために「旗艦」的コンピュータを構築し、それを下方展開することによって我が国に強固なITインフラを整備することを目指す国家プロジェクトである。また、このプロジェクトの目的は単に「巨大なマシン」を構築することにとどまらず、同時に、我が国の計算科学における新しいパラダイムの創出を目指すものである。

計算科学はこれまで物質設計や地球環境などの分野で重要な役割を果たし、社会の技術基盤のひとつとして確固たる基盤を築きつつある。とりわけ、物質や生体分子の様々な機能が発現するナノスケールの現象をターゲットとする計算科学は21世紀における産業を担うべき「知的ものづくり」や個人の遺伝情報に基づく「テーラーメイド医療」にとっての技術基盤としておおきな期待を集めている。他方、ナノスケールの現象は伝統的な理論化学物理の視点からも極めて挑戦的な課題である。特に、量子力学、統計力学、分子シミュレーションなどの理論・計算科学的方法論にとって、これまでの枠組みを大幅に越えること無くして決して達成しえない研究課題である。

以上の観点から我々は本プロジェクトのナノ分野におけるグランドチャレンジ研究課題として、下記の3つの課題を設定した。

#### (1) 次世代ナノ情報・機能材料

超高密度実装、高速応答、省エネルギーなどを目指す電子デバイス設計の計算科学的方法論を構築。

#### (2) 次世代ナノ生体物質

生命体を構成するナノ物質のシミュレーションを可能とする方法論を確立することにより、テーラーメイド医療を目指した次世代生命体シミュレーションのナノ基盤を構築。

#### (3) 次世代エネルギー

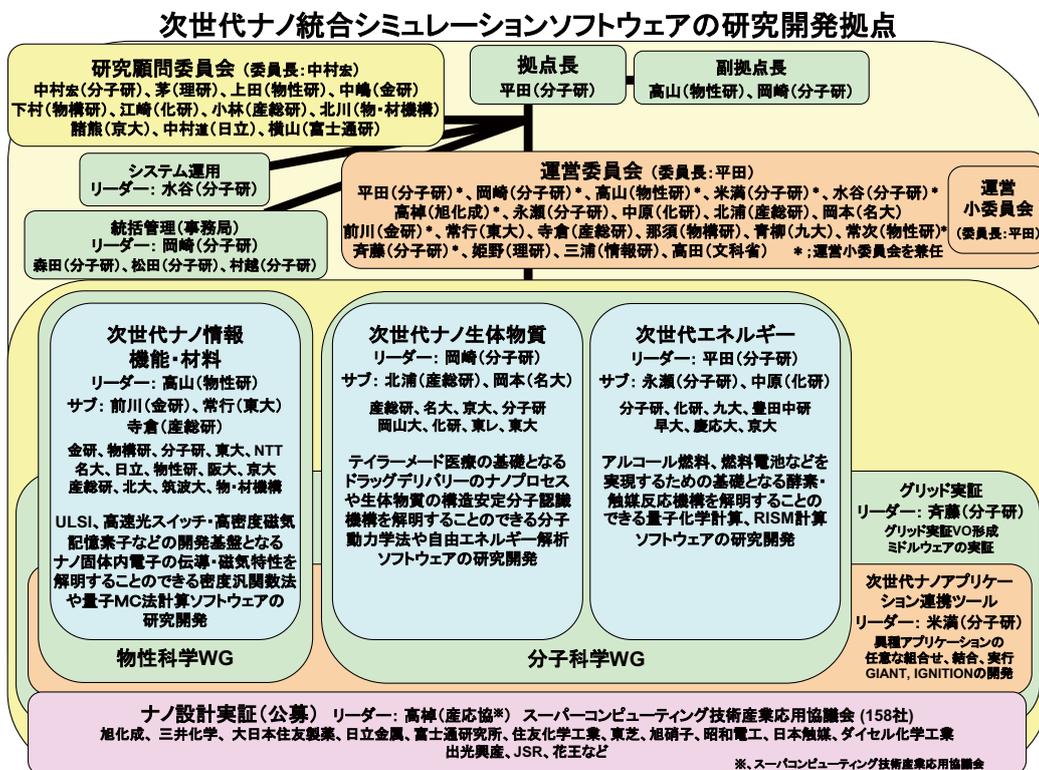
化石燃料に代わる恒久的エネルギー源として太陽エネルギーの固定、利用、貯蔵技術、特に、セルロースから酵素反応によりエタノールを生成する技術における計算科学的方法論の確立に貢献。

これらの研究課題は国の「重点推進4分野」の中において重要な技術・課題として位置付けられていることから明らかなように、21世紀の「知的ものづくり」や個人の遺伝情報に基づく「テーラーメイド医療」、化石燃料に代わる恒久的エネルギー源の確立、など産業・医療の技術基盤を確立する上で本質的であるばかりでなく、人類の存立基盤そのものにも関わる重要課題であり、「グランドチャレンジ課題」と呼ぶにふさわしいターゲットであると考えている。

我々は本プロジェクトにおいてこれらの課題に挑戦する上で必要な新しい理論や計算科学的方法論あるいは計算プログラムを構築し、そのことを通じて次世代スパコンプロジェクトの成功に貢献したいと考えている。

## 2-14-2 「ナノ統合拠点」の研究体制

ナノ統合拠点の研究体制を下図に示す。



## 2-14-3 「ナノ統合拠点」の研究課題 (個人)

ナノ統合拠点の研究課題を下表に示す。

最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発  
——グランドチャレンジ課題・課題小項目・各研究課題——

### (1) 次世代ナノ情報機能・材料

#### 1① 次世代ナノ複合材料

##### 1①-1 ナノ複合電子・強度材料の構造と特性制御

石橋 章司	産業技術総合研究所	計算科学研究部門	グループ長	材料における界面とナノスケール格子欠陥の構造と特性
毛利 哲夫	北海道大学	大学院工学研究科	教授	合金材料の内部組織形成と材料特性に関するマルチスケール解析

##### 1①-2 ナノ構造構成要素とその複合系による次世代電子デバイス設計

押山 淳	筑波大学	数理物質科学研究科	教授	ナノ構造構成要素と複合系の機能
常行 真司	東京大学	大学院理学系研究科	助教授	第一原理ナノ構造探査

1 - 3 電子励起によるナノ複合電子材料の機能制御

那須奎一郎	高エネルギー加速器 研究機構	物質構造科学研究所	教授	可視光で誘起されるグラファイト-ダイヤモンド非平衡相転移
杉野 修	東京大学	物性研究所	助教授	ナノ物質および固体表面での光励起キャリアダイナミクスと高速化学反応

1 - 4 大規模電子状態計算と精密計算によるナノ複合材料設計

寺倉 清之	産業技術総合研究所	計算科学研究部門	研究顧問	高効率大規模電子状態計算手法の開発
川添 良幸	東北大学	金属材料研究所	教授	拡散量子モンテカルロ法による分子の安定性の厳密計算

(1) 次世代ナノ情報機能・材料

1 次世代ナノ電子材料

1 - 1 次世代ナノ非線形光学素子開発

遠山 貴己	京都大学	基礎物理学研究所	教授	強相関電子系におけるナノ非線形光学デバイスの理論
那須奎一郎	高エネルギー加速器 研究機構	物質構造科学研究所	教授	非マルコフ・非負経路積分法によるナノ・サイズ多電子系の光励起シミュレーション
米満 賢治	自然科学研究機構	分子科学研究所	助教授	光誘起集団電荷移動と伝導の制御

1 - 2 新機能ナノ量子デバイス開発

永長 直人	東京大学	大学院工学系研究科	教授	ナノスケール電子状態を用いた新規機能設計
小形 正男	東京大学	大学院理学系研究科	助教授	低次元強相関電子系における超伝導および磁性、電荷秩序の理論的研究
田村 浩之	NTT	物性科学基礎研究所	主任研究員	量子ドット列デバイスにおける電子相関効果の制御

1 - 3 スピン注入ナノスピントロニクス素子開発

前川 禎通	東北大学	金属材料研究所	教授	ナノスピントロニクス理論の構築
井上順一郎	名古屋大学	大学院工学研究科	教授	接合系の量子伝導シミュレーションとナノスケールデバイス設計
市村 雅彦	日立製作所	基礎研究所	主任研究員	スピン注入型ナノ電子デバイス

(1) 次世代ナノ情報機能・材料

1 次世代ナノ磁性材料

1 - 1 超高記録密度磁気デバイス材料の構造制御

常行 真司	東京大学	大学院理学系研究科	助教授	自己組織化を用いたナノ磁性材料
-------	------	-----------	-----	-----------------

1 - 2 新しい磁性発現機構をもつナノ磁気素子の開発

宮下 精二	東京大学	大学院理学系研究科	教授	分子磁性体での局所磁気構造
赤井 久純	大阪大学	大学院理学研究科	教授	ナノ磁性の第一原理計算

1 - 3 新しい動作原理による超高記録密度磁気デバイスの開発

高山 一	東京大学	物性研究所	教授	ナノ磁性粒子配列の静的・動的性質
藤堂 眞治	東京大学	大学院工学系研究科	講師	格子変形の自由度のもとでの磁気相転移
常次 宏一	東京大学	物性研究所	教授	強相関電子系における新奇量子相
川島 直輝	東京大学	物性研究所	助教授	量子磁性体における自発的空間対称性のやぶれ——ダイマー・ストライプ・量子液体——

## (2) 次世代ナノ生体物質

### 2-1 タンパク質高度シミュレーション新規方法論の開発

北浦 和夫	産業技術総合研究所	計算科学研究部門	総括研究員	量子化学計算によるタンパク質・リガンド相互作用の解析と結合エネルギーの高精度予測——高精度 FMO 法——
岡本 祐幸	名古屋大学	大学院理学研究科	教授	拡張アンサンブルシミュレーションによる創薬設計——拡張アンサンブル法——
木下 正弘	京都大学	エネルギー理工学研究所	助教授	タンパク質フォールディングおよび高次構造形成のメカニズムの分子論的解明——RISM 法——

### 2-2 イオンチャネルの分子過程

平田 文男	自然科学研究機構	分子科学研究所	教授	チャネルのイオン選択性
-------	----------	---------	----	-------------

### 2-3 ウイルスの分子科学

岡崎 進	自然科学研究機構	分子科学研究所	教授	ウイルスの全原子シミュレーション
田中 秀樹	岡山大学	大学院自然科学研究科	教授	ナノスケールの空間中での水和構造とダイナミクス

### 2-4 がん細胞膜の分子科学と膜融合

平田 文男	自然科学研究機構	分子科学研究所	教授	がん細胞膜の構造ゆらぎと膜融合——RISM 法からのアプローチ——
岡崎 進	自然科学研究機構	分子科学研究所	教授	細胞膜の構造ゆらぎと膜間相互作用——分子動力学法からのアプローチ——
斉藤 真司	自然科学研究機構	分子科学研究所	教授	がん発現にかかわる分子スイッチの分子動力学計算

### 2-5 ナノ生体物質輸送

中原 勝	京都大学	化学研究所	教授	生体モデル膜への物質結合——結合量と結合位置の自由エネルギー解析——
岡崎 進	自然科学研究機構	分子科学研究所	教授	ミセル生成とミセルによる物質の取り込み、輸送
三上 益弘	産業技術総合研究所	計算科学研究部門	副部門長	細胞膜（脂質二重膜）における有機分子の透過機構の研究
茂本 勇	東レ（株）	機能材料研究所	研究員	高分子ゲルのダイナミクスと物質輸送

### 2-6 新規ナノ生体物質の創生と利用

北尾 彰朗	東京大学	分子細胞生物学研究所	助教授	既知ナノ生体物質の機能メカニズム解明
-------	------	------------	-----	--------------------

## (3) 次世代エネルギー

### 3-1 光触媒による太陽エネルギーの固定

中井 浩巳	早稲田大学	理工学術院	教授	固体触媒の励起過程を取り扱う理論的手法の開発と酸化チタン系への応用
-------	-------	-------	----	-----------------------------------

### 3-2 光合成による太陽エネルギーの固定

藪下 聡	慶應義塾大学	理工学部	教授	励起エネルギーおよび電子移動速度の定量的予測のための理論手法の開発
信定 克幸	自然科学研究機構	分子科学研究所	助教授	ナノスケール分子における光誘起量子多体系ダイナミクスの理論的解明

3-3 化石燃料からの脱却を目指すアルコール燃料サイクルの確立

平田 文男	自然科学研究機構	分子科学研究所	教授	酵素反応によるセルロース分解とアルコール生成の計算科学
中原 勝	京都大学	化学研究所	教授	超臨界を用いた新規無触媒化学サイクルの創成

3-4 燃料電池の作動原理における分子過程の解明

永瀬 茂	自然科学研究機構	分子科学研究所	教授	ナノ分子系の精度高い大規模量子化学計算の開発と応用
森田 明弘	自然科学研究機構	分子科学研究所	助教授	界面和周波発生分光の計算科学と液体・高分子界面の微視的構造解析への応用
南部 伸孝	九州大学	情報基盤センター	助教授	非断熱現象を利用した分子設計
兵頭 志明	(株)豊田中央研究所	計算物理研究室	室長・首席 研究員	ナノスケール構造に基づくマクロ特性解析のための階層シミュレーション法の実現

3-5 エネルギー保存技術

平田 文男	自然科学研究機構	分子科学研究所	教授	スーパーキャパシタの開発
-------	----------	---------	----	--------------

3-6 高効率物質変換

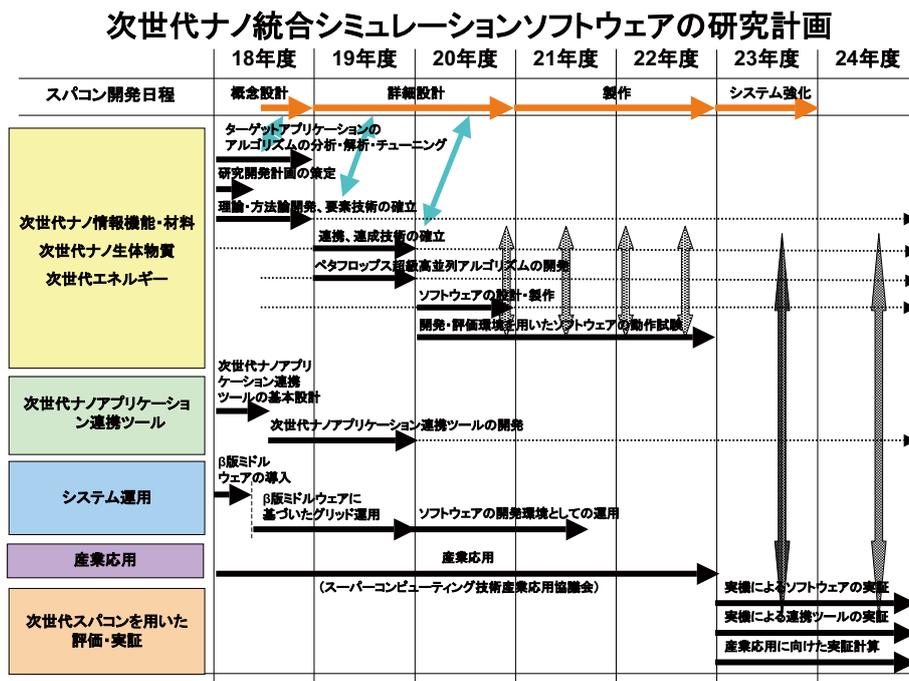
榊 茂好	京都大学	大学院工学研究科	教授	ナノスケール複合遷移金属錯体による省エネルギー高効率物質変換反応の理論開発
加藤 重樹	京都大学	大学院理学研究科	教授	溶液内およびタンパク質場における励起分子のエネルギー移動と緩和過程

3-7 電極反応の解明

青柳 睦	九州大学	情報基盤センター	教授	高度連成シミュレーションによる凝縮系界面の電子構造とダイナミクス
------	------	----------	----	----------------------------------

2-14-4 「ナノ統合拠点」の研究・開発スケジュール

ナノ統合拠点の研究・開発スケジュールを下図に示す。



## 2-15 エクストリームフォトニクス

平成 17 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・フォトニクス」を行っている。「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。

両研究所の研究打合せや成果報告のため, 本年度は, 4 月に理化学研究所にて第 3 回理研・分子研合同シンポジウムを開催した。このシンポジウムでは特に「エクストリーム波長の発生と応用」をテーマとし, テラヘルツ光やフェムト秒 X 線の発生と利用について議論した。さらに, 11 月には「コヒーレント光科学」を主題とした第 4 回の研究会を行い, この方面における所外の研究者にも講演を依頼し, 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っている。

## 2-16 国際交流と国際共同研究

### 2-16-1 国際交流

分子科学研究所では世界各国から第一線の研究者を招き共同研究を実施したり、若手外国人研究者の育成のため、当研究所の研究活動に参画させ活発に研究交流を実施している。これらの外国人研究者は、外国人研究職員（旧文部科学省外国人研究員）として雇用する者や、日本学術振興会等の各種事業により受け入れている。

また、多くの海外研究者や行政機関関係者が当研究所の研究現場や研究施設を視察に訪れている。

これらの海外からの来訪者は年間 100 名を越えており、事業別等の内訳は以下のとおりである（年度をまたがるものは再掲）。

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		
	外国人研究職員*	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	合計
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
05	9	2	46	0	76	133
合計	151	124	259	603	602	1,739

\* 03 以前は文部科学省外国人研究員

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
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
05	17	9	21	26	18	17	5	20	133
合計	327	106	141	114	224	190	101	536	1,739

表3 海外からの研究者 (2006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			
LONG, La-Sheng	中国	廈門大学助教授	17. 5. 1-18. 4.30
SWIETLIK, Roman	ポーランド	分子物理学研究所教授	18. 3. 1-18. 8.31
ALLAKHVERDIEV, I. Suleyman	アゼルバイジャン	ロシア科学アカデミー基礎生物学研究所主席研究員	18. 4. 1-18. 6.30 18.10. 1-19. 2.28
WANG, Wenping	中国	合肥工業大学助教授	18. 4. 1-19. 3.31
PAL, Nil Tarasankar	インド	インド科学技術研究所教授	18. 5.29-18. 8.29
GAO, Yongli	アメリカ	ロチェスター大学教授	18. 6.15-18. 9.15
LU, Xin	中国	廈門大学教授	18. 6.15-18. 9.20
DASCALU, Traian Eugeniu	ルーマニア	レーザーとプラズマ物理国立研究所研究主任	18.10. 1-19. 2.28
KIM, Bongsoo	韓国	チャンウォン国立大学	19. 3. 1-20. 1.31
3. 分子科学研究所外国人研究職員			
CHOI, Cheol Ho	韓国	慶北大学助教授	19. 3. 1-20. 1.31
4. 日本学術振興会招へい外国人研究者			
CHAN, Michael	アメリカ	オハイオ州立大学教授	18.11.12-18.11.28
BIELAWSKI, Serge	フランス	リール工科大学講師	18.11.28-18.12.23
5. 国際共同研究			
KURMOO, Mohamedally	ドイツ	University of Strasbourg Senior Researcher	18. 4. 6-18. 4.25 18.10.23-18.11. 5
PETEK, Hrvoje	アメリカ	ピッツバーグ大学教授	18. 5.13-18. 5.24
ROBERT, J. Levis	アメリカ	Temple University Professor	18. 5.18-18. 5.21
AGREN, Hans	スウェーデン	スウェーデン王立工科大学教授	18. 5.25-18. 5.27
LABAT, Marie	フランス	CEA (フランス原子力委員会) 大学院生	18. 5.27-18. 6. 4
LAMBERT, Guillaume	フランス	CEA (フランス原子力委員会) 大学院生	18. 5.28-18. 6. 4
GIRARD, Bertrand	フランス	ポールサバティエ工科大学教授	18. 6. 4-18. 6.10
KWON, Yong Seung	韓国	成均館大学 Professor	18. 7.10-18. 7.30
LEE, Kyeng Eun	韓国	成均館大学大学院生	18. 7.10-18. 7.30
YOON, Hee	韓国	成均館大学大学院生	18. 7.10-18. 7.30
FEIFEL, Raimund	スウェーデン	Uppsala University 大学院生	18. 7.21-18. 7.22
JEONG, Dae Hong	韓国	ソウル国際大学 Assistant Professor	18. 8. 6-18. 8.19
KIM, Youngchae	韓国	ソウル国際大学 Reseach Assistant	18. 8. 7-18. 8.25
CARNIATO, Stephane	フランス	Universite Pierre et Marie Curie Assistant Professor	18. 8.13-18. 8.20
PETTERSSON, Lars G. M.	スウェーデン	Stockholm University Professor	18. 8.15-18. 8.22
NORDGREN, Joseph	スウェーデン	Uppsala University Professor	18. 8.16-18. 8.20
YANG, Dong	中国	復旦大学大学院生	18.10.31-19. 1.31
RUEHL, Ruehlecart Gunthe	ドイツ	Free University of Berlin Professor	18.11.10-18.11.12
藤田恵津子	アメリカ	Brookhaven National Laboratory Senior Chemist	18.11.18-18.11.26
SZWAJ, Christophe	フランス	Universite des Sciences et Technologies de Lill 講師	18.11.28-18.12.23
EVAIN, Clement	フランス	Universite des Sciences et Technologies de Lill 大学院生	18.11.28-18.12.23
SEGONDS, Patricia	フランス	ジョセフ・フーリエ工科大学助教授	19. 2. 7-19. 3. 1
6. 科学研究費補助金			
RAMAN, Coinbatore	アメリカ	The University of Texas Assistant Professor	18.11.11-18.11.19
7. 所長招へい協力研究員			
YAKOVELEV, Vladislav	アメリカ	ウィスコンシン大学	18. 6. 1-18. 6. 2
池津庸哉	アメリカ	ネブラスカ州立大学准教授	18.10.17-18.10.17
HOUGEN, Jon	アメリカ	National Institute of Standards 名誉研究員	18.11.28-18.12. 1
MERER, Anthony	アメリカ	The Institute of Atomic and Molecular Sciences	18.11.28-18.12. 1

## 8 . 招へい研究員

GORDON, Mark S.	アメリカ	Ames Laboratory and Iowa State University 教授	18. 5.15-18. 5.20
SHAIK, Sason	イスラエル	Hebrew University 教授	18. 5.16-18. 5.20
MASERAS, Feilu	スペイン	Institute of Chemical Research of Catalonia Senior Researcher	18. 5.16-18. 5.20
BORDEN, Weston Thatcher	アメリカ	University of Washington 教授	18. 5.16-18. 5.20
MUSAEV, Djmaladdin G.	アメリカ	Emory University Principal Sci. Manager	18. 5.16-18. 5.20
THIEL, Walter	ドイツ	Max-Planck-Institut für Kohlenforschung Director	18. 5.17-18. 5.20
FRENKING, Gernot	ドイツ	Fachbereich Chemie Philipps-University 教授	18. 5.17-18. 5.20
HALL, Michael B.	アメリカ	Texas A&M University 教授	18. 5.17-18. 5.20
SIEGBAHN, Per E. M.	スウェーデン	Stockholm University 教授	18. 5.17-18. 5.20
DEDIEU, Alain	フランス	Universite Louis Pasteur 教授	18. 5.17-18. 5.20
RADOM, Leo	オーストラリア	University of Sydney 教授	18. 5.17-18. 5.20
GADRE, Shridhar R.	インド	University of Pune 教授	18. 5.17-18. 5.20
POESCH, Notker	ドイツ	Technischen Universität München 教授	18. 5.17-18. 5.20
SAUER, Joachim	ドイツ	Humboldt Universität zu Berlin 教授	18. 5.18-18. 5.20
BRUCE, C. Garrett	アメリカ	Pacific Northwest National Laboratory Director	18. 5.18-18. 5.20
HERTEL, Ingolf	ドイツ	Max Born Institut 所長	18. 5.21-18. 5.24
SUBRAMANIAM, Chandramouli	インド	Indian Institute of Technology 大学院生	18. 5.30-18. 7.18
ZHAO, Yi	中国	University of Science and Technology of China Professor	18. 6. 1-18. 7. 8
MADDEN, Paul	イギリス	エジンバラ大学教授	18. 6.21-18. 6.24
WENNEMERS, Helma	スイス	University of Basel Professor	18. 7. 2-18. 7.11
CHIN, See Leang	カナダ	Lavaal University Professor	18. 7. 5-18. 7. 5
ZHAO, Xiang	中国	Xi'an Jiaotong University Professor	18. 7.16-18. 8.27
ANNE, S Ulrich	ドイツ	University of Karlsruhe Director	18. 7.29-18. 8. 1
GRIESINGER, Christian	ドイツ	Max-Planck-Institute for Biophysical Chemistry Director	18. 7.29-18. 8. 1
FOEHLISCH, Alexander	ドイツ	Hamburg University 助手	18. 8.14-18. 8.21
SIMON, Marc	フランス	Universite Pierre et Marie Curie Professor	18. 8.15-18. 8.22
GUO, Jinghua	アメリカ	University of California 主幹研究員	18. 8.15-18. 8.25
HAGUE, Coryn	フランス	Universite Pierre et Marie Curie Professor	18. 8.15-18. 8.25
BERGMANN, Uwe	アメリカ	Stanford University Assistant Professor	18. 8.15-18. 8.25
MUKAMEL, Shaul	アメリカ	University of California Professor	18. 8.17-18. 8.20
ALTHORPE, Stuart C	イギリス	University of Cambridge 講師	18. 8.27-18. 8.28
WANG, Baolin	中国	Huaiyin Institute of Technology Professor	18. 9.22-18.10. 1
UTSCHIG, Thomas	インド	Indian Institute of Technology 大学院生	18. 9.25-18.10.27
VIJAYARAGHABAVA, N. Dolly	インド	Indian Institute of Chemical Technology 大学院生	18.10.10-18.12.22
WUTHRICH, Kurt	スイス	Institute of Molecular Biology & Biophysics Professor	18.10.23-18.11. 1
MORTIER, Michel	フランス	パリ国立高等化学学院 フランス国立科学センター上級研究員	18.11.14-18.11.15
SUBRAMANIAM, Chandramouli	インド	Indian Institute of Technology 大学院生	18.11.21-18.12.10
林 倫年	台湾	国立台湾大学擬態科学研究中心副研究員	18.12. 4-18.12. 7
PETRE, Cristian	ルーマニア	ルーマニア国立レーザー・プラズマ・放射物理研究所副主任研究員	18.12. 8-18.12.18

## 2-16-2 国際共同研究

2006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、科学研究のグローバル化が進み、また、東アジア地区における科学研究の急速な活性化の流れの中で、21世紀にふさわしい国際共同研究拠点としての体制を構築することが急務となっている。

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。この新しい国際共同研究のプログラムでは、研究所内の教員による国際共同研究の提案を受け、所内委員による審査を経て、海外の教授、助教授クラスの研究者の10日間程度の招聘、分子研側からの共同研究に関わる教員の海外出張、アジアを中心とする若手外国人研究者の6ヶ月以内の滞在、などを伴う国際共同研究が推進されている。本プログラムによる国際共同研究の採択件数は初年度（平成16年度）7件、平成17年度10件、本年度は12件と年々増加し、分子科学研究所の国際的な研究活動の活性化に大きく寄与している。本年度は、アジアの若手研究者の長期滞在、フランス、韓国、中国、スウェーデン、カナダ、米国、ドイツ等の研究者の招聘および分子科学研究所の研究者の海外訪問などを通して共同研究が推進された。本年度開始されたアジア研究教育拠点事業とともに、明年度以降も国際共同研究の拠点としての分子科学研究所の活動に寄与することが期待される。

### 2006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
繁政 英治	分子の深い内核電子の光励起と解離ダイナミクス
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
平等 拓範	複屈折性による疑似位相整合非線形波長変換の多機能化
加藤 政博	自由電子レーザー発振のビーム力学的研究
小杉 信博	軟X線共鳴分光に関する国際共同研究（UVSOR BL3U）
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
岡本 裕巳	金属微粒子凝集体におけるプラズモン誘起電場増強の近接場分光
田中 晃二	水の光化学的酸化反応と二酸化炭素の多電子還元反応
江 東林	光捕集アンテナの分子設計および自己組織化に関する研究
小林 速男	多重機能性分子物質の開発とその構造および物性研究

## (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。第9回は2007年10月27日 - 29日に北京で開催される予定である。

## (4) 日中拠点大学交流事業（加速器科学）

本国際共同研究はアジア地域の加速器分野における交流事業であり、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年度に、日本・中国間の交流事業としてスタートしたが、現在では韓国・インドがこれに加わり多国間事業として継続している。日本の拠点機関は高エネルギー加速器研究機構であり、中国は高能物理研究所、韓国は浦項工科大学付属加速器研究所、インドはラジャ・ラマンナ先端技術センターがそれぞれ拠点機関となっている。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)電子加速器に関する研究、(B)素粒子物理学に関する研究、(C)放射光科学に関する研究の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（UVSOR）が、上記(C)の放射光科学分野での共同研究に参加している。特に、UVSORと電子エネルギーや規模の似ている中国科学技術大学の放射光施設 NSRL との間で、相互訪問を通じた人的交流を行っている。

### 2-16-3 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、全国の分子科学研究者からの申請に基づく「岡崎コンファレンス」を引き継ぐような小規模国際研究集会の枠組みをこれまで探索してきたが、継続的に開催していくためには分子研独自の事業として運営費交付金を使うしか方策がないことがわかった。その検討結果を受けて、平成18年度から再開することを決断し、6年半ぶりに以下のような第66回岡崎コンファレンスを開催した。今後、当分の間、申請の中から毎年1件のみ採択して開催し、その実績を踏まえて件数を増やすかどうか再検討する予定である。

会議名：第66回岡崎コンファレンス

“International Workshop on Soft X-ray Raman Spectroscopy and Related Phenomena (IWSXR)”

期間：2006年8月17日~19日

場所：岡崎コンファレンスセンター

組織委員：分子科学研究所 小杉信博(代表)、岡本裕巳(副)、繁政英治、初井宇記

諮問委員：中村宏樹(所長)、Joseph Nordgren(外国人運営顧問)、Marc Simon(国際共同研究者)

内容：

軟X線は窒素や酸素に吸収されるため、地上の自然界では存在していない光であり、放射光源で作成した軟X線を真空のまま取扱う必要がある。しかし、軟X線を透過する適当な薄膜を使うことで真空と切り離すことができる。薄膜を使うことで薄膜を透過しない電子やイオンなどの観測は不可能となるが、価電子により非弾性散乱した軟X線を観測するラマン分光は可能である。軟X線ラマン分光によってこれまでの軟X線分光では扱えなかった液体や溶液などの研究が可能になった。ただし、ラマン過程の遷移確率は非常に小さいため、最近の強力な放射光源を使うこと

で初めて本格的な研究が可能になる。本岡崎コンファレンスでは以下のように 18 人の招待講演者の講演を中心に軟 X 線ラマン分光と関連現象の実験及び理論について議論した。

#### **Thursday Afternoon, August 17**

Opening Remarks by Nobuhiro Kosugi

*Session 1. Fundamental Aspects (chair: Nobuhiro Kosugi)*

Joseph Nordgren, Uppsala Univ., Sweden

Resonant Soft X-ray Emission for Materials Science and Chemical Physics

Shik Shin, Univ. Tokyo/RIKEN/SPring-8, Japan

High resolution soft X-ray emission spectroscopy of transition metal compounds and heme proteins

Uwe Bergmann, Stanford Univ., U.S.A.

Advances in X-ray Raman Spectroscopy in both Resonant and Non-Resonant Applications

Kenji Ohmori, IMS, Japan

Visualizing and controlling picometric quantum ripples in molecules

Get-Together Party

#### **Friday Morning, August 18**

Welcome Address by Hiroki Nakamura (Prof., Director-General of IMS)

*Session 2. Molecules & Raman effects (chair: Takaki Hatsui)*

Marc Simon, LCP-MR, France

Resonant inelastic X-Ray scattering around the chlorine K shell of the HCl molecule: role played by the nuclear dynamics in the tender X-Ray region

Stephane Carniato, LCP-MR, France

Theoretical Simulations of Resonant Inelastic X-Ray Scattering Spectra in K-shell Cl Core-Excited Chlorinated Molecules

Victor Kimberg, IMS, Japan

Resonant X-ray Raman scattering: Doppler effect versus scattering, role of the detuning and the shape of the spectral function

Alexander Föhlisch, Hamburg Univ., Germany

Vibrational and thermal effects in resonant inelastic X-ray scattering

#### **Friday Afternoon, August 18**

*Session 3. Poster Session*

*Session 4. Materials Science and Experimental Techniques (chair: Eiji Shigemasa)*

Jinghua Guo, ALS, LBNL, U.S.A.

Resonant inelastic soft-x-ray scattering studies of nanostructured strong correlated materials

Munetaka Taguchi, RIKEN/SPring-8, Japan

Theory of Resonant Inelastic X-ray Scattering at Transition Metal L<sub>2,3</sub> edge: dd Excitation, Charge-Transfer Effects and Their Interplay

Hisashi Hayashi, Japan Women's Univ., Japan

Resonant inelastic x-ray scattering spectroscopy for advanced XAFS studies

Takashi Tokushima, RIKEN/SPring-8, Japan

Development of a high performance slit-less spectrometer and a liquid flow cell for soft X-ray emission spectroscopy

Takaki Hatsui, IMS, Japan

Development and performance of a transmission-grating spectrometer for soft X-ray emission studies

Coryn Hague, LCP-MR, France

Preparing for resonant soft x-ray Raman spectroscopy at SOLEIL

Conference Dinner

#### **Saturday Morning, August 19**

*Session 5. Water and Solutions (chair: Hiromi Okamoto)*

Lars G.M. Pettersson, Stockholm Univ., Sweden

Theoretical and experimental x-ray investigations of liquid water structure

Shinji Saito, IMS, Japan

Theoretical study of two-dimensional Raman spectroscopy: Anharmonic dynamics and local hydrogen bond network structure in liquid and solid water

Susumu Okazaki, IMS, Japan

A molecular dynamics study of vibrational relaxation of solute molecule in solution

Shaul Mukamel, Univ. California, Irvine, U.S.A.

Non-linear ultrafast X-ray spectroscopy; Theoretical challenges

Closing Remarks by Nobuhiro Kosugi

## 2-16-4 アジア研究教育拠点事業

日本学術振興会は、平成 17 年度より新たな多国間交流事業として、アジア研究教育拠点事業（以下アジアコア事業）を開始した。本事業は、我が国において先端的又は国際的に重要と認められる研究課題について、我が国とアジア諸国の研究教育拠点機関をつなぐ持続的な協力関係を確立することにより、当該分野における世界的水準の研究拠点の構築とともに次世代の中核を担う若手研究者の養成を目的として実施されるものである。

分子科学研究所は、「物質・光・理論分子科学のフロンティア」と題して、この日本学術振興会アジアコア事業に提案し、18 年度開始事業（23 年度 3 月まで）として採択された。具体的な拠点機関は以下の通り東アジア主要 3 カ国 1 地域である。

- ・分子科学研究所
- ・中国科学院化学研究所
- ・韓国科学技術院自然科学部
- ・台湾科学院原子分子科学研究所

これら 4 拠点研究機関以外の大学や研究機関も研究交流に参加することができる。21 世紀はアジアの時代と言われており、本事業を契機に分子科学においても欧米主導の時代を離れ、新たな研究拠点をアジア地域に構築し、さらにはアジア拠点と欧米ネットワークを有機的に接続することによって、世界的な研究の活性化と新しいサイエンスの出現をねらう。

平成 18 年度に実施した内容は以下の通り。

(1) H18 年 11 月 29 日 中国・日本グリーン化学合成シンポジウム（北京、中国科学院化学研究所）

参加者国別内訳は以下のとおり。

日本 8 人、中国 80 人

(2) H18 年 12 月 5 日～9 日 第 1 回冬の学校（北京、中国科学院化学研究所）

参加者国別内訳は以下のとおり。

日本 30 人、中国 42 人、韓国 12 人、台湾 9 人

(3) H19 年 3 月 2 日～3 日 第 1 回全体会議（分子科学研究所）

参加者国別内訳は以下のとおり。

日本 91 人、中国 7 人、韓国 6 人、台湾 4 人、米国 2 人

(4) 一対一共同研究

これまで積み重ねてきた研究拠点機関間の研究者の交流を再構築し、物質・光・理論分子科学の各分野において活発な共同研究、研究交流を開始した。

物質分子科学

分子科学研究所の江東林助教授と中国科学院化学研究所の Deqing Zhang 教授は、浙江大学（中国）の Zhiqian Shen 教授と共に「電子系有機分子を基盤とする機能性ナノ構造体の構築と機能開拓」に関する共同研究を開始した。本共同研究は従来の炭素ナノ素材では実現できない光機能性に着目し、光機能性電子系有機分子を設計し、様々な光

機能性ナノ構造体を合成することを目的としている。江東林助教授グループの物質合成と化学研究所の Deqing Zhang 教授グループの自己組織化、また、浙江大学 Zhiquan Shen 教授グループの物質変換科学との異分野のシームレスな融合により新しい物質科学の創出および世界をリードするアジア若手の育成を目指している。平成 18 年度では、上述の戦略目標を達成するため、様々な新しい機能性 電子系有機分子や 電子系有機配位子の設計および合成を行い、自己組織化のための分子プログラミングプロトコルを確立するとともに、ナノ構造体の分子設計の基礎を築いた。得られたナノ構造体の情報を分子設計にフィードバックし、分子構造の最適化を進めている。

分子科学研究所の宇理須恒雄教授と中国科学院化学研究所の Li-Jun Wan 教授は、河南大学（中国）の Yu-Jun Mo 教授、上海交通大学（中国）の Changsun Wang 教授と共に、細胞等の生体材料の水中での原子間力顕微鏡による高分解イメージングについての共同研究を開始した。平成 18 年度は、生体細胞膜の AFM その場観察、脂質二重膜の AFM および光学的評価、Si 基板の微細加工および、バイオセンサー応用についての研究を進めた。

分子科学研究所の加藤晃一教授と韓国科学技術院（KAIST）自然科学部の Byong-Seok Choi 教授は、光州科学技術院（Kwangju Institute of Science & Technology, 韓国）の Jae Il Kim 教授と共に「超高磁場 NMR を用いた蛋白質 - ペプチド相互作用の精密解析」に関する共同研究を開始した。分子科学研究所に設置された 920MHz 超高磁場 NMR 装置はペプチドと蛋白質の相互作用を高精度で解析するための強力なツールとなることが期待される。本共同研究は、ペプチド合成と分子生物学的手法を駆使することによって、安定同位体標識を施したペプチドおよび糖ペプチドを効率的に生産し、超高磁場 NMR をはじめとする分光学的計測手法を徹底活用して標的蛋白質との結合様式の詳細を原子レベルの分解能で解明することを目的としている。さらには、本共同研究を基盤として、超高磁場 NMR 装置の活用を軸とした、日韓の分子科学の学術交流ひいてはアジアの研究教育の振興に資することを目標としている。

#### 光分子科学

分子科学研究所の岡本裕巳教授と中国科学院化学研究所の Minghua Liu 教授は、「特異なナノ分子システムのナノ光学」に関する共同研究を開始した。本研究では、独自の高度な技術を持つ物質開発グループ（Liu 教授グループ）と光計測グループ（岡本教授グループ）が国際的に協力することで、ナノ構造物質の新たな光学的・物理化学的性質を見だし解明し、新たな機能を開発することを目標としている。18 年度はそのための準備段階として、互いの研究グループのポテンシャルをよく理解し、最も効率的で学術的に有意義な共同研究がどのような形であるかを、研究者の相互訪問によって議論し、同時に互いの信頼関係の確立を進めた。

分子科学研究所の大島康裕教授と台湾科学院原子分子科学研究所（IAMS）の Yen-Chu Hsu 上級研究員は、同じく IAMS の Chi-Kung Ni 研究員、国立清華大学（台湾）の I-Chia Chen 教授、国立中央大学（台湾）の Bor-Chen Chang 教授と共に「コヒーレントレーザー分光による反応ダイナミックスの解明」に関する共同研究を開始した。本研究計画は、通常のパルスレーザーに比較して格段に高いコヒーレンスを有するレーザーを開発して高分解能コヒーレント分光に活用することにより、光励起した分子が引き起こす多様な化学反応や緩和過程の詳細を解明し、さらに、そのような励起分子のダイナミックスが周辺環境との相互作用によってどのように影響されるかを明らかにすることを目的としている。18 年度は、日本より研究者 4 名が台湾 IAMS を訪問、また、台湾より研究者 3 名が分子研を訪問し、ナノ秒コヒーレントパルス光源の性能評価ならびに利用法について意見交換を行なった。

## 理論分子科学

分子科学研究所の岡崎進教授と台湾科学院原子分子科学研究所 (IAMS) の Dah-Yen Yang 上級研究員は、分子研の森田明弘助教授、IAMS の S. H. Lin 上級研究員、国立陽明大学 (台湾) の Sheh-Yi Sheu 教授と共に「生体分子中における量子過程の計算機シミュレーション」についての具体的な課題設定等、検討を開始した。本研究では、タンパク質や生体膜など生体分子の機能発現に本質的な役割を果たしているプロトン移動や電子移動、さらにこれらの過程に密接に関連している振動励起や緩和などの量子過程に対する計算科学的研究手法の確立を目的とし、主として量子統計力学や量子古典混合系近似等を用いたシミュレーション手法の開発を行う。18年度は、台湾側参加者が得意とするタンパク質のダイナミクスに関わる手法と、日本側参加者が得意とする原子核の量子動力学に関わる手法とを比較検討し、両者の方法論を共有・融合することからはじめて、具体的な研究内容についての検討を開始した。

## 2-17 自然科学研究機構連携事業

### 2-17-1 イメージング・サイエンス

#### (1) 経緯と現状

研究所の法人化に伴い5研究所を擁する自然科学研究機構が発足し、5研究所をまたぐ新研究領域創成の一つのプロジェクトとして「イメージング・サイエンス」が取り上げられることとなった。以下に、その経緯と現状について述べる。

平成16年度に機構が発足した後、研究連携室で議論がなされ、機構内連携の一つのテーマとして「イメージング・サイエンス」を立ち上げることが決定された。連携室員の中から数名の他に、各研究所からイメージングに関連する研究を行っている教授・助教授1～2名が招集され、「イメージング・サイエンス」小委員会として、公開シンポジウムその他プロジェクトの推進を担当することとなった。

平成17年8月の公開シンポジウム（後述）の後、小委員会において、本プロジェクトの具体的な推進について議論を行った。この機会に、各研究所が持つ独自のバックグラウンドを元に、それらを結集して、広い分野にわたる波及効果をもたらすような、新しいイメージング計測・解析法の萌芽を見いだすことが理想、という議論がなされた。それに向けた方策として、機構内の複数の研究所にまたがる、イメージングに関連する具体的な連携研究テーマをいくつか立てる案を連携室に提案したが、予算の問題等もあってこれは実現しなかった。

現状では、機構の特別教育研究経費「分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成」の新分野創成型連携プロジェクトの項目として、イメージングに関連した研究所をまたがる提案が数件採択されている（「イメージング・サイエンス——超高圧位相差電子顕微鏡をベースとした光顕・電顕関連3次元イメージング——」など）。これが上述の提案に代わるものとして、「イメージング・サイエンス」に係る具体的な機構内連携研究を推進している。

#### (2) 実施された行事

このプロジェクトの具体的な最初の行事として、各研究所のイメージングに関わる興味の対象と研究ポテンシャルを、5研究所が互いに知ることを目的として、「イメージング・サイエンス」に関する公開シンポジウムを開催することとなった。

平成17年8月8日～9日に、「連携研究プロジェクト Imaging Science 第1回シンポジウム」として、公開シンポジウムが岡崎コンファレンスセンターで開催された。このシンポジウムでは、天文学、核融合科学、基礎生物学、生理学、分子科学におけるイメージング関連研究に関する、機構内外の講師による16件の講演、及び今後の分野間連携研究に関する全体討論が行われた。参加者は機構外36名、機構内148名、大学院生80名、合計264名を数えた。また、講演と全体討論の内容は、175ページのプロシーディングス（日本語）としてまとめられ、同年12月に発行された。この機会によって機構内のイメージング・サイエンス関連研究に関する研究所間の相互理解が進み、その後の機構内連携研究の推進に相当に寄与したと考えられる。

平成18年3月21日には、立花隆氏のコーディネート、自然科学研究機構主催で「自然科学の挑戦シンポジウム」が東京・大手町で開催された。これは、一般の観客を対象に、機構の研究アクティビティーをアピールすることを目的として、立花氏が企画して実現したもので、当日は約600名収容の会場がほぼ満席となる一般参加者があった。このシンポジウムの中で、「21世紀はイメージング・サイエンスの時代」と称して、イメージングを主題とするパネルディスカッションが組まれた。ここにはパネラーとして「イメージング・サイエンス」小委員会委員を中心とする講師によって、5研究所全てから、各研究所で行われているイメージング関連の研究の例が紹介され、最後に講師が集

まりパネルディスカッションが開かれた。

平成 18 年 12 月 5 日 - 8 日には、第 16 回国際土岐コンファレンス（核融合科学を中心とする国際研究集会）が核融合研究所主催で土岐市において開催された。この会議ではサブテーマが “ Advanced Imaging and Plasma Diagnostics ” とされ、プラズマ科学に限らず、天文学、生物学、原子・分子科学を含む広い分野におけるイメージング一般に関するシンポジウムとポスターセッションが企画された。分子科学研究所からも、数名が参加し、講演及びポスター発表を行った。

## 2-17-2 自然科学研究機構 新分野創成型連携プロジェクト 自然科学における階層と全体

自然科学研究機構の新分野創成型連携プロジェクトとして実施されている「自然科学における階層と全体」は、分子科学研究所、生理学研究所、基礎生物学研究所により実施されている「プロジェクト 1：生物系における情報統合と階層連結」と核融合科学研究所、国立天文台を中心として実施されている「プロジェクト 2：重力多体系・プラズマ系における連結階層シミュレーション研究拠点形成 長距離相互作用が支配する多体複雑系での連結階層シミュレーション研究拠点形成」の二つのプロジェクトを中心にしている。全体会議、シンポジウム等は、2つのテーマを合同で扱い、自然科学に於ける階層と全体という新しい視点で自然科学の理解を深め、新分野創成に繋げて行くことを目指している。

分子科学研究所が主に関与しているプロジェクト 1 の概要は、以下の通りである。生物系における研究においては、遺伝子や蛋白質に関する分子レベルでの膨大な情報が得られている一方で、これら分子レベルの情報から、生理機能の発現や形態形成などの「生物らしい」振る舞いが生じるプロセスについては、未解明な点が多く残されている。これは、生体が、分子、細胞、器官、個体といった異なる階層により構成されていることにも起因している。生体機能の成り立ちを知るためには、各階層において「階層を構成する素子（エレメント）についての理解」から始まり、「階層内でのエレメントの複合体化と情報のやりとりによる機能創出機構」の解明、さらには「上位階層への連結機構」を明らかにすることが必要である。分子・細胞の階層を例にあげると、各分子の機能を明らかにするだけでなく、分子複合体形成による新規機能の創出、分子間の情報伝達による機能統合を知ることにより、はじめて、細胞機能の成り立ちの仕組みが理解できると考えられる。すなわち、遺伝子や蛋白質など分子レベルの情報が、細胞機能のようなマクロなレベルへ伝達される過程を理解すること、分子が担う情報がよりマクロな階層で統合され、細胞や組織さらには個体の振る舞いが創発される過程を理解することが、我々が取り組むべき課題であるとも言える。

本プロジェクトにおいては、異なる研究バックグラウンドを有する研究者が、上記のような意識を共有した上で、有機的な連携を計りつつ、「生物系における情報統合と階層連結」に関する包括的理解に向けて、具体的には以下に述べるような研究を行う。分子科学研究所からは、小澤岳昌助教授がテーマ(1)、青野重利教授がテーマ(2)に関する研究を進める。

テーマ(1): 生体内における情報統合および機能統合を解析するための新規な研究ツールの開発を目的として研究を行う。本研究では、タンパク質再構成系 (protein reconstitution system) という新たな概念に基づくレポータータンパク質を創案・開発し、生きた動植物個体内で機能する生体分子を可視化するための、新たな原理に基づくプローブ分子を開発する。具体的には、RNA、タンパク質間相互作用、タンパク質リン酸化、酵素活性、セカンドメッセンジャー、ステロイドホルモン等を標的とし、蛍光あるいは発光に情報変換するプローブ分子を開発する。また、他の研究グループの研究に対し、このようにして開発したプローブ分子の積極的な適用を計る。

テーマ(2): 分子間情報伝達による情報統合および機能統合の分子機構解明を目的として研究を行う。本研究では、外部情報による遺伝子発現ネットワークの制御に関するセンサー型転写調節因子、外部情報(外部環境シグナル)による細胞運動制御系である走化性制御系を対象として研究を行う。特に、センサー型転写調節因子による外部情報センシング機構および遺伝子発現調節機構の解明、走化性制御系における情報統合機構の解明、ならびに統合された情報が如何にして細胞の運動制御というマクロな性質に反映されるのか、その分子機構の解明を中心に研究を進める。

テーマ(3): 分子階層における情報の統合により細胞階層での機能を理解することを目的として研究を行う。本研究では、イオンチャネル・受容体等の神経細胞の機能素子の、分子間相互作用や分子複合体形成による機能修飾に関する研究を行う。具体的には、代謝型グルタミン酸受容体の分子複合体形成によるG蛋白質応答の種類の変更、ATP受容体チャネルの発現状況依存的な構造と機能の変化、細胞長伸縮に寄与する陰イオントランスポーターファミリーに属するプレスチンの分子複合体の同定とその機能的意義の解析に焦点をあてて研究を進める。

テーマ(4): 生体情報の統合による個体階層での行動の規定について理解することを目的として研究を行う。本研究では、空腹等の生体情報や、脂肪細胞由来の液性調節因子レプチン等による情報が視床下部で統合されて、摂食行動やエネルギー消費行動に結びつく機構を明らかにする。なかでも、視床下部における生体情報の統合に重要な役割を果たしている酵素AMPキナーゼの働きに着目して、この遺伝子を改変した実験動物等を用いて行動レベルでの研究を進める。

テーマ(5): 情報が統合され機能が創出される過程を、数理的手法を用いて研究する。本研究では、シグナル分子の個別的な相互作用から、分子の時空間分布の非一様性が作り出され、生体機能が生まれる過程を、ダイナミクスとして捉え、微分方程式系などを用いて解析する。具体的には連携内の他のグループの実験データを対象とした共同研究を目指す。生体機能創出に必要な、分子間相互作用の条件を、力学系理論を元に定める。これにより、分子階層における情報を統合し、機能階層の視点から意義付けを行うと同時に、それぞれの階層における振る舞いを予測する。

テーマ(6): 分子キラリティのような分子レベルでの情報が、細胞や個体といった上位階層の情報に展開されていく過程の解明を目的として研究を行う。本研究では、発生における生物の左右性決定において、マウス初期胚の繊毛が作る左向き水流(ノード流)の役割を解明する。ケモルミネッセンスや二光子顕微鏡といったイメージング技術を用い、*in vivo*でノード流がどのような水流のパターンを作るか調べる。また水流が体の右側と左側の細胞に何らかの差を生み出す機構として、シグナル分子の不均一な拡散、あるいは分子ではなく物理的な刺激が働いている可能性を想定し、シミュレーションによる検討を行うと共に、カルシウム濃度や膜電位の測定、分子プローブによってその実体を探索する。

今年度は、7月19日、20日の二日間、箱根において「自然科学における階層と全体」第3回シンポジウムを開催した。本シンポジウムには、外部からの講演者とプロジェクト1ならびにプロジェクト2に参加している研究者からの講演の他、全体討論を行い今後のプロジェクトの進め方についても議論した。12月25日には、岡崎において「プロジェクト1: 生物系における情報統合と階層連結」に参加しているメンバーによる今年度の成果報告会を行い、成果の総括と今後の方針が話し合われた。

## 2-17-3 分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成 巨大計算新手法の開発と分子・物質シミュレーション中核拠点の形成

方法論の開発からそれに基づいた巨大計算にいたるまで、分子・物質の第一原理から出発した計算科学研究の中核拠点を形成し、物質科学および分子・物質を核とするナノサイエンス、バイオサイエンス等の自然科学の諸分野における世界の主導権を獲得することを目的として、分野間連携に基づいて、分子科学、核融合科学、生命科学、天文学といった異なる自然科学階層に属する各分野での異なる物質観、異なる方法論をお互いに共有しまた融合することにより、特に大規模複雑系を構成する分子・物質に対する計算科学研究にブレークスルーを実現するとともに、それぞれの分野においても方法論に新機軸をもたらし、学際的新分野を形成することを目指している。

更に、機構内外におけるこのような活動を通して、分子・物質シミュレーションナショナルセンター形成へ向けての基盤形成を行っている。

このため、2006年度は、連携研究、ワークショップ、人材育成等について以下に示すような活動を行った。

### (1) 連携研究

連携推進課題（3課題）（\*責任者）

- ・巨大計算に向けた粒子シミュレーション手法の開発（分子研・岡崎\*、平田、永瀬、斉藤、核融合研・堀内、天文台・富阪、東大・北尾、産総研・森下）
- ・分子多量体形成と生理機能（基生研・望月\*、生理研・永山、分子研・斉藤、岡崎、東大・北尾）
- ・物質・電磁場相互作用系のシミュレーション（分子研・信定\*、米満、森田、核融合研・中島）

連携課題（13課題）

- ・プラズマ大規模シミュレーションのための効率的並列計算手法開発（核融合研・堀内、中島）
- ・輻射輸送計算を用いた星間化学進化の研究（天文台・富阪）
- ・ミトコンドリアの energetics simulation（生理研・永山）
- ・概日リズム振動の生体分子反応シミュレーション（基生研・望月）
- ・両親媒性分子水溶液の大規模分子動力学計算（岡崎）
- ・量子古典結合多粒子系の非平衡集団運動制御の理論（米満）
- ・界面和周波発生分光の理論計算手法の開発（森田）
- ・ナノ分子の量子化学計算（永瀬）
- ・電磁場と露わに相互作用した多電子ダイナミックスの解析（信定）
- ・3次元 RISM による分子認識（平田）
- ・分子動力学計算に基づく凝縮系ダイナミックス（斉藤）
- ・第一原理分子動力学計算による液体及びアモルファスのポリモルフィズム（産総研・森下）
- ・生体超分子の立体構造変化と機能（東大・北尾）

### (2) ライブラリの整備

### (3) ワークショップ

- ・第3回連携シンポジウム 3月15日
- ・第2回国際シンポジウム 5月17日 - 19日
- ・分子・物質シミュレーション中核拠点セミナー 第11回～第20回
- ・討論会、学会の共催

#### (4) 人材育成

##### 第2回集中セミナー

「QM/MM法の基礎と応用 - 大規模分子計算へのアプローチ」12月25日 - 27日

#### (5) 実施体制

機構内12グループ 計算分子科学、理論分子科学、天文台、核融合研、生理研、基生研

機構外2グループ 東大、産総研

## 2-17-4 自然科学研究機構シンポジウム

### 「爆発する光科学の世界 量子から生命体まで」

分子科学研究所が中心となって、平成18年9月24日(日)に東京国際フォーラム(東京都千代田区)にて自然科学研究機構シンポジウムを開催した。前回の平成18年3月22日第1回に続き、2度目の開催であった。当日は、台風が心配されたが秋晴れとなり、関係者を除き525人の参加者で会場が埋め尽くされた。

今回のシンポジウムでは「光科学」をキーワードに、分子科学研究所が中心となり、光科学に関する最先端の研究を紹介した。講演会は「新しい光源」、「光と分子」、「光と生命体」の3部構成で行われた。まず、志村機構長の開会の辞に続いて、立花隆氏が聞きどころを紹介された。つづいて、松本吉泰教授がイントロダクションとして「新しい光源、光と分子」の概説と光の性質についての基礎的な話をした。その後、分子研が頻繁に利用する2種類の光源の紹介として、平等拓範助教授が手のひらサイズの高輝度レーザーの最先端について、加藤政博教授からシンクロトロン放射の原理や分子研放射光施設 UVSOR-II の紹介および今後の展望について講演した。平等助教授が光源の小型化と単色性の重要性を強調し、加藤教授が大型加速器を用いた白色性を重視したのは対照的であった。

午後は、大森賢治教授が、量子力学の不思議として光の二重性(粒子性と波動性)、自身のアト秒精度での原子波の干渉実験、分子を使った量子メモリーなどに関して紹介した。次に化学の話に移り、江東林助教授は、 dendrimer 分子を利用し、枝の部分で吸収した光エネルギーを分子中心に集めることが出来る分子設計、水の光還元、さらに医療への応用やその将来性について講演した。続いて、藤嶋昭先生(神奈川科学技術アカデミー理事長)はご自身の本多・藤嶋効果の発見から現在に至る一貫した TiO<sub>2</sub> 光触媒の基礎的、応用的研究に関して熱弁下さった。

続いて、光と生命体へと話が移り、三室守先生(京都大学)の概説に引き続き、基礎生物学研究所の和田正三先生が葉緑体の光感知と細胞内移動について、総合研究大学院大学・基礎生物学研究所の渡辺正勝先生がミドリムシの光センサーについて、生理学研究所の鍋倉淳一先生が二光子顕微鏡による脳の神経ネットワーク観察について講演された。

すべての講演の後には立花隆氏が質問やコメントをする時間を設けた。同氏の時には刺激的な質問やコメントは聴衆が違った角度から講演内容を捉えるのに役立ったと考えられる。また、最後の総括では、立花隆氏が、光科学は幅広く生活に関係し、今後日本の技術発展にどれほど必要で重要であるかを述べられた。閉会の辞として、分子研の中村宏樹所長が今後の光科学の展望と多くの方の静聴に対する謝辞を述べ、会は終了した。

前回は引き続き今回もほとんど途中で席を立つ参加者もなく、朝10時から夕方5時30分まで終始大盛況であった。話題が豊富すぎ、プログラムがタイトすぎだったかもしれず、お昼の休憩や講演の合間に展示の説明をする時間がほとんどとれなかった。それでもわずかな時間に多くの方が展示にも足を運んでくださった。参加された方の長時間にわたる熱心なご静聴と自然科学への熱い想いに感謝したい。

## プログラム

10:00 ~ 10:05	機構長挨拶 志村令郎（自然科学研究機構）
10:05 ~ 10:10	趣旨説明 プログラムコーディネーター 立花 隆
<b>【新しい光源】</b>	
10:10 ~ 10:25	Overview 松本吉泰（分子科学研究所）
10:25 ~ 11:05	光シンセサイザーを手のひらに——マイクロ固体フォトニクスの新展開—— 平等拓範（分子科学研究所）
11:05 ~ 11:45	宇宙の光を地上でつくる——シンクロトロン光源—— 加藤政博（分子科学研究所）
11:45 ~ 12:50	休憩
<b>【光と分子】</b>	
12:50 ~ 13:30	量子のさざ波を光で制御する 大森賢治（分子科学研究所）
13:30 ~ 14:10	光を吸う分子の木 江 東林（分子科学研究所）
14:10 ~ 14:50	光触媒がもたらす安全・安心な社会 藤嶋 昭（神奈川科学技術アカデミー）
14:50 ~ 15:05	休憩
<b>【光と生命体】</b>	
15:05 ~ 15:20	Overview 三室 守（京都大学）
15:20 ~ 16:00	葉緑体の光による細胞内移動 和田正三（基礎生物学研究所）
16:00 ~ 16:40	光を見る微生物のしくみ 渡邊正勝（総合研究大学院大学・基礎生物学研究所）
16:40 ~ 17:20	発達する脳を光で見よう 鍋倉淳一（生理学研究所）
17:20 ~ 17:25	総括 プログラムコーディネーター 立花 隆
17:25 ~ 17:30	閉会挨拶 中村宏樹（分子科学研究所長）

各講演内容の詳細は立花ゼミ公式サイト「サイ」<http://www.kuba.co.jp/nins/index.html> に紹介されている。

## 2-18 大学院教育

### 2-18-1 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 ~ 96	97	98	99	00	01	02	03	04	05	06
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	29	1	1								
東京工業大学	24					4	6	6	2		
お茶の水女子大学	6										
横浜国立大学	1										
金沢大学	6	3			1	1					
新潟大学	4										1
福井大学	4		1	3	2						
信州大学	2	1				1					
岐阜大学	2										
名古屋大学	61	3	3	1	2	6	2	2			3
愛知教育大学											1
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	30	2	2	1	3	1	1			2	1
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	24				1	1					
神戸大学		1	1	1	1		1				
奈良教育大学	1										
奈良女子大学	4										
島根大学							1				
岡山大学	10	1				2	2			1	
広島大学	32			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	34	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		
首都大学東京	17								2		1
名古屋市立大学					4					9	8
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	2	5	2			1	1	1	1		
明治大学											1
名城大学		2	2								
岡山理科大学										1	
計	400	27	28	19	27	31	28	26	17	14	16

## 2-18-2 総合研究大学院大学二専攻

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（2006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	22
機能分子科学専攻	10	9	15
計	20	18	37

在籍学生数（2006年12月現在）単位：人

入学年度専攻		2003年度	2004年度	2005年度	2006年度	計	定員
構造分子科学専攻	5年一貫	0	0	0	1	1	2
	博士後期	2	6	8	9	25	3
機能分子科学専攻	5年一貫	0	0	0	0	0	2
	博士後期	3	5	4	4	16	3

2006年度から5年一貫を導入 定員は2005年度まで博士後期6人

学位取得状況 単位：人

（年度別）

専攻	1991～96	97	98	99	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	36(3)	1(3)	8(2)	7(2)	8(1)	3	11	6	3	7	1	91(11)
機能分子科学専攻	33(3)	3(2)	6	6(1)	6	5	5(4)	1	5(4)	4	0	74(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	1989～96	97	98	99	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006
構造分子科学専攻	55	10	12	5	8	5	3	7	7	8	11(1)
機能分子科学専攻	54	9	7	6	0	7	6	6	6	7	4

( )は5年一貫制で内数

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		
	1989-2004年度	2005年度	2006年度	1989-2004年度	2005年度	2006年度
中国	10		5	4		
フランス				1		
ロシア				1		
バングラディッシュ	4	2		1		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	
タイ						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 ~ '04	'05 年度	'06 年度	'89 ~ '04	'05 年度	'06 年度	
北海道大学		1	1	2			4
室蘭工業大学			1	1			2
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		1	8
東京大学	6		1	8			15
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	2			1			3
名古屋大学	2			4			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			4			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	4			2	1		7
東京都立大学				1		1	2
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
兵庫県立大学			1				1
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			1(1)	2			3(1)
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			2
*その他	19	2	5	10	3	2	41

\* 外国の大学等

( ) は 5 年一貫制で内数

修了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

### 2-18-3 オープンハウス

2006 年 6 月 3 日 ( 土 ), 第 16 回分子科学研究所オープンハウスを開催した。本行事は, 全国の大学院生, 学部学生および社会人を対象に, 分子研で行なわれている研究内容を分かり易く解説するとともに, 総合研究大学院大学の基盤機関としての教育活動について, 外部の方々にも広く知って頂くことを目的としている。3 月末からホームページで告知をはじめ, 広報を通してポスターを大学関係者および生協に掲示を依頼した。総参加人数は 50 名, 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	0	0	0	0
関東（東京，神奈川，千葉）	3	10	3	0
信越・北陸（富山）	0	1	0	0
東海（愛知，静岡，岐阜）	4	7	0	1
関西（京都，大阪，兵庫）	10	6	0	0
中国（岡山，広島）	1	1	0	0
四国	0	0	0	0
九州・沖縄（福岡，宮崎）	1	1	1	0
合計 50名	19	26	4	1

（都道府県名は参加者がいるところのみ記載）

## 2-18-4 夏の体験入学

2006年8月7日から10日にわたって、「分子科学研究所夏の体験入学」を行った。全国の大学生・大学院修士課程学生を対象に、分子研での研究活動の体験を通して研究所を基盤とする大学院の特色を知ってもらうことを目的としている。総研大の新入生確保のための広報的事業として総研大本部から特定教育研究経費の予算援助を受け、総研大物理科学研究科の主催行事として2004年から開始し、今回で3回目の開催となった。広報活動等を国立天文台・核融合科学研究所・宇宙航空研究開発機構とともに共同で行い、実際の研究体験は各研究所独自に行った。

分子研での体験入学は、下記のスケジュールに従って進めた。前回の参加者のアンケート結果をもとに、今回からは体験内容をあらかじめ公表して参加申し込みを募った。

8月7日：体験内容紹介，放射光実験施設・計算科学研究センターの見学，集合写真撮影，歓迎会

8月8，9日：二つのキャンパス（明大寺・山手）に分かれて，研究体験

8月10日：全ての参加者による体験内容の報告・発表

参加者の内訳，体験内容，対応教員は以下の通りである。

	所属	学年	体験内容	対応教員
1	大阪府立大学	学部3年	ナノの金属ロッドを作って波動関数を見る	岡本教授
2	京都大学	学部2年	新しい電子物性を狙った分子物質開発	鈴木助教授
3	名古屋大学	学部3年	金属錯体の合成実験——フェロセンの合成	川口助教授
4	東海大学	学部3年	スピン転移物質の合成	江助教授
5	慶應義塾大学	学部3年	極短パルス光による反応イメージングと制御	菱川助教授
6	北里大学	学部1年	レーザー光イオン化質量分析法による共鳴イオン化スペクトルの測定	大島教授
7	名古屋大学	修士課程2年	分子の配列を観察しよう	小川教授
8	日本大学	学部2年	金クラスターの精密合成	佃助教授

9	日本大学	学部 2 年	クラスター触媒を用いた反応の一例を体験	櫻井助教授
10	静岡大学	修士課程 1 年	固体広幅 NMR 装置を体験するとともに、最先端の ESR 装置を使って分子性固体の電子状態（磁性・伝導性）を実測してみよう	中村助教授
11	東京理科大学	学部 4 年	同上	中村助教授
12	首都大学東京	修士課程 1 年	二酸化炭素の還元反応に関する研究を体験	田中教授
13	首都大学東京	学部 2 年	量子化学の基礎にふれ、実際にプログラムを使ってみよう	永瀬教授
14	京都大学	学部 2 年	生体分子の細胞内動態を解析する	小澤助教授
15	学習院大学	学部 4 年	光合成モデル化合物の合成	永田助教授
16	鹿児島大学	学部 2 年	量子論におけるダイナミクスとは何であるかを数値実験を通して体感しよう！	信定助教授

## 2-18-5 総研大アジア冬の学校

総合研究大学院大学の 2006 年度特定研究教育経費を得て、「アジア冬の学校 2006」を 2006 年 11 月 20 日（月）～ 22 日（水）の日程で岡崎コンファレンスセンターにて開催した。これは 2002 年に開催された「岡崎レクチャー（アジア冬の学校）」の流れを汲む企画で、総合研究大学院大学物理科学研究科 5 専攻の連携事業として行われるようになって 2 度目の開催となる。本年度は、国内およびアジア諸国からの学生・若手研究者を対象に、“Frontiers in Molecular Science: Electronic and Structural Properties of Molecules and Nano Materials”をテーマとして、集中講義 1 件、セミナー 6 件の講義（すべて英語）が行われた。

参加者は合計 45 名で、アジア諸国（韓国、中国、インド、バングラディッシュ、台湾、タイ、フィリピン）からの参加者は 26 名、国内からは 19 名の参加があり、そのうち総研大生は 3 名であった。プログラムは下記の通りである。

### I. Lectures (6 hours)

小杉信博，“Molecular Spectroscopy and Electronic Structure Theory”

### II. Topical Reviews (1.5 hours for each lecturer)

大島康裕，“Fundamentals of Molecular Spectroscopy as Micro- and Macroscopic Probes in Labo and Field”

岡本裕巳，“Near-field Imaging/Spectroscopy of Nanomaterials”

小川琢治，“Preparation of Organic Molecules and Inorganic Nano-Structures toward Molecular Scale Nano Devices”

佃 達哉，“Structure and Properties of Gold Clusters Stabilized by Organic Molecules”

菱川明栄，“Molecules in Few-Cycle Intense Laser Fields”

廣田朋也（国立天文台），“Astrochemistry—Molecules in space”

### III. Time Table

#### *November 20th, 2006*

8:50- 9:00	Opening
9:00-10:30	Nobuhiro Kosugi I
10:40-12:00	Hiromi Okamoto
12:00-14:00	Lunch
14:00-15:30	Tatsuya Tsukuda
15:40-17:10	Takuji Ogawa (IMS)
18:00-20:00	Poster Session

#### *November 21st, 2006*

9:00-10:30	Nobuhiro Kosugi II
10:40-12:00	Yasuhiro Ohshima
12:00-14:00	Lunch
14:00-15:30	Tomoya Hirota
15:40-17:10	Akiyoshi Hishikawa
18:00-20:00	Poster Session

#### *November 22nd, 2006*

9:00-10:30	Nobuhiro Kosugi III
10:40-12:00	Nobuhiro Kosugi IV
12:00	Closing

## 2-19 財政

### 2-19-1 現員

2006.12.1

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(1)	2(1)	3	7(2)		7(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)	2	5(2)		5(2)
相關領域研究系		0(1)	1(1)	2	3(2)		3(2)
極端紫外光科学研究系		2(0)	2(0)	4	8(0)		8(0)
計算分子科学研究系		2(0)	1(0)	3	6(0)		6(0)
研究施設		5(6)	8(2)	18	31(8)		31(8)
技術課						35	35
計	1	18(11)	17(7)	40	76(18)	35	111(18)
岡崎統合バイオサイエンスセンター		1(2)	1(0)	0	2(2)		2(2)
合計	1	19(13)	18(7)	40	78(20)	35	113(20)

( )内は客員及び兼任者数で外数である。

### 2-19-2 財政

(単位：千円)

科目等 \ 年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度	2006年度
人件費	1,247,966	1,274,750	1,264,647	1,298,382	1,295,705
運営費, 設備費	3,958,941	2,654,747	2,374,388	2,011,607	1,859,207
施設整備費	1,378,504	8,027,621	5,577	1,618,332	0
合計	6,585,411	11,957,118	3,644,612	4,928,321	3,154,912

\* 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

2006年12月31日現在

区分	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度	2006年度
件数(件)	14	16	15	17	14	24	10
金額(千円)	18,350	14,950	18,350	15,300	9,257	35,622	13,225

共通研究施設を除く

科学研究費補助金

区分	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度	2006年度
件数(件)	82	82	59	62	59	59	70
金額(千円)	384,803	506,564	434,556	728,415	249,900	240,200	342,560

\* 2006年度は2006年12月31日現在  
岡崎共通研究施設を除く

2006年度科学研究費補助金

2006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
学術創成研究費		2	0	2
特別推進研究		1	0	1
特定領域研究		24	1	25
萌芽研究		2	0	2
若手研究	(A)	1	0	1
若手研究	(B)	19	0	19
基盤研究	(S)	1	0	1
基盤研究	(A)	5	0	5
基盤研究	(B)	9	2	11
基盤研究	(C)	2	0	2
特別研究員奨励費		1	1	2
特別研究員奨励費	外国人	1	0	1
若手研究(スタートアップ)		2	0	2
合計		70	4	74

## 配分額一覧

(単位：千円)

研究種目		分子科学研究所	岡崎共通研究施設	合計
学術創成研究費		12,000	0	12,000
特別推進研究		46,000	0	46,000
特定領域研究		104,100	1,900	106,000
萌芽研究		1,900	0	1,900
若手研究	(A)	6,200	0	6,200
若手研究	(B)	25,900	0	25,900
基盤研究	(S)	23,600	0	23,600
基盤研究	(A)	60,500	0	60,500
基盤研究	(B)	56,100	8,600	64,700
基盤研究	(C)	1,700	0	1,700
特別研究員奨励費		1,200	1,100	2,300
特別研究員奨励費	外国人	700	0	700
若手研究(スタートアップ)		2,660	0	2,660
合計		342,560	11,600	354,160

## 共同研究

(単位：千円)

区分	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度	2006年度
件数(件)	5	6	7	8	13	17	13
金額(千円)	14,240	11,980	17,120	10,590	14,740	39,334	38,812

## 受託研究

(上段：件数、下段：金額(単位：千円))

区分	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度	2006年度
戦略的創造研究推進事業(JST)	1	1	5	7	7	10	12
	1,100	7,700	13,000	19,206	21,827	24,115	32,500
主要5分野の研究開発委託事業(文科省)	0	0	1	2	2	3	3
	0	0	263,000	540,574	916,847	584,312	497,850
その他	12	5	3	1	6	6	3
	199,491	232,625	6,800	4,200	163,792	64,907	32,657
合計	13	6	9	10	15	19	18
	200,591	240,325	282,800	563,980	1,102,466	673,334	563,007

(岡崎共通研究施設を含む)

## 2-20 岡崎共通施設

### 2-20-1 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1,470種（和283、洋1,187）、単行本92,132冊（和13,457、洋78,675）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。

### 2-20-2 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2,863 m<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。

### 2-20-3 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

\*山手ロッジは2006年度をもって使用中

### 2-20-4 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。

## 2-21 地域社会との交流

### 2-21-1 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	吉原經太郎 教授
12	1987. 9.26	コンピュータで探る分子の世界	柏木 浩 助教授
15	1988. 7. 2	目で見る低温実験・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？	正畠 宏祐 助教授
48	1993.10. 1	宇宙にひろがる分子の世界	齋藤 修二 教授
51	1994. 6.21	分子の動き	伊藤 光男 所長
54	1995. 6.20	生体内で活躍する鉄イオン——国境なき科学の世界——	渡辺 芳人 教授
57	1996. 6.28	分子を積み上げて超伝導体を作る話	小林 速男 教授
60	1997. 6.13	生体系と水の分子科学	平田 文男 教授
63	1998. 6.12	電子シンクロトロン放射光による半導体の超微細加工 ——ナノプロセスとナノ化学——（UVSOR 見学）	宇理須恆雄 教授
66	1999. 6. 8	レーザー光で，何が見える？ 何ができる？	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	冨田 博一 助教授
75	2002. 6. 4	クラスターの科学——原子・分子集団が織りなす機能——	佃 達哉 助教授
78	2003. 6.24	科学のフロンティア——ナノサイエンスで何ができるか？	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
87	2006. 6.20	電気を流す分子性結晶の話	小林 速男 教授

## 2-21-2 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、2006年12月で792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回開催している。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、現在までに65回開催されている。今年行われた講演の中では、理化学研究所森田浩介先生による第113番元素のお話（第61回）やサントリー先端応用技術研究所田中良和先生による青いバラのお話（第64回）に、岡崎近郊の中高校生、市民の方々がたくさん参加され、会場が満席になった。講演内容では、第37回の東京大学助教授高野陽太郎先生、第43回の立花隆さんの講演の他は、自然科学の先生によるお話であった。

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
61	2006.1.11	新発見の113番元素	森田 浩介（理化学研究所前任研究員）
62	2006.2.15	グリーンケミストリーの課題	御園生 誠（東京大学名誉教授・前日本化学会会長）
63	2006.5.17	X線自由電子レーザー計画	石川 哲也（理化学研究所播磨研究所 放射光科学総合研究センター 副センター長）
64	2006.6.14	青いバラの物語	田中 良和 （サントリー先進技術応用研究所シニアスペシャリスト）
65	2006.9.27	光量子科学の黎明期	霜田 光一 （東京大学名誉教授・日本物理教育学会会長）

### 2-21-3 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
2006 年度	中村 宏樹	分子の科学、独創性、そして東洋哲学

### 2-21-4 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的世界	大森 賢治 教授
2005. 9. 9	動物の進化	宇理須恆雄 教授

## 2-21-5 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

\*岡崎青年会議所の都合で、2006年度をもって終了

## 2-21-6 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(SSH)として指定し、高等学校及び中高一環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年度から始めた活動が最終年度を迎え、そのまとめの作業が岡崎高校を中心に行われた。同時に、岡崎高校は継続事業として平成19年度より始まるSSH事業についても引き続き実施したい旨の希望調査をとりまとめ、現在、文部科学省に申請中であり、分子科学研究所も引き続きこの事業を支援していくことに合意をしている。

### (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
美川中	2007.2.26	生物から学ぶ光と色	小澤 岳昌 助教授

岡崎市立小豆坂小学校（親子おもしろ科学教室）

回	開催日	テーマ	講師
1	1996.12.5	極低温の世界（液体窒素）	加藤 清則 技官
3	1997.12.4	いろいろな光（紫外線、赤外線、レーザー光）	大竹 秀幸 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

(3) 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

2-21-7 一般公開

平成18年度は、3年ごとに行われる分子研一般公開の年で、10月21日（土曜日）に行われた。準備は6月から始まり、一般公開実行委員会が編成され、委員長、副委員長が指名され、公開展示班、講演会班、資料作成班、設営班、記録班、広報班、総務班が組織された。テーマの選定、講演会講演者の決定、公開展示場所の確定等が7月6日になされた。9月上旬には広報班によって、分子研のシンボルカラーである鮮やかな青を基調にしたポスターが作成され、配布が行われた。また、市政便りの原稿作成、展示案内パンフレット及び研究所概要紹介パンフレットの作成などの活動がなされた。今回は、中学生を対象にサイエンスレンジャーを企画し、見附助教授を中心に周到な準備がなされた。また、中日新聞に折り込みチラシを45,800戸に配布した。テーマは、「モノの始まり：ナノの世界へようこそ」というもので、今回は、全研究室を公開するのではなく、研究室やセンターなどの希望を取って明大寺地区12カ所、山手地区13カ所を公開することとなった。更に、山手地区で3回の講演会、またそれぞれ3テーマずつの「おもしろ体験イベント」が企画された。

公開日当日は幸い晴天に恵まれた。それぞれの展示会場では担当者があらかじめ準備した説明用パネルも利用して展示内容の説明にあたった。また「おもしろ体験イベント」は、一般公開参加者自身が積極的に参加できるもので、明大寺地区において「電波のチカラ」、「メタルクラフト」、「作ってみよう！ 光を虹に分ける道具」の3テーマ、山手地区において「分子を測る」、「低温の世界」、「分子を創る、見る、触る」の3テーマで実施した。これら体験型イベントも、終日多くの参加者で賑わっていた。一般公開参加者のアンケート結果をみても、体験型イベントに対する評価は高いものであった。

公開講演会は山手3号館2階の大会議室で午後3回開催された。まず岡崎進教授が「ナノの世界をスーパーコンピュータで探る」という題名で、分子研のスーパーコンピュータの性能とそれを用いた計算機シミュレーションを紹介し、水中の生体膜の構造や動力学などの研究例を平易に解説した。次に永田央助教授が「光合成のひみつ・命を支える分子と光」という題名で、分子レベルから見た光合成の仕組みを詳説し、光励起電子移動を利用した金属錯体人工光合成システムの将来展望を示した。最後に小澤岳昌助教授が「光で探る生体分子のはたらき」という題名で、発光生物から取り出した発光タンパク質を生きた動物に注入して、細胞内部のタンパク質の変動を画像観測法で研究するという最新の成果を紹介した。100人近い聴衆が集まり、会場は大変盛況であった。また講演後も多くの質問があった。中には研究者顔負けの専門的な発言もあり、予定されていた15分の質疑応答時間では不足気味であった。アンケートの結果では、どの講演も面白く有益だったという回答が95%に達した。

岡崎市内中学生の見学体験会（サイエンスレンジャー）は、午前中に南実験棟1階で実施された。この会は市教育委員会理科部会との共催で、一般公開する研究所が毎年開催するものである。今年は学生に実験装置を操作してもらい、話題の科学技術を実体験させる事を目標とし以下のテーマを選んだ。酸化チタン $\text{TiO}_2$ の多色塗装に電気を使う：チタンに電流を流し陽極酸化させ、 $\text{TiO}_2$ の厚みを50nm以下で制御し表面を様々に着色する。 $\text{TiO}_2$ を色素塗装して電気を起こす： $\text{TiO}_2$ ナノ粒子に花の色素を塗って、可視光を高効率で吸収する色素増感太陽電池を製作する。どちらもナノの科学現象を含み、基本原理が容易で、操作は簡単かつ安全である。また、生活に直結し話題性に富む割に学生実験の題材としては斬新である。開会式で山本教育監の挨拶と講師の紹介があり、その後、219名の中学生が3つのグループに分かれて約50分間ずつ実験を行った。中学生4人に1人の割合で研究所スタッフが補佐に付いたため、トラブルは無く、誰もが楽しそうに作業に取り組んでいた。カラフルに着色されたチタン板の出来映えも良く、中学生にも引率教諭にも大変好評であったと聞いている。

参加者数が少ないのではないかと心配されたが、予想を遙かに上回る総数2058名の見学者が訪れている。この中には、東京や山口からの来訪者があった。地元の皆さんの理解を深めることは研究所にとっても大変重要なことであり、多くの皆さんが興味を持って頂いたことは嬉しい限りである。職員・研究員・学生が総出でこのイベントを支えることができ、大変有意義な1日であった。



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)	入場者 1700 人
第6回	1991.10.26 (Sat)	入場者 1974 人
第7回	1994.11.12 (Sat)	入場者 2700 人
第8回	1997.11.15 (Sat)	入場者 2400 人
第9回	2000.10.21 (Sat)	入場者 1183 人
第10回	2003.10.25 (Sat)	入場者 1600 人
第11回	2006.10.21 (Sat)	入場者 2058 人

## 2-21-8 見学受け入れ状況

年度	受入件数	見学者数	見学受入機関名
1990	10	250	(財)レーザー技術総合研究所 東京工業大学理学部応用物理学科学生 ほか
1991	3	110	静岡県新材料応用研究会 名古屋大学工学部電気・電子工学科学生 ほか
1992	7	162	三重大学技術職員研修会 慶応義塾大学理工学部化学科学生 ほか
1993	9	211	(財)名古屋産業科学研究所超伝導調査研究会 東京工業大学化学科学生 ほか
1994	7	145	(社)日本化学工業界技術部 慶応義塾大学理工学部化学科学生 ほか
1995	4	122	日本電気工業会名古屋支部 静岡県高等学校理科研究会 ほか
1996	7	180	(財)新機能素子研究開発協会 明治大学附属中野中学・高等学校理科教員 ほか
1997	9	436	(財)科学技術交流財団 慶応義塾大学理工学部化学科学生 ほか
1998	6	184	東京地方裁判所司法修習生 開成高等学校 ほか
1999	8	206	愛知県商工部 愛知県高等学校視聴覚教育研究協議会 ほか
2000	12	225	(財)衛星通信教育振興協会 東京農工大留学生 ほか
2001	8	196	中部経済産業局統計調査員協会 愛知県立豊田西高等学校 ほか
2002	5	118	関西工業教育協会 静岡県立浜松西高等学校 ほか

2003	8	146	中部経済連合会 一宮高等学校 ほか
2004	11	198	中部電力(株) 立命館高等学校 ほか
2005	10	317	自動車技術会中部支部 慶熙大学 (Kyung hee University) ほか
2006	8	144	豊田西高等学校、山梨県立都留高等学校、六ツ美中学校、 甲山中学校、日本自動車部品総合研究所、岐阜工業高 等学校、西三河地区理科教育研究会、千葉地方裁判所

## 2-22 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は増加している。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 17 年度の特許申請件数は、個人有としたもの 2 件、機構有としたもの 15 件（出願 13 件）であったが、18 年度は、個人有 1 件、機構有 6 件（実出願 5 件）であった。審査は、年 4 回行われている。