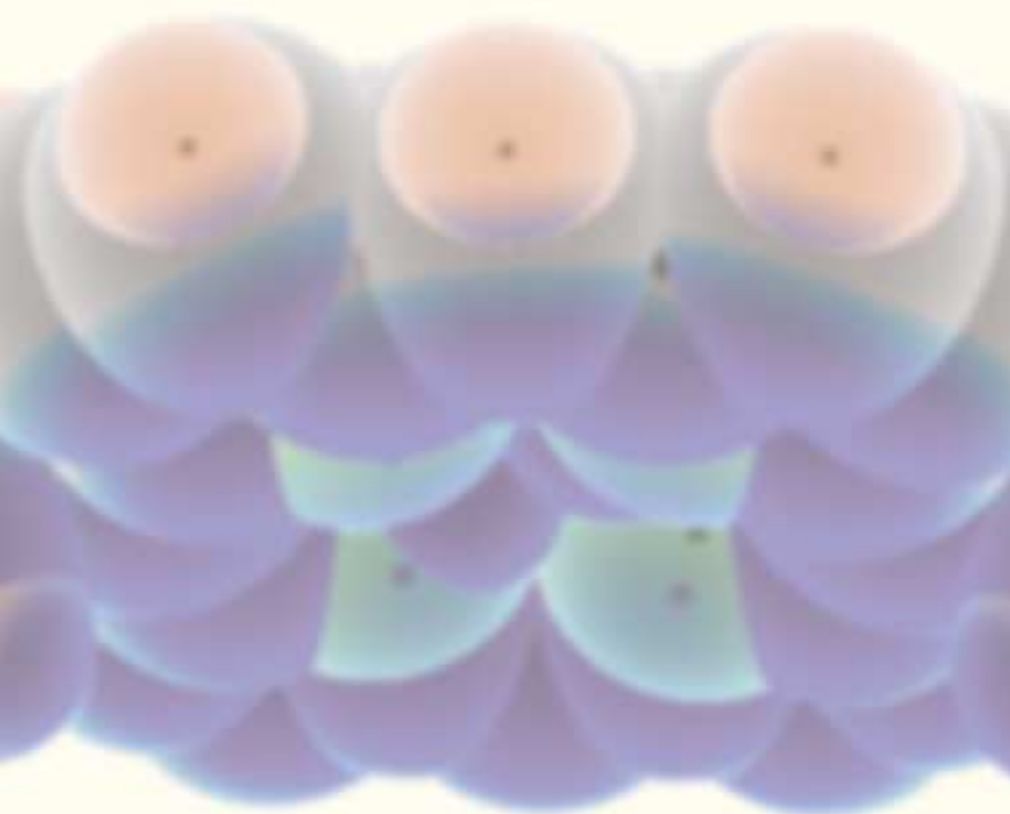


文部省 大学共同利用機関 岡崎国立共同研究機構

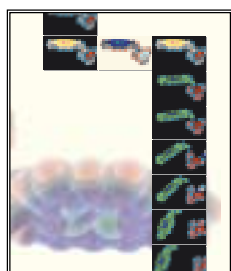
分子科学研究所 要覧2000

Institute for Molecular Science



目次

巻頭言	1
研究所の目的	2
組織	3
沿革	4
運営	6
構成員	8
研究系	13
研究施設	28
錯体化学実験施設	33
電子計算機室	35
技術課	36
大型研究設備	37
特別研究	40
岡崎コンファレンス	44
共同研究	46
国際共同研究	48
総合研究大学院大学	50
大学院教育協力	51
国際交流	52
概要	58
岡崎国立共同研究機構共通施設	60
岡崎国立共同研究機構管理局	62
交通案内	63



表紙図説明

光合成モデル化合物の光反応

光合成によるエネルギー変換の基本過程の一部を人工分子でモデル化した。有機色素と金属錯体がつながった分子（左上）に光を当てると（左列→右列），光を吸収した色素から金属錯体に電子が1つ飛び移って，金属錯体の反応活性が高まる（右列2つめ，赤い部分が金属錯体，緑色部分が色素）。活性が高まった金属錯体は色素から離れて，近くにある小分子を取り込んでしまう（右列下）。



分子科学は、「物質」をキーワードとする広義の物質科学である。原子・分子を単位とする広い意味での物質科学である分子科学は、20世紀後半に急速な発展を遂げ、化学・物理分野のみならず、環境科学、生命科学などの分野に広く入り込んでいる。西暦2000年という新しいミレニアムの最初の年度を迎えるにあたって、分子科学研究所は、3つの研究テーマ「化学反応ダイナミックス」、「光分子科学」および「物質創製」をその柱として掲げている。日常生活の有為転変の根源である化学反応をその根本から解明する、レーザー、放射光などを駆使し、時間幅、エネルギー幅、強度、波長、位相などのあらゆる角度からの研究によってフォトン科学を推進する、化学反応、化学結合、分子間相互作用の新概念を基底に新奇物質創製を目指す、など分子科学の根源的問題を追及することは、原子レベルでの物質コントロールが可能となりつつある21世紀の物質科学の重要な役割である。

本年4月から、本機構に機構共通研究施設として統合バイオサイエンスセンターが誕生した。各々独自の分野の先端的研究を行っていた岡崎の3研究所が協力・競合して、ライフサイエンスの新局面を開拓するものである。生命体の持つ複雑で精緻な機能が、分子レベルでどのように研究解明されていくか、同時に、生命機能を発想の源とした新奇物質創製が実現しうるか、という分子科学の挑戦すべき目標がここに誕生した。

平成12年3月をもって、6年間理論研究系分子基礎理論第一部門の教授を務められた岩田末廣教授が分子科学研究所から広島大学に転任された。この間、岩田教授は量子化学研究のリーダーとして国の内外において活躍され、「分子軌道理論の開拓と分子科学への応用」の業績によって日本化学会賞を受賞された。また、関連領域研究系の渡辺芳人教授が、鉄ポルフィリンモデル錯体による酸化反応素過程の直接観測などヘム酵素の触媒反応の分子機構解明の業績によって日本化学会学術賞を受賞された。心からお慶び申し上げます。極端紫外光実験施設の濱広幸助教授が東北大学、分子制御レーザー開発研究センターの佐藤信一郎助教授が北海道大学、分子物質開発研究センターの山下敬郎助教授が東京工業大学へと転出された。流動部門の教官として2年間分子科学研究に貢献された、西田雄三教授（山形大学）、海老原昌弘助教授（岐阜大学）、三好永作教授（九州大学）、田中桂一助教授（九州大学）、長門研吉助教授（高知高専）らが元の勤務地に帰任された。諸先生の分子科学研究所への多大な御貢献に感謝すると共に、益々の御発展を祈願する。

一方、分子科学研究所は新たに、魚住泰広教授（錯体化学実験施設）、加藤政博助教授（極端紫外光実験施設）、佃達哉助教授（電子構造研究系）、多田博一助教授（分子集団研究系）、そして流動部門に笠井俊夫教授（大阪大学より）、高須昌子助教授（金沢大学より）らを迎えた。

平成12年5月

茅 幸 二

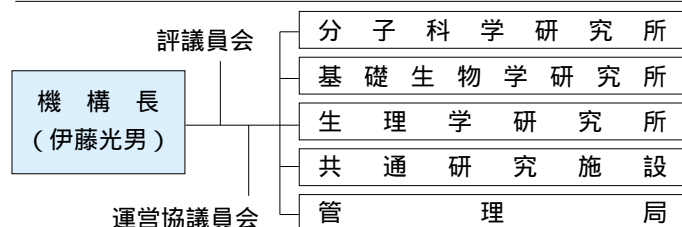
研究所の目的

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にある分子科学の研究を推進するための中核として、広く研究者の共同利用に供することを目的として設立された大学共同利用機関である。物質観の基礎を培う研究機関として広く物質科学の諸分野に共通の知識と方法論を提供することを意図している。

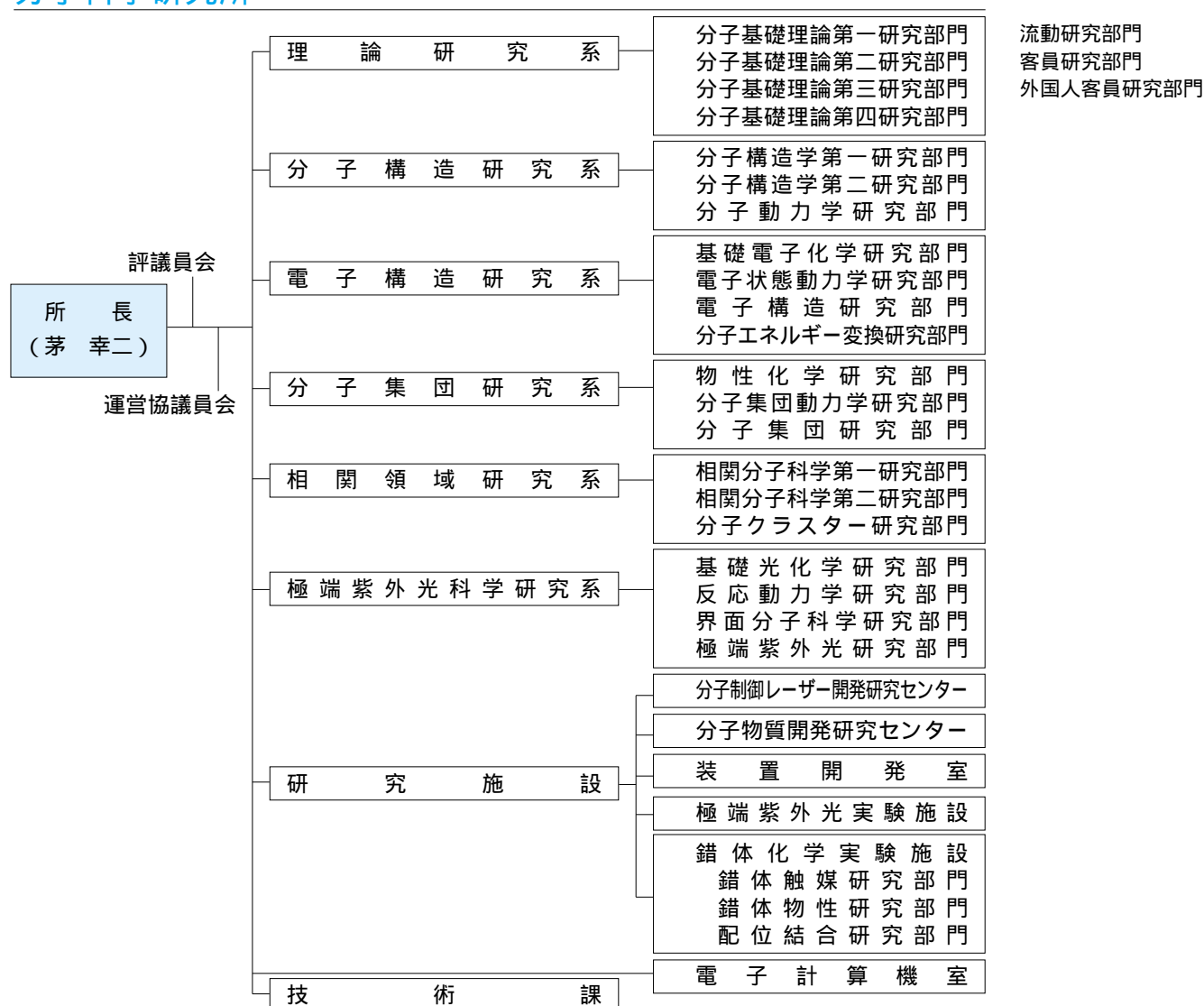
限られた資源のなかで、生産と消費の上に成り立つ物質文明が健全に保持されるためには、諸物質の機能を深く理解し、その正しい利用を図るのみでなく、さらに進んで物質循環の原理を取り入れなければならない。分子科学研究所が対象とする分子の形成と変化に関する原理、分子と光との相互作用、分子を通じて行われるエネルギー変換の機構等に関する研究は、いずれも物質循環の原理に立つ新しい科学・技術の開発に貢献するものである。



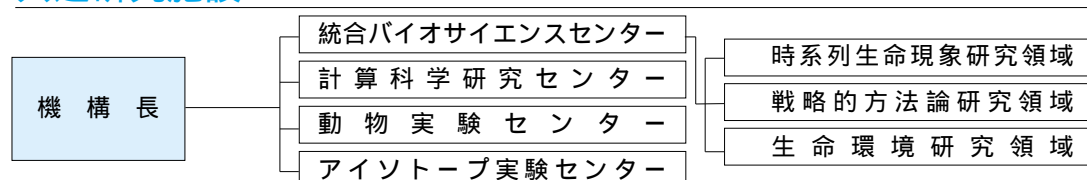
岡崎国立共同研究機構



分子科学研究所



共通研究施設



昭和36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。昭和40年に至り、日本学術会議から「分子科学研究所」（仮称）の設置について内閣総理大臣に対し勧告がなされた。この結果、化学研究連絡委員会に分子科学研究所小委員会が設けられ、研究所設立の推進に当たることとなった。

これと並行して、研究者の間に研究会が組織され、科学研究費補助金（特定研究「分子科学」）の交付を受け、昭和46年度と47年度の2年間にわたり、分子科学に関する研究を行い、分子科学全般の基礎となる研究方法を開発するとともに、研究所発足に際して施設・設備の円滑な整備を図ることが検討された。昭和48年10月、学術審議会会長から文部大臣に対し、分子科学研究所を緊急に設立することが適当であるとの報告がなされた。

次いで、昭和49年度予算において創設準備経費が計上され、同年4月10日、文部大臣裁定により分子科学研究所創設準備室（定員3名）及び分子科学研究所設立準備会議が設置された。

昭和50年	4月	分子科学研究所創設（昭和50年4月22日） 分子構造研究系（分子構造学第一研究部門，分子構造学第二研究部門） 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）
昭和51年	5月	理論研究系（分子基礎理論第一研究部門，分子基礎理論第二研究部門） 相關領域研究系（相關分子科学研究部門） 化学試料室
昭和52年	4月	相關領域研究系相關分子科学研究部門廃止 相關領域研究系（相關分子科学第一研究部門，相關分子科学第二研究部門） 電子計算機センター 極低温センター
	5月	管理局が管理局となり，分子科学研究所と創設された生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所，生理学研究所）の事務を併せ処理。 管理局（庶務課，人事課，主計課，経理課，建築課，設備課，技術課）改組
昭和53年	4月	電子構造研究系（電子状態動力学研究部門，電子構造研究部門） 分子集団研究系（基礎光化学研究部門）
昭和54年	4月	分子構造研究系（分子動力学研究部門） 管理局改組 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
昭和56年	4月	岡崎国立共同研究機構創設 昭和56年4月14日，分子科学研究所及び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，3研究所は岡崎国立共同研究機構として一体的に運営。 管理局が岡崎国立共同研究機構管理局に，技術課が研究所所属。 理論研究系（分子基礎理論第三研究部門）
昭和57年	4月	極端紫外光実験施設

昭和58年	4月	電子構造研究系（分子エネルギー変換研究部門） 分子集団研究系（分子集団動力学研究部門，極端紫外光研究部門）
昭和59年	4月	錯体化学実験施設（錯体合成研究部門，錯体触媒研究部門）
昭和61年	4月	錯体化学実験施設（配位結合研究部門）
昭和63年	10月	総合研究大学院大学創設 分子科学研究所に（数物科学研究科構造分子科学専攻，機能分子科学専攻）設置
平成元年	5月	分子集団研究系（界面分子科学研究部門） 相関領域研究系（有機構造活性研究部門） 錯体化学実験施設（錯体物性研究部門）
平成3年	4月	分子集団研究系（物性化学研究部門，分子集団動力学研究部門，分子集団研究部門） 極端紫外光科学研究系（基礎光化学研究部門，反応動力学研究部門，界面分子科学研究部門，極端紫外光研究部門）
平成7年	4月	相関領域研究系有機構造活性研究部門廃止 理論研究系（分子基礎理論第四研究部門）
平成8年	5月	相関領域研究系（分子クラスター研究部門） 管理局 総務部（庶務課，人事課，研究協力課，国際交流課）改組
平成9年	4月	極低温センター，機器センター及び化学試料室廃止 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
平成12年	4月	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廃止 電子計算機室 共通研究施設（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）

ゴシック体は設置または改組を示す。

施設の整備状況

建設年次	施設名
昭和51年度	エネルギーセンター（期），実験棟（期），生活排水処理施設，実験廃液処理施設
昭和52年度	研究棟，装置開発室，機器センター，化学試料室
昭和53年度	管理棟，図書館，実験棟（期），電子計算機センター，極低温センター
昭和54年度	環境整備，エネルギーセンター（期）
昭和55年度	職員会館（期），共同利用研究者宿泊施設
昭和57年度	極端紫外光実験棟（期），極端紫外光実験棟（期），エネルギーセンター（期）
昭和58年度	共同利用研究者宿泊施設
昭和59年度	職員会館（期），環境整備
昭和61年度	共同利用研究者宿泊施設
昭和63年度	南実験棟
平成2年度	極端紫外光実験研究棟（増築）
平成5年度	電子計算機センター棟（増築）
平成8年度	岡崎コンファレンスセンター

評議員会

研究所の事業計画その他の管理運営に関する重要事項について所長に助言する。

評 議 員	会 長 ○ 副会長
大 塚 榮 子	北海道大学名誉教授
荻 野 博	東北大学大学院理学研究科教授
木 原 元 央	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設長
京 極 好 正	福井工業大学教授
後 藤 圭 司	豊橋技術科学大学長
近 藤 保	豊田工業大学客員教授
佐 原 真	国立歴史民俗博物館長
清 水 良 一	統計数理研究所長
高 橋 理 一	(株)豊田中央研究所代表取締役所長
土 屋 莊 次	日本女子大学理学部教授
中 西 敦 男	学術著作権協会常務理事
○ 廣 田 襄	京都大学名誉教授
福 山 秀 敏	東京大学物性研究所長
細 矢 治 夫	お茶の水女子大学理学部教授
本 多 健 一	東京工芸大学長
松 尾 稔	名古屋大学総長
山 崎 敏 光	理化学研究所 RI ビーム科学研究室研究協力員
山 村 庄 亮	慶應義塾大学名誉教授
KIEFER, Wolfgang	ビュルツブルク大学教授
ZARE, Richard N.	スタンフォード大学教授

運営協議員会

共同研究計画に関する事項その他の研究所の運営に関する重要事項で、所長が必要と認めるものについて所長の諮問に応じる。

運営協議員				会長		副会長	
阿知波	洋	次	東京都立大学大学院理学研究科教授	宇理須	恆	雄	極端紫外光科学研究系教授
岡	田	正	大阪大学大学院基礎工学研究科教授	北	川	禎三	分子構造研究系教授
加藤	重	樹	京都大学大学院理学研究科教授	小	杉	信博	極端紫外光科学研究系教授
北原	和	夫	国際基督教大学教養学部教授	小	林	速男	分子集団研究系教授
小谷野	猪之助		姫路工業大学理学部教授	田	中	晃二	錯体化学実験施設教授
関	一	彦	名古屋大学物質科学国際研究センター教授	中	村	宏樹	理論研究系教授
田中	武	彦	九州大学大学院理学研究院教授	西		信之	電子構造研究系教授

濱口 宏夫	東京大学大学院理学系研究科教授	平田 文男	理論研究系教授
旗野 嘉彦	九州大学大学院総合理工学研究院教授	藤井 正明	電子構造研究系教授
松本 和子	早稲田大学理工学部教授	薬師 久彌	分子集団研究系教授
		渡辺 芳人	相關領域研究系教授

運営協議員会に、次の人事選考部会及び共同研究専門委員会を置く。

人事選考部会 教官候補者の選考に関する事項の調査審議

加藤 重樹	(京大院教授)	小林 速男	(分子研教授)
関 一彦	(名大院教授)	西 信之	(分子研教授)
田中 武彦	(九大院教授)	平田 文男	(分子研教授)
濱口 宏夫	(東大院教授)	藤井 正明	(分子研教授)
松本 和子	(早稲田大教授)	渡辺 芳人	(分子研教授)

共同研究専門委員会 共同研究計画に関する事項等の調査

伊藤 翼	(東北大教授)	田中 晃二	(分子研教授)
岡田 正	(大阪大教授)	薬師 久彌	(分子研教授)
谷本 能文	(広島大教授)	中村 宏樹	(分子研教授)
小谷野 猪之助	(姫路工大教授)	井上 克也	(分子研助教授)
山崎 巖	(北大教授)	鈴木 俊法	(分子研助教授)
小杉 信博	(分子研教授)	米満 賢治	(分子研助教授)

共同利用機関としての機能を果たすため次の会議を設け、所長を補佐する。

学会等連絡会議 所長の要請に基づき学会その他の学術団体等の連絡、共同研究専門委員会委員候補者等の推薦等に関する事について、検討し、意見を述べる。

市川 行和	(宇宙研教授)	濱口 宏夫	(東大院教授)
伊藤 健兒	(名大院教授)	平尾 公彦	(東大院教授)
大野 公一	(東北大院教授)	山下 晃一	(東大院教授)
梶本 興亜	(京大院教授)	山内 薫	(東大院教授)
川崎 昌博	(京大院教授)	北川 禎三	(分子研教授)
佐藤 直樹	(京大教授)	小林 速男	(分子研教授)
菅原 正	(東大院教授)	西 信之	(分子研教授)
田中 清明	(名工大教授)	平田 文男	(分子研教授)
張 紀久夫	(阪大院教授)	見附 孝一郎	(分子研助教授)
永田 敬	(東大院教授)		

教授会議 専任・併任の教授・助教授で構成し、研究及び運営に関する事項について調査審議する。

構 成 員

茅 幸 二 所 長

馬 場 宏 明	研究顧問
長 倉 三 郎	研究顧問，名誉教授
田 中 郁 三	研究顧問
井 口 洋 夫	研究顧問，名誉教授
土 屋 莊 次	研究顧問
廣 田 榮 治	名誉教授
木 村 克 美	名誉教授
諸 熊 奎 治	名誉教授
丸 山 有 成	名誉教授
吉 原 經太郎	名誉教授
花 崎 一 郎	名誉教授
岩 村 秀	名誉教授
齋 藤 修 二	名誉教授
岩 田 末 廣	名誉教授

理 論 研 究 系

研究主幹（併） 中 村 宏 樹

分子基礎理論第一研究部門

岡 本 祐 幸	助教授
池 上 努	助 手
杉 田 有 治	助 手
依 田 隆 夫	非常勤研究員
西 川 武 志	リサーチ・アソシエイト
伊 藤 正 勝	リサーチ・アソシエイト
光 武 亜代里	リサーチ・アソシエイト
今 井 隆 志	リサーチ・アソシエイト
ISHIKAWA, Yasuyuki	文部省外国人研究員 12.5.24 ~ 12.8.23

分子基礎理論第二研究部門

中 村 宏 樹	教 授
谷 村 吉 隆	助教授
朱 超 原	助 手
高 見 利 也	助 手
奥 村 剛	助 手
三 嶋 謙 二	非常勤研究員
加 藤 毅	非常勤研究員
BIAN, Wensheng	学振外国人特別研究員 12.2.1 ~ 14.1.31

分子基礎理論第三研究部門（客員研究部門）

菊 地 武 司	教 授（倉敷科大産業科学技術）
木 下 正 弘	助教授（京大エネルギー理工学研）
KOVALENKO, Andriy F.	助 手

分子基礎理論第四研究部門

平 田 文 男	教 授
米 満 賢 治	助教授
佐 藤 啓 文	助 手
岸 根 順一郎	助 手
SETHIA, Ashok	非常勤研究員
桑 原 真 人	非常勤研究員
森 道 康	学振特別研究員
墨 智 成	学振特別研究員
秋 山 良	特別協力研究員
今 村 主 税	公立大学研修員

分子構造研究系 研究主幹（併） 北 川 禎 三

分子構造学第一研究部門

森 田 紀 夫 助教授
森 脇 喜 紀 助 手

分子構造学第二研究部門（客員研究部門）

赤 阪 健 教 授（新潟大院自然科学）
佐々田 博 之 助教授（慶大理工）

分子動力学研究部門

北 川 禎 三 教 授（統合バイオセンター）
加 藤 立 久 助教授
水 谷 泰 久 助 手
LI, Zheng-Qiang 文部省外国人研究員
12.5.23 ~ 13.5.22
HU, Ying 学振外国人特別研究員
10.12.16 ~ 12.12.15
WALKER, Gilbert C. 学振外国人特別研究員
12.9.1 ~ 12.12.31
内 田 毅 学振特別研究員
鐘 本 勝 一 学振特別研究員
岩 瀬 正 特別協力研究員
MAITI, Nakul Chandra 特別協力研究員

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
佃 達 哉 助教授
中 林 孝 和 助 手
秋 田 素 子 リサーチ・アソシエイト

電子状態動力学研究部門

藤 井 正 明 教 授
鈴 木 俊 法 助教授
高 口 博 志 助 手
酒 井 誠 助 手
佐 伯 盛 久 非常勤研究員
WHITAKER, Benjamin 文部省外国人研究員
12.6.21 ~ 12.9.25
渡 邊 武 史 学振特別研究員
池 滝 慶 記 民間等共同研究員

電子構造研究部門（客員研究部門）

山 瀬 利 博 教 授（東工大資源化学研）
井 口 佳 哉 助 手

分子エネルギー変換研究部門（外国人客員研究部門）

MO, Yu-Jun 教 授
（中国 河南大学 教授）
12.5.2 ~ 13.5.1
WHITHAM, Christopher J. 助教授
（イギリス オックスフォード大学 講師）
11.12.15 ~ 12.6.14
GRITSENKO, Victor V. 助教授
（ロシア 科学アカデミー化学物理研究所 研究員）
12.6.15 ~ 13.6.14

分子集団研究系 研究主幹（併） 小 林 速 男

物性化学研究部門

薬 師 久 彌 教 授
中 村 敏 和 助教授
山 本 薫 助 手
塚 田 浩 非常勤研究員
MAKSIMUK, M. Y. 非常勤研究員
DROZDOVA, Olga Olegovna 文部省外国人研究員
12.4.1 ~ 13.3.31
中 野 千賀子 特別協力研究員
SIMONYAN, Mkhital 特別協力研究員

分子集団動力学研究部門

小 林 速 男 教 授
多 田 博 一 助教授
緒 方 啓 典 助 手
藤 原 秀 紀 助 手
田 村 格 良 非常勤研究員
田 中 寿 学振特別研究員
安 達 隆 文 特別協力研究員
小 島 絵美子 特別協力研究員

分子集団研究部門（客員研究部門）

徳 本 圓 教 授（工技院電総研）
森 健 彦 助教授（東工大理工）
長谷川 真 史 助 手

構 成 員

相 関 領 域 研 究 系 研究主幹（併） 渡 辺 芳 人

相関分子科学第一研究部門

渡 辺 芳 人 教 授
井 上 克 也 助 教 授
細 越 裕 子 助 手
上 野 隆 史 助 手（統合バイオインテグレーション）
KIM, Cheal 文部省外国人研究員
12.6.27 ~ 12.8.26
12.12.22 ~ 13.2.21
熊 谷 等 学振特別研究員
PUSPITA, Waheeda Jahan 特別協力研究員
今 井 宏 之 特別協力研究員
鈴 木 和 治 特別協力研究員
中 井 英 隆 特別協力研究員

相関分子科学第二研究部門（客員研究部門）

増 田 秀 樹 教 授（名工大工）
岩 田 耕 一 助 教 授（東大院理）
小 江 誠 司 助 手

分子クラスター研究部門（流動研究部門）

笠 井 俊 夫 教 授
高 須 昌 子 助 教 授
蔡 德 七 助 手
久 保 厚 助 手
橋 本 昌 人 非常勤研究員
野 口 博 司 学振特別研究員

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
田 原 太 平 助 教 授
竹 内 佐 年 助 手
陰 地 宏 非常勤研究員
ARZHANTSEV, Sergei Y. 学振外国人特別研究員
10.11.27 ~ 12.11.26
藤 野 竜 也 学振特別研究員
永 園 充 学振特別研究員

反応動力学研究部門

宇理須 恆 雄 教 授
見 附 孝 一 郎 助 教 授
水 谷 雅 一 助 手
野々垣 陽 一 助 手
小 野 正 樹 非常勤研究員
岩 崎 光 太 学振特別研究員
吉 村 大 介 特別協力研究員
新 倉 弘 倫 特別協力研究員

界面分子科学研究部門（流動研究部門）

黒 澤 宏 教 授
福 井 一 俊 助 教 授
長 岡 伸 一 助 教 授
高 嶋 圭 史 助 手

極端紫外光研究部門（外国人客員研究部門）

LUPEI, Voicu 教授
（ルーマニア 原子物理研究所 統括研究員）
12.10.1 ~ 13.3.31
AHN, Kwang Hyun 助 教 授
（韓国 キュンヒョウ大学 準教授）
12.2.1 ~ 12.7.31
MIL'NIKOV, Gennady V. 助 教 授
（ロシア 科学アカデミー構造マクロ動力学研究所 研究員）
12.8.1 ~ 13.3.31

分 子 制 御 レ ー ザ ー 開 発 研 究 セ ン タ ー

センター長（併） 藤 井 正 明

分子位相制御レーザー開発研究部

渡 邊 一 雄 助 手

放射光同期レーザー開発研究部

猿 倉 信 彦 助 教 授
大 竹 秀 幸 助 手
村 上 英 利 非常勤研究員

特殊波長レーザー開発研究部

平 等 拓 範 助 教 授
栗 村 直 助 手
庄 司 一 郎 非常勤研究員
CHA, Myoungsik 文部省外国人研究員
12.6.9 ~ 12.9.11
PAVEL, Nicolaie Ion 学振外国人特別研究員
11.3.18 ~ 13.3.17

分子物質開発研究センター	センター長(併) 渡辺 芳人
--------------	----------------

パイ電子開発研究部 田中 彰治 助手 ZAMAN, M. D. 非常勤研究員 融合物質開発研究部 藤井 浩 助教授 船橋 靖博 助手 池上 崇久 学振特別研究員	機能探索研究部 永田 央 助教授 桑原 大介 助手 伊藤 肇 助手 分子配列制御研究部 鈴木 敏泰 助教授 阪元 洋一 助手 HEIDENHAIN, Sophie B. 特別協力研究員
--	--

装置開発室	室長(併) 薬師 久彌
-------	-------------

渡辺 三千雄 助教授

極端紫外光実験施設	施設長(併) 小杉 信博
-----------	--------------

鎌田 雅夫 助教授 繁政 英治 助教授 加藤 政博 助教授 木村 真一 助教授(客員) (神戸大院自然科学) 保坂 将人 助手	下條 竜夫 助手 江田 茂 助手 高橋 和敏 助手 MOREÉ, Sam D. 学振外国人特別研究員 10.10.14 ~ 12.10.13
--	---

錯体化学実験施設	施設長(併) 田中 晃二
----------	--------------

錯体触媒研究部門 魚住 泰広 教授 谷口 功 教授(客員) (熊本大工) 田中 康隆 助教授(客員) (静岡大工) HOCKE, Heiko 学振外国人特別研究員 12.8.1 ~ 14.7.31 檀上 博史 学振特別研究員 中尾 竜 受託研究員	錯体物性研究部門 田中 晃二 教授 川口 博之 助教授 枝連 一志 非常勤研究員 BIRADHA, Kumar 学振外国人特別研究員 10.10.17 ~ 12.10.16 ALI, Md. Meser 特別協力研究員 配位結合研究部門(客員研究部門) 相田 卓三 教授(東大院工) 濱地 格 助教授(九大院工)
--	--

電子計算機室	室長(併) 平田 文男
--------	-------------

青柳 睦 助教授(計算科学研究センター) 南部 伸孝 助手(計算科学研究センター) 大野 人侍 助手(計算科学研究センター)	CHOE, Jong-In 文部省外国人研究員 12.8.1 ~ 12.12.10 岡田 一俊 受託研究員
---	--

構 成 員

技 術 課		課長 酒 井 楠 雄
第 1 技術班	班長 松 戸 修	装置開発技術係
	理論研究系技術係	係長 鈴 井 光 一
	技官 鶴 澤 武 士	技官 内 山 功 一
	技官 鈴 木 陽 子	技官 豊 田 朋 範
	技官 長 島 剛 宏	技官 近 藤 聖 彦
	分子構造研究系技術係	技官 小 林 和 宏
	技官 林 直 毅	技官 林 憲 志
	技官 長 友 重 紀	
	電子構造研究系技術係	第 4 技術班
	係長 木 下 敏 夫	班長 山 中 孝 弥
	技官 片 柳 英 樹	分子制御レーザー開発技術係
		係長 山 崎 潤一郎
		技官 上 田 正
第 2 技術班	班長 西 本 史 雄	極端紫外光実験技術係
	分子集団研究系技術係	係長 蓮 本 正 美
	係長 吉 田 久 史	主任 中 村 永 研
	技官 賣 市 幹 大	技官 近 藤 直 範
	技官 大 石 修	
	技官 岡 野 芳 則	第 5 技術班
	相關領域研究系技術係	班長 加 藤 清 則
	極端紫外光科学研究系技術係	分子物質開発技術第一係
	係長 水 谷 伸 雄	係長 永 田 正 明
	技官 水 野 操	技官 戸 村 正 章
		技官 牧 田 誠 二
第 3 技術班	電子計算機技術係	分子物質開発技術第二係
	係長 水 谷 文 保	係長 高 山 敬 史
	技官 手 島 史 綱	主任 酒 井 雅 弘
	技官 南 野 智	錯体化学実験技術係
	技官 内 藤 茂 樹	技官 水 川 哲 徳

* 構成員は6月1日現在。ただし、外国人研究者で平成12年度中に3か月を越えて滞在することが予定されている者は掲載した。

理論研究系

分子科学は、量子力学・統計力学を中心とする理論の進歩に基づいて発展した。本研究系では、分子科学の基礎としての理論研究を遂行するとともに、所内外の実験研究者と密接に連携して、実験結果の解釈、新しい指針の提供をも行っている。理論計算には計算科学研究センターの大型計算機を使用し、同センターとはプログラム開発や数値計算に関して密接に協力しあっている。

分子基礎理論第一研究部門

1. 生体分子構造予測の理論的研究

計算科学的手法を用いて、蛋白質などの生体分子の立体構造予測に取り組んでいる。特に、拡張アンサンブルに基づくモンテカルロ法（例えば、マルチカノニカル法）や分子動力学法を使って、スーパーコンピュータ上のシミュレーションを行っている。これによって、シミュレーションがエネルギー極小状態に留まってしまうという、従来の方法の困難を回避している。計算手法の改良・開発とともに、エネルギー関数（特に、溶媒の寄与）の精度を上げる努力もしている。ランダムコイル状態の初期構造から特異的立体構造への蛋白質の折り畳みを計算機上で再現するとともに、その熱力学的原理を解明することを目指している。



（後列左から）
桑 美和子、光武亜代理、
杉田有治、西川武志
（前列左から）
長島剛宏、岡本祐幸、
依田隆夫

分子基礎理論第二研究部門

1. 化学反応動力学と原子分子衝突過程に代表される分子の動的諸過程の理論的研究

新しい分子を作り出す化学反応はこの世の有為転変の根源である。その動力学機構の究明と基礎理論の開発が我々の研究課題である。具体的には、以下のような課題に取り組んでいる： 化学反応の起こりやすさを決めている因子の究明， 多自由度系の動力学を扱う理論の開発， 状態変化の基本メカニズムである非断熱遷移の理論の開発と応用， 超励起分子の特異な性質と動力学の解明， 多体系に現れる統計性と選択性の解明， 及び 分子過程の新しい制御方法の確立。

最近の特筆すべき成果はLandau, Zener, Stueckelberg以来初めて非断熱遷移理論を完成した事であり、現在理論の更なる展開と応用を進めている。



（後列左から）
神坂英幸、長屋州宣、
三嶋謙二、PICH, Lukas
（前列左から）
BIAN, Wensheng、
中村宏樹、朱 超原

(左から)

加藤 毅、日野 理、
谷村吉隆、鈴木陽子、
奥村 剛



量子化学計算など計算化学で用いられている手法などを用いる。

2．分子諸物性における量子効果とそれに及ぼす散逸の影響の研究

化学反応過程，非断熱的遷移過程における量子効果と散逸の研究，溶液中の分子の構造と運動が光学過程に及ぼす影響の研究，分子集合体における光物性，磁気的性質，電子伝導などの研究，などを行っている。量子力学的Fokker-Planck方程式など非平衡統計力学などで用いられている手法や，経路積分法など場の量子論などで用いられている手法，

分子基礎理論第三研究部門（客員研究部門）

1．タンパク質の構造形成機構と立体構造予測に関する研究

主に計算化学的手法を用いてタンパク質の立体構造形成過程の理解と立体構造予測法の開発を目指している。特にタンパク立体構造のアミノ酸間平均距離統計から簡略化したアミノ酸間有効ポテンシャルを導出し構造予測に応用することを試みている。さらに，簡単なモデルを用いてタンパクのようなフラストレーション最小状態の形成機構についても研究を行っている。

2．積分方程式論を軸にした物質複合系の非線形挙動の解明

複数の物質要素が混じり合う（あるいは接触し合う）と，各要素の挙動の重ね合わせからは想像もつかない非線形挙動が発現し得る。要素の1つが溶液である場合を特に取り上げ，溶液側に積分方程式論を適用し，他理論やモンテカルロ法などと統合させ，独自の複合理論を構築しつつ物質複合系の挙動解明を目指す。例題として，溶液中で生体高分子が取る立体構造，溶液中における微粒子間相互作用，金属 - 電解質水溶液界面の構造と性質，両親媒性分子の自己組織化によって形成される分子集合体の形態・サイズ分布に関する研究と取り組む。

分子基礎理論第四研究部門

1. 気相中では全く起きない反応が溶媒中では起きてしまう、あるいは、溶媒を変えると反応速度が大きく変化するという現象は実験化学者が日常的に経験していることである。生物体内の酵素の構造やそれによって触媒される化学反応も「水」という溶媒を抜きには考えられない。当グループでは溶液中の分子の電子状態、構造、反応性、反応速度などの化学的性質に溶媒がどのような影響を及ぼすかと言う問題を液体の統計力学に基礎を置く分子論の立場から解明しようとしている。イオンの周りの溶媒の揺らぎから蛋白質の立体構造まで広範な現象が研究対象となる。



(後列左から)
山崎 健、今井隆志、
今村主税
(中列左から)
佐藤啓文、平田文男、
秋山 良
(前列左から)
原野雄一、SETHIA, Ashok、
墨 智成

2. 有機導体や金属錯体化合物を含む多くの分子性固体では、電子的な低次元性とそれに伴う大きな量子揺らぎ、電子相関と電子格子相互作用の競合、 π 電子バンドやd電子バンドの間の相互作用、バンド充填率のわずかな変化などによって、反強磁性、電荷/スピン密度波、スピン・パイエルスなどの絶縁相、低次元金属相、超伝導相などの多様な電子状態が現われる。これらの磁性、伝導性、光物性、格子物性を物性理論を基礎に解明し、次元性と電子相関がもたらす新しい電子状態やそれに対する分子の個性的な役割を探る。



(後列左から)
森 道康、桑原真人、
宮下尚之
(前列左から)
岸根順一郎、米満賢治

分子構造研究系

本研究系は構造から出発して分子のもつ諸性質を明らかにすることを目指している。単一の比較的簡単な分子から複雑な生体分子までを広く対象とし、高励起状態や反応中間体など動的過程についても、構造論の立場から積極的にとりあげることにより、分子及び分子集合体のもつ様々な機能の解明に資する。

分子構造学第一研究部門

(左から)
森田紀夫、森脇喜紀



1. 光による気体原子の並進運動の制御や新しい運動状態の実現を目標として、レーザーによって原子をmK以下の極低温にまで冷却するレーザー冷却、及びレーザー光の中に原子を閉じ込めるレーザートラップの研究を行っている。

2. 液体ヘリウム中でバブルあるいはスノーボールを形成している原子やイオンの内部状態およびダイナミックスをレーザー分光学的に研究している。

分子構造学第二研究部門（客員研究部門）

1. 球形分子フラレンの化学は球面の外，内，球面上の三つに分類される。外側の化学としてフラレンの化学的修飾があり，内側の化学として金属を内包する金属フラレンの化学がある。また，炭素ケージ内に異原子が置換したヘテロフラレンの化学も存在する。このような三つに分類されるフラレンの化学を有機合成化学の立場から明らかにしていく。

2. 原子分子やイオンの運動をレーザー光で制御する研究が盛んに行われているが，そこではほぼ例外なく最低次のガウスモードの光ビームが用いられている。しかし，自由空間を伝搬する光ビームには，この他に，高次のエルミートガウスモード，あるいは高次のラゲールガウスモードがある。これらを使って光による冷却原子トラップやガイド，および，ラゲールガウスモードがもつ光の軌道角運動量の利用を研究する。

分子動力学研究部門

1. 振動分光学による分子動的構造の研究

振動分光学をシャープに生かして分子の構造と機能の関係を調べる研究をモットーとしている。時間分解共鳴ラマン散乱や時間分解赤外吸収を主たる実験手段とし、反応中間体や分子励起状態など、分子の動的構造と化学反応との関連の解明が実際のテーマ。時間領域はピコ秒からミリ秒にわたる。分子の振動緩和、タンパク質側鎖の速い構造変化やフォールディング／アンフォールディング、酵素による酸素活性化機構、タンパク質中のプロトン能動輸送機構、タンパク質高次構造変化によるアロステリック効果の発現や情報伝達機構の解明を中心課題としている。



(後列)

水谷泰久

(中列左から)

奥野大地、安藝理彦、
HU, Ying、野村恵美子

(前列左から)

長友重紀、北川禎三、
春田奈美

2. 凝集系の分子分光学研究

凝集系でしかできない分子分光学研究をめざしている。分子間相互作用や、分子内ポテンシャルに由来する動力学を電子スピン共鳴法や振動ラマン法で観測している。最近のターゲットは金属内包フラーレンのスピン状態、液晶分子の相転移、導伝性オリゴマーなど。



(左から)

鐘本勝一、加藤立久、
林 直毅、大窪清吾

電子構造研究系

電子構造研究系では、分子および分子の集合体がそれらの電子構造の違いによって多様な固有の性質を発現することに注目し、化学反応、電子移動、エネルギー移動、情報伝達などの分子機構を電子構造の立場から明らかにし、物質・エネルギー変換の分子論的基礎を確立することを目指している。

基礎電子化学部門

(後列)

中林孝和

(中列左から)

加茂 理、小杉健太郎、

寛 美知子、鈴木優子

(前列左から)

井口佳哉、西 信之、

日野和之



1. 溶液の中のクラスター

水はそこに溶けている分子を組織化したクラスター構造に配列したり、逆に自身の構造を破壊することによって強い静電力を持つ分子を安定化し、この分子を核とする大きなクラスターを形成する。このようなクラスターは溶液の物性を決めるばかりでなく、反応場を形成し、分子集合体の機能発現に重要な役割を果たす。このような機構を構造との関わりに注目して明らかにしている。

2. 分子クラスターイオンの電荷共鳴と電荷輸送

π 電子を持つ分子クラスターイオンにおける電荷の極在性、クラスター内の分子運動に同期した電荷のホッピング、赤外光による電荷分離と電荷移動の機構を、イオントラップ分光法、液体中におけるイオン生成に伴う超高速時間分解分光法等によって調べ、光によるナノスケールの電子輸送制御の可能性を探っている。

3. スーパークラスターの光合成と磁性、光計測

単分子でありながら極めて大きなスピン多重度を持つスーパークラスターを合成し、様々なクラスター分析の手法を動員して光によるその生成機構を解明し、実用可能な単分子磁石への道を探っている。

(左から)

鈴木優子、佃 達哉



4. ナノクラスターの創製と機能発現機構の解明

ナノメートルサイズの金属クラスターは、バルクの金属や原子とは異なる化学的・物理的な性質を持ったユニークな物質系である。まず、溶液中での金属クラスターの生成過程を追跡することによって、構造やサイズが揃ったクラスターの大量合成の方法の確立を目指す。また、調製したクラスターの反応性を調べ、幾何・電子構造との相関に注目しながら、

クラスターの機能が発現する機構を明らかにする。

電子状態動力学研究部門

1. イオン化検出赤外分光法による孤立分子・クラスターの高振動状態の研究

波長可変赤外レーザーで生じる振動励起分子を紫外レーザーにより選択的にイオン化して検出するイオン化検出赤外分光法により、孤立分子状態での高振動状態を観測する。さらに、高振動状態からの緩和過程（反応初期過程）や振動誘起反応の可能性を追求する。

2. パルス電場イオン化（PFI-ZEKE）光電子分光法による分子カチオンの振動分光

高励起リユードベリ状態を電場イオン化して検出する高分解能光電子分光法（分解能 $\sim 10^{-4}$ eV）により、分子カチオンの振動回転構造を観測し、気相分子カチオンの分子構造と緩和過程を研究する。

3. 赤外 - 紫外二重共鳴分光法による分子・クラスターの構造とその動的挙動

凝縮相の一部である、気相分子クラスターに赤外 - 紫外二重共鳴分光法である IR-Dip 分光法を適用し、基底状態（ S_0 ）、電子励起状態（ S_1 ）、カチオン（ D_0 ）さらには、光反応生成物の赤外スペクトルを観測する。振動スペクトル解析および Ab initio MO 計算との比較から、分子・クラスターの構造と動的挙動の関係を研究する。

4. 交差分子線画像観測法による化学反応動力学の研究

高分解能画像観測装置を組み込んだ交差分子線装置により、反応性散乱の微分散乱断面積を求め、量子化学計算で求められたポテンシャル曲面上での散乱計算と詳細に比較することにより、反応動力学を明らかにする。特に、成層圏オゾン層における化学反応を明らかにする目的で、 $O(^1D)$ 原子の反応について研究プロジェクトを進めている。

5. フェムト秒時間分解光イオン化法による化学反応の実時間追跡

フェムト秒時間分解光電子画像観測法により、孤立多原子分子や分子小集団における超高速位相緩和を実時間追跡し、非断熱動力学を明らかにする。



（後列左から）

酒井 誠、佐伯盛久、
渡邊武史、石内俊一

（前列左から）

藤井正明、稲垣いつ子



（後列左から）

坪内雅明、高口博志

（前列左から）

鈴木俊法、HOSSAIN, Delwar、
片柳英樹

電子構造研究部門（客員研究部門）

ヘテロポリ酸が金属酸化物の諸物性を分子論的に理解する上での格好の化合物であることに着目し、これを基盤とした分子素子の構築や無機医薬の実現に力を注いでいる。

1．ヘテロポリ酸の合成と構造化学（混合原子価状態，希土類金属等を含む種々のヘテロポリ酸の合成を行い化学構造を支配する構造化学的原理と電気および磁氣的性質との関連に関する詳細を求める。）

2．ヘテロポリ酸の光化学と応用（酸素→金属への電荷移動吸収帯の光励起により生ずる励起三重項状態の酸化還元反応やエネルギー移動の詳細を求め，触媒，EL素子，クロミック素子，発光素子，分子磁石等への応用を試みている。）

分子エネルギー変換研究部門（外国人客員研究部門）

分子及び分子集合体の性質とその機能をエネルギー変換の観点から広く研究する。そのため新しい物性をもつ物質系を斬新な手法を用いて合成・構築するとともに，その分子機能（光起電力，光触媒効果，表面電子移動，選択的触媒反応）発現の分子過程を分光学的手法等により研究し，化学的エネルギー変換の新しい原理を確立する。

分子集団研究系

分子集団研究系では新しい電子機能を持つ分子物質を設計，開発すると共に，電氣的，磁氣的，光学の実験や極低温，超高压等の条件下での種々の実験を通し，それらの新規物性の由来を解明する。これ等の研究を通し，分子物質の新物性の開拓と電子物性の統一的な理解，分子素子への展開を目指している。

物性化学研究部門

1．分子性導体の物性研究と物質開発

伝導電子が局在スピンや分子内振動と強く結合している物質や電子同士が強く相互作用している強相関電子系と呼ばれる分子性導体について，偏光反射分光法やラマン分光法など主に分光学的な手法を用いて低温あるいは高压下の電子物性の研究を行っている。現在取り組んでいる研究課題は 金属フタロシアニン導体における π 電子 - d 電子相互作用の研究，赤外・ラマン分光法による分子導体における電荷整列の研究，偏光反射分光法による分子導体のバンド構造の研究，分子性導体における電子格子相互作用の研究などである。



(後列左から)
MAKSIMUK, M. Y.,
欧 建勇、賣市幹大、
長谷川真史
(前列左から)
山本 薫、丁 玉琴、
中野千賀子、
DROZDOVA, O. O., 薬師久彌

2．分子性導体の低温電子物性

分子性導体の示す特異な電子状態に関心を持ち，主に磁気共鳴 (ESR, NMR) といった実験手法により研究を行っている。現在，以下のテーマが進行中である。

選択的同位体置換した試料による NMR 精密測定。金属 - 非金属転移における絶縁化機構・電荷局在状態の理解。ESR による伝導電子の同定，金属 - 非金属転移や電荷局在・スピンドYNAMICKS の理解。



(左から)
磯貝美穂、中村敏和、
塚田 浩

分子集団動力学研究部門

(後列左から)

緒方啓典、佐藤春菜、
大石 修、岡野芳則

(前列左から)

小島絵美子、藤原秀紀、
小林速男、田中 寿、
田村格良



新有機超伝導体の探索，新規機能性液晶の探索，複雑な構造を持つ分子性結晶の高圧単結晶 X 線結晶構造解析，超高圧下の電気伝導度精密測定法の開発，などである。

1．分子性金属・超伝導体の開発・物性と高圧固体化学

私たちの研究室では新たな電子物性を示す分子物質の開発，構造，物性研究を一元的に行っている。現在の主なテーマは π -d 電子系による分子性磁性金属・超伝導体の開発と磁性と超伝導の共存・拮抗に伴う新現象の探索，有機安定ラジカルをスピン源とする有機磁性金属・超伝導体の設計と合成，単一構成分子による分子性金属結晶の開発，

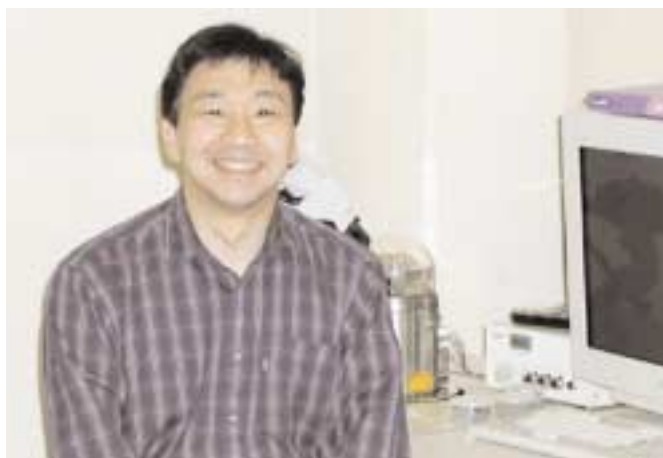
2．分子集団系の配列・配向制御と局所電気特性の解明

単一分子あるいは数分子の集合体の電気特性を調べる。金属あるいは半導体基板上に，分子線エピタキシー法や電気化学的手法を用いて，分子を規則正しく配列し，走査型プローブ顕微鏡を用いてナノメートル領域での電気伝導度や，分子 / 基板界面の電子状態を明らかにする。

3．分子素子の構築

上記知見に基づき，分子数個でスイッチングを行う素子を構築する。分子のデザイン・合成は，分子研の他のグループと協力して行う。分子へのナノサイズ配線を，リソグラフィー技術および無電解鍍金技術を用いて試みる。

夢田博一



分子集団研究部門（客員研究部門）

分子集団研究系と協力しながら，分子性金属・超伝導体，分子磁性体，有機磁性金属・超伝導体の構築，物性解明，分子磁性体のスピン構造，磁気特性の研究，極端条件下での分子性固体の研究を実施している。

相關領域研究系

本研究系では、分子科学と関連諸分野とが相關する領域を研究対象としている。有機化学、無機・錯体化学、さらには生体関連化学を視野の中にいれた広範な研究対象に関し、分子レベルでの新たなアプローチを目指している。

相關分子科学第一研究部門

1. ヘム蛋白質の構造、機能及び反応機構の解明

金属酵素の構造と機能発現機構解明を中心課題として取り扱っている。特に、ペルオキシダーゼやチトクロームP-450など酸化反応に関与しているヘム蛋白質の作用機構に関し、モデル錯体による不安定中間体の合成及び電子状態と反応性の定量化、蛋白質やミュータント、さらにはハイブリッド体を用いた研究を展開している。

特に、この課題では、酵素反応の作用機構を化学反応として精密に理解し、人工酵素の分子設計へと発展させることを目指している。



(後列左から)
鈴木和治、山原 亮、
原 功、上野隆司、
大橋雅卓
(中列左から)
楊 慧君、安 光賢、
岸田三省、渡辺芳人、
小江誠司
(前列左から)
牧原伸征、油 努、
中井英隆、谷澤三佐子、
加藤 茂

2. 分子性磁性体の開発及び物性研究

有機ラジカルと遷移金属からなる無機 - 有機ハイブリッド系を用いた新しい分子性強磁性体の構築研究及び、有機ラジカルのスピン間相互作用の研究を行っている。では配位子として高スピンのポリニトロキシドラジカルを用い、遷移金属イオンを介して自己組織化するという新しい分子磁石の構築方法を用いて高温の転移温度を持つ分子磁石や、キラルな分子磁石の構築研究を進めている。では新規安定ラジカル結晶の磁性を詳しく解析することにより分子間のスピン磁気モーメントの相互作用について研究を行っている。



(後列左から)
加藤恵一、井上克也、
今井宏之
(前列左から)
細越裕子、秋田素子
(池中左から)
岩堀史靖、鈴木健太郎

相関分子科学第二研究部門（客員研究部門）

色々な金属イオンを利用している金属酵素の構造と機能の理論を目指し，合成モデル系の構築を中心に研究の展開を行う。

分子クラスター研究部門（流動研究部門）

（後列左から）

蔡 徳七、西山裕介、
橋之口道宏、市川真史

（前列左から）

太田明代、笠井俊夫、
久保 厚



1．新規な分子クラスターの構造選別と立体反応ダイナミクス解明

分子の配向は化学反応において制御すべき，最後に残された重要な自由度です。分子線レーザー蒸発法により有機金属錯体など新規な中性クラスターを合成し，六極電場法を用いてそのサイズと構造を非破壊的に選別し，引き続きクラスターの配向制御を行います。一方，偏向レーザー励起法によりラジカル・分子のアライメントを行い完全配向状態下の

反応を実現します。さらに $AB + CD$ 二分子反応の遷移状態化学種 $[AB \cdots CD]$ の幾何構造は反応分岐を決定する要因であるので，この構造選別を行い反応の Active Control を試みます。これらの研究から新しい化学反応論の新展開と近い将来の反応制御の新しい方法論の確立を目指します。

2．固体高分解能 NMR による微粒子の研究

ラジオ波波形制御により金属微粒子の Knight シフトで広がったスペクトルの選択された帯域を励起し，溶液で使用されている 2 次元 NMR の実験に対応する実験を行い，表面の原子と内部の原子の J 結合等を決定する予定。また微粒子あるいは多孔質物質の固体表面と液晶や界面活性剤分子との相互作用を体積磁化率効果等を使って調べる。光を照射すると金属微粒子の集合体は非線型光学効果を示すがその 1 種である逆ファラデー効果や光整流効果が NMR で検出可能か否かを検討する。

（後列左から）

野口博司、野坂 誠

（前列左から）

高須昌子、橋本昌人



3．ゲルの生成過程，ヘリウムのランダムポテンシャル中の物性のシミュレーション

当研究室では，物性物理学の興味深い問題に対して，モンテカルロ・シミュレーションなどの手法を用いて研究している。特に，ゲルの生成過程に関してモデルを作成し，ラジカル，モノマー，リンカーの比率による，ネットワークのでき方の違いを調べて，相図を得る。その他，ヘリウムのランダムな媒質中での超流動

密度の変化や，雪崩現象のセルオートマトン・モデルによる研究も行っている。

極端紫外光科学研究系

本研究系は、極端紫外光実験施設（UVSOR）のシンクロトロン放射光やレーザーを用い、極端紫外光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、光化学の基礎過程、反応動力学、界面の性質および触媒作用などの研究を新しい実験手法の開発とともに推進する。

基礎光化学研究部門

1．軟X線光物性・光化学：内殻励起のダイナミクス

軟X線と分子の相互作用の基礎過程を研究している。特に、UVSOR施設からの放射光軟X線を利用して、分子の内殻電子を励起・イオン化し、そのダイナミクスを調べている。内殻電子は原子に局在しており、同じ元素であっても化学結合の違いによってエネルギーレベルが異なる。そのため、分子内の個々の原子を選択的に励起・イオン化できる。このような特徴を生かして、価電子励起・イオン化では知られていないような新しい現象を探索し、また、その現象のメカニズムを解明している。さらに分子の物性評価に応用できる新しい内殻分光法も開拓している。



（左から）
永園 充、小杉信博、
陰地 宏、高田恭孝、
中根淳子

2．超高速分光による分子ダイナミクスの研究

凝縮相（主として溶液中）での光化学反応、緩和過程、振動コーレンス等の分子のダイナミクスを時間分解分光を用いて研究する。現在は、ピコ秒・フェムト秒レーザーを用いた紫外・可視・赤外吸収分光、蛍光分光、線形・非線型ラマン分光を駆使して実験を行っている。既存の分光法の応用にとどまらず、新しい手法（方法論）の開発を目指す。また、レーザーのみでは行うことが難しいエネルギー領域への時間分解測定の高伸という観点から、放射光を用いた実験にも興味をもっている。



（左から）
藤芳 暁、竹内佐年、
ARZHANTSEV, Sergei、
水野 操、田原太平、
藤野竜也

反応動力学研究部門

気相、固相及び表面における化学反応の動力学現象の解明を目的として、シンクロトロン放射や紫外・可視レーザーを用いて以下の研究を行っている。

(後列左から)

吉村大介、野田英之、
東 康史

(前列左から)

清水厚子、野々垣陽一、
宇理須恆雄、王 志宏



1. STM, IRRAS (赤外反射吸収分光) のその場観察により、半導体表面の内殻電子励起による原子レベルでの構造変化を直接観察する。特に放射光によるナノ加工とナノ構造表面での有機化合物、特に生体関連物質の化学反応およびこれらの単一分子系での観察に重点を置いて研究を進める。

(後列左から)

清水厚子、水谷雅一、
新倉弘倫

(前列左から)

見附孝一郎、岩崎光太、
小野正樹



2. 光子エネルギーが10から200電子ボルトのシンクロトロン放射を用いて、分子や分子集合体の超励起状態の検出とその自動イオン化および単分子的解離反応の機構を解明する。主な実験手法は2次元光電子分光、正・負イオンの質量分析およびイオンや中性フラグメントのレーザー光電子分光とレーザー誘起蛍光分光である。

3. パルスまたは連続発振レーザーとシンクロトロン放射を組み合わせ

たポンプ・プローブおよび2重共鳴分光実験システムを開発する。多電子励起状態や光学禁制状態を生成したり、特定の化学結合に局在した電子遷移を惹起することで、特異な光解離反応ルートの開拓を目指す。

界面分子科学研究部門 (流動研究部門)

1. 放射光励起ナノプロセスを用いたフォトニック結晶の製作

シンクロトロン放射光による表面化学反応を利用して、高い空間分解能で大面積の微細加工ができる「ナノプロセス技術」の開発を行う。そのためには、ナノメートルの寸法を持つ構造における表面吸着分子の化学状態、電子状態、相互作用の観点からの情報が不可欠であり、走査トンネル顕微鏡、近接場光学顕微鏡を利用した観測を行い、分子レベルにおける表面反応過程を明らかにする。

さらに、原子が規則正しく並んだ半導体結晶の中では、電子(エレクトロン)のエネルギーがバンド構造をとることに基づいて種々の機能を持つエレクトロニクスデバイスが実現されている。電子の半導体結晶に相当するフォトニック結晶は、ナノメートル寸法の誘電体を規則的に並べた

構造を持っており、この結晶の中で光子（フォトン）はバンド構造をとる。このようなフォトンのアクティブデバイスであるフォトリック結晶を上記のナノプロセス技術を利用して製作する。また、フォトリック結晶の評価技術が確立されていない現状から、特に近接場光学顕微鏡を利用した光学特性評価法の確立を目指した研究も実施する。



（後列左から）
竹添法隆、河崎泰宏、
柳田英明、田中貴史、
木原隆義、土井洋一郎
（前列左から）
福井一俊、長岡伸一、
黒澤 宏、佐々木時代、
高嶋圭史

2．放射光を用いた化合物半導体薄膜の電子構造に関する研究

電子構造は半導体薄膜材料の物性を理解し、制御する為に必要な情報の一つである。本研究はこれら薄膜材料の電子構造に関する知見を実験的に求めることを目的としている。光源として、内殻電子を励起でき、かつ波長可変で直線偏光性にも優れた放射光を用い、内殻吸収とその偏光依存及び光電子分光を測定手段とする。内殻を選択励起出来るので、イオンサイト毎の情報を引き出せるため、特に化合物半導体に威力を発揮する。そこで、これらの手段を用い化合物半導体薄膜材料のバルク・表面・界面の伝導帯及び価電子帯の構造を調べる。

3．光のナイフの創成 - 内殻準位励起後のサイト選択的解離の研究

一辺が10 cmである正方形の紙の一つの頂点から一辺1 cmの正方形を切り取るには、はさみが使われる。一辺が1 cmである正方形の紙の一つの頂点から一辺1 mmの正方形を切り取るには、ナイフを使うと便利である。それでは、さらに対象が小さくなって、分子から原子もしくは原子団を切り取ろうとすればどうすればよいであろうか？ 現在は切り取られる原子や原子団の性質に基づいた化学反応によって、こうした切り取りが行われているが、ナイフに相当する便利な手法は未だ開発されていない。我々は、シンクロトロン放射光を光のナイフとして用い、内殻準位励起後のサイト選択的解離に基づいて、こうした切り取りを行うことを研究する。

分子全体に非局在化している外殻電子と異なり、内殻電子は元々属していた原子付近に局在化している。一つの分子中の同じ原子の同じ内殻の準位でも、その原子の周囲の環境によって内殻電子の励起エネルギーは変化するので、照射光のエネルギーを厳密に選べると、分子を構成する原子のうち、特定の原子のみを選択的に励起することが可能である。その結果、その原子との結合だけが選択的に切れるようなサイト選択的解離反応を起こすことができる。我々は、このような、極端紫外光を光のナイフとして用いた新しいタイプの原子分子操作を研究する。

極端紫外光研究部門（外国人客員研究部門）

極端紫外光科学研究系及び他の研究系にまたがって分子・分子集合体の物性並びに反応に関する、幅広い分子科学的研究を行っている。

分子制御レーザー開発研究センター

(後列左から)

山中孝弥、上田 正

(中列左から)

PAVEL, Nicolaie、

庄司一郎、栗村 直、

渡邊一雄、大竹秀幸

(前列左から)

平等拓範、市野里美、

寺田三和子、藤井正明、

猿倉信彦



分子科学が急速かつ高度に進歩し続けているため、市販のレーザー装置を購入しそのまま利用していたのでは、重要な研究手段であるレーザー装置の性能に限度があり、先端的分子科学研究を推進するには不十分な状況である。分子制御レーザー開発研究センターは、新しい分子科学研究を切り開く、高性能かつ新規なレーザーシステムを自ら開発することを目指している。

開発中のレーザーならびに担当研

究部は以下の通りである。

1) 分子位相制御レーザー開発研究部(渡邊一雄助手)

光の位相を利用した化学反応制御のためのレーザー開発

2) 放射光同期レーザー開発研究部(猿倉信彦助教授, 大竹秀幸助手)

超励起分子反応制御のための放射光同期レーザー開発

3) 特殊波長レーザー開発研究部(平等拓範助教授, 栗村直助手)

真空紫外・遠赤外光による反応制御のための高性能特殊波長レーザー開発

また、種々のレーザー、分光装置、測定機器を共同利用機器として管理し提供している。レーザー分光機器のうち共通性があり、かつ最高級のものを集中管理し、二重投資を防止するとともに常時高性能を維持し、研究所内外の研究者の利用に供している。共通機器の保守管理サービスは全職員が分担して行っている。

レーザー開発センター棟(1,053 m³)には、分光測定室(4室)、レーザー室(8室)、があるほか外来施設利用研究者のための準備室なども備えている。

主な設備備品

フーリエ変換赤外分光光度計(BOMEM DA3), 円二色性分散計(日本分光 J-720W), 固体波長可変超短パルスレーザー(Spectra Physics, Tunami, 再生増幅器), Nd:YAG 励起色素レーザー(Quanta-Ray DCR 2A, PDL3), Nd:YAG レーザー(Quanta-Ray GCR 250), エキシマー励起色素レーザー(Lambda Physik LPX105i, LPX205i, LPD3002, COMPex110M, SCANmate 2E), フッ素系エキシマーレーザー(COMPex 110F), シンクロナス励起OPOレーザー(Spectra Physics OPAL), Nd:YAG 励起OPOレーザー(Coherent INFINITY, Lambda Physik SCANmate OPPO), 高感度蛍光分光光度計(Spex Fluorolog II), 紫外分光光度計(日立U-3500)。

このほか貸出用(所内における共同研究, 短期の開発研究の目的のため)小型機器として、高圧電源, アンメーター, オシロスコープ, ボックスカー積分器, ロックイン増幅器, シグナルアベレージャー, 記録計等を備えている。平成5年度より上記のレーザー分光機器及び小型機器の貸出し予約システムをオンライン化し, 所内外の利用の効率化を図っている。

分子物質開発研究センター

分子物質開発研究センターの目標は分子科学に発展をもたらす新たな分子物質を開拓し、分子科学における物質研究を先端的に推進する事である。このために本センターには4開発研究部が置かれている。開発研究部の4人の助教授は研究系との協力の下に新物質開発を行う。分子性超伝導体、有機強磁性体等、物性機能に注目した分子物質開拓、および生体機能、触媒機能の観点に立つ物質開拓等を展開する。また同時に、本センターは分子科学研究所内外の研究者の活動を支援するための業務をあわせ行う。即ち、分子科学の研究に共通性のある物性機器の集中管理、低温冷媒の供給、化学試料の分析を行い、研究者の利用に供する。また、実験廃棄物の管理、処理を行う。



(後列左から)

鈴木敏泰、伊藤 肇、
菊澤良弘、藤井 浩、
高山敬史、池上崇久、
田中彰治、阪元洋一

(中列左から)

牧田誠二、伊藤歌奈女、
鈴木博子、永田 央、
糟谷さとみ、船橋靖博、
ZAMAN, Md. Badruz、
HEIDENHAIN, Sophie

(前列左から)

桑原大介、柴山日出男、
加藤清則、戸村正章、
小丸忠和、渡辺芳人、
AKHTARUZZAMAN, Md.

各研究部の主な研究内容は以下の通りである。

- パイ電子開発研究部： 多段階有機酸化還元系などの新規なパイ電子系を設計・合成し、導電体や分子電線などの機能性物質の開発研究を進めている。さらに、特異なパイ電子系分子固体の研究として、新規に開発した物質の物性研究を行っている。
- 融合物質開発研究部： 金属酵素がもつ構造の規則性と機能の関わりを、活性中心モデル錯体の電子構造やタンパク質の作る反応場の特色から研究している。さらにその成果を基に、既知の金属酵素の機能改質や人工酵素、機能性触媒などの新規物質の開発を進めている。
- 機能探索研究部： 遷移金属錯体を用いた水の活性化による新しい反応活性種の生成に取り組んでいる。さらに、金属錯体の酸化還元と光励起電子移動を組み合わせた物質変換システムの構築を目指して研究を進めている。
- 分子配列制御研究部： 単一成分の分子性金属を目指した新規有機伝導体の開発および有機エレクトロルミネッセンス素子のためのアモルファス性有機電子輸送材料の開発を進めている。

主な設備備品

希釈冷凍機、固体高分解能核磁気共鳴装置、高分解能核磁気共鳴装置、電子スピン共鳴装置、四軸およびイメージングプレート単結晶X線回折装置、粉末X線回折装置、SQUID、走査型熱解析計、円二色性分散計、二重収束質量分析計、ガスクロマトグラフ質量分析計、元素分析計、ICP発光分光分析装置、分光光度計、フーリエ変換赤外分光光度計、四重極質量分析計、MALDI-TOF MSなど。

装置開発室

(後列左から)

鈴井光一、内山功一、
林 憲志、近藤聖彦

(中列左から)

水谷伸雄、高松軍三、
豊田朋範、吉田久史、
小林和宏

(前列左から)

永田正明、浅香修治、
薬師久彌、渡邊三千雄、
浦野宏子



装置開発室の使命は、装置開発室独自にあるいは各研究部門との協力によって、分子科学研究に必要な実験装置を設計・製作し、また新しい装置を研究・開発することにある。従来から装置開発室では、研究者の依頼を受けて様々な新しい装置を製作するという業務を通じて、高度な装置技術を蓄積してきた。この技術を積極的に生かし、装置開発室本来の活動がより活発に行えるように、現在、テクニカルサービス、IMS

マシン、基盤技術育成の3部門からなる構成で業務を行っている。

テクニカルサービスでは研究者の依頼に応じて、メカトロニクス、エレクトロニクス、ニューマテリアルの各担当者が、機械、電子回路、ガラス装置の製作・改良などを行い、所内の研究を日常的に支える役割を担っている。また各工作室では研究者自らが作業を行えるようにもしてある。

IMSマシン部門では「アイデアの重視」と「所内外との共同開発」を基本とした新しい発想の先端の実験装置(IMSマシン)の提案を広く所内から募り、その企画・技術調査・設計・試作を行う。

基盤技術育成部門では体系化した知識と技術の習得を目指して、各構成員の担当分野において基礎となる技術の調査・研究を行う。

装置開発室においては、これら三者の協力に基づく総合力によって、技術を基盤とした分子科学の新しい展開を常に追及している。

主な設備備品

〔メカトロニクス・セクション〕

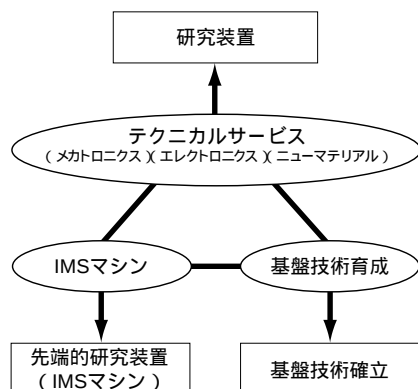
マシニングセンター(マキノBN1-85)、NCフライス盤(マキノKGNCC-70)、放電加工機(ソデックA35R)、ワイヤー放電加工機(三菱DWC90H)、電子ビーム溶接機(日本電気EWB)、正面旋盤(西部工機LHS-3616)、他一般工作機械及びCAD・CAMシステムなど。

〔エレクトロニクス・セクション〕

2GHzサンプリングデジタルオシロスコープ(レクロイ7200A)、1GHzオシロスコープ(テクトロニクス7104)、スペクトラムアナライザー(アドバンテストR3361B)、サンプリングスコープ(岩通SUS601B)、ネットワークアナライザー(パイオメーションK100D)、LCA開発システム(AMD)、プリント基板自動製作システム(LPKF)、インピーダンス・ゲイン・フェーズ・アナライザー(YHP)など。

〔ニューマテリアル・セクション〕

ガラス旋盤(理研GL-4DLH)、超音波加工機(日本電子工業UM500)、バンドソーイングマシン(LUXO VW-55)など。



極端紫外光実験施設

シンクロトン放射光 (SR) は、遠赤外から極端紫外・X線にわたる波長連続の強く安定な“夢の光”であり、また、指向性、偏光性、パルス性、清浄性といった数々の優れた特徴をもっている。このSRを利用する極端紫外光実験施設は大型研究設備の一環として建設され、昭和57年から研究施設として独立した。(大型研究設備の項参照。) 59年9月から所内外の利用実験を開始し、現在年間170件を越える研究が活発に行われている(47頁参照)。



(後列左から)
萩原久代、高橋和敏、
保坂将人、松尾末吉、
山崎潤一郎、江田 茂、
鬼武尚子、繁政英治、
下條竜夫、小杉信博
(中列左から)
神本文市、加藤政博、
蓮本正美、近藤直範
(前列左から)
鎌田雅夫、中村永研、
MORÉ, Sam D.、田中仙君

研究分野は大きく分けて、6つの分野に分類される(分野1:分光実験, 分野2:光電子分光実験, 分野3:光化学実験, 分野4:化学反応素過程実験, 分野5:固体・表面光科学実験, 分野6:光励起新物質合成実験)。現在は、第一期建設期, 第二期拡張期を経て、第三期目になり、将来に向けての重要な時期になっている。そのため、放射光分子科学の視点からの点検評価が行われると共にUVSOR将来計画委員会などが開かれている。また、設備更新が必要な段階になっており、所外ユーザーを含むUVSORワークショップが毎年開かれ、各研究分野とビームラインの発展についての熱心な検討を行ってきている。その結果、約3分の1のビームラインでアップグレードが行われ、放射光利用研究が一段と発展しつつある。また、第7の研究分野(分野7:レーザーと放射光組み合わせ実験)も順調に成長しつつある。

光源グループは光源加速器の性能向上にかかわる開発研究を行うとともに自由電子レーザーやビーム物理などに関する実験的研究を行っている。

また、観測グループは施設利用ビームラインを利用する全国の大学、研究機関からのユーザー(約800名)の支援業務を行いながら、ビームラインの性能向上に関わる開発研究として、たとえば新型分光器やスピン分解光電子分光装置の設計、製作、調整および性能評価を行っている。さらに、観測グループの研究者は、所内外の研究者や外国研究者と共同で、放射光を利用した新しい方法論や手法を用いた研究活動を活発に行っている。固体・表面グループは、清浄な絶縁性および半導体物質を対象に、内殻励起子の脱励起過程、表面からのイオンや原子の光脱離の動的過程、レーザー励起による過渡的電子励起状態、SRとレーザーの2光子過程、負の電子親和力表面の形成過程などを研究している。また、気体グループは、各種気体たとえばオゾンの高分解能内殻分光やコインシデンス分光などを行っている。

主な設備備品

〔光源加速器〕

15 MeV線型加速器, 600 MeVシンクロトン, 750 MeVストレージリング, アンジュレータ, 超伝導ウィグラー, オプティカルクライストロン

〔観測系ビームライン〕

BL1A軟X線吸収・光電子分光装置, BL1B固体真空紫外分光装置(1), BL2A真空紫外分光

装置，BL2B1 固体吸収・光電子分光装置，BL3A1 アンジュレータ光照射装置，BL3A2 気体イオン化測定装置，BL3B 気体光電子分光装置，BL4A 表面光化学反応装置（1），BL4B 表面光化学反応装置（2），BL5A 固体・表面光電子分光装置，BL5B 機器較正装置，BL6A1 フーリエ変換赤外・遠赤外分光装置，BL6A2 固体・表面光電子分光装置，BL6B 赤外固体反射測定装置，BL7A 軟X線固体分光装置，BL7B 固体真空紫外分光装置（2），BL8A 利用者持込みポート用装置，BL8B1 固体・気体吸収測定装置，BL8B2 角度分解紫外光電子分光装置

一つの金属あるいは金属イオンと配位子（原子または分子）から構成された単核錯体，複数個の金属イオンと配位子からなる多核錯体，さらにそれらの金属錯体が高分子化した無機固体物質を研究対象とする錯体化学は，金属と配位子の結合を通じて，その構造と物性を追求し，新しい機能を創造することをなしうる学問領域である。全元素を対象とした物質化学としての錯体化学は他研究領域の発展にも大きな貢献を行っている。

本実験施設は昭和59年4月に2部門をもって開設され，昭和61年度に新たに1部門を加え，平成元年度よりさらに1部門が新設された。錯体化学実験施設の各部門は南実験棟で研究を行っている。

錯体触媒研究部門

私たちは遷移金属錯体の特性を活かした新しい触媒反応，特に合成的にも有用な触媒的有機反応の開発を中心研究課題としています。生体などではむしろ一般的である「水」や「高分子ゲル」などを反応メディアとする触媒作用を，純化学的に司る新しい反応駆動力や制御概念の提出を目指しています。精密な触媒挙動の解析と共に，反応メディアや添加物をも含めたマクロな反応系全体の設計を試み，立体および化学選択性の高度な制御に挑みます。



（後列左から）

田中博隆、魚住泰広

（前列左から）

八十島佳代、柴富一孝、

中園真紀

錯体化学実験施設

錯体物性研究部門

(後列左から)

山口ゆみ子、和田裕明、
水川哲徳、田中晃二、
和田 亨、東門孝志

(前列左から)

神谷道代、小室貴士、
川口博之、小林克彰、
枝連一志



金属イオンに合目的な配位子を導入した金属錯体は特異的な機能を発現させることが可能となる。自然界での窒素、酸素、二酸化炭素等の無機化合物から有機化合物への変換過程、ならびに生体系での最も基本的なエネルギー獲得手段である細胞膜内外のプロトン濃度勾配からのエネルギー変換過程には金属錯体の酸化還元反応が中心的な役割を担っている。これらのことから、金属錯体上でのアコヒードロキシ基間の酸・塩

基平衡反応に金属錯体の酸化還元反応をカップルさせることにより、人工的な系でのプロトン濃度勾配からのエネルギー変換を行う。また、金属錯体による二酸化炭素還元反応を中心テーマとして研究を行う。

一方、生体内触媒や工業触媒には特異な反応を行う異核金属カルコゲニド化合物が存在することが知られている。これらの化合物を指標化合物とし、新しい機能をもつ異核金属カルコゲニドクラスターの創製を行う。

配位結合研究部門 (客員研究部門)

錯体化学実験施設の他部門と協力しながら、配位結合を有する希土類錯体や超分子錯体の合成と物性について研究する。また、多核金属錯体や金属-金属結合を有する金属クラスターの合成も行い、X線結晶構造解析、NMR、IRを含めた各種分光測定により構造を明らかにする。また、それらの光および磁気物性あるいは触媒活性と分子構造との相関を解明する。

平成11年1月に稼動を開始した日本電気製スーパーコンピュータSX-5と並列計算機IBM製SP2に加えて、平成11年度末に導入された富士通製ベクトル並列スーパーコンピュータVPP5000及びスカラ超並列計算機SGI Origin2800は、それぞれ200 GFLOPS以上の演算性能を持ち、200 GB以上の主記憶容量と3 TB以上の高速ディスク容量を有し、今まで計算が困難であった超大型計算が盛んに実行されている。



(後列左から)

伊藤正勝、木下朋子、
加納聖子、岡田一俊、
禿子 瞳、南野 智、
手島史綱、内藤茂樹

(前列左から)

水谷文保、高見利也、
平田文男、青柳 睦、
南部伸孝、西本史雄

平成10年度末のプロジェクト(研究課題)総数は166件、利用者数は664人であった。このうち、約70%は共同研究や施設利用を通して所外利用者に利用されており、残りの30%は所内利用に供されている。大学等では実行が困難な長時間・大主記憶容量を必要としなおかつ大量の中間データを持つ大型計算が行われ、分子の電子状態、化学反応のポテンシャル曲面、溶液や高分子の分子動力学シミュレーションなどの分野で成果を上げている。

分子科学プログラムライブラリも年々充実度を増し、所外利用者によって開発された150本のプログラムを有し、分子科学分野において、世界で最も充実したライブラリ所有機関の一つとなっている。特に量子化学文献データベース(QCLDB)は、センターでオンライン利用されるだけでなく、世界中の分子科学研究機関に配布され、この分野の研究に大いに役立てられている。

研究グループにおける主な研究内容は、分子軌道計算に基づく電子状態ポテンシャルエネルギー面の高精度計算と得られたポテンシャル面上での反応動力学の研究を行っている。特に、高振動励起状態の解析や単分子解離反応におけるエネルギー再分配過程などの研究に力をいれている。また、電子相関効果を充分に取り入れた多配置SCF計算と分子動力学計算を同時に行うためのプログラムを開発している。これを用いて、高精度の非経験的分子軌道計算によるポテンシャル曲面を解析関数として得ることが困難な、表面反応や生体関連分子の反応機構の解析に応用している。

技術課

(前列左から3人目より)
酒井楠雄、佐藤敦子、
杉山加余子、鶴田由美子、
大原恭子、永園尚代

他の人は各研究部門、
付属施設の欄参照



21世紀に向けてわが国が「科学技術創造立国」を目指し、科学技術の振興を強力に推し進めるため、平成7年に科学技術基本法が制定された。これに基づき、平成8年に科学技術基本計画が閣議で決定されたが、ここには基礎研究の重要性とその研究を支援するための組織の充実が強く述べられている。

分子科学研究所は、物質の根源を探究することを使命とし、その基礎

研究を行う研究所として昭和50年に創設された。同時に技術的研究支援を目的として、技官を組織化した技術課が発足した。

技術課は、所長に直属した組織として、6付属研究施設及び6研究系に配属された技官によって、構成されている。その役割は、各人の持っている専門的技術によって、研究活動を支援することにある。さらに、研究のしやすい環境をつくること、つまり、研究者が研究に専念できるように、ネットワークの運用管理、建物、設備、共通実験機器等の維持管理、そして、安全に関わる業務や、多数の見学者への対応等、研究所共通にかかわる業務も、研究支援のための重要な業務として行っている。また、技術課の組織を生かして、各研究施設や研究系に配属されている技官からメンバーを選び、プロジェクトチームを結成し、研究所の緊急課題に対応している。

技官は、高度化する技術に対応するために、常にその向上を目指して精進しなければならない。外部技術者との交流は、技術向上のためには不可欠である。技術課は発足時より、外部技術者との技術交流を目的とした、技術研究会を開催している。現在これは、全国的な広がりを見せ、大学、研究所の技官の技術向上に大いに役立っている。また、平成7年度からは、新しい試みとして、他大学、研究所の技官を一定期間、分子科学研究所の付属研究施設に受け入れて、技術研修を行っている。この試みは、派遣側、受け入れ側双方の技官の活性化に繋がり非常に好評である。将来的には正式に制度化して定着をはかりたい。

以上のように、技術課は各人の持っている専門的技術によって研究を支援するだけでなく、研究のしやすい環境を作ることを最大の使命と考え活動している。また、技官自身の技術向上のために、技術研究会、技術研修等自己研鑽も積極的に行っている。これらの活動は技術課の活動報告誌「かなえ」に掲載されている。

フェムト秒・ピコ秒化学反応観測システム

極短パルスレーザー技術の進歩により，超高速分光法が，物理や化学の分野における一般的な手法になりつつある。しかし用いる試料や手法に応じて，必要となるレーザー光の波長およびパルス幅などが異なる場合が多く，一つのレーザーシステムにおいて，波長やパルス幅を任意に選択することができれば，応用範囲が急速に広がることは間違いない。そこで今回，(1)1 kHzの繰り返し周波数で1 μJ 以上の強度を保ち，(2)紫外から赤外まで二色で連続波長可変であり，(3)ピコ秒レーザーとフェムト秒レーザーとが同期する，新しいレーザーシステムを導入した。図1にレーザーシステムのブロック図を

示す。新システムでは，2台のフェムト秒モード同期チタンサファイアレーザー（ML Ti:Sapphire）間のジッターを位相制御し，それぞれピコ秒およびフェムト秒のチタンサファイア再生増幅器（RGA）のシード光としている。ピコ秒RG

Aからの出力は，波長790 nm，パルス幅約4 ps，パルスエネルギー約3 mJ，フェムト秒RGAからの出力は，波長800 nm，パルス幅約200 fs，パルスエネルギー約2 mJであった。繰り返しはともに1 kHz，RGA間でのジッターは約4 psである。フェムト秒RGAは，加段増幅することにより，約10 mJのフェムト秒パルスの発生も可能である。ピコ秒RGAからの出力光を二つに分け，光パラメトリック発生・増幅システム（OPA）の励起光源として各々用いた。フェムト秒RGAからの出力光も二つに分け，片方はOPAの励起光源に，もう片方は2倍波から4倍波までの高調波発生に用いている。ピコ秒OPAの波長域は，図2に示すように和周波や差周波と組み合わせることにより，片方が230–11200 nm，もう片方が189–2700 nmまで，これら全領域において1 μJ 以上の強度を保ったまま連続波長可変である。本装置を用いて，液体中に存在する中性およびイオンクラスターの光解離，再配向および余剰エネルギーの散逸過程のダイナミックスの研究が現在行われている。分子線装置と結合させて気相中の化学反応過程を観測する実験も可能である。

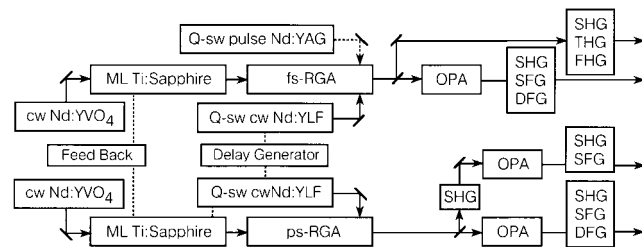


図1 ブロック図
cw Nd:YVO₄，ダイオード励起 cw Nd:YVO₄ レーザー； ML Ti:Sapphire，フェムト秒モード同期チタンサファイアレーザー； Q-sw cw Nd:YLF，Q-スイッチ cw Nd:YLF レーザー； Q-sw pulse Nd:YAG，Q-スイッチパルス Nd:YAG レーザー； fs-RGA，フェムト秒再生増幅器； ps-RGA，ピコ秒再生増幅器； OPA，パラメトリック増幅器； SHG，第二高調波発生； THG，第三高調波発生； FHG，第四高調波発生； SFG，和周波発生； DFG，差周波発生

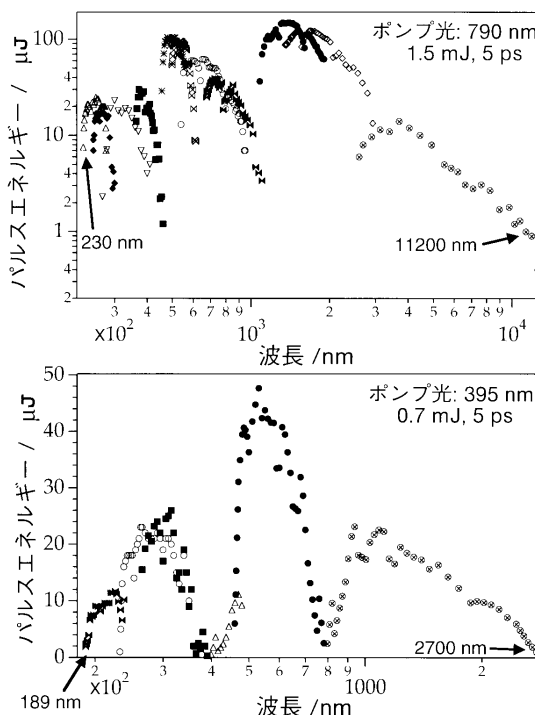
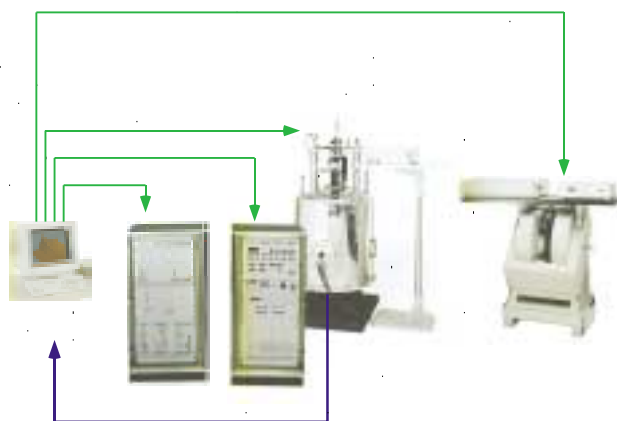


図2 ピコ秒OPAの波長域
基本波励起（上）
二倍波励起（下）

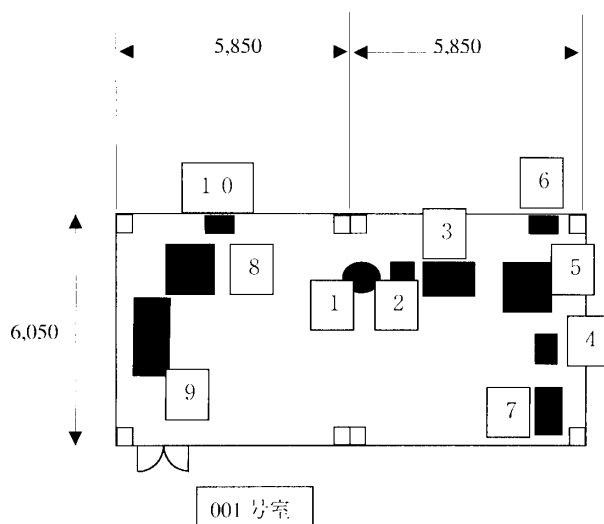
W-band (95 GHz) パルス電子スピン共鳴測定装置

High-Frequency / High-Field Pulsed ESR (Bruker E680)



分子物質開発センター内
極低温棟 001 号室平面図

Wバンド FT ESR 装置
Wバンド超伝導磁石
Wバンドマイクロ波ブリッジ
分光観測・制御ユニット
観測・制御用ワークステーション
パルスXバンド電磁石
電磁石電源・冷却水循環装置
液体窒素自動供給装置
Xバンド CW ESR 装置
CW・Xバンド電磁石
CW・Xバンド分光器
電磁石電源・冷却水循環装置



本研究所は、材料科学分野における最先端・学術研究のセンター的役割を担っている。これまで有機超伝導体や金属クラスターなど多くの高機能分子素子を生み出してきた。最近炭素クラスター・フラーレンの出現、超伝導体の種類の多様化など、分子素子材料の新しい時代を迎えている。また、生体関連分子・金属錯体のクラスターや生体無機分子の研究などが急速に進みつつある。新物質の出現・生体関連分子への注目と時を合わせるように、電子スピン共鳴測定装置に関する方法論にも新時代が到来している。つまりパルス・フーリエ変換測定法を駆使し2次元表示する二次元パルス ESR 法と高磁場・高周波数マイクロ波 ESR 法である。方法論の革命は、新分子素子や生体関連分子の電子物性測定研究に質的变化を与える。

平成 10 年度補正予算により W-band (95 GHz) パルス電子スピン共鳴測定装置が導入され、全国大学間共同利用機器として分子物質開発

センター内極低温棟 001 号室に設置された。ESR 設備全体の構成を以下に示す。

Xバンド CW ESR 装置一式 (Qバンド測定アタッチメント付)

1) 電磁石及び電源

電磁石直径： 10 インチ (25 センチ)
最大磁場： 1.48 T

最大サンプル径： 10 mm

Q 値： 6000 以上 (無負荷時)

b. Qバンド用円筒型標準キャビティ

共振モード： TE011

最大サンプル径： 2 mm 又は 3 mm

Q 値： 12000 以上 (無負荷時)

2) 分光計

a. Xバンドマイクロ波ブリッジ

発振周波数： 9.2 ~ 9.9 GHz

出力： 最大 400 mW (ガン発振器)

b. Qバンドマイクロ波ブリッジ

発振周波数： 34 GHz

出力： 最大 80 mW (ガン発振器)

4) 極低温温度可変装置

温度範囲： 1.9 K から室温

制御精度： ± 0.1 K

3) 共振器

a. Xバンド用矩形型標準キャビティ

共振モード： TE102

光透過率： 50%

Wバンド FT ESR 装置一式 (Xバンド FT ESR 装置, 並びにパルス ENDOR 装置付)

- | | |
|---------------------------------|---|
| 1) Wバンド 基本性能 | 電磁石直径: 10 インチ (25 センチ) |
| 測定領域: 93.6 ~ 94.4 GHz | 最大磁場: 1.48 T |
| 測定感度: 2×10^7 spins/GHz | |
| 2) Wバンド 共鳴器 | 5) FT 用共振器 |
| 共鳴器モード: TE011 | 形式: ダイエレクトリック |
| 共鳴器チューニング幅: 10 GHz | 最大試料管径: 5 mm |
| 共鳴器バンド幅: 40 MHz | 6) パルス ENDOR / 三重共鳴装置 |
| 共鳴器 Q 値: 2400 (室温, 無負荷時) | アンプ出力: 200 W 以上 |
| | 周波数範囲: 0.3 ~ 150 MHz |
| 3) Wバンド用超伝導磁石 | 7) 極低温温度可変装置 |
| 主磁石 (超伝導) 掃引範囲: 0 ~ 6 T | Xバンド FT: 4.2 K から室温 (精度 ± 0.1 K) |
| 補助磁石 (室温) 掃引範囲: 0 ~ 70 mT | Wバンド FT / CW: 4.2 K から室温 (精度 ± 0.1 K) |
| 4) Xバンド測定部 | |

極端紫外光実験設備

高速で運動する電子はシンクロトロン放射 (SR) と呼ばれる光を円軌道の接線方向に放出する。この SR は極端紫外から X 線にわたる領域での理想的な光であり, 分子科学の重要な研究手段の一つである。昭和 55 年度から観測システムの製作が, 昭和 56 年度から光源加速器本体の建設が始まり, 昭和 57 年度から極端紫外光実験施設が発足し, 58 年 11 月に試運転に成功した。59 年 9 月から所内外の利用実験を開始し数多くの研究が進行している。

この極端紫外光源 (ニックネーム, UVSOR) 本体は, 750 MeV の電子ストレージング (最高貯蔵電流, 500 mA) であり, その入射器は 15 MeV の線型加速器を前段加速器とする 600 MeV のシンクロトロンである。通常の偏向部では数 m までの, また超伝導ウィグラーでは約 2 m までの極端紫外光が利用できる。さらにアンジュレータからは波長可変の輝度の高い準単色光が得られる。研究の対象は気相及び凝縮相であり, 主として次の 6 つの分野に力点を置いている。

分光, 光電子分光, 光化学, 化学反応素過程, 固体・表面光化学, 光励起新物質合成
最近新しいテーマとして, レーザーと SR の組み合わせ分光実験にも取り組んでいる。

現在建設, 改造中のものも含めて 20 組の観測システム (ビームライン) が存在する。保有している分光器は, 1 m 瀬谷 - 波岡型分光器 2 台, 平面回折格子分光器 3 台, 3 m 直入射分光器 2 台, 2.2 m 定偏角斜入射分光器 1 台, 2 m グラスホッパー型斜入射分光器 1 台, 15 m 定偏角斜入射分光器 1 台, 直入射斜入射複合型分光器 1 台, 結晶分光器 2 台, 赤外干渉計 2 台及びマーチン・パブレット型遠赤外干渉計 1 台, ドラゴン型斜入射分光器 1 台, 多層膜分光器 1 台である。

ストレージングの電子ビームを用いて自由電子レーザーの研究も行い, 平成 4 年 3 月に紫色の光発振に成功後, 平成 8 年 9 月に円偏光オプティカルクライストロン利用による短波長発振を世界に先がけて行うなどの成果を挙げ, 現在, 研究を継続中である。



特別研究

特別研究は、研究系各研究部門及び研究施設で行われている研究を基盤とし、研究所内外の研究者が協力して行う独創的かつ開発的な研究であり、特に研究系および研究施設の枠を超えて、研究者が協力集中して行ってきたが、平成11年度を持って終了となった。

さらに、研究の発展に資するため、国際的規模での研究集会 - 国際研究集会岡崎コンファレンス（別項参照） - を年2～3回開催した。

研究所創設以来、5期に亘って実施した特別研究を下記にまとめた。

第一期特別研究

興味ある物性をもつ分子設計の研究（1975～1979）

分子との相互作用にもとづくエネルギー変換の研究（1975～1979）

第二期特別研究

分子機能の開発ならびに制御に関する研究（1980～1984）

分子過程によるエネルギー移動、エネルギー変換の研究（1980～1984）

物質進化の分子科学に関する研究（1982～1986）

第三期特別研究

分子場の設計・構築とそれによるエネルギーの化学的変換の研究（1985～1989）

分子素子の基礎研究（1985～1989）

物質進化と自己秩序形成の分子科学（1987～1991）

第四期特別研究

分子制御の化学と物質変換・エネルギー変換に関する研究（1990～1994）

分子素子研究の物質科学的展開（1990～1994）

金属錯体による連続反応場の構築（1993～1997）

第五期特別研究

機能性反応場の創成と量子ステアリング（1995～1999）

分子エレクトロニクス：分子性固体場における電子物性（1995～1999）

昨年度終了した第五期特別研究の内容と実施状況を次ページ以降に説明する。

機能性反応場の創成と量子ステアリング

本研究は、多様な分子環境を積極的に創出し、その反応場の機能を明らかにすると共に、反応素過程を支配する主要因子を見だし、これを制御することにより反応の道筋を選択・決定（ステアリング）することを目的としており、実施にあたっては特に次の2つの小テーマを設けた。

1. 多次元的分子系の構築と物質及びエネルギー変換，
2. 量子制御による新しい反応経路の開拓。

「レーザー光による原子・分子の並進運動制御とその反応制御への応用」の研究では、準安定ヘリウム原子のレーザー冷却・トラップの研究が進行し、フェルミオンであるヘリウム3原子同士の極低温衝突イオン化速度がボゾンであるヘリウム4原子同士のそれよりも約3倍大きいことをこれまでの実験で見出している。今回、この断面積の大小関係がクリプトン原子やキセノン原子の場合とは逆の関係になっていることの原因を詳しい理論解析によって明らかにした。超流動液体ヘリウム中の原子・イオンのレーザー分光研究では、前年度に観測した液体ヘリウム中のイッテルビウム原子イオンのスペクトルに見られた分裂がイオンを取り囲むヘリウムバブルの四重極振動による動的ヤン・テラー効果に起因するものであることを理論解析によって明らかにした。一方、実験においては、液体ヘリウム3中のマグネシウム原子やカルシウム原子のスペクトルを観測し、液体ヘリウム4中のスペクトルとは大きく異なることを見出すと同時に、これが両液体ヘリウムの量子統計性の違いによるものであることを突きとめた。

「時間分解分光による凝縮相分子ダイナミクスの解明」の研究では、電子状態、振動状態に対する時間分解分光を駆使して、フェムト秒～ピコ秒領域の凝縮相光化学ダイナミクスを研究した。第1に、光パラメトリック増幅(OPA)を用いて500 nm～750 nmの範囲で波長可変なサブ10 fsの光パルスを発生する装置を製作した。さらにこの極短パルスを用いた時間分解吸収測定システムを製作し、光励起直後の電子励起状態分子の振動コヒーレンス(核波束運動)の観測を行った。第2にフェムト秒時間分解蛍光分光を用いて、溶液中で多原子分子を S_n 状態へと光励起した後に起こる緩和過程について研究した。テトラセン分子の S_n 蛍光と S_1 蛍光の両方を時間分解観測することに成功し、その強度変化および偏光異方性の測定から、 $S_n \rightarrow S_1$ 電子緩和、電子緩和直後のIVR過程、振動冷却、および回転緩和、など一連の緩和ダイナミクスを明らかにした。さらにアントラリン分子の分子内プロトン移動反応を研究し、プロトン移動に対応すると考えられる蛍光ダイナミクスを観測した。第3にピコ秒時間分解ラマン分光により、アゾベンゼンの光異性化反応を研究した。 S_1 状態のNN伸縮振動数を決定し S_1 状態でNN結合が二重結合性を保っていることを明らかにするとともに、アンチストークスラマン測定によって振動緩和過程を明らかにした。

「化学反応素過程の可視化」の研究：80年代より超短パルス pump-probe 法によって化学反応の実時間観測が試みられてきたが、未知の中性励起状態への励起を probe に用いる従来の方法には困難が多い。本研究では、励起状態の波束を陽イオン状態に投影し、光電子スペクトルの変化から化学反応を追跡する、フェムト秒時間分解光電子画像観測を初めて実現した。陽イオン状態は、分光や量子化学計算によりポテンシャル曲面が精確に求められるため、波束を射影するのに最も適している。本方法を、無輻射遷移理論の中間ケースであるピラジン分子に適用した。ピラジンは光励起により二重蛍光減衰するが、これは高速の電子位相緩和と遅い分布数減衰による。多くの研究者がこの問題を研究したが、蛍光は励起分子の一重項性のみを反映し、位相緩和によって生成する三重項状態は実時間観測が行われていなかった。本研究では、光励起直後に現れる、 S_1 状態からの高速の光電子が100 psの寿命で消失し、三重項状態からの低エネルギー光電子が対応

して成長する様子が初めて画像化された。また、交差分子線画像観測法による、NO-Ar回転非弾性散乱の研究では、CCSD(T)レベルのポテンシャル曲面上での散乱計算と、実測の状態選別微分散乱断面積の詳細な比較を行い、量子力学的干渉効果を詳細に評価した。

「スピン副準位による状態の選択」の研究では、高分解能レーザーとラジオ波（マイクロ波）の二重共鳴によるラマンビート検出磁気共鳴分光を進めた。電子基底状態と電子励起状態の2つのスピン準位を高分解能CWレーザーとラジオ波でつなぐ。それぞれの遷移が許容で、レーザー光とラジオ波を用いて共鳴励起すると、入射レーザー周波数とスピン準位間のわずかなエネルギー差に対応する周波数だけずれた散乱光が生ずる。この周波数の差は光信号の“うなり（ビート）”として観測され、これを検出しながらラジオ波周波数を走査すれば磁気共鳴分光ができる。これをレーザーラマンヘテロダイン検出磁気共鳴分光と呼び、この方法の特徴は光で印を付けたスピンだけの磁気共鳴ができるということである。Pr³⁺/LaF₃系のPr³⁺のNQR測定と、Pr³⁺色中心を囲むLaのNQR測定を行った。

「量子力学的Fokker-Planck方程式による反応場コントロール」の研究では、トロポロン中のプロトン移動異性化反応をターゲットとして、溶液中分子のトンネル過程について研究を行った。このような問題は、散逸系の統計力学で古くから注目されている問題であるのだが、数値的にも未だに解けていない難問である。このような問題を解く手段として、量子効果を十分考慮する事が出来る、低温補正付のガウス・マルコフ量子フォッカープランク方程式をあらたに導出し、そのプログラミングを行った。この方法の利点は、もちろん、これまで不可能であった計算が可能になった事であるが、それ以外にも、古典的な結果と量子的な結果を比較出来る事がある。この方程式を数値的に解く事により、様々な温度や粘性下での化学反応率やラマンスペクトルを計算した。化学反応率は、量子的な場合はトンネル過程により増大する事、また、量子準位に対応した振動が観測される事等が見出された。ラマンスペクトルに対しては、ポテンシャルの共鳴振動に対応したピークが、量子的な場合と古典的な場合で大きく異なり、また、量子的な場合は、低い周波数にトンネル過程に対応する鋭いピークが現れる事が観測された。

分子エレクトロニクス：分子固体場における電子物性

究極の機能単位である分子を用いて新しい電子機能を発現する分子の集合体を構築するのが分子エレクトロニクスの研究であるが、この特別研究ではもっと基礎的な立場から、新しい分子の開発とその分子配列から生ずる集合体としての機能と物性に関する基礎研究を行った。電気伝導性、磁性、誘電性、光機能性など主に電子物性の立場から興味ある分子性固体の研究を行った。

「有機超伝導体の研究」では昨年度、初めての有機反強磁性金属κ-(BETS)₂FeBr₄を見出したが、この系は更に低温で超伝導転移を示す。比熱の測定より、超伝導転移以下の温度では反強磁性秩序と超伝導が共存していることが示唆され、有機磁性伝導体開発の究極目標の一つであった「磁性有機超伝導体」が初めて実現した。また、常圧でπ金属電子とアニオンの局在磁気モーメント(Fe³⁺)が結合しπ-d複合反強磁性絶縁相をとるλ-(BETS)₂FeCl₄では加圧によりπ-d結合が弱まり、温度低下と共に、反強磁性金属、超伝導相が出現することを見出した。他にも新超伝導体を発見した。

「分子性導体における新電子相の探索」では分子性導体の電子状態を、ESRおよびNMR測定といった微視的な観点から調べることを目的とした。TTF系伝導体の電荷局在状態に着目し、(EDT-TTF)₂AuBr₂にSDW内部構造があることを見いだした。TTF系以外においても、遍歴-局在電子複合スピン系(CPDT-STF)-TCNQ、伝導性金属錯体Pd(dmit)₂系、新規2鎖一次元系(BDTFP)₂Xの研究

では、注目すべき結果が得られた。

「低次元強相関系の物性理論」では、擬 1 次元有機導体(TMTCF)₂X の次元クロスオーバーにともなう電子状態の変化を摂動論的繰り込み群、 $(1 + \varepsilon)$ 次元、乱雑位相近似、密度行列繰り込み群などで総合的に調べた。(DCNQI)₂Ag_{1-x}Cu_xに対して、フィリング、乱雑さ、次元性の変化によるモット絶縁体、アンダーソン局在、フェルミ液体の競合を調べた。分子性物質の電荷秩序パターンに依存する、電荷とスピンの励起スペクトルを計算した。ハロゲン架橋複核金属錯体の電荷秩序と格子秩序パターンが配位子、ハロゲン、対イオンに依存する起原を、モデル計算を基に考察した。

「 π - d 電子系の研究」ではNiPc(AsF₆)_{0.5}の金属絶縁体転移温度が圧力と共に上昇することを電気抵抗の実験により証明した。またCoPc(AsF₆)_{0.5}における不対電子がCo₃d₂²軌道上にあることを混晶のESRにより確定した。また混晶にのみ見出されるラマンバンドを発見し、それが共鳴効果によること証明した。その他 π 電子性の分子導体DMTSA, BEDT-ATD, BDT-TTP, BEDO-TTF, BEDT-TTF, DMTCNQの電荷移動塩についてバンド構造、金属絶縁体転移、電荷分離状態について研究した。とくにBEDO-TTF塩ではプラズモンを正反射法で直接観測することに成功した。

「新規なドナー・アクセプター分子の合成研究」では1,3-ジチオール, チアジアゾール, ピラジンなどのヘテロ環を有する新規なドナーおよびアクセプター分子を合成し、これらを成分とする高伝導性の電荷移動錯体およびイオンラジカル塩を開発した。また、ヘテロ原子接触や水素結合を利用して特異な超分子構造を構築した。さらに、ヘテロ環の性質によりHOMO, LUMO準位を制御し、低エネルギーギャップの分子電線を開発した。

「新規分子性強磁性体の開発研究」では、数種の新規有機ポリラジカルの合成に成功した。高スピンラジカル of 化学修飾により、その常磁性遷移金属錯体の磁気相転移の制御に成功したほか、加圧によっても磁気相転移を制御できることを示した。また、分子内および分子間反強磁性相互作用を利用して、有機ラジカル結晶中でスピン平行配列が誘起される新しい現象を観測した。

「レーザーと放射光を組み合わせた分子固体の電子状態研究」では、単波長のレーザーと波長連続の放射光という特徴ある2つの光源を組み合わせた2光子励起システムを構築し、真空紫外領域にあるパリテイ禁制のP型励起子の測定に成功した。また、レーザー光励起した半導体表面について放射光内殻光電子分光を行い、レーザー光励起中の内殻準位の変化を検出した。これは、従来の静的な固体電子論では説明できない現象であり、これを基に表面における非平衡電子状態のダイナミクスについての考察を行った。

「内殻電子をプローブとした分子固体中の励起子の研究」では、一価の場を感じた励起子と二価の場を感じた励起子の挙動の違いから、分子性励起子の性質を解明する事を目的に研究を行った。たとえば内殻吸収スペクトルに現れる内殻励起子は一価の場を感じた励起子であり、共鳴オージェ過程で一価イオンコアが脱励起した後の内殻励起は、二価の場を感じた励起子となる。このように内殻電子をプローブとして様々な分子固体の励起子について研究を行った。

第64回 岡崎コンファレンス

次世代の分子軌道法

(Molecular Orbital Theory for the New Millennium)

開催日 平成12年1月20日～22日

提案代表者 名古屋大学情報文化学部
東京大学大学院工学系研究科
京都大学大学院工学研究科

天能 精一郎
中野 晴之
波田 雅彦

招待外国人講演者

LINDH, Roland	(University of Lund, Sweden)
HARRISON, Robert J.	(Pacific Northwest National Laboratory, USA)
MUKHERJEE, Debashis	(Indian Association for the Cultivation of Science, India)
HEAD-GORDON, Martin	(University of California, Berkeley, USA)
NOGA, Jozef	(Slovak Academy of Sciences, Slovakia)
KOCH, Henrik	(University of Southern Denmark, Odense, Denmark)
JENSEN, Jan H.	(University of Iowa, USA)
LEE, Yoon S.	(KAIST, South Korea)
HESS, Bernd A.	(Univrsitaet Erlangen, Germany)

理論化学の大きな飛躍は常に新しい概念や方法論の発展と緊密にリンクしている。電子計算機の高速化に伴う斬新な方法論の出現により、分子軌道法に代表される理論化学は新しい次元を迎えたと言っても良い。分子軌道理論の分野では最近10年間、次のトピックスで特筆すべき理論の進歩が見られた。大規模分子を高速に計算するためのスケーラブルな分子軌道理論、密度行列を変分パラメータとする新しい分子軌道理論、励起状態や化学反応といった擬縮重条件下での高精度計算を達成する多参照多電子理論、実験誤差内の高い計算精度を可能にする完全基底関数の多電子理論、溶媒分子や不活性ペプチド鎖を精密なポテンシャルとして取り扱うための理論、相対論を取り入れた分子軌道理論。本岡崎コンファレンスは、新しい千年期を迎えるにあたり、そのような新しい方向性を作り出す事に貢献してきた先進の量子化学者を迎え、スケーリングと多参照理論を中心に、分子軌道理論の更なる方向性を議論した。

第 65 回 岡崎コンファレンス

ナノストラクチャー創製における放射光の果たす役割

(Advantages of utilization of SR in nano-structure creation)

開 催 日 平成 12 年 1 月 27 日 ~ 29 日

提案代表者 分子科学研究所

宇理須 恆 雄

分子科学研究所

黒 澤 宏

招待外国人講演者

BACHER, Walter (Forschungszentrum Karlsruhe, Germany)

BERMUDEZ, Victor M. (Naval Research Laboratory, USA)

GRAY, Struan M. (Lund University, Sweden)

JO, Sam K. (Kyung Won University, Korea)

SCHWENTNER, Nikolaus (Freie Universitaet, Germany)

URQUART, Stephen G. (University of Saskatoon, Canada)

WEAVER, John H. (University of Illinois at Urbana-Campaign, USA)

量子効果を利用した新機能性発現デバイスとして注目を集めているナノストラクチャーであるが、サイズ並びに配向などを精密に制御する技術の開発が遅れており、必ずしもナノストラクチャー本来の性能を発揮できるにいたっていないのが現状である。理想的なナノストラクチャー創製には表面反応の分子レベルでの観測と制御が不可欠であり、そのためには放射光科学といった従来にはない新しい科学にもとづく技術の開発が重要となる。本コンファレンスでは、分子レベルで構造および、配向を制御したナノストラクチャー創製に深い関心を持つ表面科学、固体物理、半導体材料・プロセスなどの異なる専門分野の研究者が集まり、表面における光励起反応、ナノストラクチャーの作成方法および評価方法などについて討論を行い、ナノストラクチャーの作成と評価におけるシンクロトロン放射光の果たす役割に重点を置き、今後の放射光利用の新しい視点を模索した。

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研究を積極的に推進している。そのために共同研究者宿泊施設を用意し、運営協議員会で採択されたテーマには、旅費及び校費の一部を支給する。次の7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。)

- 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。
- 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)
- 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。
- 施 設 利 用 : 研究施設に設置された機器の個別的利用。
- UVSOR 課題研究 : 数名の研究者又は複数の研究グループによる開発的な研究で、1年あるいはそれ以上にわたるもの。
- 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。

平成11年度

課 題 研 究

課 題 名	提案代表者名
化学反応に対する溶媒効果の分子論	平田 文男(分子研)

協 力 研 究

「Protein Gのβ-シート構造に関する研究」を始め115件

研 究 会

研 究 会 名	提案代表者
新世代光源を用いた励起分子ダイナミクス探索の新たな展開	上田 潔(東北大学科学計測研)
分子会合体の研究における分光光学の役割: その現状と将来	山田 耕一(工技院産業技術融合領域研)
若手分子科学研究者のための物理化学研究会	山内 薫(東大院理)
多体相互作用系へのアプローチ-ブレインストーミング-	相田美砂子(広大理)
分子及び小集団の超高速反応ダイナミクスに関する研究会	鈴木 俊法(分子研)
大気イオンクラスターの化学とその応用	長門 研吉(分子研)
遷移金属元素を含む超微粒子の化学と物理	近藤 保(豊田工大)
物理化学の現状と将来 II	吉原経太郎(北陸先端大学院大)
新規π電子系の設計と構築	御崎 洋二(分子研)
内殻電子励起状態とダイナミクス-現状と展望-	長岡 伸一(分子研)
高機能全固体レーザーと新しい応用	平等 拓範(分子研)
クラスター反応動力学若手ミニ研究会	鈴木 俊法(分子研)

施設利用

1. 機器利用

「波長可変レーザー蒸発法による超微粒子生成過程の研究」を始め49件

2. 計算機利用

「蛋白質立体構造の変化と運動」を始め167件

UVSOR 課題研究

研究課題	提案代表者
角度分解紫外光電子分光法による有機薄膜の電子状態研究	上野 信雄（千葉工大）

UVSOR 協力研究及び招へい協力研究

「SRによるナノ構造形成と評価のビームライン建設」を始め10件

UVSOR 施設利用

「遷移金属酸化物の真空紫外反射分光」を始め150件

日米科学技術協力事業

分子科学研究所は、1979年締結「エネルギー及びこれに関連する分野における研究開発のための協力に関する日本国政府とアメリカ合衆国政府との間の協定」及び翌年締結(1988年再締結)の「科学技術における研究開発のための協力に関する日本国政府とアメリカ合衆国政府との間の協定」に基づく研究分野のうち、エネルギー分野「光合成による太陽エネルギー転換」に係る事業計画の企画立案及び実施に関する連絡調整の担当機関となり、事業の推進にあたった。1995年2月に1979年に締結された協定の5年間単純延長が合意され、2000年1月末日をもって本事業を終了した。本事業推進にあたっては、広く国内関係研究者の意見を反映させるために、所長の下に所外から委員11人と所内委員2人から成る研究計画委員会を設置し、研究者の長期派遣、日米情報交換セミナー、グループ共同研究などの企画や応募された企画の審議を行ってきた。また日米の研究推進機関(文部省と全米科学財団)の間で研究実施、企画、評価のために、日米間でステアリングコミッティーを設置した。

これまでに実施した事業の概要は次のとおりである。

ステアリングコミッティー	1982.1 ~ 1998.3	8回開催
研究計画委員会及び幹事会	1979.6 ~ 1999.3	毎年1回
研究者派遣	1979 ~ 1998年度 中・長期派遣	119名
グループ共同研究		4組
日米情報交換セミナー	1981 ~ 98年度	全部で27回開催

1999年度には以下の2件を開催した。

- ・ Photoconversion and Photosynthesis: Past, Present, and Perspective 岡崎
- ・ 超分子光化学 ルイジアナ

99年11月には、20年の共同事業と今後の展望を議論する情報交換セミナー “ Photoconversion and Photosynthesis: Past, Present, and Perspective ” を岡崎コンファレンスセンターで開催した。このセミナーは、本事業の日本側のもう一つの対応機関である理化学研究所の協力を得て実現した。アメリカ合衆国から15人、我が国から16人の招待講演、90余件のポスター講演が行われ、今後の展望までを含めた総括的な意見交換の場となった。

日韓共同研究

分子科学研究所と韓国高等科学技術院(KAIST)の協力で、1984年以来、日韓合同シンポジウムと韓国研究者の分子科学研究所への受け入れの二事業が行われている。合同シンポジウムは1984年5月に分子科学研究所において第1回シンポジウムを行い以後2年毎に日韓交互で開催しており、1999年1月韓国のテジョン(Taejon)市で開いた第8回シンポジウムに引き続き、第9回シンポジウムを2001年1月分子科学研究所において開催する予定である。

なお、1991年度から毎年3名の韓国側研究者を4か月ずつ招聘しており、1999年度も3名の招聘を実施した。

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化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。特に有機固体化学では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、ひきつづいて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10名を含む34名が、日本からは80名が参加し、盛況の内に終了した。第7回は2001年広州において開催される予定である。

日本・チェコ共同研究

1995年度から新たに開始されたプログラムで、チェコ科学アカデミー物理化学研究所（ヘイロフスキー研究所）、同高分子科学研究所、プラハ工科大学、カレル大学などとの分子科学共同研究を促進させる事を目的としている。文部省科研費、海外学術研究の支援により、初年度は所長はじめ6人の研究者がプラハを訪問し、共同研究の推進等について討論を行った。また、チェコの若手研究者1人が約3か月間分子研において共同研究を行った。1996年度は、2人をプラハに派遣し、1月には4人の研究者が来所して共同研究を実施した。1997年度からは学振の2年間共同研究として、日本側は北川禎三が代表になり申請、受理された。1997年度は2人を派遣し、6人を受け入れた。1998年度は4人を派遣し、6人を受け入れた。1999年6月にプラハのアカデミーハウスで3日間のジョイントセミナーを実施し、所長をはじめ、所内から5人、所外から3人が参加した。これ以外に1999年の4～7月 2人を派遣し、1人を受け入れた。8月から中村宏樹が日本側代表となっている。

総合研究大学院大学は昭和63年10月1日に発足し、初代学長に長倉三郎岡崎国立共同研究機構長が就任した。更に平成2年1月廣田栄治教授が同大学副学長に就任した。その後、平成7年3月に長倉学長が任期満了により退官され、同年4月に廣田栄治同大学副学長が第二代学長に就任し、森脇和郎同大学名誉教授が副学長に就任した。分子科学研究所は、同大学院大学の基盤機関として、構造分子科学専攻及び機能分子科学専攻を受け持ち、平成11年度までに157名（外国人20名、編入者2名を含む）の学生を受け入れ、さらに平成12年4月には、8大学から8名の学生を新たに受け入れた。また平成3年3月に6名の第一回博士課程後期修了者を送り出してから、これまでに100名の修了者を送り出した。

その専攻の概要は次の通りである。

構造分子科学専攻

詳細な構造解析から導かれる分子及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。従来の分光学的及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・分子レベルでその発現機構を明らかにし、さらに分子及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。

分子科学研究所は発足当初より大学院教育に協力して学生の研究指導を行う制度（次頁参照）を持ち、この制度にもとづいて特別共同利用研究員（平成12年度前期25名）を受け入れている。

分子科学研究所としては、この両制度の調和のとれた発展を図りつつ、研究所が持つ独自の大学院制度の確立をめざしている。

分子科学研究所は、大学共同利用機関として、広く分子科学に関する共同利用に供されるとともに、研究者の養成に関しては、国・公・私立大学の要請に応じて、「特別研究学生」を受け入れ、大学院における教育に協力を行ってきたが、近年における、研究所の研究活動への大学院学生の参画の重要性に鑑み、平成9年度からは当該大学院学生を「特別共同利用研究員」として受け入れ、併せて研究指導を行い大学院教育の協力を行うこととした。

特別共同利用研究員（平成3年度までは受託大学院学生、平成4年度から平成8年度までは特別研究学生）受入状況（年度別）

所 属	昭29~平2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
北海道大学	10										
室蘭工業大学	2										
東北大学	8	1			2				1	1	
山形大学									6		
筑波大学									1		1
群馬大学					1						
埼玉大学	2										
千葉大学								1	1	1	
東京大学	23	2	2	1			1	1	1		
東京工業大学	15				2	3	4				
お茶の水女子大学	4		1	1							
横浜国立大学	1										
金沢大学	3						3	3			1
新潟大学	2		1	1							
福井大学	2					1	1		1	1	2
信州大学			1	1				1			
岐阜大学				1	1						
名古屋大学	45	5	3	2	2	1	3	3	3	1	2
名古屋工業大学	6								1	4	3
豊橋技術科学大学	25	3	2								
三重大学							2	2	2	1	
京都大学	8	2		7	5	4	4	2	2	1	2
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	19	2	2	1							1
神戸大学								1	1	1	1
奈良教育大学				1							
奈良女子大学	1				1	1	1				
岡山大学					7	2	1	1			
広島大学	15	1	1	1	7	6	1			1	1
山口大学	1										
愛媛大学	2	1									
高知大学		1	1								
九州大学	23	5	4	1			1	2	1	1	2
佐賀大学	1		2	4	5	1					
熊本大学	4			2							
宮崎大学										2	4
琉球大学									1		
東京都立大学	17										
名古屋市立大学											4
大阪市立大学	3									1	
学習院大学								1			
北里大学							1	1			
慶應義塾大学	4							1	1		
上智大学	1										
東京理科大学									1	1	
東海大学	1										
東邦大学							1				1
星薬科大学	1										
早稲田大学	1						1	5	2		
名城大学								2	2		
計	256	22	20	27	30	19	25	27	28	17	25

海外からの研究者

1. 評議員

KIEFER, Wolfgang	ドイツ	ビュルツブルク大学教授	11.12.11-11.12.15
ZARE, Richard N.	アメリカ	スタンフォード大学教授	11.12.16-11.12.26

2. 外国人客員研究部門

BU, Xian-He	中国	南開大学教授	10.12.15-11.6.14
GAO, Yongli	アメリカ	ロチェスター大学準教授	11.2.1-11.7.31
ULANSKI, Jacek Pawel	ポーランド	ウジツ技術大学教授	11.3.1-11.8.31
MARKOSYAN, Ashot Surenovich	ロシア	モスクワ州立大学上級研究員	11.4.26-12.3.31
OSHEROV, Vladimir Iosifovich	ロシア	ロシア科学アカデミー教授	11.7.1-11.12.14
SEIJO, Luis	スペイン	マドリッド自治大学助教授	11.8.1-11.12.20
PAVLOV, Lubomir Iordanov	ブルガリア	ブルガリア科学アカデミー電子研究所教授	11.9.1-12.3.31
WHITHAM, Christopher James	イギリス	オックスフォード大学講師	11.12.15-12.6.14
AHN, Kwang Hyun	韓国	慶熙大学準教授	12.2.1-12.7.31

3. 文部省招へい外国人研究員

SIMONYAN, Mkhitar	アルメニア	アルメニア科学アカデミー物理学研究所主任研究員	10.6.11-11.6.10
SUTCLIFFE, Braian Terence	イギリス	ヨーク大学講師	11.3.28-11.6.27
CHUNG, Gysung	韓国	コンヤン国立大学副教授	11.6.18-11.8.17 11.12.28-12.2.27
KIM, Younkyoo	韓国	ハンクック外国語大学準教授	11.6.21-12.2.28
CHOI, Jong-Ho	韓国	韓国大学助教授	11.6.28-11.8.27 11.12.20-12.2.19
LEE, Sang Yeon	韓国	クンボーク大学助教授	11.7.1-11.8.31 11.12.27-12.2.26
MÜLLER-DETHLEFS, Klaus	イギリス	ヨーク大学主幹教授	11.7.12-11.10.11

4. 日本学術振興会招へい外国人研究者

YU, Shu-Yan	中国	中国科学院福建物質構造研究所博士研究員	9.9.1-11.8.31
ROACH, Mark Patrick	カナダ	南カリフォルニア大学大学院生	9.11.2-11.11.1
MAITI, Nakul Chandra	インド	タータ基礎科学研究所大学院生	10.1.31-12.1.30
BAILLEUX, Stephane	フランス	リール科学技術大学博士研究員	10.4.1-11.8.20
NARYMBETOV, Bakhyt Z.	ウズベキスタン	ロシア科学アカデミー固体物理学研究所研究員	10.4.1-12.3.31
MORÉ, Sam D.	ドイツ	マックスプランク研究所フリッツハーバー研究所研究助手	10.10.14-12.10.13
BIRADHA, Kumar	インド	セイント・メリーズ大学博士研究員	10.10.17-11.8.31
ARZHANTSEV, Sergei Y.	ロシア	ロシア産学共同プロジェクト株式会社研究員	10.11.27-12.11.26
HU, Ying	中国	復旦大学助手	10.12.16-12.12.15
BELOV, Sergei	ロシア	ロシア科学アカデミー応用物理学研究所主任研究員	11.3.15-11.5.13
MIL'NIKOV, Gennady V.	ロシア	ロシア科学アカデミー構造マクロ動力学研究所研究員	11.3.16-11.12.31
PAVEL, Nicolaie Ion	ルーマニア	原子物理研究所研究員	11.3.18-13.3.17

FREED, Karl Frederick	アメリカ	シカゴ大学教授	11.10.25-11.11.12
PRONIEWICZ, Leonard Marian	ポーランド	ジャゲロニアン大学教授	11.12. 1-12. 1.29
BOGEY, Marcel	フランス	リール科学技術大学教授	12. 2. 1-12. 3.31
BIAN, Wensheng	中国	山東大学助教授	12. 2. 1-14. 1.31

5 . 岡崎コンファレンス

HARRISON, Robert J.	アメリカ	バシフィックノースウェスト国立研究所主任研究員	12. 1.20-12. 1.22
HEAD-GORDON, Martin	アメリカ	カリフォルニア大学パークレー校助教授	12. 1.20-12. 1.22
MUKHERJEE, Debashis	インド	インド科学開発協会教授	12. 1.20-12. 1.22
KOCH, Henrik	デンマーク	南デンマーク大学助教授	12. 1.20-12. 1.22
JENSEN, Jan H.	アメリカ	アイオワ大学助手	12. 1.20-12. 1.22
LEE, Yeon Sang	韓国	KAIST 教授	12. 1.20-12. 1.22
HESS, B. A.	ドイツ	エルランゲン大学教授	12. 1.20-12. 1.22
BACHER, Walter	ドイツ	カールスルーエ自然科学機構助教授	12. 1.27-12. 1.29
SCHWENTNER, Nikolaus	ドイツ	フライエ大学教授	12. 1.27-12. 1.29
WEAVER, John H.	アメリカ	イリノイ大学教授	12. 1.27-12. 1.29
BERMUDEZ, Victor M.	アメリカ	ナバル研究所主任研究員	12. 1.27-12. 1.29
GRAY, Struan M.	スウェーデン	ルンド大学助教授	12. 1.27-12. 1.29
URQUHART, Stephen G.	カナダ	サスカトゥーン大学助教授	12. 1.27-12. 1.29
JO, Sam K.	韓国	キョンワン大学助教授	12. 1.27-12. 1.29

6 . 国際シンポジウム

CHESHNOVSKY, Ori	イスラエル	テルアビブ大学教授	11.12.20-11.12.22
XANTHEAS, Sotiris S.	アメリカ	バシフィックノースウェスト国立研究所教授	11.12.20-11.12.22
KOCHANSKI, Elis	フランス	ルイパスツール大学教授	11.12.20-11.12.22
DUNCAN, Mike A.	アメリカ	ジョージア大学教授	11.12.20-11.12.22
WEINKAUF, Rainer	ドイツ	デュッセルドルフ大学教授	11.12.20-11.12.22
NIEDNER-SCHATTEBURG, Gereon	ドイツ	ミュンヘン工科大学主任研究員	11.12.20-11.12.22
MÜLLER-DETHLEFS, Klaus	イギリス	ヨーク大学教授	11.12.20-11.12.22

7 . 日米科学技術協力事業

SCHANZE, Kirk S.	アメリカ	フロリダ大学教授	11.11.15-11.11.17
HONG, Bo	アメリカ	カリフォルニア大学アーバイン校教授	11.11.15-11.11.17
GUST, Devens	アメリカ	アリゾナ州立大学教授	11.11.15-11.11.17
HOLTEN, Dewey	アメリカ	ワシントン大学教授	11.11.15-11.11.17
KELLEY, Anne Myers	アメリカ	カンザス州立大学教授	11.11.15-11.11.17
BARBARA, Paul F.	アメリカ	テキサス大学オースチン校教授	11.11.15-11.11.17
MEYER, Gerald J.	アメリカ	ジョンホプキンス大学教授	11.11.15-11.11.17
HOFFMAN, Michael R.	アメリカ	カリフォルニア工業技術研究所教授	11.11.15-11.11.17
KIRMAIER, Christine	アメリカ	ワシントン大学主任研究員	11.11.15-11.11.17
HUPP, Joseph T.	アメリカ	ノースウエスタン大学教授	11.11.15-11.11.17
BOHNERT, Hans J.	アメリカ	アリゾナ大学教授	11.11.15-11.11.17

ALLEN, Randy D.	アメリカ	テキサス工科大学教授	11. 11.15-11.11.17
BLANKENSHIP, Robert E.	アメリカ	アリゾナ州立大学教授	11. 11.15-11.11.17
VERMAAS, Wim F. J.	アメリカ	生物学研究所教授	11. 11.15-11.11.17
SHEEN, Jen	アメリカ	マサチューセッツ総合ホスピタル教授	11. 11.15-11.11.17
OKAMURA, Melvin	アメリカ	カリフォルニア大学サンディエゴ校教授	11. 11.15-11.11.17

8 . 科学研究費

HIRATA, Satoshi	アメリカ	フロリダ大学研究員	12. 1.17-12. 1.23
MIL'NIKOV, Gennadi V.	ロシア	ロシア科学アカデミー構造マクロ動力学研究所研究員	12. 1.31-12. 3.31

9 . 受託研究

SCHERAGA, Harold A.	アメリカ	コーネル大学名誉教授	11. 6.12-11. 6.13
MADDEN, Paul	アメリカ	オックスフォード大学教授	11. 7.17-11. 7.26
VOTH, Gregory A.	アメリカ	ユタ大学教授	11. 7.21-11. 7.26
ROSSKY, Peter J.	アメリカ	テキサス大学教授	11. 7.21-11. 7.30
HAYMET, A.	アメリカ	ヒューストン大学教授	11. 7.22-11. 7.26
BLUM, Lesser	プエルトリコ	プエルトリコ大学教授	11. 7.23-11. 7.26
PATEY, Grenfell N.	カナダ	ブリティッシュコロンビア大学教授	11. 7.24-11. 7.30
GARCIA, Angel E.	アメリカ	ロスアラモス国立研究所教授	11.10. 9-11.10.17
IRBACK, Anders	スウェーデン	ルンド大学助教授	11.10. 9-11.10.18
LINDAU, Ingolf	スウェーデン	ルンド大学教授	11.11. 5-11.11.10
JAN, Hrusak	チェコ	チェコヘイロフスキー研究所研究員	11.12.12-11.12.22
LUDWIK, Adamowicz	アメリカ	アリゾナ大学教授	11.12.16-11.12.22
KIM, Kwang S.	韓国	プハン大学教授	11.12.19-11.12.22
BAECK, Kyoung-Koo	韓国	カンルン国立大学準教授	11.12.19-11.12.24
BAKER, David	アメリカ	ワシントン大学助教授	12. 1.18-12. 1.19
JOZEF, Noga	スロバキア	スロバキア科学アカデミー無機研究所所長	12. 1.18-12. 1.26
KOVALENKO, Andriy	アメリカ	ユタ大学リサーチアソシエイト	12. 3.29-12. 3.31

10 . 招へい協力研究員

de LANGE, Cornelias A.	オランダ	アムステルダム大学教授	11. 6. 3-11. 6. 5
MARTIN, Baumgarten	ドイツ	メインズ大学教授	11. 6. 5-11. 6. 6
De FANIS, Alberto	イギリス	サザンプトン大学博士研究員	11. 7.30-11. 8. 2
BECKER, Uwe	ドイツ	マックスプランク研究所フリッツハバー研究所教授	11. 7.30-11. 8. 2
MILLER, William H.	アメリカ	カリフォルニア大学バークレー校教授	11. 7.30-11. 8. 2
LERNEE-CAILLEAU, M. H.	フランス	レンヌ大学教授	11. 8.17-11. 8.19
CAILLEAU, Herve	フランス	レンヌ大学教授	11. 8.17-11. 8.19
DAWSON, John H.	アメリカ	南カロライナ大学教授	11. 8.26-11. 8.28
LUSCHICK, Alexandre	エストニア	エストニアタルツ大学教授	11. 8.28-11. 9. 3
SIEGMAN, Anthony E.	アメリカ	スタンフォード大学名誉教授	11. 9. 4-11. 9. 7
SEIDEMAN, Tamar	カナダ	ステイシー分子科学研究所主任研究員	11. 9.18-11. 9.21
DONG, Sai	中国	Heifei 教授	11. 9.27-11. 9.29

KRYSZEWSKI, Marian	ポーランド	ポーランド科学アカデミー教授	11. 10.18-11.10.21
KRYSZEWSKI, Stanislaw	ポーランド	グダニスク大学教授	11. 10.18-11.10.21
FEJER, Martin M.	アメリカ	スタンフォード大学教授	11. 10.27-11.11. 1
TSE, John S.	カナダ	ステーシー分子科学研究所上級研究員	11. 10.28-11.10.30
SIMON, Marc	フランス	フランス放射光利用研究所研究員	11. 11.29-11.11.30
AGREN, Hans	スウェーデン	ストックホルム工科大学教授	11. 12. 6-11. 12. 8
SALAHUB, Denis R.	カナダ	モントリオール大学教授	11. 12.19-11.12.23
SCHMITT, Michael	ドイツ	ヘインリッヒハイネ大学講師	11. 12.19-11.12.23
OKUMURA, Michio	アメリカ	カリフォルニア工科大学教授	11. 12.19-11.12.23
HACKETT, Peter A.	カナダ	カナダ国立研究所教授	11. 12.19-11.12.23
KIM, Seong Keun	韓国	ソウル国立大学教授	11. 12.19-11.12.23
LISY, James M.	アメリカ	イリノイ大学教授	11. 12.19-11.12.23
MUCKERMAN, Jim	アメリカ	ブルックヘブン国立研究所教授	11. 12.26-11.12.28
WUDL, Fred	アメリカ	カリフォルニア大学教授	12. 1. 8-12. 1.10
BOWEN, Kit H.	アメリカ	ジョンホプキンス大学教授	12. 1.12-12. 1.14
HANDY, Nicholas C.	イギリス	ケンブリッジ大学教授	12. 1.14-12. 1.20
GABOR, Besenyeyi	ハンガリー	ハンガリー科学アカデミー研究員	12. 3.13-12. 3.14
TEEHAN, Dave	イギリス	ダレスベリー研究所博士研究員	12. 3.19-12. 3.24
HAMILTON, Bruce	イギリス	マンチェスター大学教授	12. 3.19-12. 3.24
LINERT, Wolfgang	オーストリア	ウィーン工科大学教授	12. 3.21-12. 3.22
HORACEK, Jiri	チェコ	カレル大学教授	12. 3.22-12. 4. 3
BARANOV, N. V.	ロシア	ウラル州立大学教授	12. 3.23-12. 4. 5
BRUTSCHY, Bernhard	ドイツ	フランクフルト工科大学教授	12. 3.25-12. 4. 3
OSHEROV, Vladimir Iosifovich	ロシア	ロシア科学アカデミー教授	12. 3.25-12. 4. 5

11. 特別協力研究員

CHEN, Fei Wu	中国	11. 4. 1-11. 4.14 12. 2.15-12. 3.31
ALI, Md. Meser	バングラデシュ	11. 4. 1-11. 8.30
PUSPITA, Waheeda Jahan	バングラデシュ	11. 4. 1-12. 3.31
GHALSASI, Prasanna S.	インド	11. 4. 1-12. 3.31
HEIDENHAIN, Sophie Barbara	ドイツ	11. 7. 1-12. 3.31
TAMASSIA, Filippo	イタリア	11. 8. 1-11. 9.15
WHITHAM, Christopher J.	イギリス	11. 9. 1-11. 12.14
OUYANG, Jianyong	中国	11.10. 1-12. 3.31
YU, Shu-Yan	中国	11.11. 1-12. 1.31
WANG, Li	中国	11. 4. 1-11.10.19
SETHIA, Ashok	インド	11. 4. 1-12. 3.31
MAKSIMUK, Mikhail	ロシア	11. 4. 1-12. 3.31
GHOSH, Tapas Kumar	インド	11. 4. 1-12. 3.31
ZAMAN, Md. Badruz	バングラデシュ	11. 4. 1-12. 3.31
ZHANG, Tieqiao	中国	11. 8. 1-12. 3.31
MAITI, Nakul Chandra	インド	12. 1.31-12. 6.30

12 . 海外からの訪問者

WHITAKER, Benjamin	イギリス	リーズ大学教授	11. 4. 7-11. 4. 12
DROZDOVA, Olga	ロシア	ロシア科学アカデミー研究員	11. 5.17-11. 5. 21 11. 6.28-11. 7. 2 11. 9.15-11. 9. 18 11.12. 2-11. 12. 8 12. 1.12-12. 1. 17
GRAY, Stephen k.	アメリカ	アルゴンヌ国立研究所研究員	11. 5.18-11. 5. 26
SAXENA, Avadh B.	アメリカ	ロスアラモス国立研究所研究員	11. 5.22-11. 5. 23
BECKER, Uwe	ドイツ	マックスプランク研究所フリッツハバー研究所教授	11. 5.25-11. 5. 30
LASZLO, I. Simandi	ハンガリー	ハンガリー科学アカデミー教授	11. 5.31-11. 6. 1
LIN, Ming Chang	アメリカ	エモリー大学教授	11. 6. 28
NELSON, Alistair David	イギリス	エディンバラ大学研究員	11. 7. 6-11. 8. 26
JAMES, Arthur	イギリス	シュリー大学研究員	11. 7. 6-11. 8. 26
HERMAN, Zdenek	チェコ	チェコ科学アカデミー ヘルロフスキー研究所主任研究員	11. 7. 21
van der ZANDE, Wim	オランダ	原子分子研究所教授	11. 7.29-11. 8. 4
ZIMMERMANN, Peter	ドイツ	ベルリン工科大学教授	11. 7.29-11. 8. 5
SCHWENTNER, Nikolaus	ドイツ	ベルリン自由大学教授	11. 7. 30
KWON, Han-Chul	韓国	韓国大学大学院生	11. 7.30-11. 8. 2
PARK, Jong-Ho	韓国	韓国大学大学院生	11. 7.30-11. 8. 2
KIM, Hee-Kyung	韓国	韓国大学大学院生	11. 7.30-11. 8. 2
KIM, Eun-Sook	韓国	韓国大学大学院生	11. 7.30-11. 8. 2
McCARROLL, Ronald	フランス	ピエールマリーキュリー大学教授	11. 7.30-11. 8. 2
LIU, Shilin	中国		11. 7.30-11. 8. 2
EHRESMANN, Arno	ドイツ	カイザースラウテルン大学博士研究員	11. 7.30-11. 8. 2
JAGUTZKI, Ottmar	ドイツ	フランクフルト大学博士研究員	11. 7.30-11. 8. 2
LABLANQUIE, Pascal	フランス	パリ南大学主任研究員	11. 7.30-11. 8. 2
DAVIS, Floyd	アメリカ	コーネル大学助教授	11. 7.30-11. 8. 2
LARSSON, Mats	スウェーデン	ストックホルム大学教授	11. 7.30-11. 8. 2
MANOLOPOULOS, David	イギリス	オックスフォード大学助教授	11. 7.30-11. 8. 2
HEINZMANN, Ulrich	ドイツ	ビーレフェルト大学教授	11. 7.30-11. 8. 2
ZHANG, John	アメリカ	ニューヨーク大学教授	11. 7.30-11. 8. 2
CHEREPKOV, Nikolay	ロシア	物質構造科学研究所教授	11. 7.30-11. 8. 2
MILLER, William	アメリカ	カリフォルニア大学バークレー校教授	11. 7.30-11. 8. 2
KUMAR, S. V. K.	インド	タタ基礎研究所助教授	11. 7.30-11. 8. 3
CODLING, Keith	イギリス	レディング大学教授	11. 7.30-11. 8. 3
WEST, John	イギリス	ダレスベリー研究所主幹	11. 7.30-11. 8. 3
LIU, Kopin	台湾	台湾分子科学研究所教授	11. 7.30-11. 8. 3
KUMAR, Vijay	インド	ナブラングブラ物理学研究所教授	11. 7.30-11. 8. 4
SCHMIDT-BOECKING, Horst	ドイツ	フランクフルト大学教授	11. 7.31-11. 8. 3
SIEBERT, Friedlich	ドイツ	フライブルグ大学教授	11. 8. 1
WARREN, Samantha	イギリス	マンチェスター工科大学博士研究員	11. 8. 7
BRONOLD, Franz Xaver	ドイツ	オットーフォンギュリック大学博士研究員	11. 8.29-11. 9. 1
TSENG, Pho-Kun	中国	放射光研究センター顧問	11. 9.12-11. 9. 13

AMMAL, Salai Cheettu	インド		11.10. 1-12. 3.31
HORACEK, Jiri	チェコ	チャールズ大学教授	11.10.29-11.11.16
NACHTGALL, Petr	チェコ	チェコヘイロフスキー研究所研究員	11.12.14-11.12.22
MUCKERMAN, Jim	アメリカ	ブルックヘブン国立研究所教授	11.12.26-11.12.28
GAN, Zhengtin	中国	ノースウエスト大学研究員	12. 1.20-12. 1.22
KYOUNG, K. Baeck	韓国	カンナン国立研究所教授	12. 1.20-12. 1.22
MUKAMEL, Shaul	アメリカ	ロチェスター大学教授	12. 3. 6-12. 3. 8
ROSENBERG, Richard	アメリカ	Advanced Photon Source 研究員	12. 3.14-12. 3.15
NESPUREK, Stanislav	チェコ	チェコ共和国科学アカデミー教授	12. 3.19-12. 3.31
RAYNER, David	カナダ	カナダ国立研究所研究員	12. 3.27

1. 定 員

(平成12年度)

区 分	所 長	教 授	助教授	助 手	小 計	技 官	計
所 長	1				1		1
理 論 研 究 系		3 (1)	3 (1)	7	13 (2)		13 (2)
分子構造研究系		2 (1)	2 (1)	6	10 (2)		10 (2)
電子構造研究系		2 (2)	2 (2)	6	10 (4)		10 (4)
分子集団研究系		2 (1)	2 (1)	6	10 (2)		10 (2)
相關領域研究系		2 (1)	2 (1)	5	9 (2)		9 (2)
極端紫外光科学研究系		3 (1)	4 (1)	5	12 (2)		12 (2)
研 究 施 設		1 (2)	11 (3)	13	25 (5)		25 (5)
技 術 系						41	41
合 計	1	15 (9)	26 (10)	48	90 (19)	41	131 (19)

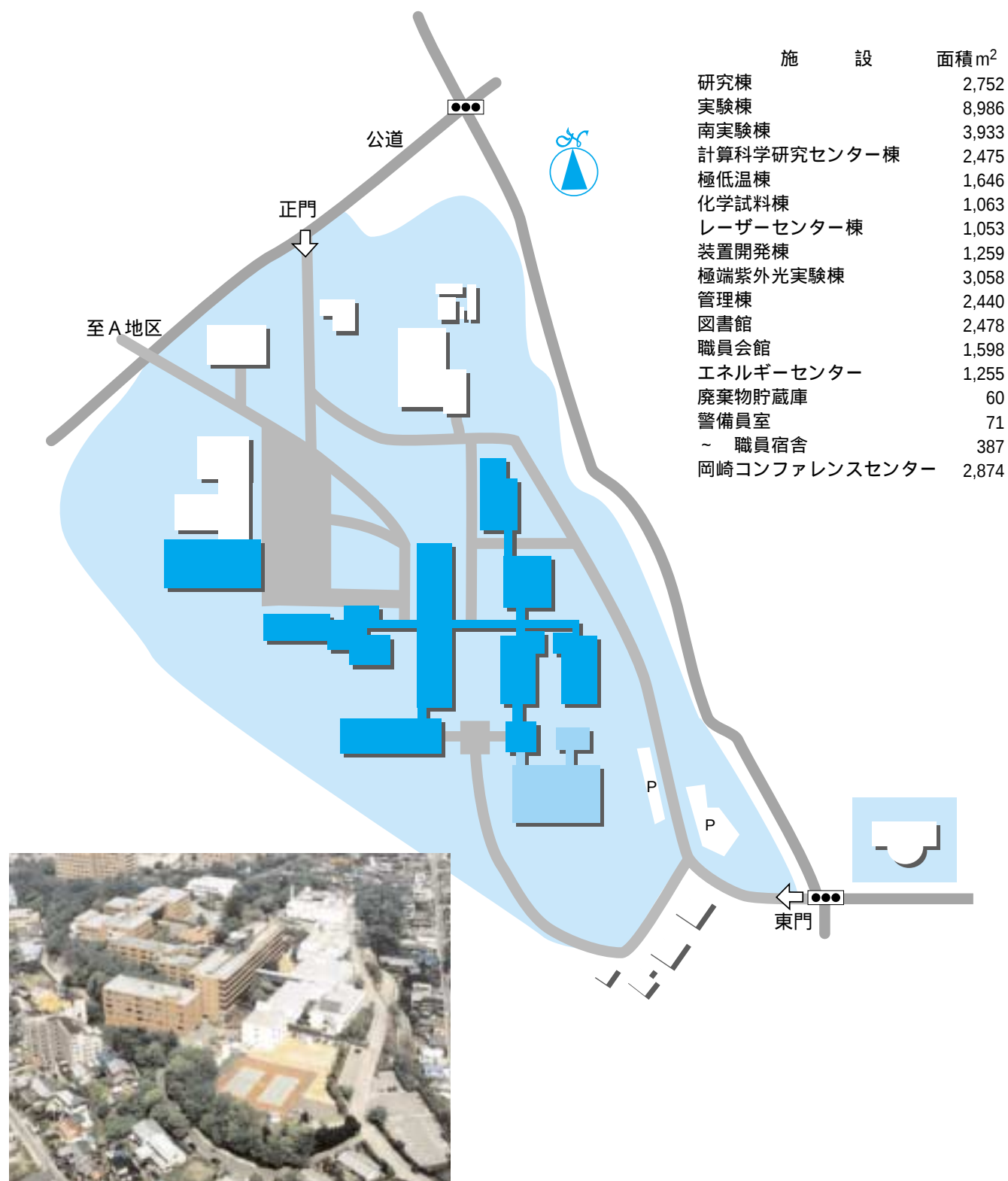
()内は客員数で，外数である。

2. 予 算

(平成11年度決算額)

区 分	計	人件費	物件費
分子科学研究所	3,413,149 千円	1,074,258 千円	2,338,891 千円

3. 配置図



岡山国立共同研究機構共通施設

情報図書館

図書館建物



情報図書館は、機構の共通施設として、3研究所の図書、雑誌等を収集・整理・保存し、機構の職員、共同利用研究者等の利用に供している。

主な機能

ライブラリーカードによる24時間利用。

情報検索サービス（DIALOG，NACSIS，STN等）。

図書館内部



岡山コンファレンスセンター

岡山コンファレンスセンター



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



岡崎コンファレンスセンター
大会議室

共同利用研究者宿泊施設

共同利用研究者等の宿泊に供するため、3研究所の共通施設として宿泊施設「三島ロッジ」〔個室51，特別個室13，夫婦室10，家族室20〕及び「山手ロッジ」〔個室11，特別個室4，家族室2〕があり，共同利用研究者をはじめ外国人研究員等に利用されている。



三島ロッジ



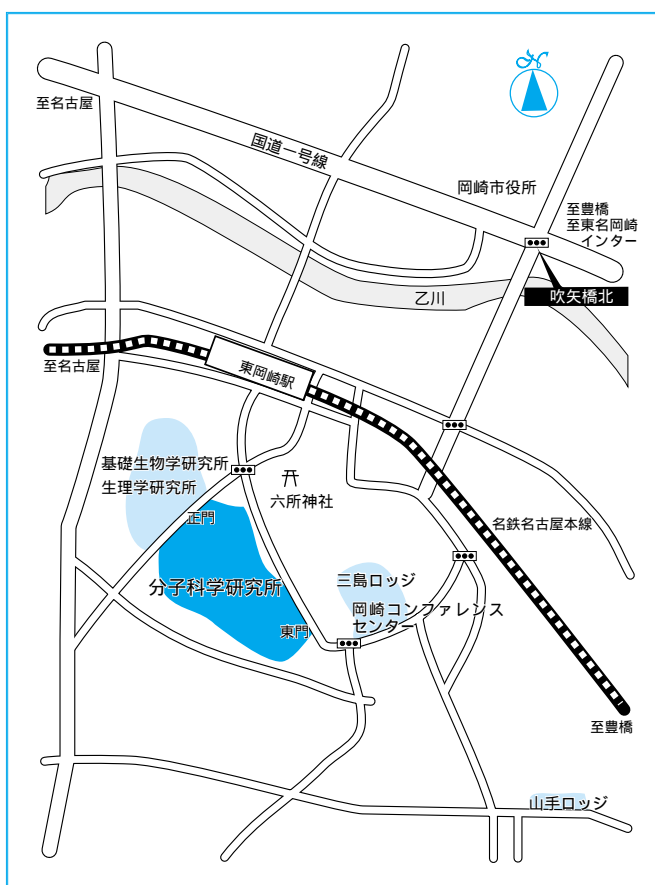
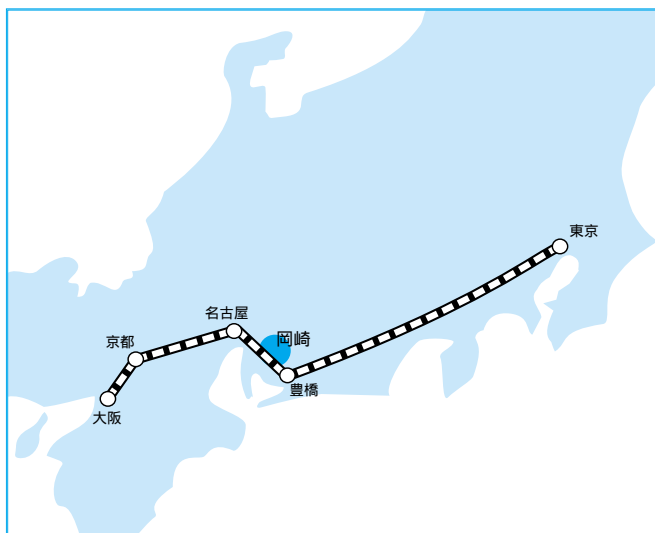
山手ロッジ

岡崎国立共同研究機構管理局

管理局	局長	寺尾 繁 美
総務部	部長	砂 田 鑑
庶務課	課長 補佐 課長 係長 庶務係長 文書法規係長 企画調査係長 情報整理係長 情報運用係長	大木 山 卓 也 神村 正 一 昌 中谷 利 浩 神島 良 志 夫 澄谷 千 賀 子 澤川 昇 三
人事課	課長 係長 任用係長 給与係長 職員係長	位 田 敏 夫 深 津 一 也 城 田 正 之 山 本 寛 幸
研究協力課	課長 専門員 研究協力専門員 専門職員 専門職員 総務係長 共同研究係長 研究協力係長	林 野 正 憲 平 崎 茂 一 彦 塚 村 浩 臣 二 崎 一 彦 塚 垣 道 雄 稲 井 誠 誠 浅
国際交流課	課長 専門職員 専門職員 国際企画係長 国際交流係長	小 野 幸 嗣 佐々部 一 真 山 田 義 郎 高 田 雅 佐々部 義 真
経理部	部長	河 野 正 俊
主計課	課長 補佐 課長 係長 総務係長 司計第一係長 司計第二係長 管財係長	岩 上 信 義 白 井 啓 夫 谷 口 哲 也 藤 田 浩 正 田 上 裕 治 井 村 美 久
経理課	課長 専門員 契約専門員 経理係長 経理係長 出納係長 情報処理係長 用度第一係長 用度第二係長	結 城 昌 伯 小 林 勝 則 行 田 豊 浦 野 實 澤 村 都 伊 藤 二 河 合 泰 和
建築課	課長 係長 総務係長 建築第一係長 建築第二係長	船 渡 英 明 渡 邊 正 波 谷 一 地 中 剛
設備課	課長 係長 電気係長 機械係長	佐 藤 久 志 井 川 正 幸 浅 野 一 夫

5月1日現在

- 東京方面から
豊橋駅にて名古屋鉄道（名鉄）に乗換え，東岡崎駅下車（豊橋 - 東岡崎間約 20 分）。南（改札出て左側）に徒歩で約 7 分。
- 大阪方面から
名古屋駅下車，名鉄（新名古屋駅）に乗換え，東岡崎駅下車（名古屋 - 東岡崎間約 30 分）。南（改札出て左側）に徒歩で約 7 分。
- 名古屋空港から
名鉄バス東岡崎(駅)直行便を利用。所用約 60 分。東岡崎駅から南へ徒歩で約 7 分。
- 自動車利用の場合
東名高速道路の岡崎 I. C. を下りて国道 1 号線を名古屋方面に約 1.5 km 吹矢橋北の信号を左折。I. C. から約 10 分。





文部省 大学共同利用機関
岡崎国立共同研究機構

分子科学研究所

〒444-8585 愛知県岡崎市明大寺町西郷中38番地
TEL 0564-55-7000(ダイヤルイン案内電話)
FAX 0564-54-2254
<http://www.ims.ac.jp/>

