

沿革

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） 関連領域研究系（関連分子科学研究部門） 化学試料室
昭和52年	4月	関連領域研究系関連分子科学研究部門廃止 関連領域研究系（関連分子科学第一研究部門，関連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	管理部が管理局となり，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 機構共通研究施設（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）
平成14年	4月	相関領域（分子クラスター研究部門），極端紫外光科学研究系（界面分子科学研究部門），分子物質開発研究センター廃止 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，分子クラスター研究部門）

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