

電子計算機室

平成12年4月、分子科学研究所電子計算機センターが機構共通施設に改組転換されたことに伴い、電子計算機室が設置された。電子計算機室で行っている主な所内情報処理サービスは以下の通りである。PPP接続による所外からのダイヤルアップ・サービス、メーリングリスト発行サービス、ネットワーク定時時刻提供（NTP）サービス。また電子計算機室が開発したプログラムを用いたWebインターフェイスによる分子科学研究所スケジュール管理表、分子科学研究所職員アドレス帳など、

ネットワーク委員会、広報委員会と協力して所内の情報化に取り組んでいる。その他、所内用の量子化学文献検索システム（QCLDB）の運用、電子状態可視化プログラムの開発等、分子科学計算関係の研究開発業務を分子科学研究所電子計算機センター時代から引き続き行っている。Webインターフェイスによるスケジュール管理表、職員アドレス帳プログラムは、機構内の管理局、生理学研究所、基礎生物学研究所セミナースケジュール等にも広く利用されている。更に、所内分子物質開発研究センターおよび分子制御レーザー開発研究センターからの依頼を受け、機器予約システム（MARS）の開発を行い、管理局からの依頼を受け、岡崎コンファレンスセンター予約状況表、ロジック予約状況検索プログラム、構内入構許可証申請プログラムなどを開発するなど、情報処理サービスの基幹プログラムの開発も行ってきた。

研究グループにおける主な研究内容は、計算機シミュレーションと化学反応動力学計算である。このうち前者では、量子化された系のシミュレーションとして、溶液中における溶質の分子振動量子動力学について影響汎関数理論、量子古典混合系近似などによる解析を行い、また量子液体とそこでの溶質の溶媒和について経路積分法による計算を行っている。さらに、複雑な古典凝縮系のシミュレーションとして、生体膜やポリペプチド、そして超臨界流体などに対しても分子動力学法による計算を行っている。一方後者では、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おり、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入れている。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。



（後列左から）手島史綱、西本史雄、高見利也、平田文男、岡崎 進
（前列左から）南野 智、内藤茂樹、水谷文保、南部伸孝