

自然科学研究機構

分子科学研究所 要覽2004

Institute for Molecular Science



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
分子スケールナノサイエンスセンター	30
錯体化学実験施設	39
岡崎共通研究施設	42
技術課	46
大型研究設備	47
岡崎IMSコンファレンス	50
共同研究	53
国際共同研究	54
総合研究大学院大学	56
大学院教育協力	57
国際交流	58
概要	62
岡崎共通施設	64
自然科学研究機構岡崎統合事務センター	66
交通案内	67



表紙図説明

光による分子の反応制御

近年の理論・実験両面での発展は、光の波長・パルス幅・位相そして強度をパラメーターとした化学反応コントロールが可能であることを示唆しており、光を用いた分子反応の制御は現実のものとなりつつあります。図はHOD分子にわずかにエネルギーが異なる光を照射することによって、H原子の解離とD原子の解離が制御できることを示した理論計算結果を表しています。

巻頭言

本年4月、分子科学研究所は大きな変革の時を迎えました。岡崎国立共同研究機構はなくなり、新たに大学共同利用機関法人自然科学研究機構がスタートしました。機構本部連絡所も東京神谷町のオフィスビルの2階に完成しました。自然科学研究機構は、構成5研究所（岡崎の3研究所と国立天文台及び核融合科学研究所）の独自性と自主性をお互いに尊重しつつ、夫々が世界に冠たる研究所として一層の発展を図ると共に、志村機構長の指導の下に自然科学の新たな発展をもたらす国際的な重要拠点として展開して行くことが大いに期待されています。日本における基礎学術を守り発展させるためにも自然科学研究機構の果たすべき役割には大きなものがあります。一方、この世の多くの物質を構成する基本部品が分子であることから、分子科学は広く自然科学諸分野との深い関係を有しています。その意味で、分子科学研究所には将来の新たな連携研究の要としての役割を果たしていく責務があるであろうと考えます。



岡崎においては、統合バイオサイエンスセンターを始めとして、分子スケールナノサイエンスセンターや錯体化学実験施設等の多くの研究室が山手地区（今までE地区と称していた地区）への移転を終了し、新たな体制が出来上がりました。明大寺地区（元のA、B地区）との緊密な関係・交流に留意しつつ、事務センターをも含めた分子科学研究所全体の一体的運営を維持・発展させることが極めて重要な課題となります。

今年も例年の通り、多くの方々から分子研から転出され、また多くの新しい方々をお迎えしました。まず、茅所長が分子研を去られ理化学研究所所長となられました。過去5年間に分子科学研究所の為に献身的にご尽力頂いたことに対して衷心よりお礼を申し上げます。昨年6月には、理論研究系の谷村吉隆助教授が京都大学理学研究科教授として転出されました。本年4月には、関連領域研究系の井上克也助教授が広島大学理学研究科教授として、分子構造研究系の加藤立久助教授が城西大学理学部化学科教授として転任され、流動として来て頂いていた水野彰教授、谷本能文教授、石田俊正助教授が、夫々、親元の豊橋技術科学大学工学部、広島大学理学研究科、静岡大学工学部に戻られました。また、装置開発室の渡辺三千雄助教授が退官されました。分子研滞在中の様々な貢献に対して心より感謝の意を表したいと思います。一方、電子構造研究系に大森賢治教授を東北大学多元物質研究所から、分子スケールナノサイエンスセンターに櫻井英博助教授を大阪大学工学研究科から、そして、計算科学研究センターに森田明弘助教授を京都大学理学研究科からお迎えしました。また、昨年度まで、分子研併任として来て頂いていた総研大先導科学研究科の松本吉泰教授を正式に分子スケールナノサイエンスセンターの専任教授としてお迎えしました。分子研での新しい発展を心よりお祈りする次第であります。例年通り、これ以外にも多くの若手研究者の流動があり、分子研の活動度の高さを実証しています。

業績の面でも多くの朗報があります。分子制御レーザー開発研究センターの平等拓範助教授が文部科学大臣賞を受賞され、平成15年度の化学会進歩賞を分子集団研究系の藤原秀紀助手（昨年10月に大阪府立大に転出）が受賞されました。また、分子制御レーザー開発研究センターの山中孝弥技術課班長が日本化学会化学技術有功賞を受賞しておられます。お祝いを申し上げますと共に、益々のご発展を心よりお祈り申し上げます。さらに、分子研名誉教授の木村克美先生が昨春、勲三等旭日賞を受賞されましたし、今年は、元流動で分子研に来て頂いた広島大学名誉教授の木村栄一先生が紫綬褒章をもらわれ、分子研所長及び岡崎国立共同研究機構長を務められました伊藤光男先生が瑞宝重光章の荣誉に輝かれました。心よりお祝いの言葉を捧げたいと思います。

法人としての新しいスタートを迎え、我々は、諸先輩が今までに築き上げられた優れた業績を受け継ぎ、なお一層の発展を目指して各人が夫々の分野において世界一の成果を挙げるべく努力を傾注していかなくてはならないと思います。

平成16年5月

中村宏樹

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。



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）
平成16年	4月	大学共同利用機関法人自然科学研究機構創設 平成16年4月1日，国立天文台，核融合科学研究所，基礎生物学研究所，生理学研究所及び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となった。 分子スケールナノサイエンスセンター（界面分子科学研究部門，分子クラスター研究部門）廃止 理論分子科学研究系 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） 分子スケールナノサイエンスセンター（先導分子科学研究部門） 安全衛生管理室 岡崎国立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，改組 岡崎統合事務センター 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）

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
平成14年度	山手1号館A，山手2号館
平成15年度	山手1号館B，山手3号館，山手4号館，山手5号館

運 営

運営会議

研究教育職員の人事等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。

運営会議委員

		議長	副議長
阿久津 秀 雄	大阪大学たんばく質研究所教授	宇理須 恆 雄	極端紫外光科学研究系教授
阿波賀 邦 夫	名古屋大学大学院理学研究科教授	小 川 琢 治	分子スケールナサイエンスセンター教授
太 田 信 廣	北海道大学電子科学研究所教授	北 川 禎 三	岡崎統合バイオサイエンスセンター教授
加 藤 隆 子	複合科学研究所研究企画情報センター教授	小 杉 信 博	極端紫外光科学研究系教授
榊 茂 好	京都大学大学院工学研究科教授	小 林 速 男	分子集団研究系教授
田 中 健一郎	広島大学大学院理学研究科教授	田 中 晃 二	錯体化学実験施設教授
寺 嶋 正 秀	京都大学大学院理学研究科教授	永 瀬 茂	理論分子科学研究系教授
西 川 恵 子	千葉大学大学院自然科学研究科教授	西 信 之	電子構造研究系教授
藤 田 誠	東京大学大学院工学系研究科教授	平 田 文 男	理論分子科学研究系教授
前 川 禎 通	東北大学金属材料研究所教授	松 本 吉 泰	分子スケールナサイエンスセンター教授
		薬 師 久 彌	分子集団研究系教授

運営会議に、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

阿波賀 邦 夫（名大院教授）
太 田 信 廣（北大教授）
榊 茂 好（京大院教授）
田 中 健一郎（広大院教授）
寺 嶋 正 秀（京大院教授）
小 杉 信 博（分子研教授）
田 中 晃 二（分子研教授）
永 瀬 茂（分子研教授）
松 本 吉 泰（分子研教授）
薬 師 久 彌（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（東北大院教授）
菅 原 正（東大院教授）
富 宅 喜代一（神戸大教授）
宇理須 恆 雄（分子研教授）
小 林 速 男（分子研教授）
田 中 晃 二（分子研教授）
西 信 之（分子研教授）
高 橋 正 彦（分子研助教授）
中 村 敏 和（分子研助教授）
見 附 孝一郎（分子研助教授）
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（宇宙研名誉教授）	平尾公彦（東大院教授）
榎敏明（東工大院教授）	平岡賢三（山梨大教授）
太田信廣（北大教授）	山内薫（東大院教授）
小林昭子（東大院教授）	山下晃一（東大院教授）
高塚和夫（東大院教授）	北川禎三（分子研教授）
張紀久夫（阪大院教授）	小林速男（分子研教授）
寺嶋正秀（京大院教授）	西信之（分子研教授）
富岡秀雄（三重大教授）	平田文男（分子研教授）
永田敬（東大院教授）	見附孝一郎（分子研助教授）
西川恵子（千葉大院教授）	

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。

運営顧問

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，研究所長の諮問に応じて助言等に当たる。

土屋 莊 次	城西大学招聘教授、東京大学名誉教授
加藤 伸 一	豊田中央研究所代表取締役
小間 篤	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所長
益田 隆 司	電気通信大学長

構 成 員

中 村 宏 樹	所 長	長 倉 三 郎	研究顧問, 名誉教授
小 杉 信 博	研究総主幹 / 教授 (併)	井 口 洋 夫	研究顧問, 名誉教授
		伊 藤 光 男	研究顧問, 名誉教授
		廣 田 襄	研究顧問
		近 藤 保	研究顧問
		玉 尾 皓 平	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
		茅 幸 二	名誉教授

理論分子科学研究系 研究主幹 (併) 平 田 文 男

分子基礎理論第一研究部門

永 瀬 茂	教 授
岡 本 祐 幸	助教授
小 林 郁	助 手
奥 村 久 士	助 手
西 野 正 理	非常勤研究員
崔 隆 基	産学官連携研究員
河東田 道 夫	産学官連携研究員
李 秀 栄	産学官連携研究員
眞 木 淳	産学官連携研究員
小久保 裕 功	産学官連携研究員
石 田 豊 和	産学官連携研究員
秋 永 宣 伸	産学官連携研究員
小 野 ゆり子	産学官連携研究員
高 木 望	学振特別研究員

分子基礎理論第二研究部門

中 村 宏 樹	教 授 (併)
MIL'NIKOV, Gennady V.	助 手
ZOU, Shiyang	非常勤研究員
近 角 真 平	研究員 (科学研究)
KONDORSKIY, Alexey	研究員 (科学研究)
田 村 宏 之	研究員 (科学研究)
趙 聖 行	研究員 (科学研究)
PARK, Tae Jun	外国人研究員
	16.7.1 ~ 16.8.31
	16.12.1 ~ 17.1.31
ZHAO, Yi	学振外国人特別研究員
	15.11.2 ~ 17.11.1

分子基礎理論第三研究部門

平 田 文 男	教 授
米 満 賢 治	助教授
鄭 誠 虎	助 手
大 塚 雄 一	非常勤研究員
KOBRYN, Oleksandr	非常勤研究員
吉 田 紀 生	研究員 (科学研究)
山 崎 健	産学官連携研究員
丸 山 豊	産学官連携研究員
宮 田 竜 彦	産学官連携研究員
谷 村 あゆみ	産学官連携研究員
生 田 靖 弘	産学官連携研究員
松 上 優	テクニカルアシスタント

分子基礎理論第四研究部門 (客員研究部門)

波 田 雅 彦	教 授 (東京都立大院理)
中 嶋 隆	助教授
	(京大エネルギー理工学研)
前 島 展 也	特別訪問研究員

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

岡本 裕巳 教授
森田 紀夫 助教授
井村 考平 助手
内田 毅 助手
永原 哲彦 非常勤研究員

分子動力学研究部門

北川 禎三 教授(剛給バイオインセンタ-)
横山 利彦 教授
中川 剛志 助手
丸山 耕一 非常勤研究員
松岡 秀人 学振特別研究員

分子構造学第二研究部門(客員研究部門)

太田 俊明 教授(東大院理)
石森 浩一郎 助教授(京大院工)

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
西條 純一 助手
十代 健 助手
岡部 智絵 研究員(科学研究)
渡辺 三千雄 産学官連携研究員
BOO, Bong Hyun 外国人研究員
16.7.8 ~ 16.8.26
16.12.27 ~ 17.2.26

分子エネルギー変換研究部門(外国人客員研究部門)

KWON, Yong-Seung 教授
(成均館大学 教授)
15.10.3 ~ 16.9.2
OSHEROV, Vladimir Iosiphovich 教授
(ロシア科学アカデミー化学物理研究所 教授)
16.9.15 ~ 17.1.14
STANKEVICH, Vladimir G. 教授
(クルチャトフ放射光研究所室長、モスクワ
工科大学 教授) 17.1.20 ~ 17.7.19
PULAY, Peter 助教授
(アーカンソー大学 教授)
16.1.1 ~ 16.5.31
COUPRIE, Marie Emmanuelle 助教授
(原子力委員会 主任研究員)
16.6.10 ~ 16.9.9
VAROTSIS, Constantinos 助教授
(クレタ大学 教授)
16.10.1 ~ 17.1.31

電子状態動力学研究部門

大森 賢治 教授
香月 浩之 助手

電子構造研究部門(客員研究部門)

市村 禎二郎 教授(東工大院理工)
高木 紀明 助教授(総研大先導科学)

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
古川 貢 助手
山本 貴 非常勤研究員
原 俊文 非常勤研究員
中野 千賀子 特別協力研究員

分子集団動力学研究部門

小林 速男 教授
高橋 一志 助手
LEE, Ha-Jin 学振外国人特別研究員
14.6.15 ~ 16.6.14
大塚 岳夫 学振特別研究員

分子集団研究部門(客員研究部門)

榎 敏明 教授(東工大院理工)
内藤 俊雄 助教授(北大院理)

関連領域研究系 研究主幹(併) 薬師 久彌

相关分子科学第一研究部門

木下 一彦 教授(剛給バイオインセンタ-)
青野 重利 教授(剛給バイオインセンタ-)
井上 克也 教授(併)
秋田 素子 助手
足立 健吾 助手(剛給バイオインセンタ-)

吉岡 資郎 助手(剛給バイオインセンタ-)

相关分子科学第二研究部門(客員研究部門)

齋藤 正男 教授
(東北大多元物質科学研)
中村 一隆 助教授
(東工大応用セラミックス研)

極端紫外光科学研究系

研究主幹(併) 宇理須 恆 雄

基礎光化学研究部門

小 杉 信 博 教 授
 菱 川 明 栄 助 教 授
 初 井 宇 記 助 手
 高 橋 栄 治 助 手
 樋 山 みやび 助 手
 瀬 戸 山 寛 之 非 常 勤 研 究 員

極端紫外光研究部門(外国人客員研究部門)

RÜHL, Eckart, Günther Adolf 教 授
 (ブルツブルグ大学 教授) 16.4.6 ~ 16.7.5
 WAN, Lijun 教 授
 (中国科学院化学研究所 教授) 16.7.10 ~ 16.10.9
 SUN, Wei-Yin 教 授
 (南京大学錯体化学研究所 教授) 16.11.1 ~ 17.10.31
 DROZDOVA, Olga 助 教 授
 (ヨッフエ物理工学研究所 上級研究員) 15.8.1 ~ 16.7.31
 LABLANQUIE, Pascal 助 教 授
 (フランス放射光研究所 CNRS 主任研究員) 16.9.1 ~ 17.2.28

反応動力学研究部門

宇理須 恆 雄 教 授
 見 附 孝 一 郎 助 教 授
 野 々 垣 陽 一 助 手
 森 崇 徳 研 究 員 (科 学 研 究)
 吉 村 大 介 特 別 訪 問 研 究 員

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 (計算科学研究センター)
 森 田 明 弘 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)
 高 見 利 也 助 手 (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)

計算分子科学第二研究部門

計算分子科学第三研究部門

分子制御レーザー開発研究センター

センター長(併) 松 本 吉 泰

分子位相制御レーザー開発研究部

放射光同期レーザー開発研究部

猿 倉 信 彦 助 教 授
 小 野 晋 吾 助 手
 後 藤 昌 宏 非 常 勤 研 究 員
 QUEMA, Alex Villareal 学 振 外 国 人 特 別 研 究 員
 16.4.1 ~ 18.3.31

特殊波長レーザー開発研究部

平 等 拓 範 助 教 授
 石 月 秀 貴 非 常 勤 研 究 員
 佐 藤 庸 一 研 究 員 (科 学 技 術 振 興 調 整)
 齋 川 次 郎 研 究 員 (科 学 技 術 振 興 調 整)
 RAKESH, Bhandari 共 同 研 究 員

分子スケールナノサイエンスセンター

センター長(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
 多 田 博 一 助 教 授
 鈴 木 敏 泰 助 教 授
 田 中 彰 治 助 手
 阪 元 洋 一 助 手
 山 田 亮 助 手
 田 中 啓 文 助 手
 藤 原 栄 一 非 常 勤 研 究 員
 中 尾 聡 産 学 官 連 携 研 究 員
 ZHANG, Fapei 学 振 外 国 人 特 別 研 究 員
 16.4.1 ~ 18.3.31
 荒 木 幸 一 特 別 訪 問 研 究 員

櫻 井 英 博 助 教 授
 長 澤 賢 幸 助 手
 倉 橋 拓 也 助 手
 山 田 陽 一 助 手
 槇 優 非 常 勤 研 究 員

ナノ光計測研究部門

松 本 吉 泰 教 授
 佃 達 哉 助 教 授
 根 岸 雄 一 助 手
 角 山 寛 規 非 常 勤 研 究 員
 長 尾 昌 志 非 常 勤 研 究 員

ナノ触媒・生命分子素子研究部門

魚 住 泰 広 教 授
 永 田 央 助 教 授
 藤 井 浩 助 教 授 (総合バイオインテック)

先導分子科学研究部門(流動研究部門)

高 橋 正 彦 助 教 授
 渡 邊 昇 助 手
 解 良 聡 助 手
 KHAJURIA, Yugal 非 常 勤 研 究 員

装置開発室 室長(併) 宇理須 恆 雄

極端紫外光研究施設 施設長(併) 小 杉 信 博

加 藤 政 博 教授	保 坂 将 人 助手
木 村 真 一 助教授	持 箸 晃 助手
繁 政 英 治 助教授	伊 藤 孝 寛 助手
伊 藤 健 二 助教授(客員) (高工不物質構造科学研)	彦 坂 泰 正 助手
	櫻 井 陽 子 非常勤研究員

錯体化学実験施設 施設長(併) 田 中 晃 二

錯体触媒研究部門

真 島 和 志 教授(客員)
(阪大院基礎工)

栗 原 正 人 助教授(客員)
(山形大理)

錯体物性研究部門

田 中 晃 二 教授

川 口 博 之 助教授

和 田 亨 助手

松 尾 司 助手

ZHANG, Dao 研究員(科学技術振興調整)

赤 木 史 生 研究員(科学技術振興調整)

小 室 貴 士 学振特別研究員

配位結合研究部門(客員研究部門)

松 坂 裕 之 教授(大阪府大総合科学)

上 野 圭 司 教授(群馬大工)

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 センター長(併) 北 川 禎 三

戦略的方法論研究領域

青 野 重 利 教授

木 下 一 彦 教授

藤 井 浩 助教授

小 林 克 彰 非常勤研究員

鬮 目 理 人 非常勤研究員

古 池 晶 研究員(科学研究)

岡 本 哲 明 研究員(科学研究)

PATRA, Digambara 学振外国人特別研究員
16.9.1 ~ 18.8.31

藤 原 郁 子 学振特別研究員

城 口 克 之 学振特別研究員

余 語 克 紀 研究員

尾 上 靖 宏 研究員

榊 直 由 研究員

生命環境研究領域

北 川 禎 三 教授

林 崎 良 英 助教授(客員)
(理化学研)

久 保 稔 非常勤研究員

PAL, Biswajit 研究員(科学研究)

MAHINAY, Myrna Sillero 学振外国人特別研究員
15.6.3 ~ 17.6.2

GU, Yuzong 学振外国人特別研究員
16.7.10 ~ 18.7.9

XAVIER, Antonio V. 学振外国人招へい研究者(短期)
17.2.21 ~ 17.3.13

KOZLOWSKI, Pawel Michal 学振外国人招へい研究者(長期)
16.4.22 ~ 16.8.21

平 松 弘 嗣 学振特別研究員

太 田 雄 大 学振特別研究員

長 野 恭 朋 学振特別研究員

當 舎 武 彦 学振特別研究員

計算科学研究センター センター長(併) 永 瀬 茂

岡 崎 進 教授	三 浦 伸 一 助手
森 田 明 弘 助教授	岩 橋 建 輔 産学官連携研究員
南 部 伸 孝 助手	松 田 成 信 産学官連携研究員
大 野 人 侍 助手	篠 田 恵 子 産学官連携研究員
高 見 利 也 助手	

第1技術班 班長

理論研究系技術係

技術職員 石村 和也

分子構造研究系技術係

技術職員 渡邊 廣憲

電子構造研究系技術係

係長 中村 永研

第2技術班 班長 山中 孝弥

分子集団研究系技術係

係長 吉田 久史

技術職員 賣市 幹大

技術職員 大石 修

技術職員 岡野 芳則

相関領域研究系技術係

極端紫外光科学研究系技術係

係長 水谷 伸雄

技術職員 手老 龍吾

第3技術班 班長 鈴井 光一

電子計算機技術係

係長 水谷 文保

技術職員 手島 史綱

技術職員 南野 智

技術職員 内藤 茂樹

技術職員 澤 昌孝

装置開発技術係

技術職員 内山 功一

技術職員 豊田 朋範

技術職員 矢野 隆行

技術職員 青山 正樹

技術職員 近藤 聖彦

第4技術班 班長 堀米 利夫

分子制御レーザー開発技術係

係長 山崎 潤一郎

技術職員 上田 正

極端紫外光実験技術係

係長 蓮本 正美

技術職員 林 憲志

技術職員 近藤 直範

第5技術班 班長

分子スケールナノサイエンス技術第一係

係長 永田 正明

技術職員 戸村 正章

技術職員 牧田 誠二

技術職員 千葉 寿

分子スケールナノサイエンス技術第二係

係長 高山 敬史

主任 酒井 雅弘

錯体化学実験技術係

技術職員 水川 哲徳

* 構成員は平成16年5月1日現在。ただし、外国人研究者で平成16年度中に3か月を超えて滞在することが予定されている者は掲載した。

研究系

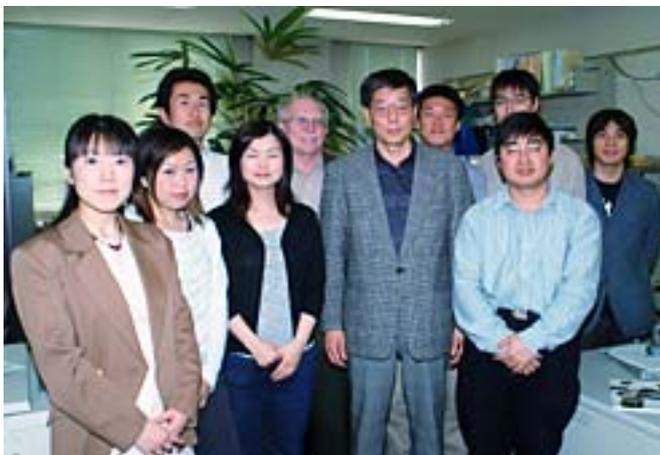
理論分子科学研究系

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、同センターおよび計算分子科学研究系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. 分子の設計と反応の理論と計算

分子科学の限りない夢は、分子を電子レベルで統一的に理解し、「望む構造、物性、機能を自由にデザインして組み立てて思うがままに反応させる」ことである。この実現のための理論と計算およびコンピューターシミュレーションを行っている。組み立てた分子を現実化するには、前駆体や置換基の適切で厳密な選択ばかりでなく、反応経路と反応条件の微妙な設定も要求される。したがって、分子構築から合成実現までを目的としている。このために、内外の実験グループと密に連携し実際の合成の可能性と予測した特性の実証を行っている。また、分子単独の設計ばかりでなく、幾つかの分子ユニットが自己集合的に組織化するナノ分子系も自由に理論予測できることを目指している。



(後列左から)高木 望、PULAY, P.、李 秀栄、石村和也、河東田道夫
(前列左から)小林 郁、中島 彩、溝呂木直美、永瀬 茂、崔 隆基

2. 生体分子の計算機シミュレーション

分子シミュレーションの手法により、蛋白質の折り畳み問題に取り組んでいる。特に、拡張アンサンブルに基づくモンテカルロ法や分子動力学法(例えば、マルチカノニカル法やレプリカ交換法)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



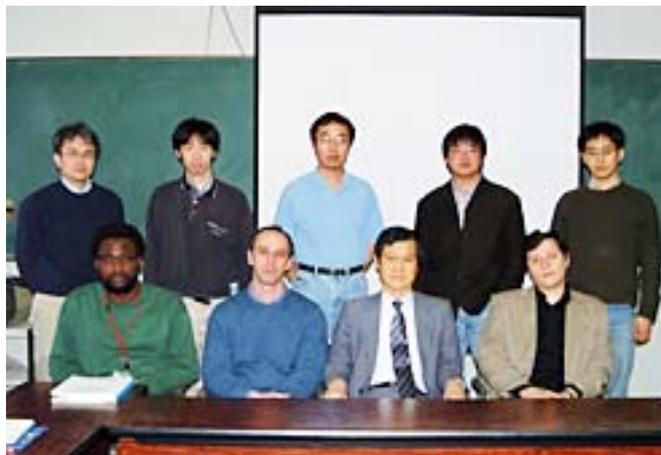
(後列左から)小久保裕功、中島 彩、伊藤 暁、小野ゆり子
(前列左から)奥村久士、岡本祐幸、川島雪生

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。

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（所長研究室）

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。



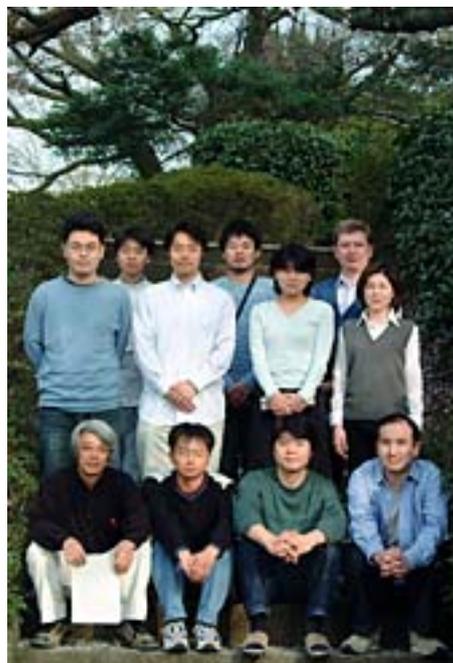
（後列左から）南部伸幸（所内協力研究者）、田村宏之、ZHAO, Yi、ZOU, Shiyang、近角真平

（前列左から）OLOYEDE, Oluwaponmile、MIL'NIKOV, Genady V.、中村宏樹、KONDORSKIY, Alexey D.

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こと及び多次元トンネルの有効な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。特に現在は，特別推進研究「Zhu-Nakamura理論に基づく非断熱化学動力学の統合的研究」に取り組んでいる。

分子基礎理論第三研究部門

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）丸山 豊、松上 優、KOBRYN, Oleksandr

（中列左から）石塚良介、生田靖弘、谷村あゆみ、桑 美和子

（前列左から）平田文男、宮田竜彦、鄭誠虎、吉田紀生

2. 分子にはいろんな機能があるが、集まることによって初めて現われる性質があり、それらは制御できる。例えば、組成変化、加圧、光照射などで環境をわずかに変えると、結晶構造や色が変わったり、磁性をもったり、超伝導になったりすることがある。こうした変化に向かう局所的な“たね”が競合しながら成長・増殖して、もの全体の性質を変えてしまうこともある。微視的にみると集団としての電子の量子力学的な性質が変わっている。これらの物性の発現機構やダイナミクスを理論的に研究する。



(後列左から)前島展也、大塚雄一、井上仁
(前列左から)石川浩美、米満賢治

分子基礎理論第四研究部門(客員研究部門)

1. 凝縮相系における分子振動と分子間相互作用の理論

凝縮相系における分子間相互作用と、その分子振動に対する影響を解析し、系の構造・ダイナミクスと振動数領域・時間領域分光シグナルの関係を明らかにする。特に、液体や生体分子系における振動励起の共鳴移動と振動緩和およびそれらの競合、生体分子内色素分子の振動および光学的性質と分子間相互作用、分子の電子構造的特徴と分子間相互作用の関係、などについて重点的に解析する。また、これらの解析に必要な、分子振動の諸性質を理論的に解析するためのソフトウェアの開発も行う。

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。単離状態の比較的簡単な分子から固体表面に吸着した分子や配向凝集系までを広く対象とし、空間分解能と時間分解能をもつ分光測定を進める。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、分子及び分子集合体のもつ様々な機能を解明する。また、固体表面や凝縮系での物性、特に分子磁性などの特性を分光学的手法により明らかにする。

分子構造学第一研究部門

1. 時間的・空間的に高い分解能を持つ新たな測定法の開発と、それによる分子・分子集合体の動的挙動や機能の解明を目指した基礎的研究。最新のレーザー分光技術によって、ピコ秒・フェムト秒オーダーの時間分解能が実現できる。また最近では近接場光学の手法によって、光の回折限界（従来の光学顕微鏡での空間分解能）を超える、ナノメートルオーダーの空間分解能が実現可能である。これらの手法の融合によって、微小な領域における分子の動的挙動に迫る分子分光法の確立をめざし、分子集合体や液相中の分子ダイナミックスの挙動を調べる。



(左から) 岡本裕巳、野村恵美子、井村考平、LIM, JongKuk、永原哲彦

2. 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。



森田紀夫

分子構造学第二研究部門（客員研究部門）

1. シンクロトロン放射光のX線を利用したさまざまな手法，X線吸収分光（XAFS），光電子分光（XPS，UPS），光電子回折（XPD），X線磁気円二色性（XMCD）を用いて，金属，半導体表面・界面の原子構造，電子状態，磁性に関する研究を行っている。特に，最近開発したエネルギー分散型表面XAFS法により，固体表面における化学種の変化や磁性の変化を追跡し，これから化学反応機構やスピン再配列機構の解明を試みている。

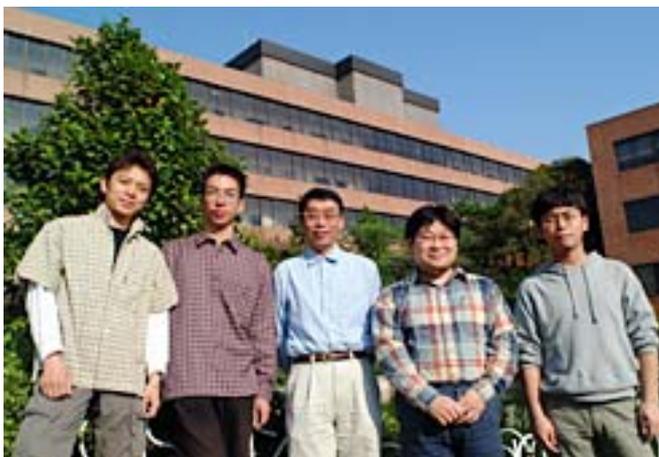
2. 鉄イオン代謝蛋白質の発現制御をするヘム蛋白質の遺伝子制御機構

近年の分子生物学の進展により，遺伝子制御に関与する多くの金属蛋白質が同定され，その制御の分子機構の解明が試みられている。代表的な金属蛋白質であるヘム蛋白質においても，チトクロム c やヘモグロビンなどに対し個別に遺伝子制御機構が調べられ，それを実行するのがまた別のヘム蛋白質である事がわかってきた。つまり，ある種のヘム蛋白質は遺伝子制御機能を持っている。その例として，生体内の鉄の濃度に応じてヘムの合成量を制御するIRPやIrrがある。それらの遺伝子制御機構を分光学的に解明する研究を行う。

分子動力学研究部門

1. ナノスケール磁性薄膜の磁気特性とその分子科学的制御

ナノスケール磁性薄膜がしばしば示す，古典的には説明できない物性を研究する。特に，薄膜の磁気特性の表面修飾による変化を，分子の吸着などの表面分子科学的な観点から，超高真空中での磁性薄膜の磁気特性の制御を検討する。実験室での磁気光学Kerr効果測定に加えて，UVSORからの軟X線を利用したX線吸収分光やX線磁気円二色性などの実験も行っている。



（左から） 馬曉東、渡邊廣憲、横山利彦、丸山耕一、中川剛志

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。

基礎電子化学研究部門

1. 新しい機能性「金属・有機ハイブリッドクラスター、ナノ粒子」の研究

金属のd軌道と有機物の π 軌道の交互の積層あるいは連結によって生成するクラスター化合物は、反応触媒や磁気的電氣的な素子への応用に通じる様々な機能を有している。金属原子を有機分子系で繋ぎ、金属原子間のスピン-スピン相互作用を制御することによって強磁性的な性格を持たせることが可能である。我々は、遷移金属アセチリド化合物というアセチレンの直交したパイ軌道が上下・左右・前後に3次元配置した6個の遷移金属原子と強磁性的に相互作用した新しい物質系の開発に成功



(後列左から)十代 健、西條純一
(前列左から)臼井千夏、鈴木優子、小野美菜代、岡部智絵、西 信之

した。これは、10ナノメートル以上の大きさの結晶になると常温で磁石として振る舞うが、それ以下では、超常磁性となる。また、磁気的な機能ばかりでなく、金属を多様に入れ替えることによってその電子構造を制御し、機能発現を設計することができる。このような機能は、ユニット数が千個以上のスーパークラスターになって初めて出現し、ナノ粒子として高分解能透過電子顕微鏡によってその原子像を観測することができる。この顕微鏡に備えられたEELS分光装置やKEKのEXAFS等を使用してその構造と機能の関係を調べている。この化合物の有用性は、シリコン基板上に作った絶縁体としてのアセチリドナノ薄膜に電子ビームやレーザービーム照射によって炭素によって被覆された金属ナノドット配列群や金属ナノ細線列の自由な(コンピューター制御された)描画創成が可能な事である。即ち、ビームによって加熱された箇所金属の偏析が起こり、このナノ金属が炭素によって保護されているために酸化や腐食が起きないと同時に、電氣的に絶縁されること、また、炭素膜が薄いところでは半導体的な役割が期待できることである。分子や粒子を任意の場所に並べるのは大変困難なことであるが、電子ビームやレーザービームを用いて、新たなナノ金属やナノ炭素膜をつくる本手法は、ナノレベルでの電子回路や組織構造の製作法としては画期的なものとなるであろう。

2. クラスターイオンにおける電荷共鳴・電荷移動・プロトン移動

分子がクラスターを形成するのは、水素結合のような静電力によるものの他に、電荷共鳴や電荷移動といった動的な共鳴がある。これらは、電子が分子間を移動し、分子間の軌道の大きな重なりを生むことによって大きな安定化エネルギーを得ている。一方、プロトンが結合に関与したクラスターでは、プロトンがどの分子サイトに着くかによってその構造が大きく変わることがある。このような電荷の動的な変化をもたらすクラスター構造のダイナミックな変化を、Z型あるいはL型トリプル四重極質量選別イオントラップレーザー共鳴分光法によって調べている。

3. 溶液中のマイクロクラスター構造とその機能の研究

水やアルコールなどの水素結合性溶媒は、自己会合能力が高く、バラバラになって他の媒体には入りこむには、大きなエネルギーを要する。水の中に見られる疎水性水和や疎水結合は水分子同士の会合特性がなせる技である。このような分子レベルでの溶媒や溶質の会合状況を、低振動数ラマン（分子間振動）スペクトル、X線回折、溶液の断熱膨張によって分離したクラスターの質量分析法などによって調べている。

電子状態動力学研究部門

1. 光を物質に照射すると、物質内に光の位相を記憶した量子波（波束）が発生する。我々は最近、二つのフェムト秒レーザーパルス間の相対位相をアト秒精度で操作し孤立分子に照射する事によって、かつてない超高精度の分子波束干渉計を開発した。また、この干渉計を用いて、分子の量子状態に特定の情報を書き込み、一定時間保存した後に読み出す「分子メモリー」の開発にも成功している。今後は、この波束干渉計を高感度のデコヒーレンス検出器として量



（左から） 稲垣いつ子、大森賢治、香月浩之

子論の基礎的な検証に用いると共に、より自由度の高い量子位相操作技術への発展を試みる。そしてそれらを希薄な分子集団や液体、固体、表面に適用することによって物質の新しい量子機能の創製を目指す「アト秒量子エンジニアリング」と呼ばれる新領域の開拓を目指している。当面は以下の4テーマの実現に向けて研究を進めている。

デコヒーレンスの検証と抑制；デコヒーレンスは、物質の波としての性質が失われて行く過程である。量子論における観測問題と密接なつながりをもつ重要なテーマであるとともに、テクノロジーの観点からは、反応制御や量子情報処理のエラーを引き起こす主要な要因である。その本質に迫り、制御法を探索する。高精度の化学反応制御；アト秒レベルの量子位相精度は紫外光を用いたコヒーレント制御を可能にする。これによって分子の電子励起状態を利用した高精度の反応制御が可能になる。分子ベースの量子情報科学の開拓；高精度の量子位相操作によって分子内の複数の自由度を用いる任意のユニタリ変換とそれに基づく高度な量子情報処理の実現を目指す。アト秒軟X線パルス源の開発と応用；強光子場中の光ドレスト状態をコヒーレント制御し、効率の良いアト秒軟X線パルス源の開発を目指す。これをアト秒時間分解分光に用いる。

電子構造研究部門（客員研究部門）

1. 光励起した芳香族分子の電子分光と反応動力学
2. 表面不均一反応の時間・空間発展に関する研究

ベンゼンやナフタレン分子の環上の水素をハロゲン原子、メチル基やメトキシ基などで置換した誘導体について、超音速ジェットとレーザーを組み合わせて分光計測を行い、それらの分子の励起状態の分子構造や緩和ダイナミクスを解明する。

また、固体表面での反応の機構を理解するために、表面での反応活性点、反応に関わる中間体の同定とその吸着状態などを明らかにすると共に、2次元表面上をどのように反応が進行するか

を知る。本研究では、主に走査型トンネル顕微鏡を用いて、これらに関する点を中心に反応の時間・空間発展を明らかにする。

分子エネルギー変換研究部門（外国人客員研究部門）

1．今年度は、量子化された光子場の原子分子動力学過程の基本的理論の構築とそのレーザー制御への応用、 C_{60} を含む有機固体の真空紫外光電子分光、放射光を用いた自由電子レーザー発振の研究、そしてシトクロム ba_3 の可視・紫外共鳴ラマンスペクトル観測を通じた酵素活性の研究を行う。

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，光学的実験や極低温，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

分子から分子へと移動遍歴する電子が分子性導体の様々な性質（物性）を担っている。分子性結晶では電子の遍歴性が弱いために，電子が一つの分子に閉じ込められた（局在）状態と隣の分子にまで広がった（非局在）状態の境界領域に位置する物質が多い。これらの物質の温度や圧力を変えると，濃淡のある電荷分布を持つ局在状態（電荷整列）と均一な電荷分布をもつ非局在状態（金属）との間を移り変わり（相転移），それに伴って物性が大きく変化する。



（後列左から）山本 貴、賣市幹大、薬師久彌、山本 薫
（前列左から）畠田奈緒、DROZDOVA, Olga、中野千賀子

このような「電荷整列を伴う相転移」に興味をもって，一連の分子導体における温度・圧力依存性（相図）を主に反射分光法とラマン分光法を用いて研究している。

2. 分子性固体の磁気共鳴研究

分子性固体の示す特異な電子状態に関心を持ち，主に磁気共鳴（NMR，ESR）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。高磁場・高周波を含むESR研究。金属 - 非金属転移や電荷局在・スピンドYNAMICKSの理解。



（後列左から）古川 貢、原 俊文、中村敏和、
前田圭介
（前列） 畠田奈緒

分子集団動力学研究部門

1. 分子物質の新たな電子機能の開発と物性研究

分子の電子機能の研究は将来のナノデバイスの開発の基礎となるものと期待されている。本研究室では新しい電子機能を持つ分子物質の設計・開発・物性研究を行っている。現在の具体的テーマは伝導電子と局在磁気モメントが共存する複合機能分子物質の開発、一種類の分子だけで出来た金属、超伝導体、強磁性金属の開発と新しい機能性の発現、有機安定ラジカルをスピン源とする新しい金属性磁石の設計・合成、ナノポーラス分子物質を利用した多重機能分子システムの開発、などである。



(後列左から)岡野芳則、高橋一志、大塚岳夫、CUI, Hengbo、大坪才華
(前列左から)磯野裕貴子、伊木志成子、小林速男、永井正子、太田明代

分子集団研究部門 (客員研究部門)

1. 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・超伝導体の開発、物性解明、分子素子の基礎に関する研究を実施している。

相関領域研究系

本研究系では、分子科学と関連諸分野とが相関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入れて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。

相関分子科学第一研究部門

1. 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。



(中心) 井上克也
(上部より左回りに)沼田陽平、太田明代、秋田素子、奥田一樹

相関分子科学第二研究部門 (客員研究部門)

1. ヘムタンパクはヘムという共通の補欠分子を用いるにも関わらず酸素や電子の運搬、反応の触媒、シグナル伝達などの機能を示し、これら多様な機能の発現にはタンパクによる制御が重要と考えられています。本分野では、タンパク質工学・反応機構の検討・X線結晶構造解析・分光学的測定などの多角的なアプローチによって、ヘムタンパクの構造-機能相関の解明を目指し、ヘムを分解すると共にシグナル伝達分子として注目される一酸化炭素を合成する、ヘムオキシゲナーゼの反応機構の解明、ヘムをセンシングして、ヘムオキシゲナーゼの発現を制御する転写抑制因子蛋白質Bach1の構造活性相関の解明、及びヘムのレセプターやトランスポーター、酸素センサータンパクなどの新規ヘムタンパクのクローニング、発現系の構築、等の研究を遂行しています。

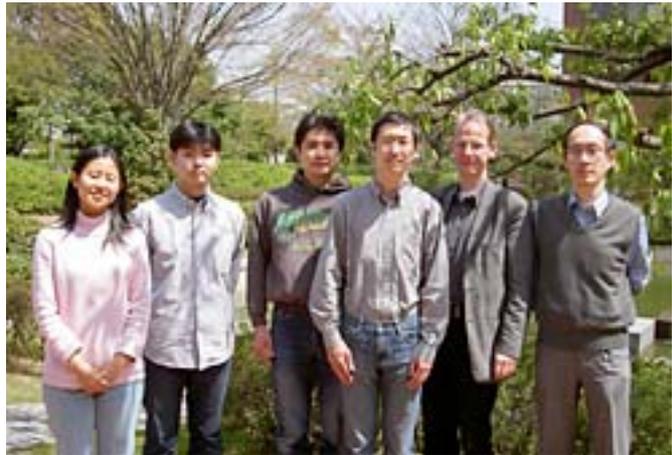
極端紫外光科学研究系

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、短パルスX線による分子ダイナミクス、反応動力学、新ナノバイオ反応場の創成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、分子の内殻電子を共鳴励起し、イオン化や非弾性散乱（発光）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できる。このような特徴を生かして、価電子領域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R行列/MQDT法等の理論アプローチを内殻現象に適用するために拡張している。



（左から） 樋山みやび、瀬戸山寛之、益田周防海、初井宇記、RUEHL, Eckart、小杉信博

2. シンクロトロン放射光および高強度超短パルスレーザーを用いたフェムト・アト秒領域の超短パルス軟X線・極端紫外光の発生、およびそれを用いた分子ダイナミクスの解明をおこなう。とくに、分子内の特定の原子に局在する内核電子のイオン化によって放出された電子をプローブとして、化学反応過程を「分子構造の変化」として明瞭に捉え、超高速で進行する化学反応過程の実時間追跡をめざしている。



（左から） 中根淳子、菱川明栄、高橋栄治

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。

1. 放射光照射による半導体表面光化学反応の基礎過程および、放射光エッチングなどによる表面ナノ構造形成の研究を行う。また、このようにして形成した表面微細構造を利用した自己組織化反応により、半導体特にシリコン表面に生体物質を集積し生体機能の発現を目指す。当グループで開発した新しい赤外反射吸収分光法により集積構造を評価するとともにSTMやAFMにより構造や反応機構を原子・分子レベルで評価解析する。



(後列左から) 吉村大介、KIM, Yong Hoon、宇野秀隆
(前列左から) 手老龍吾、清水厚子、宇理須恒雄、三澤直雄、野々垣陽一

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、分子や金属内包フラレン等のナノメタ-物質の超励起状態を観測し、電子的または振動的エネルギー緩和および単分子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、質量分析、蛍光分散分光およびレーザー誘起蛍光分光である。

3. 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。多重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起こしたり、電子基底状態と電子励起状態との振動波動関数の重なりを操作したりすることで、特異な光解離反応ルートの開拓を目指す。



(左から) 桑原英治、高林康裕、森 崇徳、見附孝一郎

極端紫外光研究部門 (外国人客員研究部門)

1. 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。

計算分子科学研究系

分子ならびに分子集合体の自己組織化やその複合体の構造と動力学，ならびに機能と物性に関する計算科学的研究を行っている。一方で，本研究系は，岡崎共通研究施設計算科学研究センターと密接な関係にあり，研究系職員はセンターの管理・運営を行っている。

計算分子科学第一研究部門

1. 凝集系の計算機シミュレーション

分子動力学法やモンテカルロ法など計算機シミュレーションの手法を用いて，方法論の開発も含めて，様々な凝集系の構造や動力学に対する分子レベルからの研究を行っている。

その中でも特に，溶液のような多自由度系における量子化された系の動力学に対し，これまですでに分子振動緩和やコヒーレンスの動力学，そして量子液体などについて，シミュレーション手法の開発から始めて研究を進めてきた。一方で，脂質二重層膜やポリペプチド，またミセル系のような巨大で時定数の長い複雑古典凝集系に対し，大規模分子動力学計算に基づいた解析を進めてきている。最近では特に，巨大系の取り扱いに向けた力の粗視化モデルについて検討を開始した。



(後列左から) 佐藤昌宏、三上泰治、岩橋建輔、吉井範行
(前列左から) 明石志保子、岡崎進、山田篤志、三浦伸一

2. 界面非線形分光の理論とシミュレーション

大気中のエアロゾルなど気相と凝集相が共存する不均質場での化学を分子レベルで理解するため，電子状態理論および分子シミュレーションなどを用いて研究している。これら複数の相にまたがる化学は分子科学の対象として未開拓な問題が多く，気液界面の構造，界面特有の反応機構および物質移動などが主な研究テーマである。近年では特に分子レベルの電子状態に基づいて，界面和周波発生(SFG)分光の実験データを非経験的に計算し解析できる理論の開発と応用に力を入れている。



(左から) 川口律子、森田明弘

計算分子科学第二研究部門

(公募準備中)

計算分子科学第三研究部門(客員研究部門)

1. 計算分子科学に関わる周辺分野の研究

超並列計算アルゴリズムやグリッドコンピューティング手法を、量子化学計算や分子動力学計算、モンテカルロ計算などへと適用し、巨大計算のための巨大演算システムにおいて最高ピーク性能を実現し、また計算効率の最大化を図るための情報工学的研究を幅広く行う。

研究施設

分子制御レーザー開発研究センター

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ための高性能かつ新規なレーザーシステムを自ら開発し、先端的分子科学研究の推進に寄与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 (公募準備中)

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



(後列左から) 上田 正、QUEMA, Alex、高崎信吾、齊川次郎、小野晋吾、DASCALU, Traian、常包正樹
(中列左から) 石月秀貴、山中孝弥、寺田三和子、石毛澄子、小野陽子、中川信代、鈴木さとみ、千葉 寿
(前列左から) 猿倉信彦、松本吉泰、平等拓範、佐藤庸一

2) 放射光同期レーザー開発研究部 (猿倉信彦助教授, 小野晋吾助手)

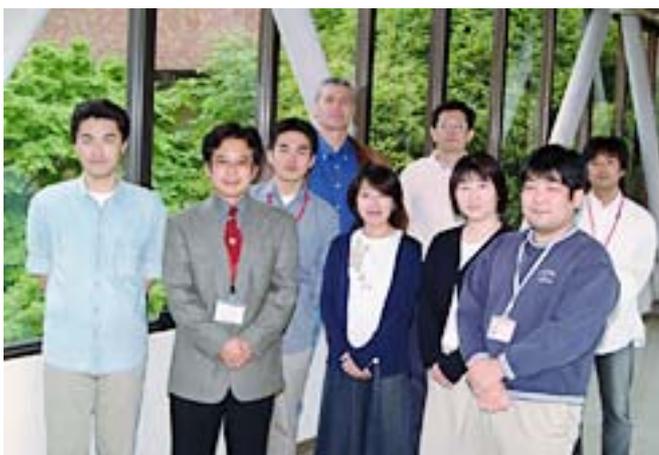
超励起分子反応制御のための放射光同期レーザー開発



(後列左から) QUEMA, Alex、鈴木さとみ、小野晋吾、長坂龍二郎、後藤昌宏
(前列) 猿倉信彦

3) 特殊波長レーザー開発研究部 (平等拓範助教授, 助手公募中)

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



(後列左から)高崎信吾、DASCALU, Traian、常包正樹、齊川次郎
(前列左から)石毛秀貴、平等拓範、石毛澄子、小野陽子、佐藤庸一

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。

今後は、レーザー光源のさらなる開発とともに、分子科学研究者とのより強い連携による新たな方法論の総合的開発を目指す。

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), 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), 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, シグナルアペレージャー, 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。

分子スケールナノサイエンスセンター

これまでの化学が扱ってきた分子は、およそ0.1 nmから数nmの大きさである。一方、コンピュータの頭脳であるCPUなどの電子回路を作るリソグラフィーの技術では10 nmを下回る構造を作ることが可能である。即ち、両方の手法を利用すれば、原理的には人類は原子レベルから、目に見え手に触れられる大きさまでのあらゆる“モノ”を、原子レベルの精度で作り出す技術を持っていることになる。しかし、実際上は分子で数nm以上のモノを合成することはいまだに困難であるし、リソグラフィーで100 nm以下の自由な構造を作ることとそれほど簡単なわけではない。モノ造りという観点で見ると、数nmから数百nmの範囲の大きさの物の合成・作成は未開のフロンティアであると言える。

また、このサイズ範囲では、光や電子が古典論的な振る舞いと量子論的な振る舞いの両方を示す可能性があり、これまでに知られていない化学、物理現象を見いだすことが期待でき、物性論的に見ても未開の地である。

こうした科学のフロンティアである「分子スケールナノサイエンス」を集中的に研究するために当センターが発足した。本センターは、規模において大部門に相当する3つの専任研究部門と1つの流動（客員）部門から構成されており、分子スケールナノ構造体の作成から、ナノ構造体の特異な化学反応性や物理的性質を体系的に研究する組織となっている。

また、本センターは、ナノサイエンスに特化した最新設備や、分子科学の研究に共通性の高い物性機器の集中管理、液体窒素・ヘリウムの供給なども行っている。

こうした体制の元で、分子研所内の共同研究だけでなく、所外・海外の様々な研究者との共同研究を進め、分子スケールナノサイエンスという新たな分野を確立することを目指している。

研究部門および研究内容は、以下の通りである。

分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門

1. 有機分子を利用したナノ構造体の作成とその電子物性の評価

現在の合成化学は、1 nm程度の大きさのものを作ることが得意であるが、10 nmを越える大きさのものを作ったり、より大きな（マイクロメートル程度以上）の構造体と精度高く繋げることが不得意である。一方、ナノテクノロジーのもう一つの潮流であるナノリソグラフィー技術は、大きなものから削ってゆくのだから、削る技術さえ進歩すれば高い精度で、全体としては大きな構造体（例えば大規模集積回路）を作ることが得意である。しかしその精度は最先端



（後列左から）小川琢治、田中啓文、荒木幸一、佐藤弘一、嶋田一裕
（前列左から）矢島高志、河尾真宏、小澤寛晃、水口英輔

の研究室レベルでもせいぜい6-7 nmに過ぎず、合成化学で可能な原子レベルの精度での加工は恐らく永遠に不可能であろう。もし、この二つの技術を繋げることができれば、原子レベルの精度で複雑な構造を持ちながら、有機分子・無機分子・金属・半導体・ナノクラスターが一体となった、1 nm程度の微小構造体から、目で見え手に触れる大きさまでの、ありとあらゆる多様な物質群ができることになる。こうした物質群は、これまでの物質・分子・構造体といった言葉が表す

概念を大きく変える可能性がある。こうした考え方が、ナノサイエンスという言葉から出てくる新しい概念の一つであると考え、分子ナノサイエンスと呼んでいる。分子ナノサイエンスの概念をより分かり易くする具体的なアイデアとして、分子スケール電子素子、分子スケール機械素子がある。我々のグループでは、この中で特に分子スケール電子素子にターゲットを絞って、下記のテーマで研究をしている。

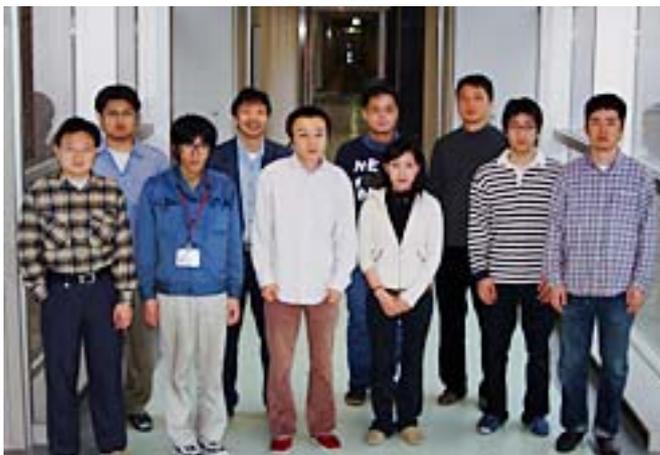
共役巨大分子の合成、解析法。 ナノギャップ電極を用いた少数分子の電気特性計測。 ナノギャップ電極中での、分子・ナノ粒子の自己組織化。 走査プローブ顕微鏡を用いた単分子電気伝導に最適化した分子の設計と合成。 新規走査プローブ顕微鏡の開発。 新規ナノリソグラフィ法の開発。

2. 電界効果トランジスター (FET) の作製と特性評価

有機半導体の真空蒸着膜あるいは電気化学堆積膜を用いたFETを作製し、キャリア注入・輸送機構を解明して高移動度素子の作製指針を導出する。

3. シリコン-炭素共有結合性ナノインターフェースの構築

シリコン基板上に分子を直接結合し、シリコン-炭素結合を起点とする分子組織体を構築し、信号の入出力インターフェースとしての特性を調べる。



(後列左から)西村知紘、夢田博一、藤原栄一、山田 亮
(前列左から)張發培、中尾 聡、高田正基、渡辺よう子、坂上 知、荒 正人

4. 分子エレクトロニクス素子のための有機半導体の開発

新しい電子物性を狙った分子物質開発のため、電子系有機分子の設計と合成を行う。特に、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電子輸送材料や有機トランジスタのためのn型半導体の開発を進めている。



(左から) 鈴木敏泰、阪元洋一

ナノ触媒・生命分子素子研究部門

1. 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。

2. 光合成を規範とする人工の物質変換システムの構築を目指して研究を進めている。具体的な研究テーマは以下の通りである。有機分子を用いて, 光励起電子移動と化学反応が組み合わさって進行する系を開発する。金属錯体などを反応場として, 電子移動によって駆動される触媒的物質変換反応を開発する。ナノメートルサイズの物質の電気化学的特性について調べ, 電子移動反応への展開をはかる。

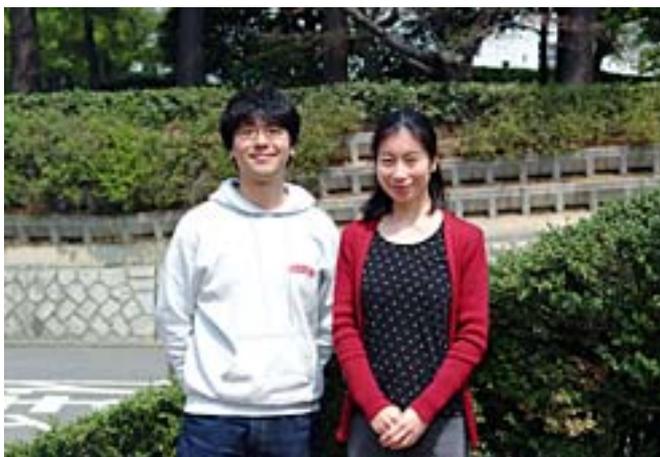
3. フラーレン部分構造を有するポウル型共役化合物(バッキーボウル)は, フラーレン類のモデルとしてだけでなく, ヘテロフルラーレン類の出発原料として, またそれぞれ自身の特異な物理的性質を利用した新規物質の基本骨格として魅力的な化合物群である。我々は, これらバッキーボウル・ヘテロフルラーレン類の「シンプル」かつ「エレガント」な合成経路を確立し, さらに合成した化合物の物性評価や錯体触媒への応用を目指している。



(後列左から) 木村将浩、竹中和浩、GUO, Haiqing、井川 舞、城口直子、皆川真規
(前列左から) 荒川孝保、鈴鹿俊雅、別府朋彦、山田陽一、魚住泰広



(左から) 永田 央、長澤賢幸、榎 優、菊澤良弘



(左から) 櫻井英博、城口直子

ナノ光計測研究部門

1. 表面反応ダイナミックスの研究

触媒反応や電子デバイスの微細加工など工業的に重要なプロセスも、一連の表面反応からなっており、これらの基礎となる表面反応ダイナミックスの解明は学術・応用の両面で重要である。本グループはフェムト秒領域の時間分解能を持った表面に鋭敏な様々な光非線形分光を開発し、これを用いて吸着分子のエネルギー散逸過程や表面化学反応のダイナミックスを明らかにすることを一つの研究の柱としている。また、不均一反応のメカニズムを知るには空間分解



(後列左から)鈴木優子、長尾昌志、松本吉泰、渡邊一也
(前列左から)冬木正紀、澤田 健、猪野大輔

能の優れた方法による実空間での直接観察が不可欠であり、原子分解能を持つ温度可変走査型トンネル顕微鏡による研究がもう一つの柱である。

2. 金属クラスターの創製と触媒機能

有機単分子膜で保護された単分散金属クラスターを調製し、その構造評価および機能探索を行っている。特に、数ナノ～サブナノメートルサイズの金属クラスターの特異的な構造に起因する新しい光学特性、触媒機能に主眼をおいている。気相クラスター実験技術を駆使して、機能の発現機構を分子レベルで理解することを目指している。



(左から) 佃 達哉、角山寛規、根岸雄一、白井千夏

先導分子科学研究部門（流動研究部門）

1．電子線コンプトン散乱による電子構造と衝突ダイナミクス

高速電子線と原子分子の相互作用の基礎過程を研究している。特に、我々が世界に先駆けて開発した（非弾性散乱電子・電離電子・解離イオン）三重同時計測装置による配向分子の電子線散乱実験や電子相関を最も直接的に反映する二重イオン化実験を中心に、光電効果によるイオン化と対比的なコンプトン散乱の物理をより詳細に理解し、従来とは異なる視点からの電子構造研究を目指している。



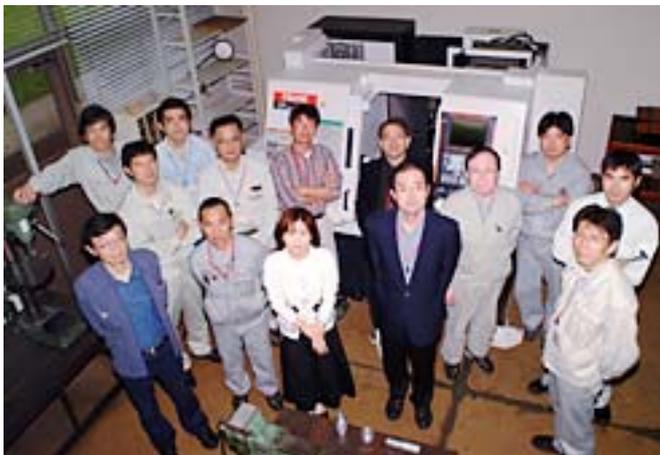
（左から） KHAJURIA, Yugal、高橋正彦、渡辺 昇、佐々木時代

2．高度に配向制御された有機積層膜を利用した表面・界面物性の研究

ナノサイエンス分野における様々な期待と要求から、有機分子を用いた新規な高機能デバイスの実用化へ向けての研究が活発となってきている。これらのデバイス特性は、構成している分子の種類（化学構造）のみならず、薄膜表面の構造（配向・配列）や電子状態に深く関連している。しかし一般的に、その構造の多様性から観測される現象の複雑化が生じ、物性を正確に理解することがしばしば困難となる。例えば、最近では有機・無機界面において観測される光電子スペクトル構造自体の正しい解釈すら問題となってきている。波長選択性、直線偏光性という優れた特性を持つシンクロトロン放射光による角度分解紫外光電子分光法は、こうした基礎物性を評価するうえで、極めて有効な手法のひとつとして知られている。我々は、ナノスケールレベルで高度に配向が規定された超薄膜試料を用いることで現象の単純化を狙い、こうした有機・無機界面に特有なスペクトル構造の線幅・形状の真の原因、ひいてはデバイス特性を支配すると考えられる表面・界面基礎物性を系統的に把握すべく研究を行っている。

装置開発室

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、技術開発、基盤技術育成の3構成で業務を行っている。



(後列左から)水谷伸雄、内山功一、矢野隆行
 (中列左から)青山正樹、宮下治美、吉田久史、宇理須恒雄、高松軍三、近藤聖彦
 (前列左から)永田正明、高松宣輝、浦野宏子、豊田朋範、鈴木光一

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。

技術開発では新しい発想の実験装置を、研究者と一体となって、新しい装置の要素技術開発を進めている。

基盤技術育成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、これらの総合力によって、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〕

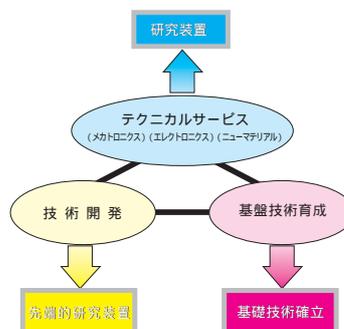
マシニングセンター(マキノBN1-85), NCフライス盤(マキノKGNCC-70), CNC旋盤(Mazak SQT100MY), ワイヤ放電加工機(三菱DWC90H, シャルミーROBOF1L2020SI), 形彫NC放電加工機(ソデックA35R), 電子ビーム溶接機(日本電気EWB), 3D測定顕微鏡(オリンパスSTM6DF), 他一般工作機械及びCAD・CAMシステムなど。

〔エレクトロニクス・セクション〕

プリント基板加工機(LPKF ProtoMat C60), スルーホール・メッキ装置(LPKF Model1010), ネットワーク/スペクトラム/インピーダンス・アナライザ(アジレントテクノロジー4396B), ロジック・アナライザ(テクトロニクスTLA5201), スペクトラムアナライザ(アドバンテストR3361B), デジタルオシロスコープ(レクロイ7200A), デジタル・フォスファ・オシロスコープ(テクトロニクスTDS3014B), LCRメータ(HP4275A)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。



極端紫外光研究施設

シンクロトロン放射光（SR）は、遠赤外から極端紫外，X線にわたる波長連続の強くて安定な“夢の光”であり，また，指向性，偏光性，パルス性といった数々の優れた特徴を持っている。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（1982年）から研究施設として独立した。（大型研究設備の項参照。）昭和59年（1984年）9月から所内外の利用実験を開始し，現在年間120件を超える研究課題申請があり，活発に利用研究が行われている（53頁参照）。



（後列左から）堀米利夫、小杉信博、彦坂泰正、持箸 晃、IM, Hojun、保坂将人、中村永研
 （中列左から）KWON, Yong-seung、近藤直範、山崎潤一郎、伊藤孝寛、鬼武尚子、繁政英治、萩原久代
 （前列左から）林 憲志、蓮本正美、木村真一、櫻井陽子、加藤政博、西 龍彦

研究分野は大きく分けて，7つ

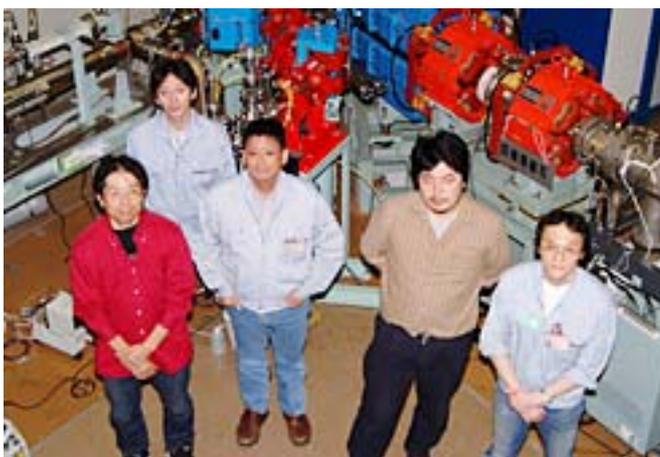
の分野に分類される（分野1：分光実験，分野2：光電子分光実験，分野3：光化学実験，分野4：化学反応素過程実験，分野5：固体・表面光化学実験，分野6：光励起新物質合成実験，分野7：顕微分光実験）。現在は，第一期の建設期，第二期の拡張期を経て，第三期目の再構築期になり，将来に向けての重要な時期となった。そのため，放射光分子科学の視点からの点検評価が行われると共に将来計画委員会などが開かれた。また，所外ユーザーを含むUVSORワークショップが毎年開かれ，各研究分野とビームラインの発展についての熱心な検討を行ってきた。その結果を踏まえ，光源加速器の高度化計画を立案するに至った。

幸いにして平成14年度予算において，UVSOR施設の光源性能を向上し，10年間程度の世界競争力を維持していくために立案された光源加速器の高度化計画（光源加速器の低エミッタンス化（高輝度化）と短直線部の増強）が認められた。建設後20年目の節目に高度化された新生リングは，UVSOR-IIと命名され，平成15年度後期より高輝度放射光が利用されている。高度化の性能を引き出すために計画されたアンジュレータラインBL3UとBL5Uの再構築は，現在その最終段階にある。平成16年度前半には本格的に稼働する予定であり，新生UVSORからの高輝度放射光を利用した世界的な研究成果が期待される。

高度化が無事完了したことを受けて，今後の施設における研究の重要性に鑑み，これまで長年用いられてきた極端紫外光実験施設という名称を極端紫外光研究施設に改めると共に，研究部制を平成16年度より導入することになった。光源グループは，光源加速器開発研究部と電子ビーム制御研究部からなり，光源加速器の安定な運転，維持・管理，及び性能向上に関する開発研究を行っている。観測グループは，光物性測定開発研究部，光化学測定開発研究部，及び放射光分光器開発研究部からなり，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（年間約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，新しい分光器や実験装置の設計，製作，調整および性能評価を行っている。

[光源加速器開発研究部、電子ビーム制御研究部] 加藤政博，保坂将人，持箸晃

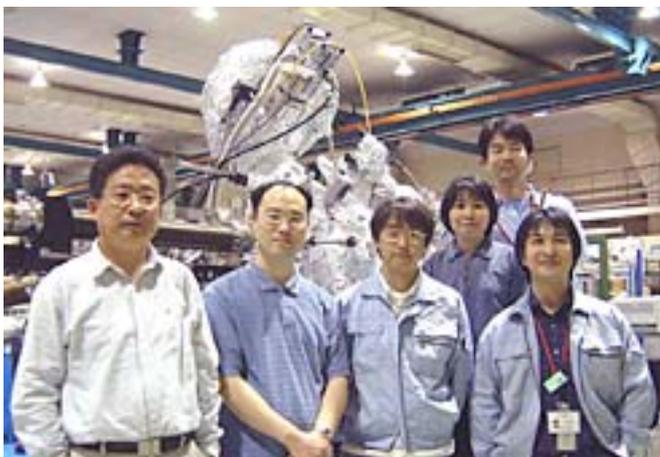
光源加速器の性能向上にかかわる開発研究を行っている。蓄積ビームの大強度化，高安定化，高輝度化，新しい挿入型光源の開発，導入などに取り組んでいる。また，自由電子レーザーやコヒーレント放射光など相対論的電子ビームを用いた様々な光発生法の開発研究，加速器技術の基礎となるビーム物理学研究などを行っている。



(後列) 林 憲志
(前列左から) 山崎潤一郎、加藤政博、保坂将人、持箸 晃

[光物性測定開発研究部] 木村真一，伊藤孝寛

有機伝導体・希土類化合物・遷移金属化合物などの電子相関の強い系やMBEで作成された強相関薄膜の，新奇物性の起源であるフェルミ準位近傍の電子状態の研究を，放射光を使った高分解能角度分解光電子分光や赤外・テラヘルツ顕微分光，磁気光学などを使って行っている。また，これらの研究を行うための，高分解能真空紫外分光器，極低温高分解能角度分解光電子分光装置，高輝度赤外・テラヘルツビームライン，テラヘルツ顕微分光装置，赤外磁気光学イメージング装置等の開発研究も行っている。



(後列) 西 龍彦
(中列) 櫻井陽子
(前列左から) KWON, Yong-seung、IM, Hojun、木村真一、伊藤孝寛

[光化学測定開発研究部] 繁政英治, 彦坂泰正

軟X線領域の放射光を用いた内殻励起分子に関する研究, 特に一光子の吸収により複数の電子が励起される多電子過程や, イオン性光解離反応の動力学的過程について, 海外の研究者も含めた共同研究を推進している。内殻励起状態の生成とその崩壊過程に関して様々な切り口で現象を捉えることを目指し, イオン性光解離反応における主たる生成物である電子や正イオンのみならず, 発光や負イオンなどのマイナープロダクトを絡めた同時計測法など新しい分光法の開発に重点を置いている。



(左から) 繁政英治、彦坂泰正

主な設備備品

[光源加速器]

15 MeV 線型加速器, 600 MeV シンクロトロン, 750 MeV ストレージリング, アンジュレータ, オプティカルクライストロン, 真空封止アンジュレータ

[観測系ビームライン (高度化後)]

BL1A 軟X線吸収分光装置, BL1B 固体真空紫外分光装置 (1), BL2B2 気体分光装置, BL3U 軟X線固体・気体分光装置, BL3B 気体光電子分光装置, BL4A 表面光化学反応装置, BL4B 軟X線固体・気体分光装置, BL5U 固体・表面光電子分光装置, BL5B 機器校正装置, BL6B フーリエ変換赤外・遠赤外分光装置, BL7U アンジュレータ光照射装置, 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 固体吸収測定装置, BL8B2 角度分解紫外光電子分光装置

錯体化学実験施設

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す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月に錯体触媒研究部門と錯体合成研究部門（流動）の2部門をもって開設され，昭和61年度に新たに配位結合研究部門（客員）を加え，平成元年度よりさらに錯体物性研究部門が新設された。錯体合成研究部門（流動）は平成12年4月に廃止となり，錯体化学実験施設は3部門となった。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

1．錯体触媒研究部門は専任教授（魚住）の分子スケールナノサイエンスセンターへの異動に伴い，同センター・ナノ触媒研究部門に密接に協力しつつ研究活動を展開しつつある。また客員部門においては「ナノクラスター分子の合成と機能（真島）」および「ルテニウム・ジオキソレン錯体の界面制御と水分子の活性化に関する研究（栗原）」に取り組んでいる。

錯体物性研究部門

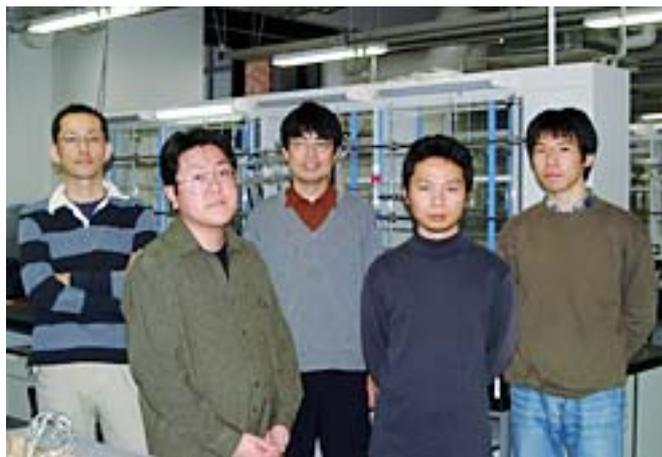
1．我々は酸化還元活性な配位子を導入した遷移金属錯体の特異な機能発現について研究を行っています。これまでに配位子により酸化還元電位を制御したオキソ金属錯体はオキソ配位子上にラジカルを誘起することを明らかにしました。この錯体は有機化合物の電気化学的酸化反応を触媒することが期待されます。有機化合物の電気化学的酸化反応は燃料電池の半反応であり，有機化合物の持つ化学エネルギーを電気量として外部回路に取り出すことが可能となります。また，我々は特定の金属錯体



（後列左から）東門孝志、宮里裕二、小泉武昭、水川哲徳、岡村 玲、
大津英揮
（前列左から）和田 亨、田中晃二、筒井香奈子、日野貴美

に配位した二酸化炭素が極めて容易に一酸化炭素へ変換されることを明らかにしており，この現象を利用した二酸化炭素の還元による有機化合物への変換を行っています。生成する有機化合物は燃料電池の原料であり，二酸化炭素の多電子還元は電気エネルギーを有機化合物に貯蔵したことになります。このような特異的な機能を有する金属錯体の開発により電気エネルギーと化学エネルギーの可逆的な相互変換が可能となり，その実現こそが地球規模での資源・環境保全に大きく貢献できるとの認識で研究を行っています。

2. 新しい配位化合物や有機金属化合物の合成, 構造, 反応性および結合や電子状態に興味をもち, 研究を行っている。現在, 混合金属カルコゲニドクラスターの合理的合成法の開拓, 金属錯体による小分子活性化, 多核金属錯体の合成と反応性に関する研究を進めている。



(後列左から)川口博之、張道、小室貴士
(前列左から)松尾司、赤木史生

配位結合研究部門(客員研究部門)

1. 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。

安全衛生管理室

平成16年4月、法人化に伴い安全衛生管理室が設置された。安全衛生管理室は、安全衛生統括代表者（所長）の指揮の下に、職場における職員の安全と健康を確保することを目的として、研究所における安全衛生の管理活動を充実し、労働災害を未然に防止するための業務を行っている。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



（後列左から）堀米利夫、高山敬史、田中彰治、加藤清則、山中孝弥、林 憲志

（前列左から）小川琢治、戸村正章、鶴田由美子、鬼武尚子

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。

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

本組織は、分子科学、基礎生物科学、生理科学の学際領域にまたがる諸問題に対し、総合的な問題意識と方法論を適用、駆使することによって、新しいバイオサイエンスを切り開く事を目的として設立された機構共通の研究センターで、生物諸科学、医科学のみならず、化学、物理学をも内包する研究課題をとり上げていく事が期待されている。岡崎の3研究所と連携を密にしながら、人事交流も含めた研究展開をはかり、研究課題は5年毎に見直すことになっている。

本センターの研究は、生命現象の基本に関する諸問題を分レベルから細胞、組織レベルまで統合的に捉える基礎研究を中心にする。具体的には、発生、分化、再生等の時系列に沿った生命現象、情報の発生、伝達、応答など生体分子の構造と機能の解明を図る戦略的方法論、生体を取り巻く環境因子とその応答など生命環境に関する諸問題、を各々中心課題とする3つの研究領域を置く。一研究領域は3人の専任教授と2～3人の助教授から成り、生命環境研究領域のみ客員教授と助教授が1人ずつついている。

センター長は平成15年4月から北川禎三教授が務めている。分子科学研究所からは、戦略的方法論研究領域に木下一彦教授、青野重利教授、藤井浩助教授、生命環境研究領域に北川禎三教授、そして客員研究部門に理化学研究所ゲノム科学総合研究センターの林崎良英教授が加わっている。

戦略的方法論研究領域

1. [分子生理グループ]

たんぱく質（あるいはRNA）の分子はたった1個で見事な機能を発揮するので、分子機械と呼ばれる。我々の目標は、生体分子機械の働く仕組みを探ることである。このために、光学顕微鏡の下で、分子機械1個1個が働く様子を直接観察し、さらに光ピンセットや磁気ピンセットといった道具を使って分子をつまんだり引っ張ったりする。すでに、回転モーター分子やリニアモーター分子など、分子モーターと呼ばれる分子機械の仕組みが分りはじめてきている。



（後列左から）城口克之、尾上靖宏、古池 晶、木下一彦
（中列左から）伊藤博康、HOSSAIN, Md. Delware、岡本哲明、榊 直由、足立健吾
（前列左から）昆 理恵子、神田律子、深津美紀子

2. 新規な機能を有する金属タンパク質の構造と機能の解明 [生物無機グループ]

近年、酸素、一酸化炭素等の気体分子が、生体系においてシグナル分子として機能することが分かり、注目を集めている。当研究グループでは、これらの気体分子が、生理的なシグナル分子として機能する場合に必要な不可欠なレセプター（センサー）タンパク質を対象に、研究を進めている。分子生物学的、および物理化学的な実験手法を駆使することにより、酸素センサータンパク質（HemAT）、および一酸化炭素センサータンパク質（CooA）による酸素、一酸化炭素センシング機構、シグナル伝達機構を明らかにし、それらの構造機能相関の解明を行なっている。さらに、新規なセンサータンパク質の探索も合わせて行なっている。



（後列左から）吉岡資郎、小林克彰、吉村英哲
（前列左から）稲垣さや香、谷澤三佐子、
青野重利

3. [生体物理グループ]

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。



（左から） 藤井 浩、 關目理人、 奥山健一、 倉橋拓也

生命環境研究領域

1. [生体分子グループ]

生体分子の構造と機能の相関を主に振動分光学の手法を用いて研究している。ピコ秒の時間分解能で蛋白質の動的構造を論じる研究や、酵素反応中間体の検出による反応メカニズムの議論まで生体分子科学を広くカバーしている。



(後列左から)平松弘嗣、長野恭朋、李江、PAL, Biswajit、呂明、
内田毅、久保稔、当舎武彦、太田雄大
(前列左から)水木寛子、MAHINAY, Myrna、北川禎三、磯貝美穂、
高影

計算科学研究センター

本センターは、前身である分子科学研究所電子計算機センターの設立以来4半世紀以上にわたり、分子科学に関わる計算科学研究センターとして分子科学および分子科学と生物科学の境界領域に対して計算科学研究の展開を図っており、文字どおり、我が国における理論分子科学分野の拠点計算機センターとして機能している。

このような歴史を踏まえつつ、現在では共同利用施設として進むべき二つの柱を据え、日々業務に励んでいる。第一番目のものは、分子科学を中心として全国に広がる研究者に対して行っている高性能ハードウェア、ライブラリ等の計算環境の提供である。平成16年4月現在、既に研究所内外の約150グループ、600名のユーザーにサービスを提供しており、この目的で、現在スーパーコンピュータシステムおよび汎用高速演算システムを運用している。

これらシステムにおける主なコンピュータは、(1) Fujitsu VPP5000 (30 PE; 288 GFLOPS; 256 GBメモリ)、(2) SGI SGI2800 (192 CPU; 115 GFLOPS; 192 GBメモリ)、Origin3800 (128 CPU; 102 GFLOPS; 128 GBメモリ)、(3) NEC SX-7 (32 CPU; 282 GFLOPS; 256 GBメモリ)、(4) NEC TX-7 (64 CPU; 332 GFLOPS; 256 GBメモリ)である。さらに、機構内利用者向けの高速シミュレーションシステムとしてHitachi SR8000F1 (6ノード; 72 GFLOPS; 96 GBメモリ)も稼働している。

第二番目は、単なる計算環境の提供にとどまるのではなく、物質に関わる計算科学分野における学術的発展そのものに中心的役割を果たしていくことである。このため、すでに平成15年度に発足した我が国のナショナルプロジェクトである文部科学省「超高速コンピュータ網形成プロジェクト」においては、理論分子科学研究系、計算分子科学研究系とともに、グリッドコンピューティングに基づいた「ナノサイエンス実証研究」を担当し、他大学、共同利用機関等と共同して研究グループを全国的に組織し、その中核研究センターとして活動してきている。

このプロジェクトで用いるグリッドコンピューティングシステムとして、(1) Hitachi SR11000 50ノード (800 way; 5.4 TFLOPS; 3 TBメモリ)、(2) Hitachi HA8000/110H9 449ノード (898 CPU; 5.4 TFLOPS; 1.7 TBメモリ)の運用を開始した。



(後列左から)大野人侍、皿井宏昌、佐藤昌宏、水谷文保、内藤茂樹、南野 智、澤 昌孝、矢崎稔子、吉井範行
(中列左から)戸谷明子、岡 沙佑美、川口律子、明石志保子、中岡由美子、池田由佳子、山田篤志、禿子 瞳、手島史綱
(前列左から)高見利也、松田成信、永瀬 茂、岡崎 進、森田明弘、南部伸孝、三浦伸一、三上泰治、岩橋建輔

技術課

分子科学研究所は、昭和50年に創設され、同時に、技術分野での研究支援を目的として技官を組織した技術課が発足しました。技術課は所長直属であり、各個人のもつ高い専門的技術により研究者が研究しやすい環境をつくり、研究に専念できるように支援しています。

具体的には、高度な知識を要求される共通実験機器および施設・設備の維持管理、機械・電子回路・理化学ガラス工作、プログラミングなどの専門的技術で直接に支援する、研究所の安全衛生管理、ネットワークの運用管理、ホームページや各種印刷物を媒体とした広報活動、見学の受け入れ対応などです。見学受け入れは研究所を直接紹介するための有効な手段です。

技術課の役割は研究の動向により変化していくので、特定技術に固定化しない、柔軟な技術支援体制を構築していきます。また、研究しやすい環境を作るためには、受付も重要になります。来訪者への窓口としての役割だけでなく、所内の研究者の窓口として機能していくようにしています。

技術課では研究の動向、高度化する技術に対応するために、特に、外部の技術者との交流を通して常に技術の向上を目指しています。

(1) 技術研究会

技術課発足時より、外部技術者組織との技術交流の場として、専門的技術の交流の意味で研究会を開催してきました。その研究会の特徴は、いろいろな失敗を積極的に発表することです。つまり、「新しいことを行うのだから当然失敗はあります。それらの失敗を公開して共有することで、同じ過ちを繰り返さないことができるのです。また、失敗のなかには将来の新しい技術の芽が隠れていることもあります」という積極的な意味を持っています。そのような趣旨で始まった小さな技術研究会も今では、数百人規模の大きな研究会に成長しています。

(2) 人事交流

分子科学研究所と他の大学共同利用研究所や大学の技術者同士が、数年間所属を移して業務を行っています。それぞれの機関で発展させ、機関固有の技術になっている技術を会得することで、技術者個人の技術の幅を広げ、その個人の交流を通して組織の交流を図るために行っています。

(3) 技術研修

分子科学研究所では、大学などの技術者を短期間だけ受け入れて、共同作業を行ったり相互に技術教育を行い技術向上を図っています。

2004年4月1日、国立の大学共同利用研究所から大学共同利用機関法人に組織が変わり、5研究所が統合した自然科学研究機構が発足しました。その結果、各研究所の技術者組織は互いに密接な関係を持つことになりました。特に岡崎に設立されている分子科学研究所・基礎生物学研究所・生理学研究所の3研究所の技術課は、設備の維持管理や安全衛生の分野で協力・共同して対処していくこととなります。それらの協力関係は今後さらに深まっていくことでしょう。



(前列左から) 杉山加余子、大原恭子、加藤清則、鶴田由美子、中村理枝

他の人は各研究部門、付属施設の欄参照

大型研究設備

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RGA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。

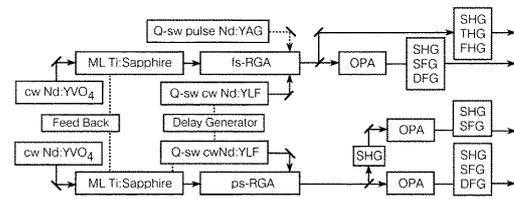


図1 ブロック図

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

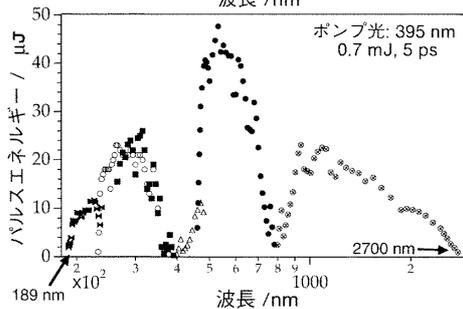
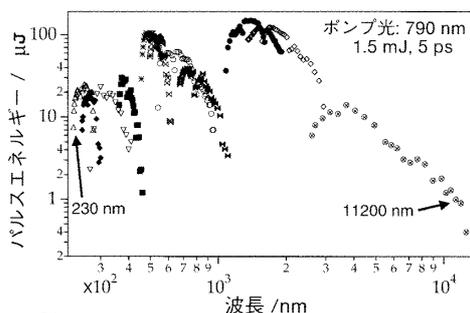
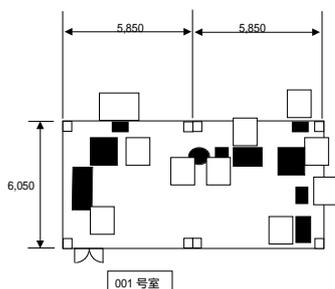


図2 ピコ秒OPAの波長域
基本波励起(上)
二倍波励起(下)

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)



分子スケールナノサイエンス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

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
- 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)
- 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%
 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)
- 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

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スケールナノサイエンス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。

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

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は遠赤外から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月から所内外の施設利用実験を開始し、数多くの研究が進行している。

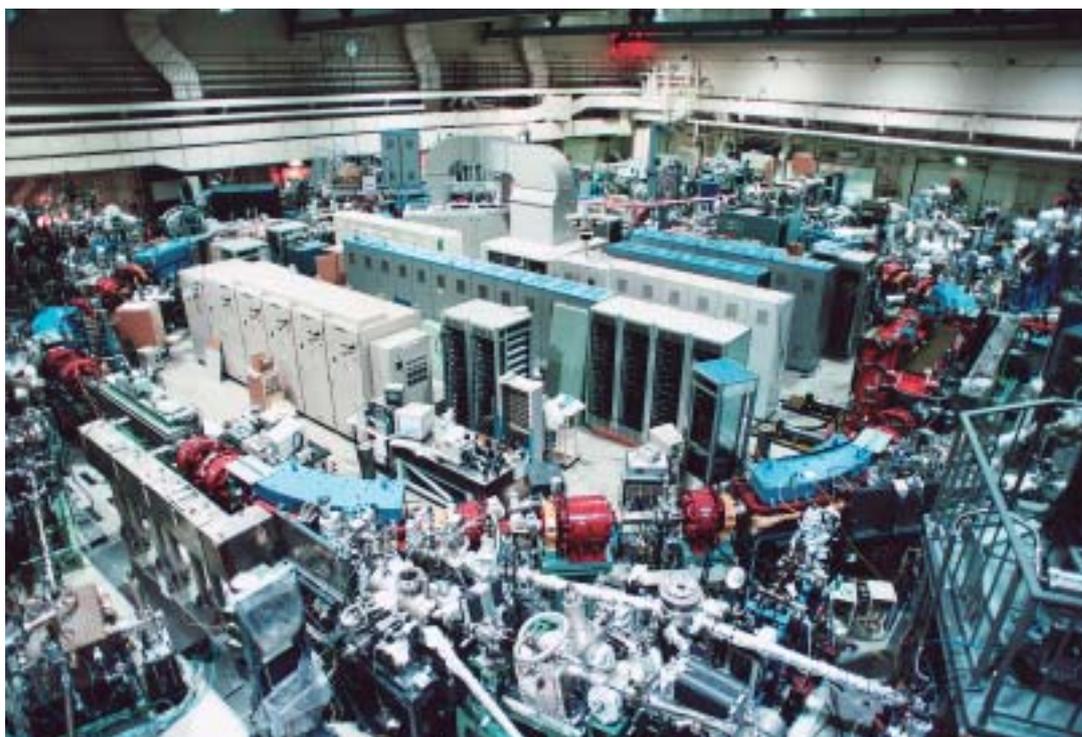
この極端紫外光源 (ニックネーム、UVSOR) 本体は、750 MeVの電子ストレージング (最高貯蔵電流、500 mA) であり、その入射器は15 MeVの線型加速器を前段加速器とする600 MeVのシンクロトロンである。通常の偏向部では波長数 μm までの極端紫外光が利用できる。アンジュレータと呼ばれる挿入光源を直線部に挿入したビームラインでは、波長可変で、より高輝度の準単色光を利用することができる。研究の対象は気相及び凝縮相であり、主として次の7つの分野に力点を置いている。

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、顕微分光実験。

現在建設、改造中のものも含めて16本のビームライン (観測システム) が存在し、それぞれ以下のような実験を行うことが出来る。

BL1A: 軟X線吸収分光, BL1B: VUV固体分光, BL2B2: EUV気体分光, BL3U: 軟X線気体・固体分光, BL3B: VUV気体分光, BL4A1: 軟X線分光照射表面反応, BL4A2: 放射光照射表面反応, BL4B: 軟X線気体・固体分光, BL5U: 固体・表面高分解能光電子分光, BL5B: 機器校正及びEUV固体分光, BL6B: 赤外・テラヘルツ固体分光, BL7U: 軟X線照射表面反応STM観察, BL7B: VUV固体分光, BL8A: 放射光照射, BL8B1: 軟X線気体・固体分光, BL8B2: EUV固体・表面光電子分光

平成14年度に電子ストレージングの高度化予算が認められ、直線部の増強と低エミッタンス化の実現を目指した大改造が開始された。建設後20年目の節目に高度化される新生リングは、UVSOR-IIと命名され、平成15年9月より高輝度放射光が利用されている。



岡崎 IMS コンファレンス

Okazaki IMS Conference 2003

International Symposium on Functional Clusters and Cluster-Based Nano-Materials
機能性クラスターとクラスターを用いたナノ物質の構築

開催日 2003年12月15日～18日
提案代表者 分子科学研究所 西 信之

数個から数百個程度の原子で構成されるクラスター・ナノ粒子はサイズ特異的な性質を示すことから、次世代機能材料の基本物質として大きな注目を集めている。本シンポジウムでは、国内外の第一線の研究者とともに、学問分野や領域を横断した視点から、以下のテーマについて現状と将来への展開についての議論が行われた。

気相クラスターの熱力学的性質，気相クラスターの幾何学的構造および電子構造，クラスターの化学反応性，分子クラスターの構造と反応動力学，担持クラスター，クラスターの磁気的性質とナノ単磁区磁石，ナノ粒子とナノクラスター。

最初に、ペンシルバニア州立大学のキャッスルマン教授による「クラスターの反応と物性：クラスターを素材とする物質系の構築を目指して」という題名で基調講演がなされた。教授は、特に炭素を含むナノ金属合金系の構築に対するアプローチに関する研究を詳しく紹介された。次に、カナダのシマード博士が、「機能性物質の創製へ向けた遷移金属クラスターの気相および液相合成」という題名で、高分子中に酸化鉄のクラスターを分散させたり、金と銀との混合クラスターの液相合成に関して興味深い報告を行った。ドイツのフライブルグ大学のハバーランド教授は、ナトリウム的大型クラスターのサイズ効果をしらべ、その熱力学的性質がサイズの変化によって大きく変わることを、また、サイズ次第では負の熱容量を示すことを報告した。インディアナ大学のジャロルド教授は20個から40個の塩化ナトリウムクラスターのナトリウムイオン付加体について、その構造と結合エネルギーのサイズ依存性について実験と理論的な解析を紹介した。ジョンホプキンス大学のボウエン教授はアルミニウム、ニッケルの負イオンクラスターのイオン化ポテンシャルおよび磁気双極子モーメントのサイズ依存性について詳細な内容を報告した。ワシントン州立大学のワン教授は、金の平面クラスターについて大変興味深い研究を報告した。金のような金属でも、炭素化合物と同様な芳香族性を示すこと、そして、それが車輪のような構造を有することを紹介した。ジョージア工科大学のウエッテン教授は、炭素76ナノ電極や球状スーパーシェル構造を持つ銀クラスターのナノキャパシタ特性を紹介した。また、同じ大学の物理学教室のランドマン教授は幾つかの金属や半導体クラスターあるいはナノワイヤーの電気的性質についてエネルギー的あるいはエントロピー的な立場からの考察を発表した。これに加えて、茅幸二を始めとする9名の日本人研究者がそれぞれ独創性の高い研究を発表し、高い評価を得た。また、52件の若い研究者によるポスター発表があり、遅くまで議論が続いた。我が国のクラスター研究の周知とレベル向上に大きな成果があった。

PROGRAM

December 15 (Monday)

- 8:50 – 9:00 **K. Kaya** (Director General, IMS) Welcome Greeting
- 9:00 – 9:50 **A. W. Castleman** (Pennsylvania State University)
Cluster reactions and properties: Laying the foundation for cluster assembled materials
- 9:50 – 10:35 **B. Simard** (National Research Council of Canada)
Transition metal clusters in the gas phase and in solutions—Towards the fabrication of functional materials
- 10:50 – 11:35 **H. Haberland** (University of Freiburg)
Experimental thermodynamics of small systems: Melting and boiling of clusters
- 11:35 – 12:20 **M. F. Jarrold** (Indiana University)
Melting of clusters and nanocrystals
- 13:40 – 14:25 **K. Kaya** (IMS)
Cluster science in Keio: Creation and development of cluster chemistry
- 14:25 – 15:10 **M. Kappes** (Universitat Karlsruhe)
Physical and chemical properties of coinage metal clusters
- 15:10 – 15:55 **J. H. Parks** (Rowland Institute at Harvard)
Electron diffraction of trapped metal clusters
- 16:15 – 17:00 **K. H. Bowen** (Johns Hopkins University)
Photoelectron spectroscopy of cluster anions
- 17:00 – 17:45 **L. -S. Wang** (Washington State University)
Planar clusters: from aromaticity to molecular wheels
- 17:45 – 18:05 **A. Nakajima** (Keio University)
Photoelectron spectroscopy of binary cluster anions
- 18:05 – 18:25 **A. Terasaki** (Toyota Institute of Technology)
Laser spectroscopy of free, trapped, and deposited cluster ions

December 16 (Tuesday)

- 9:00 – 9:45 **T. Kondow** (Toyota Institute of Technology)
Size-dependent physical and chemical properties of metal clusters
- 9:45 – 10:30 **P. Armentrout** (University of Utah)
Bond energies of molecular fragments to transition metal clusters
- 10:50 – 11:35 **R. L. Whetten** (Georgia Institute of Technology)
Selected gold and metal-oxide clusters as model low-temperature oxidation catalysts
- 11:35 – 12:20 **A. Rosen** (Göteborg University)
Molecular dynamics study of catalysed carbon nanotube growth within the vapor-liquid-solid model
- 13:30 – 14:15 **J. M. Farra** (University of Rochester)
Size-dependent electron density redistribution in polar solvent-alkaline earth cluster ions
- 14:15 – 14:35 **F. Misaizu** (Tohoku University)
Excited state charge-transfer process and dissociation dynamics of Mg^+ -methyl halide complexes
- 14:35 – 14:55 **K. Fuke** (Kobe University)
Electronic properties of hypervalent clusters
- 15:15 – 16:00 **S. K. Kim** (Seoul National University)
Conformation dependent structure and dynamics of amino acid and its clusters
- 16:00 – 16:20 **M. Fujii** (Tokyo Institute of Technology)
Picosecond time-resolved IR spectroscopy on 7-azaindole dimer—Bridge from cluster to solution
- 16:20 – 16:40 **H. Sekiya** (Kyushu University)
Excited-state double proton transfer dynamics in deuterated 7-azaindole dimers studied by hole-burning spectroscopy
- 16:40 – 17:00 **A. Fujii** (Tohoku University)
Infrared spectroscopy of large sized water containing cluster cations: Development of the three-dimensional hydrogen bond network with the cluster size
- 17:00 – 19:00 **Poster Session**

December 17 (Wednesday)

- 9:00 – 9:45 **U. Landman** (Georgia Institute of Technology)
Small is different: self-selection, assembly, and non-scalable evolution of nanoclusters
- 9:45 – 10:05 **J. Murakami** (National Institute of Advanced Industrial Science)
Low-temperature activation and direct oxidation of dinitrogen on supported tungsten nanoclusters
- 10:25 – 11:10 **C. Brechignac** (CNRS)
Nanosystems from cluster deposition: formation, stability and organization
- 11:10 – 11:55 **M. Broyer** (CNRS and Universite Lyon)
Clusters on surfaces and embedded in matrix: organization, optical properties and dynamics
- 13:10 – 13:55 **M. B. Knickelbein** (Argonne National Laboratory)
Toward molecular magnetic materials: Molecular beam characterization of magnetic clusters and complexes
- 13:55 – 14:15 **N. Nishi** (IMS)
Air-stable Fe nanoparticles and nanorods with graphitic carbon-skins
- 14:15 – 14:35 **T. Yamase** (Tokyo Institute of Technology)
Quantum tunneling of magnetization of VO^{2+} -triangle-containing polyoxotungstates and self-assembly of polyoxo-molybdates and -tungstates to nano-ring superclusters
- 14:35 – 14:55 **K. Sumiyama** (Nagoya Institute of Technology)
Composite state control of two different clusters *via* gas phase
- 15:15 – 16:00 **D. J. Schiffrin** (University of Liverpool)
Functionalised nanoparticles and molecular linkers: optical and electrical properties
- 16:00 – 16:45 **J. Cheon** (Yonsei University)
Novel anisotropic inorganic nanocrystals: diamonds, wires and stars
- 16:45 – 17:05 **T. Teranishi** (Advanced Institute of Science and Technology)
Planar patterning of gold nanoparticles for nanoelectronic devices
- 17:05 – 17:25 **T. Tsukuda** (IMS)
Photochemical and photophysical properties of subnanometer-sized gold clusters
- 17:25 – 17:35 **N. Nishi** Closing Address

共同研究

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、旅費及び校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。

平成15年度

課題研究

課題名	提案代表者名
高速時間分解分光法による孤立分子および分子集合体のフォトクロミック機構の研究	関谷 博(九大院理)
末端酸素酵素の高酸化状態反応中間体の構造化学	北川 禎三(総研カハセンター)
内殻励起における交換相互作用とスピン軌道相互作用	小杉 信博(分子研)
自由電子レーザーの短波長化とその応用	加藤 政博(分子研)
固体表面上の生体分子認識反応系の構築と構造解析	宇理須恆雄(分子研)

協力研究

「タンパク質の折り畳みに対する溶媒効果の分子論的研究」を始め101件

研究会

研究会名	提案代表者
固体表面における非熱的電子励起状態の化学	山下 晃一(東大院工)
単純系から複雑系にわたる凝集系振動緩和ダイナミクス研究の現状と展望	江幡 孝之(東北大院理)
生体関連分子の水素結合とダイナミクスの新展開	関谷 博(九大院理)
分子科学研究のフロンティア	寺嶋 正秀(京大院理)
2003年度若手分子科学研究者のための物理化学研究会	大野 公一(東北大院理)
ロドプシンの分子科学	神取 秀樹(名工大工)
生体分子ダイナミクスと機能・立体構造形成研究会	北尾 彰朗(東大分子細胞生物研)
ナノ反応場におけるサイズ効果	真船 文隆(東大院総合文化)

施設利用

1. 機器利用

「中間スピンを有するポルフィリン鉄(III)錯体に関する研究」を始め54件

2. 計算機利用

「固体メタンおよび水の物性」を始め120件

UVSOR施設利用

「水熱合成したゼオライト系多孔体材料のXAFSによる局所構造解析」を始め129件

国際共同研究

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員を受け入れ、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。このような背景を基に、分子科学研究所は1994年以降、分子研リポートに置いて多国間国際共同研究協力事業の必要性を指摘してきた。

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、新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。しかし、従来の国際共同事業は殆ど二国間に限られており、グローバルな国際共同研究を機動的に推進するためには必ずしも適していない。1994年の提言から10年を経た本年度、分子科学研究所は「物質分子科学」、「光分子科学」、「化学反応ダイナミックス」の3つの重点分野について、多国間国際共同研究の推進プログラムを自主的に試行し、分子科学研究所を中心とした分子科学分野の国際共同研究の輪を広げる試みを開始した。具体的には、本年度この国際共同研究の実施要項の整備を進めると共に、研究所内の教員による国際共同研究の提案を受け、試行的に7件の共同研究計画を採択した。中国および韓国の若手研究者の長期（6ヶ月）滞在やフランス、ドイツ、イタリア、スウェーデン等からの約8名の研究者の短期訪問による共同研究の推進が予定されている。一方、研究所の独自の努力で遂行できる共同研究の範囲には限界がある。今後、国際共同研究プログラムを更に拡充し、定着させていく事が重要であり、引き続き予算的裏付けを求めていく必要がある。

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、2001年1月に分子科学研究所で開いた第9回シンポジウム「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」に引き続き、第10回シンポジウム「理論化学と計算化学：分子の構造、性質、設計」が2003年1月12日 - 15日に韓国のPohang大学で開催され、盛況の内に終了した。次回の第11回シンポジウムは2005年度中に分子科学研究所で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、2003年度も3名の招へいを実施した。

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、有機固体化学、化学反応動力学、レーザー化学、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、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月に岡崎で開催する予定である。

総合研究大学院大学

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。そして平成13年4月には小平桂一前国立天文台長が第三代学長に、高畑尚之同大学先導科学研究科長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14年度までに187名（外国人23名、編入者2名を含む）の学生を受け入れ、さらに平成15年4月には、10大学から11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129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15年度前期16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。

大学院教育協力

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52-平6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
北海道大学	10										
室蘭工業大学	2										
東北大学	11				1	1					
山形大学					6						
筑波大学					1		1				
宇都宮大学									2	2	
群馬大学	1										
埼玉大学	2										
千葉大学				1	1	1		1	1		
東京大学	28		1	1	1						
東京工業大学	17	3	4						4	5	2
お茶の水女子大学	6										
横浜国立大学	1										
新潟大学	4										
金沢大学	3		3	3			1	1			
福井大学	2	1	1		1	1	2				
信州大学	2			1				1			
岐阜大学	2										
名古屋大学	57	1	3	3	3	1	2	5	2	2	
名古屋工業大学	6				1	4	3	1			2
豊橋技術科学大学	30										2
三重大学			2	2	2	1					
京都大学	22	4	4	2	2	1	2	1	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	2	1	1								
島根大学									1		
岡山大学	7	2	1	1				2	1		
広島大学	25	6	1			1	1		2	1	1
山口大学	1										
愛媛大学	3									5	1
高知大学	2										
九州大学	33		1	2	1	1	2	2	1	1	
佐賀大学	12	1									
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											2
東京都立大学	17							3			2
名古屋市立大学							4				
大阪市立大学	3					1					
大阪府立大学									1		
兵庫県立大学								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		
東京理科大学					1	1		1		1	1
東邦大学			1				1	1			
星薬科大学	1										
早稲田大学	1		1	5	2			1	1	1	1
名城大学				2	2						
計	356	19	25	27	28	17	25	24	20	18	16

国際交流

海外からの研究者（平成15年度）

1. 評議員

GRAHAM, R. Fleming アメリカ カリフォルニア大学バークレー校教授 16. 2.14-16. 2.21

2. 外国人客員研究部門

GANGAVARAPU, Ranga Rao インド インド工業大学マドラス校助教授 14. 8. 1-15. 7.31
SOLOVJEV, Evgeni マケドニア マケドニア科学アカデミー教授 14. 9. 1-15. 6.30
KUMAR, Krishna, Subbarao Venkata インド タタ基礎科学研究所助教授 15. 1.22-15. 6. 3
DAS, Puspendu Kumar インド インド科学研究所教授 15. 6.15-15. 9.14
MORGUNOV, Roman ロシア 固体物理学研究所主任研究員 15. 7. 1-16. 3.31
VAROTSIS, Constantinos ギリシャ クレタ大学準教授 15. 7. 3-15.10. 2
DROZDOVA, Olga ロシア ヨッフェ物理工学研究所上級研究員 15. 8. 1-16. 7.31
HOLOVKO, Myroslav ウクライナ ウクライナ科学アカデミー凝縮系物理学研究所部門長 15. 9.16-15.12.31
KWON, Yong-Seung 韓国 成均館大学教授 15.10. 3-16. 9. 2
PULAY, Peter アメリカ アーカンソー大学教授 16. 1. 1-16. 5.31

3. 文部科学省外国人研究員

ISHKHANYAN, Artur アルメニア アルメニア科学アカデミーエンジニアリングセンター研究部門長 15. 6.20-15.12.20
YOON, Cheol Min 韓国 高麗大学教授 15. 6.20-15. 8.20
15.12.24-16. 2.24
KIM, Younkyoo 韓国 ハンクック外国語大学教授 15. 6.24-15. 8.23
15.12.23-16. 2.21
YI, Jonghoon 韓国 ヨンナム大学助教授 15. 6.24-15. 8.20
15.12.23-16. 2.19
WANG, Zhe-Ming 中国 北京大学助教授 14. 7.21-15. 7.20

4. 日本学術振興会招へい外国人研究者

LU, Jing 中国 北京大学教授 13. 9.14-15. 9.13
KONDORSKIY, Alexey ロシア モスクワ物理工科大学レベデフ物理研究所大学院生 13.11.15-15.11.14
LEE, Ha-Jin 韓国 Hanyang 大学博士研究員 14. 6.15-16. 6.14
SLANINA, Zdenek チェコ 台湾中央研究院客員教授 14.11.28-15. 9.28
ERINGATHODI, Suresh インド Central salt and marine Chemical Research Institute 14.11.25-15.11.24
KJAERGAARD, Henrik Grum デンマーク ニューージーランドオタゴ大学助教授 15.10. 1-15.11.29
PAL, Biswajit インド アラバマ大学博士研究員 13.11.15-15.11.14
WALKER, Gilbert Creighton アメリカ ピッツバーグ大学準教授 15. 4.13-16. 1.12
MAHINAY, Myrna Sillero フィリピン MSU - イリガン工科大学教授 15. 6. 3-17. 6. 2
BERTINI, Ivano イタリア フィレンツェ大学教授 15. 7.30-15. 8.24
TOMAN, Petr チェコ チェコ科学アカデミー高分子化学研究所研究員 15.10.31-15.11.14
ZHAO, Yi 中国 カリフォルニア大学バークレー校博士研究員 15.11. 2-17.11. 1

5 . 国際シンポジウム

BROYER, Michel	フランス	リヨン大学教授	15. 12. 12-15.12.19
CASTLEMAN, Albert Welford Jr.	アメリカ	ペンシルバニア州立大学教授	15. 12. 12-15.12.19
SCHIFFRIN, David J.	イギリス	リバプール大学教授	15. 12. 12-15.12.19
SIMARD, Benoit	カナダ	カナダ研究委員会上級研究員	15. 12. 12-15.12.19
BOWEN, Kit H. Jr.	アメリカ	ジョンズ・ホプキンス大学教授	15. 12. 13-15.12.18
BRECHIGNAC, Catherine	フランス	国立中央理科学研究所教授	15. 12. 13-15.12.18
JARROLD, Martin F.	イギリス	インディアナ大学教授	15. 12. 13-15.12.18
KAPPES, Manfred	ドイツ	カールスルーエ大学教授	15. 12. 13-15.12.18
KNICKELBEIN, Mark B.	アメリカ	アルゴンヌ国立研究所研究員	15. 12. 13-15.12.18
LANDMAN, Uzi	アメリカ	ジョージア工科大学教授	15. 12. 13-15.12.18
PARKS, Joel H.	アメリカ	ローランド研究所主任研究員	15. 12. 13-15.12.18
WANG, Lai-Sheng	アメリカ	ワシントン州立大学教授	15. 12. 13-15.12.18
ARMENTROUT, Peter B.	アメリカ	ユタ大学教授	15. 12. 13-15.12.19
FARRAR, James M.	アメリカ	ロチェスター大学教授	15. 12. 13-15.12.19
HABERLAND, Helmut	ドイツ	フライブルグ大学教授	15. 12. 13-15.12.19
ROSÉN, Arne E.	スウェーデン	イエーテボリ大学教授	15. 12. 13-15.12.19
WHETTEN, Robert L.	アメリカ	ジョージア工科大学教授	15. 12. 13-15.12.19
KIM, Seong Keun	韓国	ソウル国立大学教授	15. 12. 14-15.12.18
CHEON, Jinwoo	韓国	ヨンセイ大学助教授	15. 12. 16-15.12.18
KLAUS, Müller-Dethlefs	ドイツ	ヨーク大学教授	15. 12. 17-15.12.18

6 . 科学研究費

LU, Ming	中国		15. 9. 2-15. 9.30
GAO, Ying	中国		15. 9.15-15. 9.30
SIMONYAN, Mkhitar	アルメニア	科学アカデミー物理学研究所主任研究員	15.10.22-16. 3.27
STEPANE, Josef	チェコ	Charles 大学教授	15.11.18-15.12. 3
VAROTSIS, Constantinos	ギリシャ	クレタ大学準教授	15.11.29-15.12.19
MARKOSYAN, A. S.	ロシア	M. V. Lomonosov Moscow 州立大学教授	15. 12. 4-16. 3. 4
RAO, Venigalla Basaveawara	アメリカ	アメリカカトリック大学教授	15. 12. 10-15.12.15
MARKOSYAN, A. S.	ロシア	M. V. Lomonosov Moscow 州立大学教授	16. 1. 5-16. 1. 9
BENNAIM, Arieh	イスラエル	ヘブライ大学教授	16. 2.27-16. 3.12

7 . 未来開拓学術研究費

KAPPES, Manfred	ドイツ	カールスルーエ大学教授	15. 12. 12-15.12.19
BROYER, Michel	フランス	リヨン大学教授	15. 12. 12-15.12.19
SIMARD, Benoit	カナダ	カナダ研究委員会上級研究員	15. 12. 12-15.12.19
CASTLEMAN, Albert Welford Jr.	アメリカ	ペンシルバニア州立大学教授	15. 12. 12-15.12.19
BOWEN, Kit H. Jr.	アメリカ	ジョンズ・ホプキンス大学教授	15. 12. 13-15.12.18
LANDMAN, Uzi	アメリカ	ジョージア工科大学教授	15. 12. 13-15.12.18
ARMENTROUT, Peter B.	アメリカ	ユタ大学教授	15. 12. 13-15.12.19
WHETTEN, Robert L.	アメリカ	ジョージア工科大学教授	15. 12. 13-15.12.19
ROSÉN, Arne E.	スウェーデン	ゴートブルグ大学教授	15. 12. 13-15.12.19
KIM, Seong Keun	韓国	ソウル国立大学教授	15. 12. 14-15.12.18
CHEON, Jinwoo	韓国	ヨンセイ大学助教授	15. 12. 16-15.12.18
KLAUS, Müller-Dethlefs	イギリス	ヨーク大学教授	15. 12. 17-15.12.18

8 . 科学技術振興調整費

PAVEL, Nicolaie	ルーマニア	レーザーとプラズマ物理国立研究所上級研究員	15. 5.27-15. 8.31
LUPEI, Voicu	ルーマニア	レーザーとプラズマ物理国立研究所教授	15. 7.31-15. 9. 1

9 . 招へい協力研究員

SALMAN(Zamik), Rosenwaks	イスラエル	Ben-Gurion Univ. of the Negev 教授	15. 4.22-15. 4.23
HEINRICH, Rohrer	ス イ ス	元IBMフェロー	15. 5.27-15. 5.29
TIM, P. Softley	イギリス	オックスフォード大学教授	15. 6.16-15. 6.17
CHRISTOF, Woell	ド イ ツ	Physical Chemistry Ruhr-Univ.Bochum 教授	15. 7.25-15. 7.26
NESPUREK, Stanislav	チ ェ コ	チェコ科学アカデミー高分子研究所教授	15. 8. 5-15. 8.25
NESPURKOVA, Jana	チ ェ コ	チェコ科学アカデミー高分子研究所研究員	15. 8. 5-15. 8.25
CARR, G. Lawrence	アメリカ	ブルックヘブン国立研究所研究員	15.10. 2-15.10. 3
GEL' MUKHANOV, Faris	スウェーデン	王立工科大学教授	15.10.25-15.10.27
OHRWALL, Gunnar	スウェーデン	ウプサラ大学講師	15.10.25-15.10.27
鄭 誠虎	フランス	モンペリエ第2大学博士研究員	15.12.31-16. 1. 9
MUSSO, Maurizio	オーストリア	ザルズバーク大学助教授	16. 1. 7-16. 1. 7
ZHANG, Tieqiao	アメリカ	The Univ. of Texas at Austin 博士研究員	16. 1.17-16. 1.29
BYER, L. Robert	アメリカ	スタンフォード大学教授	16. 1.28-16. 1.31
ROMAIN, Gaume	アメリカ	スタンフォード大学大学院生	16. 1.28-16. 1.31
JEFFREY, Wisdom	アメリカ	スタンフォード大学大学院生	16. 1.28-16. 1.31
MANDON, Dominique	フランス	ルイパスツール大学国立研究所主任研究員	16. 2. 2-16. 2. 3
PALACIO, Fernando	スペイン	Zaragoza 大学教授	16. 2.13-16. 2.15
CHEN, Kuo-mei	台 湾	National Sun Yat-sen Univ. 教授	16. 3. 7-16. 3.11
LEE, Yuan-Pern	台 湾	National Tsing Nua Univ. 教授	16. 3. 7-16. 3.11
CHANG, Bor-chen	台 湾	National Central Univ. 教授	16. 3. 7-16. 3.11
DIAU, Eric W. -G.	台 湾	National Chiao Tung Univ. 助教授	16. 3. 7-16. 3.11
TZENG, Wen-Bih	台 湾	IAMS, Academia Sinica 研究員	16. 3. 7-16. 3.11
LIN, Jim-Jr-Min	台 湾	IAMS, Academia Sinica 副研究員	16. 3. 7-16. 3.11
LEE, Shih-Huang	台 湾	Nat. Synchrotron Res. Cent. 副研究員	16. 3. 7-16. 3.11
JOO, Taiha	韓 国	Pohong Univ. Sci. Tech. 教授	16. 3. 7-16. 3.11
KIM, Dongho	韓 国	Yonsei Univ. 教授	16. 3. 7-16. 3.11
LIM, Manho	韓 国	Pusan National Univ. 助教授	16. 3. 7-16. 3.11
SHIN, Seokmin	韓 国	Seoul National Univ. 助教授	16. 3. 7-16. 3.11
CHOI, Jong-Ho	韓 国	Korea Univ. 助教授	16. 3. 7-16. 3.11
LEE, Sangwon	韓 国	Korea Univ. 助手	16. 3. 7-16. 3.11

10 . 特別協力研究員

ZHANG, Bin	中 国		15. 4. 1-16. 3.31
HOCKE, Heiko	ド イ ツ		15. 4. 1-15.11.24
HOSSAIN, Mohammad Delawar	バングラディッシュ		15. 8. 1-16. 3.31
PAL, Biswajit	イ ン ド		15.11.15-16. 3.31
MKHITAR, Simonyan	アルメニア		15.11. 1-16. 3.23

11 . 海外からの訪問者

BUSHIRI, M. Junaid	インド	ケララ大学博士	15. 4. 1-16. 3.31
KOBYRN, Oleksandr	ウクライナ	ウクライナ科学アカデミー凝縮系物理研究所博士	15. 4. 1-18. 3.31
CHEN, Zhongfang	ドイツ	エルランゲン大学研究員	15. 4. 7-15. 6. 4
PITERA, Jed	アメリカ	IBM アルマデン研究所博士	15. 4.16-15. 4.16
TARLOK, Singh Lobana	インド	グルナナデーブ大学教授	15. 5.20-15. 5.21
BRION, Christopher Edward	カナダ	プリティッシュコロンビア大学教授	15. 5.26-15. 5.28
PAVEL, Nicolaie	ルーマニア	原子物理研究所博士	15. 5.28-15. 8.31
RAYMOND, Ziessel	フランス	ルイ・パスツール大学教授	15. 6. 9-15. 6.10
SCHMID, Michael W.	アメリカ	アイオワ州立大学教授	15. 6.18-15. 7.20
ZELAKIEWICS, S. Brian	アメリカ	ジョージタウン大学博士	15. 7.16-15. 7.17
WOELL, Christof	ドイツ	ポッフム大学教授	15. 7.25-15. 7.26
HU, Chin-kun	台湾	台湾中央研究院教授	15. 8.24-15. 8.27
CHEN, Xiangjun	中国	台湾サイエンス、テクノロジー大学教授	15. 8.25-15. 8.25
FRANK, H. Kohler	ドイツ	ミュンヘン大学教授	15. 9.16-15. 9.17
CARR, G. Lawrence	アメリカ	ブルックヘブン国立研究所博士	15.10. 2-15.10. 3
OHRWALL, Gunnar	スウェーデン	ウプサラ大学博士	15.10.25-15.10.27
GEL'MUKHANOV, Faris	スウェーデン	玉立工科大学教授	15.10.25-15.10.27
WANG, Lai-Sheng	アメリカ	ワシントン州立大学教授	15.12.14-15.12.18
PAVEL, Nicolaie	ルーマニア	レーザーとプラズマ物理国立研究所博士	16. 1.11-16. 2.22
MANDON, Dominique	フランス	ルイ・パスツール大学教授	16. 2. 2-16. 2. 3
HAMMER, Thomas	ドイツ	シーメンス技術部門博士	16. 2. 3-16. 2. 5
LABLANQUIE, Pascal	フランス	フランス放射光研究所博士	16. 2.16-16. 2.16

概要

現 員

(平成16年4月1日現在)

区 分	所 長	教 授	助教授	助 手	小 計	技 官	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		2 (2)	0 (2)	3	5 (4)		5 (4)
分子集団研究系		2 (1)	1 (1)	3	6 (2)		6 (2)
相關領域研究系		1 (1)	0 (1)	1	2 (2)		2 (2)
極端紫外光科学研究系		2 (1)	2 (1)	4	8 (2)		8 (2)
計算分子科学研究系		1	1	3	5		5
研 究 施 設		5 (2)	11 (3)	15	31 (5)		31 (5)
技 術 系						35	35
合 計	1	17 (9)	19 (10)	36	73 (19)	35	108 (19)

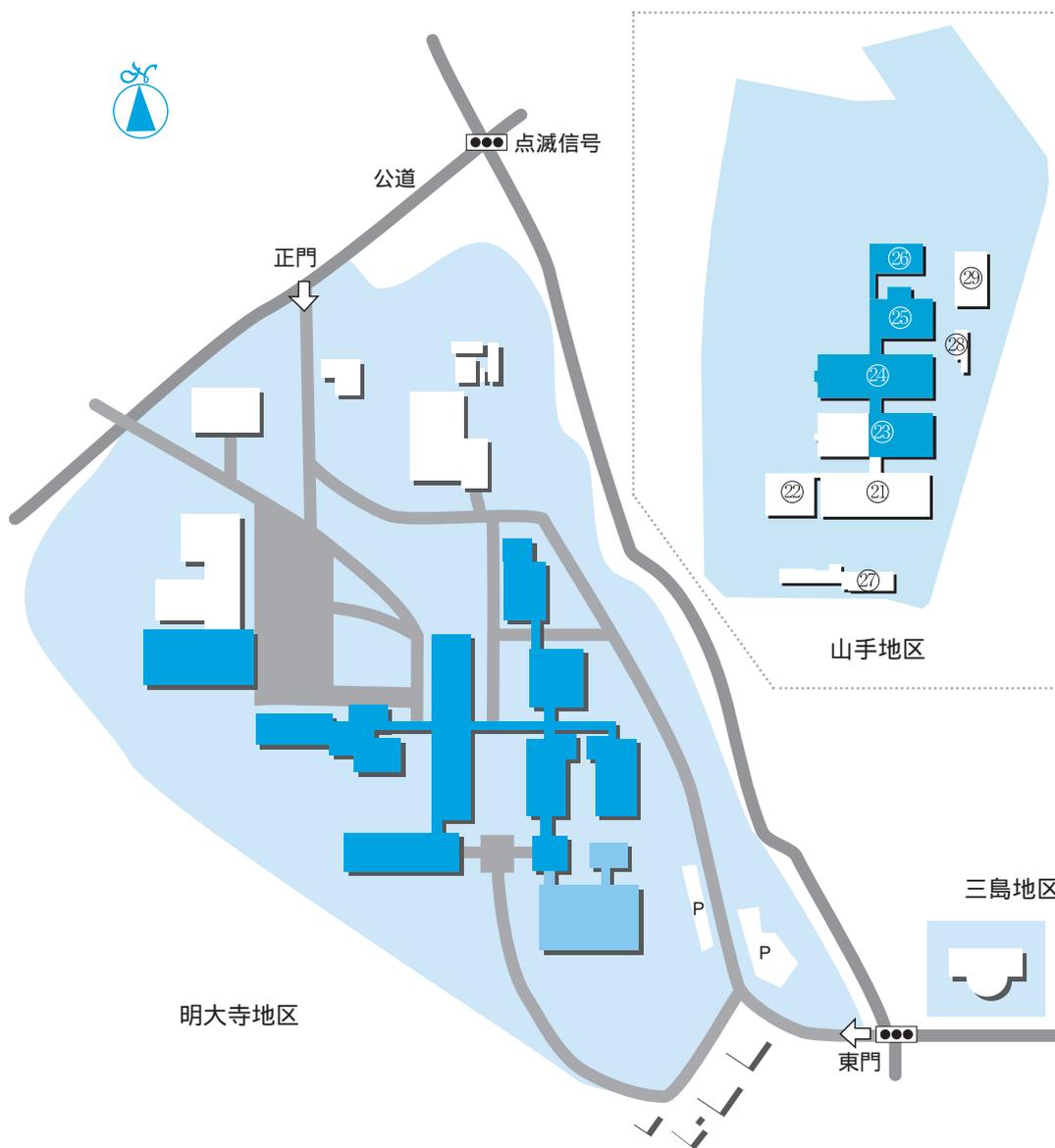
()内は客員数で、外数である。

予 算

(平成15年度決算額)

区 分	計	人件費	物件費	施設整備費
一般会計	千円 212,394	千円 14,358	千円 198,036	千円 0
国立学校特別会計	7,885,063	940,595	1,779,304	5,165,164
計	8,097,457	954,953	1,977,340	5,165,164

配置図



施設	面積 m ²	施設	面積 m ²
研究棟	2,752	廃棄物貯蔵庫	60
実験棟	9,101	警備員室	74
南実験棟	3,935	～ 職員住宅	384
計算科学研究センター棟	2,474	岡崎コンファレンスセンター	2,863
極低温棟	1,559	㉑山手1号館A	4,674
化学試料棟	1,063	㉒山手1号館B	2,303
レーザーセンター棟	1,053	㉓山手2号館	8,453
装置開発棟	1,260	㉔山手3号館	10,757
極端紫外光実験棟	3,097	㉕山手4号館	3,813
管理棟	2,371	㉖山手5号館	664
図書館	2,002	㉗山手ロッジ	1,007
職員会館	1,575	㉘実験排水処理施設	111
エネルギーセンター	1,255	㉙高圧配電施設	440

岡崎共通施設

岡崎情報図書館

岡崎情報図書館は、岡崎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

- ・ Web of Science
- ・ inside Web
- ・ NACSIS-IR
- ・ SciFinder Scholar 等



図書館建物



図書館内部

岡崎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



岡崎コンファレンスセンター大会議室

岡崎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、共通施設として宿泊施設「三島ロッジ」〔個室51，特別個室（1人用）9，特別個室（2人用）4，夫婦室10，家族室20〕及び「山手ロッジ」〔個室11，特別個室（2人用）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

自然科学研究機構岡崎統合事務センター

岡崎統合事務センター		センター長	鈴木 洪 一			
総務部		部長(兼務)	鈴木 洪 一			
総務課	課長 補佐 専門員 専門職員 総務係長 情報処理係長 図書館係長 総務分子研係長 総務基生研係長 総務生理研係長		田松 神杉 桑原 服古 山本 小林 遠藤	境永 谷浦 原部 田本 林藤	守和 利鈴 博康 克敏 寛幸 高士 典子	康雄 昌代 明史 敏幸 幸士 子
国際研究協力課	課長 補佐 専門員 専門職員 研究協力係長 共同利用係長 共同研究係長		柳杉 伊村 廣行 神	野江 藤木 岡田 谷	友伸 教義 義豊 志夫	栄修 二悦 彦
財務部		部長	原 口 正 明			
財務課	課長 補佐 総務係長 財務第一係長 財務第二係長 財務第三係長 資産管理係長 出納係長		尾白 稲二 加古 佐々 浅	越井 垣村 藤橋 部 井	和啓 道浩 悟 真誠	博夫 雄臣 厚志 真誠
調達課	課長 補佐 専門員 調達第一係長 調達第二係長 調達第三係長		窪藤 浦古 高	川本 野川 藤	友和 一八	行夫 實広 郎
施設課	課長 補佐 専門員 施設係長 施設管理係長 電気係長 機械係長		藤本 谷 地井 浅	本谷 中川 野	恵省 正一	夫一 剛幸 夫

平成16年5月1日現在

交通案内

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

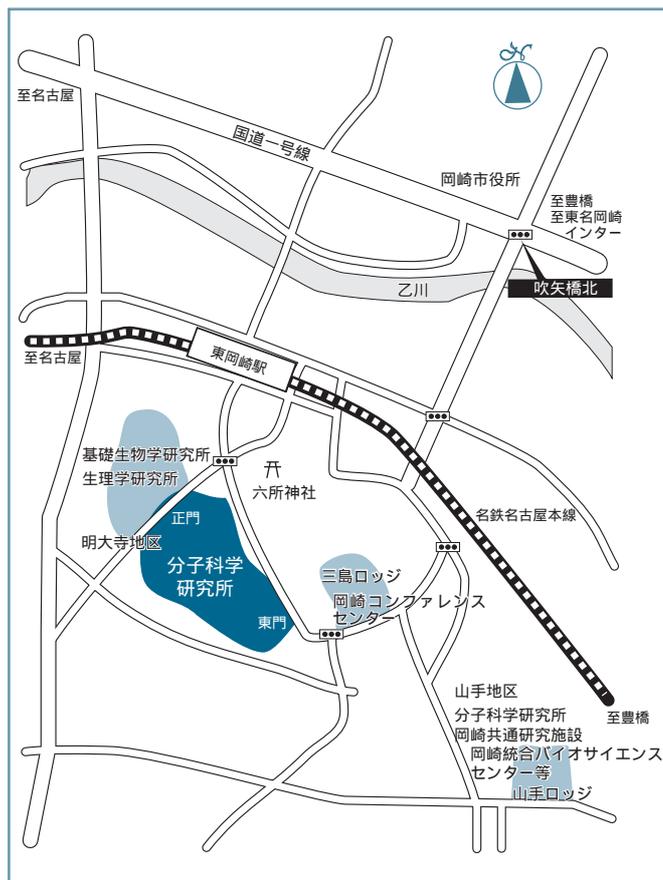
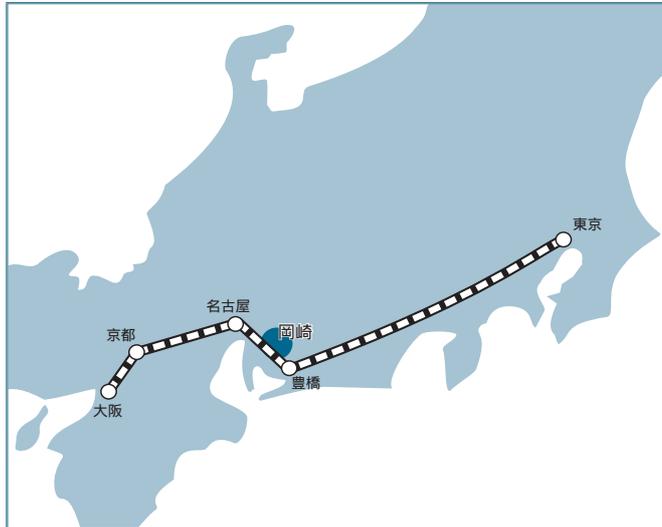
名古屋駅下車，名鉄（新名古屋駅）に乗換え、東岡崎駅下車（名古屋 - 東岡崎間約 30 分）。南（改札出て左側）に徒歩で約 7 分。

名古屋空港から

名鉄バス東岡崎(駅)直行便を利用。所要約 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。





大学共同利用機関法人
自然科学研究機構
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/>

