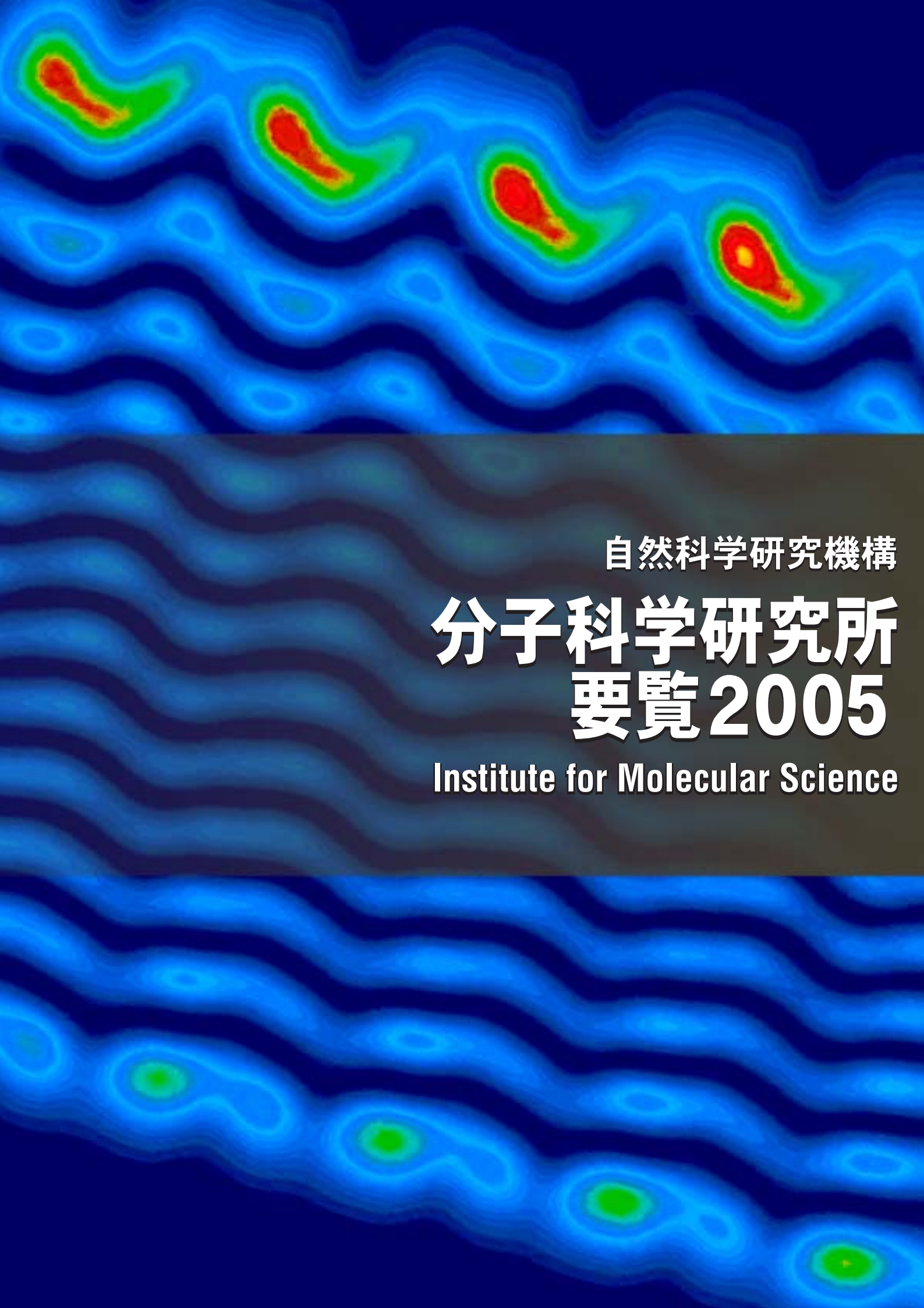


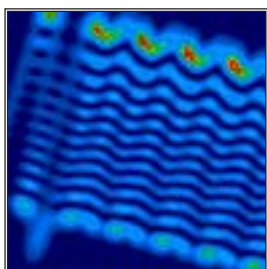


自然科学研究機構

分子科学研究所 要覧2005

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	29
錯体化学実験施設	29
分子スケールナノサイエンスセンター	31
極端紫外光研究施設	36
分子制御レーザー開発研究センター	39
装置開発室	41
安全衛生管理室	42
岡崎共通研究施設	43
岡崎統合バイオサイエンスセンター	43
計算科学研究センター	45
技 術 課	46
技術課	46
広報担当	47
大型研究設備	48
超高磁場核磁気共鳴分光装置	48
フェムト秒・ピコ秒化学反応観測システム	49
W-band (95 GHz) パルス電子スピン共鳴測定装置	50
極端紫外光実験設備	51
共 同 研 究	52
国際共同研究	53
総合研究大学院大学	55
大学院教育協力	56
国 際 交 流	58
現員・財務・構内図	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

アト秒精度のコヒーレント制御

2つのレーザーパルスを連続的に分子に照射したときに発生する量子の波の干渉模様を示すシミュレーション。レーザーパルスの時間間隔をアト秒 (10^{-18} 秒) 精度で変化させることによって、この干渉模様を書き換え、読み出す事ができます。このような技術を使えば、1個の分子に情報を記録したり、物質内の化学結合をナノテクを超える精度で操作することもできるようになると期待されています。

巻 頭 言

分子科学研究所は岡崎の2研究所と国立天文台及び核融合科学研究所と共に自然科学研究機構を構成して1年が経ちました。世界に冠たる研究機関として、機構内は勿論のこと機構外の機関とも連携を深めて、基礎学術としての自然科学の発展をもたらす国際的に重要な拠点として更に発展していくために、機構長の指導の下にたゆまぬ努力を続ける必要があります。

本年、分子科学研究所は創設30周年を迎えました。国、分子科学コミュニティの皆様その他の多くの方々のご支援に対する感謝の気持ちを表すために、5月20日（金）に、ささやかながら記念式典・祝賀会を催しました。多数の方々のご参列を頂きましたことに対して、ここに改めて御礼申し上げます。また、若手研究者の支援や国際協力の推進を目指して募金活動を行っておりますが、これに対しましても多方面から心温まるご支援を頂き感謝に耐えません。本年度は、「エクストリーム・フォトニクス」連携融合研究プログラムや、機構内連携としての「分子・物質シミュレーション中核拠点形成」に向けた活動が始まります。また、世界一の920MHz NMRの利用研究も順調に開始されております。分子科学国際共同研究の推進、及びアジア諸国との緊密な協力体制の構築をも目指し、分子科学の発展のみならず、世界における基礎学術の発展に少しでも貢献出来ることを願っております。

一方、法人化に伴う重要な施策として、安全衛生管理室の立ち上げと広報委員会の充実が行われました。健康で安全に研究が遂行できることは当然ながら極めて重要なことでありますし、「技術の応用」を重視する社会の風潮の中で「基礎学術の重要性」を分かり易く説明していく努力もまた怠ってはなりません。それぞれの「室」に任せるだけでなく、職員一同が意識を変えて協力することが肝要です。

例年通り今年も、多くの方々が分子研を転出され、また多くの新しい方々をお迎えしました。昨年12月に分子構造研究系の森田紀夫助教授が福井大学工学部教授として、本年4月には、岡崎統合バイオサイエンスセンターの木下一彦教授が早稲田大学理工学部教授として、理論分子科学研究系の岡本祐幸助教授が名古屋大学大学院理学研究科教授として、分子スケールナノサイエンスセンターの多田博一助教授が大阪大学大学院基礎工学研究科教授として、それぞれ転出されました。また、流動として来て頂いていた分子スケールナノサイエンスセンターの高橋正彦助教授が親元の東北大学多元物質科学研究所に戻されました。分子研在職中における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、理論分子科学研究系に信定克幸助教授を北海道大学から、電子構造研究系に大島康裕教授を京都大学から、分子構造研究系に小澤岳昌助教授を東京大学から、関連領域研究系に江東林助教授を科学技術振興機構からお迎えしました。分子研での世界一を目指した新しい発展を心より祈っております。これ以外にも、多くの若手研究者の流動があります。

受賞の面でも良い知らせがあります。分子構造研究系の小澤岳昌助教授が文部科学大臣表彰若手科学者賞を、分子制御レーザー開発研究センターの齋川次郎研究員（現東工大博士研究員）、佐藤庸一研究員および平等拓範助教授がレーザー学会進歩賞を、分子スケールナノサイエンスセンターの山田陽一助手が日本薬学会奨励賞を、そして極端紫外光研究施設の堀米利夫技術班長が化学会化学技術有効賞をそれぞれ受賞されました。日頃からの研鑽に敬意を表し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。

社会に基礎学術の重要性を説明し、また、その支援に応えていくには、立派な研究成果を上げていくことが何よりも一番重要であります。研鑽に励みましょう。

平成17年5月

中 村 宏 樹



研究所の目的

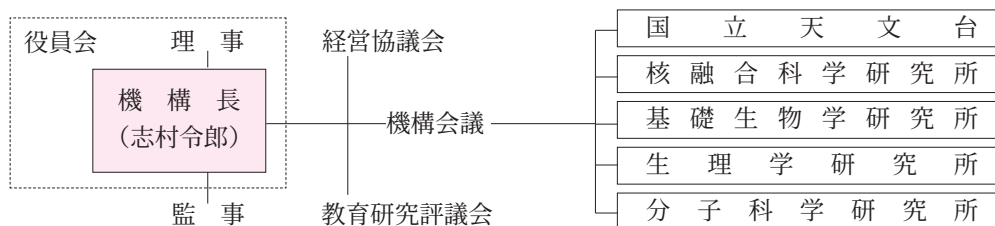
分子科学研究所は、物質の基礎である分子の構造とその機能に関する実験的研究並びに理論的研究を行うとともに、化学と物理学の両方にまたがる分子科学の研究を推進するための中核として、広く研究者の共同利用に供することを目的として設立された大学共同利用機関である。物質観の基礎を培う研究機関として広く物質科学の諸分野に共通の知識と方法論を提供することを意図している。

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。



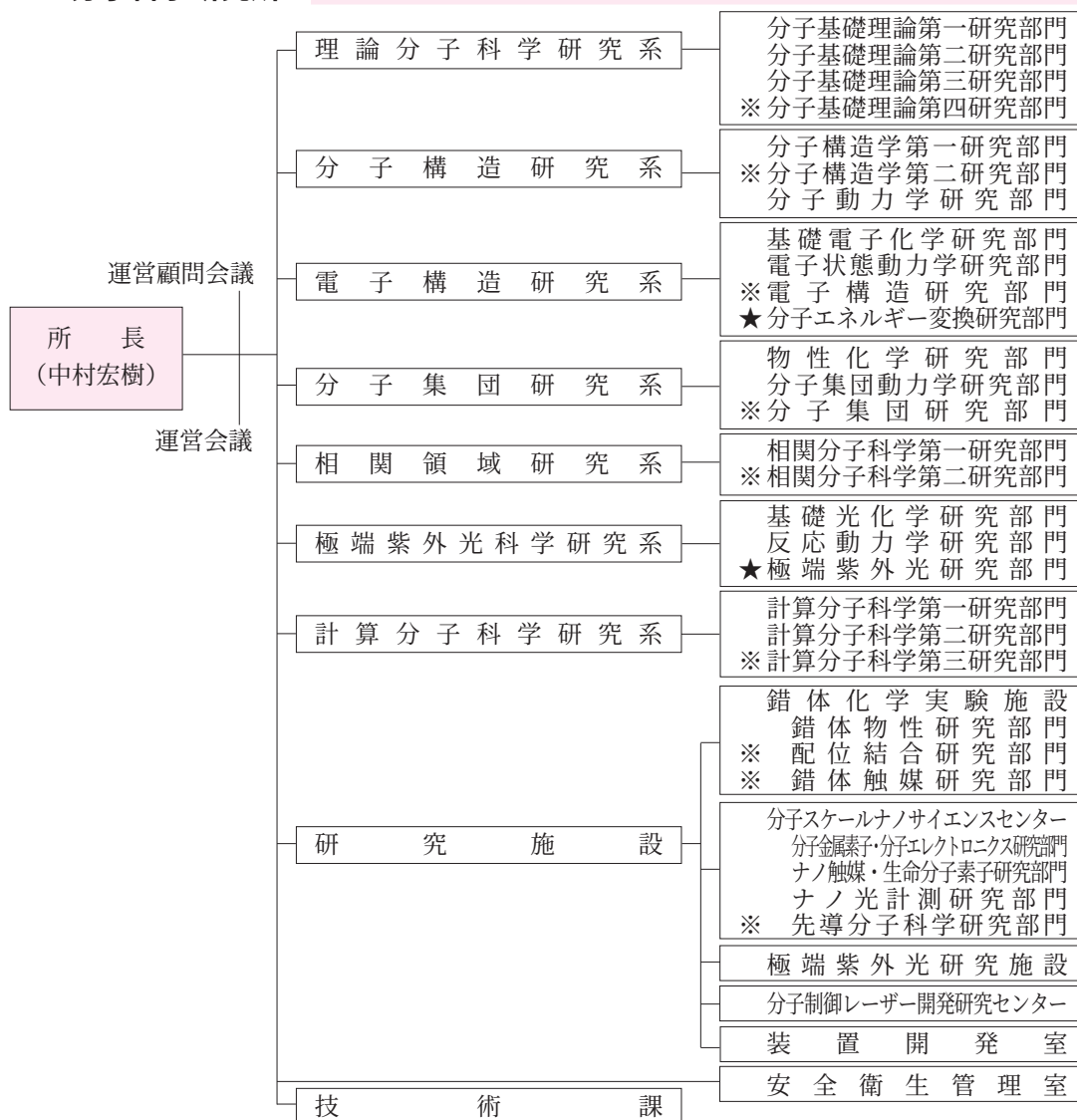
組 織

■ 自然科学研究機構

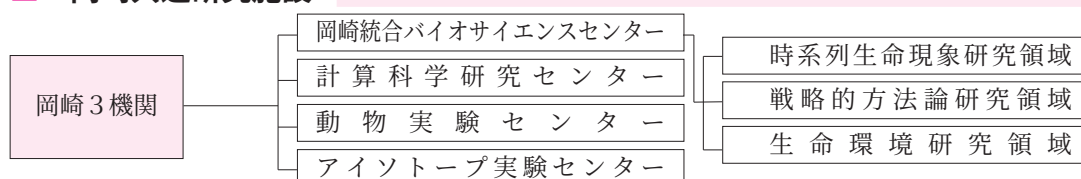


■ 分子科学研究所

※客員研究部門 ★外国人客員研究部門



■ 岡崎共通研究施設



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） 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 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，基礎生物科学研究所，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（Ⅰ期），実験棟（Ⅰ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（Ⅱ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（Ⅱ期）
昭和55年度	職員会館（Ⅰ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（Ⅰ期），極端紫外光実験棟（Ⅱ期），エネルギーセンター（Ⅲ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（Ⅱ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

■ 運営顧問会議

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。

運営顧問

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理事物質構造科学研究所長
土 屋 莊 次	城西大学招聘教授、東京大学名誉教授
益 田 隆 司	電気通信大学長

外国人運営顧問

NORDGREN, Joseph	スウェーデン国ウプサラ大学教授
CASTLEMAN, A. Welford Jr.	米国ペンシルバニア州立大学教授

■ 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	大阪大学たんぱく質研究所所長	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	分子スケールナノ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科教授	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	核融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	分子スケールナノサイエンスセンター教授
		薬 師 久 彌	分子集団研究系教授

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

研究教育職員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）
榑 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（東北大名誉教授）
阿久津 秀 雄（阪大たんぱく研所長）
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）
加 藤 晃 一（分子研教授）
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について、検討し、意見を述べる。

伊 藤 翼（東北大名誉教授）	戸 部 義 人（阪大院教授）
上 村 大 輔（名大院教授）	中 嶋 敦（慶應大教授）
榎 敏 明（東工大院教授）	山 内 薫（東大院教授）
太 田 信 廣（北大教授）	山 下 晃 一（東大院教授）
加 藤 隆 子（核融合研教授）	岡 本 裕 巳（分子研教授）
下 村 理（高輝度光科学研セ）	小 林 速 男（分子研教授）
鈴木 俊 法（理研主任研究員）	西 信 之（分子研教授）
竜 田 邦 明（早大主任教授）	平 田 文 男（分子研教授）
谷 村 吉 隆（京大院教授）	見 附 孝一郎（分子研助教授）
寺 嶋 正 秀（京大院教授）	

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

中 村 宏 樹	所 長	長 倉 三 郎	特別顧問・名誉教授
小 杉 信 博	研究総主幹／教授（併）	井 口 洋 夫	特別顧問・名誉教授
		伊 藤 光 男	特別顧問・名誉教授
		茅 幸 二	特別顧問・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

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
小 林 郁	助 手
奥 村 久 士	助 手
河東田 道 夫	専門研究職員
石 田 豊 和	専門研究職員
高 木 望	専門研究職員
隅 本 倫 徳	専門研究職員
SLANINA, Zdenek	専門研究職員
土 屋 敬 史	専門研究職員（東大勤務）

分子基礎理論第二研究部門

中 村 宏 樹	教 授（併）
信 定 克 幸	助教授
MIL'NIKOV, Gennady V.	助 手
KONDORSKIY, Alexey	専門研究職員
ZOU, Shiyang	研究員
近 角 真 平	研究員
田 村 宏 之	研究員
趙 聖 行	研究員（理研勤務）
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
山 下 靖 文	助 手
KOBRYN, Oleksandr	非常勤研究員
吉 田 紀 生	専門研究職員
丸 山 豊	専門研究職員
宮 田 竜 彦	専門研究職員
谷 村 あゆみ	専門研究職員
生 田 靖 弘	専門研究職員
久保田 陽 二	専門研究職員
GOPAKUMAR, Geetha	専門研究職員（東大勤務）
LEE, Jin Yong	外国人研究職員 17.6.23～17.8.22 17.12.19～18.2.18

分子基礎理論第四研究部門（客員研究部門）

瀧 崎 員 弘	教 授（愛媛大理）
小松崎 民 樹	助教授（神戸大理）

分子構造研究系

研究主幹(併) 岡 本 裕 巳

分子構造学第一研究部門

岡 本 裕 巳 教 授
井 村 考 平 助 手
内 田 毅 助 手
堀 本 訓 子 非常勤研究員

分子動力学研究部門

北 川 禎 三 教 授(隣接バイオサイエンスセンター)
横 山 利 彦 教 授
小 澤 岳 昌 助 教授
中 川 剛 志 助 手
丸 山 耕 一 非常勤研究員

分子構造学第二研究部門(客員研究部門)

石 森 浩一郎 教 授(北大院理)
寺 嶋 正 秀 教 授(京大院理)

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 非常勤研究員
中 尾 聡 専門研究職員
渡 辺 三千雄 研究員

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
(東大院新領域創成)

分子エネルギー変換研究部門(外国人客員研究部門)

STANKEVICH, Vladimir G. 外国人研究職員
(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
WU, Yung-Dong 外国人研究職員
(香港理工大学 教授) 17.12.1~18.2.28
TANATAR, Makariy 外国人研究職員
(ウクライナ科学アカデミー表面化学研究所
シニア科学研究員) 17.2.1~18.1.31
PULAY, Peter 外国人研究職員
(アーカンソー大学 教授) 17.5.16~17.8.15

電子状態動力学研究部門

大 森 賢 治 教 授
大 島 康 裕 教 授
香 月 浩 之 助 手
長谷川 宗 良 助 手
穂 坂 綱 一 非常勤研究員
宮 崎 充 彦 非常勤研究員

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
原 俊 文 非常勤研究員
OLGA, Drozdova 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
宮 本 明 人 共同研究員

分子集団研究部門(客員研究部門)

小 島 憲 道 教 授(東大院総合文化)
河 本 充 司 助 教授(北大院理)

相 関 領 域 研 究 系

研究主幹(併) 薬 師 久 彌

相関分子科学第一研究部門

青 野 重 利 教 授(隣接バイオサイエンスセンター)
江 東 林 助 教授
秋 田 素 子 助 手
足 立 健 吾 助 手(隣接バイオサイエンスセンター)
吉 岡 資 郎 助 手(隣接バイオサイエンスセンター)

相関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
 松 田 晃 孝 非常勤研究員

反応動力学研究部門

宇理須 恆 雄 教 授
 見 附 孝一郎 助教授
 片 柳 英 樹 助 手

極端紫外光研究部門(外国人客員研究部門)

SUN, Wei-Yin 外国人研究職員
 (南京大学錯体化学研究所 教授)
 17.6.1~17.8.31
 荒 木 幸 一 外国人研究職員
 (サンパウロ大学 教授)
 17.12.1~18.2.28
 AKA, Gerard Philippe 外国人研究職員
 (パリ国立高等化学院 教授)
 17.3.1~17.5.31
 LONG, La-Sheng 外国人研究職員
 (厦門大学 助教授)
 17.5.1~18.4.30

計算分子科学研究系

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)
 三 浦 伸 一 助 手
 石 田 干 城 助 手

計算分子科学第二研究部門

計算分子科学第三研究部門

錯体化学実験施設

施設長(併) 田 中 晃 二

錯体物性研究部門

田 中 晃 二 教 授
 川 口 博 之 助教授
 和 田 亨 助 手
 松 尾 司 助 手
 宮 里 裕 二 非常勤研究員
 渡 邊 孝 仁 非常勤研究員
 赤 木 史 生 研究員
 田 熊 元 紀 研究員
 藤 田 光 晴 研究員

配位結合研究部門(客員研究部門)

林 高 史 教 授(阪大院工)
 石 井 洋 一 教 授(中央大理工)

錯体触媒研究部門(客員研究部門)

真 島 和 志 教 授(阪大院基礎工)
 栗 原 正 人 助教授(山形大理)

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
 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
 HUANG, Wei 非常勤研究員
 中 尾 聡 専門研究職員

山 田 陽 一 助 手
 東 林 修 平 助 手
 槇 優 非常勤研究員
 神 谷 育 代 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
 渡 邊 一 也 助 手
 松 本 健 俊 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(分子ナノサイエンスセンター)
 櫻 井 英 博 助教授
 長 澤 賢 幸 助 手
 倉 橋 拓 也 助 手(分子ナノサイエンスセンター)

先導分子科学研究部門(流動研究部門)

加 藤 晃 一 教 授(客員)
 (名古屋市大院薬)
 笹 川 拡 明 助 手

極端紫外光研究施設

施設長(併) 小 杉 信 博

加 藤 政 博 教 授
木 村 真 一 助教授
繁 政 英 治 助教授
原 徹 助教授(客員)
(理化学研)

保 坂 将 人 助 手
持 箸 晃 助 手
伊 藤 孝 寛 助 手
彦 坂 泰 正 助 手
櫻 井 陽 子 非常勤研究員

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
ESTACIO, Elmer 非常勤研究員
村 上 英 利 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 助 手
佐 藤 庸 一 専門研究職員
常 包 正 樹 共同研究員

装置開発室

室 長(併) 宇理須 恆 雄

安全衛生管理室

室 長(併) 小 川 琢 治

戸 村 正 章 助 手

■ 岡崎共通研究施設(分子科学研究所関連)**岡崎統合バイオサイエンスセンター**

センター長(併) 高 田 慎 治(基生研)

戦略的方法論研究領域

青 野 重 利 教 授
藤 井 浩 助教授
吉 岡 資 郎 助 手
倉 橋 拓 也 助 手
小 林 克 彰 非常勤研究員
關 目 理 人 非常勤研究員
小 澤 一 道 非常勤研究員
望 月 俊 介 研究員

長 野 恭 朋 研究員
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
EL-MASHTOLY, S. F. -M. 学振外国人特別研究員
16.10.1~18.9.30
VAROTSIS, C. 学振外国人招へい研究者(短期)
17.2.18~17.4.17
平 松 弘 嗣 学振特別研究員
當 舍 武 彦 学振特別研究員

生命環境研究領域

北 川 禎 三 教 授
久 保 稔 非常勤研究員

計算科学研究センター

センター長(併) 永 瀬 茂

岡 崎 進 教 授
森 田 明 弘 助教授
大 野 人 侍 助 手
岩 橋 建 輔 専門研究職員
松 田 成 信 専門研究職員
篠 田 恵 子 専門研究職員(産総研勤務)

伊 藤 暁 専門研究職員(名大勤務)
吉 井 範 行 専門研究職員
山 田 篤 志 専門研究職員
三 上 泰 治 専門研究職員
村 越 稔 専門研究職員
石 山 達 也 専門研究職員

技 術 課

課長 加 藤 清 則

一班（機器開発技術班）

班長 鈴 井 光 一

機器開発技術一係

係長 水 谷 伸 雄

係員 矢 野 隆 行

機器開発技術二係

係長 青 山 正 樹

係員 近 藤 聖 彦

二班（電子機器・ガラス機器開発技術班）

班長 吉 田 久 史

電子機器開発技術係

係員 内 山 功 一

係員 豊 田 朋 範

ガラス機器開発技術係

係長 永 田 正 明

三班（極端紫外光技術班）

班長 堀 米 利 夫

極端紫外光技術一係

係長 蓮 本 正 美

係員 近 藤 直 範

極端紫外光技術二係

係長 山 崎 潤一郎

係員 林 憲 志

極端紫外光技術三係

係長 中 村 永 研

主任 酒 井 雅 弘

四班（光計測技術班）

班長 山 中 孝 弥

光計測技術係

係員 上 田 正

係員 千 葉 寿

五班（計算科学技術班）

班長 水 谷 文 保

計算科学技術一係

係員 手 島 史 綱

係員 南 野 智

計算科学技術二係

係員 内 藤 茂 樹

係員 澤 昌 孝

六班（ナノサイエンス技術班）

ナノサイエンス技術一係

係長 高 山 敬 史

主任 水 川 哲 徳

ナノサイエンス技術二係

係員 牧 田 誠 二

係員 藤 原 基 靖

係員 中 野 路 子

七班（研究・広報技術班）

研究・広報技術係

（研究）係員 石 村 和 也

係員 渡 邊 廣 憲

係員 賣 市 幹 大

係員 岡 野 芳 則

係員 手 老 龍 吾

係員 大 石 修

（広報）係員 原 田 美 幸

＊ 構成員は平成17年5月1日現在。ただし，外国人研究者で平成17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

分子科学の限らない夢は、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。

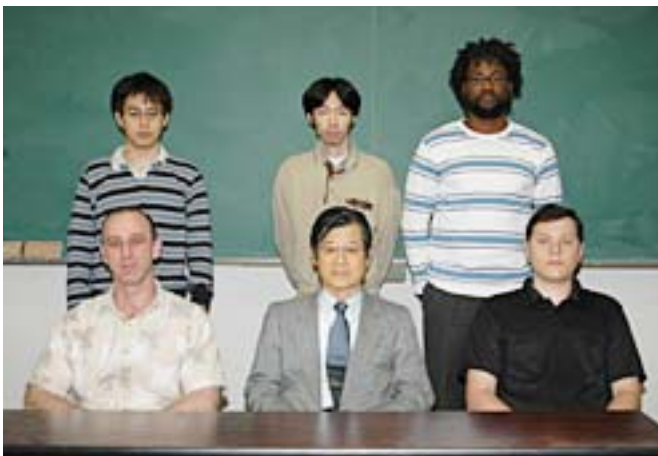


(後列左から) SLANINA, Z., 永瀬 茂、石村和也、隅本倫徳、河東田道夫
(前列左から) 高木 望、山田真理子、溝呂木直美、中島 彩

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：①化学反応の起こりやすさを決めている因子の究明、②多自由度系の動力学を扱う理論の開発、③状態変化の基



(後列左から) 近角真平、田村宏之、OLOYEDE, Oluwaponmle
(前列左から) MIL'NIKOV, Genady V., 中村宏樹、KONDORSKIY, Alexey D.

本メカニズムである非断熱遷移の理論の開発と応用，④超励起分子の特異な性質と動力学の解明，⑤多体系に現れる統計性と選択性の解明，及び⑥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こと，多次元トンネルの有効な理論を完成した事，及びレーザーによる分子過程の制御法の提唱等であり，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総合的研究」に取り組んでいる。

2. 量子開放系分子における多電子・多原子ダイナミクスの理論

分子は多数の電子と多数の原子核から構成される複合粒子系とみなすことができ，更に分子が関わる諸問題を現象として分類すれば，定常状態の問題とダイナミクスの問題に大別できる。当研究室では，電子や原子の動的な変化に注目して，理論的・数値計算的両方の観点から研究を進めている。多電子ダイナミクスの研究例としては，金属クラスターの超高速線形・非線形光学応答や電荷移動の研究があり，一方，多原子ダイナミクスの研究例としては，比較的



(左から) 山田真理子、岩佐 豪、信定克幸、白鳥和矢、久保田陽二

小さな分子系を対象として，化学反応機構の詳細な解明を行っている。また，最近では特に，周りの環境と相互作用している分子（量子開放系分子と呼ぶ）における電子的エネルギーの散逸を伴う電子ダイナミクスの研究にも興味を持ち，その理論的研究を行っている。

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。

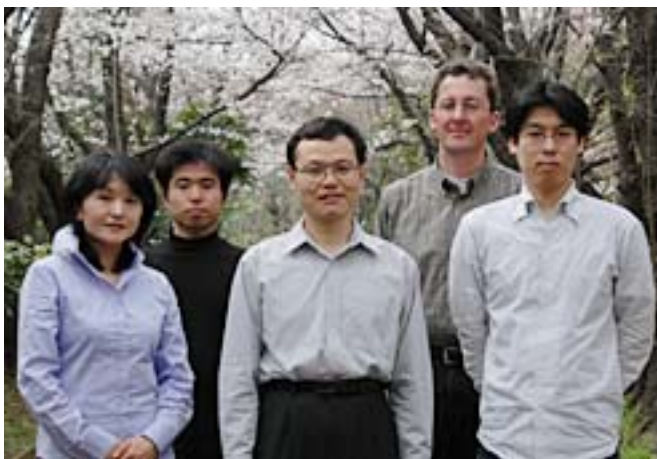


(左列後から) 宮田竜彦、KOBRYN, Oleksandr、鄭誠虎、山田真理子、桑 美和子

(中列後から) 谷村あゆみ、石塚良介、平田文男

(右列後から) 松上 優、奥村 久、生田靖弘、吉田紀生、中島 彩

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) 山下靖文、BRONOLD, Franz Xaver
(前列左から) 山田真理子、米満賢治、前島展也

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、①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、②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、③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

本研究系は広い意味での構造から出発して分子とその集合体のもつ諸性質を明らかにすることを目指している。比較的簡単な分子から固体表面に吸着した分子やナノ構造体、さらに生体内分子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。励起状態や反応中間体など動的過程と分子やナノ構造のもつ様々な機能との関わりについても、構造論の立場から解明する。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。生体系で機能する分子の細胞内動態を光計測する、新たな技術開発をめざす。

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、励起状態の波動関数とコヒーレンスに迫る分子分光法を確立し、分子集合体のダイナミックな挙動を調べる。



（左から） 堀本訓子、岡本裕巳、野村恵美子、井村考平

分子構造学第二研究部門（客員研究部門）

1. 蛋白質ダイナミクスの解明

レーザー分光を手段として、生体タンパク質反応機構、活性分子の反応、励起状態ダイナミクスの解明を中心に研究を行っている。特に、過渡回折格子法や高速レーザー分光法を用いて、光の関与する機能性蛋白質（Photoactive Yellow Protein, ロドプシン, センサリーロドプシン, フォトリトロピン, フィトクロムなど）の反応過程における、エネルギーや構造ダイナミクスを時間分解で明らかにしている。類似手法により、蛋白質-蛋白質相互作用の時間分解検出法の開発も行っている。また、光学顕微鏡を用いた蛍光検出による1分子分光により、蛋白質の動きを個々の分子ごとに捉え、揺らぎと反応の関係を調べている。

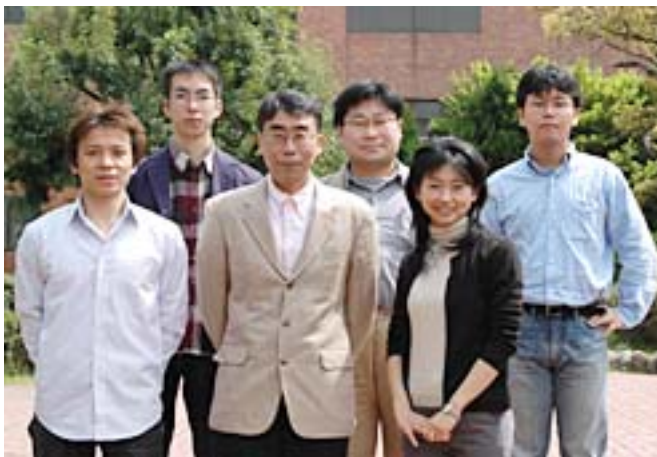
2. 鉄イオン代謝蛋白質の発現制御をするヘム蛋白質の遺伝子制御機構

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 効果と磁化誘起第二高調波発生測定に加えて、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。



(後列左から) 渡邊廣憲、丸山耕一、中川剛志
(前列左から) 馬曉東、横山利彦、能登円望

2. 生体分子の細胞内動態を解析する分子科学

生きた細胞や動物個体内で機能する生体分子の時空間解析法は、生命科学研究分野において現在最も重要な分析法の一つである。我々は、RNAやタンパク質がいつ・どこで・どの程度機能を発現しているか、時間軸を含めた生体分子の機能とその動態を低侵襲的に解析する新しい研究方法の開発を目的としている。用いる技術は、緑色蛍光タンパク質 (GFP) や生物発光タンパク質 (luciferase) 等のタンパク質の立体構造に関する情報を基に分子設計し、遺伝子



小澤岳昌

工学的技術を駆使して機能性光タンパク質を開発する。そして開発するタンパク質を用いて、生体分子の機能と細胞内動態を光計測する新たな研究方法やイメージング技術の開発を目指している。

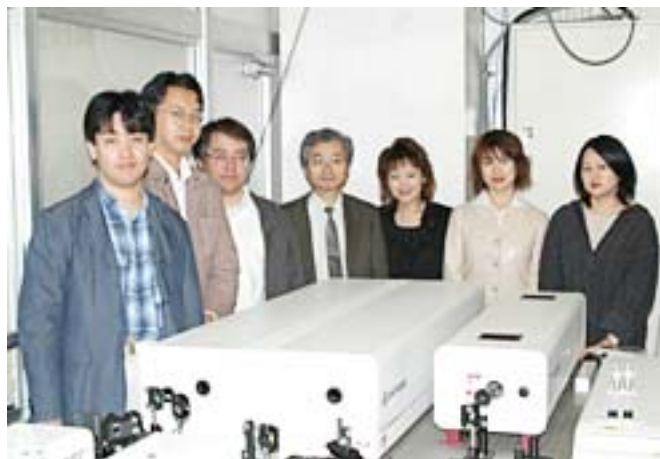
電子構造研究系

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、ナノワイヤー、ナノ構造体」の研究

金属のd軌道と有機物あるいはグラファイト状炭素の π 軌道の連結によって生成するクラスター化合物やナノ構造体は、反応触媒や磁気的電気的な素子への応用に通じる様々な機能を有している。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 π 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した。これは、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



(左から) 西條純一、十代 健、大石 修、西 信之、小野美菜代、岩永清子、岡部智絵

現を設計することができる。このような2成分以上から構成されるナノ構造体内の金属クラスターあるいは金属原子ナノ結晶部分はバルクの金属結晶と異なり、界面の相互作用がナノ結晶の構造を決めてしまうほど強くなる。これは、炭素と金属の結合が界面を形成する場合に顕著であり、このような核と殻との相互作用によって独特の構造が出現するのがナノシステムの特徴である。平成16年度は、①スタックしたチューブ状の炭素ディスクの中心に直径2.5 nm程度の銅の線状結晶芯を持った二重構造炭素-銅ナノチューブ、および、②CoC₂ナノベルトの中に、炭素で覆われた直径3 nmの金属コバルト結晶核がドット状に配列した規則的な構造体の合成に成功した。後者のドットアレーベルトは、基本的には超常磁性であるが、これに電子線をスポット照射すると、コバルト核が集合し、径が10 nm以上の大きな強磁性ドット列が出来る事がわかった。大きなドットは電子ビーム加工によって任意の場所に任意の間隔で並べる事が可能であり、マトリックスが常磁性であること、ドット間の磁気的相互作用を遮蔽する効果があることから、書き込み可能な記憶媒体として利用できる。直径3 nmのドット状金属コバルト結晶核を持つナノベルトは、ドットの作る井戸型ポテンシャル列の中に電子の蓄積と井戸の間のトンネル移動を可能とするデバイスであり、今後、電子物性計測が重要となる。これらのナノ金属系は、炭素被覆銅ワイヤーの線方向成分を除いて、有限個の不連続エネルギー準位をもつ半導体的な性質を示す系であり、電子物性の重要さと共にデバイスとしての様々な応用が考えられる。このようなナノ構造体は、有機分子部位を持たせる事も可能であり、有機溶媒界面に浮かぶ（或いは、沈む）有機薄膜中に固定された金属ドット列の創成研究も進んでいる。

2. 水和金属クラスターイオンの構造とプロトン移動

生体系に於いて水和金属陽イオンは、タンパク質や核酸の構造発生や触媒反応制御に関わる機能を発現する重要な分子系である。このような視点に立って、我々は、アルカリ金属イオン、アルカリ土類金属イオン、そして遷移金属イオンの水和構造の研究を主としてクラスターイオン

ラップ赤外レーザー光解離分光法を用いて行っている。水和金属イオンクラスターは、付加する水分子が多くなるにつれて、エネルギーが同じくらいの構造異性体の数が増してくる。即ち、水の結晶のような特定の配置を持たず、室温では十分に乗り越えられるようなエネルギーを持った多くの準安定構造が存在し、このような様々な構造をとることによって、エントロピーを稼ぐことができる。これが、液体の本質に繋がっている。特に、大きな金属原子イオンになればこれが顕著になってくる。このような現象が、イオンの機能にどのように繋がっていくのだろうか。このような問題を念頭に置き、系統的に金属イオンの電子構造とクラスターの構造との関係を調べている。

3. 溶液中のミ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いりこむには、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） 穂坂綱一、DELANGNES, Jean-Christophe、香月浩之、稲垣いつ子、大森賢治

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。

①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。②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。③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。④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。

2. 分子運動の量子状態操作法の開拓

実際の分子は空間を飛行し、回転し、振動している。室温の条件であっても、典型的な分子で1秒間に300 m飛び回り、 10^{11} 回も回転し、振動は $10^{12} \sim 10^{13}$ 回に達する。このような分子の運動を自在に操作するという分子科学の1つの夢を、レーザーに代表される様々なアイテムを活用して実現しようとしている。具体的には、①強力な静電場、もしくは、分子の運動に比べて十分ゆっくりとした時間スケールで変化する電場（ナノ秒レーザーの光電場）を利用



（左から） 大島康裕、長谷川宗良、稲垣いつ子、宮崎充彦

して、回転運動を拘束して空間的に分子の向きを揃える、②回転や振動運動と同程度の時間スケールの極短光パルスを用いて「瞬間的に」分子に撃力を加え、回転や振動運動を励起・制御する、③複数のコヒーレンスの良い光との相互作用によって、特定の振動・回転量子状態へ分布を完全に移動する、等の方法論の開発を進めている。

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、タンパク質などのナノ系を対象とした巨大分子システムの新しい計算手法の開発と、遷移金属を含む触媒分子系の反応経路に関する研究を開始する。また、 C_{60} を含む有機固体の光電子分光や高温有機超伝導体の磁気共鳴に関する研究も継続して行う。

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、電気的、磁氣的、光学的実験や極低温、超高圧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、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。

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。



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

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。

①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。②高磁場・高周波／パルス法によるESR研究。金属－非金属転移や電荷局在・スピンドYNAMIX・分子内電荷分布の理解。



（後列左から）原 俊文、古川 貢、中村敏和、TANATAR, Makariy
（前列左から）松岡秀人、前田圭介、茅田奈緒

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。本研究室では新ら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①伝導電子と局在磁気モーメントが共存する機能性分子物質の開発、②一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らしい機能性の発現、③スピン転移を示す新しい伝導性磁石の設計・合成、④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、大坪才華、小林速男、CUI, Heng-Bo、宮本明人

(前列左から) 高橋一志、太田明代、永井正子、伊木志成子、磯野裕貴子

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、①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、②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。

相関分子科学第一研究部門

1. 分子プログラムに基づくソフトナノマテリアルの創成と機能開拓

『機能性ユニットの分子デザイン／プログラムに基づいた高度・自在な集積化／外部刺激で制御可能な機能性ナノ材料の開拓』という三位一体なダイアグラムで研究を展開している。具体的に、共役分子からなる光機能性ソフトナノマテリアルの開拓；光捕集アンテナ系の構築；人工光合成デバイスの構築，集積型金属錯体からなる新規スピン活性材料の開拓；光誘起「ドミノ効果」の検討；有機・無機ハイブリッドスピン活性材料の創出，および共役分子・集積金属錯体の融合による有機スピントロニクス材料の開拓；光・電子・スピンなどの機能融合による複合機能性材料の開拓を目指している。



(左から) 秋田素子、江 東林、太田明代

2. 有機化合物を主体とした新規キラル磁性体の開発

キラルな磁気構造を持つ磁性体には不斉磁気円二色性と呼ばれる磁気光学効果が観測されることが期待される。本研究では、より光学活性の大きなキラル磁性体の構築を目的とし、①高い転移温度をもつと期待されるプルシアンブルー系磁性体の構成要素としての新規有機不斉配位子の設計・合成，および②不斉中心を有するニトロキシドラジカルと遷移金属イオンの自己集積による新規分子性磁性体の構築研究を行っている。

3. 新規自己複製反応の構築

自己複製は生体内反応の基本過程であり，様々な化学的モデルを用いた研究が行われており，現在までに反応生成物が鋳型となる最も単純な自己複製系が実現されている。本研究ではポルフィリン多量体を鋳型として用い，①基質－酵素－補酵素類似の三成分からなる新規自己複製反応，および②相補的鋳型反応による新規自己複製反応の構築を目指している。

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、①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、②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③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） 中根淳子、樋山みやび、初井宇記、小杉信博

2. 分子内クーロン場に匹敵する極めて強い光子場において発現する新規な分子過程の解明とその応用研究を行う。特に10 fs以下の極めて短い時間幅を持つレーザーパルス光を利用し、下記の研究課題に取り組む。

①運動量相関計測による強光子場中分子ダイナミクスの解明。②光ドレスト状態形成を利用した新規反応経路の開拓。③フェムト秒からアト秒領域の超短パルス極端紫外光・軟X線の発生と核・電子ダイナミクスの実時間追跡。



（左から） 松田晃孝、高橋栄治、菱川明栄

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膜タンパク／脂質二重膜の集積構造を形成し、膜タンパクの生命機能発現を目指すとともに膜タンパクバイオセンサー応用を目指す。

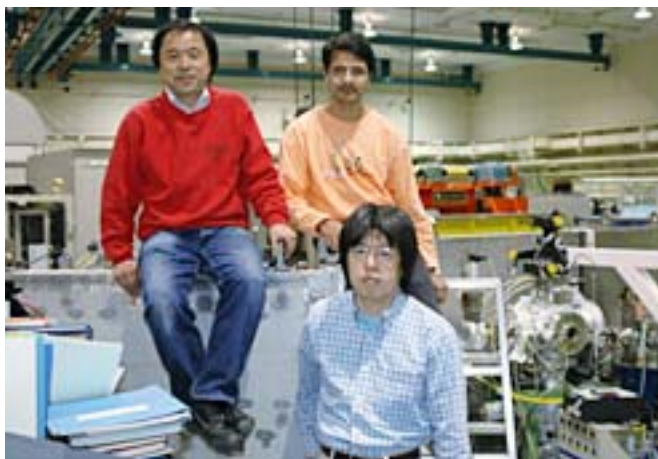
当グループで開発した新しい赤外反射吸収分光法により集積構造を評価するとともにSTMやAFMにより構造や反応機構を原子・分子レベルで評価解析する。



(後列左から) 宇野秀隆、KIM, Yong-Hoon、中井直史、RAHMAN, Mashiur
(前列左から) ZHANG, Zhenlong、三澤宣雄、宇理須恒雄、手老龍吾、清水厚子

2. 光子エネルギーが10から200電子ボルトの放射光を用いて、分子や金属内包フラーレン等のナノメーター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. レーザーと放射光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



(後列左から) 見附孝一郎、KAFLE, Bhim Prasad
(前列) 片柳英樹

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。

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) 岩橋建輔、吉井範行、山田篤志、三上泰治
(前列左から) 三浦伸一、岡崎 進

2. 界面和周波分光の理論計算と不均質化学

液体界面の関わる構造とダイナミックスを分子レベルで理解するために，電子状態理論および分子シミュレーションを用いて研究している。液体界面特有の反応機構，大気中微粒子表面の構造および物質移動などが研究対象である。近年とくに分子の電子状態モデリングに基づいて，界面和周波発生(SFG)分光を非経験的に計算し解析できる理論の開発に力を入れている。開発した計算手法を計算科学研究センターの計算資源を生かして実現し，界面SFG分光の理論の幅広い応用を目指している。



(左列後から) 森田明弘、石田干城、李洪珍、石山達也
(右列) 川口律子

計算分子科学第二研究部門

(着任予定)

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

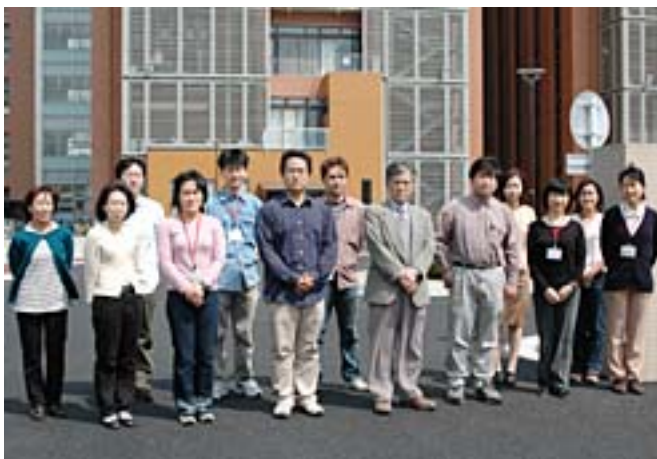
錯体化学実験施設

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。各部門は新設された山手3号館で研究を行っている。

錯体物性研究部門

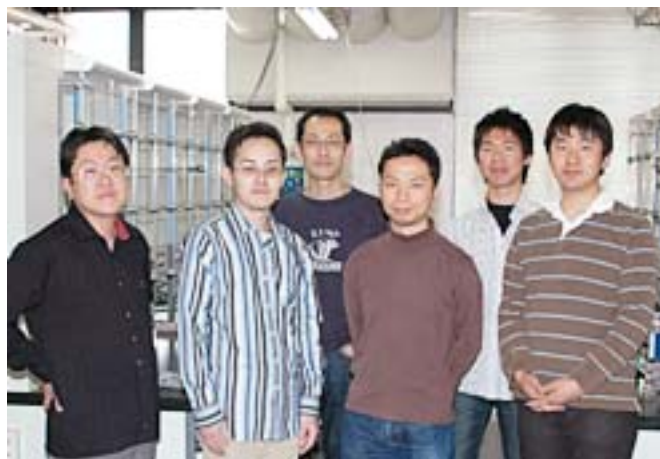
1. 我々は酸化還元活性な配位子を導入した遷移金属錯体の特異な機能発現について研究を行っています。これまでに配位子により酸化還元電位を制御したオキソ金属錯体はオキソ配位子上にラジカルを誘起することを明らかにしました。この錯体は有機化合物の電気化学的酸化反応を触媒することが期待されます。有機化合物の電気化学的酸化反応は燃料電池の半反応であり、有機化合物の持つ化学エネルギーを電気量として外部回路に取り出すことが可能となります。また、我々は特定の金属錯体



（後列左から）福嶋 貴、丹内秀典、宮里裕二、筒井香奈子、中川さつき
（前列左から）神谷道代、井上絢子、日野貴美、和田 亨、田中晃二、
小泉武昭、山口ゆみ子、岡村 玲

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, 研究を行ってる。現在, ①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, ②金属錯体による小分子活性化, ③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、渡辺孝仁
(前列左から) 松尾 司、田熊元紀、赤木史生、藤田光晴

配位結合研究部門 (客員研究部門)

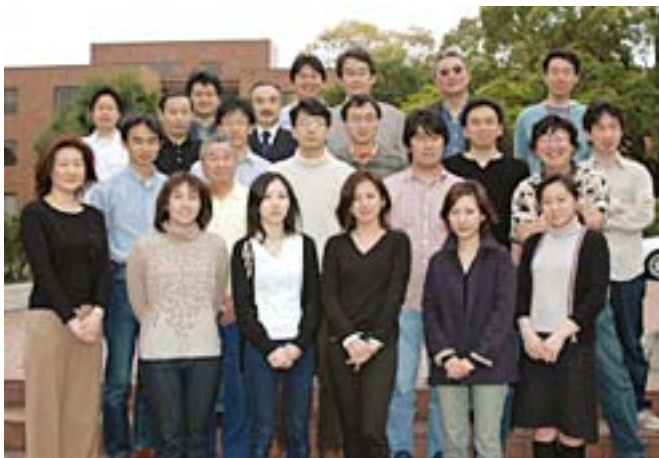
1. 錯体化学実験施設の他部門と協力しながら, 配位結合を有する超分子錯体の合成と物性について研究する。多核金属錯体や金属-金属結合を有する金属クラスターの合成(石井)を行い, X線結晶構造解析, NMR, IRを含めた各種分光測定により構造を明らかにする。また, タンパク質マトリクスを反応場とする水中の金属錯体の化学を行う(林)。

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。

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すらそれほど簡単



(後列左から) 松本健俊、水川哲徳、長澤賢幸、藤原基靖、松本吉泰、田中啓文、小川琢治、魚住泰広、高山敬史
(中列左から) 笹川弘明、小丸忠和、渡邊一也、黄偉、佃達哉、東林修平、山田陽一、牧田誠二
(前列左から) 坂井恭子、鈴木博子、中野路子、中川信代、渡辺よう子、神谷育代

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で、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、目で見え手で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。

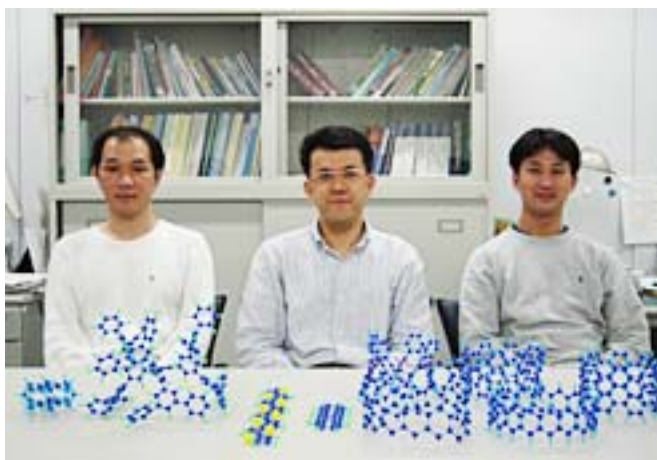
①共役巨大分子の合成、解析法。②ナノギャップ電極を用いた少数分子の電気特性計測。③ナノギャップ電極中での、分子・ナノ粒子の自己組織化。④走査プローブ顕微鏡を用いた単分子電気伝導に最適化した分子の設計と合成。⑤新規走査プローブ顕微鏡の開発。⑥新規ナノリソグラフィ法の開発。

2. 分子エレクトロニクス素子のための有機半導体の開発

新しい電子物性を目指した分子物質開発のため、 π 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。



(後列左から) 矢島高志、小澤寛晃
(前列左から) 黄 偉、田中啓文、小川琢治、河尾真宏



(左から) 阪元洋一、鈴木敏泰、大久保公敬

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) 荒川孝保、大高 敦、川出 令
(中列左から) 木村将浩、齋藤 香、前多泰成、百合草知子、皆川真規、福山尚志、魚住泰広
(前列左から) 山田陽一、佐々木時代、鈴鹿俊雅、別府朋彦、酒巻順一郎、木村 努、竹中和浩

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。①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。②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。③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。



(左から) 長澤賢幸、永田 央、槇 優

3. フラーレン部分構造を有するボウル型共役化合物（バッキーボウル）は，フルーレン類のモデルとしてだけでなく，ヘテロフルーレン類の出発原料として，またそ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。



(左から) 櫻井英博、滝澤 隆、東林修平、神谷育代、佐々木時代

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。



(後列左から) 中川信代、澤田 健、長尾昌志、山口 大、冬木正紀、NICKUT, Patricia

(前列左から) 渡邊一也、松本吉泰、松本健俊

2. 金属クラスターの創製と機能探索

有機単分子膜で保護された金属クラスターをサイズ選択的に調製し、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や触媒機能を分子レベルで理解することを目指している。



(左から) 岩永清子、根岸雄一、佃 達哉、甲斐憲子、角山寛規、中尾 聡

先導分子科学研究部門（客員研究部門）

1. 超高磁場核磁気共鳴（NMR）分光法を用いて、生体高分子の作動機構を原子分解能で解明することを目的とした研究を行っている。現在、以下のテーマに取り組んでいる。①生体を構成する主要な高分子である複合糖質およびタンパク質の精密立体構造解析。②NMRを利用した生体高分子の相互作用と内部運動の解析。③超高磁場固体NMR法の生体高分子の高次構造解析への応用。



（後列左から）山口芳樹、山田兼三、加藤晃一、西 洋平
（中列左から）鈴木麻衣子、中野路子、矢木宏和、神谷由紀子、
笹川祐明、杉原隆広
（前列左から）佐々木時代、住吉 晃、長野真弓、前野亜弥

■ 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（52頁参照）。



（後列左から）吉村大介、水野貴文、保坂将人、萩原久代、小杉信博、繁政英治
 （中列左から）IM, Hojun、中村永研、堀米利夫、林憲志、近藤直範、酒井雅弘、彦坂泰正、山崎潤一郎
 （前列左から）西龍彦、木村真一、蓮本正美、伊藤孝寛、加藤政博、持箸晃、櫻井陽子

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の再構築は完了し、平成16年度前半から本格的に稼働を開始した。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年度より導入した。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、光物性測定器開発研究部、光化学測定器開発研究部、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

UVSOR-II 電子加速器群を利用して，シンクロトロン放射光，自由電子レーザー，コヒーレントテラヘルツ放射光など，相対論的電子ビームを用いた光発生の研究を行っている。電子加速器の性能向上のための技術開発，その基礎となるビーム物理学研究，高輝度放射光を生成するための挿入型光源の開発，自由電子レーザーの実用化を目指した研究，極短パルスレーザーと電子ビームの相互作用を利用した新しい光発生法の開拓などに取り組んでいる。



(左から) 加藤政博、山崎潤一郎、持箸 晃、林 憲志、保坂将人

〔光物性測定器開発研究部〕 木村真一，伊藤孝寛

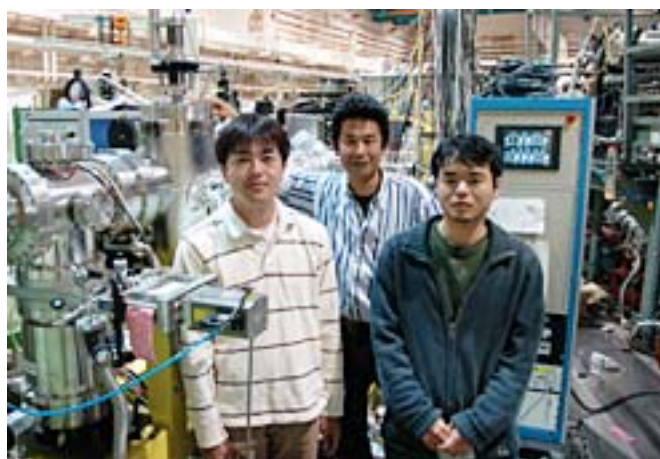
有機伝導体・希土類化合物・遷移金属化合物などの電子相関の強い系やMBEで作成された強相関薄膜の，新奇物性の起源であるフェルミ準位近傍の電子状態の研究を，放射光を使った高分解能角度分解光電子分光や赤外・テラヘルツ顕微分光，磁気光学などを使って行っている。また，これらの研究を行うための，高分解能真空紫外分光器，極低温高分解能角度分解光電子分光装置，高輝度赤外・テラヘルツビームライン，テラヘルツ顕微分光装置，赤外磁気光学イメージング装置等の開発研究も行っている。



(後列左から) 木村真一、IM, Hojun、吉村大介
(中列) 水野貴文
(前列左から) 伊藤孝寛、西 龍彦、櫻井陽子

〔光化学測定器開発研究部〕 繁政英治, 彦坂泰正, 金安達夫

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) 彦坂泰正, 繁政英治, 金安達夫

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〕

BL1A 軟X線吸収分光装置, BL1B 固体真空紫外分光装置 (1), BL2B 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

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）QUEMA, Alex, DIWA, Gilbert Asuncion、山中孝弥、常包正樹、佐藤庸一、鈴木さとみ
（中列左から）村上英利、小野晋吾、千葉 寿、ESTACIO, Elmer Surat、AKA, Gerard、石月秀貴、小野陽子、稲垣弥生
（前列左から）上田 正、猿倉信彦、松本吉泰、平等拓範、寺田三和子

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

我々のグループでは、遠赤外及び紫外領域におけるレーザー光源開発とその新しい応用の開拓を研究テーマとしている。遠赤外光源に関しては、振動数1 THz（波長300 μm ）付近の電磁波で、一般にテラヘルツ電磁波と称されるコヒーレント光源の開発及びその応用研究を進めている。我々は、磁場中においた半導体基板にチタンサファイアレーザーからの超短パルスレーザー光を照射すること



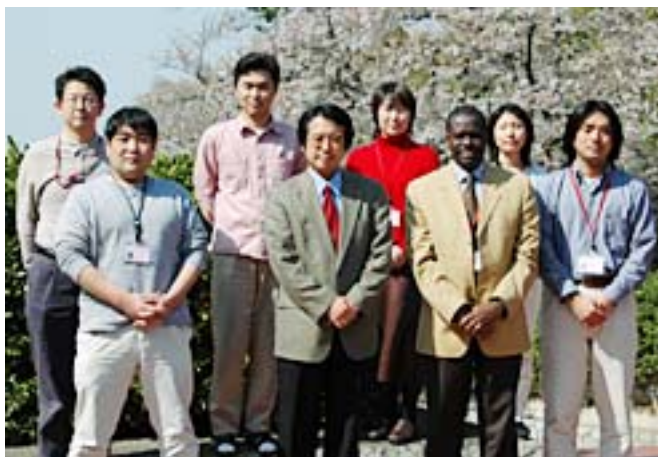
（後列左から）村上英利、小野晋吾、鈴木さとみ、QUEMA, Alex
（前列左から）ESTACIO, Elmer Surat、猿倉信彦、DIWA, Gilbert Asuncion

で、高出力のテラヘルツ電磁波を発生させることに成功している。現在は、この光源の高出力化、小型化を進めるとともに、この領域でのフォトニック結晶ファイバー等の導波路開発や分光研究を行っている。また紫外光源に関しては非線形結晶である $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ やレーザー利得媒質である $\text{Ce}^{3+}:\text{LiCaAlF}_6$ を用いた紫外全固体高出力レーザーの開発を行っている。さらに、複合フッ化物をベースとした真空紫外発光素子開発を進めている。

3) 特殊波長レーザー開発研究部 (平等拓範助教授, 石月秀貴助手)

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

中赤外域から紫外域までの広い波長域における多様な光計測・応用を可能とする高機能・広帯域波長可変クロマチップレーザーの実現をめざして研究を進めている。具体的には、レーザー材料の分光評価による基礎特性の評価、NdおよびYb系材料を用いた固体レーザーの高機能・高性能化、LiNbO₃やGaAs等の非線形材料を用いたQPM方式にもとづく波長変換など、新規光源の検討およびその新たな応用までを含めた研究開発を行っている。



(後列左から) 常包正樹、石月秀貴、小野陽子、稲垣弥生
(前列左から) 佐藤庸一、平等拓範、AKA, Gerard、齊川次郎

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开发を目指す。

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。

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、所内研究者と共に様々な新しい装置を製作するという業務を通じて、高度な装置開発技術を蓄積してきた。装置開発室はこれらの技術を積極的に生かし所内の実験研究を支える役割を担っている。

平成17年度後期からは、将来の展望をふまえ既存技術の高度化と革新技術の取得に日夜努力するという基本姿勢を基に、これまでは、分子研のみのニーズに答えるのが基本方針であったが、大学共同利用機関法人の一施設として、所外のニーズにも答えるよう分子研共同研究募集要項を改訂した。

装置開発室の体制として、機械技術、電子回路技術、ガラス加工技術の三つの技術分野グループで業務を行っている。機械技術グループでは、他大学や研究機関の技術部門との連携により、「マイクロ加工技術」として特に脆性材料の微細加工について技術開発を進め、新たな研究分野の要求に対応できる技術獲得を行っている。電子回路技術グループでは、近年のエレクトロニクス技術の進歩に対応すべく、ハードウェア記述言語による論理LSI設計、ネットワークやマイクロ・コンピュータ周辺の高速度データ転送技術の応用、シミュレータを用いた高周波回路設計に重点を置いて技術力の向上に努めている。ガラス加工技術グループでは、バーナーワークを中心に製作依頼業務を行っているが、研削及び研磨技術についても進めている。

主な設備備品

〔機械工作室〕

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）、ワイヤー放電加工機（三菱 DWC90H、シャルミー ROBOFIL2020SI）、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）、小型走査電子顕微鏡（KEYENCE VE-8800）、他一般工作機械及びCAD・CAMシステムなど。

〔電子回路工作室〕

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（HP 4275A）など。

〔ガラス工作室〕

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。



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

安全衛生管理室

安全衛生管理室は、研究所における快適な職場環境の実現と労働条件の改善を通じて、職場における職員の安全と健康を確保するための専門業務を行うことを目的として、平成16年4月に設置された。安全衛生管理室には、室長、専任及び併任の安全衛生管理者、安全衛生管理担当者、化学物質・放射線・高圧ガス・電気・レーザーなどのそれぞれの分野を担当する作業主任者が置かれている。安全衛生管理者は、少なくとも毎週1回明大寺・山手両地区を巡視し、設備、作業方法又は衛生状態



(後列左から) 加藤清則、田中彰治、山中孝弥、林 憲志、戸村正章
(前列左から) 高山敬史、堀米利夫、永田正明、小川琢治、鬼武尚子、
鶴田由美子

に危険及び有害のおそれがあるときは、直ちに、職員の健康障害を防止するための必要な措置を講じている。また、安全衛生管理室は、分子科学研究所全職員に対する安全衛生教育も行っており、そのための資料作成、各種資格取得の促進、専門家の養成などを行っている。さらに、職場の安全衛生を推進するために必要な、保護具、各種の計測機器、文献・資料、各種情報の集中管理を行い、分子研における安全衛生管理の中心としての活動を行っている。

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岡崎三研究所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、自然科学のグローバルな観点から研究展開をはかり、基礎科学のフロンティアを形成する事が期待されている。

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17年3月まで北川禎三教授が務めたが、4月から高田慎治教授に交代した。分子科学研究所からは、戦略的方法論研究領域に青野重利教授、木下一彦教授の後任教授、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阪大蛋白質の高木淳一教授が加わっている。

戦略的方法論研究領域

1. 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であるDcrA, Htr8などについても、その構造機能相関の解明を目指して研究を進めている。



（後列左から）青野重利、吉岡資郎、小澤一道、小林克彰
（前列左から）谷澤三佐子、稲垣さや香、西村宗十、吉村英哲

2. [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、倉橋拓也、鬨目理人、望月俊介

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) GU, Yuzong、EL-MASHTOLY, Samir、平松弘嗣、久保 稔、VAROTSIS, Constantinos、内田 毅、當舎武彦、長野恭朋、呂 明
(前列左から) 北川禎三、MAHINAY, Myrna、磯貝美穂、水木寛子、高 影、李 江

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110グループ、450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)を運用している。



(後列左から) 澤 昌孝、大野人侍、内藤茂樹、水谷文保、矢崎稔子、岩橋建輔、三上泰治、村越 稔、石田干城
(中列左から) 禿子 瞳、戸谷明子、川口律子、加納聖子、中岡由美子、池田由佳子、岡 沙佑美、山田篤志、吉井範行、石山達也、李 洪珍
(前列左から) 森田明弘、三浦伸一、永瀬 茂、岡崎 進、松田成信、手島史綱

技術課

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。技術課は所長直属の技術者組織であり、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、

①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。②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。③研

究室で研究を直接支援する。④研究所の安全衛生管理。⑤ネットワークの運用管理。⑥ホームページや各種印刷物を媒体とした広報活動。⑦見学の受け入れ対応。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と位置づけています。



(前列左から2番目から) 鬼武尚子、野川京子、加茂恭子、加藤清則、杉山加余子、大原恭子、鶴田由美子
他の人は各研究部門、付属施設の欄参照

技術課の役割は研究の動向により変化していくので、幅広く柔軟に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、技術課とリンクした受付機能も重要になります、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。

2005年4月1日に、上記の観点から技術課の体制を変更しました。書類上の所属と勤務している職場が異なる、というねじれた関係を改めました。その結果、係数は13のままですが、班が2班増えて7班になりました(下記参照)。当面は、この体制で業務を進めていきます。

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外部(新)技術の吸収及び既知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専門的技術の交流の場として、また分子研にない技術を取得する場として研究会を開催してきました。技術研究会の一つの特徴は、いろいろな失敗を積極的に発表しあうことです。つまり、「新しいことを行うのだから当然失敗はある。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。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る」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それぞれの機関の業務を行います。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、かつ分子研の保有する技術の幅を広くする役目を担っています。

(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。

(4) 資格取得

装置や施設の管理や運営を行うには、多くの資格が必要です。技術課員が取得している資格の種類だけでも、37種類あります。大学共同利用機関法人では、労働安全衛生法関係の国家資格・講習資格も必要です。技術職員は、業務上必要な資格を取得することで研究所の運用に積極的に関わっています。

大学共同利用機関法人になってから、安全衛生・防災の分野で、岡崎に設置されている3研究所——分子科学研究所・基礎生物学研究所・生理学研究所——の技術課の協力関係は強くなってきました。これからは、安全衛生以外の分野でも関係をより深めていこうと考えております。

参考：技術課の体制（2005.4.1）

一班（機器開発技術班）	機器開発技術一係 機器開発技術二係
二班（電子機器・ガラス機器開発技術班）	電子機器開発技術係 ガラス機器開発技術係
三班（極端紫外光技術班）	極端紫外光技術一係 極端紫外光技術二係 極端紫外光技術三係
四班（光計測技術班）	光計測技術係
五班（計算科学技術班）	計算科学技術一係 計算科学技術二係
六班（ナノサイエンス技術班）	ナノサイエンス技術一係 ナノサイエンス技術二係
七班（研究・広報技術班）	研究・広報技術係

■ 広報担当

研究所に関する広報活動は広報委員会が中心となって行っている。広報委員会の主な活動は、公式ホームページの作成・運営・管理、各種出版物の作成、研究会やセミナーのポスター作成である。法人化に伴い研究所は研究内容やその成果を広く理解してもらうことが、益々重要になってきており、今後さらに情報発信機能の強化・整備を予定している。



（後列左から）松本吉泰、横山利彦
（前列左から）原田美幸、中村理枝

大型研究設備

■ 超高磁場核磁気共鳴分光装置

核磁気共鳴（NMR）分光法はX線回折法とともに分子の精密構造解析に重要な役割を果たしている。しかしながら、複雑な高分子有機化合物、複合糖質やタンパク質等の生体高分子の精密立体構造解析をNMR法にて行う際には、複雑化した信号の著しい縮重および分子量の増大に伴う信号の広幅化もしくは消失などの問題を生じる。これらの問題を克服するためには高感度・高分解能な計測を可能とする超高磁場のNMR装置が不可欠である。本研究所に導入された超高磁場NMR装置は21.6テスラの超伝導磁石を心臓部としており、現存するNMR装置の中では世界でも最高レベルの感度と分解能（プロトン共鳴周波数920 MHz）を誇るものである（図1）。この装置により従来の装置では測定、解析が非常に困難であった糖鎖、巨大タンパク質等の複雑な生体高分子や高分子有機化合物の精密構造・機能解析が可能となり、生体高分子はもとより高機能ナノ触媒の開発をはじめとする材料科学においても新しい応用分野を切り拓くことが期待される。



図1 超高磁場NMR装置。

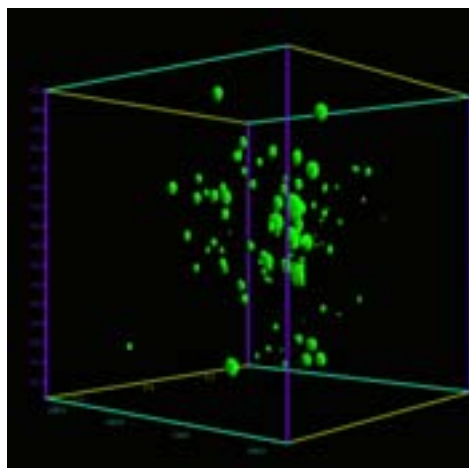
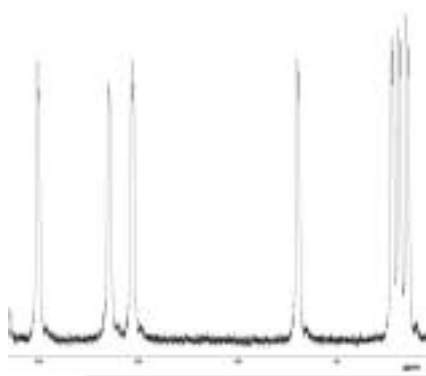


図2 糖鎖の高分解能一次元NMRスペクトル(左)と糖タンパク質の三次元NMRスペクトル(右)。

■ 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。

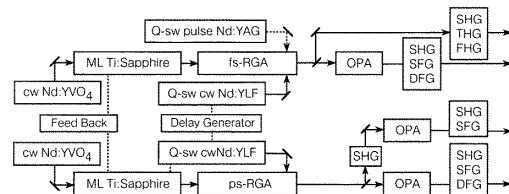


図1 ブロック図

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

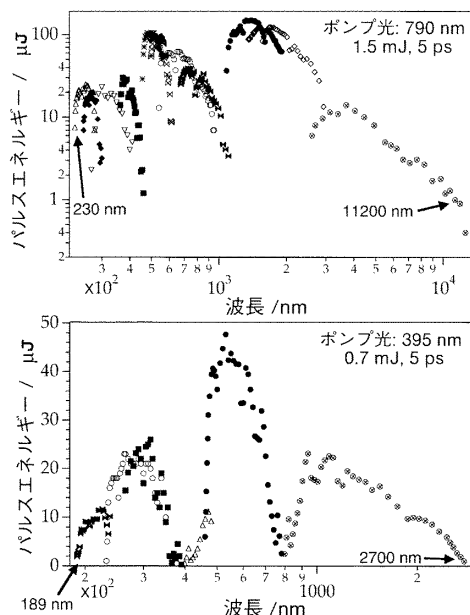
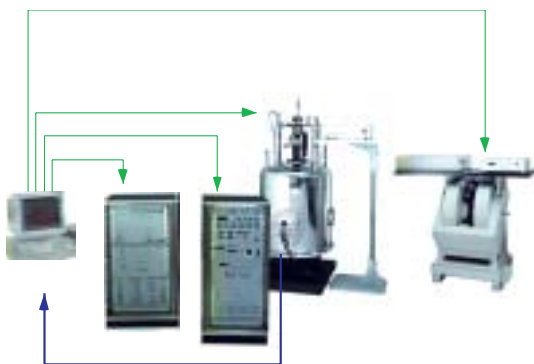
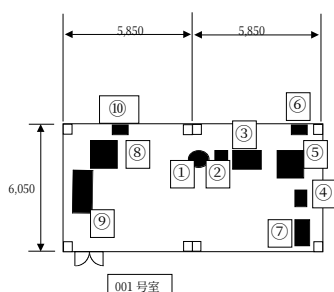


図2 ピコ秒OPAの波長域
基本波励起 (上)
二倍波励起 (下)

■ 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 ①Wバンド超伝導磁石②Wバンドマイクロ波ブリッジ③分光観測・制御ユニット④観測・制御用ワークステーション⑤パルスXバンド電磁石⑥電磁石電源・冷却水循環装置⑦液体窒素自動供給装置
Xバンド CW ESR装置 ⑧CW・Xバンド電磁石⑨CW・Xバンド分光器⑩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あわせるように、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
 アンプ出力: 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tron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。

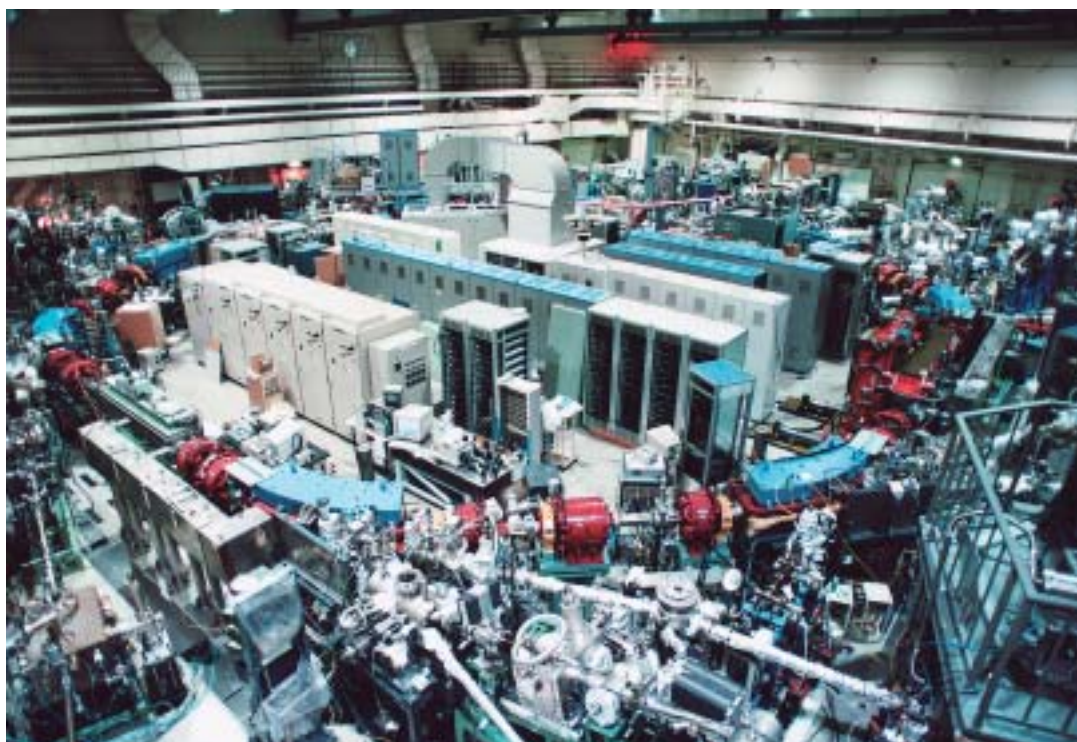
この極端紫外光源（ニックネーム、UVSOR）本体は、750 MeVの電子ストレージング（最高貯蔵電流、500 mA）であり、その入射器は15 MeVの線型加速器を前段加速器とする600 MeVのシンクロtronである。通常の偏向部では波長数Åまでの極端紫外光が利用できる。アンジュレータと呼ばれる挿入光源を直線部に挿入したビームラインでは、波長可変で、より高輝度の準単色光を利用することができる。研究の対象は気相及び凝縮相であり、主として次の7つの分野に力点を置いている。

①分光、②光電子分光、③光化学、④化学反応素過程、⑤固体・表面光化学、⑥光励起新物質合成、⑦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、BL2B：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行われた。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9月より高輝度放射光が利用されている。



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利用研究を積極的に推進している。そのために共同利用研究者宿泊施設を用意し、運営会議で採択されたテーマには、旅費及び研究費の一部を支給する。次の5つのカテゴリーに分類して実施している。(公募は前期・後期(年2回)、関係機関に送付。)

1. 課題研究 : 数名の研究者により特定の課題について行う研究で3年間にまたがることも可能。
2. 協力研究 : 所内(岡崎統合バイオサイエンスセンターを含む)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16年度

①課題研究

課 題 名	提案代表者名
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)
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)
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)

②協力研究

「ビニルラジカルのポテンシャル曲面と運動の理論的研究」を始め100件

③研究会

研 究 会 名	提案代表者
分子機能の物理化学——理論・計算化学と分光学による新展開	石田 俊正(分子研)
先端分子科学と境界領域への進展	鈴木 俊法(理化研和光)
キラル磁性体の磁気構造と磁気光学効果	井上 克也(分子研)
若手分子科学研究者のための物理化学研究会	中嶋 敦(慶應大理工)
原子・分子反応素過程における粒子相関	河内 宣之(東工大院理工)
分子エレクトロニクス研究会	松本 卓也(阪大産業科学研)
物理化学から生命科学を展望する——分子組織体から細胞へ	寺嶋 正秀(京大院理)
生体金属分子科学の展望	城 宣嗣(理化研播磨)
表面磁性科学の最近の展開	太田 俊明(東大院理)
分子情報伝達系の表面界面分子科学研究	宇理須恆雄(分子研)
有機固体の電子的物性・機能およびその応用に関する研究会	薬師 久彌(分子研)
生体分光光学と分子イメージングの最前線	田村 守(北大電子科学研)
大気科学における不均質系の分子科学	高見 昭憲(国立環境研)

④施設利用

1. 機器利用

「光学活性なシリルおよびゲルミル置換遷移金属錯体の構造と反応性に関する研究」を始め55件

2. 計算機利用

「分子内および分子間電荷移動の分子軌道法による研究」を始め153件

⑤UVSOR施設利用

「低級炭化水素の脱水素触媒に有効な担持モリブデン触媒活性種のL-XANESIによる微細構造解析」を始め128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来た。このような背景を基に、分子科学研究所は過去十余年、分子研レポートにお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、21世紀にふさわしい国際共同研究拠点としての体制を構築することが急務となっている。昨年度、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、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、昨年度、新たな国際共同研究のため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が推進された。また、本年度は更に多くの共同研究の提案があったが、研究所内の3名の教員による審査を経て、（規模を大幅に縮小して戴いた計画もあるが）10件の国際共同研究を実施することとした。言うまでもなく、研究所の独自の努力で遂行できる国際共同研究の範囲には限界がある。国際共同研究プログラムを更に拡充し、定着させていくための何らかの予算的裏付けを求めていく努力が重要である。

平成17年度分子研国際共同研究

代 表 者	研 究 課 題 名
宇理須恒雄	シリコン基盤上への生体情報伝達システムの構築と分子レベル機能解析
大森 賢治	超高精度コヒーレント制御法の開発と応用
平等 拓範	複屈折性による擬似位相整合非線形波長変換の多機能化
繁政 英治	分子の内核励起ダイナミックスの研究
木村 真一	量子臨界点近傍の電子状態の光学的・光電的研究
猿倉 信彦	テラワット紫外全固体超短パルスレーザーの開発
加藤 政博	蓄積リング自由電子レーザーの研究
松本 吉泰	固体表面における電子-フォノンダイナミックスの研究
小杉 信博	軟X線共鳴ラマン分光による価電子状態の研究
田中 晃二	オキシラジカル金属錯体の電子状態の解明

■ 日韓共同研究

分子科学研究所と韓国高等科学技術院（KAIST、Korea Advanced Institute of Science and Technology）の間で、1984年に分子科学分野での共同研究プロジェクトの覚え書き（2004年に更新）がかわされて以来、シンポジウムおよび韓国研究者の分子科学研究所への招聘と研究交流が行われてきている。

日韓合同シンポジウムは、第1回目を1984年5月に分子科学研究所で開催して以来、2年毎に日韓両国間で交互に実施している。最近では、2001年1月に分子科学研究所で第9回合同シンポジウム「気相、凝縮相および生体系の光化学過程：実験と理論の協力的展開」を、2003年1月に浦項工科大学で第10回合同シンポジウム「理論化学と計算化学：分子の構造、性質、設計」を、第11回合同シンポジウム「分子科学の最前線」は2005年3月に分子科学研究所で開催されて、活発な研究発表と研究交流はもとより両国の研究者間の親睦が高められてきている。

また、1991年から韓国の様々な大学および研究所から毎年3名の韓国の研究者を4ヶ月間ずつ招聘して共同研究を実施している。

■ 日中共同研究

日中共同研究は、1973年以来相互の研究交流を経て、1977年の分子科学研究所と中国科学院科学研究所の間での研究者交流で具体的に始まった。両研究所間の協議に基づき、共同研究分野として、①有機固体化学、②化学反応動力学、③レーザー化学、④量子化学をとりあげ、合同シンポジウムと研究者交流を実施している。2004年中国科学院化学研究所と覚書きの更新を行い、上記4分野を①物質科学、②光科学、③理論および計算科学の3分野に整理した。有機固体化学では1983年に第1回の合同シンポジウム（北京）以来3年ごとに合同シンポジウムを開催してきた。1995年10月の第5回日中シンポジウム（杭州）では日本から20名が参加し、引き続いて1998年10月22日－25日に第6回の合同シンポジウムを岡崎コンファレンスセンターで開催した。中国からは若手研究者10名をふくむ34名が、日本からは80名が参加し、盛況のうちに終了した。第7回は2001年11月19日－23日に広州の華南理工大学で開催され、日本からは井口洋夫教授や白川英樹教授をふくむ26名が参加し、中国からは90名が参加した。第8回は2004年11月11日－14日に岡崎コンファレンスセンターで開催した。中国からは40名が日本からは70名が参加した。

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、高畑尚之同大学先端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15年度までに200名（外国人25名、編入者2名を含む）の学生を受け入れ、さらに平成16年4月には、9大学から10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145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16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7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17
北海道大学	10										1
室蘭工業大学	2										
東北大学	11			1	1						
山形大学				6							
筑波大学				1		1					
宇都宮大学								2	2		
群馬大学	1										
埼玉大学	2										
千葉大学			1	1	1		1	1			
東京大学	28	1	1	1							
東京工業大学	20	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	3	1		1	1	2					
信州大学	2		1				1				
岐阜大学	2										
名古屋大学	58	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	26	4	2	2	1	2	1	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	3	1									
島根大学								1			
岡山大学	9	1	1				2	1			
広島大学	31	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	13										
長崎大学										2	
熊本大学	6										
宮崎大学					2	4					
琉球大学				1							
北陸先端科学技術大学院大学										2	
東京都立大学	17						3			2	
名古屋市立大学						4					8
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				
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							
岡山理科大学											1
計	375	25	27	28	17	25	24	20	18	16	11

国際交流

■ 海外からの研究者（平成16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

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
DROZDOVA, Olga	ロシア	ヨッフエ物理工学研究所上級研究員	15. 8. 1-16. 7.31
OSHEROV, Vladimir, Iosiphovich	ロシア	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.	ロシア	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
COUPRIE, Marie, Emmanuelle	フランス	原子力委員会主任研究員	16. 6.10-16. 9. 9
VAROTSIS, Constantinos	ギリシャ	クレタ大学教授	16.10. 1-17. 1.31
RÜHL, Eckart, Günther, Adolf	ドイツ	ブルツブルグ大学教授	16. 4. 6-16. 7. 5
WAN, Lijun	中国	中国科学院化学研究所教授	16. 7.10-16.10. 9
SUN, Wei-Yin	中国	南京大学錯体化学研究所教授	16.11. 1-17. 2.28
LABLANQUIE, Pascal	フランス	フランス放射光研究所 CNRS 主任研究員	16. 9. 1-17. 2.28
AKA, Gerard, Philippe	フランス	パリ国立高等化学学院教授	17. 3. 1-17. 5.31
TANATAR, Makariy	ウクライナ	ウクライナ科学アカデミー表面化学研究所シニア科学員	17. 2. 1-18. 1.31

3. 分子科学研究所外国人研究職員

BOO, Bong Hyun	韓国	忠南国立大学教授	16. 7. 8-16. 8.26 16.12.20-17. 2.28
PARK, Tae Jun	韓国	東国大学教授	16. 7. 1-16. 8.31 16.12. 7-17. 2. 6

4. 日本学術振興会招へい外国人研究者

LEE, Ha-Jin	韓国	Hanyang 大学博士研究員	14. 6.15-16. 6.14
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
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
QUEMA, Alex, Villareal	フィリピン	分子科学研究所講師(研究機関研究員)	16. 4. 1-18. 3.31
ZHANG, Fapei	中国	ドレスデン固体材料研究所研究員	16. 4. 1-18. 3.31
GU, Yuzong	中国	河南大学物理学科准教授	16. 7.10-18. 7. 9
PATRA, Digambara	インド	ユーリッヒリサーチセンター生物蓄能研究所フンボルト研究員	16. 9. 1-18. 8.31
XAVIER, Antonio, V.	ポルトガル	リスボン大学生物化学技術研究科教授	17. 2.21-17. 3.13
KOZLOWSKI, Pawel, Michal	アメリカ	ルイスビル大学化学学科助教授	16. 4.22-16. 8.21

5. 国際シンポジウム

LAHIRI, Joydeep	アメリカ	コーニング社研究員	17. 2.27-17. 3. 6
BOXER, Steven, G.	アメリカ	スタンフォード大学教授	17. 3. 1-17. 3. 6
HUCEK, Stanislav	チェコ	南ボヘミア大学助教授	17. 3. 1-17. 3. 8

TERRETTAZ, Samuel	ス イ ス	スイス連邦工科大学ローザンヌ校助手	17. 3. 1-17. 3.12
HUQUE, Monimul	ハンガリー	ハンガリー科学技術大学教授	17. 3. 1-17. 3.12
KNOLL, Wolfgang	ド イ ツ	マックスプランク研究所教授	17. 3. 2-17. 3. 6
EVANS, Stephen D.	イギリス	リード大学教授	17. 3. 2-17. 3. 8
JEUKEN, Lars	イギリス	リード大学博士研究員	17. 3. 2-17. 3. 8
CINDY, Berrie	アメリカ	カンザス大学助教授	17. 3. 2-17. 3.11
LEI, Sheng-Bin	中 国	中国科学院化学研究所助教授	17. 3. 2-17. 3.16
WAN, Li-Jun	中 国	中国科学院化学研究所教授	17. 3. 3-17. 3. 7
THORNTON, Trevor J.	アメリカ	アリゾナ州立大学教授	17. 3. 3-17. 3. 8
NING, Gu	中 国	南西大学教授	17. 3. 3-17. 3. 8
CHOI, Jeong-Woo	韓 国	ソガン大学教授	17. 3. 3-17. 3. 8
LEE, Hea Yeon	韓 国	電子工学通信研究所上級研究員	17. 3. 3-17. 3. 8
HAMERS, Robert J.	アメリカ	ウィスコンシン大学マディソン校教授	17. 3. 4-17. 3. 8

6. 国際共同研究

LIM, Jong Kuk	韓 国	ソウル国立大学化学科大学院生	16. 4.15-16.10.16
SICHELSCHMIDT, Joerg	ド イ ツ	マックスプランク固体化学物理研究所研究員	16. 5.24-16. 6. 6
LEI, Sheng Bin	中 国	中国科学アカデミー博士研究員	16. 5. 9-16.11.11
RUBENSSON, Jan-Erik	スウェーデン	ウプサラ大学物理学助教授	16. 6.21-16. 7.17
BOULANGER, Benoit	フランス	ジョセフフーリエ大学教授	16. 7.17-16. 7.29
GIRARD, Bertrand	フランス	ポールサバティエ大学教授	16. 7.14-16. 8. 5 16.12. 6-17.12.16
KIM, Dongho	韓 国	延世大学化学科教授	16. 8.23-16. 8.26
MENEGHETTI, Moreno	イタリア	パドバ大学物理化学科教授	16.10.24-16.10.30
MEYER, Michael	フランス	南パリ大学主任研究員	16.11.28-16.12.18
SIMON, Marc	フランス	南パリ大学主任研究員	17. 1.15-17. 1.29

7. 科学研究費補助金

LE, Hoang Hai	ベトナム	Center for Quantum Electronics. Institute of Physics	16. 6. 2-16. 7. 1 16.10.14-16.12.16
EL-MASHTOLY, Samir Fathy Abd El-Monem	エジプト	Ain Shams University	16. 7.27-16. 9.30
ISHKHANYAN, Artur	アルメニア	アルメニア国立科学アカデミー	16. 9.14-16.12.15
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	16. 9.21-16.12.24
XU, Wei	中 国	中国科学院化学研究所	16.11.11-16.11.15
LIU, Huibiao	中 国	中国科学院化学研究所	16.11.11-16.11.15
KIM, Harold. D.	アメリカ	スタンフォード大学	16.11.23-16.11.29
PALANISAMI, Akilan	アメリカ	イリノイ大学	17. 2. 2-17. 3.26

8. 受託研究

NICOLAIE, Pavel	ルーマニア	レーザーとプラズマ物理国立研究所	16. 4.29-16. 5.15
LUPEI, Voicu	ルーマニア	レーザーとプラズマ物理国立研究所	17. 2.28-16. 3.31
CHEON, Jin Woo	韓 国	Yonsei 大学	17. 3.15-17. 3.18
KANG, Young Kee	韓 国	Chungbuk National 大学	17. 3.15-17. 3.18
KWON, Young	韓 国	Sungkyunkwan 大学	17. 3.15-17. 3.18
LEE, Jin Yong	韓 国	Chonnam National 大学	17. 3.15-17. 3.18
YANG, Mino	韓 国	Chungbuk National 大学	17. 3.15-17. 3.18

KIM, Sehun	韓国	韓国高等科学技術院 (KAIST)	17. 3.15-17. 3.18
CHOI, Jong-Ho	韓国	Korea 大学	17. 3.15-17. 3.18
CHOI, Cheol Ho	韓国	Kyungpook National 大学	17. 3.15-17. 3.18
Joo, Taiha	韓国	Postech	17. 3.15-17. 3.18
SHIN, Kook Joe	韓国	Seoul National 大学	17. 3.15-17. 3.18
SHIN, Seokmin	韓国	Seoul National 大学	17. 3.15-17. 3.18
LEE, Seonghoon	韓国	Seoul National 大学	17. 3.15-17. 3.18
PARK, Seung C.	韓国	Sungkyunkwan 大学	17. 3.15-17. 3.18
KIM, Dongho	韓国	Yonsei 大学	17. 3.15-17. 3.18
WARD, H, Thompson	アメリカ	Kansas 大学	16. 5.26-16. 5.29
CINDY, L, Berrie	アメリカ	Kansas 大学	16. 5.26-16. 5.29
MICHAEL, W. Schmidt	アメリカ	アイオワ州立大学エイメス研究所	16. 9.16-16.10.16
BRAAMS, Bastiaan	アメリカ	Emory 大学	17. 3.13-17. 3.18
JING, Lu	中国	北京大学物理学科	16. 7. 1-16. 7.10 16.12.24-16.12.31
PHILIPPE, Anthony, Bopp	フランス	ボルドー大学化学科	16. 6. 8-16. 6. 9
KULKARNI, Anant	インド	Pune 大学	16.10.19-16.10.31

9. 共同研究

BYER, Robert L.	アメリカ	スタンフォード大学ギンツトン研究所教授	17. 3.23-17. 3.24
GAUME, Romian	アメリカ	スタンフォード大学ギンツトン研究所ポスドク	17. 3.23-17. 3.24
WISDOM, Jeffrey	アメリカ	スタンフォード大学ギンツトン研究所大学院生	17. 3.23-17. 3.24

10. 所長招へい協力研究員

GUHR, Markus	ドイツ	Freir Universitat Berlin 院生	16. 8. 2-16. 8. 3
LEVIS, Robert, J.	アメリカ	テンプル大学リサーチディレクター	16. 7.29-16. 8. 1
FEJER, Martin	アメリカ	スタンフォード大学教授	16. 8.22-16. 8.24
LAURELL, Fredrik	スウェーデン	スウェーデン王立工科大学教授	16. 8.28
CANALIAS, Carlota	スウェーデン	スウェーデン王立工科大学院生	16. 8.28
LI, Yongfang	中国	中国科学院教授	16.11.11-16.11.15
SHUAI, Zhigang	中国	中国科学院教授	16.11.11-16.11.15
LI, Yuliang	中国	中国科学院教授	16.11.11-16.11.15
LIU, Minhua	中国	中国科学院教授	16.11.11-16.11.15
BAI, Fenglian	中国	中国科学院教授	16.11.11-16.11.15
SONG, Yanlin	中国	中国科学院教授	16.11.11-16.11.15
DAVID, Giedroc	アメリカ	Texas A&M faculty 教授	16.10.14-16.10.16
DELEUZE, Michael Simon Daniel G.	ベルギー	リンブルグ中央大学教授	16.10.26-16.10.29
GUSTACV, G. Gerber	ドイツ	Fakultut fur Physik und Astronomie 教授	16.11.25-16.11.26
COUPRIE, Marie Emmanuelle	フランス	Commissariat for Atomic Energy 主任研究員	17. 1.27-17. 2. 2
PETER, Day	イギリス	The Royal Institution of Great Britain	17. 3. 8-17. 3.11
LARSSON, Mats	スウェーデン	ストックホルム大学教授	17. 3. 1-17. 3. 3

11. 招へい研究員

YANG, Chunhe	中国	中国科学院助教授	16.11.11-16.11.15
GENG, Yanhou	中国	中国科学院助教授	16.11.11-16.11.15
LEE, In-Ho	韓国	韓国基礎科学研究所上級研究員	16.12. 5-16.12.10

WANG, Jian	シンガポール	シンガポール大学研究員	16. 12. 5-16.12.10
TANTIRUNGROTECHAI, Yuthana	タイ	マヒドール大学助手	16. 12. 5-16.12.10
SOMSOOK, Ekasith	タイ	マヒドール大学助手	16. 12. 5-16.12.10
PROMMEENATE, Peerada	タイ	キングモンカット工科大学研究員	16. 12. 5-16.12.10
PORNPUTTAPONG, Natapol	タイ	国立遺伝子工学及び人間工学研究所研究員	16. 12. 5-16.12.10
HU, Chin-Kun	台湾	台湾中央研究所教授	16. 12. 5-16.12.11
WU, Ming-Chya	台湾	台湾中央研究所教授	16. 12. 5-16.12.10
SHAIKH, Md. Aftab Ali	バングラデシュ	ダッカ大学講師	16. 12. 5-16.12.10
MO, Yu-Jun	中国	江南大学教授	17. 2. 2-17. 3.30
POBRE, Romeric Ferrer	フィリピン	デラシェール大学助教授	17. 2. 9-17. 3.31
SICHELSCHMIDT, Joerg	ドイツ	マックスプランク固体化学物理研究所上級研究員	17. 2.13-17. 3.26
ESTACIO, Elmar Surat	フィリピン	フィリピン大学研究員	17. 2.16-17. 3.31
BRADEANU, Ioana	ドイツ	ブルツブルグ大学院生	17. 2.21-17. 3.28
NOH, Tae Won	韓国	ソウル大学教授	17. 2.25-17. 3. 6
MOON, Soon Jae	韓国	ソウル大学院生	17. 2.26-17. 3. 6
ISHKHANYAN, Artur	アルメニア	アルメニア国際科学アカデミー教授	17. 2.28-17. 3.31
MANUKYAN, Ashot	アルメニア	アルメニア国際科学アカデミー研究員	17. 2.28-17. 3.31
WARD, H. Thompson	アメリカ	カンザス大学助教授	17. 3. 2-17. 3.11
KWON, Yong Seung	韓国	成均館大学教授	17. 3.23-17. 3.29

現 員・財 務・構 内 図

1 現 員

(平成17年4月1日現在)

区 分	所 長	教 授	助教授	助 手	小 計	技術職員	計
所 長	1				1		1
理論分子科学研究系		2 (1)	2 (1)	5	9 (2)		9 (2)
分子構造研究系		2 (2)	1 (0)	2	5 (2)		5 (2)
電子構造研究系		3 (1)	0 (1)	4	7 (2)		7 (2)
分子集団研究系		2 (1)	1 (1)	3	6 (2)		6 (2)
相関領域研究系		0 (1)	0 (1)	2	2 (2)		2 (2)
極端紫外光科学研究系		2 (0)	2 (0)	4	8 (0)		8 (0)
計算分子科学研究系		1	1	2	4		4
研 究 施 設		5 (4)	9 (2)	21	35 (6)		35 (6)
技 術 課						37	37
合 計	1	17 (10)	16 (6)	43	77 (16)	37	114 (16)

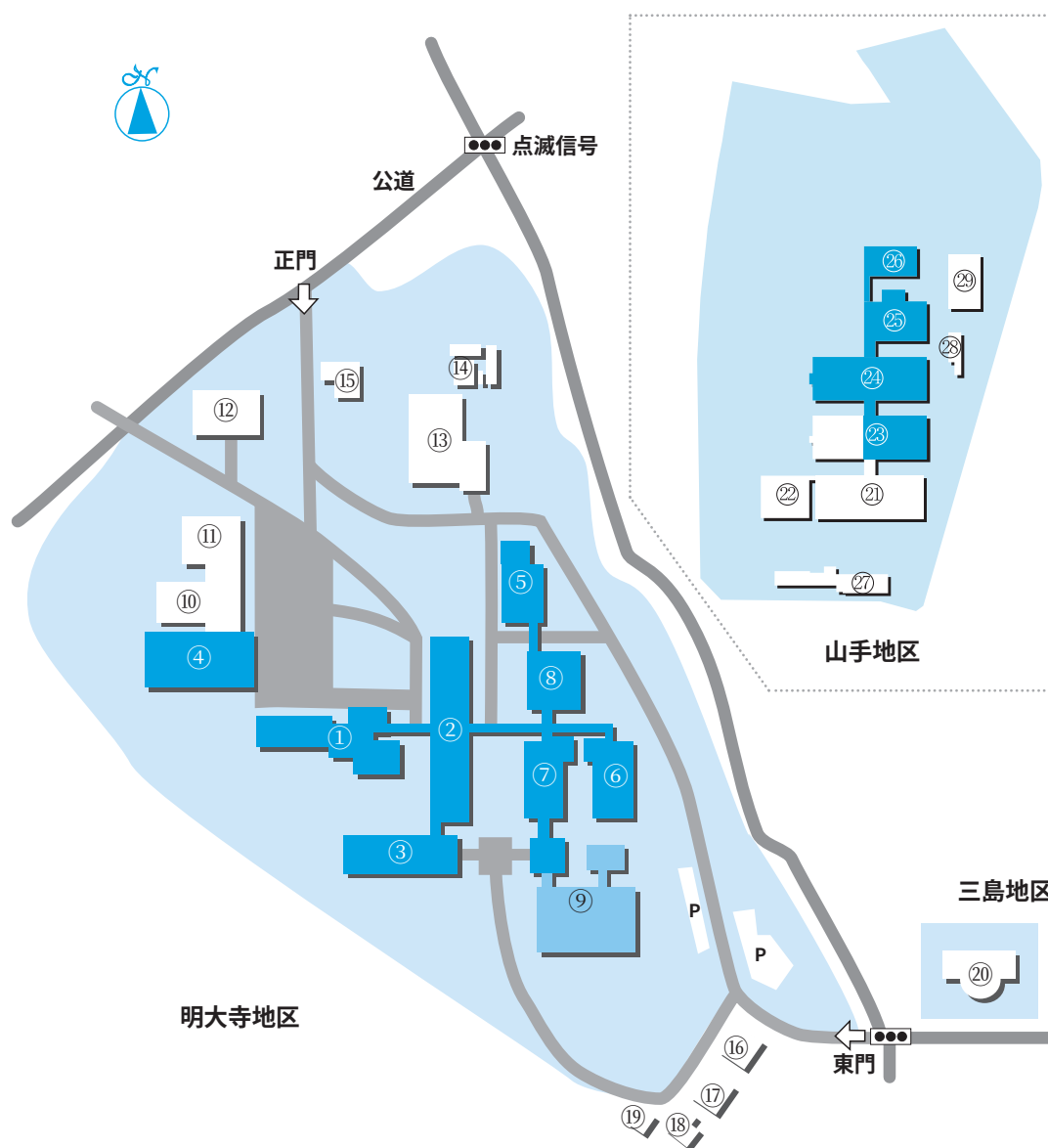
() 内は客員数で、外数である。

2 財 務

(平成16年度決算額)

人件費	物件費	計
千円 1,264,647	千円 2,379,965	千円 3,644,612

3 構内図



施設	面積m ²	施設	面積m ²
①研究棟	2,752	⑭廃棄物貯蔵庫	60
②実験棟	8,857	⑮警備員室	74
③南実験棟	3,921	⑯～⑰職員住宅	384
④計算科学研究センター棟	2,474	⑳岡崎コンファレンスセンター	2,863
⑤極低温棟	1,527	㉑山手1号館A	4,674
⑥化学試料棟	1,063	㉒山手1号館B	2,303
⑦レーザーセンター棟	1,053	㉓山手2号館	8,453
⑧装置開発棟	1,260	㉔山手3号館	10,757
⑨極端紫外光実験棟	3,097	㉕山手4号館	3,813
⑩管理棟	2,371	㉖山手5号館	664
⑪図書館	2,002	㉗山手ロッジ	1,007
⑫職員会館	1,575	㉘実験排水処理施設	111
⑬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

岡崎統合事務センター

センター長

栗城繁夫

総務部		部	長	(兼務)	栗	城	繁	夫
総務課	課長	補佐	長		田水	境野	守利	康均
	課長	補佐	長		水神	野谷	利昇	昌治
課長	課長	補佐	長		鈴桑	木原	博高	明士
	課長	補佐	長		小服	林部	高康	史敏
課長	課長	補佐	長		古山	田本	克寛	幸代
	課長	補佐	長		杉廣	浦岡	鈴義	彦
国際研究協力課	課長	補佐	長		平行	尾田	耕一	二豊
	課長	補佐	長		山山	田田	一伸	郎郎
課長	課長	補佐	長		伊神	藤谷	良志	二夫
	課長	補佐	長		神	谷	良志	夫
財務部		部	長		原	口	正	明
財務課	課長	補佐	長		林白	井垣	正啓	憲夫
	課長	補佐	長		稲二	村藤	道浩	雄臣
課長	課長	補佐	長		加村	木井	教	厚悦
	課長	補佐	長		浅			誠
調達課	課長	補佐	長		葛藤	西本	和嘉	勇夫
	課長	補佐	長		浦加	野藤	八	實之
課長	課長	補佐	長		高	藤		郎
	課長	補佐	長					
施設課	課長	補佐	長		渡渡	邊谷	壽省	夫一
	課長	補佐	長		佐々	部中		真剛
課長	課長	補佐	長		井浅	川野	正一	幸夫
	課長	補佐	長					

平成17年4月1日現在



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/>

