

5. 各種事業

大学共同利用機関である分子科学研究所は、国際的な分子科学研究の中核拠点として所内外の研究者を中心とした共同研究と設備を中心とした共同利用を積極的に推進し、大学等との人事流動や国際交流を活性化しながら、周辺分野を含めた広い意味の分子科学の発展に貢献する使命を持っている。

分子科学研究所が行う事業には、『先端的な研究を推進する拠点事業』、『国内の研究者への共同研究・共同利用支援に関する事業』、『研究者の国際ネットワーク構築に関する事業』、『研究力強化推進事業』がある。予算的には運営費交付金の一般経費・特別経費、文部科学省の委託事業、日本学術振興会等の競争的資金で実施している。運営費交付金の一般経費以外はいずれも期間が定められており、運営費交付金一般経費も毎年削減を受けている。

(1) 『先端的な研究を推進する拠点事業』の UVSOR 共同利用事業（放射光分子科学）、エクストリームフォトンクス連携事業（レーザー分子科学）に関連するものとして、光創成ネットワーク研究拠点プログラム（分子科学研究所は分担）を 2017 年度まで受託、実施した。また、スーパーコンピュータ共同利用事業（理論計算分子科学）に関連するものとして、文科省の「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）の構築」プロジェクトは 2015 年度で終了し、2014 年度より「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発（ポスト「京」重点課題⑤）」が実施された。これは 2019 年度で終了し、富岳成果創出加速プログラムとして継続した（分子科学研究所としての活動は行っていない）。さらに、理論計算に関連するものとして、文科省「元素戦略プロジェクト」の「触媒・電池の元素戦略研究拠点」（分子研は分担）を受託、2021 年度まで実施した。2018 年度より文部科学省から「光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP」事業を、2022 年度から内閣府／科学技術振興機構から「ムーンショット型研究開発事業」を受託している。

(2) 『国内の研究者への共同研究・共同利用支援に関する事業』のうち、実験研究のための共同利用は機器センターが担当している。研究設備ネットワーク事業（2007 年度から「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」、2010 年度より「大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用と共同研究の促進」）を進めている。また、2011 年度までは文科省の研究施設共用イノベーション創出事業「ナノテクノロジーネットワーク」の「中部地区ナノテク総合支援」プロジェクトの幹事機関として、2012 年度より文科省「ナノテクノロジープラットフォーム」事業の「分子・物質合成プラットフォーム」の代表機関（機器センター内にナノテクノロジープラットフォーム運営室を設置）として、共同利用設備の共用を推進している。この事業は 2021 年度で終了し、後継事業として文科省「マテリアル先端リサーチインフラ」が 2021 年度から開始することとなり、分子科学研究所はそのスポーク機関として参画している。2022 年度からはこの事業が本格稼働した。前述の大学連携研究設備ネットワーク事業については、当初の 3 つの目的である、全国的設備相互利用、設備復活再生、最先端設備重点配置のうち、第 2 期中期計画期間では、最初のものだけが生き残り実施されることになったが、2015 年度には 2016 年度以降（第 3 期中期計画期間）の事業の方向性を見直した。一方、後 2 者については、共同利用設備の安定的な運営を勧奨し、旧分子スケールナノサイエンスセンターの共同利用設備をすべて機器センターに集約し、予算面では「マテリアル先端リサーチインフラ」事業予算（外部資金）を主な財源とし、運営費交付金一般経費も用いながら運用している。

(3) 『研究者の国際ネットワーク構築に関する事業』としては、個人ベースの萌芽的な取り組みと組織ベースの国際共同研究拠点の形成がある。従来からの外国人顧問制度、客員外国人制度、招へい外国人制度、国際研究集会（岡崎コンファレンスなど）を実施すると同時に、第1期中期計画期間には独自の分子研国際共同プログラムを進めた。このプログラムは個人ベースの国際共同研究のきっかけ（萌芽的国際共同）を作るものである。さらに国際共同研究拠点として組織ベースで取り組むために、第2期中期計画期間においては、自然科学研究機構としての運営費交付金特別経費で「自然科学研究における国際的学術拠点の形成」事業がスタートした。分子科学研究所では、「分子科学国際共同研究拠点の形成」による新たな取組（協定締結等）を進めている。また、日本学術振興会の多国間交流事業「アジア研究教育拠点事業」の一環として、「物質・光・理論分子科学のフロンティア」（2006年度～2010年度）の事業を行ってきた。5年間、日中韓台の4拠点（協定をそれぞれ締結）を中心にしてマッチングファンド方式での様々な試みを行った。また、分子科学研究所（総合研究大学院大学として）は、外務省による21世紀東アジア青少年大交流計画（JENESYSプログラム）の枠で設定された日本学術振興会の「若手研究者交流支援事業」に2008年度より2011年度まで毎年、応募・採択され、対象国の若手研究者（院生を含む）の人材育成に貢献してきた。これらの事業については、現在、これまでの経験を踏まえて精査を行った上で集中・重点化し、いくつかの予算枠を組み合わせる形で実施している。なお、2015年度以降はIMS-IIPA（International Internship Program in Asia）としてアジア地区の国際ネットワークを構築するとともに、米国、欧州、イスラエルとの若手研究者を対象とした国際共同研究（こちらはIMS-IIPと呼ぶ）を強化しているところである。

(4) 『研究力強化推進事業』

自然科学研究機構として文科省の「研究大学強化促進事業」の予算を受けて機構として一体的に行う事業である。2013年10月より10年計画で開始された。詳しくは5-8を参照のこと。

5-1 新分野創成センター（自然科学研究機構）

自然科学研究機構は、共同研究・共同利用の研究機関として広範な自然科学の先端的研究を推進するとともに、未解明の課題に挑戦するため、従来の研究領域の枠組みを越えて多様な研究者が協働する研究の場を創り出し、研究者コミュニティの発展に貢献することを目的としている。この従来の研究領域の枠組みを超えた「新たな研究領域の開拓」を目的として、2009年に新分野創成センターが設立され、新しい脳科学の創成を目指すブレインサイエンス研究分野と、広範な自然現象を新たな視点から理解することを目的としたイメージングサイエンス研究分野の二つの研究分野でスタートした。2013年には第三の研究分野として、宇宙における生命研究分野を立ち上げ、これは2015年度からアストロバイオロジーセンターに移行した。またブレインサイエンス研究分野とイメージングサイエンス研究分野は2018年度に機構直属の組織として新しく設立された生命創成探究センターに移行した。

これによって設立後9年を経て新分野創成センターの三つの研究分野は発展的に解消することとなった。これらに代わって数年間にわたって推進する新たな研究領域の設定に関して、2015年に新分野創成センターの中に新分野探索室を設置し、機構の5機関から委員が出て議論を進めることとなった。新分野探索室での議論の結果として、2018年度から新たな研究分野として、「先端光科学」を設定することが決定した。また、新分野探索室で設定する研究分野以外に、コンソーシアム型共同研究を推進する体制として「プラズマバイオ」を今一つの研究分野として、やはり2018年度から設定することとなった。

ここでは、特に分子科学研究所が深く関与することが想定される、先端光科学研究分野について述べる。光学顕微鏡や分光学における先端的な技術は、これまで自然科学の各分野にブレークスルーをもたらし、20世紀にはレーザーや放射光などの新しい光源の出現によりそれらが著しく加速した。それらはさらに、観察対象の性質を調べる道具としてのみならず、光による制御の技術を生み出し、光科学の広い分野への応用を可能とした。現在においても光の新たな特性に関する発見や解明が進展を見せ、光イメージングにおいては多様な超解像の手法が創出されるなど、新たな光操作技術や光計測技術の発展とその広い自然科学分野での応用が期待されている。新分野創成センターに設置された先端光科学研究分野では、光そのものの特性に関する新原理の発見とそれに基づいた新装置の開発ではなく、「原理自体は（ほぼ）解明されているが、生命科学や物質科学、その他自然科学諸分野への新原理の技術的応用が未だなものに焦点を当て、新分野としての萌芽を探索し、展開を図る」ことを目的として、活動を行う。

この目的に沿って研究活動を推進する体制として、教授会議を組織し、各機関から1名ずつの併任教員（教授または准教授）、機構内の教授が兼任する分野長（現在分子研が担当）、新分野創成センター長、及び数名の所外からの客員教授・准教授で構成することとなった。また先端光科学研究分野で独自の研究活動を推進するために、専任の特任助教を雇用することとなった。

このような体制を構築した上で、新たな分野融合的発想に基づく光技術の適用法や新技術開発につながる先駆的・挑戦的な萌芽研究を開拓・推進する「共同研究」、およびそれらを探索する「研究会」のプロジェクト提案を広く機構内外から公募し、教授会議での審査を経て、採択課題を推進することとなった。2021年度は、10件の共同研究を採択し（うち5件が機構外からの応募）、研究活動を支援している。また教授会議で企画するワークショップとして、2019年度には“Chiro-Optical Effects in Nanomaterials”を、2020年度にはオンラインで「先端光科学研究分野勉強会」を開催した。2021年度は、日本学術会議と分子科学研究所で共同主催で開催された「アト秒レーザー科学研究施設（ALFA）計画の現状と展望」に共催として加わる形とした。2022年度は、学術変革領域研究A「キラル光物質科学」との共催として、ワークショップ「キラルな光とキラルな物質」を開催した。専任の特任助教は2018年度に公募によって広く人材を募集し、教授会議構成員の内の5名で構成される選考委員会で選考が行われて候補者が決定し、2018年度末に着任して研究活動を行っている。

5-2 光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP (文部科学省)

量子コンピュータ・量子シミュレータ・量子センサなど、近年開発競争が激化している量子科学技術は、電子や原子の「波の性質」を活かした質的に新しいテクノロジーである。スパコンでさえ10の何百乗年もかかるような計算を1秒以内で終わらせることができ、機能性材料・薬剤・情報セキュリティ・人工知能などに革命を起こし得るため、世界主要各国の科学技術政策において莫大な投資が行われている。例えば米国では、国防省や国立科学財団 (NSF) 等により毎年約200億円オーダーの投資が行われている他、NSFおよびエネルギー省 (DOE) において2019年より新たな量子科学技術プロジェクトが始まった。EUでは2018年から総額約1300億円規模を投資する10年プロジェクト「Quantum Technology Flagship」が進行中だ。英国では2014年から5年間で約500億円を投入した「The UK National Quantum Technologies Programme」の第2期が始まった。中国政府は、「科学技術イノベーション第13次五カ年計画 (2016年)」の重点分野として、量子通信と量子コンピュータを重大科学技術プロジェクト、量子制御と量子情報を基礎研究の強化に位置づけている他、1000億円以上を投資して量子情報科学の国立研究所を合肥に建設中である。民間企業でも、Google, IBM, Microsoft, Intel等のITジャイアントが2000年代半ば以降、量子情報技術に莫大な投資を進めている。これらの国際動向を受けて、日本でも、文部科学省の科学技術・学術審議会において、量子科学技術に関する政策課題を議論する「量子科学技術委員会」が2015年6月に発足し、ここでの議論を踏まえ2018年に新たな国家事業「光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP」(2018～2027年度;2018年度予算総額22億円)がスタートした。本事業は、経済・社会的な重要課題に対し、量子科学技術を駆使して、非連続的な解決 (Quantum leap) を目指す研究開発プログラムである (<https://www.jst.go.jp/stpp/q-leap/index.html>)。①「量子情報処理 (主に量子シミュレータ・量子コンピュータ)」②「量子計測・センシング」③「次世代レーザー」の3つの技術領域から成り立っている。

分子科学研究所では、光分子科学研究領域の大森賢治教授が量子科学技術委員会の専門委員・副主査として、我が国の量子科学技術に関する政策課題・将来展望の議論を先導する立場を果たしてきた。また、大森教授が研究代表者を務める新たな研究プロジェクト「アト秒ナノメートル領域の時空間光制御に基づく冷却原子量子シミュレータの開発と量子計算への応用」がQ-LEAP「量子情報処理」領域の大規模・基礎基盤研究に採択され進行中である。共同研究機関である浜松ホトニクス中央研究所・京都大学・岡山大学・近畿大学・オックスフォード大学・ハイデルベルグ大学・ストラスブール大学・インスブルック大学らと緊密に連携して、卓越したコアコンピタンスを有し、量子力学の根源的な問題に深く鋭く切り込む全く新しい量子シミュレータ・量子コンピュータの開発を目指す。この他、同事業の採択課題「Flagship プロジェクト:先端レーザーイノベーション拠点」(研究代表者:藤井輝夫(東京大学))の「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」部門には平等拓範特任教授が、「Flagship プロジェクト:量子生命技術の創製と医学・生命科学の革新」(研究代表者:馬場嘉信(量子科学技術研究開発機構))および「基礎基盤研究:複雑分子系としての光合成機能の解明に向けた多次元量子もつれ分光技術の開発」(研究代表者:清水亮介(電気通信大学))には石崎章仁教授が、分担者として加わっており、同事業に寄与している。

5-3 ムーンショット型研究開発事業（内閣府／科学技術振興機構）

「ムーンショット型研究開発事業」は、内閣府の主導により、超高齢化社会や地球温暖化問題など重要な社会課題に対し、我が国発の破壊的イノベーションの創出を目指し、従来技術の延長にない、より大胆な発想に基づく挑戦的な、そして人々を魅了する、野心的な目標（ムーンショット）の実現を推進するための、国家的な大型研究プログラムである。（内閣府／JST ムーンショット型研究開発事業：<https://www.jst.go.jp/moonshot/>）

目標6「2050年までに、経済・産業・安全保障を飛躍的に発展させる誤り耐性型汎用量子コンピュータを実現」では、従来のコンピュータの進歩が限界に達しつつあるなか、爆発的に増大する情報処理の需要に対応する量子コンピュータの開発を目指す。多様、複雑で大規模な実社会の問題を量子コンピュータで解くためには、量子的な誤りを直しながら正確な計算を実行する、誤り耐性型汎用量子コンピュータの実現が鍵となる。

分子科学研究所では、光分子科学研究領域の大森賢治教授が目標6の研究開発プログラム「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュータ」のプロジェクトマネージャー（PM）に決定した。大森教授のプロジェクトでは、光ピンセットを用いて大規模に配列させた冷却原子量子ビットの各々を、自在かつ高速に移動させつつゲート操作、誤り検出・訂正を行う動的量子ビットアレーの実装、および産学連携の下での構成要素の統合・パッケージ化による高い安定性とユーザビリティの達成により、誤り耐性量子コンピュータの実現を目指す。

5-4 大学連携研究設備ネットワークによる研究設備共用促進事業

大学連携研究設備ネットワークは、化学系の教育研究組織を持つ全国の機関が連携し、老朽化した研究設備の復活再生、及び、最先端研究設備の重点的整備を行い、大学間での研究設備の有効活用を図ることを目的として、文部科学省特別経費「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」事業として2007年度よりスタートした。分子科学研究所が事務局を担当するこの事業は、2010年度から「大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用と共同研究の促進」事業として経常経費化され、2017年度からは「大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用の促進」事業、2022年度からは「大学連携研究設備ネットワークによる研究設備共用促進」事業（以下「本事業」という）として運営が行われている。

現在、本事業では国立大学ばかりでなく公立大学や高等専門学校を含む77機関が参画して機器共用を実施し、利用機関数は私立大学や企業も含めて約600に上っている。参画機関の外部公開機器の登録台数は、1,175台（本事業の予約・課金システムを通して利用できる設備）、紹介のみの登録設備（各参画機関の独自の予約・課金システムを通して利用できる設備）を含めると3,345台であり、登録ユーザー数は約17,000名に達している（数値は2023年3月末現在）。表1には利用実績件数の推移を示した。発足当時から順調に学外利用数が増加し、現在では3,000件/年以上に達している。2017年度に、設備の登録範囲を化学系設備のみならず物質科学全般に拡大したことに加え、2019年度からは、利用者に限定していた公私立大等へも設備登録ができるよう規約を改めた。これらの施策により、さらなる登録設備の増加とネットワーク拡大、それに伴う利便性向上が期待される。

第4期中期計画の初年度にあたる2022年度においても、設備の学外利用を促進するために、外部利用が期待される設備の補修やコンポーネント追加による高機能化等の提案を支援する研究設備共用加速事業（表2）を実施した。また、外部利用促進に向け参画機関同士や外部機関との交流を促進する形式の講習会・研修会を開催した（表3）。これらの講習会・研修会の事業の実施においては、文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ事業、国立大学法人機器・分析センター協議会、等とも連携しながら、企画、運営を行っている。

本事業に対しては、2017年度より、機構本部の自然科学大学間連携推進（NICA）事業においても予算が継続的に措置されている。これまでは研究者間のつながりで運営されていたネットワーク型共同研究について、機関間の組織的な関係を強化し一層の発展を目指すことを目的に、連携の強化や集約による分野別予算の確保や人的・物的資源の有効活用等（マネージャー人件費や予約課金システム更新費、講習会強化費用等）が可能となった。これらの施策は本事業の安定運営に大きく寄与している。今後も引き続き、①予約・課金システム等の安定運用と改善、②研究設備の共用加速事業の実施、③講習会・研修会の開催、④他の設備共用事業等との連携継続、⑤広報活動、等を行い更に事業を推進していく予定である。

表1 大学連携研究設備ネットワーク利用実績一覧

年度	学内利用	学外利用			
		国立大	公私大等	民間企業	計
2007	5,570	158	-	-	158
2008	7,081	122	-	-	122
2009	10,520	183	-	-	183
2010	48,833	354	6	4	364
2011	73,997	438	38	2	478
2012	85,128	490	63	25	578
2013	88,516	576	149	162	887

2014	108,863	682	254	241	1,177
2015	113,063	757	329	228	1,314
2016	111,728	798	448	298	1,544
2017	119,077	1,005	698	594	2,297
2018	143,789	1,154	671	658	2,483
2019	169,051	1,005	820	966	2,791
2020	146,621	962	701	948	2,611
2021	169,617	1,053	738	1,282	3,073
2022	175,491	1,121	810	1,870	3,801

表2 2022年度加速事業課題一覧

大学	部署	代表者	職名	課題名
千葉大学	共用機器センター	榊 飛雄真	准教授	高磁場 NMR の固体プローブ整備
東京農工大	学術研究支援総合センター	野口 恵一	教授	二重収束磁場型質量分析計の機能復活による設備共用加速
山梨大学	工学部附属ものづくり教育実践センター	勝又まさ代	技術専門職員	電子スピン共鳴装置の温度可変システム整備
奈良先端大	物質科学教育研究センター	河合 壯	教授	Autoflex2(MALDI-TOFMS) 装置の共用促進のための施設整備事業
奈良先端大	物質科学教育研究センター	河合 壯	教授	共同利用者の利便性向上のための多機能走査型 X 線光電子分光分析装置制御用パソコンアップグレード
大阪大学	産業科学研究所	鈴木 健之	准教授	固体核磁気共鳴装置の保守整備による依頼利用促進
大阪大学	理学研究科分析機器測定室	今田 勝巳	教授	分子間相互作用解析装置（表面プラズモン共鳴装置）のリモート測定対応化と整備
広島大学	技術センター	網本 智子	契約専門職員	ナノ LC システムの点検整備による質量分析計の外部利用促進
広島大学	技術センター	前田 誠	技術主任	真空ポンプ消耗品パーツ交換並びに清掃整備による装置の安定稼働促進
鳥取大学	研究推進機構研究基盤センター	森本 稔	准教授	ガスクロマトグラフ質量分析装置の自動化と多サンプル対応化による設備共用の加速化
高知大学	総合研究センター実験実習機器施設	坂本 修士	教授	オールインワン蛍光顕微鏡の共用化促進のための「機能拡張」事業
愛媛大学	学術支援センター物質科学部門	谷 弘幸	准教授	単結晶 X 線構造解析装置の相互利用促進事業
九州大学	生体防御医学研究所	福井 宣規	教授	「多階層生体防御システム研究拠点」事業におけるクライオ電子顕微鏡 Polara と汎用電子顕微鏡 TE20 の全国相互利用の促進
九州大学	生体防御医学研究所	福井 宣規	教授	「トランスオミクス医学研究拠点ネットワーク形成事業」における超並列シーケンサー NovaSeq6000 の相互利用の促進
長崎大学	研究開発推進機構設備共同利用部門	真木 俊英	准教授	高輝度単結晶構造解析装置再整備事業
長崎大学	研究開発推進機構設備共同利用部門	真木 俊英	准教授	透過型電子顕微鏡整備事業

表3 2022年度講習会・研修会開催一覧

講習会・研修会名	申請者	開催日	参加数
質量分析初歩講習会1	大阪大学	2022年 4月22日(金)	68
ラマン分光初歩講習会	分子科学研究所	2022年 4月27日(水)	54
英語研修1(スピーキング)	静岡大学	2022年 5月16日(月) 2022年 5月17日(火)	12
質量分析初歩講習会2	大阪大学	2022年 5月20日(金)	63
NMR 初歩講習会	鳥取大学	2022年 5月27日(金)	65
分析装置総覧講習会	分子科学研究所	2022年 6月10日(金)	128
SPM 初歩講習会	分子科学研究所	2022年 6月23日(木)	38
英語研修2(英訳)	静岡大学	2022年 6月27日(月)	6
質量分析講習会3 質量分析MALDI-MSハイブリッド講習会	大阪大学	2022年 7月7日(木)	61
粉末X線回折初歩講習会	分子科学研究所	2022年 7月8日(金)	40
英語研修3(パラフレージング)	静岡大学	2022年 7月8日(金)	6
固体NMR測定【中級者コース】	鳥取大学	2022年 7月14日(木) 2022年 7月15日(金)	19
質量分析ESI-MSハイブリッド講習会	大阪大学	2022年 8月4日(木)	44
英語研修4(集合研修)	静岡大学	2022年 9月8日(木)	18
ESR 初歩講習会	分子科学研究所	2022年 9月16日(金)	27
英語研修5(スピーキング)	静岡大学	2022年 9月26日(月) 2022年 9月27日(火)	12
固体NMR測定(上級者コース)	鳥取大学	2022年10月6日(木) 2022年10月7日(金)	10
機器分析における試料前処理講習会	大阪大学	2022年10月13日(木)	47
単結晶X線回折初歩講習会	分子科学研究所	2022年10月20日(木)	45
第一回NMR構造解析講習会	鳥取大学	2022年11月10日(木)	45
質量分析講習会7-1	大阪大学	2022年11月11日(金)	34
第1回分子研NMRセミナー	分子科学研究所	2022年11月14日(月)	61
第2回分子研NMRセミナー	分子科学研究所	2022年11月17日(木)	58
SQUID 初歩講習会	分子科学研究所	2022年11月18日(金)	26
質量分析講習会6	大阪大学	2022年11月22日(火)	29
クライオミクロトーム実践講習会	分子科学研究所	2022年11月25日(金)	20
SEM(走査形電子顕微鏡)中級講習会	分子科学研究所	2022年11月25日(金)	61
質量分析講習会7-2	大阪大学	2022年12月9日(金)	27
質量分析講習会8	大阪大学	2022年12月14日(水)	25
第二回NMR構造解析講習会	鳥取大学	2022年12月16日(金)	37
質量分析講習会7-3	大阪大学	2023年 1月11日(水)	29
NMR 実地講習	鳥取大学	2023年 1月19日(木) 2022年 1月20日(金)	28
第三回NMR構造解析講習会	鳥取大学	2022年 2月10日(金)	24
英語研修6	静岡大学	2022年 2月7日(火) 2022年 2月8日(水)	12
英語研修7	静岡大学	2022年 3月7日(火) 2022年 3月8日(水)	11
第四回NMR構造解析講習会	鳥取大学	2022年 3月17日(金)	27

5-5 マテリアル先端リサーチインフラ ARIM (文部科学省)

2021年度から文部科学省委託研究マテリアル先端リサーチインフラ (Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology in Japan, ARIM) プログラムが始動した。先行事業であるナノテクノロジープラットフォームで培った、全国的な最先端共用設備体制と高度な技術支援提供体制に加え、リモート化・自動化・ハイスループット化された先端設備を導入し、設備共用を継続すると共に、共用に伴って創出されるマテリアルデータを、利活用しやすい構造化された形で、収集・蓄積を行っていくことを主たる目的とした事業である。分子科学研究所はこのARIM事業の掲げる7つの重要技術領域のうち「マテリアルの高度循環のための技術」領域のスポーク機関と、2022年度からは同事業運営機構横断領域物質・材料合成プロセス技術領域の責任機関として受託業務を遂行することとなった。本事業では機器センターが運営母体となり、計算科学研究センターに主としてDX関連業務を分担してもらい運営体制を構築した。「マテリアル高度循環」領域はハブ機関・物質材料研究機構のもと、名古屋工業大学、電気通信大学とチームを構成し、4機関が有する種々の先端機器の共用を通じて、代替材料や再生材料由来の物質合成、材料削減に資する触媒反応の可視化などマテリアル循環に関わる支援をするとともに、創出されたデータを効率よく収集・蓄積・構造化し、その利活用を図ることで、サステナブルなマテリアルのデータ駆動型研究開発に貢献する。

2021年度は準備期間に位置付けられ、本事業2020年度第3次補正予算によりデータ連携・遠隔操作機能付電子スピン共鳴装置ならびにデータ蓄積サーバー正副2機の導入がなされ、2021年度補正予算により超伝導量子干渉型磁束計(SQUID)の更新された。2022年度本事業補正予算でも単結晶X線構造解析と有機自動合成システムの導入が認められ、2023年度末から稼働予定である。2022年度からは、ナノプラットフォーム実施機関の大部分が本事業のスポーク機関に移行し、実施担当者50名規模に加え、本格的に本事業が始動された。また、2022年度には、7つの重要技術領域間の連携を支援するため3つの横断技術領域が新設され、分子科学研究所は横断技術領域「物質・材料合成プロセス」責任機関として、有機合成のデジタル化、物質・材料合成プロセスのデータ構造化・自動化等を進める体制を構築しつつあるところである。

表1には2022年度の支援装置・プログラム一覧、表2には2022年度の採択課題一覧、表3には2022年度採択・実施件数日数(2022年4月1日～2022年3月31日実施分)を示した。

表1 2022年度支援装置・プログラム一覧(分子科学研究所担当分)

支援装置・プログラム	装置・プログラムの概要	支援責任者	所属
X線磁気円二色性分光(XMCD)	UVSOR BL4Bを用いた極低温高磁場X線磁気円二色性測定システム。薄膜作製用試料準備槽つき。利用エネルギー200-1000 eV、試料温度5-60 K、磁場±5 T(±7 Tまで一応可能)。作成した薄膜等を大気に曝すことなくそのまま元素選択磁性測定したい場合に有効。 [UVSOR-III BL4B(100-1000 eV円偏光)、超伝導磁石: JANIS社製7THM-SOM-UHV(±7 T, 5 K)、試料作製槽LEED/AES、蒸着などを装備]	解良 聡施設長 横山利彦教授 小坂谷貴典助教 山本航平助教 石山 修特任研究員	UVSOR 物質分子科学 物質分子科学 物質分子科学 機器センター
マイクロストラクチャー製作・評価支援	マスクレス露光装置(DL-1000/IMC) 段差計付き マスクレス露光装置は、任意の形状をフォトマスクなしで直接描画する装置。光源は405nmLEDで、露光範囲100 mm × 100 mm、最小線幅1μmの描画が可能。段差計は、150 mmまでの領域でステッチングなしで測定可能。その他にも、精密温湿度調整付きのイエロークリーンプースは、フォトリソグラフィに関する一連の作業(基板洗浄、各種レジスト塗布、露光、現像、アッシング、エッチング)に利用可能。 [マスクレス露光装置(ナノシステムソリューションズDL-1000/IMC)、段差計(KLA Tencor P7)、精密温度調整機能付クリーンプース、マスクライナー(ミカサ社製MA-10)、スピコーター(ミカサ社製MS-A100)]	山本浩史室長 近藤聖彦主任技師 高田紀子技術員 木村幸代技術員 石川晶子技術支援員	装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室

	<p>3次元光学プロファイラーシステム (Nexview)</p> <p>3次元光学プロファイラーシステム (ZYGO Nexview) は、非接触で表面の3次元形状測定、表面粗さ測定を行う装置。つなぎ合わせ機能により□46.5 mm 範囲の3次元形状測定や、Ra0.1 nm 以下の超精密研磨面の測定、透明膜の厚さ測定 (1µm 以上) などが可能。X-Y ステージ可動範囲 200 mm×200 mm。Z 軸可動範囲 100 mm</p> <p>[精密温度調整機能付クリーンブース]</p>	<p>山本浩史室長 近藤聖彦主任技師 菊地拓郎技術員 木村幸代技術員</p>	<p>装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室</p>
	<p>電子ビーム描画装置</p> <p>データ提供の可否 可の場合データ情報の内容を簡単に提供できるデータは加速電圧、ビーム電流、エリアドーズ (レジスト感度) となる。</p> <p>[エリオニクス製 ELS-G100 最大加速電圧: 100 kV, 最小ビーム径: 1.8 µm, 最小描画線幅: 6 nm]</p>	<p>山本浩史室長 近藤聖彦主任技師 高田紀子技術員 木村幸代技術員 石川晶子技術支援員</p>	<p>装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室 装置開発室</p>
電解放出形走査電子顕微鏡	<p>走査電子顕微鏡を提供。主に施設利用に対応。</p> <p>[JEOL JSM-6700F(1) (試料 2 インチまで)]</p>	<p>横山利彦センター長 石山 修特任研究員 今井弓子技術支援員</p>	<p>機器センター 機器センター 機器センター</p>
低真空分析走査電子顕微鏡	<p>幅広い試料に対する、SEM 観察と EDS 元素分析の環境を提供。SEM 本体は、日立ハイテクノロジー社製 SU6600。10 ~ 300Pa の低真空観察に対応し、絶縁性試料を導電処理なしで観察可能。分解能は、高真空 1.2 nm (30 kV), 低真空 3.0 nm (30 kV)。EDS 分析装置は、BrukerAXS 社製 XFlash5060FQ 及び XFlash6 10。表面凹凸の影ができにくく高感度な EDS 検出器を搭載。温度を -20 ~ 50℃ 程度で変えられるステージも利用可能。</p> <p>[日立ハイテクノロジー SU6600, BrukerAXS_QUANTAX XFlash 5060FQ+XFlash6 10 コンバインシステム]</p>	<p>横山利彦センター長 石山 修特任研究員 上田 正主任技術員 今井弓子技術支援員</p>	<p>機器センター 機器センター 機器センター 機器センター</p>
電界放出形透過電子顕微鏡	<p>高輝度で高い干渉性の電子線が得られるフィールドエミッション電子銃 (FEG) を搭載した電子顕微鏡。ナノスケールオーダーの超高分解能の像観察や分析が可能。エネルギー分散型 X 線分析装置 (EDS) による微小部の元素分析、組成マップを測定可能。STEM 機能により走査透過像測定が可能。</p> <p>[JEOL_JSM-2100F (試料 3 mm φ 以内)]</p>	<p>横山利彦センター長 伊木志成子特任専門員 上田 正主任技術員 賣市幹大技術職員</p>	<p>機器センター 機器センター 機器センター 機器センター</p>
走査プローブ顕微鏡	<p>形状測定、機械特性測定、電気特性測定、ケルビンプローブ測定に特化した走査プローブ顕微鏡を用いた共同研究が可能。</p> <p>[Bruker Dimension XR Icon NanoElectrical]</p> <p>電気化学測定に特化した走査プローブ顕微鏡を用いた共同研究が可能。</p> <p>[Bruker Dimension XR Icon NanoElectrochemical]</p>	<p>横山利彦センター長 湊 丈俊主任研究員 上田 正主任技術員 杉本敏樹准教授</p>	<p>機器センター 機器センター 機器センター 物質分子科学</p>
単結晶 X 線回折	<p>単結晶試料に X 線を入射すると、結晶構造を反映した回折点を得られる。この回折点の位置および強度から、結晶構造解析が行われる。構造解析により、原子の三次元座標 (立体構造) や原子間距離・結合距離、三次元の電子密度などの情報が得られる。数十~数百 mm サイズの単結晶試料が作成出来れば、3 時間程度で測定~解析が可能。</p> <p>[Rigaku_MERCURY CCD-1・R-AXIS IV, MERCURY CCD-2]</p>	<p>横山利彦センター長 岡野芳則技術員</p>	<p>機器センター 機器センター</p>

単結晶 X 線回折 (微小結晶用)	高輝度 X 線：光学系にコンフォーカルミラーを用いており、CCCD-1, -2 に比べ、約 10 倍の高輝度 X 線ビームが得られ、測定が難しかった微小結晶でも測定が可能。ビーム径は $\phi 0.1 \sim 0.2$ mm で、コリメータはバックグラウンド低減のためビーム径よりやや大きめの 0.3mm のものが取付。 低温測定：ガス吹き付け型の冷却装置で、到達温度は N ₂ ガスモードで 100 K, He ガスモードで 24 K (実測)。到達時間は、N ₂ で 240 分, He で 150 分かかる。運転モードの切り替えは、He から N ₂ には迅速に切り替え可能だが、N ₂ から He の場合は、冷凍機を一旦室温に戻す必要。 [Rigaku_HyPix-AFC]	横山利彦センター長 岡野芳則技術員	機器センター 機器センター
結晶スポンジ法を用いた分子構造解析	単結晶 X 線構造解析は、分子の立体構造を決定する上で最も強力な分析方法。しかしながら、この手法を用いるためには、構造を明らかにしたい試料の単結晶が不可欠であり、単結晶作製は時として大きな困難を伴う。藤田らが開発した「結晶スポンジ法」は、細孔性錯体の結晶 (結晶スポンジ) を試料の溶液に浸すことで試料分子を結晶スポンジの細孔内に導入し、単結晶 X 線構造解析により試料分子の立体構造を明らかにするという「結晶化不要の単結晶 X 線構造解析法」。結晶スポンジ法を用いて、提供を受けた試料の立体構造解析の支援を実施。また、結晶スポンジ法に関連した協力研究も広く受付。 [Rigaku_XtaLAB P200, SuperNova, XtaLAB SynergyCustom]	藤田 誠卓越教授 横山利彦センター長 三橋隆章特任助教	特別研究部門 機器センター 特別研究部門
粉末 X 線回折	粉末試料に X 線を照射し、回折された X 線の角度および強度を測定。主な利用法は定性分析 (同定) である。既知試料の回折パターン (PDF: Powder Diffraction File) と照合することで測定試料の同定を行う。その他にも、ピークの有無や強度による結晶性や配向評価、ピーク幅による結晶子サイズ評価、小角領域の測定による粒子径の評価などにも用いられる。また測定精度によっては未知構造解析も可能。 [Rigaku_RINT-UltimaIII]	横山利彦センター長 藤原基靖主任技術員 宮島瑞樹技術員	機器センター 機器センター 機器センター
オペランド多目的 X 線回折	試料に X 線を照射し、回折・反射・散乱された X 線を観測することで、化合物の同定・定量・配向性、薄膜の膜厚・粗さ、粒径・空隙径分布などの情報が得られる。本装置では、各種ミラー・ステージ・オプションにより、様々な測定に対応可能である。 [Panalytical Empyrean]	横山利彦センター長 竹入史隆助教 藤原基靖主任技術員 宮島瑞樹技術員	機器センター 物質分子科学 機器センター 機器センター
X 線溶液散乱計測システム	X 線小角散乱による溶液状試料 (タンパク質, ミセル, コロイドなど) の構造解析・生体高分子試料の状態診断支援 (回転半径, 形状, 分子質量, 距離分布関数など) 溶液散乱データの解析・解釈支援 放射光施設での実験に向けた試料の前評価, 計画立案支援 [Rigaku_NANO-Viewer]	横山利彦センター長 秋山修志教授 向山 厚助教 古池美彦助教	機器センター 協奏分子センター 協奏分子センター 協奏分子センター
機能性材料バンド構造顕微分析システム	静電半球型アナライザーを用いた機能性材料の価電子バンド構造測定システム。ディフレクターを使用することで 2 次元波数空間マッピングを行うことが可能。薄膜作製用真空チェンバー, 試料表面処理チェンバー (電子衝撃加熱, 通電加熱, Ar ⁺ スパッタが可能), 電子線回折装置, 劈開機構を利用することができるため、様々な機能性材料の測定に対応。	解良 聡教授 田中清尚准教授 福谷圭祐助教	光分子科学 UVSOR 光分子科学
X 線光電子分光	汎用性も高いハイスpek X 線光電子分光システム Scienta 光電子分光装置 (光電子分析器 R4000L1, Al-K α 単色 X 線源 MX-650, 真空紫外光源 VUV5k, 中和電子銃, グローブボックス) 光電子分析器: エネルギー分解能 1.8meV 以下, スポットサイズ 1 \times 3mm ² 単色 X 線源: エネルギー幅 300 meV	横山利彦センター長 山本航平助教 石山 修特任研究員 伊木志成子特任専門員	機器センター 物質分子科学 機器センター 機器センター

電子スピン共鳴 (E680)	電子スピンの分布や相互作用, ダイナミクスの解析支援。Bruker社製 E680 では, 通常の X-band CW-ESR 以外にも, 多周波数 (Q-, W-band), 多種測定 (パルス, 多重共鳴) が可能。 [Bruker_E680]	横山利彦センター長 中村敏和チームリーダー 浅田瑞枝技術員 上田 正主任技術員 藤原基靖主任技術員 宮島瑞樹技術員 伊木志成子特任専門員	機器センター 機器センター 機器センター 機器センター 機器センター 機器センター
電子スピン共鳴 (EMX Plus, E500, E580)	電子スピン共鳴 (ESR) 装置は, 対電子 (電子スピン) をプローブとした分光装置。静磁場中に置かれた電子スピンはエネルギー単位が分裂し, 一定のマイクロ波を加えながら静磁場を掃引すると, このエネルギー差に相当する磁場で共鳴が起こる。この共鳴磁場や吸収強度などの観測から, 電子スピンを持つ原子や分子の量, 構造, 電子状態などに関する情報が得られる。ESR 装置は, 有機ラジカルや遷移金属などを含む物質の物性研究の他にも, 放射線や酸化などにより対電子が生じた岩石や食品の評価, 触媒や重合反応などのプロセス追跡にも利用。 [Bruker_EMX Plus, E500, E580]	横山利彦センター長 中村敏和チームリーダー 浅田瑞枝技術員 藤原基靖主任技術員 宮島瑞樹技術員 伊木志成子特任専門員	機器センター 機器センター 機器センター 機器センター 機器センター 機器センター
SQUID 型磁化測定装置	SQUID 型磁化測定装置 (Quantum Design 社製 MPMS-7, MPMS-XL7) により, 高感度磁化測定が可能。DC 測定に加え, AC 測定や光照射・圧力下の測定も可能。その他, 超低磁場や角度回転オプションも利用可能。 [Quantum Design_MPMS-7, MPMS-XL7, MPMS-3]	横山利彦センター長 中村敏和チームリーダー 藤原基靖主任技術員 宮島瑞樹技術員 伊木志成子特任専門員	機器センター 機器センター 機器センター 機器センター 機器センター
示差走査型カロリメーター (溶液)	熱分析装置では物質を温度制御しながら, その熱変化などを測定。示差走査型カロリメーター (DSC) による分子の構造変化時の熱変化を直接測定する方法や, 等温滴定型カロリメーター (ITC) による分子間の結合時の熱変化を直接測定する方法などが可能。 [MicroCal_VP-DSC]	横山利彦センター長 賣市幹大技術員 長尾春代技術員	機器センター 機器センター 機器センター
等温滴定型カロリメーター (溶液)	熱分析装置では物質を温度制御しながら, その熱変化などを測定。示差走査型カロリメーター (DSC) による分子の構造変化時の熱変化を直接測定する方法や, 等温滴定型カロリメーター (ITC) による分子間の結合時の熱変化を直接測定する方法などが可能。温度一定下の条件において, リガンド滴下により2種の分子が相互作用する時に生じる反応熱を測定する。溶液中の生体高分子に特化した仕様。 [MicroCal_PEAQ-ITC, iTC200]	横山利彦センター長 賣市幹大技術員 長尾春代技術員	機器センター 機器センター 機器センター
熱分析装置 (固体, 粉末)	熱分析とは, 物質の温度を一定のプログラムによって変化させながら, その物質のある物理的性質を温度の関数として測定する分析法。熱流差を検出する示差走査熱量測定 (DSC) による融解・結晶化や比熱の測定, 質量 (重量変化) を検出する熱重量測定 (TGA) による脱水・熱分解の測定などが可能。 [Rigaku_DSC8231, TG-DTA8122]	横山利彦センター長 藤原基靖主任技術員 宮島瑞樹技術員	機器センター 機器センター 機器センター
MALDI-TOF 質量分析	イオン化部はマトリックス支援レーザー脱離イオン化 (MALDI), 質量分離部が飛行時間型の質量分析計 (TOF-MS)。MALDI はマトリックスと呼ばれるイオン化を促進する試薬を試料と共にサンプルプレート上に結晶化させ, そこにレーザー光を照射する。マトリックスはレーザー波長に対して吸収を持っているので急速に加熱され試料と共に気化。試料は気相反応 (プロトン移動など) によってイオン化し, TOF-MS と呼ばれるイオン源で発生したイオンがフライトチューブ内を飛行し検出器まで到達する時間によって質量を測定する装置により分離, 検出。MALDI によるイオン化は穏和で試料分子の分解が起こりにくく, TOF-MS は分子量が数万~十数万のタンパク質のような高分子を測定することが可能であり, 発生したイオンの大部分が検出器に到達するため感度も高い点が挙げられる。 [Bruker Daltonics_microflex LRF]	横山利彦センター長 賣市幹大技術員 藤川清江技術支援員	機器センター 機器センター 機器センター

顕微ラマン分光	顕微ラマン分光システムによる分子構造、局所結晶構造解析を支援。コンフォーカル光学系+冷却 CCD による高空間分解能、高感度観測。488 nm から 785 nm までの励起波長選択、ヘリウム温度までの試料冷却が可能。 [RENISHAW_inVia Reflex]	横山利彦センター長 賣市幹大技術員	機器センター 機器センター
FT 遠赤外分光	FT-IR 分光器による遠赤外スペクトル測定支援。格子フォノン、分子ねじれ振動などの集団運動や分子間水素結合、配位結合等の弱い結合による光学モードを検出。 [Bruker_IFS66v/S]	横山利彦センター長 賣市幹大技術員	機器センター 機器センター
蛍光分光	蛍光分光光度計は、励起光を試料に当て、放出される蛍光強度やスペクトルを測定して物質の定量、定性分析を行う装置で、吸光分析である分光光度計よりも非常に高い感度で測定が可能。観測側（蛍光側）の分光器の波長を蛍光波長に固定し、励起側の分光器の波長をスキャンすると励起スペクトルが得られる。励起側の波長を固定（最も強い蛍光を生じる励起波長）し、観測側の分光器の波長をスキャンすると蛍光スペクトルが得られる。また、励起側分光器と観測側分光器の両方の波長をスキャンさせて測定できる装置もあり、簡単に蛍光励起スペクトルの測定が可能。 [HORIBA_SPEX Fluorolog 3-21]	横山利彦センター長 上田 正主任技術員	機器センター 機器センター
紫外・可視・近赤外分光光度計	測定する物質がどの程度光を吸収するかを波長分布として測定する装置。実際は、透過率を測定しソフトウェアで計算によって吸光度を求めており、物質の同定や性質、あるいは濃度（定量分析）を調べることが可能。付属装置によって、半導体・薄膜・ガラスやフィルムなどの固体試料の反射率・透過率測定が可能。 [SHIMADZU_UV-3600Plus]	横山利彦センター長 上田 正主任技術員	機器センター 機器センター
絶対 PL 量子収率測定装置	物質に光を照射し励起された電子が基底状態に戻る際に発光する光を観測することで、発光材料の絶対発光量子収率を測定する装置である。PL 量子収率とは、吸収した光のフォトン数に対して分子から放出される発光フォトン数の割合で、発光の効率を表す。 [HAMAMATSU Quantaaurus-QY C11347-01]	横山利彦センター長 上田 正主任技術員	機器センター 機器センター
円二色性分散	円二色性分散計は光学活性分子の立体構造（相対～絶対配置、立体配座、生体高分子の高次構造）を解析する手段として利用。分光器から出た光は偏光子で直線偏光にされ、円偏光変調器で左右円偏光が交互に作られ試料を通過。この時、試料が光学活性物質であると円偏光の不等吸収が起こり（この現象を円二色性または CD と呼ぶ）、その左右円偏光の差吸光度 ΔA （通常は楕円率 θ で表される）が観測。楕円率とは直線偏光を光学活性物質の吸収波長で通過させると楕円偏光になるが、その楕円の短軸長軸の正接角 θ をもって定義され、 ΔA が小さいと $\theta = 33 \times \Delta A$ が成立。CD 測定でのフルスケールは θ 表示（単位 mdeg）。 [JASCO J-1500]	横山利彦センター長 賣市幹大技術員 藤川清江技術支援員	機器センター 機器センター 機器センター
ピコ秒レーザー	超短パルスレーザーでは、不確定性原理によってパルスの時間幅と波長幅（バンド幅）を同時に狭くすることは相反するが、ピコ秒のレーザーはその両者、つまり時間分解能とエネルギー分解能の両方において高い分解能が得られるとされている。そのためピコ秒レーザーは、物理化学分光研究における超高速時間分解実験の分光光源として用いられ、超高速時間分解吸収、或いは蛍光スペクトルを高い分解能で観測するための最も重要なツール。また、ピコ秒レーザーは、パルス幅が短くピークパワーが高いため、熱影響の少ない精密微細加工を実現できるツールとしても応用。 [Spectra-Physics, Quantronix_Millennia-Tsunami, TITAN-TOPAS]	横山利彦センター長 上田 正主任技術員	機器センター 機器センター

¹ H 600MHz 固体 (高磁場 NMR)	600MHz 固体 NMR による蛋白などの生体分子, 有機材料, 天然物などの精密構造解析支援。 ¹ H- ¹³ C- ¹⁵ N 三重共鳴実験まで対応。 [Bruker_AVANCE600]	横山利彦センター長 西村勝之准教授	機器センター 物質分子科学
¹ H 600MHz 溶液 (高磁場 NMR)	核磁気共鳴 (NMR) とは磁気モーメントをもつ原子核を含む物質を磁場の中におき, これに共鳴条件を満足する周波数の電磁波を加えたときにおこる共鳴現象。核磁気共鳴装置はこの共鳴現象を観測することによって, 原子の化学的環境を反映した原子個々の情報 (どの原子とどの原子が隣り合っているか, 原子間の距離がどの程度かなど) が得られるので, 化合物の分子構造や組成, 物理化学的性質を分析する方法として様々な分野で日常的に利用。 [JEOL_JNM-ECA600]	横山利彦センター長 賣市幹大技術員 長尾春代技術員	機器センター 機器センター 機器センター
合成ものづくり支援 (大規模量子化学計算)	機能性ナノ分子の励起状態やナノ微粒子触媒の反応機構に関する電子状態計算。 [高精度ナノ構造電子状態計算]	江原正博教授	計算科学研究センター
合成ものづくり支援 (有機 FET)	分子性伝導体や有機分子を用いたトランジスタの作製・評価を支援。電気分解による単結晶成長, レーザー加工によるデバイス作製, 低温・磁場下における輸送特性測定および顕微反射赤外による物性の評価が可能。 [有機 FET の設計・製作・各種評価, 有機伝導体半導体合成]	山本浩史教授 佐藤拓朗助教	協奏分子センター 協奏分子センター
合成ものづくり支援 (有機合成 DX)	自動および手動によるバッチ型反応実験, ならびに, AI や DFT 計算によるデータ解析を行い, 有機合成分野のデジタル化を支援。 [反応実験に用いる有機低分子化合物の合成支援, 自動スクリーニング装置によるバッチ型反応実験の実施支援, 手動実験による自動実験の検証支援, 有機合成反応のデータ構造化支援, 有機低分子および有機合成反応の DFT 計算支援]	榎山儀恵准教授 鈴木敏泰チームリーダー	生命・錯体分子科学 機器センター
合成ものづくり支援 (磁性薄膜作製評価)	超高真空中で磁性薄膜等を作成し, in situ 磁気光学 Kerr 効果による評価, ならびに, 紫外レーザー磁気円二色性光電子顕微鏡 (UV MCD PEEM) によるナノ磁気構造評価を実施。 [超高真空中での磁性薄膜作成・磁気光学 Kerr 効果によるその場観察評価。紫外レーザー磁気円二色性光電子顕微鏡も利用可]	横山利彦教授 山本航平助教	物質分子科学 物質分子科学
合成ものづくり支援 (金属錯体)	金属錯体の設計, 合成, 構造解析および物性評価を支援。光学特性および電気化学特性の評価が可能。 [金属錯体の設計, 合成, 単結晶および粉末 X 線回折による構造解析, AFM 観察, 電気化学測定ならびに紫外-可視-近赤外吸光分光光度計, 分光蛍光光度計, 発光スペクトル-寿命測定システム, フーリエ変換赤外分光光度計による各種光物性測定が可能]	草本哲郎准教授 松岡亮太助教	生命・錯体分子科学 生命・錯体分子科学
合成ものづくり支援 (機器センター長協力研究)	機器センター以外の分子研施設利用を実施する際に, 機器センター機器 (所内専用機器を含む) を補助的に利用するための区分	横山利彦センター長	機器センター

表2 2022年度(令和4年度)採択課題一覧 分子科学研究所担当分(2023年3月31日現在)

(1) 協力研究

課題名	支援機器等	代表者
パルス ESR 法を用いた高 LET 放射線照射で生成するアラニンラジカルの局所的ラジカル分布の評価	E680	東京都立産業技術研究センター 中川 清子
濃厚電解液が形成する電極被膜構造の in-situ 解析	SPM	名古屋工業大学大学院工学研究科 本林 健太
高移動度有機半導体の完全なバンド構造決定	ARUPS	千葉大学大学院工学研究院 吉田 弘幸
超伝導体/磁性体/半導体複合材料の価電子バンド構造解析	ARUPS	神戸大学大学院理学研究科 内野 隆司
石英ガラス上に形成するナノ水滴の粘弾性計測	SPM	金沢大学理工研究域 荒木 優希
ダイヤモンド中における常磁性欠陥の NV センターへのデコヒーレンス効果の研究	E680	物質・材料研究機構機能性材料研究拠点 眞榮 力
多形により機械的柔軟性が異なる錯体分子結晶の結晶表面状態の観察と機械特性の定量化	SPM	岐阜大学教育学部 萩原 宏明
原子間力顕微鏡を用いた潤滑油添加剤層のヤング率計測	SPM	神戸大学大学院理学研究科 大西 洋
光応答性分子の分子シミュレーション解析による蛍光挙動の解明	量子計算	新居浜工業高等専門学校 高見 静香
光励起三重項の電子スピン特性評価	E680	九州大学大学院工学研究院 楊井 伸浩
安定発光性ラジカル PyBTM 及び F ₂ PyBTM のパラ置換による新たな光物性開発	金属錯体	龍谷大学先端理工学部 服部 陽平
量子生物物理化学のための新しいパルス ESR 実験	E680	埼玉大学大学院理工学研究科 前田 公憲
有機結晶表面に作成した電解質トランジスタと歪印加を併用した新奇物性探索	有機 FET	名古屋大学大学院工学研究科 伊東 裕
反応条件探索装置の活用による高度精密有機合成のデジタル化	有機合成 DX	九州大学大学院薬学研究院 大嶋 孝志
キラル誘起スピン選択性を用いたキラル物質の評価および検出	有機 FET	大阪公立大学大学院工学研究科 戸川 欣彦
コラニユレン骨格を有する錯体の合成と性質に関する量子化学計算	量子計算	奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学領域 山田美穂子
パルス ESR を用いたスピン間距離測定による輸送膜タンパク質の構造解析	E680	神戸大学大学院理学研究科 木村 哲就
光制御タンパク質ケージの構造解析	SAXS	大阪大学大学院理学研究科 石川 春人
結晶性キラル半導体におけるスピン依存非相反伝導とその電気的制御	有機 FET	静岡大学理学部物理学科 広部 大地
Theoretical Studies on Endohedral Metal-Metal-Bonding Fullerenes Lu ₂ @C _{2n} (2n = 76-84) and Their Two-Dimensional Nanomaterials	量子計算	Xi'an Jiaotong University Tao Yang
固体 NMR によるクマムシ由来タンパク質 SAHS の乾燥状態の構造解析	600NMR 固体	名古屋市立大学大学院薬学研究科 矢木 真穂
タンパク質への酸化修飾がもたらすミスフォールディングと神経変性疾患の発症メカニズム	SAXS	慶應義塾大学理工学部 古川 良明
コハク酸、リンゴ酸の吸着によるカルサイトの溶解促進メカニズムの解明	SPM	金沢大学理工学研究域 荒木 優希
液晶性有機薄膜の液晶転移に伴う表面モルフォロジー変化のその場観察	SPM	東北大学大学院工学研究科 丸山 伸伍
水中での非線形音響現象によるセラミックス合成の観察	SPM	桐蔭横浜大学医工学部 石河 睦生
最先端計算機科学・材料評価手法の融合による加速器科学を革新するタンガステン合金の開発	SPM	高エネルギー加速器研究機構素粒子原子核研究所 牧村 俊助
電子焦電性を示す分子結晶の表面構造と電子特性の解析	SPM	九州大学先端物質化学研究所 金川 慎治
イオン液体の基板に対する濡れ特性: 基板依存性	SPM	千葉大学大学院融合科学研究科 城田 秀明
量子化学計算に基づく金属ナノクラスターの構造-物性相間の解明	量子計算	大阪公立大学大学院理学研究科 武藤 克也
二酸化チタンのナノ構造と電子状態	SPM	九州工業大学大学院工学研究院 河野 翔也
走査プローブ顕微鏡による始原的隕石の物性の解析	SPM	海洋研究開発機構高知コア研究所 伊藤 元雄
結晶スポンジ法による放線菌由来新規有機ヒ素天然物の構造決定	結晶スポンジ	東京大学農学生命科学研究科 星野翔太郎
S = 1/2 第一遷移金属イオンを持つポリオキソメタレートのスピンコヒーレンス現象	E680	日本大学文理学部 石崎 聡晴

(2) 施設利用

課題名	支援機器等	代表者
カーボンナノチューブの生成メカニズムの解明	TEM	名城大学理工学部 丸山 隆浩
新規オリゴマー型有機伝導体の開発と伝導機構の解明	EMX E500	東京大学物性研究所 小野塚 洸太
人工ニッケルキラターゼへの部位特異的変異によるタンパク質立体構造と触媒機能の関連の調査	円二色性	埼玉大学大学院理工学研究科 藤城 貴史
EPR による 2 つの [2Fe-2S] クラスタから [3Fe-4S] クラスタへの構造変換反応の補足	EMX E500 E580	埼玉大学大学院理工学研究科 藤城 貴史

電子スピン共鳴による酵素の構造学的研究	E680 EMX E500 E580	佐賀大学農学部	堀谷 正樹
Sn/Ni 多層膜の電気伝導特性, Cu-ZnO ナノロッドの磁氣的性質の解明	MS-7 XL7	岐阜大学工学部	嶋 睦宏
Interaction of Polymers with Lipids	iTC200	北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科	Robin Rajan
高周波 ESR による Bilayer 型分子磁性体の磁気特性機構の解明	微小結晶 E680 EMX E500 E580	理化学研究所	大島 勇吾
人工光合成をめざす半導体光触媒の水中共 ESR 測定	EMX E500	神戸大学大学院理学研究科	大西 洋
逆バロブスカイト型マンガン窒化物における特異な磁気特性の解明	MS-7 XL7	静岡大学大学院工学領域	川口 昂彦
複合酸化物触媒, 及び電極触媒の表面構造解析	TEM ESCA	名古屋大学大学院理学研究科	邨次 智
多元系酸フッ化物の磁性 IV	MS-7	京都大学大学院人間・環境学研究科	高見 剛
Zr-Mo クラスタを含む複塩結晶における水素結合ネットワークと磁氣的性質	CCD-1 CCD-2 微小結晶 粉末 X 線 オペランド EMX E500 E580 MS-7 XL7 熱解析	金沢大学国際基幹教育院	三橋 了爾
ナノ磁性微粒子, 及び磁性体ナノ周期構造を利用した新規磁気光学材料の開発	MS-7 XL7	静岡大学工学部	中嶋 聖介
遷移金属で置換したゼオライト粒子の磁気特性の解明	MS-7 XL7 ESCA EMX E500	熊本大学大学院先端科学研究部	松田 元秀
常磁性異種金属一次元鎖錯体と二次元状混合原子価集積体の合成と磁気物性	CCD-1 CCD-2 微小結晶 E500 MS-7 XL7	岐阜大学工学部	植村 一広
超伝導/強磁性/半導体ナノ複合材料の超伝導近接効果	MS-7 XL7 ラマン	神戸大学大学院理学研究科	内野 隆司
常温常圧で機能する高活性窒素固定触媒の開発	MS-7 XL7 600NMR 溶液 CCD-1 CCD-2 微小結晶	愛知工業大学工学部	梶田 裕二
多周波 EPR 法による光合成タンパク質の構造及び機能の解析	E680 EMX E500 E580 MS-7 XL7	名古屋大学大学院理学研究科	三野 広幸
コラーゲンの構造物性と抗体との分子間相互作用解析	PEAQ-ITC 円二色性	京都府立大学大学院生命環境科学研究科	織田 昌幸
光エネルギー変換物質の励起状態の研究	E680 蛍光分光 量子収率 ピコ秒	大阪公立大学理学部	松岡 秀人
スピン依存的な光化学特性を示す開殻電子系の創製	E500 熱解析	京都大学大学院工学研究科	清水 大貴
β シート性ペプチド錯体の熱力学特性の評価	熱解析	東京大学大学院工学系研究科	恒川 英介

無脊椎動物の生殖腺刺激ホルモンペプチドの探索と解析 半導体量子ドット三次元超格子の構築と構造・電子状態解析	MALDI オペランド 蛍光分光 紫外可視近 赤外	基礎生物学研究所 名古屋工業大学大学院工学研究科	大野 薫 濱中 泰
自己組織化によるカーボンナノチューブの自在配列手法の構築	低 SEM ラマン	早稲田大学理工学術院	安倍 悠朔
フラビンタンパク質の光誘起ラジカルペア生成に関する人工システムの構築	E680 蛍光分光 紫外可視近 赤外 ピコ秒 VP-DSC	広島大学先進理工系科学研究科	岡 芳美
新規配位高分子錯体の合成と磁気的性質に関する研究	CCD-1 粉末 X線 MS-7 XL7 FT	東京海洋大学海洋電子機械工学 部門	藤田 渉
有機分子の自己組織化に基づく新規有機・無機ハイブリッドナノ構造の構築 3 ペイポクロミズム及びエレクトロクロミズム特性を示すパドルホイール型ロジウム二核錯体の開発	TEM CCD-1 CCD-2 微小結晶 MS-7 XL7 熱解析 ESCA ラマン	関西学院大学生命環境学部 島根大学総合理工学部	増尾 貞弘 矢野なつみ
ポリオキソメタレートの前酸化還元反応メカニズムの定量的解析	EMX 600NMR 溶液 ラマン	高知大学教育研究部 大阪大学大学院理学研究科	上田 忠治 坏 広樹
$\beta^{\text{II}}\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{XC}_2\text{H}_4\text{SO}_3$ (X = Cl, Br) における Raman 分光による BEDT-TTF の価数決定 金属酵素モデル錯体の電子構造の研究	CCD-1 CCD-2 微小結晶 EMX E500 E580 MS-7 XL7 紫外可視近 赤外 600NMR 溶液	奈良女子大学研究院自然科学系	藤井 浩
スピン転移とサーモサリエン特性が連動する錯体分子結晶のアルキル置換基効果の解明	微小結晶 オペランド MS-7 XL7 熱解析	岐阜大学教育学部	萩原 宏明
ポリオキソメタレートを骨格として持つ金属錯体の磁気物性	MS-7 XL7 熱解析 ラマン	日本大学文理学部	石崎 聡晴
多段階電子遷移による高効率光電変換実現に向けた AlN バンドギャップ中電子状態の解明 金属錯体の時間分解 ESR による光励起構造の解明	E680 EMX E500 E580 紫外可視近 赤外	群馬大学大学院理工学府	浅野 素子
InP 系コアシェル型ナノ結晶の界面ポテンシャルが及ぼす励起子素過程の調査	TEM 粉末 X線 ラマン 紫外可視近 赤外 量子収率	関西学院大学理工学部	江口 大地
光のエネルギーを蓄えることができる物質の光励起状態と緩和過程の電子スピン共鳴 種々の KI 結晶中に生成した AgI ナノ結晶の電子顕微鏡観察	EMX E500 TEM 蛍光分光	愛媛大学大学院理工学研究科 大阪公立大学大学院理学研究科	内藤 俊雄 河相 武利

触媒機能をもつ遷移金属錯体の遠赤外スペクトルによる金属ハロゲン結合の分析 ナノサイズ発光バイオマーカーの新規開発と細胞標識への展開	FT 600NMR 溶液 SEM 低 SEM TEM	岡山大学大学院自然科学研究科 名城大学理工学部	押木 俊之 西山 桂
X線結晶構造解析による新規合成有機化合物の構造決定	CCD-1 CCD-2 微小結晶	豊橋技術科学大学応用化学・生命工学系	藤沢 郁英
ドーブ型 PEDOT の単結晶オリゴマーモデルの磁性における共役系拡張効果	CCD-2 微小結晶 EMX E500	東京大学物性研究所	藤野 智子
バレー自由度をもつ光注入キャリアの磁場下マイクロ波共鳴によるダイナミクス研究 鉄含有ペロブスカイト型酸化物の酸素放出挙動と結晶構造変化の相関解明 キラル磁性体の磁気物性	E680 オペランド E500 MS-7 XL7	和歌山大学システム工学部 高知大学教育研究部 広島大学大学院先進理工系科学研究科	秋元 郁子 藤代 史 井上 克也
新奇レーザーセラミックスの作製プロセスに関する学術基盤構築 (II)	粉末 X 線 オペランド 熱解析	理化学研究所	平等 拓範
三重項状態アントラキノン誘導体の磁気パラメーターの決定	E680 EMX E500	埼玉大学大学院理工学研究科	長嶋 宏樹
金属ドーブ型 BiFeO ₃ ナノ粒子の磁性に関する研究 キラルな大環状分子のゲスト包接と光学特性との相関解明	MS-7 XL7 iTIC200 量子収率 円二色性	山形大学大学院理工学研究科 福井大学学術研究院工学系部門	有馬ボシール アハンマド 内藤 順也
E580 イメージングユニットを利用した低温プラズマ-マテリアルインフォマティクス 液相合成法を用いたダイヤモンド様炭素膜の作製 二酸化炭素還元を指向した金属錯体の合成と構造解析	E580 ラマン CCD-1 CCD-2 微小結晶	名古屋大学低温プラズマ科学研究センター 大同大学電気電子工学科 名城大学理工学部	石川 健治 橋本 雄一 永田 央
生体に含まれる脂質分析のための脂肪酸 NMR 情報の収集 炭化水素中でのレーザー照射による金属表面への硬質炭化物被膜形成	600NMR 溶液 ESCA ラマン 蛍光分光	生理学研究所 名古屋工業大学大学院工学研究科	福永 雅喜 小野 晋吾
マグネシウムフェライド薄膜およびその置換系の強磁性に関する研究	E500 MS-7 XL7	名古屋工業大学先進セラミック ス研究センター	安達 信泰
エネルギー変換への応用のためのナノマテリアル薄膜の構造および物性評価	微小結晶 粉末 X 線 オペランド EMX E500 E580 MS-7 XL7 VP-DSC 熱解析 MALDI ラマン 蛍光分光 紫外可視近 赤外 量子収率 円二色性 ピコ秒	法政大学生命科学部	緒方 啓典
有機 π 電子系化合物を成分とする有機電子材料の構造と物性	微小結晶 XL7 MALDI	愛媛大学大学院理工学研究科	白旗 崇
キラリティーを有する分子性導体の物性研究	MS-7 XL7 微小結晶 MALDI	愛媛大学大学院理工学研究科	藤崎 真広

ドナー・アクセプター型光誘起複合機能物質群のメカニズム解明	微小結晶 E680 EMX E500 E580 MS-7 XL7	新潟大学研究推進機構	古川 貢
金および Si ナノ粒子集合体の光学特性の解明	SEM 量子収率	早稲田大学理工学術院	井村 考平
ポルフィリンを主骨格とする DA タイプ COF の光誘起時間分解 ESR 研究	E680 E500	シンガポール大学	JIANG, Donglin
ESR を用いた新規 Ag クラスターの組成並びに電子状態研究	E680	東京理科大学理学部	根岸 雄一
有機伝導体 $\beta^{\prime\prime}$ -(BEDT-TTF) ₂ Hg(SCN) ₂ Cl の低温電荷秩序状態の構造の解明	微小結晶	北海道大学大学院理学研究院	河本 充司
双性イオン構造を有する新規純有機中性ラジカル伝導体の磁氣的性質の解明 -III	MS-7 XL7	熊本大学大学院先端科学研究部	上田 顕
超酸化物不均化反応活性を有する金属-有機構造体触媒の電子状態評価	ESCA	京都大学大学院理学研究科	小坂谷 貴典
糖鎖脂質含有二重膜表面で誘起されるアミドイド β 会合状態の固体 NMR を用いた構造解析	600NMR 溶液	名古屋市立大学大学院薬学研究科	矢木 真穂
アドバンスド ESR 法による植物性食品による環境計測	E680 EMX E500 E580	新潟大学研究推進機構	古川 貢
強い水素結合相互作用をもつ新規分子性伝導体の合成と物性研究	MS-7 XL7	日本大学文理学部	周 彪
有機色素の光学特性に関する研究	量子収率 ピコ秒 蛍光分光	神戸大学大学院工学研究科	堀家 匠平
バリウム黒鉛層間化合物の磁化率	オペラント MS-7 XL7	大阪工業大学工学部	平郡 諭
ハイブリッド光触媒における Ag 担持効果の解明	EMX E500	東京工業大学理学院	榊原 教貴
金属相と超伝導相の境界に位置する $\beta^{\prime\prime}$ -型 BEDT-TTF 塩の格子揺らぎの探索	ラマン	愛媛大学大学院理工学研究科	山本 貴
超薄層半導体光触媒の透過電子顕微鏡による計測評価	TEM	神戸大学大学院理学研究科	大西 洋
新規 N3S3 型 Fe(III) 錯体によるメタノール酸化反応の中間体および活性種の解明	E500 XL7	名古屋工業大学大学院工学研究科	小澤 智宏
イオン液体のコンフォメーションと非対称性アニオン効果	ラマン	防衛大学校機能材料工学科	阿部 洋
電子供与基を有するチオールを配位させた非平面ポルフィリン鉄 (III) 錯体の磁氣的性質	E500 E580 MS-7 XL7	島根大学大学院総合理工学研究科	池上 崇久
ヘム-カルコゲナート錯体の物性・化学研究	EMX XL7	名古屋市立大学大学院薬学研究科	樋口 恒彦
6-chloro-2,4-dinitroaniline 会合体の特異な発光過程の研究	ピコ秒	愛知教育大学教育学部	日野 和之
逆分子ふるい効果に連動した発光特性変化を示す金属錯体格子の励起状態ダイナミクス	E680 EMX E500	東北大学金属材料研究所	宮坂 等
金属酸化物のナノレベル構造解析	SEM 低 SEM	信州大学繊維学部	浅尾 直樹
放射線照射されたアラニン中のラジカル数の定量	MS-7	産業技術総合研究所	山口 英俊
ポリ N- イソプロピルアクリルアミドのダイマー水溶液の温度誘起型相分離現象の解明	VP-DSC	新居浜工業高等専門学校	橋本 千尋
強磁性/反強磁性分子間相互作用をもつ Galvinoxyl Radical の低温相の構造決定	微小結晶	名古屋大学大学院理学研究科	水津 理恵
Ca 結合型光合成タンパク質における耐熱化メカニズムの解明	VP-DSC PEAQ-ITC iTC200	神戸大学大学院農学研究科	木村 行宏
シグナル伝達に伴うベシクル型人工細胞組織の集団挙動発現	PEAQ-ITC iTC200	慶應義塾大学大学院理工学研究科	小島 知也
巨大中空錯体に内包されたタンパク質の構造解析	MALDI 円二色性	東京大学大学院工学系研究科	中間 貴寛
有機-無機界面磁気結合を利用した原子層物質の磁気状態制御	XMCD (BL4B)	名古屋大学未来材料・システム 研究所	宮町 俊生

XMCDを用いたβ-Mn型カイラル磁性体Fe _{2-x} Pd _x Mo ₃ NおよびCo _{2-x} Pd _x Mo ₃ Nエピタキシャル薄膜における磁気状態の研究 磁性ヘテロ薄膜構造の磁化方向制御に関する研究	XMCD (BL4B)	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	伊藤 孝寛
フラーレン誘導体LB薄膜の表面観察と光電気化学測定 分裂酵母ライブイメージングとデバイス内部からの選択的回収	XMCD (BL4B) 3次元 マスクレス 3次元 電子ビーム	名古屋大学未来材料・システム研究所 愛知教育大学教育学部 生命創成探究センター	宮町 俊生 日野 和之 杉山 博紀
界面選択的な振動分光を実現するナノ構造電極基板の開発 マイクロ流体デバイスを用いた植物の成長解析 がん細胞特異的結合分子探索効率を向上させるマイクロ流路デバイスの開発 キラリティ検出デバイスの作製	電子ビーム マスクレス マスクレス 3次元 マスクレス 電子ビーム	名古屋工業大学大学院工学研究科 基礎生物学研究所 豊田工業高等専門学校 大阪公立大学大学院工学研究科	本林 健太 四方 明格 神永 真帆 戸川 欣彦
FI-02 製イマージョン回折格子の形状・表面粗さ測定 α反跳トラックの密度測定による白雲母の年代推定	3次元 3次元	帝京大学医療共通教育研究センター 海洋研究開発機構数理科学・先端技術研究開発センター	藤代 尚文 廣瀬 重信
昆虫の発音器官の構造評価	マスクレス 3次元電子 ビーム	基礎生物学研究所	中村 太郎

(3) 所内利用

課 題 名	支援機器等	代 表 者
開殻分子性物質の創製と機能創出	低 SEM CCD-1 CCD-2 微小結晶 粉末X線 ESCA E680 EMX E500 E580 MS-7 XL7 熱解析 MALDI-TOF ラマン FT 蛍光分光 紫外可視近 赤外 量子収率 円二色性	生命・錯体分子科学研究領域 草本 哲郎
X線溶液散乱法およびX線単結晶回折法による生体分子の構造解析 周期的3次元有機構造体の創製	SAXS SEM 低 SEM TEM CCD-1 CCD-2 微小結晶 粉末X線 オペランド ESCA E680 EMX E500 E580 MS-7 XL7 VP-DSC PEAQ-ITC iTC200 熱解析 MALDI ラマン FT 蛍光分光 紫外可視近	協奏分子システム研究センター 秋山 修志 生命・錯体分子科学研究領域 瀬川 泰知

分子性伝導体の電子物性研究	赤外 量子収率 円二色性 ピコ秒 600NMR 溶液 E680 EMX E500 E580 MS-7 XL7	機器センター	中村 敏和
蛍光材料等の分光実験	低 SEM TEM 蛍光分光 紫外可視近 赤外 量子収率 ピコ秒	機器センター	上田 正
分子と対称性を用いた新奇機能性の創出	SEM 低 SEM TEM CCD-1 CCD-2 微小結晶 粉末 X 線 オペランド ESCA E680 EMX E500 E580 MS-7 XL7 VP-DSC PEAQ-ITC iTC200 熱解析 MALDI ラマン FT 蛍光分光 紫外可視近 赤外 量子収率 円二色性 ピコ秒 600NMR 溶液	協奏分子システム研究センター	佐藤 拓朗
金属センサータンパク質の NMR 構造研究	600NMR 溶液 円二色性	生命創成探究センター	村木 則文
有機分子変換を駆動・制御する新しい反応システムの構築	TEM MALDI	生命・錯体分子科学研究領域	奥村慎太郎
電極と電解質の表面や界面で起きる現象の解析	走査プローブ 顕微鏡	機器センター	湊 丈俊
有機材料のケルビンプローブ顕微鏡観察	走査プローブ 顕微鏡	物質分子科学研究領域	平本 昌宏
生命分子システムの動的秩序形成と高次機能発現の仕組みの探究	VP-DSC PEAQ-ITC iTC200 MALDI 円二色性 600NMR 溶液	生命創成探究センター	加藤 晃一
新規有機分子の合成と構造決定	600NMR 溶液 MALDI-TOF	生命・錯体分子科学研究領域	榎山 儀恵
超分子化学のツールを用いたタンパク質の構造・機能に関する研究	微小結晶 VP-DSC PEAQ-ITC iTC200 熱解析 MALDI-TOF 蛍光分光 円二色性 600NMR 溶液	特別研究部門	三橋 隆章

有機材料局所伝導度測定	走査プローブ 顕微鏡	協奏分子システム研究センター	佐藤 拓朗
ヒドリドの物質研究	SEM 低 SEM TEM 粉末 X 線 オペランド ESCA E680 EMX E500 E580 MS-7 XL7 VP-DSC PEAQ-ITC iTC200 熱解析	物質分子科学研究領域	竹入 史隆
新規高分子の表面解析	SEM 低 SEM	生命・錯体分子科学研究領域	榎山 儀恵
非常に鋭利な先端形状をもつ STM 用金属探針の開発	SEM 低 SEM TEM ラマン FT 蛍光分光 紫外可視近 赤外 量子収率 円二色性	物質分子科学研究領域	櫻井 敦教
EB 描画による Cr パターンの組成分析 天然および人工高分子分解酵素の機能解析	低 SEM VP-DSC PEAQ-ITC iTC200 MALDI-TOF	装置開発室 特別研究部門	木村 幸代 中村 彰彦
分子と対称性に基づいた新奇機能性デバイス作成	マスクレス 電子ビーム 3 次元	協奏分子システム研究センター	佐藤 拓朗
エネルギー材料の物性解析	SEM 低 SEM TEM CCD-1 CCD-2 微小結晶 粉末 X 線 オペランド ESCA E680 EMX E500 E580 MS-7 XL7 VP-DSC PEAQ-ITC iTC200 熱解析 MALDI ラマン FT 蛍光分光 紫外可視近 赤外 量子収率 円二色性 ピコ秒 600NMR 溶液	機器センター	湊 丈俊
一タンパク質赤外振動分光のための AFM 試料観察	走査プローブ 顕微鏡	メゾスコピック計測研究センター	西田 純
Fabrication of Plasmonic Chiral Nanostructure	SEM 低 SEM ラマン	メゾスコピック計測研究センター	Hyo-Yong Ahn

合成した光触媒の粒子の分析 AFM 液中電気化学電極評価	低 SEM 低 SEM ラマン	物質分子科学研究領域 機器センター	斎藤 晃 中本 圭一
遷移金属酸水素化物 BaTiO _{3-x} H _x の特性解析	低 SEM オペランド	物質分子科学研究領域	内村 祐
X線反射率による多層膜構造評価	オペランド	物質分子科学研究領域	山本 航平
蛍石型構造を持つ水素化物の結晶相判定	オペランド	物質分子科学研究領域	泉 善貴
溶液光化学反応の励起ダイナミクス研究	蛍光分光 紫外可視近 赤外	光分子科学研究領域	長坂 将成
スパッタリング法で得られた薄膜の膜厚測定 結晶の表面粗さ評価	マスクレス 3次元	物質分子科学研究領域 社会連携研究部門	内村 祐 小林 純
UVSOR 代行実験のためのグローブボックス利用	機器センター 長協力研究	極端紫外光研究施設	田中 清尚
電極表面の微細反応メカニズムを解明するための表面観察	走査プローブ 顕微鏡	物質分子科学研究領域	櫻井 敦教
Comparison of Surface Roughness Profile	走査プローブ 顕微鏡	社会連携研究部門	Arvydas Kausas
有機分子薄膜の表面構造研究	走査プローブ 顕微鏡	光分子科学研究領域	福谷 圭祐
ビームスポットの深さ測定	3次元	社会連携研究部門	小林 純
金属センサータンパク質の機能解明	PEAQ-ITC iTC200 蛍光分光 円二色性	生命創成探究センター	南 多娟
有機合成反応のデジタル化に向けたデータ収集	有機合成 DX	生命・錯体分子科学研究領域	大塚 尚哉
固体 NMR による 2次元および 3次元共有結合構造体の構造解析	600NMR 固体	生命・錯体分子科学研究領域	瀬川 泰知

(4) 非公開利用

マテリアル先端リサーチインフラ事業では、民間等の非公開利用も通常の公開利用を大きく圧迫しない条件で積極的に受入れている。2022年度は 600MHz 溶液 1件、低 SEM 1件、ラマン 1件が採択された。業種別内訳は大企業 2件、その他 1件であった。

表 3 2022年度（令和4年度）利用件数一覧（2022年4月～2023年3月）

	協力研究	施設利用	所内利用	非公開利用
採択件数	33	101	40	3
実施件数	31	96	39	3
実施日数	793	1615	1276	12

マテリアル先端リサーチインフラ事業では、同一申請者から前期後期に別々に申請があっても通年申請と読み替え 1件と数える。研究課題が変わっても同一申請者からの申請は年間 1件とする。

5-6 分子科学国際共同研究拠点の形成

分子科学研究所は、創設以来、多くの国際共同事業を主催するとともに、外国人客員教授を始めとする優れた外国人研究者を計画的に受入れて国際共同研究を推進し、国際的に開かれた研究所として内外から高い評価を得ている。近年、科学研究のグローバル化が急速に進むとともに、インドや東南アジアを含む広い意味での東アジア地区の科学研究も欧米追随ばかりでなく活性化しており、分子科学研究所においても、21世紀にふさわしい新たな国際共同研究拠点を構築していくことが必要となっている。このような状況の中、2004年度の法人化の機会に分子科学重点分野を定めて国際共同研究の輪を広げる試みを開始し、その後、日本学術振興会、JENESYS（外務省）、JASSO（日本学生支援機構）、総合研究大学院大学等の各種支援も受けながら、自然科学研究機構・国際学術拠点形成事業や分子科学アジアコア多国間国際共同事業などを実施し、欧米及びアジア地区での国際連携を強化してきた。さらにアジア拠点と欧米ネットワークを有機的に接続することによって、アジアと欧米を区別することなくグローバルな研究活性化と新しいサイエンスの出現が期待されており、今後、その方向に向けて分子科学研究所が活動していく必要がある。

そこで、2012年度に国際共同の在り方を大きく見直し、2013年から外国人研究者に関わる諸手続や渉外事務を担当する専門員（現在はURA）を雇用し、国際的に分子科学研究所の存在感を示せるようなシステム作りを始めている。現在、以下のような財源を利用して国際共同を活性化しているが、それぞれの財源の制約に合わせた国際共同研究事業を個々に行うのではなく、分子科学研究所として自由度の高い国際共同研究体制をアジアと欧米を区別することなくグローバルに構築しながら各種財源を混合して実施するように工夫している。なお、ここでは3章に記述のある岡崎コンファレンス、ミニ国際シンポジウム、アジア連携分子研研究会、総研大アジア冬の学校、外国人客員教授については触れない（以下の国際共同研究事業の財源を一部使っているものもある）。

5-6-1 国際共同研究事業の財源

(1) 自然科学研究機構「戦略的国際研究交流加速事業」

本事業は、各機関が第4期中期計画の達成を見据え、競争力の高い海外の研究機関等との国際共同研究を発展させる、あるいは新たに開始するための人的相互交流を支援する。特に、各機関が国際共同研究の核となるための、優れた外国人研究者の招へい、将来の国際共同研究の中核を担う若手研究者・大学院生の海外派遣及び海外からの受入れ、海外の先駆的研究者と機構所属の若手研究者との交流、等を推奨する。これにより、持続性のある国際交流関係を構築・強化し、機構における研究の国際競争力の向上を目指す。

【タイプB】各分野の将来を担う国際的な若手研究者の育成

海外の研究機関等との間で、若手研究者（ポストドク・大学院生を含む）を受入れ・派遣することにより、中長期的に持続性のある国際交流関係を構築・強化するための戦略的取り組み。

分子科学研究所として「東南アジア地域の分子科学分野の将来を担う国際的な若手研究者の育成（2022）」が採択。

アジアを相手とする IMS-IIPA（Institute for Molecular Science International Internship Program in Asia）事業や共同研究を支援。

(2) 自然科学研究機構「ネットワーク型研究加速事業」

自然科学分野において、国内外の大学や研究機関との幅広い連携による共同研究を推進し、異分野連携による新たな学問分野の開拓や、自然現象シミュレーションや新技術の開発を生かした創造的研究活動を推進する、国際的にも評価される機関間連携ネットワークを構築し、分野融合型や国際的共同利用・共同研究拠点を形成することを目的とする（5-7参照）。

【分野融合ネットワーク型研究加速】

異分野の研究領域を持つ機関が連携・ネットワーク化を図ることにより、新たな学問分野を開拓する国際的にも評価される研究拠点形成を目指すもの

分子科学研究所として「対称性の破れに基づく分子科学の深化（2022）」が採択。

欧米との国際共同研究と、アジアを相手とする IMS-IIPA (Institute for Molecular Science International Internship Program in Asia) 事業、共同研究等を支援。

(3) 総合研究大学院大学

【I. 新入生確保のための広報的事業】

2022年度は、アジアを相手とする IMS-IIPA 事業の支援として、タイ、インド、マレーシアからインターンシップ生4名を招へい。また、マレーシアのマラヤ大学からの総研大アジア冬の学校参加者2名の支援を行った。

(4) 分子科学研究所経常経費

以上の(1)～(3)はそれぞれの枠組みでの種々の制約があり、運用できないものがあるため、研究所の経常経費から補填し運用している。例えば、半年以上滞在する外国人インターン生の支援は以上の枠組みでは困難なため、国内の特別共同利用研究員（以前の受託院生）に対する RA 雇用と同基準での支援を行っている。

5-6-2 分子研国際インターンシッププログラム (IMS-IIP)

それぞれの外部資金に合うように別々に実施してきた、院生を主なターゲットにした研修生（インターン）制度を見直し、大きな枠組みで研究所が主導して実施する基幹プログラムとして位置付ける方向で2012年度に見直した。それを受けて2013年度より、分子研国際インターンシッププログラム (International Internship Program: IMS-IIP) として事業化し、共著論文を書けるまで滞在して研究することのできる目安として半年間前後の中長期の招へい計画を主な対象として実施している。なお、アジア分については次節に詳細を記述したが、IMS-IIPA (アジア版 IMS-IIP) と呼ぶことでアジア地区を重視した分子研独自のスカラシップがあるように見せた上で、提携研究機関・提携大学を中心に候補者の推薦を依頼している。なお、半年以上の研修生については国内分と同一の制度に基づき特別共同利用研究員（受託院生に相当する身分）として受入れるとともに RA 雇用して給与を支払っている。半年以内の研修生については、国内での共同利用者に相当する国際協力研究員として滞在費の補助を行っている。外国人の場合、共同利用研究者宿舎の中長期利用が可能である。

欧米及びアジアの各提携研究機関・提携大学に候補者の推薦依頼をする際には、例えば、のべ12ヶ月・人という総枠を与え、数名の推薦を依頼する形を原則としている（のべ12ヶ月だと半年滞在者2名あるいは4ヶ月滞在者3名の推薦が可能。ただし、滞在は3ヶ月以上という条件を課す）。各提携先にのべ何ヶ月・人の総枠を与えるかは実績を判断しながら増減している。毎年、優秀な候補者（院生と若手研究者を合計して考える場合と若手研究者は別枠とする場合がある）を推薦してくれている提携先へは先方の希望に応じて総枠を拡げている。一方で、先方から推薦された者をそのまま受入れるのではなく、現地あるいはインターネットで面接選考をせざるを得ない提携先もある。特に、東南アジアでは、まだ、その段階にあるところが多い。

以上のような調整を継続しながら質の面でのレベルアップを図っているところであるが、量的な面でも、2013年度は31名、2014年度は39名、2015年度は69名、2016年度は53名、2017年度は60名、2018年度は65名、2019年度は51名の受入れを行えるまでに順調に拡大している。新型コロナウイルスの感染拡大により、2020年度は25名、2021年度は2名にとどまっていたが、2022年度は、新型コロナウイルスによる入国制限が緩和したため26名の受入れが可能となった。

5-6-3 分子研アジア国際インターンシッププログラム (IMS-IIPA)

外務省のJENESYS事業、分子研のEXODASS事業を引き継ぐ形で2015年度よりIMS-IIPA事業として運用している。JENESYS事業、EXODASS事業の各種制限を解消し、欧米を相手に実績のあるIMS-IIP事業と同じ基準で実施するようになったので自由度が増した。今ではアジアと欧米を分ける意味もなくなりIMS-IIP事業として一括して扱っている。ただし、財源的には未だに区別が残っている。分子研はアジア地区で重点大学・拠点研究機関（タイのチュラロンコン大学・カセサート大学・NANOTEC・VISTEC、マレーシアのマラヤ大学、中国のアモイ大学、インドのIIT Kanpur、韓国科学技術院自然科学部、台湾の国立交通大学・中央研究院原子分子科学研究所等）を選び、MOUを直接、あるいは、総合研究大学院大学物理科学研究科を通して、締結しており、大学院生や若手研究者を一定期間招聘している。提携先拠点研究機関については、共同研究の有無なども考慮しながら随時入れ換えを行っていく。大学院生の場合は原則として5～6ヶ月、若手研究者の場合は1～6ヶ月滞在し、ホスト研究室に所属して国際共同研究を担ってもらう。分子研での研究を体験して、総研大への入学を希望する学生が毎年数名いるほか、分子研にポスドクとして戻ってくる学生もおり、分子研・総研大の研究力強化と国際化に寄与している。今後はダブルディグリー制度などとの組み合わせによって、さらに魅力的な制度となるよう改良していく予定である。

5-6-4 短期外国人研究者招へいプログラム

これまで分子科学研究所では、国内の共同利用研究者と同様、1、2週間程度の滞在（年通算では1ヶ月程度になるケースもある）で施設利用研究を実施する枠組みがなかった。そのため、短期外国人研究者招へいプログラムを設定し、中部国際空港を起点として、国内研究者と同様、分子科学研究所に滞在中の滞在費を支援することにした。海外の所属機関と中部国際空港の間の旅費については原則、支給しないが、財源によっては支給が前提のものもあるため、LCC等の利用によって国内旅費より低額になるケースなどで例外的に支給することもある。現在のところ、施設利用のすべてにおいて、直接、海外からの申請を認めているわけではなく、UVSOR施設のように国際的に見て競争力のある設備を利用した研究に限られているため、欧米やアジアでも中国、韓国、台湾、インド、タイのような科学技術が進んでいる国の研究者を対象としている。なお、研究者に随行して共同研究に参加する院生はIMS-IIP事業の短期分として中長期分に合算してカウントすることになっている。

一方、国際協力研究については、海外からの直接申請ではなく、研究所内の教員による国際共同研究の提案を受け、所内委員による審査を経て①海外の教授、准教授クラスの研究者の短期招へい、②若手外国人研究者の短期招へいなどが「分子科学国際共同研究拠点の形成」の主要プログラムとして実施されていた。その実績は2008年度9件、2009年度12件、2010年度13件、2011年度13件、2012年度11件である。

2013年度より様々な財源をもとに短期外国人研究者招へいプログラムを始めることで、従来の国際協力研究に加え、国際施設利用（協力研究的であり、単なる設備利用はない）にも拡大した結果、2013年度35件、2014年度31件、2015年度40件、2016年度45件、2017年度48件、2018年41件、2019年44件と推移しており、今やIMS-IIP事業と合わせて分子科学研究所の国際的な存在感を高めるプログラムとなっている。2020年度は新型コロナウイルスの感染拡大により、その件数は30件にとどまった。また2021年度は日本への入国が制限され、短期外国人研究者招へいプログラムによる国際共同研究は0件であった。一方、リモートによる研究打合せ、実験等が加速し2021年度のリモートによる国際共同研究実施者は105名、2022年度は73名であった。2022年度は、新型コロナウイルスの規制が緩和されたため短期外国人招へいプログラムによる国際共同研究実績は12件であった。

5-7 ネットワーク型研究加速事業（自然科学研究機構）

第3期中期計画期間に入り、自然科学研究機構の研究費（運営費）の一部が、機構で統括し、機構長の裁量で各機関に配分する形をとることとなり、自然科学研究機構では2016年度に「自然科学研究における機関間連携ネットワークによる拠点形成事業」（2017年度からは「ネットワーク型研究加速事業」に名称変更して継承）として機構内で公募して選考することとなった。これは、自然科学分野における国内外の大学や研究機関との連携による共同研究を推進し、新たな学問分野の開拓も視野に入れて自然現象シミュレーションや新計測技術の開発を生かした創造的研究活動を推進する、国際的にも評価される機関間連携ネットワークの構築による国際的共同利用・共同研究拠点を形成することを目的としている。分子科学研究所においては、この機構内公募に対して「対称性の破れに基づく分子科学の深化」という事業を申請し、採択された。その内容の概略は、以下の通りである。

様々な物質相と階層において、対称性の破れを共通の原理とした理解を促進し、マイクロとマクロの間で起きる分子機能を解明する、新しい分子計測法と理論解析手法を開拓する。そのような研究によって、分子とそのシステムが関わる広い領域の自然現象を対象とした国際的な連携研究のネットワークを形成する。新しい発想の計測を中心とした実験手法と、そこから有意な情報を取り出すデータ解析手法、及び実験結果をシミュレーションし、解析する理論的枠組みを一体的に開発し、物質科学、生命科学の広い階層の挙動解明に新たな視点を提供する。また、分子科学関連分野の国内外研究機関と共同研究を進め、生命科学分野の研究機関とも連携して、観察・解析手法の開発・展開にフィードバックし、それらの特徴を生かした新たな異分野融合研究領域を開拓する。

これらの将来的な生命科学への展開について可能性を議論するため、本事業に関わる研究会やセミナーを13件開催した。また海外諸機関との共同研究、インターンシップ受入れを継続して行っている。

5-8 研究大学強化促進事業（文部科学省）

「研究大学強化促進事業」は文部科学省の2013年度から10年間の事業であり、(A)研究戦略や知財管理等を担う研究マネジメント人材群（所謂、URA：University Research Administrator）の確保・活用と(B)集中的な研究環境改革による大学等の教育研究機関の研究力強化のための支援事業である。2022年度はその最終年度にあたる。

自然科学研究機構では、機構本部に研究力強化推進本部（担当理事が本部長）、5研究所に研究力強化戦略室が設置され、それぞれ研究マネジメント人材（自然科学研究機構では年俸制の特任教員、特任研究員、特任専門員の雇用を可能にした）を配置し、研究力強化戦略会議（議長は機構長。理事、各機関の長5名、各機関の副所長或いは相当職5名、及び推進本部特任教授がメンバー）の下で一体的に活動することになった。なお、研究力強化戦略室の室長は研究力強化戦略会議メンバーである副所長相当職（分子研の場合は研究総主幹）を機構長が指名し、各機関の以下に述べる項目に関する研究マネジメント体制を考えることになった。

自然科学研究機構では、研究力強化のために①国際共同研究支援、②国内共同研究支援、③広報、④研究者支援（外国人、女性、若手）の4本柱を立てて本事業を開始した。また現在では、これらに加えて、⑤IR（Institutional Research）の機能を事業に含めて運営することとなっている。戦略室の中に広報機能が入ることになったため、分子研では広報室は戦略室に一本化した。また、これまでの史料編纂室機能は研究評価・研究企画に利用すべくIR資料室的機能を持たせて戦略室に含め、⑤IR機能、及び評価・企画を含めて統合的に運用することにした。所長は、戦略室の支援によって、より広い見地からの研究力強化の戦略を立てる。

2022年度は前年度の活動に引き続き、以下の活動を行った。

- ・ 研究所の研究力強化のための評価・提言を戴いた。

研究顧問

2022年5月9日-11日（ハイブリッドで実施）

北川 進（京都大学物質-細胞統合システム拠点拠点長、特別教授）

James M. Lisz（Research Professor, University of Illinois Urbana-Champaign）

- ・ 国際インターンシップ生の受入れを継続して行った。
- ・ ソーシャルネットワークサービスでの発信、一般向け講演会のオンライン開催、ホームページにおける英文の強化を重点的に行った。
- ・ 海外との連携強化のため、例年、MOU締結大学等での視察・打合せ・研究会、および先方からの受入れを行っているが、2022年度はCOVID-19感染拡大の影響で実施実績はなかった。

5-9 URA による研究 DX を推進するデータの整備・構築 MIRAI-DX プロジェクト（文部科学省）

研究大学コンソーシアムに参画する国立大学等 36 機関では、自然科学研究機構が事務局となり、研究大学強化促進事業 2020 年度補正予算により URA（ユニバーシティ・リサーチ・アドミニストレーター）の活動に資するデジタルトランスフォーメーション（DX）プラットフォームの構築を行った。URA の研究支援活動の一部を DX 化することで共同研究ネットワークの構築を推進し異分野人材交流を活発化することが狙いである。

これからの科学研究のあり方の一つとして、研究者個人の意思や能力だけに頼るのではなく、個々の研究者の強み・特徴をデータベース化することで大学・研究機関の組織に研究力情報を集約し、データベース情報に基づいて、個々の研究者では案出し得ないような共同研究モデルを創出することが考えられる。研究者個人や研究機関単独の取り組みでは研究グループの組織編成・分野交流に限界があったところを、本事業プロジェクトでは全国大学の URA が仲介・伴走することで、組織の枠を越え異分野融合・産学連携をなし、急激な世界の研究進展の潮流に乗り社会課題の迅速な解決に貢献することを目指す。構築された研究者データの DX プラットフォームを活用し参加機関の URA が協働することで、国内の科学研究を縦横無尽に分野・機関を越えてつなぎ、共同研究を推進することを期待した取り組みである。

2022 年度には、完成した DX プラットフォームを活用し、前年の人的試行で得られたノウハウを組み合わせた共同研究マッチングをパイロットフェーズとして行った。

5-10 分子科学研究所所長招聘会議

分子科学研究所 所長招聘会議は、我が国の学術の姿、研究力強化、大学及び共同研究機関の変容と変革、大学院教育戦略・国際化、科学政策・評価などについて産官学の意見・考えを基に多角的統括的に討議することを目的に、2001年からほぼ1年に1回の頻度で開催されている。日本学術会議 化学委員会、日本化学会 戦略企画委員会と分子科学研究所の共同主催として開催され、日本学術会議 化学委員会の主要活動の一つに位置づけられている。分子科学研究所は運営事務局として参画する。

ここ数年は初夏の頃に本会議を開催しており、2022年度は、「日本の人材育成を考える」というタイトルで、2020年度、2021年度に引き続き、我が国における博士人材の状況と果たす役割について議論を行った。日本の科学技術の低下を防ぐためにも優秀な博士人材の確保は喫緊の課題であるが、経済的な支援を含む様々な施策がなされてきたにも関わらず、博士課程の進学率は上がっていない。博士人材の層を厚くするためには何が必要なのか。今回は4名の講師を招き、博士課程学生支援を総括するとともに、欧米との博士人材育成の違い、社会に貢献できる博士人材の育成、日本特有の就職システムなど、どこに問題があるのかを議論した。

なお、2022年度は、COVID-19感染状況に鑑み、オンラインと現地開催のハイブリッド形式で開催し、約140名の参加者があった。

開催テーマ：「日本の人材育成を考える」

開催日時：2022年6月7日（火） 13:00～17:00

プログラム：

開会挨拶 渡辺芳人（分子科学研究所 所長）

趣旨説明 茶谷直人（大阪大学 名誉教授）

講演

「過去20年の博士支援の総括」

松尾泰樹（内閣府科学技術・イノベーション推進事務局長）

「私が体感した日本と欧州の博士人材育成の違い」

豊田良順（東北大学 助教）

「VUCAの時代の企業における博士人財の役割と期待」

高柳大（味の素株式会社）

「日本の悪しき就職活動を変えなければ博士人材育成の改革はできない」

菅裕明（東京大学 教授、日本化学会会長）」

総合討論

司会：玉田薫（九州大学 教授）

討論参加者：上記講演者及び関根千津（株式会社住化技術情報センター代表取締役社長）

主催：日本学術会議化学委員会、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、公益社団法人 日本化学会戦略企画委員会

運営事務局：分子科学研究所（岡本裕巳 教授）