

01 実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究 拠点 Elements Strategy Initiative for Catalysis and Battery (ESICB)

平成24年度に開始した「元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>」は今年度で3年目を迎え、いよいよ研究活動も本格化し、顕著な成果も出始めている。本プロジェクトは磁石材料、触媒・電池材料、電子材料、構造材料の4領域から構成され、その中で触媒・電池材料領域は京都大学に研究拠点を置いており、分子科学研究所は電子論グループの連携機関として参画している。本プロジェクトのミッションは、汎用元素を利用した高性能な触媒と二次電池の開発であり、具体的には、自動車排ガス浄化触媒とナトリウムイオン電池の開発である。

ここでは、1年半前の分子研レターズ68号に報告して以降の研究拠点の活動を概括する。「公開シンポジウム」は年2回開催が定例化され、本年も3月19日に第4回が東大本郷キャンパスにて、10月14日に第5回が京大桂キャンパスにて開催され、それぞれ100名程度の参加者を得ている。公開シンポジウムでは3件の招待講演に加えて、触媒、電池、電子論各グループからの研究報

告が行われている。また、本プロジェクトで活動している博士研究員の講演を中心とした「次世代ESICBセミナー」も、本年10月で4回を数えている。さらに、年2回のペースで内部的な研究交流会として「触媒・電子論合同検討会」および「電池・電子論合同検討会」を開催し、実験と理論研究の交流を促進しながら、研究開発を推進している。これらの合同検討会では、実験・理論双方から、研究の進展の報告が行われ、ポスター発表による議論がなされている。またこれ以外にも「電子論検討会」や「電子論分科会」を開催しており、理論研究独自の的方法論開発や触媒・電池研究への応用に関する共通の話題について議論を行っている。さらに、昨年度からESICBコロキウムとして、この分野における国内外の著名な研究者を招へいた講演会も随時開催しており、現在まで8回目を迎えている。

このようにプロジェクト内外の研究交流を積極的に行っており、実験と理論の相互理解も発足時点と比較すると



格段に進化したという実感がある。実際、幾つかのグループで、実験と理論の共著の論文も成果として出てきている。また、触媒・電池の複雑・複合系を取り扱うことのできる理論開発も進展しており、今後、触媒・電池の革新的な材料の開発に繋がることが期待される。

(江原 正博 記)

02 文部科学省「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」 HPCI戦略分野2「新物質・エネルギー創成」計算物質科学イニシアティブ (CMSI) 計算分子科学研究拠点 (TCCI) 第5回研究会

平成21年度の実施可能性調査から始まったHPCI戦略分野プロジェクトも6年目となった。平成26年10月17日(金)、18日(土)に、岡崎コンファレンスセンター(OCC)にて、計算分子科学研究拠点(TCCI)の研究会(全体シンポジウム)を開催した。今年度は予算削減の影響で、毎年開催してきた「TCCI実

験化学との交流シンポジウム」も兼ねて、本研究会を開催することになった。このため、実験研究者5名を含む招待講演6件と、TCCIメンバーからの成果報告など(口頭9件、ポスター30件)が行われた。参加者数は69名(民間企業から3名を含む)であった。今回の企画は、斎藤真司教授(分子研)と佐

藤啓文教授(京大院工)が担当した。

冒頭、拠点長の高塚和夫(東大院総合文化/分子研)が開会の辞を兼ねた拠点報告を行い、文部科学省の川口悦生計算科学技術推進室長よりご挨拶を頂いた。開発の始まった「京」の次のスーパーコンピュータについて、理研AICSエクサスケールコンピューティン

グ開発プロジェクトの石川裕プロジェクトリーダーから「ポスト京コンピュータ開発概要」と題して、検討中の内容についてご紹介を頂いた。TCCI側からは、安藤嘉倫特任講師（名大）、石村和也特任研究員（分子研）がそれぞれ開発を担当しているアプリケーションソフトのポスト京に向けた方針と課題について報告した。

理研放射光科学総合研究センターXFEL研究開発部門の矢橋牧名チームライン研究開発グループディレクターからは「X線自由電子レーザー SACLAの現状と展望」と題して世界の最先端のSACLAの状況と今後の予定について、公益財団法人地球環境産業技術研究機構（RITE）化学研究グループの中尾真一グループリーダーからは「二酸化炭素分離回収技術の現状」と題してCO₂分離回収技術の開発状況と特に回収コスト低減を含めた今後の研究開発の取組みについて、京大の阿部竜教授からは「太陽光水素製造を目指した可視光応答型光触媒系の開発」と題して人工光合成に繋がる光触媒の研究開発

状況について実験の様子も含めて、分子研の正岡重行准教授からは「金属錯体を利用した多電子酸化還元触媒の開発」と題してやはり人工光合成を目指した触媒開発の状況について、同じく分子研の飯野亮太教授から「生体分子モーターダイナミクスの1分子計測：構造解析と理論予測との協奏を目指して」と題して分子モーターに関する研究についてご講演を頂いた。

例年の「TCCI実験化学との交流シンポジウム」と同様、TCCIメンバーからの報告は実験研究者の講演テーマに近い内容を同じセッションで発表するようにアレンジされていることに加えて、ポスト「京」コンピュータで重点的に取り組むべき社会的・科学的課題の一つとして「エネルギー問題」が選定されていることから、「実験でできること」「計算でできること」を中心に活発な質疑が行われ盛会となった。なお、HPCI戦略分野プロジェクトは、平成27年度が最終年度となる予定である。

（高塚 和夫 記）



03 ナノテクノロジープラットフォーム

ナノテクノロジープラットフォーム（以下、ナノプラット）は開始から3年目を迎えました。ナノプラットは文部科学省の委託事業であり、大学や研究機関が所有する装置や研究のノウハウを、公平に民間企業や非営利団体、大学の方々に利用してもらい、科学技術の発展に貢献することを目的とした共用事業です。10年間続きます。微細加工、微細構造解析、分子・物質合成の3

つのプラットフォームとセンター機関から成り、分子研は11機関から成る分子・物質合成プラットフォームの代表機関並びに実施機関として活動しています。ナノプラット室には、代表機関運営責任者・実施機関実施責任者である横山教授、分子・物質合成プラットフォーム全体を担当している金子運営マネージャーの他、数名のメンバーがいます（筆者は分子研部分を担当して

います）。

分子研の中の方にとっては、これまでの業務と特に変わらないことが多く、ナノプラットを意識することは少ないと思いますが、ナノプラットが始まったことにより今まで分子研の存在さえ知らなかった人に利用していただく機会を多く作ることに成功しています。また、民間企業の方も利用料を支払えば分子研の装置を利用できるよう

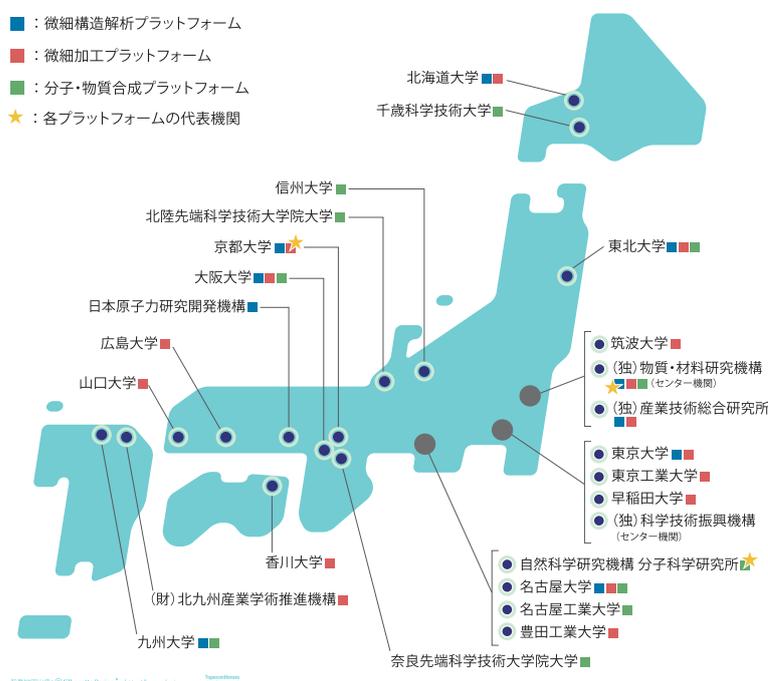
なっています。とはいっても、この2年半の実施課題数329件（公開・非公開利用の合計。ナノプラットは通年で1件として数える）のうち民間利用は46件しかなく、他の実施機関に比べると民間の利用件数は少ない状況です。それでもそこそこの収入になっていますので、共同利用の強化に使える予算がナノプラットを通して増えたと考えていただければと思います。もちろん、社会貢献が重要なのですが。

具体的な分子研の支援として、UVSORからは、我が国唯一の共用装置である走査型軟X線透過顕微鏡装置と世界的にも共用設備の少ない超高真空高磁場極低温軟X線磁気円二色性測定装置を公開しており、海外を含めて多くの利用者を迎え数々の成果を挙げています。920 MHz NMRを用いた超高速試料回転固体NMRの開発（平成24年度、東京農工大）は、もともと物質・材料研究機構（NIMS）の超高磁場NMRを利用して開発を予定した研究でしたが、東日本大震災でNIMSのNMRが大きな被害を受けたための復興特別支援となりました。また、高磁場ESRを利用した成果として、内包フラーレン分子錯体の特徴的分子磁性（平成25年度、京大、筑波大、JST）があり、He原子を内包したフラーレン合成により世界で初めてHe原子のX線回折を捉えた研究が非常に注目を集めています。合成支援においては、有機FET作成支援に基づく「分子性ディラック電子系における量子輸送現象」（平成24-25年度、東邦大、阪大、理研）、有機合成支援に基づく「Pd/USYゼオライトを触媒とした高選択的かつ高効率的C-C結合生成反応の開発」（平成24年度、鳥取大）などで成果が挙がっています。また、平成26年度には、このところ大きな社会問題となっている危険ドラッグに関連した支援（科警研）を行っています。

事業の補正予算として、機能性材料バンド構造顕微システム、低真空電界放射分析走査型電子顕微鏡、X線溶液散乱計測システム（機器センター）、マイクロストラクチャー作製・評価装置（装置開発室）を導入し、本年度より運用開始致しました。前身のナノテクノロジーネットワークプロジェクトのときには分子スケールナノサイエンスセンターに事務室があったのですが、分子スケールナノサイエンスセンターが廃止になってからは事務室が見えなく

なっていました。しかし、来年からようやく機器センターが受け皿になって事務室も一本化できることになりました。ナノテクプラットフォームは異分野融合を推進しています。機器センターをコアとして関連する施設と協力し、事業の発展だけでなく、分子研の発展にも貢献できれば幸いです。

（井上 三佳 記）



文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム実施機関一覧。
 ■の機関が分子・物質合成プラットフォームの実施機関。



ナノプラットは所内の融合交流にも貢献しています！
 (忘年会@日間賀島 2014年12月)

04 大学連携研究設備ネットワークの現状

大学連携研究設備ネットワークは、全国の国立大学の有する研究設備を相互に利用することで設備の有効活用をはかり、同時に研究者の利便性向上に寄与することを目的として、全国の国立大学法人と自然科学研究機構（分子科学研究所）が連携して推進しているプロジェクトです。前身は2007年度から開始された「化学系研究設備有効活用ネットワーク」で、他大学の装置を利用するという形態になりやすい化学系の分野でまず相互利用のシステムを構築しようと、化学系の教員・各大学の機器分析センター等が中心となってプロジェクトがスタートしました。その後3年経過した2010年度より(1)対象分野を化学系に限定しない、(2)公私立大学・企業等からの利用も可能とする、などの変更を加え、名称も大学連携研究設備ネットワークと改称して現在に至っています。分子科学研究所が行っていた従来の施設利用を包含しています。

他大学の装置を予約して利用する為に、インターネットを利用した予約システムを構築しました。ユーザーはwebブラウザを使ってこのシステムにアクセスします(URL: <http://chem-eqnet.ims.ac.jp/>)。

システムには各大学で相互利用に供する設備とその管理者を登録しており、登録ユーザーは全国の大学の装置を予約することができます。測定を自分で行う（マシンタイムを確保する）タイプの予約（相互利用）と、サンプルを送付して管理者に測定してもらうタイプの予約（依頼測定）2つの利用形態が用意されています。

設備の利用料金は四半期毎に大学単位で相殺処理を行います。参加している72の国立大学は12の地域に分けられ、地域毎に拠点校を設定していますが、相殺処理は各大学が使用した料金（支払い）と提供した設備の料金（収入）の差額のみを拠点校との間でやり取りし、相殺処理後、各大学内で予算の振替等によって設備を利用した研究室から料金を徴収し、設備を提供した部署へ料金が配分されます。

2007年5月に、登録機器119台、登録ユーザー4700名で、予約システムが稼働開始しましたが、2014年12月現在では、登録機器676台、登録ユーザーは1万名、登録研究室数は2300を越えています（表1、図1,2）。各種統計データを表1、2、図1～5にまとめ

てありますが、それぞれの数値で順調な成長を示しています。

以下、化学系研究設備有効活用ネットワーク、大学連携研究設備ネットワーク（以下、「設備ネットワーク」と略記）の出来事を順に記します。

スタート当初、大学間での利用を想定していたため、各大学の状況は他大学に公開できる数台の設備だけネットワークの予約システムを使い、その他の多数の設備は従来の予約システムを使用するという変則的な状況になっていたかと思われます。利用者からすれば似たような設備なのに予約システムが違うという不便な状況になっていたと推測されました。この状況を改善するため、当予約システムを学内向けの設備でも使えるように、システムの改良をしました。“学内専用”と設定された設備は同じ大学のユーザーからしか予約ができず、設備の存在自体も他大学からは見えないようになっていました。2009年12月に改良を行い、2010年度になってから実際の登録がされ始めましたが、利用件数のグラフ（図5）より、この頃を境に利用件数が急激に増えていることがわかります。

表1 大学連携研究設備ネットワーク登録者数

	2007年5月	2014年12月
全ユーザー	4729名	10002名
設備管理者	101名	376名
研究室責任者（＝研究室数）	792名	2385名

表2 登録機関数（2014年12月現在）

国立大学	73
公立大学	9
私立大学	26
公的研究機関	7
民間・企業	37
その他	2
計	154

表3 登録の多い設備（2014年12月現在）

カテゴリ	学内設備	公開設備	計
NMR(溶液/固体)	24	77	101
質量分析装置(MS)	27	62	89
X線回折装置(薄膜・単結晶)	12	54	66
電子顕微鏡(SEM, TEM)	22	35	57

表4 生物関連機器の登録台数（2014年12月現在）

カテゴリ	学内設備	公開設備	計
DNAシーケンサー	12	10	22
PCR装置	5	8	13
プロテインシーケンサー		4	4
セルソーター、フローサイトメーター、マルチプレックスアッセイ	12	2	14
マイクロプレートリーダー、イメージングサイトメーター	1	2	3
蛍光顕微鏡	4	1	5
バイオアナライザー	1	1	2
パラフィンブロック/切片 作装置	2		2
ペプチド合成機	1		1
レーザーマイクロダイセクション	1		1

72機関の国立大学と分子研で構成されていた当プロジェクトですが、2010年度より公私立大・民間企業等の参加も受け入れるようになりました。これは、予約システムへの登録を可能とし、利用者側としてのみ参加できるという扱いで、既存の国立大学とは異なり、以下のような規定がされています。

- ・公私立大・民間企業等の設備を設備ネットワークに登録・提供することはできない。

- ・従来からの設備提供機関は各機関の判断で公私立大・民間企業等への利用提供に対応してよい。義務ではない。

- ・料金の相殺処理は行わず、直接2機関の間で料金の授受を行う。

設備ネットワークは、予約システムの利用を解放するだけで相殺処理も行わないので、設備提供大学は個々に利用機関に対して料金請求の事務を行うこととなります。また設備の提供は義務ではなく、「公私立大は利用可、企業の利用は不可」等といった個々の大学独自のルールでの運用が可能です。登録に際し、企業や大学の規模が大きく動きがとりづらい場合には、学部単位や研究所単位などでも登録を受け付けています。

2014年12月現在の登録機関数を表2に、国立大学以外の登録機関数の推移を図4に示します。ホームページ上の私立大学等登録手順の記載を見やすく改修した効果か、2013年4月から機関の登録数が伸びています。各大学の事情をうかがうと、設備ネットワークに登録されている機関であると大学の事務方での通りがよく、事務処理がスムーズに運ぶという話も聞かれます。

2011年度より文部科学省の設備サポートセンター事業が開始されました。これは、毎年数校の大学を選定し、学内の設備を有効利用する体制を整える

もので、3年間予算措置があります。設備ネットワークとは直接の関係はないものの、学内設備を全学的に利用できる体制を整えるにあたり、当設備ネットワークの予約システムを利用される例が多く、この事業の開始とともに設備の登録台数も増加しています(図3)。

登録数の多い設備は、表3に示す通り化学系のものが多いですが、最近では生物・農学・医学等の分野からも登録があります。表4に生物系で登録されている設備の例を示します。また、変わった所ではファイトロン(植物を育成する温室)などの登録もあり、数ヶ月単位での利用に合わせてシステムの改修も行いました。

設備ネットワークでは、第1期中期計画期間中は特別経費等の配分が文科省からあったおかげで登録設備に対する予算措置を行うことができ、2008-2009年の2年間で45台の設備の復活再生(修理、オプションの追加・交換によるグレードアップ等)を行いました。また、2009年度補正予算により、36台の設備が新規に購入され設備ネット



図1 登録ユーザー数の推移



図2 研究室責任者数(=研究室数)の推移

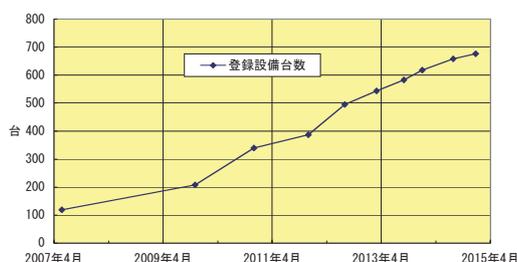


図3 設備登録台数の推移

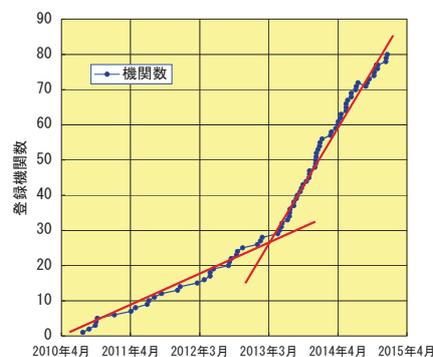


図4 公私立大・企業の登録数推移



図5 相互利用(分子研では施設利用に相当)件数

ワークに登録されています。第2期中期計画期間（2010年～2016年）でも概算要求獲得の努力はしましたが、結果的には特別経費等の予算措置がなくなりました。しかし、分子科学研究所として内部的に機関間の共同研究に対する補助に限り予算を確保し、新規に導入された36台の設備の利用を軸とし

て、装置利用料や旅費等の補助や設備の利用講習会等の補助を続けています。

設備ネットワークでは、参画国立大学に対して予約システムのソースの配布を行っています。各機関で利用しやすいようにシステムを改良し、学内用のシステム等として利用することができます。第3期中期計画期間（2016年

～2022年）の予算は厳しいと聞いていますが、少なくとも設備ネットワークの維持と各機関での予約システム構築への協力は継続しますので、引き続きご活用いただければ幸いです。

（岡野 芳則 記）

国際研究協力事業報告

01 アジア冬の学校

2015年1月13日（火）から16日（金）にかけて、日中韓台の4カ国で毎年順番に開催している「アジアコア冬の学校」が岡崎コンファレンスセンターにて開催されました。今回は「総研大アジア冬の学校」との共催により、例年に比べて規模も大きくなり（講師19名、その他参加者93名）、中国、台湾、韓国、タイ、ベトナムといった多くの国々から参加がありました。

プログラムは、「実験と理論計算」、「新材料のデザインと合成」、「物質科学」、

「光分子科学」、「生命科学」の5つのセッションで構成され（詳細は<http://www.ims.ac.jp/aws14/program.html>を参照）、台湾で開催された昨年度のスタイルに近いものでした。前半は学生からの質問が少なかったのですが、座長や教員から繰り返し促すことで、中盤から後半にかけて徐々に積極的に手が挙がるようになりました。幅広い分野から参加者が集う学校ですので、学校としてのテーマ設定だけでなく、講師陣の話題提供内容や方法など、改善に向けて

検討すべき点が見受けられました。

開催にあたり、講師の先生方、所内の担当委員の先生方、秘書、総研大生の多くの方々に協力を頂きました。この場をお借りし、お礼申し上げます。

なお、次回の「アジアコア冬の学校」は、中国がホストとなる予定で、開催地は北京周辺、時期は2016年1月の第2～3週あたりが候補となっています。

（秋山 修志 記）

