

「分子研リポート2005」目次

1 . 序	言	1
2 . 分子科学研究所の概要		3
2-1	研究所の目的	3
2-2	沿 革	3
2-3	現在の組織とその発足	5
2-4	研究所の運営	7
2-4-1	運営顧問会議	7
2-4-2	運営会議	7
2-4-3	人事選考部会	8
2-4-4	運営会議共同研究専門委員会	9
2-4-5	学会等連絡会議	9
2-4-6	教授会議	10
2-4-7	主幹・施設長会議	10
2-4-8	大学院委員会	10
2-4-9	特別共同利用研究員受入審査委員会	10
2-4-10	各種委員会等	11
2-5	構成員	14
2-5-1	現在の構成員	14
2-5-2	人事異動状況	22
2-6	研究系及び研究施設の概要	23
2-7	岡崎共通研究施設（分子科学研究所関連）の概要	30
2-8	技術課	31
2-8-1	技術研究会	31
2-8-2	技術研修	33
2-8-3	見学者の受入れについて	35
2-8-4	人事	35
2-8-5	受賞	36
2-9	共同利用研究	37
2-9-1	共同利用研究の概要	37
2-9-2	2005 年度の実施状況	37
2-9-3	共同利用研究実施件数一覧	53
2-10	学術創成研究（新プログラム）	54
2-11	ナノサイエンス支援	55
2-11-1	ナノサイエンス支援「分子・物質総合合成・解析支援プログラム」による 協力研究・施設利用について	55
2-11-2	2005 年度の実施状況（1 月 31 日まで）	56
2-12	超高速コンピュータ網形成（NAREGI）プロジェクト	59
2-12-1	中間評価への取り組み	59
2-12-2	2005 年度「ナノ設計実証」公募研究テーマ一覧（16 社 19 件）	61
2-13	エクストリームフォトンクス	63
2-14	国際交流と国際共同研究	64
2-14-1	国際交流	64

2-14-2	国際共同研究	67
2-14-3	国際シンポジウム	69
2-14-4	総研大アジア冬の学校	71
2-15	大学院教育	74
2-15-1	特別共同利用研究員	74
2-15-2	総合研究大学院大学	75
2-15-3	オープンハウス	78
2-15-4	夏の体験入学	79
2-16	財政	81
2-16-1	現員	81
2-16-2	財政	81
2-17	岡崎共通施設	84
2-17-1	岡崎情報図書館	84
2-17-2	岡崎コンファレンスセンター	84
2-17-3	岡崎共同利用研究者宿泊施設	84
2-17-4	職員会館	84
2-18	地域社会との交流	85
2-18-1	国研セミナー	85
2-18-2	分子科学フォーラム	86
2-18-3	岡崎市民大学講座	87
2-18-4	安城市民公開講座等	87
2-18-5	おかざき寺子屋教室	88
2-18-6	地域の理科教育への協力	88
2-18-7	中学校理科副教材の作成	89
2-18-8	一般公開	90
2-18-9	見学受け入れ状況	91
2-19	安全衛生管理室	92
2-20	広報委員会	93
2-21	知的財産	94
3	研究系及び研究施設の現状	95
3-1	論文発表状況	95
3-1-1	論文の発表状況	95
3-1-2	論文の引用状況	96
3-2	理論分子科学研究系	97
	分子基礎理論第一研究部門	97
	分子基礎理論第二研究部門	108
	分子基礎理論第三研究部門	115
3-3	分子構造研究系	125
	分子構造学第一研究部門	125
	分子動力学研究部門	129
3-4	電子構造研究系	135
	基礎電子化学研究部門	135
	電子状態動力学研究部門	139
3-5	分子集団研究系	146
	物性化学研究部門	146
	分子集団動力学研究部門	154

3-6	相関領域研究系	158
	相関分子科学第一研究部門	158
3-7	極端紫外光科学研究系	161
	基礎光化学研究部門	161
	反応動力学研究部門	167
3-8	計算分子科学研究系	176
	計算分子科学第一研究部門	176
	計算分子科学第二研究部門	185
3-9	錯体化学実験施設	188
	錯体物性研究部門	188
3-10	研究施設	193
	分子スケールナノサイエンスセンター	193
	極端紫外光研究施設	235
	分子制御レーザー開発研究センター	244
	安全衛生管理室	263
3-11	岡崎共通研究施設（分子科学研究所関連）.....	265
	岡崎統合バイオサイエンスセンター	265
4	点検評価と課題	281
4-1	電子構造研究系	281
4-2	極端紫外光科学研究系	291
4-3	岡崎統合バイオサイエンスセンター	305
4-4	運営顧問による点検評価	319
	4-4-1 小間 篤運営顧問	319
5	将来計画及び運営方針	321
5-1	分子スケールナノサイエンスセンター	322
5-2	極端紫外光研究施設（UVSOR）.....	326
5-3	分子制御レーザー開発研究センター	332
5-4	装置開発室	333
5-5	計算科学研究センター	338
5-6	系と施設の在り方等の検討	340
6	中期計画に対する取組	347
6-1	研究機構の教育研究等の質の向上に関する目標を達成するためにとるべき措置	348
	6-1-1 研究に関する目標を達成するための措置	348
	6-1-2 共同利用等に関する目標を達成するための措置	351
	6-1-3 教育に関する目標を達成するための措置	354
	6-1-4 その他の目標を達成するための措置	356
6-2	業務運営の改善及び効率化に関する目標を達成するためにとるべき措置	358
	6-2-1 運営体制の改善に関する目標を達成するための措置	358
	6-2-2 研究組織の見直しに関する目標を達成するための措置	358
	6-2-3 職員の人事の適正化に関する目標を達成するための措置	359
	6-2-4 事務等の効率化・合理化に関する目標を達成するための措置	359

6-3	財務内容の改善に関する目標を達成するためにとるべき措置	361
6-3-1	外部研究資金その他の自己収入の増加に関する目標を達成するための措置	361
6-3-2	経費の抑制に関する目標を達成するための措置	361
6-3-3	資産の運用管理の改善に関する目標を達成するための措置	361
6-4	自己点検・評価及び当該状況に係る情報の提供に関する目標を達成するための措置	362
6-4-1	評価の充実に係る目標を達成するための措置	362
6-4-2	広報及び情報公開等の推進に関する目標を達成するための措置	362
6-5	その他業務運営に関する重要目標を達成するためにとるべき措置	364
6-5-1	施設設備の整備等に関する目標を達成するための措置	364
6-5-2	安全管理に関する目標を達成するための措置	364
7	資料	371
7-1	評議員（1976～1981）.....	371
7-2	評議員（1981～2004）.....	372
7-3	外国人評議員（1976～2004）.....	376
7-4	運営に関する委員会委員（1975～1981）.....	377
7-5	運営協議員（1981～2004）.....	378
7-6	自然科学研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規則	382
7-7	自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則	383
7-8	自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則	386

1 . 序 言

新しい自然科学研究機構がスタートして3年目に入りました。また、分子科学研究所は平成17年5月に創設30周年を祝いました。国、岡崎市、分子科学コミュニティー、その他の多方面に亘る多くの方々のご支援に対して、改めて、お礼を申し上げたいと思います。

今世紀には全包括的世界観に基づく新しい科学の誕生が期待されています。国の財政状況が極めて厳しい中においても新しい科学の流れを発信できる様に、物質科学から生命科学に跨る広い範囲の基礎科学の推進に独自の哲学を持って臥薪嘗胆、研鑽を積まねばなりません。「真善美」の意識を常に持ち、更にはその上にあると言う「妙」の意識をも追究する努力が必要です。

平成18年度からは、アジア・コア・プログラムが認められ、長年の希望でありましたアジア諸国との共同研究および若手の育成に力を入れていくことが出来ます。既存の分子研独自の分子科学国際共同研究事業との連携を取りながら、国際共同研究の推進、アジアにおける基礎科学の興隆に貢献したいと思っています。

本分子研リポートは、研究所の現状と評価、そして将来計画等の議論をまとめ毎年発行しているものです。研究所の全貌が把握できるように企画されています。平成17年度は、電子構造研究系、極端紫外光科学研究系、及び岡崎統合バイオサイエンスセンターの評価が行われました。評価に当たられた諸先生方には、この場を借りまして改めて、お礼を申し上げます。

世界における分子科学の中核として更なる発展を期するために、各方面の方々のなお一層のご支援を心よりお願い申し上げます。

平成18年4月
自然科学研究機構
分子科学研究所 所長
中村宏樹

2．分子科学研究所の概要

2-1 研究所の目的

分子科学研究所は、物質の基礎である分子の構造とその機能に関する実験的研究並びに理論的研究を行うとともに、化学と物理学の境界から生命科学にまでわた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・自然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、その正しい利用をはかるのみでなく、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。生体分子をも含む広範な分子の形成と変化に関する原理、分子と光の相互作用、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。

2-2 沿革

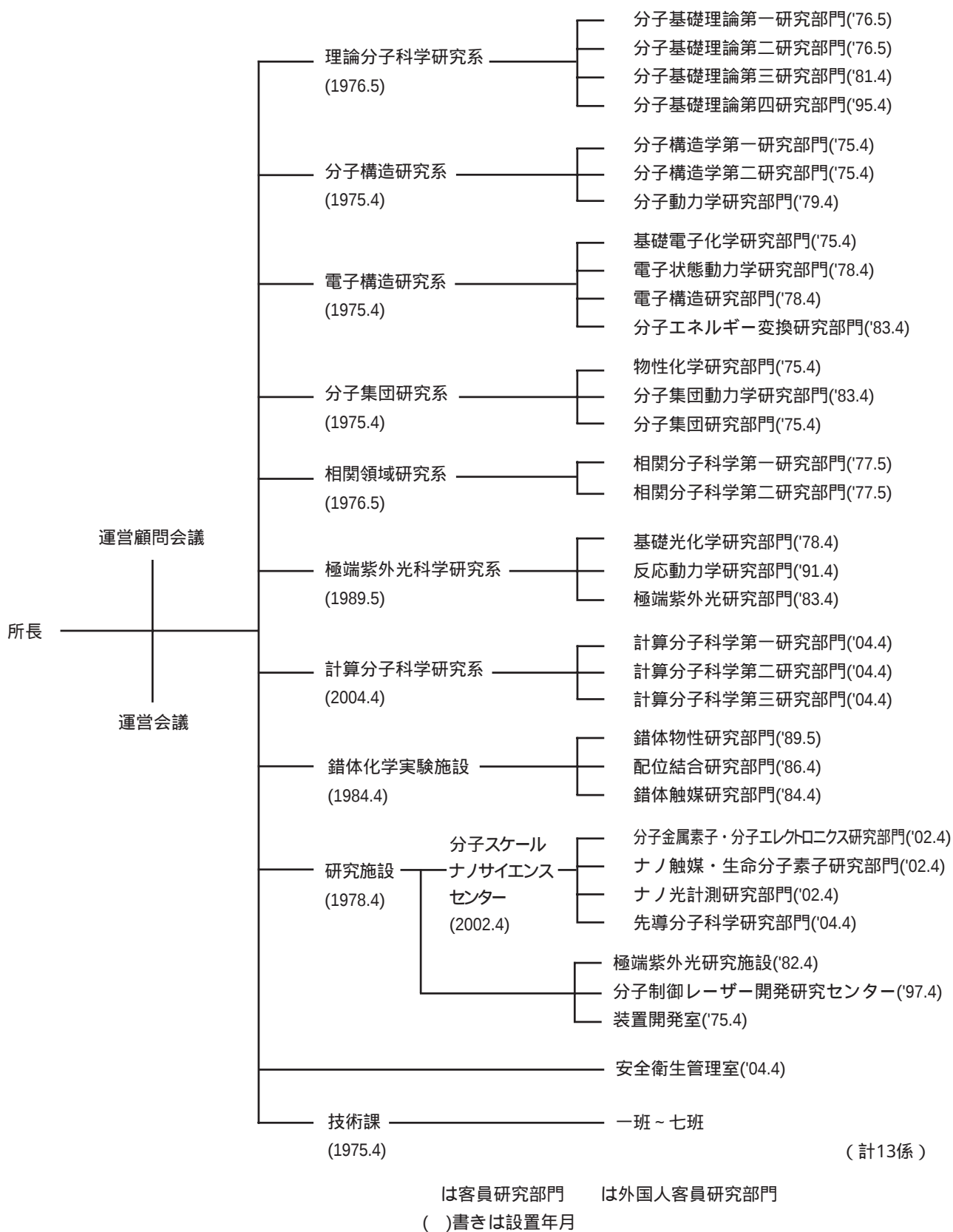
1960年頃から分子科学研究者の間に研究所設立の要望が高まり、社団法人日本化学会の化学研究将来計画委員会においてその検討が進められた。

- 1965. 12.13 日本学術会議は、「分子科学研究所」(仮称)の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
- 1973. 10.31 学術審議会は、「分子科学研究所」(仮称)を緊急に設立することが適当である旨、文部大臣に報告した。
- 1974. 4.11 文部大臣裁定により、東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室(室長:井口洋夫前東京大学物性研究所教授,定員3名)及び分子科学研究所創設準備会議(座長:山下次郎前東京大学物性研究所長,学識経験者35人により構成)が設置された。
- 1974. 7. 6 分子科学研究所創設準備会議において、研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
- 1975. 4.22 国立学校設置法の一部を改正する法律(昭50年法律第27号)により「分子科学研究所」が創設され、初代所長に赤松秀雄前横浜国立大学工学部長が任命された。同時に、分子構造研究系(分子構造学第一研究部門,同第二研究部門),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)が設置された。
- 1975. 12.22 外国人評議員の設置が制度化された。
- 1976. 5.10 理論研究系(分子基礎理論第一研究部門,同第二研究部門),相關領域研究系(相關分子科学研究部門),化学試料室が設置された。
- 1976. 11.30 実験棟第1期工事(5,115 m²)が竣工した。
- 1977. 4.18 相關領域研究系相關分子科学研究部門が廃止され,相關領域研究系(相關分子科学第一研究部門,同第二研究部門),電子計算機センター,極低温センターが設置された。
- 1977. 4. 大学院特別研究学生の受入れが始まる。
- 1977. 5. 2 国立学校設置法の一部を改正する法律により生物科学総合研究機構(基礎生物学研究所,生理学研究所)が設置されたことに伴い,管理部を改組して分子科学研究所管理局とし,生物科学総合研究機構の事務を併せ処理することとなった。管理局に庶務課,人事課,主計課,経理課,建築課,設備課,技術課が置かれた。
- 1978. 3. 7 分子科学研究所研究棟(2,752 m²)が竣工した。
- 1978. 3.11 装置開発棟(1,260 m²),機器センター棟(1,053 m²),化学試料棟(1,063 m²)が竣工した。
- 1978. 4. 1 電子構造研究系に電子状態動力学研究部門,電子構造研究部門が,分子集団研究系に基礎光化学研究部門が設置された。
- 1979. 3. 1 電子計算機センター棟(1,429 m²)が竣工した。
- 1979. 3.24 実験棟第2期工事(3,742 m²),極低温センター棟(1,444 m²)が竣工した。
- 1979. 4. 1 分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され,管理局が総務部(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),技術課に改組された。
- 1979. 11. 8 分子科学研究所創設披露式が挙行された。

1981. 4. 1 第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4.14 国立学校設置法の一部を改正する法律により，分子科学研究所と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，岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され，管理局が岡崎国立共同研究機構管理局となり，技術課が研究所所属となった。
1982. 4. 1 研究施設として極端紫外光実験施設（UVSOR）が設置された。
1982. 6.30 極端紫外光実験棟第1期工事（1,281 m²）が竣工した。
1983. 3.30 極端紫外光実験棟第2期工事（1,463 m²）が竣工した。
1983. 4. 1 電子構造研究系に分子エネルギー変換研究部門が，分子集団研究系に分子集団動力学研究部門，極端紫外光研究部門が設置された。
1983. 11.10 極端紫外光実験施設ストレージリング装置に電子貯蔵が成功した。
1984. 2.28 極端紫外光実験施設の披露が行われた。
1984. 4.11 研究施設として，錯体化学実験施設（錯体合成研究部門，錯体触媒研究部門）が設置された。流動研究部門制度が発足し錯体化学実験施設に錯体合成研究部門が設置された。
1985. 5.10 分子科学研究所創設10周年記念式典が挙行された。
1987. 4. 1 第三代研究所長に井口洋夫分子科学研究所教授が任命された。
1989. 2.28 分子科学研究所南実験棟（3,935 m²）が竣工した。
1989. 5.28 分子集団研究系に界面分子科学研究部門が，関連領域研究系に有機構造活性研究部門（共に流動研究部門）が設置された。
1991. 3.27 極端紫外光実験棟（増築）（283 m²）が竣工した。
1991. 4.11 極端紫外光科学研究系（反応動力学研究部門）が設置された。基礎光科学，界面分子科学，極端紫外光の各研究部門は分子集団研究系から極端紫外光科学研究系へ振替された。
1993. 4. 1 第四代研究所長に伊藤光男東北大学教授が任命された。
1994. 1.31 電子計算機センター棟（増築）（951 m²）が竣工した。
1995. 3.31 関連領域研究系有機構造活性研究部門（流動）が廃止された。
1995. 4. 1 理論研究系に分子基礎理論第四研究部門が設置された。
1995. 5.12 分子科学研究所創設20周年記念式典が挙行された。
1996. 5.11 関連領域研究系に分子クラスター研究部門（流動）が設置された。
1997. 4. 1 機器センター，極低温センター，化学試料室が廃止され，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が設置された。
1999. 4. 1 第五代研究所長に茅幸二慶應義塾大学教授が任命された。
2000. 4. 1 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が廃止され，電子計算機室が設置された。共通研究施設として，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が設置された。
2002. 2.28 山手2号館（統合バイオサイエンスセンター，計算科学研究センター）（5,149 m²）が竣工した。
2002. 3.11 山手1号館A（動物実験センター，アイソトープ実験センター）（4,674 m²）が竣工した。
2002. 4. 1 関連領域研究系分子クラスター研究部門（流動），極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門（流動），分子物質開発研究センターが廃止され，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（流動），分子クラスター研究部門（流動））が設置された。
2003. 8.20 山手4号館（分子科学研究所分子スケールナノサイエンスセンター）（3,813 m²）が竣工した。
2004. 3. 1 山手5号館（NMR）（664 m²）が竣工した。
2004. 3. 8 山手3号館（統合バイオサイエンスセンター）（10,757 m²）が竣工した。
2004. 4. 1 国立大学法人法により，国立天文台，核融合科学研究所，基礎生物学研究所，生理学研究所，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が創設された。理論研究系が理論分子科学研究系に改組された。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）が設置された。分子スケールナノサイエンスセンターに，先導分子科学研究部門が設置され，界面分子科学研究部門，分子クラスター研究部門が廃止された。極端紫外光実験施設が，極端紫外光研究施設に改組された。安全衛生管理室が設置された。岡崎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，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）に改組された。第六代研究所長に中村宏樹分子科学研究所教授が任命された。
2005. 5.20 分子科学研究所創設30周年記念式典が挙行された。

大学共同利用機関法人自然科学研究機構





2-4 研究所の運営

分子科学研究所は、全国の大学共同利用機関としての機能をもつと同時に独自の研究・教育のシステムを有している。この項では、これらに関する研究所運営の組織とそれぞれの機能について説明する。

2-4-1 運営顧問会議

法人組織となって、法律上は分子科学研究所の属する自然科学研究機構にだけ研究と教育に関する（教育研究）評議会（機構外委員，機構内委員，約半数ずつ）が置かれるようになった。また，機構の経営に関する（経営）協議会（機構外委員，機構内委員，約半数ずつ）も機構に置かれるようになった。その影響で，法人化前に法律上，各研究所に置かれていた評議員会（所外委員のみから構成）や運営協議員会（所外委員，所内委員，約半数ずつ）は消滅した。各研究所では内部組織について法律上の規定はなく，独自の判断での設置が可能であるが，それらの内部組織はすべて所長の諮問組織となる。法人化前，研究所に置かれていた評議員会の主な機能は， 所長選考， 事業計画その他の管理運営に関する重要事項の検討，であったが，法人化後はこれらは基本的には機構長・役員会が評議会・協議会に諮る事項になった。

自然科学研究機構では創設準備の段階から各研究所の自律性を保つことを基本原則として，機構憲章を作成した。その精神に基づき，上記 の機能は法律上の組織だけに任せるのではなく，各研究所別に適切な内部組織を置くことになった。ただし，機能 については，所長の諮問組織で審議するのは不適当なため，形式的には機構長の諮問組織的な位置付けで，その都度，各研究所別に大学共同利用機関長選考委員会を設置することにした。その委員には評議会・協議会の各機構外委員を含めることになっている。一方，機能 については必要に応じて各研究所で適当な内部組織（所長の諮問組織）を構成することになった。その結果，分子科学研究所では運営顧問制度を発足させた。現在，機構の評議会・協議会から分子科学研究所に関わりを持つ機構外委員各 2 名に運営顧問をお願いしている。また，外国人評議員に代わる外国人運営顧問も引き続き 2 名をお願いしている。

運営顧問（任期 2004.4-2006.3）

加 藤 伸 一	豊田中央研究所代表取締役
小 間 篤	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所長
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（任期 2005.4-2007.3）

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

2-4-2 運営会議

運営顧問の項で説明したように，法人化後は各研究所に置かれていた運営協議員会は消滅した。そのため，各研究所に運営会議なるものを内部組織（所長の諮問組織）として設置することになった。委員構成は運営協議員と同じで，所外委員10名，所内委員11名の合計21名の組織である。学会等連絡会議で所外委員候補を決めるプロセスも全く同じである。分子科学研究所では教授会議も堅持しており，運営会議は教授会議と連携をとりながら法人化前と同じ方式に従って所長候補，研究者人事，共同研究について審議，検討することになっている。つまり，運営会議側では以前と同様，人事選考部会（運営会議委員の中で所外 5 名，所内 5 名から成る）で人事について審議し，共同研究専門委

員会で共同研究について審議する。所長候補検討も同様に運営会議で行われる予定である（大学共同利用機関長選考委員会から依頼を受けて）。

運営会議委員（任期 2004.4-2006.3）

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

2-4-3 人事選考部会

人事選考部会は運営会議のもとに設置され、研究教育職員候補者の選考に関する事項の調査審議を行う。委員は運営会議の所内委員5名と所外委員5名の計10名によって構成され、委員の任期は2年である。平成12年度より、人事が分子科学の周辺に広く及びかつ深い専門性を伴いつつある現状に対応し、人事選考部会は必要に応じて構成員以外の者を専門委員として加えることが出来るようになった。また、岡崎統合バイオサイエンスセンター（分子研兼務）教授・助教授の人事選考については、同センターの特殊性に鑑み、独自の専門委員会制度を取り入れることとした。教授、助教授及び助手候補者の選考は全て人事選考部会において行われ、1名の最終候補者が部会長より所長に答申される。所長はオブザーバーとして会議に参加する。なお、助手候補者の選考においては、人事選考部会のもとに専門委員を含む5名の助手選考小委員会を設置する。同小委員会での選考の結果、その主査は最終候補者を部会長に答申し、部会長は人事選考部会に報告し審議を行う。

所長は、部会長から受けた答申結果を教授会議（後述）に報告し、了解を得る。

分子科学研究所における研究教育職員候補者は、“短期任用助手”の場合を除いて全て公募による応募者の中から選考される。教授又は助教授を任用する場合には、まず教授・助教授懇談会において当該研究分野及び募集方針の検討を行い、それに基づいて作成された公募文案を教授会議、人事選考部会で審議した後公募に付する。研究系でのいわゆる内部昇任は慣例として認められていない。ただし、技術職員又はIMSフェローから助手への任用、あるいは総研大生又はその卒業生から助手への任用は妨げていない。平成11年1月から平成16年3月までに採用された研究系の助手（平成15年4月以降研究系だけではなく、施設に採用された助手にも適用された）には6年の任期が規定されてお

り,任期を越えて在職する場合は1年ごとに所長に申請してその再任許可の手続きを得なければならない。ただし,平成16年4月以降助手の任期制を見直し,分子研本来の制度に戻した。

人事選考部会委員(2005年度)

阿波賀 邦 夫 (名大教授)	小 杉 信 博 (分子研教授)
太 田 信 廣 (北大教授)	田 中 晃 二 (分子研教授)
榊 茂 好 (京大教授)	永 瀬 茂 (分子研教授)
田 中 健一郎 (広大教授)	松 本 吉 泰 (分子研教授)
寺 嶋 正 秀 (京大教授)	薬 師 久 彌 (分子研教授)

2-4-4 運営会議共同研究専門委員会

全国の大学等との共同利用研究は分子研の共同利用機関としての最も重要な機能の一つである。本委員会では,共同利用研究計画(課題研究,協力研究,招へい協力研究,研究会等)に関する事項等の調査を行う。半年毎(前,後期)に,申請された共同利用研究に対して,その採択及び予算について審議し,運営会議に提案する。また,UVSOR施設(極端紫外光研究施設)に関する共同利用研究については,別に専門委員会を設け,各研究者からの申請について審議し,運営委員会に提案する。

運営会議共同研究専門委員会の委員は,運営会議委員6名以内と運営会議の議を経て所長が委嘱する運営会議委員以外の者6名以内によって構成される。

運営会議共同研究専門委員会委員(2005年度)

伊 藤 翼 (東北大名誉教授)	西 信 之 (分子研教授)
阿久津 秀 雄 (大阪大教授)	中 村 敏 和 (分子研助教授)
富 宅 喜代一 (神戸大教授)	見 附 孝一郎 (分子研助教授)
宇理須 恆 雄 (分子研教授)	米 満 賢 治 (分子研助教授)
小 林 速 男 (分子研教授)	高 橋 正 彦 (分子研助教授)
田 中 晃 二 (分子研教授)	

2-4-5 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との連絡,共同研究専門委員各候補者等の推薦等に関するることについて,検討し,意見を述べる。

学会等連絡会議構成員(2005年度)

伊 藤 翼 (東北大名誉教授)	戸 部 義 人 (大阪大院教授)
上 村 大 輔 (名大院教授)	中 嶋 敦 (慶大教授)
榎 敏 明 (東工大院教授)	山 下 晃 一 (東大院教授)
太 田 信 廣 (北大教授)	山 内 薫 (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 (高輝度センター審議役)	小 林 速 男 (分子研教授)
鈴 木 俊 法 (理化研主任研究員)	西 信 之 (分子研教授)
竜 田 邦 明 (早大院研究科長)	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)	

2-4-6 教授会議

分子科学研究所創設準備会議山下次郎座長の申し送り事項に基づいて、分子研に教授会議を置くことが定められている。同会議は分子研の専任・客員の教授・助教授で構成され、研究及び運営に関する事項について調査審議し、所長を補佐する。所長候補者の選出にあたっては、教授会議は独立に2名の候補者を選出し、運営会議に提案しその審議に委ねる。また、研究教育職員の任用に際しては人事選考部会からの報告結果を審議し、教授会議としての可否の投票を行う。

2-4-7 主幹・施設長会議

主幹・施設長会議は、所長の諮問に応じて研究所の運営等の諸事項について審議し、所長を補佐する。そこでの審議事項の大半は教授会議に提案され、審議の上、決定する。主幹・施設長会議の構成員は各研究系の主幹及び研究施設の施設長で、所長が招集し、主催する。

2-4-8 大学院委員会

総合研究大学院大学の運営に関する諸事項、学生に関する諸事項等の調査審議を行い、その結果を大学院専攻委員会に提案し、その審議に委ねる。大学院委員会は各系及び錯体化学実験施設からの各1名の委員によって構成される。

2-4-9 特別共同利用研究員受入審査委員会

他大学大学院からの学生（従来大学院受託学生と呼ばれていたもの）の受入れ及び修了認定等に関する諸事項の調査、審議を行う。同委員会は、各系及び錯体化学実験施設からの各2名の委員によって構成される。

2-4-10 各種委員会等

上記以外に次表に示すような“各種の委員会”があり，研究所の諸活動，運営等に関するそれぞれの専門的事項が審議される。詳細は省略する。

(1) 分子科学研究所の各種委員会

会議の名称	設置の目的・審議事項	委員構成	設置根拠等	実施日
点検評価委員会	研究所の設置目的及び社会的使命を達成するため自ら点検及び評価を行い研究所の活性化を図る。	所長，研究総主幹，研究主幹，研究施設の長，本部研究連携室の研究所所属の研究教育職員，技術課長，他	点検評価規則	研究系ごとに外部評価を実施
将来計画委員会	研究所の将来計画について検討する。	所長，研究総主幹，教授数名，助教授数名	委員会規則	なし
放射線安全委員会	放射線障害の防止に関する重要な事項，改善措置の勧告。	放射線取扱主任者，研究所の職員 6 技術課長，他	放射線障害予防規則	なし
分子制御レーザー開発研究センター運営委員会	分子制御レーザー開発研究センターの管理運営に関する重要事項。共同研究の採択に関する調査。	センター長 センターの助教授 教授又は助教授 3 職員以外の研究者若干	センター規則 委員会規則	2006.1.25
分子スケールナノサイエンスセンター運営委員会	分子スケールナノサイエンスセンターの管理運営に関する重要事項。共同研究の採択に関する調査。	センター長 センターの教授及び助教授 センター以外の分子研の教授又は助教授若干 職員以外の研究者若干		2005.9.13
極端紫外光研究施設運営委員会	研究施設の運営に関する重要事項。共同研究の採択に関する調査。	研究施設長 研究施設の教授及び助教授 教授又は助教授 4 職員以外の研究者 7	研究施設規則 委員会規則	2005.8.4 2006.2.10
錯体化学実験施設運営委員会	実験施設の運営に関する重要事項。	実験施設長 施設の教授及び助教授 施設以外の教授又は助教授 2 職員以外の研究者 4	実験施設規則 委員会規則	なし
装置開発室運営委員会	装置開発室の運営に関する重要事項。	(原則) 各研究室から各 1 当該施設から若干 他の施設から若干		2006.2.9
分子研安全衛生委員会	安全衛生管理に関する事項。	(原則) 各研究室から各 1 施設から必要数	安全衛生委 管理規則	2006.3.16
図書委員会	購入図書の選定。他			なし
広報委員会	Annual Review，分子研レターズ等の研究所出版物作成に関すること。研究所公式ホームページの管理運営。	関係研究者のうちから 7		2005.11.1 2006.3.7
分子研ネットワーク委員会	情報ネットワークの維持，管理運営。	(原則) 各研究系から各 1 施設から必要数		なし
情報ネットワークセキュリティ委員会	分子研情報ネットワークセキュリティに関する必要な事項。	各研究系教授各 1 各研究施設教授各 1 技術課長 分子研広報委員長 分子研ネットワーク委員長		なし

知的財産委員会	研究所における知的財産の創出，取得，管理及び活用を戦略的に実施するとともに，知的財産の一元的な管理及び活用を行うことにより，研究所における教育研究活動の活性化を図り，先端科学分野の進展に資することを目的とする。	研究所長が指名した研究教育職員 1，研究系及び研究施設の研究教育職員若干名，岡崎共通研究施設の研究教育職員若干名，技術課長，財務課長，国際研究協力課長，知的財産及び産学連携マネージメントできる者で，研究所長が委嘱した者若干名，その他研究所長が必要と認めた者	知的財産委員会規則	2005.4.11, 5.13, 6.1, 6.27, 7.13, 10.31, 11.25, 2006.1.18, 3.10
---------	---	--	-----------	---

設置根拠の欄 分子科学研究所で定めた規則，略式で記載。記載なきは規定文なし。

表以外に，分子研コロキウム係，自衛消防隊組織がある。

(2) 岡崎 3 機関の各種委員会等

会議の名称	設置の目的・審議事項	分子研からの委員	設置根拠等	実施日
岡崎 3 機関研究所長会議	研究所相互に関連のある管理運営上の重要事項について審議するとともに円滑な協力関係を図る。	所長	所長会議運営規則	2005.4.19, 5.24, 6.21, 7.19, 9.20, 10.18, 11.15, 12.20, 2006.1.17, 2.21, 3.28
岡崎 3 機関職員福利厚生委員会	レクリエーションの計画及び実施に関すること，職員会館の運営に関すること。他	研究教育職員 1 技術職員 1	委員会規則	2005.7.22
岡崎情報ネットワーク管理運営委員会	岡崎情報ネットワークの管理運営に関する必要事項。	副所長又は研究総主幹，教授 1 計算科学研究センター長 責任担当所長 岡崎情報ネットワーク管理室次長（教授）	委員会規則	2005.3.2 2005.12.6 2006.3.22
岡崎情報ネットワーク管理運営専門委員会	岡崎情報ネットワークの日常の管理。将来における岡崎情報ネットワークの整備，運用等について調査研究。	次長（技術担当） 教授 1 技術職員 1	岡崎情報ネットワーク管理運営委員会規則第 7 条	2005.4.27, 6.1, 7.20, 9.21, 11.2, 2006.1.11, 3.8
岡崎 3 機関スペース・コラボレーション・システム事業委員会	事業計画，事業の運営方法に関すること。他	所長，教授 1 岡崎情報ネットワーク管理室次長	委員会規則	なし
岡崎 3 機関スペース・コラボレーション・システム事業実施専門委員会	事業計画に関する事項等について調査。	事業委員会委員，研究教育職員 1 岡崎情報ネットワーク管理室員	スペース・コラボレーション・システム事業委員会規則第 6 条 委員会要項	なし
岡崎共同利用研究者宿泊施設委員会	宿泊施設（ロッジ）の運営方針・運営費に関すること。	担当責任所長 教授 1	委員会規則	なし
岡崎コンファレンスセンター運営委員会	センターの管理運営に関し必要な事項。	担当責任所長 教授 1	センター規則第 5 条	なし
岡崎情報図書館運営委員会	情報図書館の運営に関する重要事項。	教授 1 助教授 1	情報図書館規則第 4 条 委員会規則	2006.3.22

岡崎 3 機関安全衛生委員会	岡崎 3 機関の安全衛生に関し必要な事項について。		岡崎 3 機関安全衛生委員会規則	2005.4.19, 5.24, 6.21, 7.14, 8.16, 9.20, 10.18, 11.15, 12.20, 2006.1.17, 2.21, 3.28
防火防災対策委員会	防火防災管理に関する内部規定の制定改廃, 防火防災施設及び設備の改善強化。防火防災教育。訓練の実施計画, 防火思想の普及及び高揚。他	所長 防火防災管理者(技術課長) 高圧ガス保安員統括者	委員会規則	なし
動物実験委員会	動物実験に関する指導及び監督。実験計画の審査。他	研究教育職員 2 技術課長	動物実験に関する指針 委員会規則	2006.1.18 2006.3.23
岡崎統合バイオサイエンスセンター運営委員会	センターの管理運営に関する重要事項を審議するため。	教授又は助教授 2	センター規則	なし
計算科学研究センター運営委員会	センターの管理運営に関する重要事項を審議するため。	教授又は助教授 2	センター規則	2005.8.19 2006.3.8
動物実験センター運営委員会	センターの管理運営に関する重要事項を審議するため。	教授又は助教授 2	センター規則	2005.8.3 2005.11.21
アイソトープ実験センター運営委員会	センターの管理運営に関する重要事項を審議するため。	教授又は助教授 2 技術課長	センター規則	2005.6.10
セクシュアル・ハラスメント防止委員会	セクシュアル・ハラスメントの防止並びにその苦情の申出及び相談に対応するため。 セクシュアル・ハラスメントの防止等適切な実施を期すため。	所長が指名する者 2	委員会等に関する規則	2005.9.26
文部科学省共済組合自然科学研究機構支部岡崎 3 機関食堂運営委員会	営業種目, 営業時間。他	教授 1 技術課長	委員会規則	なし
岡崎南ロータリークラブとの交流委員会	岡崎南ロータリークラブが行う交流事業等に関する協議及び事業への協力	研究教育職員 1		なし
アイソトープ実験センター明大寺地区実験施設放射線安全委員会	明大寺地区実験施設における放射線障害の防止に関し必要な事項を企画審議する。	研究教育職員 3 技術課長	センター明大寺地区実験施設放射線障害予防規則	2005.10.3
アイソトープ実験センター山手地区実験施設放射線安全委員会	山手地区実験施設における放射線障害の防止に関し必要な事項を企画審議する。	研究教育職員 3 技術課長	センター山手地区実験施設放射線障害予防規則	2005.10.3
施設整備委員会	機構の山手地区及び明大寺地区の施設整備に関する事項の立案を行い, 所長会議に報告する。	教授 2	所長会議申合せ	なし
自然科学研究機構岡崎情報公開委員会	「独立行政法人等の保有する情報の公開に関する法律」を円滑に実施するため。	所長又は研究総主幹 教授 1	委員会規則	
生命倫理審査委員会	機構におけるヒトゲノム・遺伝子解析研究を, 倫理的配慮のもとに適正に推進するため。	教授又は助教授 2	委員会規則	2005.10.28

設置根拠の欄 岡崎 3 機関が定めた規則, 略式で記載。記載なきは規定文なし。

2-5 構成員

2-5-1 現在の構成員

中 村 宏 樹	所長
小 杉 信 博	研究総主幹(併)
長 倉 三 郎	特別顧問, 名誉教授
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
近 藤 保	研究顧問
玉 尾 皓 平	研究顧問
廣 田 襄	研究顧問
岩 田 末 廣	名誉教授
岩 村 秀	名誉教授
木 村 克 美	名誉教授
齋 藤 修 二	名誉教授
花 崎 一 郎	名誉教授
廣 田 榮 治	名誉教授
丸 山 有 成	名誉教授
諸 熊 奎 治	名誉教授
吉 原 經太郎	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
河東田 道 夫	専門研究職員
石 田 豊 和	専門研究職員
SLANIA, Zdenek	専門研究職員
高 木 望	専門研究職員
梶 田 理 恵	専門研究職員
WANG, Baolin	専門研究職員
奥 村 久 士	助 手

分子基礎理論第二研究部門

中 村 宏 樹	教 授(併)
KONDORSKIY, Alexey	専門研究職員
田 村 宏 之	研究員
近 角 真 平	研究員
MIL'NIKOV, Gennady V.	研究員
信 定 克 幸	助教授
安 池 智 一	助 手

分子基礎理論第三研究部門

平 田 文 男	教 授
鄭 誠 虎	助 手
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
KOBRYN, Oleksandr	研究員
米 満 賢 治	助教授
山 下 靖 文	助 手
前 島 展 也	特別訪問研究員
宮 下 哲	特別訪問研究員
LEE, Jin Yong	外国人研究職員 '05.6.23 ~ '05.8.22
	(全南大助教授) '05.12.24 ~ '06.2.23

分子基礎理論第四研究部門（客員研究部門）

淵 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
堀 本 訓 子	研究員

分子構造学第二研究部門（客員研究部門）

寺 嶋 正 秀	教 授（京大院理）
石 森 浩一郎	教 授（北大院理）

分子動力学研究部門

北 川 禎 三	教 授(兼) 岡崎統合バイオサイエンスセンター)
横 山 利 彦	教 授
中 川 剛 志	助 手
丸 山 耕 一	研究員
小 澤 岳 昌	助教授
竹 内 雅 宜	助 手

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
十 代 健	助 手
西 條 純 一	助 手
岡 部 智 絵	研究員
渡 辺 三千雄	研究員

電子状態動力学研究部門

大 森 賢 治	教 授
香 月 浩 之	助 手
穂 坂 綱 一	研究員
大 島 康 裕	教 授
長谷川 宗 良	助 手

電子構造研究部門（客員研究部門）

市 村 禎次郎	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） '05.1.20 ~ '05.7.19
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） '05.2.1 ~ '06.1.31
PULAY, Peter	外国人研究職員（アーカンソー大学 教授） '05.5.16 ~ '06.8.15

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
山 本 薫	助 手
中 野 千賀子	特別協力研究員
中 村 敏 和	助教授
古 川 貢	助 手
原 俊 文	研究員
松 岡 秀 人	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
CUI, Heng-Bo	共同研究員
SUN, Hao-Ling	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）

関連領域研究系 研究主幹(併) 薬 師 久 彌

関連分子科学第一研究部門

青 野 重 利	教 授(兼) 岡崎統合バイオサイエンスセンター)
吉 岡 資 郎	助 手 (岡崎統合バイオサイエンスセンター)
江 東 林	助教授

関連分子科学第二研究部門（客員研究部門）

齋 藤 正 男	教 授（東北大多元研）
中 村 一 隆	助教授（東工大応用セラミック研）

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
初 井 宇 記	助 手
樋 山 みやび	助 手
BRADEANU, Ioana Lavinia	研究員
菱 川 明 栄	助教授
高 橋 栄 治	助 手
松 田 晃 孝	研究員

反応動力学研究部門

宇理須 恆 雄	教 授
手 老 龍 吾	助 手
鈴 木 晃	共同研究員
伊 藤 雅 幸	共同研究員
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） '05.6.1 ~ '05.8.31
AKA, Gerard, Philippe	外国人研究職員（パリ国立高等化学学院 教授） '05.3.1 ~ '05.5.31
荒 木 幸 一	外国人研究職員（サンパウロ大学 教授） '05.11.1 ~ '06.1.31
LONG, La-Sheng	外国人研究職員（廈門大学 助教授） '05.5.1 ~ '06.4.30

計算分子科学研究系 研究主幹(併)

計算分子科学第一研究部門

岡 崎 進	教 授(兼) 計算科学研究センター)
三 浦 伸 一	助 手(計算科学研究センター)
森 田 明 弘	助教授(兼) 計算科学研究センター)
石 田 干 城	助 手(計算科学研究センター)

計算分子科学第二研究部門

齋 藤 真 司	教 授(計算科学研究センター)
---------	-----------------

計算分子科学第三研究部門（客員研究部門）

研究施設

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
和 田 亨	助 手
宮 里 裕 二	研究員
岡 村 玲	共同研究員
丹 内 秀 典	共同研究員
日 野 貴 美	共同研究員
筒 井 香奈子	共同研究員
川 口 博 之	助教授
松 尾 司	助 手
渡 邊 孝 仁	研究員
田 熊 元 紀	研究員
藤 田 光 晴	研究員
赤 木 史 生	研究員

配位結合研究部門（客員研究部門）

石 井 洋 一	教 授(中央大理工)
林 高 史	教 授(阪大院工)

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 施設長(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
田 中 啓 文	助 手
HUANG, Wei	研究員
佐 藤 弘 一	共同研究員
多 田 博 一	教授(委嘱)(阪大院基礎工)
鈴 木 敏 泰	助教授
阪 元 洋 一	助 手
田 中 彰 治	助 手

ナノ触媒・生命分子素子研究部門

魚 住 泰 広	教 授
山 田 陽 一	助 手
木 村 力	共同研究員
竹 中 和 浩	共同研究員
前 田 泰 成	共同研究員
大 高 敦	共同研究員
鈴 鹿 俊 雅	共同研究員
永 田 央	助教授
長 澤 賢 幸	助 手
櫻 井 英 博	助教授
東 林 修 平	助 手
神 谷 育 代	研究員
藤 井 浩	助教授(兼)(岡崎統合バイオサイエンスセンター)
倉 橋 拓 也	助 手(岡崎統合バイオサイエンスセンター)

ナノ光計測研究部門

松 本 吉 泰	教 授
渡 邊 一 也	助 手
松 本 健 俊	助 手
長 尾 昌 志	研究員
佃 達 哉	助教授
根 岸 雄 一	助 手
中 尾 聡	専門研究職員
角 山 寛 規	研究員
NICKUT, Patricia	特別訪問研究員

先導分子科学研究部門

加 藤 晃 一	教 授(名市大薬)
笹 川 拓 明	助 手
杉 原 隆 広	特別訪問研究員

極端紫外光研究施設 施設長(併) 小 杉 信 博

加 藤 政 博	教 授
保 坂 将 人	助 手
持 箸 晃	助 手
木 村 真 一	助教授
伊 藤 孝 寛	助 手
櫻 井 陽 子	研究員

隅 井 良 平	特別訪問研究員
繁 政 英 治	助教授
彦 坂 泰 正	助 手
金 安 達 夫	研究員
原 徹	助教授（理研）

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
村 上 英 利	研究員
ESTACIO, Elmer	研究員
QUEMA, Alex, Villareal	学振外国人特別研究員 '04.4.1 ~ '06.3.31

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	研究員
曾 根 明 弘	共同研究員
酒 井 博	共同研究員
バンダリ ラケシュ	共同研究員
金 原 賢 治	共同研究員
阿 部 亜 紀	共同研究員
堀 米 秀 嘉	共同研究員
高御堂 哲 司	共同研究員
玉 置 善 紀	共同研究員
鈴 土 剛	共同研究員
齋 川 次 郎	特別訪問研究員

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

戦略的方法論研究領域

青 野 重 利	教 授
吉 岡 資 郎	助 手
小 林 克 彰	研究員
小 澤 一 道	研究員
藤 井 浩	助教授
倉 橋 拓 也	助 手
鬨 目 理 人	研究員

生命環境研究領域

北 川 禎 三	教 授
久 保 稔	研究員
長 野 恭 朋	研究員
GU, Yuzong	学振外国人特別研究員 '04.7.21 ~ '06.7.20
EL-MASHTOLY, S. F. -M.	学振外国人特別研究員 '04.10.1 ~ '06.9.30
KOUTSOUPAKIS, Constantinos	学振外国人特別研究員 '05.10.23 ~ '07.10.22
當 舎 武 彦	学振特別研究員
平 松 弘 嗣	学振特別研究員
高 木 淳 一	教 授 (阪大蛋白研)

計算科学研究センター 施設長(併) 永 瀬 茂

岡 崎 進	教 授
齋 藤 真 司	教 授(兼)
森 田 明 弘	助教授
大 野 人 侍	助 手
三 浦 伸 一	助 手(兼)
石 田 干 城	助 手(兼)
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
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
伊 藤 暁	専門研究職員
山 田 清 志	専門研究職員
石 山 達 也	専門研究職員
李 洪 珍	研究員

技術課 課 長 加 藤 清 則

一班 (機器開発技術班) 班 長 吉 田 久 史

機器開発技術一係

係 長	水 谷 伸 雄
技術職員	矢 野 隆 行

機器開発技術二係

係 長	青 山 正 樹
技術職員	近 藤 聖 彦

二班 (電子回路・ガラス機器開発技術班) 班 長 鈴 井 光 一

電子機器開発技術係

技術職員	内 山 功 一
技術職員	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
技術職員	近 藤 直 範

極端紫外光技術二係

係 長	山 崎 潤一郎
技術職員	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

技術職員	上 田 正
技術職員	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

技術職員	澤 昌 孝
------	-------

計算科学技術二係

技術職員	内 藤 茂 樹
技術職員	手 島 史 綱
技術職員	南 野 智

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
技術職員	藤 原 基 靖

ナノサイエンス技術二係

技術職員	牧 田 誠 二
技術職員	中 野 路 子

七班（研究・広報技術班）

研究・広報技術係

技術職員	石 村 和 也
技術職員	渡 邊 廣 憲
技術職員	賣 市 幹 大
技術職員	岡 野 芳 則
技術職員	大 石 修
技術職員	原 田 美 幸

* 整理日付は2005年12月1日現在。ただし，外国人研究者で2005年度中に3か月を超えて滞在した者及び滞在が予定されている者は掲載した。

* 職名の後に（ ）書きがある者は客員教員等で，本務校を記載している。

2-5-2 人事異動状況

(1) 分子科学研究所の人事政策

分子科学研究所では創立以来、研究教育職員（教授、助教授、助手）の採用に関しては厳密に公募の方針を守り、しかもその審議は全て所内5名、所外5名の委員で構成される運営会議人事選考部会に委ねられている。さらに、厳密な選考を経て採用された助教授および助手は分子科学研究所教員の流動性を保つため内部昇格が禁止されている。施設の助教授・助手については例外規定が設けられているが、実際には分野の特殊性から同じ施設で、助手から助教授と助教授から教授への昇格が認められた例があるだけである。また、助手が6年を越えて勤務する際には毎年、本人の属する研究系の主幹あるいは施設長が主幹・施設長会議においてそれまでの研究活動と転出の努力を報告し、同会議で承認された後、教授会議でも同様の手続きを行い承認を得るという手続きをとっている。

教授と助教授の研究グループの研究活動に関しては、毎年教授・助教授全員が所長と研究顧問によるヒアリング、また3年おきには研究系あるいは施設ごとに国内委員と国外委員による点検・評価を受けている。さらに、教授と助教授の個人評価は国外委員により confidential report の形で所長に報告されている。このように完全な公募による教員の採用、国内外の外部研究者による評価ならびに内部昇格禁止等の内部措置により、分子科学研究所に勤務する助教授および助手は研究業績を上げて、大学や研究機関に転出していくことを当然のこととしている。教員の流動性とは、全ての研究者が等しく、その能力に応じて研究環境が整った大学や研究機関で研究する機会が与えられることであり、その結果、個々の研究者がさらに研究能力をのばして各研究分野で指導者としての人材に成長することに大きな貢献をするものである。

(2) 創立以来の人事異動状況（2006年1月1日現在）

専任研究部門等

職 名 区 分	所 長	教 授	助教授	助 手	技術職員	非常勤研究員 (IMSフェロー)
就任者数	6	43	70	222	147	177
転出者数	5	26	55	181	111	159
現 員	1	17(2)	15	41	36	18

() は委嘱で外数。

客員研究部門

職 名 区 分	教 授	助教授
就任者数	112	122
現 員	10	6

外国人客員研究部門

職 名 区 分	分子エネルギー変換研究部門		極端紫外光研究部門	
	教 授	助教授	教 授	助教授
就任者数	29	29	31	22
現 員	2	0	2	0

人数は、延べ招へい人数(招へい決定者を含む。継続は除く。)

2-6 研究系及び研究施設の概要

理論分子科学研究系

研究目的 分子科学は量子力学および統計力学を中心とする理論の進歩に基づいて発展した。また実験的研究の成果は新しい理論の開発をうながすものである。本系では、実験部門と密接に連携した分子科学の基礎となる理論的研究を行う。

分子基礎理論第一研究部門

研究目的 分子科学の基礎となる理論的方法の開発及び分子構造の理論的研究

研究課題 1 ,分子の設計と反応の理論計算
2 ,分子シミュレーションにおける新手法の開発と生体高分子の立体構造の理論的研究

分子基礎理論第二研究部門

研究目的 原子、分子の動的諸過程、及び分子集合体の物性と構造の変化に関する理論的研究

研究課題 1 ,化学反応諸過程の動力学に関する理論的研究
2 ,原子分子過程における電子状態遷移の理論的研究
3 ,凝縮系における分子の光学過程に関する理論的研究
4 ,凝縮系における電子的励起の緩和と伝播の理論的研究

分子基礎理論第三研究部門

研究目的 分子性液体・固体の構造、物性及び非平衡過程に関する理論的研究

研究課題 1 ,溶液中の平衡・非平衡過程に関する統計力学的研究
2 ,溶液内分子の電子状態と化学反応に関する理論的研究
3 ,生体高分子の溶液構造の安定性に関する統計力学的研究
4 ,界面における液体の統計力学的研究
5 ,分子性物質の電子物性における次元性と電子相関に関する理論的研究
6 ,光誘起非線型ダイナミクスと秩序形成過程に関する理論的研究

分子基礎理論第四研究部門（客員）

研究目的 1 ,凝縮系における化学反応ダイナミクスに関する理論的・計算科学的研究
2 ,凝縮系における光と分子の相互作用および分子間相互作用に関する理論的研究

研究課題 1 ,凝縮系化学反応における分子エネルギー移動過程の理論的研究
2 ,自由エネルギー勾配法の開発、溶質分子の構造最適化プログラムの開発と個別反応への適用
3 ,液体および生体分子系における分子間振動相互作用と振動励起移動および光学的性質に関する理論的研究
4 ,分子振動の諸性質と理論的に解析するためのソフトウェアの開発と応用

分子構造研究系

- 研究目的 分子科学では原子・分子の立体配置及び動きを知ること,またそれらと電子状態の相関を解明することが重要であり,そのための実験手段として各種の静的分光法および時間分解分光法が用いられる。これらの方法を高感度化,高精密化するとともに時間・空間分解能を高めることも含め新しい手段の開発を行う。

分子構造学第一研究部門

- 研究目的 分子及び分子集団の時間的・空間的挙動を通じた化学的性質の解明
- 研究課題 1 ,極めて高い空間分解能をもつ高速分光法による分子ダイナミクスの研究
2 ,微粒子系における素励起の空間分解分光の研究

分子構造学第二研究部門(客員)

- 研究目的 1 ,蛋白質ダイナミクスの解明
2 ,鉄センサー蛋白質の構造化学的研究
- 研究課題 1 ,レーザー分光を手段として,機能性蛋白質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する
2 ,鉄センサー蛋白質(IRP)が鉄を検出するとDNAに結合し転写活性を示す事が知られているが,その構造化学的研究を振動分光法で進める

分子動力学研究部門

- 研究目的 1 ,磁性薄膜における表面分子化学的磁化制御
2 ,低侵襲的生体分子イメージング法に関する研究
- 研究課題 1 ,X線磁気円二色性と磁気光学Kerr効果による新規磁性薄膜の探索と表面分子化学的な磁化制御の検討
2 ,蛍光・発光蛋白質を利用した蛋白質オルガネラ移行と遺伝子発現の時空間解析法の開発

電子構造研究系

- 研究目的 分子および分子集合系の個性と電子構造との関係を実験的立場から研究し,分子のかくれた機能を解明するとともに,これを応用する研究を行う。

基礎電子化学研究部門

- 研究目的 分子の励起状態の研究及びその化学反応,エネルギー変換,電荷輸送制御などへの応用
- 研究課題 1 ,分子間相互作用および化学反応や電荷輸送過程の分子クラスターレベルでの研究
2 ,ナノクラスターの構造と機能発現機構の解明

電子状態動力学研究部門

- 研究目的 励起分子の構造，化学反応，及びこれに伴う緩和の素過程を明らかにする
- 研究課題 1 ,励起分子の構造及び緩和過程に関する研究
- 2 ,原子分子衝突や化学反応素動力学の実験的研究

電子構造研究部門（客員）

- 研究目的 励起分子の動的挙動及び化学反応における分子間相互作用の研究
- 研究課題 1 ,励起分子の動的挙動の研究
- 2 ,分子間相互作用の分子構造や化学反応への影響

分子エネルギー変換研究部門（外国人客員）

- 研究目的 光エネルギー（太陽光）を電気エネルギー又は化学エネルギー（燃料）に変換する方法の基礎についての研究
- 研究課題 1 ,内殻励起・イオンの量子化学
- 2 ,多次元系における非断熱動力学の理論的研究
- 3 ,ヘム蛋白質及びその関連モデル化合物の電子状態
- 4 ,分子性磁性体の単結晶の磁気物性研究
- 5 ,放射光を利用した極端紫外域の分光学と動力学

分子集団研究系

- 研究目的 新しい物性をもつ物質の構築並びにその物性の研究。分子と分子集合体の接点を求めながら，分子物性の新領域の開発に取り組む。

物性化学研究部門

- 研究目的 分子性固体の化学と物理
- 研究課題 1 ,分子性導体の機能探索と電子構造の研究
- 2 ,導電性有機固体の電子物性の研究

分子集団動力学研究部門

- 研究目的 分子集合体の物性機能開拓と物性解明
- 研究課題 1 ,磁性有機超伝導体・単一分子金属の開発と物性
- 2 ,新規な機能性分子システムの開発

分子集団研究部門（客員）

- 研究目的 分子及び分子集団の構造と物性の研究
- 研究課題 1 ,興味ある物性を持つ新物質の開発と物性
- 2 ,分子素子の基礎研究

相関領域研究系

研究目的 分子科学の成果を関連分野の研究に反映させ、また関連分野で得られた成果を分子科学の研究に取り入れるなど両者の連携を図るための相関領域に関する研究を行う。

相関分子科学第一研究部門

研究目的 無機化学、有機化学、高分子化学、超分子科学を含む分子科学関連分野の諸問題を、特に分子の構造とその機能という分子科学の観点から研究

研究課題 1、樹木状金属集積体を用いたスピン空間の構築と機能開拓
2、分子プログラムに基づいた光機能性ナノ構造体の構築
3、新規分子性強磁性体の構築とその磁気構造の解明

相関分子科学第二研究部門（客員）

研究目的 ヘムタンパクの構造 - 機能相関の解明

研究課題 ヘムオキシゲナーゼの反応機構解明と新規ヘムタンパクのクローニング、発現系の構築

極端紫外光科学研究系

研究目的 極端紫外光実験施設のシンクロトロン光源は、軟X線領域から遠赤外光までの広範囲な光を安定に供給している。本研究系では、この放射光源を用いて、放射光分子科学の新分野を発展させる中核としての役割を果たす。特に放射光及び放射光とレーザーの同期などによる気相・液相・固体・固体表面の光化学、ナノ物性、ナノバイオマテリアル創製などを旨とした研究を展開する。

基礎光化学研究部門

研究目的 分子及び分子集合体の光化学並びに化学反応素過程の所究

研究課題 1、軟X線分光による分子及び分子集合体の光化学・光物性研究
2、レーザー光及び放射光を用いた光化学反応の研究
3、短パルス光による分子ダイナミクスの研究

反応動力学研究部門

研究目的 極端紫外光を用いた化学反応動力学の研究

研究課題 1、気相における光イオン化及び光解離のダイナミクス
2、放射光に同期したレーザーシステムの開発とその分子科学研究への利用
3、極端紫外光反応を用いたシリコン表面ナノ構造の形成と生体情報伝達受信素子製作

極端紫外光研究部門（外国人客員）

研究目的 世界唯一の化学専用極端紫外光を利用した化学の反応、合成等全般についての研究

- 研究課題
- 1 ,化学反応動力学の理論的研究
 - 2 ,分子および分子集合系の分子構造・電子構造と物性
 - 3 ,極端紫外光分子科学の研究
 - 4 ,金属原子を含む化合物, 新物質創成
 - 5 ,ナノスケール分子科学の研究

計算分子科学研究系

研究目的 分子および分子集合体の計算科学的研究

計算分子科学第一研究部門

研究目的 分子および分子集合体の構造と動力学に関する計算科学的研究

- 研究課題
- 1 ,凝集系における溶質, 溶媒の量子動力学シミュレーション
 - 2 ,複雑な古典凝集系の分子動力学シミュレーション
 - 3 ,界面和周波発生分光の計算手法の開発

計算分子科学第二研究部門

研究目的 分子および分子集合体の機能と物性に関する計算科学的研究

- 研究課題
- 1 ,凝縮系におけるダイナミクス・多次元分光法の理論および数値解析
 - 2 ,生体高分子の構造変化と機能発現に関する分子動力学計算

研究施設

錯体化学実験施設

研究目的 金属原子を含む化合物を中心とする広範な物質を対象とし, その構造, 物性, 反応性等を探索することにより, 新物質創造のための設計指針ならびに新規反応系を開発することを目的とする。

錯体物性研究部門

研究目的 金属錯体の合成と物質変換に関する所究

- 研究課題
- 1 ,二酸化炭素固定
 - 2 ,酸塩基中和反応を駆動力とする化学エネルギーと電気エネルギーの相互変換
 - 3 ,自己組織性精密分子システムの設計・創成・機能発現
 - 4 ,金属カルコゲニド化合物の合成と多核機能化

配位結合研究部門 (客員)

研究目的 3次元金属錯体超分子の合成, 機能と結晶構造制御

錯体触媒研究部門

研究目的 遷移金属錯体による有機分子変換反応の開発

- 研究課題
- 1 ,多重応答型錯体の合成と外場応答
 - 2 ,新規不斉触媒の開発
 - 3 ,錯体触媒の固定化と新機能
 - 4 ,機能性ナノ錯体分子の開発

分子スケールナノサイエンスセンター

研究目的 原子・分子サイズでの物質の構造および形状の解明と制御,さらに新しい機能を備えたナノレベルでの新分子系「分子素子」の開発とその電子物性の解明を行うとともに,このような研究を進展させる新しい方法論の開発を行う。

分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門

研究目的 分子スケール電子物性研究の基礎となる機能性分子の開発およびその電子物性計測技術の確立を目指す

- 研究課題
- 1 ,分子電子素子のための分子設計と合成およびナノデバイスの作成
 - 2 ,巨大分子系合成の研究
 - 3 ,非伝統的手法による無機ナノ構造体の作成
 - 4 ,分子スケールプローバーの開発
 - 5 ,分子エレクトロニクス素子のための有機半導体の開発

ナノ触媒・生命分子素子研究部門

研究目的 触媒機能発現機構の解明と理解の上に立った新しい機能を発現する新触媒の創成および生体分子が示す特徴を活用した反応制御,エネルギー変換,情報伝達系などの新たな設計指針の確立を目指す

- 研究課題
- 1 ,両親媒性レジン担持ナノパラジウム触媒の創成:設計・調整および水中触媒作用
 - 2 ,光励起電子移動を利用した触媒反応の開発
 - 3 ,大型有機分子を用いたナノ反応場の設計と制御
 - 4 ,新規不斉錯体触媒の開発
 - 5 ,ボウル型共役分子の設計・合成および機能
 - 6 ,金属ナノ粒子を用いた触媒反応の開発

ナノ光計測研究部門

研究目的 新たなナノ空間・ナノ構造体の計測手法を用いて,ナノ空間内の現象解明とその分子科学的応用を行う

- 研究課題
- 1 ,非線形分光による固体・ナノ構造体表面でのダイナミックス
 - 2 ,サブナノ金属クラスターの調整と構造, 電子状態, 反応性評価
 - 3 ,有機単分子膜によって保護された金属クラスターの構造解析

先導分子科学研究部門 (客員)

- 研究目的 超高磁場核磁気共鳴 (NMR) 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
- 研究課題
- 1 ,高分解能 NMR 計測による複合糖質・タンパク質の精密構造解析
 - 2 ,NMR 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 法の生体分子への応用

極端紫外光研究施設

- 研究目的 電子蓄積リングを利用した極端紫外光源の研究・開発とシンクロトロン放射を用いた分子科学の研究
- 研究課題
- 1 ,極端紫外光源の高度化と先進放射光源に関する開発研究
 - 2 ,相対論的電子ビームを用いた光発生法の開発研究, 及びビーム物理学研究
 - 3 ,極端紫外光を用いた光物性実験用の観測システムの開発とそれを用いた分光学的研究
 - 4 ,極端紫外光を用いた光化学実験用の観測システムの開発とそれを用いた分光学的研究
 - 5 ,極端紫外光用高性能分光器及び挿入光源を含めた制御システムの開発研究

分子制御レーザー開発研究センター

- 研究目的 分子科学の今後の発展のために, 分子科学の研究手段としてふさわしい, 新しいレーザーシステムを開発し, 光分子科学における新しい分野の開拓を目指す。
- 研究課題
- 1 ,放射光に完全同期した紫外レーザーシステムの開発とその分子科学研究への応用
 - 2 ,赤外パルスレーザーシステムの開発とその分子科学研究への応用

装置開発室

- 研究目的 実験装置の設計・製作および技術開発
- 研究課題
- 1 ,放電加工, 切削加工, レーザー加工による微細加工の開発と応用
 - 2 ,ワンチップ MCU を使った自動制御装置の開発
 - 3 ,CPLD, FPGA を用いた高速デジタル回路の開発

安全衛生管理室

- 業務目的 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的業務を行う

2-7 岡崎共通研究施設（分子科学研究所関連）の概要

岡崎統合バイオサイエンスセンター

研究目的 生命現象の基本に関する諸問題を分子レベルから細胞，組織，個体レベルまで統合的に捉える新しいバイオサイエンスの基礎的研究を展開する

研究課題 1 ,蛋白質の機能と高次構造ダイナミクス
2 ,センサー機能を有する金属タンパク質の構造と機能
3 ,酸素分子を活性化する金属酵素の機能発現の分子メカニズム

計算科学研究センター

研究目的 分子および分子集合体の計算科学的研究

研究課題 1 ,複雑凝集系の計算機シミュレーション
2 ,界面和周波発生分光の計算手法の開発
3 ,凝縮系のダイナミクスと多次元分光法の解析

2-8 技術課

技術課は所長に直属した技術職員の組織で、2005年4月1日の構成員は、37名である。技術職員は、研究系及び付属施設に配属され、それぞれの持つ高い専門技術で、分子科学の研究を支援している。研究室に配属された技術職員は、研究教育職員と共同して研究を行ううちに、博士号を取得し、他機関へ研究者として転出して行く。一方、付属施設に配属された職員は、先端の装置を駆使し、研究教育職員から依頼された業務をこなす、装置の維持管理を行っている。また、研究教育職員と協力し、施設の運営も行っている。

施設に配属された技術職員が対応する技術分野も幅が広く、依頼を受けて製作・測定する分野としては、機械工作、回路工作、理化学ガラス製作、計算機プログラミング、広報ポスター・出版物作成、化学分析などがあり、機器の管理分野では、ネットワークシステム、レーザーシステム、X線解析装置、電子顕微鏡、ESR、SQUID、NMR装置などの維持管理があり、また施設の管理分野としては、計算機施設、装置開発施設、高圧ガス製造施設、放射光施設の維持管理業務がある。

安全衛生分野では、基礎生物学研究所並びに生理学研究所とともに、岡崎3機関の安全衛生委員会に安全衛生管理者として加わった。分子研に於いては、安全衛生管理室に所属し（併任）、4名の技術課所属衛生管理者が、毎週職場巡視を行い、分子研の安全衛生管理に寄与している。また、放射線・電気／レーザー・高圧ガス担当の作業主任者としても安全衛生管理室に加わり、研究教育職員とともに安全衛生を担当している。

技術職員が組織化されたのは、1975年に創設された分子科学研究所技術課が最初である。技術職員が組織化したことで、直接待遇改善につながったが、組織化の効果はそれだけでなく、施設や研究室の狭い枠に留まっていた支援を、広く分子科学分野全体の研究支援を行うことができるようになり、強力な研究支援体制ができあがった。支援体制の横のつながりを利用して、分子研への見学・視察の際の見学先との交渉、スケジュールの作成も技術課が行っている。

しかし、分子研の場合、施設に配属された技術職員は、研究室に配属された技術職員に比較すると、流動性に乏しいので、組織と個人の活性化を図るために、積極的に次のような事項を推進している。

2-8-1 技術研究会

施設系技術職員が他の大学、研究所の技術職員と技術的交流を行うことにより、技術職員相互の技術向上に繋がることを期待し、1975年度、分子研技術課が他の大学、研究所の技術職員を招き、第1回技術研究会を開催した。内容は日常業務の中で生じたいろいろな技術的問題や失敗、仕事の成果を発表し、互いに意見交換を行うものである。その後、毎年分子研でこの研究会を開催してきたが、参加機関が全国的規模に広がり、参加人員も300人を超えるようになった。そこで、1982年度より同じ大学共同利用機関の高エネルギー物理学研究所（現、高エネルギー加速器研究機構）、名古屋大学プラズマ研究所（現、核融合科学研究所）で持ち回り開催することになり現在に至っている。1996年度より国立天文台や大学も交代で開催するようになった。表1に今までの技術研究会開催場所及び経緯を示す。

表 1 技術研究会開催機関

年度	開催機関	開催日	分科会	備考
昭和50	分子科学研究所	昭和50年2月26日	機械	名大(理)(工)のみ
昭和51	分子科学研究所	昭和50年7月20日	機械	学習院大など参加
		昭和51年2月	機械、(回路)	名大(工)回路技術
昭和52	分子科学研究所	昭和52年7月	機械	都城工専など参加
		昭和53年2月	機械、(回路)	名大プラ研回路技術
昭和53	分子科学研究所	昭和53年6月2日	機械、回路	技術研究会について討論会 分科会形式始める
	高エネルギー物理学研究所	昭和53年10月27日	機械技術	
昭和54	分子科学研究所	昭和54年7月	機械、回路、電子計算機	電子計算機関連の分科会を創設
	高エネルギー物理学研究所	昭和54年10月19日	機械	
	分子科学研究所	昭和55年2月	機械、回路、電子計算機	
昭和55	高エネルギー物理学研究所	昭和55年10月24日	機械	
	分子科学研究所	昭和56年1月30日	機械、回路、電子計算機、低温	低温分科会を創設 技術課長 内田 章
昭和56	分子科学研究所	昭和56年7月	機械、回路、電子計算機、低温	
	高エネルギー物理学研究所	昭和56年1月30日	機械	
昭和57	高エネルギー物理学研究所	昭和58年3月17-18日	機械、回路、電子計算機、低温	技術部長 馬場 斉 3 研究機関持ち回り開催が始まる
昭和58	分子科学研究所	昭和59年3月2-3日	機械、回路、電子計算機、低温	
昭和59	名古屋大学プラズマ研究所	昭和59年11月15-16日	機械、ガラス、セラミック、低温回路、電子計算機、装置技術	実行委員長 藤若 節也
昭和60	高エネルギー物理学研究所	昭和61年3月19-20日	機械、計測制御、低温、電子計算機、装置技術	技術部長 山口 博司
昭和61	分子科学研究所	昭和62年3月19-20日	機械、回路、電子計算機、低温	
昭和62	名古屋大学プラズマ研究所	昭和63年3月29-30日	機械、回路、低温、電子計算機、装置技術	
昭和63	高エネルギー物理学研究所	平成元年3月23-24日	機械、計測制御、低温、電子計算機、装置技術	技術部長 阿部 實
平成元	分子科学研究所	平成2年3月19-20日	機械、回路、低温、電子計算機、総合技術	2 ヶ所で懇談会
平成2	核融合科学研究所	平成3年3月19-20日	機械、低温、計測制御、電子計算機、装置技術	
平成3	高エネルギー物理学研究所	平成4年2月6-7日	機械、低温、計測制御、電子計算機、装置技術	
平成4	分子科学研究所	平成5年3月11-12日	装置I、装置II、低温、電子計算機	実行委員長 酒井 楠雄 3 研究機関代表者会議
平成5	核融合科学研究所	平成6年3月23-24日	機械、低温、計測制御、電子計算機、装置技術	技術部長 村井 勝治 研究所間討論会
平成6	高エネルギー物理学研究所	平成7年2月16-17日	機械、低温、計測制御、電子計算機、装置技術	技術部長 三国 晃 研究所間討論会
平成7	分子科学研究所	平成8年3月18-19日	機械、回路、計測制御、電子計算機、化学分析	技術課長 酒井楠雄 研究所間懇談会 化学分析を創設
平成8	国立天文台・電気通信大学共催	平成8年9月19-20日	計測・制御、装置・回路 計算機・データ処理	初めての分散開催
	大阪大学産業科学研究所	平成8年11月14-15日	機器分析	
	名古屋大学理学部	平成9年2月6-7日	装置開発A,B、ガラス工作	
	北海道大学理学部	平9年2月27-28日	低温	
平成9	核融合科学研究所	平成9年9月11-12日	機械、回路、低温、電子計算機、装置技術	
	静岡大学	平成9年11月27-28日	機器分析	工学部、情報学部、電子工学研究所 各技術部の共催
平成10	名古屋工業大学	平成10年11月26-27日	機器・分析	
	高エネルギー加速器研究機構	平成11年3月4-5日	工作、低温、回路・制御、装置、計算機	インターネット討論会
平成11	東北大学	平成11年11月11日	機器・分析	
	分子科学研究所	平成12年3月2-3日	装置、回路、極低温、電子計算機、ガラス工作	インターネット技術討論会
平成12	福井大学	平成12年9月28-29日	機器・分析	
	東北大学	平成13年3月1-2日	工作、装置、回路、極低温、情報・ネットワーク、材料・物性開発、地球物理観測	
平成13	大阪大学	平成13年11月15-16日	機器・分析	
	核融合科学研究所	平成14年3月14-15日	工作、装置、計測・制御、低温、計算機・データ処理	

平成14	東京大学	平成15年3月6-7日	工作、装置、回路、極低温、情報・ネットワーク、生物科学、機器・分析、地球物理観測、文化財保存、教育実験・実習	
平成15	三重大学	平成15年11月20-21日	機器・分析	
	高エネルギー加速器研究機構	平成16年2月26-27日	工作、低温、回路・制御、装置、計算機	
平成16	佐賀大学	平成16年9月16-17日	機器分析を主とし全分野	
	大阪大学	平成17年3月3-4日	工作、装置、回路・計測制御、低温、情報ネットワーク、生物科学、教育実験・演習・実習	
平成17	分子科学研究所	平成18年3月2-3日	機械・ガラス工作、回路、低温、計算機、装置	
	岩手大学	平成17年9月15-16日	機器・分析	

2-8-2 技術研修

1995年度より、施設に配属されている技術職員を対象として、他研究所・大学の技術職員を一定期間、分子研の付属施設に受け入れ技術研修を行っている。分子研のような大学共同利用機関では、研究者同士の交流が日常的に行われているが、技術者同士の交流はほとんどなかった。他機関の技術職員と交流が行われれば、組織の活性化、技術の向上が図れるであろうという目的で始めた。この研修は派遣側、受け入れ側ともに好評だった。そこで、一歩進めて、他研究機関に働きかけ、受け入れ研修体制を作っていただいた。そうした働きかけの結果、1996年度より国立天文台が実施し、1997年度には高エネルギー加速器研究機構、1998年度からは核融合科学研究所が受け入れを開始した。法人になった今年度は、相互の受け入れ体制が整っていないためにまだ実施件数は少ないが、今後活発になるものと考えている。表2、3に分子研での受け入れ状況を示す。

表2 過去の技術研修受入状況

年 度	受 入 人 数
平成7年度	6
平成8年度	12
平成9年度	13
平成10年度	7
平成11年度	6
平成12年度	13
平成13年度	47
平成14年度	96
平成15年度	59
平成16年度	8

表3 技術研修受入状況（2005.1.1～12.31）

氏 名	所 属	研 修 期 間	備 考
宗本 久弥	琉球大学低温センター	1/25/05～1/27/05	低温技術研究会
土屋 光	東京大学物性研究所	1/26/05～1/27/05	低温技術研究会
鷲山 玲子	東京大学物性研究所	1/26/05～1/27/05	低温技術研究会
中道 功	広島大学自然科学研究支援開発センター	1/26/05～1/27/05	低温技術研究会
河野 賢悟	熊本大学理学部	1/26/05～1/27/05	低温技術研究会
楠田 敏之	京都大学化学研究所	1/26/05～1/27/05	低温技術研究会
池田 博	筑波大学研究基盤総合センター	1/26/05～1/27/05	低温技術研究会
宮田 清美	京都大学原子炉実験所	1/26/05～1/27/05	低温技術研究会
吉本 佐紀	千葉大学理学部	1/26/05～1/27/05	低温技術研究会

伊東 寛	北海道大学極低温液化センター	1/25/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
黒川 俊和	名古屋大学全学技術センター	1/26/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
田中 峰雄	大阪市立大学事務局	1/26/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
中本 聡美	大阪市立大学事務局	1/26/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
小田嶋 豊	東京大学大学院総合文化研究科	1/26/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
吉田 辰彦	(独)理化学研究所加速器基盤研究部	1/26/05 ~ 1/27/05	低温技術研究会
増沢 隆久	東京大学生産技術研究所	3/10/05 ~ 3/11/05	教授 セミナー講師
百地 武	東芝機械(株)精密機械営業部	3/10/05 ~ 3/11/05	参事 セミナー講師
吉田 睦	アイシン精機(株)新規事業企画室	3/10/05	グループマネージャー セミナー講師
吉田 基	ヨシダ工業(株)	3/10/05	マイクロ加工技術セミナー
谷田貝悦男	東京大学生産技術研究所	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
加賀谷孝三郎	東北大学多元物質科学研究所	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
佐々木英一	東北大学多元物質科学研究所	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
谷川 慎一	タニワカプロダクト	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
大石 和泉	株式会社オオイシ	3/10/05	マイクロ加工技術セミナー
森 紀年	(財)東京都中小企業振興公社	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
岡田 則夫	国立天文台	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
杉戸 正治	核融合科学研究所	3/10/05	マイクロ加工技術セミナー
増田 忠志	名古屋大学全学技術センター	3/10/05	マイクロ加工技術セミナー
鈴木 和司	名古屋大学全学技術センター	3/10/05	マイクロ加工技術セミナー
鳥居 龍晴	名古屋大学全学技術センター	3/10/05	マイクロ加工技術セミナー
松下 幸司	名古屋大学全学技術センター	3/10/05	マイクロ加工技術セミナー
千田 進幸	名古屋大学全学技術センター	3/10/05	マイクロ加工技術セミナー
小田嶋 豊	東京大学大学院総合文化研究科	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
中島 教雄	東京大学教養学部	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
星野 英夫	長岡技術科学大学工作センター	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
宇野 宗則	北陸先端科学技術大学院大学	3/10/05 ~ 3/11/05	マイクロ加工技術セミナー
嶺岸 宏治	東北大学多元物質科学研究所	6/14/05 ~ 6/15/05	受入研修 装置開発室
柳田 里見	東北大学多元物質科学研究所	6/14/05 ~ 6/15/05	受入研修 装置開発室
三浦 和浩	東北大学多元物質科学研究所	6/14/05 ~ 6/15/05	受入研修 装置開発室
小田嶋 豊	東京大学教養学部	10/12/05	受入研修(EBW) 装置開発室
滝澤 勉	東京大学教養学部	10/12/05	受入研修(EBW) 装置開発室
加賀谷孝三郎	東北大学多元物質科学研究所	10/20/05 ~ 10/21/05	放電加工技術研究会
森 紀年	(財)東京都中小企業振興公社	10/20/05 ~ 10/21/05	放電加工技術研究会
高橋 庸夫	北海道大学	11/22/05 ~ 11/23/05	教授 セミナー講師
小中 信典	徳島大学	11/22/05 ~ 11/23/05	教授 セミナー講師
増田 忠志	名古屋大学全学技術センター	11/22/05	エレクトロニクス最先端技術セミナー
北 宏之	北陸先端科学技術大学院大学	11/22/05	エレクトロニクス最先端技術セミナー

表 4 研修受講実績(平成17年度)

研 修 名	開 催 機 関	日 程	参 加 者
東海・北陸地区国立大学法人等技術専門職員研修 (情報処理コース)	名古屋大学	8/31/05 ~ 9/2/05	内藤茂樹
東海・北陸地区国立大学法人等教室系技術職員研修 (電気・電子コース)	静岡大学	9/7/05 ~ 9/9/05	内山功一、酒井雅弘
東海・北陸地区国立大学法人等技術専門職員研修 (物理・化学コース)	三重大学	9/26/05 ~ 9/28/05	高山敬史
平成17年度前期放送大学	愛知学習センター	4/05 ~ 9/05	永田、蓮本、千葉、水川、原田
平成17年度後期放送大学	愛知学習センター	10/05 ~ 3/06	山中、高山、中村、藤原、中野

2-8-3 見学者の受入れについて

自然科学研究機構岡崎3機関の見学者受入は、事務センター総務課企画評価係が窓口になって行われており、その中で分子科学研究所の見学分については、技術課が中心となってその対応にあたっている。年間およそ300名が来訪している。

近年は中学生の職場体験学習「生徒自身が短期間ながらも自ら体験した仕事と人間関係から希望に満ちた勤労観を育ませ、それを進路選択の一助にしてもらおう」という取り組みにも積極的に協力している。

平成16年度

受入日	見学受入機関名	見学者数等
4月27日	愛知県庁	知事公室4名
5月17日	フランスアレヴァ社	アジア研修視察団20名
5月18日	中部電力（株）	電力技術研究会25名
6月8日	三島小学校	3年生94名（総合学習）
7月15日	南山高校	女子部生徒27名
8月5日	愛知県立豊田西高等学校	職場訪問27名
8月10日	中学生職場体験学習	2年生4名
8月23日	竜海中学校	生徒・教諭5名岡崎市職員1名
8月25日	立命館高校（スーパーサイエンスH.S.）	高校生24名
11月5日	東海流体熱工学研究会	会員15名
11月16日	岡崎市火曜会	会員24名
12月9日	アジア冬の学校	参加者30名
3月11日	異業種・異分野交流会	会員40名
平成16年度見学受入者総数		340名

平成17年度

受入日	見学受入機関名	見学者数等
8月9日	岐阜西濃地区理科教諭	岐阜西濃地区理科教諭22名
9月7日	東京都立工業高等専門学校	電子情報工学科学生40名
9月8日～9日	岡崎市立岩津中学校職場体験	2年生2名
9月13日	社団法人自動車技術会中部支部	会員70名
11月1日	名古屋高年大学	鯉城学園OB中川鯉城会35名
11月8日	岐阜工業高等専門学校	電気情報工学科学生40名
1月10日	韓国慶熙大学	環境・応用科学学科の学生20名
1月25日～26日	宝飯郡音羽中学校	2年生1名
3月15日	若狭高等学校	1年38名
平成17年度見学受入者総数（12月20日現在、予定を含む）		268名

2-8-4 人事

人事の活性化を図るために、人事交流を行ってきた。法人になってからは、変化をもたせた技術職員の採用を行うために、公募採用も取り入れた。

人事交流

長期間、同一職場に勤務すると、慢性のために活力が低下しがちである。転勤が少ない職場での人事異動は、組織と個人の活性化に不可欠である。1995年3月から、一定の期間、所属を移して勤務する人事交流を行っている。現在、手続きが確定していないため停止している。

人事交流実績

装置開発室 / 名古屋大学理学部

極端紫外光実験施設 / 北陸先端科学技術大学院大学

大学からの採用

2004年4月1日，大学から2名の中堅技術職員を採用した。

装置開発室 1名（名古屋大学）

分子制御レーザー開発研究センター 1名（東北大学）

転任

2005年12月，7班技術職員 手老龍吾

採用

2004年10月16日，技術職員を公募により採用した。

7班（広報担当） 1名

2005年4月1日，技術職員を公募により採用した。

6班（分子スケールナノサイエンスセンター）2名

2006年2月1日，技術職員を公募により採用した。

5班（計算科学研究センター） 1名

2-8-5 受賞

早坂啓一（1995年定年退官） 日本化学会化学研究技術有功賞（1985）

低温工学協会功労賞（1991）

酒井楠雄（2004年定年退官） 日本化学会化学技術有功賞（1995）

加藤清則 日本化学会化学技術有功賞（1997）

西本史雄（2002年辞職） 日本化学会化学技術有功賞（1999）

山中孝弥 日本化学会化学技術有功賞（2004）

石村和也 WATOC2005 Best Poster Diamond Certificate（2005）

堀米利夫 日本化学会化学技術有功賞（2005）

2-9 共同利用研究

2-9-1 共同利用研究の概要

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: 所内の教授又は助教授と協力して行う研究。(原則として1対1による)。

(平成11年度後期より UVSOR 協力研究は、協力研究に一本化された)

(3) 研究会: 分子科学の研究に関連した特定の課題について、所内外の研究者によって企画される研究討論集会。

(4) UVSOR 施設利用: 原則として共同利用の観測システムを使用する研究。

(5) 施設利用: 研究施設に設置された機器の個別的利用。

2-9-2 2005 年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名	提案代表者
固体表面上の生体分子認識反応系の構築と構造解析	分子科学研究所 宇理須恆雄

(2) 協力研究

課 題 名 (前期)	代 表 者
RISM - モード結合理論を用いて調べる溶媒ゆらぎの時間変化と溶媒和構造変化	島根大学教育学部 西山 桂
金ナノ微粒子膜の近接場光学顕微鏡による光学測定	(独)物質・材料研究機構 北島 正弘
共鳴ラマン分光法を用いたセンサー蛋白質の構造と機能に関する研究	京都大学大学院工学研究科 鷲澤 尊規
SMOKEによる Ru(0001)基板上的 Co 薄膜の磁性研究	東京大学大学院理学系研究科 雨宮 健太
純液体及び2成分混合溶液中のクラスター構造	福岡教育大学教育学部 小杉健太郎
DNA 塩基誘導体の光反応ダイナミクス	東京工業大学大学院理工学研究科 鈴木 正
ナノキャピティ内の芳香族分子のピコ、フェムト秒励起状態ダイナミクス	東京工業大学大学院理工学研究科 松下 慶寿
(ET) ₂ MHg(SCN) ₄ の電荷秩序相に関する振動分光学的研究	東京工芸大学工学部 比江島俊浩
光学スペクトルによるずれ応力効果の研究	山口東京理科大学基礎工学部 井口 眞
W および Q-band ESR による有機導体等の電子状態の研究	首都大学東京都市教養学部 溝口 憲治
分子性機能物質の極小結晶による構造決定、および物性測定	(独)産業技術総合研究所 田中 寿
分子性伝導体の微小結晶の構造決定と極低温伝導度・磁化率測定	東京大学大学院理学系研究科 小林 昭子
折れ曲がった骨格を有するドナーに基づく磁性伝導体の構造と物性	大阪府立大学大学院理学系研究科 藤原 秀紀
ヘムオキシゲナーゼ反応機構の解明	東北大学多元物質科学研究所 松井 敏高
化学ドーピングした DNA 鎖の電子状態測定	東京大学大学院新領域創成科学研究科 川合 真紀
軟X線による無機透明物質のアブレーション	筑波大学大学院数理物質科学研究科 村上 浩一
カーボンナノチューブネットワーク上への生体超分子の固定	横浜国立大学大学院工学研究院 荻野 俊郎
放射光を用いたカーボンナノチューブの加工制御に関する研究	名古屋大学 今泉 吉明
放射光励起表面光化学反応の STM を用いた実空間 “ その場 ” 観察	日本原子力研究所関西研究所放射光科学研究センター 吉越 章隆
ZnTe 表面構造の照射による変化	佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター 小川 博司
金属内包フラーレンの極端紫外光吸収	岡山大学大学院自然科学研究科 久保園芳博
胆汁酸ミセルのMDシミュレーション	大分大学教育福祉科学部 中島 俊男
マイクロチップ固体レーザーの紫外高調波発生に関する研究	大阪大学大学院工学研究科 佐々木孝友
レーザーによって構造・サイズ制御された金属微粒子の反応性	東京大学大学院総合文化研究科 真船 文隆
同時計測法による分子2重イオン化のダイナミクスと2価イオン状態の研究	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 伊藤 健二

分子ラジカルの内殻励起状態の分光とその崩壊ダイナミクスの研究	広島大学大学院理学研究科	和田 真一
Fe 基ホイスラー型合金の紫外線角度分解光電子分光	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
テラヘルツ領域における銅スピネル化合物の電子状態の研究	神戸大学大学院自然科学研究科	難波 孝夫
計算機実験による液体の相分離ダイナミクスに関する研究	東北大学大学院理学研究科	福村 裕史
巨大 π 電子系化合物の効率的合成法の開発	名古屋大学大学院理学研究科	山口 茂弘
芳香族化合物の直接官能基化を経る π 共役多環式芳香族化合物合成	慶應義塾大学理工学部	垣内 史敏
ジオキソレン錯体の多電子酸化還元系の構築と水分子の活性化	山形大学大学院理工学研究科	近藤 展征
オキソスルフィドタングステン錯体の生成と同定	大阪市立大学大学院理学研究科	杉本 秀樹
多核 NMR による FixL センサー機構の解明	(独) 理化学研究所	城 宜嗣
常磁性 NMR による活性部位近傍変異体ヘムタンパク質の解析	九州大学大学院農学研究院	野中 大輔
赤外振動分光法によるヘムタンパク質補欠分子の変形と配位子結合特性の解析	千葉大学大学院薬学研究院	根矢 三郎
ヘムセンサー蛋白質 NPAS2 のラマン分光を用いた構造解析と機能相関	京都府立大学大学院農学研究科	佐上 郁子
固体コヒーレントフォノン励起における光パルス位相制御の効果	(独) 物質・材料研究機構	石岡 邦江
リチウム二次電池用正極活物質の粒子表面と内部における充放電機構の研究	(独) 産業技術総合研究所	小林 弘典
超分子構造体の示すスピン状態スイッチング測定	城西大学理学部	加藤 立久
環拡張ポルフィリン金属錯体の磁気特性の解明	京都大学大学院理学研究科	清水 宗治
α' -(BEDT-TTF) ₂ IBr ₂ の電荷秩序転移に伴う電子状態の変化	岡山大学大学院自然科学研究科	神戸 高志
分子性機能物質の極小結晶による構造決定、および物質測定	(独) 産業技術総合研究所	田中 寿
環状チアジラジカル結晶の構造解析と磁気特性評価	名古屋大学物質科学国際研究センター	藤田 渉
TTP 系分子性導体の合成と構造・物性に関する研究	愛媛大学工学部	御崎 洋二
積層プレート構造半導体波長変換素子の開発	中央大学理工学部	庄司 一郎
テラヘルツコヒーレント放射光の発生と分光研究への応用	京都大学原子炉実験所	高橋 俊晴

課 題 名 (後期)

代 表 者

SMOKEによる Ru(0001)基板上の Co 薄膜の磁性研究	東京大学大学院理学系研究科	雨宮 健太
共鳴ラマン分光法を用いたセンサー蛋白質の構造と機能に関する研究	京都大学大学院工学研究科	鶴澤 尊規
振動分光学的手法による dmit 塩の電荷整列現象の研究、及び、分子性導体の引張り環境下における光学測定の開発	(独) 理化学研究所	山本 貴
有機導電体の電荷整列相に対する圧力効果の研究	京都大学大学院理学研究科	前里 光彦
環拡張ポルフィリン金属錯体の磁気特性の解明	京都大学大学院理学研究科	清水 宗治
W および Q-band ESR による有機導体等の電子状態の研究	首都大学東京大学院理学研究科	溝口 憲治
金属内包フラーレン単結晶やウィスカの示すスピン状態決定	城西大学理学部	加藤 立久
シアノバクテリア由来光化学系 II 複合体の単結晶 W-band EPR 研究	関西学院大学	河盛亜佐子
折れ曲がった骨格を有するドナーに基づく磁性伝導体の構造と物性	大阪府立大学大学院理学系研究科	藤原 秀紀
TTP 系分子性導体の合成と構造・物性に関する研究	愛媛大学工学部	御崎 洋二
遷移金属イオンの配位・溶媒和構造に関する研究	九州大学大学院理学研究院	大橋 和彦
ヘムオキシゲナーゼ反応機構の解明	東北大学多元物質科学研究所	松井 敏高
カーボンナノチューブネットワーク上への生体超分子の固定	横浜国立大学大学院工学研究科	荻野 俊郎
放射光を用いたカーボンナノチューブの加工制御に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	今泉 吉明
胆汁酸ミセルのMDシミュレーション	大分大学教育福祉科学部	中島 俊男
計算機実験による液体の相分離ダイナミクスに関する研究	東北大学大学院理学研究科	福村 裕史
半導体レーザ励起マイクロチップ固体レーザの物性と応用	東海大学大学院工学研究科	大塚 建樹
単一縦モードマイクロチップYAGレーザーを用いた小型テラヘルツ波光源の開発	(独) 理化学研究所	渋谷 孝幸
マイクロチップ固体レーザーの紫外高調波発生に関する研究	大阪大学大学院工学研究科	佐々木孝友
積層プレート構造半導体波長変換素子の開発	中央大学理工学部	庄司 一郎
単結晶二酸化チタンを用いた可視光応答光触媒反応の実現	東京大学大学院理学系研究科	守川 春雲
固体コヒーレントフォノン励起における光パルス位相制御の効果	(独) 物質・材料研究機構	石岡 邦江
テラヘルツ領域における希土類化合物 CeB ₆ の電子状態の研究	神戸大学大学院自然科学研究科	難波 孝夫
巨大 π 電子系化合物の効率的合成法の開発	名古屋大学大学院理学研究科	山口 茂弘
芳香族化合物の直接官能基化を経る π 共役多環式芳香族化合物合成	慶應義塾大学理工学部	垣内 史敏
タングステン錯体の可逆的硫黄化反応と金属 - 硫黄結合の特性解明	大阪市立大学大学院理学研究科	杉本 秀樹
ジオキソレン錯体の高酸化電位系の構築と水分子の活性化	山形大学大学院理工学研究科	近藤 展征
CooA タンパク質の結晶解析	兵庫県立大学大学院生命科学研究科	樋口 芳樹
紫外共鳴ラマン分光法によるチトクロム c 酸化酵素の反応追跡	兵庫県立大学大学院生命科学研究科	小倉 尚志
共鳴ラマン分光法によるヘモグロビンのヘムの配向に関する研究	法政大学工学部	長井 雅子

ヘムセンサー蛋白質 NPAS2 のラマン分光を用いた構造解析と機能相関
 様々な酸素活性種を含む金属錯体の構造と反応性相関
 レーザーパルススライスによるコヒーレント放射光発生の基礎研究
 オゾン分子の内殻励起状態の研究
 分子ラジカルの内殻励起状態の分光とその崩壊ダイナミクスの研究
 軟X線による無機透明物質のアブレーション
 溶液中のクラスターに関する研究
 ESR による複核金属内包フラーレンのスピン状態の研究
 刺激応答性ブロックポリマーを用いた金ナノ微粒子の作製と触媒活性
 フェノール分子の高振動状態ダイナミクスの実時間測定
 ベンゼンを含むクラスターのレーザー分光学的研究
 高出力型リチウム二次電池の正極活物質のナノ界面に関する研究
 放射光励起シリコン表面化学反応の実空間観察技術の開発

アシルフェニルアラニンにより誘起されるリン脂質二分子膜の形態変化
 シトクロム c 翻訳後修飾酵素の作用機構の解明
 マイクロリアクターを用いた光反応の研究
 光励起した芳香族分子の励起状態ダイナミクス
 放射光源加速器の超高真空に関する研究
 誘起導体におけるダイナミクスの ESR による研究
 生細胞内におけるミトコンドリア RNA の可視化検出法の開発

京都府立大学大学院農学研究科
 金沢大学大学院自然科学研究科
 名古屋大学大学院工学研究科
 新潟大学教育研究院自然科学系
 広島大学大学院理学研究科
 筑波大学大学院数理物質科学研究科
 福岡教育大学教育学部
 首都大学東京都市教養学部
 大阪大学大学院理学研究科
 東京工業大学資源化学研究所
 東京大学大学院総合文化研究科
 (独)産業技術総合研究所
 日本原子力研究所関西研究所放射光科学研究センター
 金沢大学大学院自然科学研究科
 北海道大学大学院理学研究科
 東京工業大学大学院理工学研究科
 東京工業大学大学院理工学研究科
 高エネルギー加速器研究機構
 中央大学大学院理工学研究科
 東京大学大学院理学系研究科

佐上 郁子
 鈴木 正樹
 高嶋 圭史
 副島 浩一
 和田 真一
 村上 浩一
 小杉健太郎
 兒玉 健
 青島 貞人
 藤井 正明
 住吉 吉英
 小林 弘典
 寺岡 有殿
 太田 明雄
 内田 毅
 松下 慶寿
 鈴木 正
 堀 洋一郎
 風間 重雄
 名取 穰

(3) 研究会

分子科学コア領域と関連領域の最先端

2005 年 6 月 4 日(土)～5 日(日) 岡崎コンファレンスセンター

6 月 4 日(土)

9:00-9:05 はじめに
 9:05-11:05 セッション 1: 水素結合の物理化学
 ディスカッションリーダー 橋本健朗(首都大)
 講師
 藤井朱鳥(東北大) 気相分子クラスターから観る水素結合——ネットワーク構造と新奇性——
 大峰 巖(名大) 水、水、水——水の多様なすがた
 11:05-13:30 セッション 2: 新しい液体とその科学
 ディスカッションリーダー 平田文男(分子研)
 講師
 浜口宏夫(東大) イオン液体: この不思議なもの
 西川恵子(千葉大) ゆらぎが超臨界流体の物性を決める!

6 月 5 日(日)

9:00-11:00 セッション 3: より複雑な表面・界面における分子ダイナミクスと反応へのアプローチ
 ディスカッションリーダー 松本吉泰(分子研)
 講師
 大西 洋(神戸大) 二次元開放系の化学反応
 渡會 仁(阪大) 液液界面反応の新規計測法と機能解析
 12:15-14:15 セッション 4: 生体分子情報の生成と伝達
 ディスカッションリーダー 笹井理生(名大)
 講師
 田口英樹(東大) 「時計仕掛けのゆりかご」シャペロニン GroEL の作用機構
 北尾彰朗(東大) 生体超分子の機能を生み出す分子間相互作用とダイナミクス
 14:45-16:45 セッション 5: アト秒への道
 ディスカッションリーダー 大森賢治(分子研)
 講師
 鳥塚健二(産総研) 時間領域から見たキャリアエンベロープ位相制御技術
 渡部俊太郎(東大) アト秒パルスの発生と今後の展開

ロドプシンの仲間・G蛋白質共役型レセプターの機能と構造
2005年6月15日(水)～17日(金) 岡崎コンファレンスセンター

6月15日(水)

- 13:25-13:30 開会の挨拶
- 13:30-13:50 日下部岳広(兵庫県大)
ホヤの新奇光受容器とオプシンファミリーの多様性
- 13:50-14:10 小島大輔(東大)
ゼブラフィッシュ幼生におけるVAL オプシン遺伝子の役割
- 14:10-14:30 今井啓雄(京大)
ノックインマウスを用いた光情報伝達の解析
- 14:30-14:50 今元 泰(奈良先端大)
ロドプシンの情報伝達における蛋白質間相互作用の直接観測
- 15:05-15:25 井上圭一, 寺嶋正秀(京大)
レチナールタンパク質のエネルギーと構造変化を観る
- 15:25-15:45 古谷祐詞^{1,2}, 寺北明久^{2,3}, 七田芳則^{2,3}, 神取秀樹^{1,2} (1. 名大, 2. CREST・JST, 3. 京大)
赤外分光法による視物質ロドプシンの情報伝達過程におけるタンパク質の構造変化解析
- 15:45-16:05 石黒正路(サントリー生物有機研)
ロドプシン光活性化モデルによる機能的GPCR構造
- 16:05-16:25 諏訪牧子(産総研)
Computational system for predicting function of Orphan receptors
- 16:40-17:00 倭 剛久(名大)
イエロープロテインの吸収波長制御・光異性化・エネルギー流の解析
- 17:00-17:20 櫻井 実(東工大)
分子動力学シミュレーションによるロドプシンの活性化機構の研究
- 17:20-17:40 美宅成樹(名大)
膜貫通ヘリックス本数分布のシミュレーションから見た7本膜貫通ヘリックス型膜タンパク質の進化要因
- 18:00-19:00 レチナールプロテイン国際会議組織委員会

6月16日(木)

- 9:00-9:20 針山孝彦(浜松医大)
魚類視物質に存在する2種の発色団——淡水が生んだ視覚の多様性?——
- 9:20-9:40 入江俊明(秋田大), 梶原昌五(岩手大), 東 眞美(阪教大), 妹尾春樹(秋田大), 関 隆晴(阪教大)
貯蔵レチノイドとしてのレチナールの生物学的意義: その進化的背景
- 9:40-10:00 岩佐達郎, 浦野和雄, 高島大貴(室蘭工大), 岡野恵子, 中村 整(電通大)
イモリ嗅上皮に発現するリポカリン類と嗅覚受容体
- 10:00-10:20 宮下洋子, 山田大邦, 山田恵子, 森谷常生(札幌医大)
皮膚色素細胞の光受容
- 10:40-11:00 寺北明久(京大)
ロドプシンファミリーの多様性: アゴニストとして全トランス型レチナールの結合能を持つロドプシン類
- 11:00-11:20 津田基之(兵庫県立大)
GPCRモデルとしてのタコロドプシン
- 11:20-11:40 武田茂樹(群馬大)
ランダムペプチドライブラリーを用いたGPCRに対するペプチドリガンドの同定
- 11:40-12:00 斎藤祐見子, 丸山 敬(埼玉医大)
Structure and functional relationship of melanin-concentrating hormone receptor
- 13:20-13:40 上田昌宏(阪大)
走化性情報伝達系の細胞内1分子可視化解析
- 13:40-14:00 林 文夫(神戸大)
円板膜におけるロドプシンのブラウン運動
- 14:00-14:20 中田裕康(東京都神経研)
アデノシン受容体とP2受容体のヘテロダイマー形成
- 14:20-14:40 黒瀬 等(九大)
アンジオテンシン受容体を介したシグナル伝達
- 15:00-15:20 佐藤元康(学習院大)
PaeI受容体による細胞死とmRNAの品質管理
- 15:20-15:40 齊藤 修(長浜バイオ大), 伊藤政之(東邦大), 久保義弘(生理研)
RG58によるGタンパク質共役受容体体系の制御
- 15:40-16:00 久富 修(阪大)
魚類のフォスフェーションとGタンパク質
- 16:00-16:20 深田吉孝(東大)
網膜視細胞Gタンパク質の脂質修飾の生理的役割
- 16:20-18:00 ポスターセッション

6月17日(金)

- 9:00-9:20 神取秀樹(名工大)
古細菌ロドプシンの赤外分光
- 9:20-9:40 須藤雄気(名工大)
膜蛋白質複合体の分子間認識機構:古細菌ロドプシンと情報伝達蛋白質との相互作用
- 9:40-10:00 内藤 晶、川村 出(横国大)、池田陽一、須藤雄気、岩本真幸、下野和美、加茂直樹(北大) 齊藤 肇(広大)
固体NMRによるセンサリーロドプシンIIとトランスデューサーの相互作用にともなう局所構造及び局所運動変化の検出
- 10:15-10:35 大谷弘之(東工大)
トランス体ならびにシス体を発色団とするレチナル蛋白類の蛍光特性から見た励起状態緩和過程
- 10:35-10:55 佐々木裕次(高輝度研)
膜タンパク質分子のピコレベル運動1分子計測:バクテリオロドプシンの場合
- 10:55-11:15 光岡 薫(産総研)
pH10.0でのバクテリオロドプシンの立体構造とプロトン放出機構
- 11:30-11:50 神山 勉(名大)
バクテリオロドプシンのプロトン輸送サイクルにおける水分子の動き
- 11:50-12:10 前田章夫(イリノイ大)
バクテリオロドプシンの分子内水分子の役割
- 12:10-12:30 加茂直樹、橋 場剛、奈良敏文(北大) 菊川峰志、荒磯恒久(北大) 井原邦夫(名大)
*H.turkmenica*の光プロトンポンプ
- 12:30-12:50 辻本和雄(北陸先端大)
*Halorubrum*の Na^+/H^+ アンチポーター阻害剤耐性を持つ菌株の単離と光学的性質
- 12:50 閉会

多様な水素結合系と量子効果

2005年7月8日(金)~9日(土) 岡崎コンファレンスセンター

7月8日(金)

- 13:20-13:30 関谷 博(九大院理) Opening remarks
- 13:30-15:00 座長: 富宅喜代一
大島康裕(分子研)
ベンゼン-水クラスターの内部運動ダイナミクス: π -水素結合の分子間ポテンシャル決定を目指して
江幡孝之(広島大院理)
水素結合クラスターのX-H伸縮振動の緩和ダイナミクス
○ 迫田憲治、岡部智絵、西信之、関谷博(九大院理・分子研)
7-アザインドール2量体における励起状態2重プロトン移動ダイナミクス
- 15:15-16:45 座長: 藤井朱鳥
栗原和枝(東北大多元研)
固-液界面において水素結合により形成する分子マクロクラスター
○ 常行真司、赤木和人(東大院理)
凝集水に見られるプロトンリレー型反応
三枝洋之(横浜市立大)
DNA塩基の微細水和構造とダイナミクス
- 17:00-18:30 座長: 藤井正明
立川仁典(横浜市立大)
核・電子の量子効果を考慮した水和クラスターの理論的研究
富宅喜代一(神戸大院理)
溶解過程における水和構造の役割
○ 阿部肇・井上将彦(富山医薬大薬)
糖質との水素結合によりらせんを形成する人工ポリピリジン分子の開発

7月9日(土)

- 9:00-10:30 座長: 大島康裕
池田進(KEK)
中性子プローブの革新と水素量子効果
杉本秀彦(中大理工)
水素結合系プロトンの量子絡み合い状態
○ 牛山浩、高塚和夫(東大院総合文化)
水素移動反応における多次元・多体効果
- 10:45-12:45 座長: 大橋和彦
田原太平(理研)
水和電子からの共鳴ラマン散乱: e^- -水素結合系の振動スペクトル

○酒井誠、大森努、藤井正明（東工大資源研）
 溶液・気相両面から見た水素結合クラスターの振動緩和
 ○佐藤春実、尾崎幸洋（関西学院大理工）
 赤外分光法と量子化学計算法による生分解性ポリマーの C-H...O 水素結合の研究
 藤井朱鳥、宮崎充彦、榎本怜子、須原健一郎、水瀬健太、江幡孝之、三上直彦（東北大院理）
 大サイズクラスターカチオンにおける 3 次元水素結合ネットワークの成長

12:45-12:55 藤井正明（東工大資源研） Closing remarks

若手分子科学研究者のための物理化学研究会

2005 年 6 月 8 日（水） 分子科学研究所 研究棟302号室

13：20-13：30 挨拶
 13：30-17：00 講演
 13：30-14：10 「テラヘルツ電磁波の発生・検出とその応用」
 大阪大学レーザーエネルギー学研究センター 谷 正彦助教授
 14：10-14：50 「有機化学反応の量子化学シミュレーション」
 広島大学大学院理学研究科 相田美砂子教授
 15：00-15：40 「非平衡物理と分子科学」
 九州大学大学院理学研究院 吉森 明助教授
 15：40-16：20 「金属クラスター・金属ナノ粒子研究の基礎と最前線」
 分子科学研究所 佃 達哉助教授

凝縮系のコヒーレンス制御と超高速ダイナミクス

2006 年 3 月 2 日（木）～ 3 日（金） 岡崎コンファレンスセンター

3 月 2 日（木）

13：00-13：10 挨拶
 セッション 1 （13：10-15：10） 座長：香月浩之（分子研）
 13：10-13：50 宗像利明（大阪大） 吸着分子の振動励起状態
 13：50-14：30 大西 洋（神戸大） 四次元ラマン効果を利用した埋没界面の時間領域振動分光
 14：30-15：10 渡邊一也（分子研） 表面吸着種の振動コヒーレンスとコヒーレント表面フォノンのダイナミクス
 セッション 2 （15：40-17：40） 座長：渡邊一也（分子研）
 15：40-16：20 オリバーライト（北大） 超短光パルスレーザーによるコヒーレントフォノンの発生 / 検出
 16：20-17：00 北島正弘（物材機構） 半導体 / 半金属におけるコヒーレントフォノンダイナミクス
 17：00-17：40 中村一隆（東工大） フェムト秒時間分解 X 線回折によるコヒーレントフォノン測定

3 月 3 日（金）

セッション 3 （9：30-10：50） 座長：石岡邦江（物材機構）
 9：30-10：10 菱川明栄（分子研） 極短パルス強光子場による反応イメージング
 10：10-10：50 大森賢治（分子研） アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御
 セッション 4 （11：10-12：30） 座長：長谷宗明（物材機構）
 11：10-11：50 大槻幸義（東北大） 凝縮相における分子コヒーレントダイナミクスの最適制御シミュレーション
 11：50-12：30 萱沼洋輔（大阪府大） 超高速ポンプ・プローブ分光に見る波束振動と、フォノンの真空中に刻む分子メモリー
 セッション 5 （13：30-14：50） 座長：松田晃孝（分子研）
 13：30-14：10 岡本裕巳（分子研） プラズモンモードの光学的可視化とコヒーレンス
 14：10-14：50 中野秀俊（NTT） フェムト秒レーザープラズマ軟 X 線による光照射シリコンの時間分解 XAFS 計測
 セッション 6 （15：10-16：20） 座長：千葉 寿（分子研）
 15：10-15：40 恩田 健（東工大） 有機伝導体の超高速光誘起相転移とコヒーレンス制御の可能性
 15：40-16：20 岡本 博（東大） 有機半導体の光誘起相転移におけるコヒーレント振動とその制御
 16：20-16：30 まとめ

未来型分子触媒の創製

2005 年 12 月 6 日（火）～ 7 日（水） 岡崎コンファレンスセンター

12 月 6 日（火）

13:00-13:10 澤村正也（北大） 趣旨説明

13:10-14:55	表面分子触媒【part 1】 魚住泰広(分子研) 両親媒性高分子担持遷移金属触媒による水中有機変換反応 尾中篤(東大) ゼオライト極性ナノ空間での不安定化学種の安定貯蔵と反応加速 小林修(東大) 高分子カルセランド型触媒の開発
15:25-17:45	表面分子触媒【part 2】 海老谷幸喜(阪大) 超効率的化学変換に向けた固体表面への触媒機能の集積 原賢二(北大) 単結晶シリコン表面を基盤とする単分子層触媒の開発 和田健司(京大) シルセスキオキサンを活用した固体触媒の開発 水野哲孝(東大) 構造・機能の精密制御による環境調和型選択酸化触媒反応系の開発

12月7日(水)

9:00-10:10	クラスター分子触媒【part 1】 川口博之(分子研) 前周期金属ヒドリド錯体反応場による分子変換反応の開拓 永島英夫(九大) 高分子ゲル反応場はクラスター触媒のブレークスルーになるか?
10:40-12:25	クラスター分子触媒【part 2】 佃達哉(分子研) 金ナノクラスターの空気酸化触媒作用に対するサイズ効果 上野隆史(名大) 蛋白質超分子空間を用いたクラスター触媒制御 藤原尚(近大) 有機分子機能化金属ナノクラスターの界面制御とキラルナノ分子触媒
13:45-16:05	超分子触媒 江東林(分子研) デンドリマーを用いた水の光還元および水素発生 寺田真浩(東北大) 基質認識型 Brønsted 酸触媒による不斉合成 徳永信(北大) 均一系触媒反応における剛直なナノサイズ配位子の効果 笹井宏明(阪大) 不均一系不斉触媒構築の新機軸
16:05-16:10	櫻井英博(分子研) 総括・事務連絡

金属内包フラーレン研究の新展開——基礎と応用

2005年11月7日(月)～8日(火) 岡崎コンファレンスセンター

11月7日(月)

9:55-10:00	久保園芳博(岡山大院自然) 研究会の主旨説明
10:00-11:00	金属内包フラーレンの生成、構造評価【座長 加藤立久】 鈴木信三(首都大東京) フラーレン及び単層カーボンナノチューブの生成過程 菅井俊樹(名大院理) 気相移動能法を用いた金属内包フラーレンの構造測定と反応
11:00-12:00	金属内包フラーレンの分光学Ⅰ【座長 赤坂 健】 兒玉健(首都大東京) 磁気共鳴分光法からみた金属内包フラーレン 加藤立久(城西大理) 金属内包フラーレンの分子磁性
13:00-14:00	フラーレン物質の構造・物性・デバイス応用Ⅰ【座長 斎藤 晋】 Valery N. Khabashesku (Rice University) Functionalized fullerene materials: synthesis, characterization and Applications 岩佐義宏(東北大金研) 分子性固体としてのフラーレン
14:00-15:00	フラーレン物質の構造・物性・デバイス応用Ⅱ【座長 篠原久典】 斎藤 晋(東工大院理) 金属内包ナノチューブ系の電子構造と物性 Kosmas Prassides (University of Durham) Temperature- and pressure-induced negative thermal expansion in rare-earth fullerenes
15:30-17:00	新しい内包フラーレンの発見・合成と物性の発現【座長 岩佐義宏】 篠原久典(名大院理) 金属カーバイド内包フラーレンの発見とダイナミックス 村田靖次郎(京大化研) 内包フラーレン合成への有機化学的アプローチ 谷垣勝己(東北大院理) C ₆₀ および H ₂ @C ₆₀ を利用したフォノンと電子物性に関する研究
17:00-18:30	フラーレンの電界効果デバイス応用【座長 谷垣勝己】 藤原明比古(北陸先端大) フラーレン FET の輸送特性: サイズ・温度依存性から 近松真之(産総研) フラーレン誘導体のデバイス応用 久保園芳博(岡山大院自然) フラーレンを使った電界効果デバイスの可能性

11月8日(火)

9:00-10:00	金属内包フラーレン, フラーレン誘導体の材料化学【座長 村田靖次郎】 赤坂 健(筑波大 TARA セ) フラーレン科学の新展開: 金属内包フラーレンの化学 高口 豊(岡山大院環境) フラロデンドロンを用いた機能性材料開発
------------	--

10:30-12:00	金属内包フラーレンの分光学 II 【座長 鈴木信三】 見附孝一郎（分子研） 金属内包フラーレンの軟 X 線吸収とイオン化 日野照純（千葉大工・院自然） 複核金属内包フラーレンの光電子分光 山岡人志（理研播磨研） $\text{Pr}@\text{C}_{82}$ の Pr L_{III} 吸収端における高分解能共鳴 X 線非弾性散乱
13:00-14:30	フラーレンの構造，反応，ナノテク利用 【座長 日野照純】 永瀬 茂（分子研） 金属内包フラーレンの構造と電子状態 野内 亮（岡山大理、JST-CREST）フラーレンのナノマニピュレーション 井上 崇（豊田中研） C_2 分子内包金属内包フラーレン
14:30-15:30	金属内包フラーレンの精密構造と動的特性解明 【座長 永瀬 茂】 下谷秀和（東北大金研） $\text{La}_2@\text{C}_{80}$ における La イオンの運動 西堀英治（名大院工） 放射光粉末法による金属内包フラーレン構造研究の現状
15:30-15:40	見附孝一郎（分子研） 研究会のまとめと事務連絡

第 3 回分子科学研究所高磁場 NMR フォーラム「超高磁場 NMR によるナノサイエンス研究の最先端と展望」
2005 年 11 月 15 日（火） 分子科学研究所 山手 3 号館 2 階

10:00-10:10	Opening remarks
10:10-10:50	榛葉信久（味の素） ヘルペスウイルスプロテアーゼの二量体形成機構の解析と阻害剤の設計
10:50-11:30	津田正史（北大） LC-NMR と DOSY 法を用いた天然有機分子の構造解析と新規化合物探索ストラテジーの開発
13:00-13:40	菊地 淳（理化研／横浜市立大） 動植物の均一安定同位体標識化に基づく多次元 NMR メタボローム基盤技術構築
13:40-14:20	村田道雄（阪大） 脂質膜中に形成される分子集合体——NMR による立体配座と分子認識機構の解明
14:40-15:20	齋藤公児（新日本製鐵） 超高磁場固体 NMR で益々発展する無機材料分野での展望
15:20-16:20	伊倉光彦（トロント大学） 特別講演「蛋白質 - 蛋白質複合体の NMR 攻略法：転写制御因子を例として」
16:20-16:30	Closing remarks

生体における金属イオンの役割とその利用
2006 年 3 月 18 日（土）～ 20 日（月） 岡崎コンファレンスセンター

3 月 18 日（土）

	【座長：渡辺芳人（名大院理）】
13:30 - 14:00	田中健太郎（東大院理、JST さきがけ） バイオインスパイアード・テンプレートを利用した金属イオンの精密集積
14:00 - 14:30	山口和也（阪大院理） 金属酵素モデル錯体を利用した亜硝酸イオン還元系の構築
14:30 - 15:20	福住俊一（阪大院工） 特別講演「生体関連電子移動反応における金属イオンの役割とその利用」
	【座長：青野重利（岡崎統合バイオ）】
15:40 - 16:10	吉澤一成（九大先端物質化学研） Enzymatic Function of Dopamine b-monoxygenase Mediated by Cu(III)-oxo Species
16:10 - 16:40	伊東 忍（阪市大院理） 酸素運搬タンパク質ヘモシアニンによるフェノール類の酸化反応
16:40 - 17:10	樋口恒彦（名市大院薬） シトクロム P450 中心構造錯体の行う酵素機能に関連した O-O 結合開裂反応
17:10 - 17:40	小倉尚志（兵庫県大院生命） ミトコンドリア中のチトクロム c 酸化酵素の反応機構

3 月 19 日（日）

	【座長：城 宜嗣（理研播磨研究所）】
9:00 - 9:30	當舎武彦（岡崎統合バイオ） 珊瑚由来アレンオキサイド合成酵素における構造機能相関：類似した構造をもつカタラーゼとの比較
9:30 - 10:00	榊 利之（富山県大工） ビタミン D を代謝するシトクロム P450 の構造と機能
10:00 - 10:30	松井敏高（東北大多元研） ヘムオキシゲナーゼによるヘム分解機構

10:30 - 11:00	小林克彰（岡崎統合バイオ） ヘムを活性中心とするフェニルアセトアルドキシム脱水酵素の反応機構と軸配位子の効果 【座長：伊東 忍（阪市大院理）】
11:20 - 12:10	鈴木正樹（金沢大自然） 特別講演「金属錯体による酸素分子活性化の化学」 【座長：齋藤正男（東北大多元研）】
13:30 - 14:00	石森浩一郎（北大院理） 鉄代謝制御蛋白質におけるヘム結合様式とその機能発現の分子機構
14:00 - 14:30	小森博文（兵庫県大院生命） 一酸化炭素センサーとして働く転写制御因子 CooA の X 線結晶構造解析
14:30 - 15:20	桜井 弘（京都薬大） 特別講演「生体関連金属による血糖制御 パナジウムやジンク錯体による糖尿病治療は可能か？」 【座長：林 高史（阪大院工）】
15:40 - 16:10	菊地和也（阪大院工） 錯体化学を応用した生体機能可視化センサー分子のデザイン・合成・応用
16:10 - 16:40	秋山修志（JST さきがけ） 蛋白質の研究に X 線小角散乱が貢献できること
16:40 - 17:10	菊地晶裕（理研播磨研究所） BioXAS による金属タンパク質の構造解析
17:10 - 17:40	高妻孝光（茨城大院理工） Aromatic Ring Interaction in a Blue Copper Protein, Pseudoazurin

3月20日（月）

	【座長：樋口芳樹（兵庫県立大院生命）】
9:00 - 9:30	水谷泰久（神戸大・分子フォトサイエンスセンター） リガンド脱離に伴うヘムタンパク質の構造ダイナミクス：時間分解共鳴ラマン分光法による研究
9:30 - 10:00	廣田 俊（京都薬大、JST さきがけ） 一酸化炭素を利用した金属蛋白質の構造—機能相関の研究
10:00 - 10:30	上野隆史（名大・物質科学国際研究センター） 蛋白質複合化による金属錯体の精密反応制御
10:30 - 11:00	林 高史（阪大院工） ミオグロビン及びシトクロム P450cam の補欠分子ヘムにおけるプロピオン酸側鎖の役割解明

第 1 回ナノメディスン討論会～分子科学から医学まで（2nd MB-ITR）～
2006 年 2 月 12 日（日）～ 13 日（月） 岡崎コンファレンスセンター

2月12日（日）

13:00-13:10	宇理須恒雄	開会挨拶
13:10-13:50	Chiming Wei (Johns Hopkins Univ.)	Future Development of Nanomedicine: From Basic to Clinical
13:50-14:30	飯島澄男（名城大、NEC）	ナノカーボン材料の科学と応用
14:30-15:10	大内憲明（東北大院医学）	がん医療を目指した機能性ナノ粒子と一分子可視化技術の開発
15:30-16:00	片岡一則（東大院工学）	ナノバイオテクノロジーが拓く未来医療 ～ピンポイント診断・治療のためのナノデバイス設計～
16:00-16:30	梅澤喜夫（東大院理学）	細胞シグナルの可視化プローブ
16:30-17:00	濱口宏夫（東大院理学）	ラマン分光法による単一酵母生細胞の生物活性と分子イメージング
17:00-17:30	庭野道夫（東北大電通研）	半導体表面赤外分光で見る溶液中の生体分子
17:50-18:20	松本和子（早稲田大）	蛍光性希土類錯体が拓くバイオテクノロジー
18:20-19:00	井原康夫（東大医学）	γ セクレターゼの謎

2月13日（月）

9:00-9:40	和田昭允（理化研ゲノム科学融合研究センター）	“井の中の蛙”と“井の外の蛙”
10:00-10:30	永井健治（北大電子科学研）	生理機能イメージング技術とその医学応用
10:30-11:00	小澤岳昌（分子研）	細胞内オルガネラに局在するタンパク質の新たな可視化技術
11:00-11:30	水野 彰（豊橋技科大）	DNA- 分子を対象とする反応・計測のための要素技術の開発
11:30-12:00	富永真琴（岡崎統合バイオ）	温度感受性 TRP チャネルの構造・機能と生理学的意義
13:00-13:30	塩谷光彦（東大院理学）	精密金属配列に基づく分子機能創成——人工 DNA から動的ナノカプセルまで——
13:30-14:00	江 東林（分子研）	機能性 dendritic 高分子の設計と医薬分野への応用
14:00-14:30	竹中繁織（九州工大）	ガンを電気チップで調べる
14:30-15:00	湯田坂雅子（JST, NEC 基礎研）	カーボンナノホーンのドラッグキャリアー応用の可能性

15:00-15:30	芝 清隆（癌研究所）	ナノメディスンにおける人工タンパク質の役目
15:50-16:30	盛 英三（国立循環器病センター）	次世代循環器疾患治療を実現するためのナノメディスンプロジェクトの概要
16:30-17:00	宇理須恒雄（分子研）	膜タンパクバイオセンサーの開発と応用
17:00-17:30	菅原正雄（日大）	チャンネル型情報変換と生体分子センシング
17:30-18:00	井出 徹（阪大院生命機能）	チャネルタンパクの光学的、電気生理学的 1 分子測定
18:00-18:30	野田昌晴（基生研）	体液塩濃度恒常性制御の脳内機構
18:30	宇理須恒雄	閉会挨拶

(4) UVSOR 施設利用

（前期）

Ti 表面に生成する陽極酸化チタニア中の S の局所構造解析	大阪府立大学工学部	中平 敦
軟 X 線照射誘起発光を利用したセラミックス照射効果に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
L 殻 XANES による MFI 担持 Mo 触媒の還元活性種の評価	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
リチウムイオン電池正極材料であるポリアニオン系鉄化合物の電子構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	中山 将伸
XAFS 測定による金属フタロシアニン錯体の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
XANES による AlN 薄膜中のナノ構造解析	京都大学大学院工学研究科	田中 功
窒化物半導体の Al-K 内殻励起による可視・紫外発光 3	金沢大学工学部	直江 俊一
層状及びスピネル酸化物のアルミニウムの電子状態の解明	（独）産業技術総合研究所	小林 弘典
アミノ酸のイオウ K 殻および水晶のシリコン K 殻スペクトル測定	神戸大学発達科学部	中川 和道
希土類イオンを添加したイオン結晶の真空紫外分光	岐阜大学工学部	山家 光男
3d 遷移金属酸化物の真空紫外分光	東京大学大学院工学系研究科	十倉 好紀
極端紫外光照射による無機蛍光体の励起現象（2）	新潟大学工学部	太田 雅壽
ワイドバンドギャップを有する無機・有機絶縁材料の吸収・発光及び寿命測定	早稲田大学理工学部	大木 義路
真空紫外励起新規蛍光体の発光・励起スペクトル	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
複合フッ化物の真空紫外発光特性評価	分子科学研究所	猿倉 信彦
酸素高圧凝集相の紫外分光と励起状態の圧力効果	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	赤浜 裕一
圧電性 LGS 系物質の反射・発光・励起スペクトルの測定	信州大学工学部	伊藤 稔
誘電体結晶中の T1 ⁺ 型不純物センターの光学特性の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
窒化物半導体系紫外線受光素子の軟 X 線領域での受光特性研究	三重大学工学部	元垣内敦司
光収量によるアモルファス半導体の光誘起現象に関する研究	岐阜大学大学院工学研究科	林 浩司
希ガス固体表面に形成される水クラスターの光励起脱離機構の解明	学習院大学理学部	荒川 一郎
表面修飾単分散 Si ナノ粒子の高分解能光電子分光 II	神戸大学工学部	田中 章順
アルカリ金属吸着による鉄超薄膜の磁性変化	分子科学研究所	中川 剛志
Electronic structure of CeNiGe _{2-x} Si _x studied by Ce 4d-4f resonant and angle-resolved photoemission spectroscopy	分子科学研究所	木村 真一
BL-5U におけるユーザータイム前調整および整備作業	分子科学研究所	伊藤 孝寛
低次元 CDW 化合物の低励起エネルギー角度分解光電子分光	分子科学研究所	伊藤 孝寛
Fe-V-Al 合金および Zr-Al-Cu-Ni 合金の価電子帯電子構造 II	名古屋大学大学院工学研究科	曽田 一雄
UVSOR（FEL）光によるアミノ酸の絶対不斉合成	（独）科学技術振興機構	井上 佳久
ピスマスクラスターの相転移	富山大学理学部	池本 弘之
誘電体および f 電子系のミリ波分光	神戸大学大学院自然科学研究科	岡村 英一
赤外反射吸収分光による有機 / 金属界面の研究	分子科学研究所	櫻井 陽子
高周波誘電体の遠赤外スペクトル	名古屋工業大学しくみ領域環境材料教育類	大里 齊
高圧下テラヘルツ分光による強相関係のキャリアダイナミクス	分子科学研究所	木村 真一
BL6B の調整とテラヘルツ顕微鏡の設置	分子科学研究所	木村 真一
紫外及び可視用ナノフォトニック結晶の光学的特性評価に関する研究	三重大学工学部	元垣内敦司
コロジオン法とサリチル酸ソーダ法併用によるアミノ酸薄膜の吸収スペクトル	神戸大学発達科学部	中川 和道
AlN 及び AlGaN の発光励起と時間分解測定（II）	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
反応性スパッタリング法により作成した酸化物薄膜の VUV 吸収スペクトルの測定	明治大学理工学部	松本 皓永
Tm 及び Sm カルコゲナイドの可視・真空紫外反射スペクトル	神戸大学大学院自然科学研究科	難波 孝夫
真空紫外光励起による長残光性物質の熱発光・光伝導特性	福井工業高等専門学校	北浦 守
シンクロトロン光を用いた ZnTe 系半導体材料のエッチング特性	佐賀大学理工学部	西尾 光弘
XAFS 法を用いた金属酸化物中のリチウムの状態	福岡大学理学部	栗崎 敏

アモルファスカーボン系薄膜の構造解析	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所	神田 一浩
スピネル酸化物の粒子表面における電子構造の解明	(独)産業技術総合研究所	小林 弘典
リチウムイオン電池正極材料であるポリアニオン系鉄化合物の電子構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	中山 将伸
窒化物半導体の N-K 内殻励起による可視・紫外発光 2	金沢大学工学部	直江 俊一
フラーレン類の光電子分光	千葉大学工学部	日野 照純
角度分解紫外光電子分光法を用いたペンタセン分子超薄膜の分子配向と電子構造に関する研究	千葉大学工学部	奥平 幸司
バンド構造・薄膜構造からみたフタロシアニン薄膜に対するドーピング効果	名古屋大学物質科学国際研究センター	関 一彦
含イオウ平面 π 共役分子薄膜の角度分解光電子分光による研究	名古屋大学大学院理学研究科	金井 要
金属 / 有機物半導体界面の電子構造研究	島根大学総合科学研究支援センター	田中 仙君
Li-Ni 系複合酸化物の真空紫外光電子分光	愛媛大学工学部	宮崎 隆文
放射光を用いた有機薄膜中のフェルミ準位シフトの可能性	千葉大学大学院自然科学研究科	小野 正樹
角度分解光電子分光法による 6P 薄膜のバンド構造に関する研究	千葉大学工学部	上野 信雄
イオン運動量画像法を用いた分子の光イオン化の研究	分子科学研究所	彦坂 泰正
中性励起フォトフラグメント用検出器の性能評価	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	下條 竜夫
PZT 薄膜の光学特性計画	静岡大学電子工学研究所	MISTRIK, JAN
クラスレート化合物の真空紫外分光	分子科学研究所	櫻井 陽子
全光電子収量法による反射多層膜の位相評価の試み	東北大学多元物質科学研究所	江島 丈雄
層状 Co 酸化物の 3 次元電子構造と熱電能	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
ラミナー回析格子の回析効率測定	高エネルギー加速器研究機構	伊藤 健二
(後期)		
Ti 表面に生成する陽極酸化チタニア中の S の局所構造解析	大阪府立大学工学部	中平 敦
軟 X 線照射誘起発光を利用したセラミックス照射効果に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
L 殻 XANES による MFI 担持 Mo 触媒の還元活性種の評価	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
リチウムイオン電池正極材料であるポリアニオン系鉄化合物の電子構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	中山 将伸
XAFS 測定による金属フタロシアニン錯体の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
窒化物半導体の Al-K 内殻励起による可視・紫外発光 3	金沢大学工学部	直江 俊一
層状及びスピネル酸化物のアルミニウムの電子状態の解明	(独)産業技術総合研究所	小林 弘典
希土類イオンを添加したイオン結晶の真空紫外分光	岐阜大学工学部	山家 光男
極端紫外光照射による無機蛍光体の励起現象 (2)	新潟大学工学部	太田 雅壽
ワイドバンドギャップを有する無機・有機絶縁材料の吸収・発光及び寿命測定	早稲田大学理工学部	大木 義路
真空紫外励起新規蛍光体の発光・励起スペクトル	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
複合フッ化物の真空紫外発光特性評価	分子科学研究所	猿倉 信彦
圧電性 LGS 系物質の反射・発光・励起スペクトルの測定	信州大学工学部	伊藤 稔
誘電体結晶中の T1 ⁺ 型不純物センターの光学特性の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
窒化物半導体系紫外線受光素子の軟 X 線領域での受光特性研究	三重大学工学部	元垣内敦司
光収量によるアモルファス半導体の光誘起現象に関する研究	岐阜大学大学院工学研究科	林 浩司
希ガス固体表面に形成される水クラスターの光励起脱離機構の解明	学習院大学理学部	荒川 一郎
アルカリ金属吸着による鉄超薄膜の磁性変化	分子科学研究所	中川 剛志
Electronic structure of CeNiGe _{2-x} Si _x studied by Ce 4d-4f resonant and angle-resolved photoemission spectroscopy	分子科学研究所	木村 真一
BL-5U におけるユーザータイム前調整および整備作業	分子科学研究所	伊藤 孝寛
低次元 CDW 化合物の低励起エネルギー角度分解光電子分光	分子科学研究所	伊藤 孝寛
Fe-V-Al 合金および Zr-Al-Cu-Ni 合金の価電子帯電子構造 II	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
UVSOR (FEL) 光によるアミノ酸の絶対不斉合成	(独)科学技術振興機構	井上 佳久
ビスマスクラスターの相転移	富山大学理学部	池本 弘之
誘電体および f 電子系のミリ波分光	神戸大学大学院自然科学研究科	岡村 英一
赤外反射吸収分光による有機 / 金属界面の研究	分子科学研究所	櫻井 陽子
高周波誘電体の遠赤外スペクトル	名古屋工業大学しくみ領域環境材料教育類	大里 齊
高圧下テラヘルツ分光による強相関係のキャリアダイナミクス	分子科学研究所	木村 真一
BL6B の調整とテラヘルツ顕微鏡の設置	分子科学研究所	木村 真一
紫外及び可視用ナノフォトニック結晶の光学的特性評価に関する研究	三重大学工学部	元垣内敦司
コロジオン法とサリチル酸ソーダ法併用によるアミノ酸薄膜の吸収スペクトル	神戸大学発達科学部	中川 和道
AlN 及び AlGaIn の発光励起と時間分解測定 (II)	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊

Tm 及び Sm カルコゲナイドの可視・真空紫外反射スペクトル シンクロトロン光を用いた ZnTe 系半導体材料のエッチング特性 XAFS法を用いた金属酸化物中のリチウムの状態 スピネル酸化物の粒子表面における電子構造の解明 リチウムイオン電池正極材料であるポリアニオン系鉄化合物の電子構造解析 窒化物半導体の N-K 内殻励起による可視・紫外発光 2 フラーレン類の光電子分光 角度分解紫外光電子分光法を用いたベンタセン分子超薄膜の分子配向と電子構造に関する研究 バンド構造・薄膜構造からみたフタロシアニン薄膜に対するドーピング効果 含イオウ平面 π 共役分子薄膜の角度分解光電子分光による研究 Li-Ni 系複合酸化物の真空紫外光電子分光 放射光を用いた有機薄膜中のフェルミ準位シフトの可能性 角度分解光電子分光法による 6P 薄膜のバンド構造に関する研究 改良型タルサイト年度の局所構造解明 水溶液表面での光イオン化 Xe 放電蛍光ランプに適した真空紫外励起用蛍光体 $YAl_3(BO_3)_4$ の励起発光特性 全光電子収量法による反射多層膜の位相評価 $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ の電子構造の三次元性の解明 デンドリマー分子カプセル内包金属ナノクラスターの光電子分光 遠赤外分光法による白金クラスターの電子状態の解明	神戸大学大学院自然科学研究科 佐賀大学理工学部 福岡大学理学部 (独)産業技術総合研究所 東京工業大学大学院理工学研究科 金沢大学工学部 千葉大学工学部 千葉大学工学部	難波 孝夫 西尾 光弘 栗崎 敏 小林 弘典 中山 将伸 直江 俊一 日野 照純 奥平 幸司
Optical investigation on Ca_2RuO_4 under pressures 反応性スパッタリング法により作成した酸化物薄膜の VUV 吸収スペクトルの測定 Sr 欠損及び Gd をドーブした $SrAl_2O_4:Eu$ セラミックスの長残光特性 UV Reflectance Spectroscopy of Ta, Ni and NiFe Films イオン運動量画像法を用いた分子からの負イオン生成の研究 機能性アモルファスカーボン薄膜の構造解析 有機物半導体 / 金属界面修飾による電子状態への影響の研究 ラミナー回析格子の回析効率測定 エピタキシャル磁性薄膜の紫外磁気円二色性測定 HCl 分子の K 殻電離しきい値近傍における PCI 効果 強相関物質の真空紫外分光 深紫外～低エネルギー軟 X 線領域におけるダイヤモンド検出器の性能評価	名古屋大学物質科学国際研究センター 名古屋大学大学院理学研究科 愛媛大学工学部 千葉大学大学院自然科学研究科 千葉大学工学部 大阪府立大学工学部 九州大学大学院総合理工学研究院 関西学院大学理工学部 東北大学多元物質科学研究所 名古屋大学エコトピア科学研究所 神戸大学工学部 北陸先端科学技術大学院大学材料科学研究科 分子科学研究所 明治大学理工学部 福井工業高等専門学校 静岡大学電子工学研究所 分子科学研究所 兵庫県立大学高度産業科学技術研究所 島根大学総合科学研究支援センター 高エネルギー加速器研究機構 分子科学研究所 分子科学研究所 神戸大学大学院自然科学研究科 大阪大学大学院工学研究科	関 一彦 金井 要 宮崎 隆文 小野 正樹 上野 信雄 中平 敦 原田 明 小笠原一禎 江島 丈雄 竹内 恒博 田中 章順 三谷 忠興 木村 真一 松本 皓永 北浦 守 青山 満 彦坂 泰正 神田 一浩 田中 仙君 伊藤 健二 中川 剛志 繁政 英治 岡村 英一 伊藤 利道

(5) 施設利用

分子制御レーザー開発研究センター

(前期)

芳香族有機分子の高分解能超音速ジェット分光 2 波長蛍光 dip 分光法を用いたローダミン 6G の蛍光消光過程の研究	京都大学大学院理学研究科 東京工業大学資源化学研究所	馬場 正昭 渡邊 武史
--	-------------------------------	----------------

(後期)

芳香族有機分子の高分解能超音速ジェット分光 パルスレーザーと超音速ジェットを用いた多原子分子の振電バンドの分光 円二色性スペクトルによる立体規則性置換ポリアセチレンの溶液中における高次構造解析 Nd:YAG レーザーを用いた Z スキャン法による新光学材料の評価	京都大学大学院理学研究科 神戸大学分子フォトサイエンス研究センター 北海道大学大学院工学研究科 九州大学大学院システム情報科学研究院	馬場 正昭 笠原 俊二 馬渡 康輝 中田 芳樹
--	---	----------------------------------

分子スケールナノサイエンスセンター

(前期)

ポルフィリンオリゴマーの合成と構造 金属イオンのホメオスタシスを実現する分子機構 アザポルフィリンおよび関連化合物の鉄錯体の磁気特異性の解明	愛媛大学総合科学研究支援センター 金沢大学大学院自然科学研究科 千葉大学大学院薬学研究院	宇野 英満 櫻井 武 根矢 三郎
--	--	------------------------

相溶性ブロック共重合体の動的不均一性に関する研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	山本 勝宏
希土類マンガナイトの物性研究	豊橋技術科学大学	佐藤 裕久
新規π系拡張ポルフィリン誘導体の合成と構造に関する研究	愛媛大学理学部	小野 昇
希土類置換型磁性薄膜の磁気特性の評価	名古屋工業大学セラミックス基盤研究センター	安達 信泰
有機分子および金属錯体のX線結晶構造解析	兵庫県立大学大学院工学研究科	北村 千寿
有機金属含有タンパク質における金属イオンの構造と電子状態の解析	名古屋大学大学院理学研究科	中島 洋
新規なキャリア輸送材料の合成と電子デバイスへの応用	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 克彦
金属酵素活性中心モデル錯体の構造と機能	名古屋工業大学大学院工学研究科	奥村 健志
高分子固体表面における無触媒・無溶媒ラジカル重合反応	静岡県立大学環境科学研究所	坂口 真人
ESRによる複核金属内包フラーレンのスピン状態の研究	首都大学東京都市教養学部	児玉 健
シアノバクテリア由来光化学系II複合体の単結晶EPR研究	関西学院大学理工学部	河盛阿佐子
集積型金属錯体によるナノチャンネルの構築	名古屋工業大学大学院工学研究科	伊藤 光宏
コバルト錯体[Co(C ₁₂ -terpy) ₂](BF ₄) ₂ の相転移現象	九州大学大学院理学研究院	速水 真也
希土類元素を含むZn基P型正二十面体準結晶及びその関連結晶の磁性	北海道大学大学院工学研究科	柏本 史郎
温度に応答してナノ細孔を変化させる動的ニッケル錯体の合成	静岡大学理学部	近藤 満
食品の加工工程中に生成する機能性成分の精製、単離と構造解析	名古屋経済大学人間生活科学部	長島 万弓
イオン結晶中の希土類イオンの電子スピン共鳴法による電子状態の解明	岐阜大学工学部	山家 光男
有機化合物の構造決定	愛知教育大学教育学部	日野 和之
(後期)		
ポルフィリンオリゴマーの合成と構造	愛媛大学総合科学研究支援センター	宇野 英満
非対称性ABA型トリブロック共重合体の短い末端A鎖のB成分への相溶化挙動の観察	名古屋工業大学大学院工学研究科	山本 勝宏
高分子固体表面における無触媒・無溶媒ラジカル重合反応および生成物の分子運動性について	静岡県立大学環境科学研究所	坂口 真人
温度に応答してナノ細孔を変化させる動的ニッケル錯体の構造変化に関する研究	静岡大学理学部	近藤 満
有機金属含有タンパク質における金属イオンの構造と電子状態の解析	名古屋大学大学院理学研究科	中島 洋
有機分子及び金属錯体のX線結晶構造解明	兵庫県立大学大学院工学研究科	北村 千寿
有機化合物の構造決定	愛知教育大学教育学部	日野 和之
イオン結晶中の希土類イオンの電子スピン共鳴法による電子状態の解明	岐阜大学工学部	山家 光男
希土類永久磁石薄膜の垂直磁気異方性	名古屋工業大学セラミックス基盤研究センター	安達 信泰
金属含有酵素および蛋白質を模倣したバイオミメティック錯体の合成とその機能	名古屋工業大学大学院工学研究科	奥村 健志
Zn-Sc基正二十面体相準結晶中における4f希土類元素の磁性	北海道大学大学院工学研究科	柏本 史郎
集積型金属錯体によるナノチャンネルの構築	名古屋工業大学大学院工学研究科	伊藤 光宏
新規なキャリア輸送材料の合成と電子デバイスへの応用	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 克彦
可逆な構造変化を示す酸化還元応答性ホストの開発	信州大学理学部	太田 哲
Mn ₁₂ 誘導体の磁気特性の研究	広島大学大学院理学研究科	谷本 能文
ゴマの登熱過程に生成する機能性成分の精製、単離と構造解析	名古屋経済大学人間生活科学部	長島 万弓
装置開発室		
(前期)		
低次元系機能性材料開拓のための固体NMRプローブ技術開発	九州大学大学院理学研究院	北川 宏
(後期)		
レーザー電場により配向した極低温孤立分子の電子運動量分光装置の開発	東北大学多元物質科学研究所	高橋 正彦
複合機能性を有する分子性伝導体の結晶作製のための定電流電源の製作	大阪府立大学大学院理学系研究科	藤原 秀紀
神経軸索の軸索ガイダンス分子に対する応答性の解析	基礎生物学研究所	野田 昌晴
高等植物における表皮細胞の形態形成	基礎生物学研究所	星野 敦
衝突アライメント配向分子ビーム発生用超小型メカニカル速度選択デスクの開発	大阪大学大学院理学研究科	笠井 俊夫
飛行時間型メカニカル速度選択装置の特殊駆動電子回路の開発	大阪大学大学院理学研究科	岡田美智雄
新規な交流変調型単色吸光度測定装置に用いる電子回路の開発	大阪大学大学院理学研究所	蔡 徳七
超高真空中で試料交換可能な極低温用保持機構の開発	千葉大学工学部	日野 照純
錯体作成用水熱合成容器の制作	広島大学大学院理学研究科	秋田 素子

計算機利用

フラーレンやカーボンナノチューブの構造欠陥の分子動力学計算
 密度汎関数法を用いた半導体薄膜の電子状態と輸送特性の第一原理的研究
 分子内および分子間電荷移動の分子軌道法による研究
 生体分子の機能発現反応に関する理論的研究
 分子，生物，表面の量子化学：励起状態と化学反応
 複合電子系の構造，電子状態，反応過程，溶媒和構造に関する理論的研究
 化学反応の分類および分子設計に関する理論的研究
 生体分子の構造と機能に関する理論的研究
 遷移金属化合物および合金の電子構造
 ナノバイオ物質の電子状態・構造・機能の相関
 量子化学計算によるタンパク質の *insilico* 構造・機能予測
 有機ラジカル電子状態の *ab initio* MO 計算
 活性アルキル基の反応性の分子軌道法による検討
 分子の励起状態とその動的挙動の研究
 鎖状化合物の安定化効果に関する理論研究
 励起状態を生成するペニングイオン化の生成過程
 低次元強相関電子系物質の特異な電子状態に関する数値的研究
 気相および液相における化学反応の理論的研究
 DNA 素子自己組織化の第一原理計算
 微小半導体における量子干渉効果及び電子相関
 層状人工格子における磁気円二色性
 分子軌道法による反応予測を基盤とする新有機反応の開発
 熱化学反応及び光化学反応に関する理論的研究
 化合反応の量子ダイナミクスに関する理論的研究
 第一原理電子構造理論の拡張と物質設計
 分子軌道計算による有機反応設計および分子構造設計のための電子構造予測
 気相及び凝縮相における光化学反応に関する理論的研究
 分子の電子状態と化学反応のポテンシャル面の理論的研究
 フラーレン・ナノチューブ系の分子物性と固体物性の総合研究
 励起状態とその緩和過程に関する理論的研究
 金属原子・分子相互系の幾何構造・電子構造の解明とポテンシャル曲面の解析
 遷移系イオンを含む化合物の反応制御に関する理論研究
 金属錯体の構造・反応・電子遷移に関する理論的研究
 新規なケイ素化合物の *ab initio* 分子軌道法による研究
 大環状人造蛋白質における両極性イオン捕捉機構の第一原理電子論とホスト・ゲスト・ナノ科学
 種々の分子及び分子集合体の赤外・ラマン強度と電子・振動相互作用および分子間相互作用
 核酸合成における保護・脱保護法の開発
 二酸化炭素・水負イオン系のミクロ溶媒和のメカニズム
 量子化学計算によるナノ科学へのアプローチ
 固体触媒および生体分子における励起ダイナミクスと反応メカニズムに関する理論的研究
 溶媒和クラスターの微視的構造と反応ダイナミクスの研究
 ナノネットワーク炭素系物質の構造と電子状態についての第一原理的研究
 分子動力学シミュレーションに基づく自由エネルギー計算法による蛋白質と核酸の機能と物性の物理化学的研究
 環境関連有機化学および有機金属化学反応の設計および開発
 機能性有機材料の電子物性解析に関する理論的研究
 高分子濃厚系における 1 本の高分子鎖の動的性質
 穴のあいたフラーレンの構造および分子包接特性に関する理論的研究
 拡張アンサンブルシミュレーションによる高分子系の研究
 シッフ塩基遷移金属錯体を触媒とする不斉反応の理論的解析
 蛋白質の動的構造と機能の解析
 分子軌道計算による含フッ素有機化合物の反応機構解明

横浜市立大学総合理学研究科
 慶応義塾大学理工学部
 神奈川大学理学部
 千葉大学大学院薬学研究科
 京都大学大学院工学研究科
 京都大学大学院工学研究科
 岐阜大学工学部
 広島大学大学院理学研究科
 名古屋大学大学院工学研究科
 筑波大学物理学系
 東京工業大学大学院生命理工学研究科
 奈良女子大学理学部
 福岡大学薬学部
 広島大学大学院理学研究科
 東京大学大学院総合文化研究科
 新潟大学理学部
 千葉大学理学部
 京都大学大学院理学研究科
 鳥取大学工学部
 山形大学教育学部
 奈良県立医科大学医学部
 東京大学大学院理学系研究科
 広島大学大学院理学研究科
 東京大学大学院工学系研究科
 東京大学大学院薬学系研究科
 秋田大学工学資源学部
 名古屋大学大学院情報学研究科
 東京工業大学大学院理工学研究科
 慶應義塾大学理工学部
 東北大学大学院理学研究科

 岐阜大学地域科学部
 お茶の水女子大学理学部
 群馬大学工学部
 早稲田大学理工学部

 静岡大学教育学部

 琉球大学教育学部
 東京大学大学院総合文化研究科
 九州大学先端物質化学研究所
 早稲田大学理工学部

 神戸大学理学部
 筑波大学物理学系
 弘前大学理工学部

 茨城大学理学部
 京都大学大学院工学系研究科
 慶應義塾大学理工学部
 名古屋大学大学院環境学研究科
 慶應義塾大学理工学部
 慶應義塾大学理工学部
 横浜市立大学大学院総合理学研究科
 東京工業大学大学院理工学研究科

岡田 勇
 山内 淳
 田仲 二郎
 星野 忠次
 中辻 博
 榊 茂好
 酒井 章吾
 相田美砂子
 森永 正彦
 押山 淳
 櫻井 実
 竹内 孝江
 新矢 時寛
 岩田 末廣
 友田 修司
 徳江 郁雄
 太田 幸則
 加藤 重樹
 石井 晃
 野々山信二
 平井 國友
 中村 栄一
 田林 清彦
 山下 晃一
 藤原 毅夫
 大和田智彦
 天辰 禎晃
 古賀 伸明
 斎藤 晋
 薮下 聡
 大野 公一

 和佐田裕昭
 鷹野 景子
 工藤 貴子
 武田京三郎

 鳥居 肇

 安藤 香織
 永田 敬
 吉澤 一成
 中井 浩巳

 富宅喜代一
 岡田 晋
 斎藤 稔

 森 聖治
 田中 一義
 萩田 克美
 岩松 将一
 光武重代理
 池野 健人
 木寺 詔紀
 三上 幸一

次世代 LSI 用高誘電率絶縁膜とそのゲート電極用金属材料の第一原理計算による設計	筑波大学大学院数理物質科学研究科	白石 賢二
第一原理分子動力学法による液体金属及び液体半導体の物性研究	(独)産業技術総合研究所	森下 徹也
フェレドキシンタンパク活性部位の電子状態および磁性	金沢大学理学部	小田 竜樹
ab initio MO 法による芳香族クラスターの研究	日本原子力研究所	佐伯 盛久
P- セレクチンやヒトインフルエンザ認識される Neu5Aca-3Galb の理論的研究	岐阜大学大学院連合農学研究科	澤田 敏彦
光酸化還元反応によるプロトトンネルの制御を利用した新規光スイッチ分子の理論設計	九州大学大学院総合理工学研究院	三好 永作
生体超分子の立体構造変化と機能	東京大学分子細胞生物学研究所	北尾 彰朗
半導体ナノ構造における酸化反応の理論的研究	三重大学工学部	秋山 亨
第一遷移系列金属イオンを中心とする配位化合物の反応における d 電子の効果に関する理論的研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	和佐田祐子
タンパク質・生体関連巨大分子系の量子化学計算に基づくアプローチ	(独)産業技術総合研究所	石田 豊和
分子軌道計算を基盤とする単核及び二核金属不斉触媒の設計と開発	立教大学理学部	山中 正浩
ナノサイズ膜孔を通過する荷電高分子 DNA の分子動力学研究	核融合科学研究所	田中 基彦
低原子価六族金属カルボニル錯体を触媒とする炭素骨格構築反応の機構解明	東京工業大学大学院理工学研究科	岩澤 伸治
拡張アンサンブル法による蛋白質分子の折り畳みシミュレーション	名古屋大学大学院理学研究科	岡本 祐幸
固体表面上の生体分子認識反応系の構築と構造解析	分子科学研究所	宇理須恒雄
胆汁酸ミセルの MD シミュレーション	大分大学教育福祉学部	中島 俊男
計算機実験による液体の相分離ダイナミクス	東北大学大学院理学研究科	福村 裕史
クラスター電子構造と幾何構造	分子科学研究所	西 信之
導電性有機物質の構造と物性の研究	分子科学研究所	薬師 久弥
有機導体の電子物性とスピン構造	分子科学研究所	古川 貢
量子および古典擬集系に対する計算機シミュレーション	分子科学研究所	岡崎 進
偏光赤外吸収分光法を用いたアミロイドフィブリルの分子構造の解明	岡崎統合バイオサイエンスセンター	平松 弘嗣
内部官能基を持つかご状化合物の分子動力学	分子科学研究所	永田 央
ボウル型共役化合物の物性調査	分子科学研究所	櫻井 英博
界面非線形分光の理論	分子科学研究所	森田 明弘
シトクロム c 酸化酵素 Cu _B サイトモデル錯体の紫外共鳴ラマンスペクトル	岡崎統合バイオサイエンスセンター	長野 恭朋
QM/MM 法によるタンパク質全原子計算から振動スペクトルを解析する	東北大学多元物質科学研究所	海野 雅司
数値シミュレーションによる分光スペクトルの計算	京都大学大学院理学研究科	谷村 吉隆
金属錯体に関する理論的研究	静岡理工科大学理工学部	関山 秀雄
分子内水素結合の研究	弘前大学理工学部	須藤 進
有機分子を用いた単分子素子の量子輸送特性の理論的研究	東京大学大学院理学系研究科	田上 勝規
ウラシル系分子に対するシクロデキストン包接効果に関する研究	茨城大学理学部	寺阪 利孝
非線形量子系におけるソリトンとカオス	鈴鹿国際大学国際学部	大野 稔彦
化学反応の ab initio 計算による研究	愛媛大学理学部	長岡 伸一
有機分子の電子励起状態における大振幅振動ポテンシャルの分子軌道計算	北海道大学大学院理学研究科	竹内 浩
表面・薄膜・クラスターの電子状態と反応過程	姫路工業大学理学部	島 信幸
分子磁性体の分子軌道法による理論解析及び新規手法の開発	大阪大学大学院理学研究科	山口 兆
溶液内化学反応の理論的研究	名古屋大学大学院理学研究科	大峰 巖
金属クラスターイオンの幾何・電子構造の反応機構	豊田工業大学	近藤 保
分子シミュレーションによる分子集合体の研究	名古屋文理大学情報文化学部	本多 一彦
静電ポテンシャルフィット法を用いた原子電荷パラメーターの自動決定法の開発	北里大学理学部	米田 茂隆
モデルペプチドの二次構造安定性に対する溶媒効果の分子論的研究	福岡大学理学部	山口 敏男
電子状態計算によるタンパク質・低分子間相互作用解析	京都大学大学院薬学研究科	仲西 功
転写因子 CREB の CRE 配列認識機構におけるマグネシウムイオンの役割	湖北短期大学情報メディア学科	小田井 圭
円偏光軟 X 線のアミノ酸への作用に関する理論的研究	神戸大学大学院人間科学研究科	沖山 佳生
ベンザインを用いる有機合成反応における機構解明	東京工業大学大学院理工学研究科	鈴木 啓介
分子のひずみを介した有機固相反応の計算機シミュレーション	慶應義塾大学理工学部	ファジャール ブラディプタ
蛋白質の構造機能相関計算	立命館大学情報理工学部	高橋 卓也
置換アントラセンの基底・励起状態に関する量子化学計算	星薬科大学薬学部	坂田 健
イオンの選択と透過に果たす水のナノ構造と機能の理論的研究	関東学院大学工学部	杉本 徹
タンパク質励起状態計算の新技术	名古屋大学大学院理学研究科	川口 一朋
Photoactive Yellow Protein の時間分解蛍光スペクトルの解析	名古屋大学大学院理学研究科	小池 香奈
ヘモグロビンの構造と機能の研究	東海大学総合科学技術研究所	妹尾 康喜

量子ダイナミクスによる動的物性量の理論的研究	大阪大学大学院基礎工学研究科	中野 雅由
非経験的分子軌道法によるチタン表面酸化過程	岡山理科大学大学院理学研究科	中川 幸子
古典スピン系の分子動力学計算による物理量の計算	大阪教育大学教育学部	喜綿 洋人
金属タンパク質の性質に関する量子化学計算	岡崎統合バイオサイエンスセンター	北川 禎三
フッ素を含むフェロモン活性物質の分子配座と生理活性との関係	鳥取大学工学部	早瀬 修一
非経験的分子軌道計算による有機ラジカルの電子状態の研究	広島大学大学院工学研究科	太田 信昭
グラフェンシートにおける原子空孔の第一原理計算	金沢大学大学院自然科学研究科	斎藤 峯雄
生命関連星間分子の生成機構に関する理論的研究	明治学院大学法学部	高橋 順子
梯子形ハロゲン架橋白金錯体の光学伝導度の第1原理計算	高エネルギー加速器研究機構	岩野 薫
酸化クロム結晶表面上に吸着した水分子の量子化学計算	岡山理科大学理学部	橋高 茂治
新規ジオキセタンおよびジオキセタン型化学発光性分子創製のためのモデリング	東洋大学生命科学部	和田 直久
有機ナノ分子の溶媒中における熱力学的安定性の理論的研究	分子科学研究所	丸山 豊
気相および星間空間での多原子分子が関与する化学反応の量子化学的・反応動力学的研究	京都大学福井謙一記念研究センター	石田 俊正
有機反応の経路と微視的機構	立教大学理学部	山高 博
Rigged QED 理論および領域密度汎関数理論計算プログラムの開発	京都大学大学院工学研究科	立花 明知
分子衝突の動力学の理論的研究	日本大学理工学部	中村 正人
低配位型ホウ酸アニオン種ボラニドの合成に向けた分子デザインと生成物の物性解明	東京大学大学院工学系研究科	山下 誠
ハロゲン架橋金属錯体の電子状態シミュレーション	分子科学研究所	前島 展也
アセチレン架橋を有するドナー・アクセプター・ポルフィリンの非線形光学特性	京都大学大学院理学研究科	勝田 貴之
量子科学計算に基づく分子認識と自己組織化に関する理論的研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	麻田 俊雄
遷移金属錯体触媒反応に関する理論研究	分子科学研究所	木村 将浩
分子の電子状態と反応動力学に関する理論的研究	九州大学情報基盤センター	南部 伸孝
胆汁酸ミセルのMDシミュレーション	大分大学教育福祉学部	中島 俊男
計算機実験による液体の相分離ダイナミクス	東北大学大学院理学研究科	福村 裕史
凝縮系のダイナミクスと化学反応の理論研究	分子科学研究所	斉藤 真司
分子の電子状態とスペクトルについての ab initio 計算	大阪市立大学理学系研究科	西本 吉助
2,9-ジクロロキナクリドンの黒色相の電子構造	横浜国立大学大学院工学研究院	千住 孝俊
分子多体系における量子移動化学過程の理論的研究	京都大学理学部	安藤 耕司

2-9-3 共同利用研究実施件数一覧

分子科学研究所共同利用研究実施一覧

年度 項目	'76～'98		'99		'00		'01		'02		'03		'04		'05		備考
	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	
課題研究	78	617	1	5	2	12	7	41	5	36	5	70	3	33	1	13	人数： 登録人数
協力研究	2,804	3,141	115	212	119	249	100	223	125	253	101	246	100	265	96	225	"
招へい 協力研究	186	186	0	0	2	3	5	6	1	1	1	1	0	0	0	0	"
所長 招へい	1,850	1,850	321	321	264	264	385	3857	313	313	308	308	160	160	63	63	人数： 旅費支給者
研究会	224	3,152	12	194	13	276	6	129	11	332	8	229	13	304	10	205	"
施設利用 I	1,372	2,953	49	135	54	142	49	139	63	188	54	150	55	149	53	108	件数： 許可件数 人数： 許可人数
電子計算機 施設利用 (施設利用II)	3,295	9,951	167	654	156	631	144	584	134	558	120	525	154	581	132	511	"
合計	9,809	21,850	665	1,521	610	1,577	696	1,507	652	1,681	598	1,529	485	1,492	355	1,125	
経費	382,340		30,898		32,080		30,994		37,896		30,794		-		-		千円

* 施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用

('05 年度の数値は、2005.12 末現在)

分子科学研究所UVSOR共同利用研究実施一覧

年度 項目	'85～'98		'99		'00		'01		'02		'03		'04		'05		備考
	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	件数	人数	
課題研究	37	412	1	11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	人数： 登録人数
協力研究	304	1,074	8	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
招へい 協力研究	70	70	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	"
研究会	28	409	1	26	1	29	1	13	0	0	1	51	1	16	0	0	人数： 旅費支給者
施設利用	1,407	6,966	150	699	160	820	157	707	160	805	129	715	128	582	125	578	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	1,846	8,931	162	773	161	849	158	720	160	805	130	766	129	598	125	578	
経費	154,909		12,951		16,441		16,512		15,780		13,884		-		-		千円

('05 年度の数値は、2005.12 末現在)

2-10 学術創成研究（新プログラム）

学術創成研究費

「新しい研究ネットワークによる電子相関係の研究

——物理と化学の真の融合を目指して——」

20世紀後半のエレクトロニクス産業を支えた半導体は、電子の遍歴性に基いた物性を基盤としているが、分子の持つ電子の局在性とこの遍歴性の中間的な性質を持つ物質群は「多様な電子相関係物質」として近年物理の分野で大きなトピックとなっている。電子間の相互作用が強くなると、電子の運動はお互いに強く相関するようになる。これを強電子相関係と呼んでいる。この強相関は、外部パラメーターのわずかな変化によって様々な相を生じ、これが多機能性の起源となっている。このため、「強電子相関」の概念は次世代の材料開発に不可欠と言われている。これは、ナノ構造体のように電子相関を恣意的に強めた系で本質的な役割を示す。物理学と化学は、「実空間であれ運動量空間であれ、各々の旧来のやり方では表現できない電子系」を未開拓領域として持っており、それぞれ協力・融合して、次世代の物質科学の基礎を支える新概念を構築する必要性が強く認識されるようになった。このような背景から、我が国の物性科学に関連する五つの研究所、即ち分子科学研究所の他に北から、東北大学金属材料研究所、高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所、東京大学物性研究所、京都大学化学研究所が一体となって上記の学術創成研究を実行している。

まず、共同研究体制を有形の形で実現するために、5カ所の研究室間ネットワーク“コラボラトリー”の構築が重点課題の一つとして取り上げられた。新しい研究協力システムである“コラボラトリー”とは、各研究室の持つ資源（ブレイン、ハードウェア、ソフトウェア）を研究ネットワーク上の研究室の間で共有化することにより、各研究室があたかも隣にあるかのような研究環境を提供するものである。具体的には、高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所の精密構造解析システムを分子研のオフィスからマシンの状況と計測データを表示する2台のパソコンの画面を通して、制御と計測を行うものである。分子研では、中村敏和助教授によってこのシステムの運用が実現されている。

本学術創成研究では、昨年度から班編制を修正して、主として強相関係の電気伝導性や磁性を取り扱う第一班、ソフトマテリアルやナノシステム、界面や複合物質系を対象として5研究所間のネットワークを利用した物理学と化学の融合によって初めて可能となる精密構造解析を行う第二班、高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所を中心としてコラボシステムの活用とヒューマンインターフェースの益々の充実を図る第三班から構成されている。

今年度は、8月26日に第1回総括班等会議を理研東京事務所で、10月6日と7日に蒲郡で第6回若手の会を開催した。更に、10月18日から19日にテーマ会議を、これに併せて、18日に第2回総括班等会議を開催した。最後の全体会議は、1月30日から2月1日の3日間、名鉄犬山ホテルで開催され、参加者全員が成果発表を行った。1月30日には、第3回総括班等会議が開催され、成果の総括と今後の方針が話し合われた。

このプロジェクトは物理と化学の研究者が多く集まり、共通した対象から周辺の対象に至る広範囲の問題を共に議論しあい更に多くの共同研究の成果が生まれ、この広い分野の進展に大きな貢献があったと言える。このような異分野ネットワークの形成が科学の発展に必要であることが痛感された。

2-11 ナノサイエンス支援

2-11-1 ナノサイエンス支援「分子・物質総合合成・解析支援プログラム」による協力研究・施設利用について

分子科学研究所では文部科学省のナノテクノロジー総合支援プロジェクトを受託し、その一環として、分子スケールナノサイエンスセンターや関連する研究系を中心として、ナノ物質創製・物性評価・構造決定・ナノスケール分子観察・分子物質操作加工などを行うための8種の装置群の開放と理論計算支援のプログラムを実行している。今年度は、利用申請課題数も130件を超え、多くのナノサイエンス研究者に参加して頂いている。17年度から920MHz核磁気共鳴吸収装置が共同利用に供され、また、炭素や窒素の軽元素では初めての固体プローブが導入された。

表1に各装置群とプログラムを示す。支援は、担当研究者と共に研究を進めてゆく協力研究と、装置に関する十分な知識と経験を有する研究者が随時の申し込みによって当該装置を利用する施設利用の何れかの申し込みを通して行われる。研究所ホームページ(<http://www.ims.ac.jp/joint/>)にある公募要領に沿って通常の共同研究と同じように年2回の公募を行い、分子・物質ナノサイエンス支援実行委員会で申請内容を審査し採択課題を決定している。また、施設利用は随時実行し機動性を高めている。顕微鏡関係の施設利用は、学、産、官を問わず増加している。

表1 支援装置・プログラム一覧

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
分子電子素子のための、素子作成と電気特性計測システム	ムービングウォールLB膜作成装置、マグネトロンスパッター、定フォトン照射装置、アルゴンレーザー、高倍率高感度CCDカメラ付金属顕微鏡、極低温真空プローバー、微小電流計測システム、点接触電流イメージング原子間力顕微鏡等を用いた分子電子素子の作成と、その電気特性の計測が可能である。	小川琢治教授	分子スケールナノサイエンスセンター
分子電子素子のための分子合成の全自動化システム	全自動化しないと合成が困難な分子を全自動合成装置で合成する。	小川琢治教授 永田 央助教授	分子スケールナノサイエンスセンター
光誘起反応観測装置	レーザーと極低温走査型トンネル顕微鏡を組み合わせ、光による分子構造の変化やレーザー誘起された試料表面の強電磁場による変化の観測の支援を行う。共鳴ラマン(時間分解)分光器および極低温走査型トンネル顕微鏡単体としての使用も可能である。	西 信之教授	電子構造研究系
ナノクラスター飛行時間型質量分析装置	金属クラスターなど種々のクラスターを適切な方法(ESI, LDI, MALDI, EI)によってイオン化し、その質量を最高質量10万Daの範囲で計測する。	佃 達哉助教授	分子スケールナノサイエンスセンター

分子結合状態解析システム	MicroESCA：必要とする微小領域に絞れるX線源を用いたX線光電子分光装置であり，ナノサイエンスに必須のナノ領域の分子の結合状態を診断する装置。	横山利彦教授	分子構造研究系
	920MHzNMR：現在利用可能な最高の分解能を誇る核磁気共鳴装置。C/Hプローブ，HCNプローブによる ¹ H核， ¹³ C核の溶液試料測定に対応。平成17年後期より固体試料（ ¹³ C核）測定を試行。	魚住泰広教授	分子スケールナノサイエンスセンター
高感度磁気物性測定装置	振動式高感度磁化率測定装置（RSO）を装備した，微量試料用7テスラ超低磁場連続低温制御および温度スイープ型磁気物性測定装置。	西條純一助手	電子構造研究系
分子設計用大型計算支援プログラム	大型コンピューターを用いた理論計算によって，分子設計および生成物のスペクトル予測を行い，有機合成の指針を与えるための支援プログラム。専門家の適切な指導により，大型分子設計の理論計算手法を修得する。	永瀬 茂教授	理論分子科学研究系
電子顕微鏡	300kV透過型分析電子顕微鏡（EELS 装置，EDS装置付TEM），電界放出型走査電子顕微鏡（SEM），集束イオンビーム加工観察装置（FIB）による構造解析・分析。	西 信之教授 佃 達哉助教授	電子構造研究系 分子スケールナノサイエンスセンター

2-11-2 2005 年度の実施状況（1 月 31 日まで）

(1) 協力研究

課 題 名（前期）	代 表 者
窒化物半導体の光電子分光	名城大学理工学部 丸山 隆浩
リボソーム上に形成されるアシルアミノ酸ナノチャンネルの構造評価	金沢大学自然科学研究科 太田 明雄
海洋微細藻由来の生物活性ナノ有機分子の構造解析	北海道大学大学院薬学研究科 久保田高明
窒化物半導体の光電子分光	名城大学理工学部 丸山 隆浩
窒化物半導体の光電子分光	名城大学理工学部 河村 康之
ナノサイズの分子の大規模計算	大阪府立大学理科学研究科 麻田 俊雄
磁場配向膜を用いた強磁場 NMR による膜結合分子の構造と機能の解明	大阪大学大学院理科学研究科 山本 仁
磁場配向膜を用いた強磁場 NMR による膜結合分子の構造と機能の解明	大阪大学大学院理科学研究科 安達 清治
1次元水素結合ナノワイヤークラスタにおける多重プロトン移動反応の共同効果と量子性	九州大学大学院理学院 迫田 憲治
開口フラレーン誘導体（穴のあいたフラレーン）への小分子封入・排出に関する理論的研究	名古屋大学大学院環境学研究科 岩松 将一
金属内包フラレーンのピンゲル反応による化学修飾	筑波大学大学院数理物質科学研究科 赤阪 健
スタンノールアニオン類の電子状態の解明とスタンノール骨格を主鎖に有する高分子化合物の物性探索	埼玉大学理学部 斎藤 雅一
1次元水素結合ナノワイヤークラスタにおける多重プロトン移動反応の共同効果と量子性	九州大学大学院理学院 河本 裕介
デンドリマー分子カプセル内包金属ナノクラスタの質量分析	神戸大学工学部 田中 章順
デンドリマー分子カプセル内包金属ナノクラスタの質量分析	東北大学大学院理科学研究科 今村 真幸
デンドリマー分子カプセル内包金属ナノクラスタの質量分析	神戸大学大学院自然科学研究科 上掛 惟史
デンドリマー分子カプセル内包金属ナノクラスタの質量分析	東北大学大学院理科学研究科 今村 真幸
新規な金属内包フラレーンの構造決定	筑波大学大学院数理物質科学研究科 若原 孝次
新規な金属内包フラレーンの構造決定	筑波大学大学院数理物質科学研究科 飯塚 裕子
新規な金属内包フラレーンの構造決定	筑波大学大学院数理物質科学研究科 二川 秀史
金属内包フラレーンのピンゲル反応による化学修飾	筑波大学大学院数理物質科学研究科 山田 道夫
金属内包フラレーンのピンゲル反応による化学修飾	筑波大学大学院数理物質科学研究科 佐藤久美子

磁場配向膜を用いた強磁場 NMR による膜結合分子の構造と機能の解明	大阪大学大学院理学研究科	村田 道雄
金属イオンを核とするナノクラスターの構造解析と光誘起反応	九州大学大学院理学研究院	大橋 和彦
金属イオンを核とするナノクラスターの構造解析と光誘起反応	九州大学大学院理学研究院	宗 豊
金属イオンを核とするナノクラスターの構造解析と光誘起反応	九州大学大学院理学研究院	飯野 拓郎
拡張ポルフィリン自動合成法の開発	九州大学工学研究院応用科学部門	古田 弘幸
有機金属ナノクラスターの創製：構造と機能制御	愛知教育大学自然科学系	日野 和之
メゾメゾ結合ポルフィリン多量体を基軸とした分子素子開発	京都大学大学院理学研究科	荒谷 直樹
導電性中性単一成分モレキュラーナノワイヤー錯体の原子価状態の解明	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	満身 稔
導電性中性単一成分モレキュラーナノワイヤー錯体の原子価状態の解明	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	末次 晃
導電性中性単一成分モレキュラーナノワイヤー錯体の原子価状態の解明	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	降旗 洋子
高共役 π 分子修飾電極の作成と評価	愛媛大学総合科学研究支援センター	宇野 英満
Nanotechnology - Lubrication ナノテクノロジーによるナノ潤滑材料	日本工業大先端材料技術研究センター	竹内 貞雄
Nanotechnology - Lubrication ナノテクノロジーによるナノ潤滑材料	日本工業大先端材料技術研究センター	鈴木 学
新規なナノスケール分子キャビティを活用した高反応性化学種安定化に関する理論研究	東京大学大学院理学研究科	後藤 敬
拡張ポルフィリン自動合成法の開発	九州大学工学研究院応用科学部門	池田 慎也
拡張ポルフィリン自動合成法の開発	九州大学工学研究院応用科学部門	岡 康孝
単層カーボンナノチューブとアミンの相互作用	東京学芸大学教育学部	前田 優
磁場配向膜を用いた強磁場 NMR による膜結合分子の構造と機能の解明	大阪大学大学院理学研究科	土居 幹嗣

課 題 名 (後期)	代 表 者	
ロジウム(110)上の亜酸化窒素分子の吸着配向と活性サイト近傍の分布の STM 観測	北海道大学触媒化学研究センター	中越 修
フォトミック反応を用いたナノ光素子の基礎研究	九州大学大学院理学研究院	迫田 憲治
二重 N- 混乱ヘキサフィリンの大量合成	大阪大学大学院理学研究科	安達 清治
海洋微細藻由来の生物活性ナノ有機分子の構造解析	北海道大学大学院薬学研究科	久保田高明
SiC 表面からのカーボンナノチューブ生成過程の研究	名城大学理工学部	丸山 隆浩
920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いたタンパク質・複合糖質の構造解析	名古屋市立大学大学院薬学研究科	坂田 絵里
SiC 表面からのカーボンナノチューブ生成過程の研究	名城大学理工学部	丸山 隆浩
シゾフィラン - 金ナノ粒子複合体の近接場分光	科学技術振興機構	沼田 宗典
電気化学析出法によって得られる化合物半導体薄膜のナノ構造観察	岐阜大学大学院工学研究科	市瀬 圭吾
電気化学析出法によって得られる化合物半導体薄膜のナノ構造観察	岐阜大学大学院工学研究科	B. R. Sankapal
ポリジアセチレン LB 膜の色相転移に関する顕微分光学的研究	埼玉大学理学部	坂本 章
ポリジアセチレン LB 膜の色相転移に関する顕微分光学的研究	埼玉大学理学部	森 和彦
結晶成長により作製した量子構造上への脂質膜の形成	名古屋大学大学院工学研究科	宇治原 徹
920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いたタンパク質・複合糖質の構造解析	名古屋市立大学大学院薬学研究科	栗本 英治
金属内包フラーレンの電荷移動錯体の合成と構造	筑波大学大学院数理物質科学研究科	佐藤久美子
金属内包フラーレンの電荷移動錯体の合成と構造	筑波大学大学院数理物質科学研究科	河野 孝佳
金属内包フラーレンの電荷移動錯体の合成と構造	筑波大学大学院数理物質科学研究科	栗原 広樹
Ce@C ₈₂ アニオンの ¹³ C NMR における常磁性シフトの解析	筑波大学大学院数理物質科学研究科	高野 勇太
Ce@C ₈₂ アニオンの ¹³ C NMR における常磁性シフトの解析	筑波大学大学院数理物質科学研究科	二川 秀史
Ce@C ₈₂ アニオンの ¹³ C NMR における常磁性シフトの解析	筑波大学大学院数理物質科学研究科	菊池 隆
スタンノールアニオン類の電子状態の解明とスタンノール骨格を主鎖に有する高分子化合物の物性探索	埼玉大学理学部	斎藤 雅一
高共役 π 分子修飾電極の作成と評価	愛媛大学総合科学研究支援センター	宇野 英満
高共役 π 分子修飾電極の作成と評価	愛媛大学総合科学研究支援センター	田中 洋輔

(2) 施設利用

(前期)		
単パルスレーザーによる二酸化炭素・水及びアルコール 2 成分ナノクラスターイオンのレーザー分光構造解析とクラスター内電荷移動反応の研究	東京大学大学院総合文化研究科	井口 佳哉
単パルスレーザーによる二酸化炭素・水及びアルコール 2 成分ナノクラスターイオンのレーザー分光構造解析とクラスター内電荷移動反応の研究	東京大学大学院総合文化研究科	村岡 梓
機能性セラミックス上のカーボンナノチューブの構造制御 ——基板表面の元素結合状態——	名古屋工業大学大学院	小島 寛之
ナノサイズで構造の制御された含フッ素高分子の精密合成	東京大学大学院工学系研究科	中野 幸司
ナノサイズで構造の制御された含フッ素高分子の精密合成	東京大学大学院工学系研究科	藤田 智行

銀ビバレート錯体の構造決定	名古屋大学大学院理学研究科	吉川 浩史
透明キラル分子磁性体の構築と物性	広島大学大学院理学研究科	井上 克也
フェムト秒レーザーを用いたクロムポルフィリン錯体の光化学反応初期過程の研究	北海道大学電子科学研究所	中林 孝和
配位子置換によるクラスターの大量合成法の開拓	筑波大学大学院数理物質科学研究科	七分 勇勝
ナノギャップ電極による金微粒子の電気伝導測定	科学技術振興機構	根岸 良太
シアノ架橋分子磁性体の分子設計	慶応義塾大学理工学部	秋津 貴城
赤外光解離分光による金属原子イオンの局所溶媒和構造の研究	東北大学大学院理学研究科	古谷 亜理
赤外光解離分光による金属原子イオンの局所溶媒和構造の研究	東北大学大学院理学研究科	鶴田 譲
ポリジアセチレン LB 膜の色相転移に関する顕微分光学的研究	埼玉大学理学部基礎化学科	坂本 章
ポリジアセチレン LB 膜の色相転移に関する顕微分光学的研究	埼玉大学理学部基礎化学科	森 和彦
フェムト秒レーザーを用いたクロムポルフィリン錯体の光化学反応初期過程の研究	愛知教育大学自然科学系	稲毛 正彦
貴金属及び酸化物ナノクラスターの高分解能 TEM を用いた微構造解析	豊田中央研究所触媒研究室	須田 明彦
低次元自己組織化分子ナノパターンニングの創製と電気特性解明	(独) 物質・材料研究機構	中西 尚志
自動車部品用途への適用を狙ったポリマー系ナノコンポジット材料の開発	東海興業(株) 研究開発部	前川美穂子
(後期)		
タンパク質を電子顕微鏡観察するための吸着基板検討と位相板開発	岡崎統合バイオサイエンスセンター	永山 國昭
自動車部品用途への適用を狙ったポリマー系ナノコンポジット材料の開発	東海興業(株)	前川美穂子
銀ナノクラスターの質量分析	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	清水 悠子
液体金属のホール効果と磁気抵抗効果の同時測定	静岡大学大学院理工学	伊藤 孝典
液体金属のホール効果と磁気抵抗効果の同時測定	静岡大学大学院理工学	荻田 正巳
磁気機能性遷移金属錯体の磁性評価	慶応義塾大学理工学部	秋津 貴城
キラルな金属ポルフィリン環状ホストを用いたキラルなキラルな炭素クラスターの不斉骨格センシング	東京大学工学系研究科	庄子 良晃
ナノギャップ電極による金微粒子の電気伝導測定	(独) 科学技術振興機構	根岸 良太
キラル磁性体の構築と物性研究	総合研究大学院大学(広島大学)	沼田 陽平
キラル磁性体の構築と物性研究	広島大学大学院理学研究科	秋田 素子
キラル磁性体の構築と物性研究	広島大学大学院理学研究科	増原 直治
キラル磁性体の構築と物性研究	広島大学大学院理学研究科	井上 克也
超高磁場固体 ^{17}O NMR を用いたペプチド・ポリペプチドの構造研究	東京工業大学大学院理工学研究科	黒木 重樹
分子内に電位勾配を有するピレン連結ポルフィリンの合成と物性評価	東京都立大学大学院理学研究科	三宅 雄介
一次元混合原子価イリジウム錯体の原子価状態の解明	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	満身 稔
一次元混合原子価イリジウム錯体の原子価状態の解明	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	末次 晃
機能性セラミックス上のカーボンナノチューブの構造制御 ——基板表面の微細構造観察——	名古屋工業大学大学院工学研究科	小島 寛之
機能性セラミックス上のカーボンナノチューブの構造制御 ——基板表面の微細構造観察——	名古屋工業大学大学院工学研究科	園部 宗孝
機能性セラミックス上のカーボンナノチューブの構造制御 ——基板表面の微細構造観察——	名古屋工業大学大学院工学研究科	梅澤 良介

2-12 超高速コンピュータ網形成 (NAREGI) プロジェクト

NAREGI プロジェクト開始後、本年度(2005年度)は中間の年にあたり、プロジェクトの中間的なまとめとして、二つの大きな事業を行った。ひとつはナノ分野における計算科学の国際会議(1st NAREGI International Nanoscience Conference)である。この会議は「NAREGI ナノサイエンス実証拠点」の過去2年半におよぶ研究の成果を国際コミュニティにアピールするとともに、ナノサイエンス分野における国際的な研究交流の場として、6月14日より17日まで奈良県新公会堂において開催したものである。会議には国外よりこの分野の国際的なリーダー25名を招待し、基調講演5件、キーノート講演6件、招待講演45件、ポスター発表134件を含む参加総数280名の盛況なものとなった。

本年度行ったもうひとつの活動は総合科学技術会議による中間評価への取り組みである。本稿では主としてこの活動について報告を行う。(昨年9月以降は2006年度よりスタートする「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用プロジェクト」のグランドチャレンジ課題(ナノ分野)予定実施拠点として、プロジェクト立ち上げに協力してきたが、この取り組みについては別項で述べる。)

2-12-1 中間評価への取り組み

NAREGI プロジェクトに対する中間評価は、昨年7月12日、科学技術・学術審議会に置かれた「情報科学技術委員会」(委員長:土居慶応大学教授)のもとで行われた。評価項目は(1)プロジェクトの実施体制、(2)学術上の成果、(3)産・学・官連携への取り組み、(4)ミッションの達成状況、(5)社会への情報発信など多岐にわたって行われた。その結果、NAREGI プロジェクトは全体として下記のような高い評価(まとめ)を受けた。

「本プロジェクトは、国際標準化を目指したグリッド技術により、100テラフロップス級の高速サイエンスグリッド環境を実現する情報通信技術とナノサイエンス技術との融合により、先端科学技術の研究と製品開発を目指している。

プロジェクト推進には、国立情報学研究所を集中拠点に、日本を代表するグリッド研究者、ナノサイエンス研究者と産業界企業による適切な実施体制のもと、個々の特徴的な研究開発をベースに、世界標準化を目指したグリッド基板ソフトウェアのプロトタイプ版が予定どおり完成するなど高く評価できる。」

ここでは分子研拠点の取り組みのなかで項目(2)-(4)について活動とまとめを述べる。

(1) 学術上の成果

本プロジェクトにおける分子研拠点の基本的なミッションは「グリッド計算環境をナノ分野の計算科学によって実証する」というものであるが、われわれはこのミッションを達成するためには、単に「既存の計算プログラムをグリッド上で動かす」だけでは不十分であり、ナノ現象に対応できる新しい方法論を開発し、その方法論とアプリケーションソフトによってグリッド計算環境の有効性を実証することを企図した。ナノ現象はいくつかの点で従来の分子科学計算の守備範囲を大きく越えている。例えば、蛋白質という分子の電子状態を考えた場合、それは従来の量子化学計算の対象を遥かに越えているし、また、それが水溶液内に存在する場合、これまでの計算科学では全く不可能と言ってよい。したがって、水溶液中の蛋白質の電子状態を求めようとする場合、まず、蛋白質自身の電子状態を計算する方法論をつくる必要があり、さらに、それを溶液中で計算する新しい道具立てを構築する必要がある。すなわち、ナノ現象を解明するにはこれまでの枠組みを越えた新しい理論をつくるか、これまでの方法論を組み合わせたいわば複合的な方法論を構築する以外にない。NAREGI ナノ実証拠点ではいわゆる「ハードナノ」から「ソフトナノ」までの

すべてのナノ現象に対応できる計算科学方法論の構築を目指して研究を行ってきた。その主な成果は下記のとおりである。(これらの研究成果は346報の学術論文と80報の総説・解説として発表済みである。)

(2) 主な学術的研究成果

ナノスケールの巨大分子の電子状態を計算する新しい方法論の開発および改良

3D-RISM/FMO 法 (新規提案)

FMO による蛋白質 (1000 原子) の全電子計算 (世界記録)

溶液内の生体分子の折り畳み, およびナノ分子集合体形成をシミュレートする新しい方法論の構築および巨大計算

3D-RISM/ レプリカ MC 法 (新規提案)

1000 万原子系の分子動力学計算 (世界記録)

ナノ電子デバイスへの応用の基礎となる理論・方法論の開発および巨大計算

ハッパード模型の厳密対角化計算コードの開発と計算 (世界記録)

密度行列繰り込み群法によるスペクトル計算 (世界最高規模)

ナノ磁気デバイスへの応用の基礎となる理論・方法論の開発および巨大計算

磁気双極子系の磁気秩序形成における新奇な協力現象を発見

光誘起強誘電転移機構の解明 (国際賞を受賞)

ナノ電子・磁気デバイスへの直接の応用を目指した方法論の構築および巨大計算

半無限固体の表面からの電子放出の計算手法を提案 (世界初)

電子レベルからマクロな相に至るマルチスケールシミュレーションに成功 (世界初)

(3) プロジェクトミッションの達成状況

NAREGI プロジェクトのミッションは我が国に自然科学分野の「高速コンピュータ網(グリッド)」を構築することであり, 分子科学研究所拠点のそれは国立情報学研究所 (国情) 拠点で開発したグリッドミドルウェア (科学のアプリケーションソフトをグリッド環境上で動かすための中間的ソフトウェア群) の有効性をナノサイエンス分野の計算科学によって実証することである。もちろん, 今回は中間評価であるから, 完成されたミドルウェアに関する「実証計算」を行うわけではなく, 国情拠点より提供された試行版 (アルファ版と呼ばれる) の実証研究を行った。行った実証研究の項目は下記のとおり。

ハイスループット

ジョブをグリッド環境内のコンピュータに無駄なく割り付けることにより, 計算のスループットを上げる。

メタコンピューティング

超高速ネットワークによって連結された異サイトあるいは異機種間の並列計算により大規模計算を実現。

リアルタイムコラボレーション

異なる計算機環境で研究を行っている研究者がそれぞれの開発プログラムをリアルタイムで共有することを可能にする。(現在は異なるオペレーティングシステムで動いているプログラムを使おうとする場合, コード変換などのいわゆる移植作業を伴うため, 数ヶ月の労力と共同研究の遅延は免れない。)

(4) 産・学・官連携への取り組み

本プロジェクトのもうひとつの性格は国の「産業再生プログラム」の一貫としての「産学官連携」であり、この側面での成果も評価の対象となった。分子研拠点では分担研究者としていくつかの企業からの直接の参加を得ると同時に、「産業応用協議会」との連携のもとに、主にふたつの活動を行った。ひとつは公募形式で行った企業研究者による実証研究(公募実証研究)、他は企業研究者のグリッド利用を容易にする「グリッドナノシミュレータ」の開発である。

公募実証研究への応募企業と研究課題は以下の表にまとめてある。

2-12-2 2005 年度「ナノ設計実証」公募研究テーマ一覧(16社19件)

ナノサイエンス実証研究拠点

分子科学研究所

2005年2月15日(火)

課 題 名	実施企業
タンパク質立体構造解析システム superFAMS のグリッド化と ab initio 構造解析手法によるゲノムスケールへの適用	日立ソフトウェアエンジニアリング(株)(共同研究者・北里大、日本 SGI(株)、味の素(株))
ナノスケールにおける触媒反応の解析と新規触媒の開発	旭化成(株)
RISM-SCF 法を用いた分子物性および化学反応に対する溶媒効果への適用	三井化学(株)
拡張アンサンブル分子動力学シミュレーションプログラムの開発と酵素触媒の活性コンフォーメーション探索	三井化学(株)
アスパラギン酸プロテアーゼのリガンド結合形式に関する研究	住友製薬(株)
核内レセプターのシグナル伝達に関する分子メカニズム解析	住友製薬(株)
メソポーラス材料ナノ空間——吸着分子相互作用の解析	(株)日立製作所
ナノ磁性粒子集合体の磁化分布解析	日立金属(株)
シリコンナノデバイス用高誘電率ゲート絶縁膜材料の劣化過程の研究	(株)富士通研究所
時間依存解析に基づく物性量の算出	住友化学工業(株)
光励起・緩和過程における多体効果の量子動力学的解析	(株)東芝
ナノ領域における希薄混合流体の動的挙動解析	(株)東芝
RISM 法による溶液中の物性推算手法の研究——酸強度の推算——	旭硝子(株)
RISM 法による溶媒・溶質相互作用を取り入れた物性推算手法の研究	昭和電工(株)
RISM 法による溶液中の物性推算手法の研究——溶解度の推算——	日本ゼオン(株)
RISM 法による溶液中の物性推算手法の研究——溶媒和の pKa への効果の推算——	(株)日本触媒
RISM 法による溶液中の物性推算手法の研究——反応および活性化自由エネルギーの推算——	ダイセル化学工業(株)
RISM 法を用いた pKa、log Pow の算出	出光石油化学(株)
RISM 法を用いた pKa、log Pow の算出	JSR(株)

この中で特筆すべき活動のひとつは「RISM ワーキンググループ」である。そもそも「産学連携」の心は「学」で開発された研究成果を「産」に移転し、産業の活性化に役立てることにあろう。しかしながら、学問分野によっては「産」の側に「学」の成果を受け入れる土壌が存在しない場合も少なくない。そのような場合には「産」の中にその「土壌」形成していく活動も「産学連携」の重要な一部でなければならない。液体の統計力学である RISM 理論がまさにこの場合に当たる。RISM 理論は溶液中の様々な「ナノ現象」を解明していく上で非常に有効な方法論であることが明らかになりつつあり、企業の関心も高まりつつある。しかしながら、この理論的方法論は、現在、大学の学部はおろか大学院においてすらもその教育課程に含まれていない学問である。このような状況のもとで、いくつかの化学企業が合同して「RISM 理論」の勉強と研修を当面の目的に公募実証研究に参加してきた。これらの企業研究者は約 1 年間の講義と研修を経て、現在、研究レベルの計算を行うまでに成長してきている。

我々が「産学連携」に関して行ったもうひとつの重要な貢献は「グリッドナノシミュレータ」の構築である。別項で述べたように、「グリッド計算環境」の最も重要な利点は研究者間の「リアルタイムコラボレーション」を実現することにある。従来の計算機環境ではある研究者が別の計算機環境下にある他の研究者と計算プログラムを共有しようとする場合、プログラムコードの変換というやっかいな作業が不可欠であり、それによって、数ヶ月の遅延は免れなかった。しかも、そのような変換作業が可能なも自作のプログラムに限られており、Gaussianに代表されるような多くの市販プログラムはコードの変換そのものを許していない。後者の事情はGaussianなど市販のプログラムに依存している多くの化学企業にとって致命的とも言える欠陥である。グリッドナノシミュレータはこの欠陥を本質的に克服し、研究者がグリッド計算環境下において(コード変換などによる遅延なく)「リアルタイム」でプログラムを共有することを可能にする。グリッドナノシミュレータの骨格部分は(a)初期データ生成ツール(シミュレーション初期データの入力生成プログラム)、および(b)GIANT(個別プログラム間のデータ変換やヒューマンインターフェース)からなる。このGIANTによって、異機種コンピュータに存在するプログラム間のコミュニケーションが可能になったのである。このことによって、企業研究者はコードを変換することなくGaussianを他のプログラムと連成して使うことが可能となった。

2-13 エクストリームフォトンクス

今年度から理化学研究所との連携融合事業として「エクストリーム・フォトンクス」を開始した。「光を造る」、「光で観る」、「光で制御する」という3つの観点から、両研究所で相補的にレーザー光科学のより一層の進展を図ろうとするプログラムである。分子研側からは、「光を造る」という観点から

「光波特性制御マイクロチップレーザーの開発」(平等)

「新複合フッ化物の真空紫外発光デバイスとしての探索と新 VUV フェムト秒光源の実現」(猿倉),

「光で観る」という観点から

「時間・空間分解分光による固体表面・ナノ構造物質表面における反応研究」(松本)

「エクストリーム近接場時間分解分光法の開発」(岡本)

「タンパク質立体構造に基づく機能性発光分子の開発と生体機能解析システム」(小澤),

「光で制御する」という観点から

「アト秒コヒーレント制御法の開発と応用」(大森)

「紫外強光子場による反応コヒーレントコントロール」(菱川)

「高強度極短パルス紫外光を用いた超高速光励起ダイナミックスの観測と制御」(大島)

の合計8課題を選定し、実行に移している。

まず、両方の組織をあわせて4月に理化学研究所にて第1回の合同研究会を開催した。この研究会は、全体的に各グループの今までの研究成果を中心に今後の研究計画を披露し、これを中心に議論を行った。これに対して、11月には「分子イメージングとスペクトロスコピーの接点」を主題とした研究会を行い、より突っ込んだ議論を進めた。また、このプログラムを中心に所内に日常的な議論の場としての光分子科学フォーラムを設け、光分子科学の進展を図ることとした。

2-14 国際交流と国際共同研究

2-14-1 国際交流

分子科学研究所には1ヶ月以上滞在して共同研究を実施する長期滞在者と研究会や見学・視察等で来所される短期滞在者を合わせて、毎年100名以上の外国人研究者が訪れている。前者には文部科学省外国人研究員（客員分4名、特別分毎年3名程度）、日本学術振興会招へい外国人研究者及び特別協力研究員（私費や委任経理金等により共同研究実施のために来訪する研究者）等がある。短期訪問者とは岡崎コンファレンスを始めとして次項で述べる様な色々な国際共同研究事業に基づく研究会への参加者及び短時日の見学来訪者である。

以下に今迄の来訪者の過去10年間のデータを種類別及び国別に示す（年度を越えて滞在中にいる人は二重に数えられている）。

表1 外国人研究者数の推移（過去10年間）

年度	長期滞在者			短期滞在者		合 計
	文部科学省外国人研究員	日本学術振興会招へい外国人研究者	特別協力研究員等	研究会	訪問者	
95	16	19	23	83	30	171
96	18	22	20	55	65	180
97	17	17	20	99	19	172
98	18	21	11	84	33	167
99	16	16	16	92	53	193
00	13	9	12	43	23	100
01	16	14	10	69	68	177
02	15	9	13	125	110	272
03	14	8	56	20	22	120
04	15	6	55	16	133	225
合計	158	141	236	686	556	1,777

表2 外国人研究者数の国別内訳の推移（過去10年間）

年度	アメリカ	イギリス	ドイツ	フランス	韓国	中国	ロシア	その他	合計
95	34	14	17	9	17	8	9	63	171
96	37	10	13	13	25	14	11	57	180
97	41	16	7	7	12	21	15	53	172
98	30	17	13	10	12	12	20	53	167
99	53	16	20	8	15	13	15	53	193
00	26	8	8	7	13	10	7	21	100
01	45	14	20	8	23	13	8	46	177
02	31	8	22	10	45	40	9	107	272
03	27	3	10	8	14	5	6	47	120
04	20	5	7	17	47	45	5	79	225
合計	344	111	137	97	223	181	105	579	1,777

表3 海外からの研究者（2005年度）

1．外国人運営顧問				
NORDGREN, Joseph	スウェーデン	ウプサラ大学教授		
CASTLEMAN, A. Worford Jr.	アメリカ	ペンシルバニア州立大学教授		
2．外国人客員研究部門				
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	
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	
TANATRA, 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的研究員	17. 2. 1-18. 1.31	
SUN, Wei-Yin	中国	南京大学錯体化学研究所教授	17. 6. 1-17. 8.31	
PULAY, Peter	アメリカ	アーカンソー大学教授	17. 5.16-17. 8.15	
荒木 幸一	ブラジル	サンパウロ大学教授	17.11. 1-18. 1.31	
LONG, La-Sheng	中国	廈門大学助教授	17. 5. 1-18. 4.30	
ROMAN, Swietlik	ポーランド	分子物理学研究所教授	18. 3. 1-18. 8.31	
3．分子科学研究所外国人研究職員				
LEE, Jin Yong	韓国	全南大学助教授	17. 6.23-17. 8.22	
			17.12.24-18. 2.23	
4．日本学術振興会招へい外国人研究者				
MAHINAY, Myrna Sillero	フィリピン	MSU - イリガン工科大学	15. 6. 3-17. 6. 2	
QUEMA, Alex, Villareal	フィリピン	分子科学研究所研究員	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	河南大学物理学学科準教授	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情報処理研究所フンボルト研究員	16. 9. 1-18. 8.31	
VAROTSIS, C.	ギリシャ	クレタ大学化学科教授	17. 2.18-17. 4.17	
5．国際共同研究				
DELAGNES, Jean-Christophe	フランス	ポールサバティエ大学大学院生	17. 4. 1-17. 6.27	
			18. 2.15-18. 3.20	
MEIYER, Christophe	フランス	ポールサバティエ大学教授	17. 5.28-17. 6. 4	
LE, Hoang Hai	アメリカ	カンタム・エレクトロニクス研究員	17. 7. 1-17. 8.31	
PETEK, Hrvoje	アメリカ	ピッツバーグ大学教授	17. 7. 5-17. 7. 8	
LAMBERT, Guillaume	フランス	Commissariat for Atomic Energy 大学院生	17. 7. 7-17. 7.26	
COUPRIE, Marie Emmanuelle	フランス	Commissariat for Atomic Energy 主任研究員	17. 7. 9-17. 8.15	
			17.11.14-17.11.29	
LABAT, Marie	フランス	Commissariat for Atomic Energy 大学院生	17. 7. 9-17. 8.15	
KWON, Yong Seung	韓国	成均館大学教授	17. 8. 4-17. 8.19	
			18. 3.25-18. 3.31	
HONG, Jong Beom	韓国	成均館大学大学院生	17. 8. 4-17. 8.25	
KIM, Jeong Woon	韓国	成均館大学大学院生	17. 8. 4-17. 8.24	
SALVADOR, Arnel	フィリピン	University of Philippines 副部長	17. 9.23-17.10. 2	
QUIROGA, Reuben V.	フィリピン	De La Salle University 助教授	17.11. 5-17.12. 5	
藤田恵津子	アメリカ	Brookhaven National Research Chemist	17.11.25-17.12. 1	
RUELE, Eckart, Gunther Adolf	ドイツ	Wuerzburg 大学教授	17.11.26-17.12. 5	
BIELAWSKI, Serge	フランス	Universite des Sciences et Technologies de Lille 助教授	17.11.28-17.12.23	
PLENGE, Juergen	ドイツ	Wuerzburg 大学大学院生	17.12. 3-17.12.11	
GYILLEMIN, Renand	フランス	CNRS 大学院生	18. 1. 5-18. 1.15	
SIMON, Marc	フランス	CNRS 研究員	18. 1. 8-18. 1.15	
PETIT, Yannick	フランス	ジョセフ・フーリエ大学研究員	18. 2. 6-18. 3. 2	
HOLLAND, Andrew	ブルネイ	Brunei University 教授	18. 3. 1-18. 3.11	
INGLEY, Richard	ブルネイ	Brunei University 大学院生	18. 3. 1-18. 3.11	
HOLLAND, Karen	ブルネイ	Brunei University 大学院生	18. 3. 6-18. 3.13	
AKA, Gerard Philippe	フランス	パリ国立高等化学学院教授	18. 3.11-18. 3.29	

6 . 科学研究費補助金			
DASKALAKIS, Evangelos	ギリシャ	University of Crete Department of Chemistry 大学院生	17. 4. 1-17. 6. 8
GWATKIN, Ralph	アメリカ	Case Western Reserve University 教授	17. 5. 9-17. 5.18
BOYKO, Sergiy	カナダ	University of Ontario Institute fo Technology Technician	17. 7. 1-17. 8.31
KIM, Younkyoo	韓国	韓国外国語大学教授	17. 7.11-17. 8.26
中川 康	アメリカ	University of Minnesota Medical School 助教授	17. 7.23-17. 7.28
OLOYEDE, Oluwaponmile			17.10. 1-17.11.30
VAROTSIS, Constantinos	ギリシャ	University of Crete Department of Chemistry 教授	17.10. 2-17.11. 2
McCORMACK, Thomas James	アメリカ		17.10. 2-18. 3.31
LI, Zhengqiang	中国	Jilin University 教授	17. 9.30-17.12.28
友安 慶典	アメリカ	Kansas State University Research Asst. Professor	17.10.30-17.11. 7
POBRE, Romeric Ferrer	フィリピン	De La Salle University 助教授	17.11. 5-17.12. 5
GARDNER, Kevin	アメリカ	University of Texas Southwestern Medical Center at Dallas 助教授	17.11.15-17.11.20
WANG, Yi	中国	Institute of Biophysics Chinese Academy of Sciences 教授	17.12.12-17.12.17
PAL, Biswajit	インド	Centre for Cellular and Molecular Biology Scientist	17.12.16-18. 1.30
LEVY, Ronald	アメリカ	Rutgers University 教授	18. 1. 3-18. 1. 8
WOLFGANG, Doster	ドイツ	Technische Universitat Munchen 教授	18. 1. 3-18. 1.11
MARTIN, Karplus	フランス	Universite Louis Pasteur 教授	
		Harvard University 教授	18. 1. 4-18. 1. 8
CHRISTOPHER, Dobson	イギリス	University of Cambridge 教授	18. 1. 4-18. 1. 8
JOYOOUNG, Lee	韓国	Korea Institute for Advanced Study 教授	18. 1. 5-18. 1.13
LEE, Jinwoo	韓国	Korea Institute for Advanced Study 研究員	18. 1. 5-18. 1.13
JOO, Keehyoung	韓国	Korea Institute for Advanced Study 研究員	18. 1. 5-18. 1.13
7 . 所長招へい協力研究員			
FEJER, Martin	アメリカ	スタンフォード大学教授	17. 7.16-17. 7.19
SEAN, Campbell Smith	オーストラリア	クイーンズランド大学教授	17. 9.11-17. 9.12
石塚 智也	アメリカ	ペンシルバニア大学特別研究員	17.10. 4-17.10. 7
PRADEEP, T.	インド	Indian Institute of Technology Madras 教授	17.11.12-17.11.15
WEI, Chiming	アメリカ	ジョーンズホプキンス大学教授	17.11.23-17.11.24
LEE, Yuan Tseh	中国	台湾科学院院長	18. 2. 8-18. 2. 9
KAMINSKII, Alexander	ロシア	ロシア科学アカデミー結晶学研究所教授	18. 2.15-18. 2.16
保木 邦仁	カナダ	University of Tronto 研究員	18. 2.16-18. 2.19
伏谷 瑞穂	ロシア	ベルリン自由大学物理学研究所博士研究員	18. 3. 3-18. 3. 6
8 . 招へい研究員			
趙 翔	中国	Xi'an Jiaotong University 教授	17. 7.20-17. 8.25
			18. 1.17-18. 2.18
KUSHCH, Natalia	ロシア	ロシア科学技術研究所	17.10. 2-17.10.12
LUIS, Fernand de Oliveira	ブラジル	University of Sao Paulo 大学院生	17.11. 6-18. 1.10
FRENKING, Gernot	ドイツ	Fachbereich Chemie Philipps-University 教授	17.11.12-17.11.19
YARWOOD, Jack	イギリス	Sheffield Hallam University 名誉教授	17.11.13-17.11.15
Quiroga Reuben V	フィリピン	De La Salle University 助教授	17.11.23-17.11.23
			17.11.26-17.11.27
香川 憲夫	アメリカ	Vanderbit University 助教授	17.12. 5-17.12. 5
BARANOV, Nikolai	ロシア	ウラル州立大学教授	18. 2.17-18. 2.19

2-14-2 国際共同研究

2005年現在実施している国際共同研究事業を以下に説明する。

(1) 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者を受け入れ、国際共同研究事業を積極的に推進し、国際的に開かれた研究所として高い評価を得ている。近年、東アジア地区における科学研究の急激な発展の潮流の中で、分子科学研究所が従来にもまして国際的リーダーシップを確立して行くためには、新たな国際共同研究拠点としての体制を構築することが急務となっている。しかし、従来の国際共同事業は二国間に限られており、それが、急速に活性化しつつある国際的な共同研究の推進にややもすれば障害となっている。

このような状況に鑑み、平成16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独自に試行し、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、研究所内の教員による分子科学研究所国際共同研究の提案を受け、初年度は7件の共同研究計画を採択した。この新規な分子研国際共同研究によって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研究者の短期訪問による共同研究が実施された。また、本年度は10件の共同研究計画の課題が採択され、4名の若手研究者の1 - 3ヶ月の滞在、欧米およびアジアの諸国の研究者との間の共同研究・相互訪問が実施されている。この新規な国際共同研究プログラムを通して、分子科学研究所が近隣アジア諸国は勿論、広く世界の分子科学研究の国際共同研究拠点としての新たな役割を果たすための環境が整えられていくものと思われる。一方、分子科学研究所の独自努力により遂行できる共同研究には限界がある。今後、新規な国際共同研究プログラムを定着させ、アジアを初めとする世界の研究者を受け入れ、分子科学研究者の交流と共同研究の実施を効率よく行うために分子研の国際共同研究事業に対する予算的裏付けを確保することが益々重要となっている。

2005年度実施状況

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

(2) 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が交わされ、日韓合同シンポジウムや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。この覚え書きは2004年に更新されている。

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年ごと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」が、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」が、2005年3月に分子科学研究所で第11回合同シンポジウム「分子科学の最前線」開催され、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。2005年の第11回合同シンポジウムは、文部科学省の「日韓友情年2005（進もう未来へ、一緒に世界へ）」記念事業としても認定された。次回は、韓国で開催される。

また、1991年以降韓国のさまざまな大学および研究所から毎年3名の研究者を4ヶ月間ずつ招聘して共同研究を実施している。

(3) 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え書きの更新を行い、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。

(4) 日中拠点大学交流事業（加速器分野）

本国際共同研究は加速器分野における日中の交流事業であり、日本学術振興機構の拠点大学方式による学術交流事業として2000年度より継続して行われている。日本側の拠点機関は高エネルギー加速器研究機構であり、中国側は中国科学院高能物理研究所である。本事業に参加している日本側研究機関には、高エネルギー加速器研究機構の他、分子科学研究所など15の大学・研究所が含まれている。研究テーマは、(A)加速器物理及び加速器工学、(B)JLC（リニアコライダ）実験・BELLE（Bファクトリー）実験・素粒子理論、(C)放射光加速器及び放射光科学の3つであり、電子・陽電子加速器に関する幅広い内容が含まれている。それぞれのテーマで複数の共同研究やセミナーが活発に行われている。分子科学研究所からは極端紫外光研究施設の職員が、上記(C)の放射光分野での共同研究、より具体的には(1)既設シンクロトロン放射光源用加速器及びビームラインの高度化に関する共同研究、(2)SSRF（上海放射光施設）加速器とビームラインのR&Dに関する共同研究、の2つの共同研究に参加している。

2-14-3 国際シンポジウム

分子科学研究所では1976年（1975年研究所創設の翌年）より2000年まで全国の分子科学研究者からの申請を受けて小規模国際研究集会「岡崎コンファレンス」を年2～3回、合計65回開催し、それぞれの分野で世界トップクラスの研究者を数名招へいし、情報を相互に交換することによって分子科学研究所における研究活動を核にした当該分野の研究を国際的に最高レベルに高める努力をしてきた。これは大学共同利用機関としての重要な活動であり、予算的にも文部省から特別に支えられていた。しかし、1997年以降、COEという考え方が大学共同利用機関以外の国立大学等にも広く適用されることとなり、大学共同利用機関として行う公募型の「岡崎コンファレンス」は、予算的には新しく認定されるようになったCOE各機関がそれぞれ行う独自企画の中規模の国際シンポジウムの予算に切り替わった。これに伴い、分子科学研究所主催で「岡崎 COE コンファレンス」を開催することになった。一方、所外の分子科学研究者は分子科学研究所に申請するのではなく、所属している各 COE 機関から文部省に申請することになった。しかし、「岡崎コンファレンス」では可能であった助手クラスを含む若手研究者からは事実上提案できなくなるなど、各 COE 機関が行う中規模国際研究集会は小規模国際研究集会「岡崎コンファレンス」が果たしてきた役割を発展的に解消するものにはなり得なかった。その後、COE は認定機関だけのものではないなどの考えからいろいろな COE 予算枠が生み出され、その中で国際研究集会は、2004年からの法人化に伴い日本学術振興会において一本化され、全国的に募集・選考が行われることになった。ただし、この枠はシリーズになっている大規模国際会議を日本に誘致したりする際にも申請できるなど、公募内容がかなり異なっている。一方、法人化後、各法人で小～中規模の国際研究集会が独自の判断で開催できるようになり、分子科学研究所が属する自然科学研究機構や総合研究大学院大学でその枠が整備されつつある。ただし、所属している複数の機関がお互い連携して開催するのが主たる目的となっている。

以上のようにこれまでいろいろな動きがある中で、全国の分子科学研究者からの申請を受けて開催する「岡崎コンファレンス」が果たしてきたような役割を引き継ぐものを分子科学研究所は探してきたが、結果的には独自で再開するしか、方法がないということがわかった。そのため、分子科学研究所では小規模国際研究集会「岡崎コンファレンス」を平成18年度から復活すべく、現在、検討を始めているところである。

なお、以下では、2005年に総合研究大学院大学の予算で開催した国際会議を簡単に報告する。

会議名：総合研究大学院大学国際シンポジウム

“Molecule-Based Information Transmission and Reception—Application of Membrane Protein Biofunction—(MB-ITR2005)”

期 間：2005年3月3日～7日

場 所：岡崎コンファレンスセンター

世話人：分子科学研究所 宇理須恆雄

内 容：

生体内の情報伝達においては、脱分極信号、イオンチャンネル電流などの電気信号と神経伝達物質やホルモンなどの分子の信号が巧みに使われて、複雑かつ大容量の信号処理が外部擾乱の影響も殆ど受けずに達成されている。このような情報処理系において、膜タンパク質は信号受信の最も重要なキーパーツであり、これを用いたバイオセンサーを構築することは、電気通信、光通信と並ぶ、分子通信とも言える新しい科学技術領域の開拓の端緒を開くことを意味すると言っても過言ではない。

関連する学術分野は、分子科学のみならず、生命科学、薬学、医学、電子工学と非常にボーダーレスな総合科学技

術領域と言える。本会議は、このような未開の学術領域の開拓においては、関連する多くの学術分野の専門家の間のコミュニケーションを通じたネットワークづくりが分野の発展において重要であるとの観点から開催されたもので、以下の課題について討論をした。

- (A) Basis for membrane-protein, structure, theory, *etc.*
- (B) Construction of membrane-protein system.
- (C) Biophysics and chemistry of membrane-protein system.
- (D) Bio-organic and surface chemistry
- (E) Membrane protein array and applications
- (F) Quantum probes for structure analysis of supported membrane system.
- (G) Molecular recognition reaction and protein-protein interaction.
- (H) Membrane-protein devices.

招待講演者：

内外の研究者約150名が参加し活発な討論がなされた。参加者のうち、招待講演者は、以下の方々である。

Shigetoshi AONO (SOKENDAI/OIIB)	Cindy BERRIE (Univ. Kansas)
Steven G. BOXER (Stanford Univ.)	Stephen D. EVANS (Univ. Leeds)
Takashi FUYUKI (NAIST)	Ning GU (Southeast Univ.)
Hiroo HAMAGUCHI (Univ. Tokyo)	Takao HAMAKUBO (Univ. Tokyo)
Robert J. HAMERS (Univ. Wisconsin-Madison)	Masahiko HARA (Tokyo Inst. Tech.)
Yoshihide HAYASHIZAKI (RIKEN)	Stanislav HUCEK (Univ. South Bohemia)
Takanori ICHIKI (Univ. Tokyo)	Toru IDE (Osaka Univ.)
Kouji IIDA (NMIRI)	Atsushi IKAI (Tokyo Inst. Tech.)
Hisao ISHII (Tohoku Univ.)	Takashi ITO (Univ. Tokyo)
Lars JEUKEN (Univ. Leeds)	Hideki KAMBARA (Central Res. Lab. Hitachi)
Hideki KANDORI (Nagoya Inst. Tech.)	Wolfgang KNOLL (Max Planck Inst.)
Joydeep LAHIRI (Corning Inc.)	Hea Yeon LEE (Osaka Univ.)
Akira MIZUNO (Toyohashi Univ. Tech.)	Iwao OHDOMARI (Waseda Univ.)
Yuko OKAMOTO (SOKENDAI/IMS)	Yasushi OKAMURA (SOKENDAI/OIIB)
Ken RITCHIE (Nagoya Univ.)	Ichio SHIMADA (Univ. Tokyo)
Masao SUGAWARA (Nihon Univ.)	Tadashi.SUGAWARA (Univ. Tokyo)
Mizuki TADA (Univ. Tokyo)	Haruo TAKAHASHI (TOYOTA Central Res. Lab.)
Samuel TERRETTAZ (Swiss Fed. Inst.Tech. Lausanne)	Keiichi TORIMITSU (NTT)
Trevor J. THORNTON (Arizona State Univ.)	Takuya UEDA (Univ. Tokyo)
Yoshio UMEZAWA (Univ. Tokyo)	Kohei.UOSAKI (Hokkaido Univ.)
Costantinos VAROTSIS (Univ. Crete)	Li-Jun WAN (Chinese Academy Sci.)
MasahitoYAMAZAKI (Shizuoka Univ.)	Toshio YANAGIDA (Osaka Univ.)
Shigeo YOSHII (Matsushita Elec.Indust.)	Tatsuo YOSHINOBU (Osaka Univ.)

2-14-4 総研大アジア冬の学校

(1) 総研大岡崎レクチャーズ：アジア冬の学校 2004

総合研究大学院大学の2004年度特定教育研究経費を得て、2004年12月6日(月)～9日(木)に岡崎コンファレンスセンターで、「総研大岡崎レクチャーズ：アジア冬の学校」を開催した。これは、2002年3月に谷村吉隆助教授と北原和夫教授(国際基督教大学)の企画で開かれた「岡崎レクチャー(アジア冬の学校)」と2003年3月に北川禎三教授の企画で開かれた「総研大・岡崎レクチャー」に続くものと言える。国内ばかりでなく、アジアの国々の学生や若手研究者を対象としているので、講義は全て英語で行われたが、今回の特徴は、講師を全て分子研の教員にしたことである。分子科学研究の幅広い分野をカバーしたが、集中講義1件とセミナー8件を用意した。

正式に登録した参加者は合計110名であった。その内訳は、アジア諸国(インド、インドネシア、韓国、シンガポール、タイ、台湾、中国、マレーシアなど)からの大学院生など37名、国内の大学の大学院生など63名、分子研の総研大生10名であった。以下にプログラムを掲載した。

TIMETABLE

	12月6日(月)	7日(火)	8日(水)	9日(木)
9:30-10:30	L1	L4	L7	森田
10:30-11:00	Coffee Break	Coffee Break	Coffee Break	Coffee Break
11:00-12:00	L2	L5	L8	宇理須
12:00-14:00	Lunch Break	Lunch Break	Lunch Break	End of School
14:00-15:00	L3	L6	L9	
15:00-15:30	Coffee Break	Coffee Break	Coffee Break	
15:30-16:30	多田	岡崎	大森	
16:30-17:30	薬師	岡本(裕)	木下	

Lectures (L1~L9)

岡本祐幸, “Basics of molecular simulations and protein folding.”

Topical Reviews

宇理須恒雄, “Integration of membrane proteins on the silicon surface and application to a biosensor.”

大森賢治, “High-precision quantum processing of molecules.”

岡崎進, “Molecular dynamics calculation of vibrational relaxation of solute molecule in solution.”

岡本裕巳, “Nanometric wavefunction imaging and dynamics by near-field spectroscopy.”

木下一彦, “A rotary molecular motor that works in your body.”

多田博一, “Recent progress in molecular-based and molecular-scale electronics.”

森田明弘, “Sum frequency generation spectroscopy: theory and application to surface analyses.”

薬師久彌, “Infrared and Raman study of a metal-insulator transition in organic conductors.”

(2) 総研大岡崎レクチャーズ：アジア冬の学校 2005

総合研究大学院大学の2005年度特定教育研究経費を得て、2006年2月20日（月）～23日（木）に岡崎コンファレンスセンターで、「総研大岡崎レクチャーズ：アジア冬の学校」を開催した。岡本祐幸名古屋大学教授による昨年度冬の学校の報告にあるように、この企画は2002年から続くものであり、今回で4回目を迎える。本年度もアジア諸国の学生や若手研究者を対象として4日間の講義（全て英語）を行った。今回の特徴は、テーマを分子ダイナミクスに絞り、各先生方の講演時間を多めにとり、集中的かつ深く講義をして頂いた点である。

参加者は合計72名であった。その内訳は、アジア諸国（タイ、大韓民国、台湾など）からの大学院生など14名、国内の大学院生など50名、総研大生8名であった。以下に講義タイトルとプログラムを掲載した。

Lectures

- 1) Professor Shaul Mukamel (University of California, Irvine, USA)
Nonlinear Optical Spectroscopy
- 2) Professor Kopin Liu (Institute of Atomic and Molecular Sciences, Taiwan)
Crossed-Beam Studies of Elementary Reactions

Topical Reviews

- 1) Professor Fumio Hirata (Institute for Molecular Science)
Dynamics and Relaxation in Liquid
- 2) Professor Yoshiyasu Matsumoto (Institute for Molecular Science)
Photo-Induced Surface Dynamics
- 3) Professor Yasuhiro Ohshima (Institute for Molecular Science)
Intermolecular Interaction Unveiled via Spectroscopic Studies on Gas-Phase Clusters
- 4) Professor Koji Ando (Kyoto University)
Quantum Transfer Processes in Chemical Many-Body Systems

TIMETABLE

Monday, 20

- 13:20 - 13:30 Opening Remarks Prof. H. Nakamura (IMS Director-General)
13:30 - 15:30 Prof. S. Mukamel, I
15:30 - 15:50 Coffee Break
15:50 - 17:50 Prof. K. Liu, I

Tuesday, 21

- 9:00 - 10:10 Prof. Y. Matsumoto
10:10 - 10:30 Coffee Break
10:30 - 12:30 Prof. S. Mukamel, II
12:30 - 14:00 Lunch
14:00 - 16:00 Prof. K. Liu, II
16:00 - 16:20 Coffee Break
16:20 - 17:30 Prof. Y. Ohshima

Wednesday, 22

9:00 - 10:10 Prof. F. Hirata
10:10 - 10:30 Coffee Break
10:30 - 12:30 Prof. S. Mukamel, III
12:30 - 14:00 Lunch
14:00 - 16:00 Prof. K. Liu, III
16:00 - 16:20 Coffee Break
16:20 - 17:30 Prof. K. Ando

Thursday, 23

9:00 - 10:30 Prof. S. Mukamel, IV
10:30 - 10:50 Coffee Break
10:50 - 12:20 Prof. K. Liu, IV

2-15 大学院教育

2-15-1 特別共同利用研究員

分子科学研究所は、分子科学に関する研究の中核として、共同利用に供するとともに、研究者の養成についても各大学の要請に応じて、大学院における教育に協力し、学生の研究指導を行っている。また、特別共同利用研究員の受入状況は以下の表で示すとおりであり、研究所のもつ独自の大学院制度（総合研究大学院大学）と調和のとれたものとなっている。

特別共同利用研究員（1991年度までは受託大学院生、1992年度から1996年度までは特別研究学生）受入状況（年度別）

所 属	1977 ～ 95	96	97	98	99	00	01	02	03	04	05
北海道大学	10									1	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	6	6	2	
お茶の水女子大学	6										
横浜国立大学	1										
金沢大学	3	3	3			1	1				
新潟大学	4										
福井大学	3	1		1	3	2					
信州大学	2		1				1				
岐阜大学	2										
名古屋大学	58	3	3	3	1	2	6	2	2		
名古屋工業大学	6			1	4	3	1			2	
豊橋技術科学大学	30								7	2	
三重大学		2	2	2	1						
京都大学	26	4	2	2	1	3	1	1			2
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	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	2	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								4		2	
東京都立大学	17									2	
名古屋市立大学						4					9
大阪市立大学	3				1						
大阪府立大学							1	1			
姫路工業大学							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	1			
東京理科大学				1	1	1	4		1	1	
東邦大学		1				1	1				
星薬科大学	1										
早稲田大学	1	1	5	2			1	1	1	1	
名城大学			2	2							
岡山理科大学											1
計	375	25	27	28	19	27	31	28	26	17	14

2-15-2 総合研究大学院大学

総合研究大学院大学は1988年10月1日に発足した。分子科学研究所は、同大学院大学に参加し、構造分子科学専攻及び機能分子科学専攻を受け持ち、1991年3月には6名の第一回博士課程後期修了者を誕生させた。なお、所属研究科は2004年4月より数物科学研究科から物理科学研究科に再編された。

その専攻の概要は次のとおりである。

構造分子科学専攻

詳細な構造解析から導かれる分子およ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。従来の分光学的およ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・分子のレベルでその発現機構を明らかにし、さらに分子およ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。

大学開設以来の分子科学2専攻の入学人数、学位取得状況等及び各年度における入学者の出身大学の分布等を以下に示す。

担当教員（2005年12月現在） 単位：人

専攻	教授	助教授	助手
構造分子科学専攻	10	9	19
機能分子科学専攻	9	9	19
計	19	18	38

在籍学生数（2005年12月現在） 単位：人

入学年度専攻	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度	計	定員
構造分子科学専攻	0	7	6	8	21	6
機能分子科学専攻	1	5	5	6	17	6

学位取得状況 単位：人

（年度別）

専攻	1991	92	93	94	95	96	97	98	99	2000	2001	2002	2003	2004	2005 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	1	3	5	3	14	10(3)	1(3)	8(2)	7(2)	8(1)	3	11	6	3	3	86(11)
機能分子科学専攻	5	5	4(1)	8(1)	4	7(1)	3(2)	6	6(1)	6	5	5(4)	1	5(4)	1	71(14)

（ ）は論文博士で外数

入学状況（定員各専攻共6） 単位：人

（年度別）

専攻	1989～95	96	97	98	99	2000	2001	2002	2003	2004	2005
構造分子科学専攻	45	10	10	12	5	8	5	3	7	7	8
機能分子科学専攻	46	8	9	7	6	0	7	6	6	6	7

外国人留学生数（国別，入学者数） 単位：人

	構造分子科学専攻			機能分子科学専攻		
	1989-2003年度	2004年度	2005年度	1989-2003年度	2004年度	2005年度
中国	9	1		4		
フランス				1		
ロシア				1		
バングラディッシュ	4		2	1		
インド	1					
チェコ				1		
韓国	2					
ナイジェリア				1		
ネパール		1				
フィリピン						2
ベトナム						1

大学別入学者数

大学名等	構造分子科学専攻			機能分子科学専攻			計
	'89～'03	'04年度	'05年度	'89～'03	'04年度	'05年度	
北海道大学			1	2			3
室蘭工業大学				1			1
東北大学	1			1			2
山形大学				2			2
筑波大学	1			1			2
群馬大学				1			1
千葉大学	5			2			7
東京大学	6			7	1		14
東京農工大学	1						1
東京工業大学				3			3
お茶の水女子大学	4			1			5
電気通信大学	1			2			3
横浜国立大学	1						1
新潟大学				1			1
長岡技術科学大学	1						1
富山大学	1						1
福井大学				1			1
金沢大学	2			2			4
信州大学	3						3
静岡大学	1	1		1			3
名古屋大学	2			2	2		6
名古屋工業大学	1						1
豊橋技術科学大学	3		1				4
三重大学	1						1
京都大学	9			13		1	23
京都工芸繊維大学	1			1			2
大阪大学	5			3	1		9
神戸大学	3						3
奈良女子大学				1			1
鳥取大学	1						1
岡山大学	2			2			4
広島大学	1			3			4
山口大学			1	1			2
愛媛大学	2				1	1	4
九州大学	2			2			4
佐賀大学				1			1
熊本大学	2						2
鹿児島大学				1			1
琉球大学	1						1
北陸先端科学技術大学院大学	3	1		1	1	1	7
東京都立大学				1			1
名古屋市立大学				2			2
大阪市立大学	1						1
大阪府立大学	2			2			4
姫路工業大学		1		1			2
石巻専修大学	1						1
青山学院大学				1			1
学習院大学	3		1	2			6
北里大学	1						1
慶應義塾大学	1			4			5
国際基督教大学				1			1
中央大学		1		1			2

東京電機大学	1					1
東京理科大学	3			1		4
東邦大学				2		2
日本大学				1		1
法政大学	1		1			2
明星大学	1					1
早稲田大学	3			4		7
静岡理工科大学					1	1
名城大学	2					2
立命館大学				2		2
龍谷大学	1					1
関西大学	1					1
甲南大学			1			1
岡山理科大学				1		1
* その他	16	3	2	10	3	34

* 外国の大学等

修了生の現職身分別進路（2005年12月現在）

現 職 身 分	構造分子科学専攻	機能分子科学専攻
教 授	1	1
助教授	7	13
講 師	3	4
助 手	14	13
大学以外の研究職	4	5
博士研究員等	23	19
企業等（研究職等）	10	13
企業等（研究職以外）	7	3

2-15-3 オープンハウス

2005年6月4日（土）に第15回分子科学研究所オープンハウスを開催した。これは、全国の大学院生、学部学生および社会人を対象に、総合研究大学院大学の基盤機関としての分子研での教育活動を外部に発信することを目的とし、年に1度開催される分子研見学会である。1月頃から分子研ホームページで告知を始めた。特に今回は、5年一貫制博士課程が構造および機能分子科学の両専攻で導入されるため、学部学生への周知を目的に、平成18年度入学学生募集ポスターにオープンハウスの告知を併記し、広報委員会を通して全国の大学の生協に掲示を依頼した。参加者の内訳は下記の表の通りである。

	学部学生	修士課程	博士課程	その他
北海道・東北（北海道、宮城）	3	1	2	1
関東（東京、神奈川、千葉、茨城、埼玉）	4	17	5	6
信越・北陸（石川）	0	2	0	0
東海（愛知、静岡、岐阜、三重）	21	12	4	7
関西（大阪、京都、兵庫、奈良）	6	8	2	2
中国（広島）	0	1	0	1
四国	0	0	0	0
九州・沖縄（福岡、鹿児島）	0	8	1	1
合計 115名	34	49	14	18

（都道府県名は参加者がいるところのみ記載）

2-15-4 夏の体験入学

2005年8月2日（火）から5日（金）の4日間にわたり「夏の体験入学」が開催された。2006年度から始まる大学院5年一貫制に備え、全国の大学の学部生と大学院修士課程学生を対象に、総研大での研究活動を分子研で体験させ、研究所を基盤とする大学院の特色を知る機会を与えることを目的としている。総研大本部から特定教育研究経費として予算の援助を受け、総研大物理科学研究科の主催行事として2004年に始まった。今回は国立天文台、核融合科学研究所、宇宙航空研究開発機構とともに広報活動やアンケート項目の共通化などを図った。しかし実際の研究体験は各研究所で独自に行われた。分子研での参加者の内訳は以下のとおりで、専門は物理・化学・生物・薬学・電気／情報・知能／機械にわたった。

所 属	1年	2年	3年	4年	修1年	修2年	計
室蘭工業大学						1	1
筑波大学				1			1
お茶の水女子大学	1						1
東京工業大学					1		1
東京大学			3				3
東京農業大学	1						1
東京理科大学				1			1
首都大学東京	3		3			1	7
早稲田大学	1		1				2
神奈川大学		2					2
金沢大学						1	1
福井大学		1					1
豊橋技術科学大学			1				1
名古屋工業大学				1			1
立命館大学	1						1
京都大学				1			1
神戸大学				1			1
福岡工業大学		1					1
計	7	4	8	5	1	3	28

研究室での体験については以下の各研究グループが対応した。

魚住教授、宇理須教授、大島教授、大森教授、小川教授、小澤助教授、櫻井助教授、田中教授、江助教授、佃助教授、永瀬教授、永田助教授、菱川助教授、藤井助教授、薬師教授、米満助教授。

2-16 財政

2-16-1 現員

2005.12.1

区分	所 長	教 授	助教授	助 手	小 計	技術職員	合 計
所長	1				1		1
理論分子科学研究系		2(1)	2(1)	4	8(2)		8(2)
分子構造研究系		2(2)	1(0)	3	6(2)		6(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)
相關領域研究系		0(1)	1(1)	1	2(2)		2(2)
極端紫外光科学研究系		2(0)	2(0)	5	9(0)		9(0)
計算分子科学研究系		2(0)	1(0)	2	5(0)		5(0)
研究施設		5(5)	9(2)	20	34(7)		34(7)
技術課						35	35
計	1	18(11)	17(6)	42	78(17)	35	113(17)
岡崎統合バイオサイエ ンスセンター		2(1)	1(0)	0	3(1)		3(1)
合計	1	20(12)	18(6)	42	81(18)	35	116(18)

() 内は客員及び委嘱数で外数である。

2-16-2 財政

(単位：千円)

科目等 \ 年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度
人件費	1,266,910	1,247,966	1,274,750	1,264,647	1,298,382
運営費，設備費	2,606,583	3,958,941	2,654,747	2,374,388	2,011,607
施設整備費	18,481	1,378,504	8,027,621	5,577	539,444
合計	3,891,974	6,585,411	11,957,118	3,644,612	3,849,433

* 2003年度までは岡崎統合事務センター経費が按分として含まれている。

* 2003年度までは2001年度に岡崎共通研究施設に改組された計算科学研究センターが含まれている。

寄付金

区 分	1999年度	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度
件数 (件)	14	14	16	15	17	14	24
金額 (千円)	12,450	18,350	14,950	18,350	15,300	9,257	35,622

共通研究施設を除く

科学研究費補助金

区 分	1999年度	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度
件数（件）	91	82	82	59	62	59	59
金額（千円）	493,030	384,803	506,564	434,556	728,415	249,900	240,200

* 2005年度は2005年12月31日 現在

岡崎共通研究施設を除く

2005年度科学研究費補助金

2005年12月31日現在

採択者数一覧

研究種目		分子科学研究所	岡崎共通研究施設	合計
特別推進研究		1	1	2
特定領域研究		19	2	21
萌芽研究		4	0	4
若手研究	（ A ）	1	0	1
若手研究	（ B ）	18	0	18
基盤研究	（ S ）	1	0	1
基盤研究	（ A ）	5	0	5
基盤研究	（ B ）	6	2	8
基盤研究	（ C ）	3	1	4
特別研究員奨励費		0	2	2
特別研究員奨励費	外国人	1	1	2
合計		59	9	68

配分額一覧

（単位：千円）

研究種目		分子科学研究所	岡崎共通研究施設	合計
特別推進研究		30,000	55,200	85,200
特定領域研究		78,000	2,800	80,800
萌芽研究		5,800	0	5,800
若手研究	（ A ）	6,000	0	6,000
若手研究	（ B ）	25,000	0	25,000
基盤研究	（ S ）	28,500	0	28,500
基盤研究	（ A ）	31,200	0	31,200
基盤研究	（ B ）	31,200	9,000	40,200
基盤研究	（ C ）	3,300	1,000	4,300
特別研究員奨励費		0	1,100	1,100
特別研究員奨励費	外国人	1,200	2,400	3,600
合計		240,200	71,500	311,700

共同研究

(単位：千円)

区 分	1999年度	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度
件数 (件)	0	5	6	7	8	13	14
金額 (千円)	0	14,240	11,980	17,120	10,590	14,740	33,084

受託研究

(上段：件数、下段：金額 (単位：千円))

区 分	1999年度	2000年度	2001年度	2002年度	2003年度	2004年度	2005年度
戦略的創造研究推進事業 (JST)	0	1	1	5	7	7	10
	0	1,100	7,700	13,000	19,206	21,827	24,115
主要5分野の研究開発委託事業 (文科省)	0	0	0	1	2	2	3
	0	0	0	263,000	540,574	916,847	584,312
その他	8	12	5	3	1	6	6
	225,207	199,491	232,625	6,800	4,200	163,792	64,907
合計	8	13	6	9	10	15	19
	225,207	200,591	240,325	282,800	563,980	1,102,466	673,334

2-17 岡崎共通施設

2-17-1 岡崎情報図書館

岡崎情報図書館は機構（岡崎3機関）の共通施設として3研究所の図書、雑誌等を収集・整理・保存し、機構（岡崎3機関）の職員や共同利用研究者等の利用に供している。

現在岡崎情報図書館は雑誌1,467種（和283、洋1,184）、単行本91,451冊（和13,145、洋78,306）を所蔵している。

また、学術雑誌の電子ジャーナル化の趨勢にいち早く対応するよう努めており、現在、機構（岡崎3機関）として約5,500誌の電子ジャーナルが機構内部からアクセスできるようになっている。

岡崎情報図書館では専用電子計算機を利用して、図書の貸出しや返却の処理、単行本ならびに雑誌の検索等のサービスを行っている。このほかWeb of Science、SciFinder Scholar等のデータベース検索や学術文献検索システムによるオンライン情報検索のサービスも行っている。また、ライブラリーカードを使用することによって、岡崎情報図書館は24時間利用できる体制になっている。

2-17-2 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は、国内外の学術会議はもとより研究教育活動にかかる各種行事に利用できる岡崎3機関の共通施設として平成9年2月に竣工した。センターは共同利用研究者の宿泊施設である三島ロッジに隣接して建てられている。

岡崎3機関内の公募によって「岡崎コンファレンスセンター」と命名された建物は、延べ床面積2,863 m²、鉄筋コンクリート造2階建てで、大型スクリーン及び最新のAV機器等を備えた250人が参加可能な大会議室、150人の中会議室、50人の小会議2室などが設けられている。中会議室は会議等の目的に応じて2分割して使用することもでき、小会議室は1室としての使用も可能である。

2-17-3 岡崎共同利用研究者宿泊施設

自然科学研究機構岡崎3機関には、日本全国及び世界各国の大学や研究機関から共同利用研究等のために訪れる研究者のために三島ロッジと山手ロッジの二つの共同利用研究者宿泊施設がある。それぞれの施設概要は下記のとおりで、宿泊の申込みは、訪問する研究室の承認を得て、web上の専用ロッジ予約システムで予約する。空室状況も同システムで確認することができる。

三島ロッジ 室数 シングル：60室 ツイン：14室 ファミリー：20室

共同設備：炊事場、洗濯室、公衆電話、情報コンセント

山手ロッジ 室数 シングル：11室 ダブル：4室 ファミリー：2室

共同設備：共同浴室、炊事場、洗濯室、公衆電話

2-17-4 職員会館

職員会館は機構（岡崎3機関）の福利厚生施設として建てられ、食堂、喫茶室、和室、会議室、トレーニング室等が設けられている。

2-18 地域社会との交流

2-18-1 国研セミナー

このセミナーは、岡崎3機関と岡崎南ロータリークラブとの交流事業の一つとして行われているもので、岡崎市内の小・中学校の理科教員を対象として、岡崎3機関の研究教育職員が講師となって1985(昭和60)年12月から始まり、毎年行われている。

分子科学研究所が担当したものは以下のとおりである。

回	開催日	テーマ	講 師
2	1986. 1.18	分子研の紹介	諸熊 奎治 教 授
3	1986. 6. 7	シンクロトロン放射とは (加速器・分光器・測定器の見学)	渡邊 誠 助教授 春日 俊夫 助教授
6	1986.10. 4	人類は元素をいかに利用してきたか	齋藤 一夫 教 授
9	1987. 6.13	レーザーの応用について	吉原經太郎 教 授
12	1987. 9.26	コンピュータで探る分子の世界	柏木 浩 助教授
15	1988. 7. 2	目で見える低温実験・発光現象と光酸化現象	木村 克美 教 授
18	1988.10.29	人工光合成とは何か	坂田 忠良 助教授
21	1989. 6.24	星間分子と水—生命を育む分子環境—	西 信之 助教授
24	1989.10.21	常温での超伝導は実現できるか	那須奎一郎 助教授
27	1990. 6.23	目で見える結晶の生成と溶解 —計算機による実験(ビデオ)—	大瀧 仁志 教 授
30	1990.10.20	電気と化学	井口 洋夫 所 長
33	1991. 6.22	自己秩序形成の分子科学 —分子はどのようにしてリズムやパターンを作り出すか—	花崎 一郎 教 授
37	1991.12.14	からだと酸素,そしてエネルギー:その分子科学	北川 禎三 教 授
39	1992. 7. 7	サッカーボール分子の世界	加藤 立久 助教授
42	1992.11.13	炭酸ガスの化学的な利用法	田中 晃二 教 授
45	1993. 6.22	化学反応はどのように進むか?	正畠 宏祐 助教授
48	1993.10. 1	宇宙にひろがる分子の世界	齋藤 修二 教 授
51	1994. 6.21	分子の動き	伊藤 光男 所 長
54	1995. 6.20	生体内で活躍する鉄イオン—国境なき科学の世界—	渡辺 芳人 教 授
57	1996. 6.28	分子を積み上げて超伝導体を作る話	小林 速男 教 授
60	1997. 6.13	生体系と水の分子科学	平田 文男 教 授
63	1998. 6.12	電子シンクロトロン放射光による半導体の超微細加工 —ナノプロセスとナノ化学—(UVSOR見学)	宇理須恆雄 教 授
66	1999. 6. 8	レーザー光で、何が見える? 何ができる?	猿倉 信彦 助教授
69	2000. 6. 6	マイクロチップレーザーの可能性	平等 拓範 助教授
72	2001. 6. 5	ナノメートルの世界を創る・視る	畠田 博一 助教授
75	2002. 6. 4	クラスターの科学—原子・分子集団が織りなす機能—	佃 達哉 助教授
78	2003. 6.24	科学のフロンティア—ナノサイエンスで何ができるか?	小川 琢治 教 授
81	2004. 6.22	生命をささえる分子の世界—金属酵素のしくみを探る	藤井 浩 助教授
84	2005. 6.28	環境に優しい理想の化学合成	魚住 泰広 教 授

2-18-2 分子科学フォーラム

分子科学研究所では『分子研コロキウム』という名前で所員に向けた分子科学のセミナーを開催し、2005年12月で778回目を終った。これとは別に、分子科学の内容を他の分野の方々や一般市民にも知らせ、また分子研コロキウムよりはもう少し幅広い科学の話を分子研の研究者が聞き、自分の研究の展開に資するようにすることを目的としたセミナーも有益であろうという考えの元に、豊田理化学研究所の協力を得て開催するに到ったのが『分子科学フォーラム』である。豊田理化学研究所の理事を長年つとめておられる井口洋夫先生の紹介によりこれが可能になり、実際の運営はコロキウム委員が担当している。年度毎に年間計画を前年度末に豊田理化学研究所の理事会に提出し、承諾を得てから実施している。

分子科学フォーラムは年6回開催することを原則にしており、第1回は1996年9月にシカゴ大学教授の岡武史先生、第2回は同年10月に生理学研究所名誉教授の江橋節郎先生に講演をお願いし、最近では2005年11月に第59回の東大理学部山内薫先生のセミナーを聞いた。文学部の先生の講演（高野陽太郎東大助教授、第37回）も1回あったが、他は自然科学の先生方の話であった。その中には、ノーベル賞に輝く白川英樹先生のセミナー（第32回）も含まれる。年6回の定例の会以外に、2000年9月には豊田理化学研究所創立60周年を記念して『科学と技術』と題する特別例会を開催し、分子科学研究所名誉教授の井口洋夫先生と、豊田理化学研究所理事長の豊田章一郎先生に御講演していただいた。またもう一つの特別例会は2000年10月に開催され、理化学研究所の伊藤正男先生から脳のお話をうかがった。

この様に、分子科学フォーラムは分子研コロキウムより幅広い人を対象にしたセミナーで、大学院生や社会人も含めた多くの方々に対して、分子科学やその関連分野の最先端の研究成果をわかりやすく紹介する事を基本趣旨として、講演者に努力をお願いしてきた。毎回簡単な講演要旨を事前に講演者に書いてもらい、それを愛知県内の大学や岡崎市内の色々な機関に送ると共に、分子研ホームページにも載せている。一般市民の参加数は会毎に大幅に変わるので、開催案内はかなりいきわたっていると思われる。テーマや講演者の選考、広報の仕方等にコロキウム委員のアイデアが大いに入ってくるので、委員には負担ではあるが、その時毎に結果の出るやりがいのある仕事であろうと思っている。これが分子研と一般社会とのつながりにより大きく貢献するものになっていけばよいと願ってやまない。

回	開催日	テーマ	講演者
54	2005. 1.25	量子コンピューティングと物性科学	井元信之（大阪大学教授）
55	2005. 2. 2	科学と社会	平田光司 （総合研究大学院大学教授）
56	2005. 3. 2	循環型エネルギー資源の創生を目指した 二酸化炭素の還元反応と有機物の酸化反応の開発	田中晃二（分子科学研究所教授）
57	2005. 7.20	ヒトゲノムを極める	清水信義（慶應義塾大学教授）
58	2005. 9. 7	微量元素と生活習慣病	桜井 弘（京都薬科大学教授）
59	2005.11. 9	強光子場科学の最前線—光をまとった分子の世界	山内 薫（東京大学教授）
60	2005.12.14	フォトリック結晶の現状と将来展望	野田 進（京都大学教授）

2-18-3 岡崎市民大学講座

岡崎市教育委員会が、生涯学習の一環として岡崎市民（定員 1,500 人）を対象として開講するもので、岡崎 3 機関の研究所が持ち回りで担当している。

分子科学研究所が担当して行ったものは以下のとおりである。

開催年度	講 師	テーマ
1975年度	赤松 秀雄	化学と文明
1976年度	井口 洋夫	分子の科学
1980年度	廣田 榮治	分子・その形とふるまい
1981年度	諸熊 奎治	くらしの中のコンピュータ
1982年度	長倉 三郎	分子の世界
1983年度	岩村 秀	物の性質は何でできるか
1987年度	齋藤 一夫	生活を変える新材料
1988年度	井口 洋夫	分子の世界
1991年度	吉原経太郎	光とくらし
1994年度	伊藤 光男	分子の動き
1997年度	齋藤 修二	分子で宇宙を見る
2000年度	茅 幸二	原子・分子から生命体までの科学
2003年度	北川 禎三	からだで活躍する金属イオン

2-18-4 安城市民公開講座等

安城市教育委員会が、生涯学習の一環として安城市民（公開講座は、一般市民約100名、シルバーカレッジ（2年間）は、熟年者約50名）を対象として開講しているもので、岡崎 3 機関の研究所が協力して、講師を派遣している。

分子科学研究所が担当して行ったものは、以下のとおりである。

安城市民公開講座

開催日	テーマ等	講 師
2002. 8.10	ナノテクノロジーの話	多田 博一 助教授
2003. 7.19	レーザー入門～光の基礎からレーザー研究の最前線まで～	平等 拓範 助教授

安城市シルバーカレッジ

開催日	テーマ等	講 師
2002. 6. 6	鏡に写った分子の話	魚住 泰広 教 授
2003. 6. 5	分子の振動を観測して蛋白質のメカニズムを明らかにする	北川 禎三 教 授
2004. 7. 6	原子のさざ波と不思議な量子の世界	大森 賢治 教 授
2005. 9. 9	動物の進化	宇理須恆雄 教 授

2-18-5 おかざき寺子屋教室

岡崎市内の小学校高学年を対象に、岡崎3機関の研究者が講義・実験を行い、学校では普段体験できないことを体験してもらい、小学生に科学に対しての夢や憧れを持ってもらうために実施するものである。1995年より年1回行われ、岡崎3機関の研究所が順に担当している。

分子科学研究所が担当したものは以下のとおりである。

回	開催日時	会 場	講 師	テーマ
1	1995.11.11(土) 13:00-16:00	岡崎地域職業訓練センター	井口 洋夫 名誉教授 加藤 立久 助教授	めざそう理科博士
2	1996.10.26(土) 12:30-15:00	岡崎商工会議所中ホール	鹿野田一司 助教授	低温物理学実験
5	1999.10.23(土) 13:30-16:00	岡崎コンファレンスセンター 分子科学研究所	谷村 吉隆 助教授	目指せ！ 科学者
8	2002.10.19(土) 14:00-16:30	分子科学研究所	魚住 泰広 教 授	僕も私も名探偵
11	2005. 5.29(日) 14:00-16:30	山手3号館大会議室	宇理須恆雄 教 授	アトム誕生 —ナノテクノロジーの世界—

備 考

(社)岡崎青年会議所との共催

参加者：小学校5～6年生 40～50名程度

2-18-6 地域の理科教育への協力

(1) スーパーサイエンスハイスクール

文部科学省が「科学技術、理科・数学教育を重点的に行う学校をスーパーサイエンスハイスクールとして指定し、高等学校及び中高一貫教育校における理科・数学に重点を置いたカリキュラムの開発、大学や研究機関との効果的な連携方策についての研究を推進し、将来有望な科学技術系人材の育成に資する」事を趣旨に平成14年度から始めた本活動を、自然科学研究機構として平成17年度も引き続き支援した(分子研レポート2002-2004参照)。分子科学研究所が平成17年度に行った支援活動は以下の通りである。

愛知県立岡崎高等学校スーパーサイエンス部活動の支援

テーマ：「三層系を用いた光合成型光反応モデル系の実験」

担当者：永田 央助教授

内 容：実験方法に関するアドバイス、疑問点への回答や背景となる化学の解説、発表に関するアドバイス等を行った。

受 賞：愛知県学生科学賞「最優秀賞」

(2) 小中学校への協力

岡崎市内の小中学校を対象に、物理・化学・生物・地学に関わる科学実験や観察を通して、科学への興味・関心を高めることを目的に、岡崎市教育委員会や各小中学校が企画する理科教育に協力している。

分子科学研究所が担当したものは以下のとおりである。

岡崎市教育委員会（出前授業）

対象校	開催日	テーマ	講 師
六ツ美北中 東海中	2002. 1. 25	光学異性体とその活用	魚住 泰広 教 授
東海中	2003. 2. 18	計算機を使って分子を見る	谷村 吉隆 助教授
常磐南小	2005. 2. 7	光の不思議	岡本 裕巳 教 授
東海中	2006. 2. 8	モルフォ蝶とナノ化粧品秘密	小川 琢治 教 授

岡崎市立小豆坂小学校（親子おもしろ科学教室）

回	開催日	テーマ	講 師
1	1996.12. 5	極低温の世界（液体窒素）	加藤 清則 技官
3	1997.12. 4	いろいろな光（紫外線、赤外線、レーザー光）	大竹 秀幸 助手
17	2004.11.30	波と粒の話	大森 賢治 教授

岡崎市立竜海中学校（授業研究協議会）

回	開催日	テーマ	講 師
18	1999. 11. 30	物体の運動：斜面を転がり落ちる運動を調べよう	黒澤 宏 教授
19	2000. 6. 14	クリーンエネルギー：環境を考えた電池を作ろう	鎌田 雅夫 助教授

2-18-7 中学校理科副教材の作成

岡崎市・岡崎市教育委員会・理科教育振興協会の要請により、市内の中学生に、岡崎3機関の研究内容を知らせることで、生徒の自然科学に対する興味、関心を高めることを目的とした、理科副教材の作成に協力している。一般公開を行った研究所が、翌年に協力し作成することが慣例になっている。作成にあたっては、各項目ごとに市内中学校の理科担当教諭及び中学生徒2名程度が、分子科学研究所の担当教官を訪問して、インタビューを行い、両者が協力して、資料を作成する。

中学校理科副教材（冊子）

「分子のしくみ」

1998年9月発行

中学校理科副教材（パネル）

「分子で見る物質の世界」、「光で分子を見る」、「鏡に映った形の分子（光学異性体）」

「ナノサイエンス 10億分の1の世界」

2001年10月作成

2-18-8 一般公開

研究活動や内容について，広く一般の方々に理解を深めていただくため研究所内を公開し，説明を行っている。現在では研究機構の研究所が輪番に公開を実施しているので，3年に1回の公開となっている。公開日には実験室の公開と講演会が行われ，約2 000人の見学者が分子研を訪れる。

回 数	実施月日	備 考
第 1 回	1979.11. 9 (Fri)	創設記念一般公開
第 2 回	1980.11.15 (Sat)	
第 3 回	1981.11.14 (Sat)	3 研究所同時公開
第 4 回	1985. 5.11 (Sat)	1 0 周年記念一般公開
第 5 回	1988.11. 5 (Sat)	
第 6 回	1991.10.26 (Sat)	
第 7 回	1994.11.12 (Sat)	
第 8 回	1997.11.15 (Sat)	
第 9 回	2000.10.21 (Sat)	
第 10 回	2003.10.25 (Sat)	入場者 1600人

2-18-9 見学受け入れ状況

年度	受入件数	見学者数	見学受入機関名
1990	10	250	(財)レーザー技術総合研究所 東京工業大学理学部応用物理学科学生 ほか
1991	3	110	静岡県新材料応用研究会 名古屋大学工学部電気・電子工学科学生 ほか
1992	7	162	三重大学技術職員研修会 慶応義塾大学理工学部化学科学生 ほか
1993	9	211	(財)名古屋産業科学研究所超伝導調査研究会 東京工業大学化学科学生 ほか
1994	7	145	(社)日本化学工業界技術部 慶応義塾大学理工学部化学科学生 ほか
1995	4	122	日本電気工業会名古屋支部 静岡県高等学校理科研究会 ほか
1996	7	180	(財)新機能素子研究開発協会 明治大学付属中野中学・高等学校理科教員 ほか
1997	9	436	(財)科学技術交流財団 慶応義塾大学理工学部化学科学生 ほか
1998	6	184	東京地方裁判所司法修習生 開成高等学校 ほか
1999	8	206	愛知県商工部 愛知県高等学校視聴覚教育研究協議会 ほか
2000	12	225	(財)衛星通信教育振興協会 東京農工大留学生 ほか
2001	8	196	中部経済産業局統計調査員協会 愛知県立豊田西高等学校 ほか
2002	5	118	関西工業教育協会 静岡県立浜松西高等学校 ほか
2003	8	146	中部経済連合会 一宮高等学校 ほか
2004	11	198	中部電力(株) 立命館高等学校 ほか
2005	10	317	核融合科学研究所、岐阜県高等学校西濃地区理化教育研究会、東京都立工業高等専門学校、自動車技術会中部支部、名古屋市高年大学鯉城学園OB中川鯉城会、岐阜工業高等専門学校、慶熙大学(Kyung hee University)、音羽町立音羽中学校、福井県立若狭高等学校、岡崎ものづくり推進協議会

2-19 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。

また、安全生成に必要な情報は、管理室のWEB ページ (<http://info.ims.ac.jp/safety/>) に集中しており、必要な規則や書式に即座にアクセス可能である。また、管理室員全員のメールアドレスが入っているメイリングリスト (safety@ims.ac.jp) も設定しており、各種の質問などに機動的に対応できる体制になっている。

2-20 広報委員会

ホームページの全面的改訂を行い、5月には一般に公開をした。単に見栄えを変えたのではなく、その構成を大幅に変更した。特に、留意した点としては、まず所内の職員や学生が活用できることを重視した上で、所外への情報発信のプラットフォームとして機能するように工夫した。前者においては、所内でのセミナーなどの一覧を整備することや、後者においては、本研究所での顕著な成果を専門家以外の人にも理解できるように配慮してトピックス（下記リスト参照）として取り上げ、また、人事公募要領を公開して広く候補者を募るなどの努力を行っている。

出版物としては、従来から発行してきた「分子科学研究所要覧」が必要以上に大部になった割には所外への情報発信力が弱いので、これを補うように、新たに「分子科学研究所」という冊子を別に刊行し、本研究所の研究面の取組や運営をより簡潔に紹介するものとした。まだ、不十分な点はあるが、これが従来の要覧に代わるものと位置づけている。その他の出版物である一年間の研究面での活動を伝える英文誌「Annual Review」、研究所の現状・評価・将来計画は「分子研レポート」、学生を対象とした「総研大パンフレット（総合研究大学院大学物理科学研究科構造分子科学専攻／機能分子科学専攻パンフレット）」上記のものではカバーできない研究所関係者の日常的な事柄については「分子研レターズ」を刊行した。この他にも、総研大の出版物である「総研大ジャーナル」の特集として「光分子科学」の特集の企画・製作に協力した。

本年度は本研究所創立30周年を迎え、広報委員会も30周年記念事業におけるホームページ、パネル作成などを通してこれに寄与すると共に、記念事業の報告集を編纂した。また、岡崎市の依頼により「施設へGo」というシリーズにおける本研究所の紹介番組に全面的に協力し、この作品はケーブルテレビにて放映されている。

この他にも、研究所主催の種々の研究会をできるだけ広く周知するためにポスターを作製・配布し、所員や学生の研究会などでのポスター発表のためのポスター印刷などの手助けも日常業務として行っている。

今後、各種出版物のそれぞれの役割をはっきりさせることにより、整理統合をはかること、また今までほとんどなされてこなかったこれら刊行物の英語版の刊行などを行っていかねばならない。広報に関する組織としては本委員会が行っているが、より効率的に業務を遂行していく集団としての広報室の整備も今後の課題である。

採用したトピックス

掲載日	件 名
2005. 6.30	光で電子を動かし物性が変わるしくみの理論
2005. 7.11	ス・パ・キャパシタの巨大容量と作動原理をミクロレベルで解明
2005.11. 2	波形変調パルスによる表面振動コヒーレンスのモード選択励起
2005.12.21	高速な光解離を利用した内殻励起状態及び光電離ダイナミクスの研究
2006. 3.23	量子のさざ波を世界最高精度で観測・制御—大森グループらが成功 【サイエンス、フィジカルレビューに相次いで発表】

2-21 知的財産

分子科学研究所では、外部委員を含めた知的財産委員会を構成し、特許出願、特許権の帰属、利益相反等に関する審議を行っている。

法人化によって知的財産の研究機関による保有が円滑に行われるようになり、独創的な技術や物質開発に対する権利が相応に保証されるシステムが確立してきたことと知的財産権の保有に対する評価が根付いてきたこともあって、研究所に於ける特許申請件数が著しく増加している。内容は、基礎研究から生まれた新しい材料の創成、光学的あるいは電氣的デバイスの開発、さらに、小型大出力セラミックスレーザーの開発関連など多岐にわたっている。この中には、企業との共同出願も含まれている。これらを基にした企業との共同研究も盛んであり、基礎科学の成果が企業を通して社会に還元される道を作っている。平成16年度の特許申請件数は、個人有としたもの3件、機構有としたもの10件（出願10件）であったが、17年度は、個人有2件、機構有15件（実出願13件）であった。審査は、ほぼ毎月行われている。

3 . 研究系及び研究施設の現状

3-1 論文発表状況

3-1-1 論文の発表状況

分子研では毎年Annual Review(英文)を発刊し、これに発表した全ての学術論文のリストを記載している。

論文の発表状況

編集対象期間	ANNUAL REVIEW	原著論文の数	総説等の数
～ 1978.8.	1978	25	13
1978.9. ～ 1979.8.	1979	55	7
1979.9. ～ 1980.8.	1980	85	21
1980.9. ～ 1981.8.	1981	114	24
1981.9. ～ 1982.8.	1982	149	14
1982.9. ～ 1983.8.	1983	177	29
1983.9. ～ 1984.8.	1984	153	26
1984.9. ～ 1985.8.	1985	196	31
1985.9. ～ 1986.8.	1986	207	45
1986.9. ～ 1987.8.	1987	287	42
1987.9. ～ 1988.8.	1988	247	39
1988.9. ～ 1989.8.	1989	281	60
1989.9. ～ 1990.8.	1990	320	60
1990.9. ～ 1991.8.	1991	260	23
1991.9. ～ 1992.8.	1992	303	41
1992.9. ～ 1993.8.	1993	298	41
1993.9. ～ 1994.8.	1994	211	26
1994.9. ～ 1995.8.	1995	293	23
1995.9. ～ 1996.8.	1996	332	40
1996.9. ～ 1997.8.	1997	403	41
1997.9. ～ 1998.8.	1998	402	44
1998.9. ～ 1999.8.	1999	401	47
1999.9. ～ 2000.8.	2000	337	30
2000.9. ～ 2001.8.	2001	405	65
2001.9. ～ 2002.8.	2002	489	59
2002.9. ～ 2003.8.	2003	530	45
2003.9. ～ 2004.8.	2004	367	40
2004.9. ～ 2005.8.	2005	402	44

3-1-2 論文の引用状況

論文の引用数については、米国トムソンサイエンティフィック社（通称ISI）の引用動向データに基づく調査結果が毎年公開されている。ただし、化学分野の場合、総被引用数で国内10位までしか公表されないため、分子科学研究所のように小さな所帯では総被引用数で10位に入り切らないことがある（15位までのクラスには入っていると思われる）。一方、国立情報学研究所の根岸正光教授は同じISI社のデータから化学分野で論文総数で国内30位以内という基準で調査対象とする組織を選んだ上で、研究者の数に依存しない論文1報あたりの平均被引用数をもとに分野の違いが出ないような統計処理を行って引用度指数というものを算出している（文献1に定義がある）。ここでは表1に文献2に公表されている最新のデータを示す。ひとつの目安でしかないが、化学分野では岡崎国立共同研究機構（分子科学研究所と見なして良いであろう）は引用度の高い論文を生産していることがわかる（論文総数は10位）。なお、物理学分野では化学分野ほどよくなくて、岡崎国立共同研究機構（同じく分子科学研究所と見なせる）は引用度指数118で9位（論文総数は1021報で14位）にランクされている。²⁾

参考文献

- 1) 根岸正光, 「大学ランキング2003」, 朝日新聞社, pp. 134-141 (2002).
- 2) 根岸正光, 「大学ランキング2006」, 朝日新聞社, pp. 204-207 (2005).

表1 日本の大学等の分野別論文引用度指数
分野: 化学(1993—2002)²⁾

順位	大学等	論文総数	引用度指数
1	岡崎国立共同研究機構	1803	158
2	東京大学	6714	135
3	名古屋大学	3240	130
4	京都大学	7349	126
5	東京理科大学	2088	123
6	北海道大学	3751	122
	東京都立大学	986	122
8	大阪大学	5899	115
	九州大学	4014	115
10	千葉大学	1486	111
	東北大学	5287	111
12	早稲田大学	1071	108
13	東京工業大学	6296	105
14	大阪市立大学	1244	102
15	京都工芸繊維大学	1196	97

3-2 理論分子科学研究系

分子基礎理論第一研究部門

永 瀬 茂 (教授) (2001 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：理論化学、計算化学

A-2) 研究課題：

- a) 分子の形と大きさおよび元素と特性を利用した分子設計と反応
- b) ナノスケールでの分子設計理論と量子化学計算

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 分子の特性は、立体的な形状とサイズおよび柔軟さに大きく支配される。サイズの大きい分子が与える外部空間および内部空間は新しい機能発現のための相互作用場として利用できる。このために、フラーレンの骨格に空孔を作ることによる分子の内包、金属内包フラーレンを化学修飾することによる内包金属の動的挙動の制御と機能化、内包金属を変えることによる反応制御と位置選択性、金属内包フラーレンのアニオンとカチオンの反応性、最も多数の原子を内包したフラーレンの構造と特性、化学修飾による新規金属内包フラーレンの単離、化学修飾によるカーボンナノチューブの分散化、化学修飾による金属性カーボンナノチューブと半導体カーボンナノチューブの分離、金属内包フラーレンを内包したカーボンナノチューブやボロンと窒素を骨格にもつチューブの電子特性、カーボンナノチューブの内径を変えることによる反応性、チトクロムP450の活性部位のヘム配位子の触媒効果、等を実験と共同して理論計算により明らかにした。また、ナノ構造による活性結合の立体保護等の計算を実行して、柔軟な形状と空孔を利用した新規な機能性分子の構築準備を行った。分子の特性は、サイズや立体的な形状ばかりでなく、構成元素の組み合わせにも大きく支配される。高周期元素の複合的な組み合わせは多種多様な機能電子系発現の宝庫である。このために、新しい超原子価化合物や高周期元素間に多重結合をもつユニークな化合物の構造と電子状態を明らかにして、高周期元素の特性を統一的に理解して予測する分子理論の展開を行っている。
- b) これまでの量子化学計算法は、サイズの小さい分子を精度高く取り扱えるが分子サイズが大きくなると計算負荷が加速的に増大してしまうので、飛躍的な進展が望まれている。現在、密度汎関数計算法は相当に大きな分子の大規模計算を可能にしているが、ナノ分子系で主題となる超分子、ゲスト・ホスト相互作用、分子認識、自己集合、生理活性などで本質的な役割をするファンデルワールス力などの弱い非共有結合相互作用を取り扱うことができないという致命的な欠点がある。このために、簡便に電子相関を取り込める分子軌道法の代表であるMP2(second-order Møller Plesset perturbation)法の新しい並列計算アルゴリズムとプログラムを作成して、2,000基底関数を超える計算をルーチンワーク化した。現在、ナノ分子の構造決定および反応経路や遷移構造が計算できるように、MP2法のエネルギー微分計算の高速並列化を実現できるアルゴリズムの開発とプログラムの作成を行っている。

B-1) 学術論文

Z. SLANINA, L. ADAMOWICZ, K. KOBAYASHI and S. NAGASE, "Gibbs Energy-Based Treatment of Metallofullerenes: Ca@C₇₂, Ca@C₇₄, Ca@C₈₂, and La@C₈₂," *Mol. Sim.* **31**, 71-77 (2005).

- Y. MAEDA, J. MIYASHITA, T. HASEGAWA, T. WAKAHARA, T. TSUCHIYA, L. FENG, Y. LIAN, T. AKASAKA, K. KOBAYASHI, S. NAGASE, M. KAKO, K. YAMAMOTO and K. M. KADISH**, “Chemical Reactivities of the Cation and Anion of $M@C_{82}$ ($M = Y, La, \text{ and } Ce$),” *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 2143–2146 (2005).
- T. SASAMORI, E. MIEDA, N. NAGAHORA, N. TAKEDA, N. TAKAGI, S. NAGASE and N. TOKITOH**, “Systematic Studies on Redox Behavior of Homonuclear Double-Bond Compounds of Heavier Group 15 Elements,” *Chem. Lett.* 166–167 (2005).
- M. YAMASHITA, Y. YAMAMOTO, K. -Y. AKIBA, D. HASHIZUME, F. IWASAKI, N. TAKAGI and S. NAGASE**, “Syntheses and Structures of Hypervalent Pentacoordinate Carbon and Boron Compounds Bearing an Anthracene Skeleton—Elucidation of Hypervalent Interaction Based on X-Ray Analysis and DFT Calculation,” *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 4354–4371 (2005).
- J. LU, S. NAGASE, Y. MAEDA, T. WAKAHARA, T. NAKAHODO, T. AKASAKA, D. YU, Z. GAO, R. HAN and H. YE**, “Adsorption Configuration of NH_3 on Single-Wall Carbon Nanotubes,” *Chem. Phys. Lett.* **405**, 90–92 (2005).
- L. FENG, T. WAKAHARA, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, Y. LIAN, T. AKASAKA, N. MIZOROGI, K. KOBAYASHI, S. NAGASE and K. M. KADISH**, “Structural Characterization of $Y@C_{82}$,” *Chem. Phys. Lett.* **405**, 274–277 (2005).
- M. YAMADA, L. FENG, T. WAKAHARA, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, Y. LIAN, M. KAKO, T. AKASAKA, T. KATO, K. KOBAYASHI and S. NAGASE**, “Synthesis and Characterization of Exohedrally Silylated $M@C_{82}$ ($M = Y \text{ and } La$),” *J. Phys. Chem. B* **109**, 6049–6051 (2005).
- K. -Y. AKIBA, Y. MORIYAMA, M. MIZOZOE, H. INOHARA, T. NISHII, Y. YAMAMOTO, M. MINOURA, D. HASHIZUME, F. IWASAKI, N. TAKAGI, K. ISHIMURA and S. NAGASE**, “Synthesis and Characterization of Stable Hypervalent Carbon Compounds (10-C-5) Bearing a 2,6-Bis(*p*-substituted phenyloxymethyl)benzene Ligand,” *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 5893–5901 (2005).
- M. KATOUDA, M. KOBAYASHI, H. NAKAI and S. NAGASE**, “Practical Performance Assessment of Accompanying Coordinate Expansion Recurrence Relation Algorithm for Computation of Electron Repulsion Integrals,” *J. Theor. Comput. Chem.* **4**, 139–149 (2005).
- T. TSUCHIYA, T. WAKAHARA, Y. MAEDA, T. AKASAKA, M. WAELCHLI, T. KATO, N. MIZOROGI, K. KOBAYASHI and S. NAGASE**, “2D NMR Characterization of the $La@C_{82}$ Anion,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **44**, 3282–3285 (2005).
- S. IWAMATSU, S. MURATA, Y. ANDOH, M. MINOURA, K. KOBAYASHI, N. MIZOROGI and S. NAGASE**, “Open-Cage Fullerene Derivatives Suitable for the Encapsulation of a Hydrogen Molecule,” *J. Org. Chem.* **70**, 4820–4825 (2005).
- Z. SLANINA, S. -L. LEE, L. ADAMOWICZ, F. UHLIK and S. NAGASE**, “Computed Structure and Energetics of $La@C_{60}$,” *Int. J. Quantum Chem.* **104**, 272–277 (2005).
- Y. RIKIISHI, Y. KASHINO, H. KUSAI, Y. TAKABAYASHI, E. KUWAHARA, Y. KUBOZONO, T. KAMBE, T. TAKENOBU, Y. IWASA, N. MIZOROGI, S. NAGASE and S. OKADA**, “Metallic Phase in the Metal-Intercalated Higher Fullerene $Rb_{8.8(7)}C_{84}$,” *Phys. Rev. B* **71**, 224118 (6 pages) (2005).
- J. LU, S. NAGASE, S. RE, X. ZHANG, D. YU, J. ZHANG, R. HAN, Z. GAO, H. YE, S. ZHANG and L. PENG**, “Interplay of Single-Wall Carbon Nanotubes and Encapsulated $La@C_{82}$, $La_2@C_{80}$, and $Sc_3N@C_{80}$,” *Phys. Rev. B* **71**, 235417 (5 pages) (2005).

J. LU, S. NAGASE, X. ZHANG, Y. MAEDA, T. WAKAHARA, T. NAKAHODO, T. TSUCHIYA, T. AKASAKA, D. YU, Z. GAO, R. HAN and H. YE, "Structural Evolution of [2+1] Cycloaddition Derivatives of Single-Wall Carbon Nanotubes: From Open Structure to Closed Three-Membered Ring Structure with Increasing Tube Diameter," *THEOCHEM* **725**, 255–257 (2005).

H. NIKAWA, T. KIKUCHI, T. WAKAHARA, T. NAKAHODO, T. TSUCHIYA, G. M. RAHMAN, T. AKASAKA, Y. MAEDA, K. YOZA, E. HORN, K. YAMAMOTO, N. MIZOROGI and S. NAGASE, "Missing Metallofullerene La@C₇₄," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 9684–9685 (2005).

Y. IIDUKA, O. IKENAGA, A. SAKURABA, T. WAKAHARA, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, T. NAKAHODO, T. AKASAKA, M. KAKO, N. MIZOROGI and S. NAGASE, "Chemical Reactivity of Sc₃N@C₈₀ and La₂@C₈₀," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 9956–9957 (2005).

Y. -K. CHOE and S. NAGASE, "Effect of the Axial Cysteine Ligand on the Electronic Structure and Reactivity of High-Valent Iron (IV) Oxo-Porphyrins (Compound I): A Theoretical Study," *J. Comput. Chem.* **26**, 1600–1611 (2005).

Z. SLANINA and S. NAGASE, "Sc₃N@C₈₀: Computations on the Two-Isomer Equilibrium at High Temperatures," *ChemPhysChem* **6**, 2060–2063 (2005).

Y. MAEDA, S. KIMURA, M. KANDA, Y. HIRASHIMA, T. HASEGAWA, T. WAKAHARA, Y. LIAN, T. NAKAHODO, T. TSUCHIYA, T. AKASAKA, J. LU, X. ZHANG, Z. GAO, Y. YU, S. NAGASE, S. KAZAOUI, N. MINAMI, T. SHIMIZU, H. TOKUMOTO and R. SAITO, "Large-Scale Separation of Metallic and Semiconducting Single-Walled Carbon Nanotubes," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 10287–10290 (2005).

M. SAITO, R. HAGA, M. YOSHIOKA, K. ISHIMURA and S. NAGASE, "The Aromaticity of the Stannole Dianion," *Angew. Chem., Int. Ed.* **44**, 6553–6556 (2005).

Y. MAEDA, J. MIYASHITA, T. HASEGAWA, T. WAKAHARA, T. TSUCHIYA, T. NAKAHODO, T. AKASAKA, N. MIZOROGI, K. KOBAYASHI, S. NAGASE, T. KATO, N. BAN, H. NAKAJIMA and Y. WATANABE, "Reversible and Regioselective Reaction of La@C₈₂ with Cyclopentadiene," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 12190–12191 (2005).

Y. IIDUKA, T. WAKAHARA, T. NAKAHODO, T. TSUCHIYA, A. SAKURABA, Y. MAEDA, T. AKASAKA, K. YOZA, E. HORN, T. KATO, M. T. H. LIU, N. MIZOROGI, K. KOBAYASHI and S. NAGASE, "Structural Determination of Metallofullerene Sc₃C₈₂ Revisited: A Surprising Finding," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 12500–12501 (2005).

W. SONG, M. NI, J. LU, Z. GAO, S. NAGASE, D. YU, H. YE and X. ZHANG, "Encapsulations of La@C₈₂ and La₂@C₈₀ inside Single-Walled Boron Nitride Nanotubes," *THEOCHEM* **730**, 121–124 (2005).

M. FUJITSUKA, O. ITO, Y. MAEDA, T. WAKAHARA, T. TSUCHIYA, T. NAKAHODO, T. AKASAKA, N. MIZOROGI and S. NAGASE, "Photophysical and Photochemical Properties of the La@C₈₂ Anion," *Chem. Lett.* 1600–1601 (2005).

W. SONG, M. NI, J. LU, Z. GAO, S. NAGASE, D. YU, H. YE and X. ZHANG, "Electronic Structures of Semiconducting Double-Walled Carbon Nanotubes: Important Effect of Interlay Interaction," *Chem. Phys. Lett.* **414**, 429–433 (2005).

M. YAMADA, T. NAKAHODO, T. WAKAHARA, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, T. AKASAKA, M. KAKO, K. YOZA, E. HORN, N. MIZOROGI, K. KOBAYASHI and S. NAGASE, "Positional Control of Encapsulated Atoms inside a Fullerene Cage by Exohedral Addition," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 14570–14571 (2005).

L. FANG, T. NAKAHODO, T. WAKAHARA, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, T. AKASAKA, T. KATO, E. HORN, K. YOZA, N. MIZOROGI and S. NAGASE, "A Singly Bonded Derivative of Endohedral Metallofullerene: $\text{La@C}_{82}\text{CBr}(\text{COOC}_2\text{H}_5)_2$," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 17136–17137 (2005).

H. NIKAWA, T. NAKAHODO, T. TSUCHIYA, T. WAKAHARA, G. M. A. RAHMAN, T. AKASAKA, Y. MAEDA, M. T. H. LIU, A. MEGURO, S. KYUSHIN, H. MATSUMOTO, N. MIZOROGI and S. NAGASE, "S-Heterocyclic Carbene with a Disilane Backbone," *Angew. Chem., Int. Ed.* **44**, 7567–7570 (2005).

M. KARNI, Y. APELOIG, N. TAKAGI and S. NAGASE, "Ab Initio and DFT Study of the ^{29}Si NMR Chemical Shifts in $\text{RSi}=\text{SiR}$," *Organometallics* **24**, 6319–6330 (2005).

Z. SLANINA, F. UHLIK, S. -L. LEE, L. ADAMOWICZ and S. NAGASE, "Enhancement of Fullerene Stabilities from Excited Electronic States," *Comput. Lett.* **1**, 313–321 (2005).

Z. SLANINA, F. UHLIK, L. ADAMOWICZ and S. NAGASE, "Computing Fullerene Encapsulation of Non-Metallic Molecules: $\text{N}_2@\text{C}_{60}$ and $\text{NH}_3@\text{C}_{60}$," *Mol. Sim.* **31**, 801–806 (2005).

B-2) 国際会議のプロシーディング

Z. SLANINA and S. NAGASE, "Computing Encapsulation of Non-metallic Molecules," Nanotech 2005—Technical Proceedings of the 2005 NSTI Nanotechnology Conference and Trade Show, Nano Science and Technology Institute, Cambridge, MA, Vol. 2, pp. 222–225 (2005).

Z. SLANINA, F. UHLIK, S. -L. LEE, L. ADAMOWICZ and S. NAGASE, "Relative Stability Evaluations for Metallofullerenes through Gibbs Energy Treatments," European Nano Systems 2005—Proceedings of the ENS 2005 Conference, Paris, pp. 148–153 (2005).

B-3) 総説、著書

赤坂 健、永瀬 茂, 「金属内包フラーレンの構造解析——最近の話題と進展」, *化学* **60**, 68–69 (2005).

赤坂 健、永瀬 茂, 「金属内包フラーレン Sc_3C_{82} の構造」, *固体物理* **40**, 962–963 (2005).

永瀬 茂、岡本祐幸, 「コンピュータで巨大分子の形や性質を予測する」, *分子科学者がいどむ12の謎*, 化学同人, 169–186 (2005).

永瀬 茂, 「韓国の重点領域・分子科学」, *総研大ジャーナル* **7**, 10–11 (2005).

Z. SLANINA and S. NAGASE, "Computational Chemistry of Isomeric Fullerenes and Endofullerenes," in *Theory and Applications of Computational Chemistry: The First Forty Years*, C. E. Dykstra, G. Frenking, K. S. Kim and G. E. Scuseria, Eds., Elsevier; Amsterdam, pp. 891–917 (2005).

B-4) 招待講演

S. NAGASE, "Large Space and Flexible Structures Provided by Nanomolecular Systems," 7th Congress of the World Association of Theoretically Oriented Chemists (WATOC2005), Cape Town (South Africa), January 2005.

S. NAGASE, "Endohedral and Exohedral Doping of Fullerenes, Carbon Nanotubes, and Cage-Like Molecules," 2nd Asian Pacific Conference on Theoretical & Computational Chemistry, Bangkok (Thailand), May 2005.

S. NAGASE, "Functional Nanomolecules," 1st NAREGI International Nanoscience Conference, Nara (Japan), June 2005.

S. NAGASE, "Nanomolecules and Computational Chemistry," NanoForum 2005, Xi'an (China), October 2005.

S. NAGASE, "Interesting Properties of Endohedral Metallofullerenes and Carbon Nanotubes," 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Society (PACIFICHEM2005), Honolulu (U.S.A.), December 2005.

S. NAGASE, "Endohedral and Exohedral Doping of Fullerenes, Carbon Nanotubes," 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Society (PACIFICHEM2005), Honolulu (U.S.A.), December 2005.

永瀬 茂,「ナノ分子と計算化学」, 第2回QuLiS(量子生命科学プロジェクト研究センター)シンポジウム「ナノサイエンスの広がり」, 広島, 2005年3月.

永瀬 茂,「金属内包フラーレンの構造と電子状態」, 分子研研究会「金属内包フラーレン研究の新展開——基礎と応用」, 岡崎, 2005年11月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

WATOC (World Association of Theoretically Oriented Chemists) Scientific Board .

APACTCC (Asian Pacific Conference on Theoretical & Computational Chemistry) Scientific Board.

分子構造総合討論会運営委員会幹事.

フラーレン・ナノチューブ研究会幹事.

学会の組織委員

Korea-Japan Joint Symposium on Theoretical and Computational Chemistry 組織委員長 (2001, 2005).

The First Asian Pacific Conference on Theoretical & Computational Chemistry 組織委員長 (2004).

文部科学省、学術振興会等の役員等

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員.

独立行政法人科学技術振興機構領域アドバイザー.

日本化学会学術賞・進歩賞選考委員会委員.

学会誌編集委員

Silicon Chemistry, Subject Editor.

J. Comput. Chem., Editorial Advisory Board.

Mol. Phys., Editorial Board.

B-8) 他大学での講義、客員

城西大学大学院理学研究科, 集中講義「有機物質設計特論」, 2005年8月29-31日.

筑波大学先端学際領域研究センター併任教授, 2002年11月 - .

筑波大学TARAセンター, 客員研究員, 2002年1月 - .

Xi'an Jiaotong University (China), 客員教授, 2005年10月 - .

B-10) 外部資金獲得

重点領域研究,「金属内包フラーレンの構造、電子状態、反応性の理論的研究」, 永瀬 茂 (1993年-1995年).

重点領域研究,「高周期典型元素化合物の反応制御」, 永瀬 茂 (1992年-1995年).

基盤研究(B),「ケイ素クラスターと遷移金属・炭素混合クラスターの構造解明と成長機構の理論研究」,永瀬 茂 (1995年-1997年).

基盤研究(B),「金属内包フラーレンの構造、物性、生成過程」,永瀬 茂 (1997年-1999年).

特定領域研究(A),「インターエレメント多重結合の理論研究」,永瀬 茂 (1997年-1999年).

特定領域研究(A),「高周期元素の特性と分子の形を利用した分子設計」,永瀬茂 (1999年-2001年).

基盤研究(B),「ナノスケールでの分子設計と反応の理論と計算システムの構築」,永瀬 茂 (2002年-2003年).

特定領域研究(A),「高周期元素とナノ柔構造の特性を利用した分子構築の理論と計算」,永瀬 茂 (2003年-2005年).

C) 研究活動の課題と展望

新素材開発において、分子の特性をいかにしてナノスケールの機能として発現させるかは最近の課題である。このために、炭素を中心とする第2周期元素ばかりでなく大きな可能性をもつ高周期元素およびナノ構造の特性を最大限に活用する分子の設計と反応が重要である。サイズの大きい分子はさまざまな形状をとれるので、形状の違いにより電子、光、磁気特性ばかりでなく、空孔の内径を調節することによりゲスト分子との相互作用と取り込み様式も大きく変化させることができる。これらの骨格に異種原子や高周期元素を加えると、変化のバリエーションを飛躍的に増大させることができる。ナノスケールでの分子設計理論と実用的な量子化学計算コンピューターシミュレーション法を確立し、新規な機能性分子を開発する。これらの分子を効率的に合成実現するためには、従来のように小さい分子から順次組み上げていくのではなく、自己集合的に一度に組織化する機構の解明と理論予測はきわめて重要である。また、現在の量子化学的手法は、小さな分子の設計や構造、電子状態、反応を精度よく取り扱えるが、ナノスケールでの取り扱いには飛躍的な進展が望まれている。

岡 本 祐 幸 (助 教 授) (1995 年 4 月 1 日 ~ 2005 年 3 月 31 日) *)

A-1) 専門領域：生物化学物理、計算科学

A-2) 研究課題：

- a) 蛋白質分子の第一原理からの立体構造予測問題および折り畳み問題
- b) 生体分子以外の系への拡張アンサンブル法の適用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 蛋白質は自然界に存在する最も複雑な分子である。よって、その立体構造を予測することは(その生化学的機能との関係上、極めて重要であるにもかかわらず)至難の業である。特に、理論的に第一原理から(自由エネルギーの最小状態を求めることにより)立体構造を予測することは不可能と広く信じられている。それは、溶媒の効果を取り入れるのが困難であるばかりでなく、系にエネルギー関数の極小状態が無数に存在するために、シミュレーションがそれらに留まってしまって、世界最速のスーパーコンピュータをもってしても、最小エネルギー状態に到達するのが絶望的であるからである。我々はシミュレーションがエネルギー極小状態に留まらない強力な計算手法を、蛋白質の立体構造予測問題に適用することを提唱してきた。具体的には、徐冷法(simulated annealing)及び拡張アンサンブル法(generalized-ensemble algorithm)を導入し、これらの手法が小ペプチド系において従来の方法よりはるかに有効であることを示してきた。拡張アンサンブル法では、非ボルツマン的な重み因子に基づいて、ポテンシャルエネルギー空間上の酔歩を実現することによって、エネルギー極小状態に留まるのを避ける。この手法の最大の特徴は唯一回のシミュレーションの結果から、最小エネルギー状態ばかりでなく、物理量の任意の温度におけるアンサンブル平均を求めることができることである。拡張アンサンブル法の代表的な例がマルチカノニカル法(multicanonical algorithm)と焼き戻し法(simulated tempering)であるが、これらの二手法ではその重み因子を決定することが自明ではない。この問題を克服するため、我々は新たにTsallis統計に基づく拡張アンサンブル法やレプリカ交換法(replica-exchange method)の分子動力学法版を開発したりしてきた。特に、レプリカ交換分子動力学法はその適用が簡便であるために、我々の発表とともにすぐに受け入れられ、現在では国内外のタンパク質の折りたたみシミュレーションにおける有力グループが相次いで採用しているとともに、AMBERなどの主要な分子シミュレーションのソフトウェアパッケージに組み込まれている。更には、正確な溶媒の効果エネルギー関数に取り入れていくことも大切であるが、距離に依存した誘電率で表すもの(レベル1)や溶質の溶媒への露出表面積に比例する項(レベル2)を試すとともに、厳密な溶媒効果(レベル3)として、RISMやSPTなどの液体の統計力学に基づくものや水分子をあらわにシミュレーションに取り入れること等を検討してきた。

本年度は、レプリカ交換分子動力学法(REMD)を様々な系に適用した。まず、水中とエタノール中の小ペプチドの2次構造形成傾向性を比較し、アルコールがペプチド内の静電相互作用を強め、2次構造形成を促進することを示した。また、アミロイド病を引き起こす β_2 ミクログロブリンのペプチドフラグメントのREMDシミュレーションでは、 β ヘアピンの形成がアミロイド形成と深く関わっていることを示唆する結果を得た。更には、X線1分子測定の実験の系を鑑み、末端を固定することがタンパク質の立体構造の安定性に与える影響を調べた。次に、REMD以外では、マルチオーバーラップ法とマルチカノニカル法を合体させた新しい拡張アンサンブル法を開発した(S. G. Itoh and Y. Okamoto, in preparation)。これによって、2つの状態間の遷移状態の情報を温度の関数として調べることができ

るようになった。また、一昨年に開発したマルチバーリック・マルチサーマル法をアラニンジペプチドの高圧実験の系に適用し、部分モルエンタルピーと部分モル体積が実験とよく一致することを示した(H. Okumura and Y. Okamoto, in preparation)。最後に、広く使われている AMBER、CHARMM、OPLS、GROMOS などの標準的なエネルギー関数(力場)が蛋白質の立体構造予測が可能な程の精度を持つか否かを調べてきたが、我々の結論は既存のどの力場も完璧なものはないというものであった。特に、主鎖のねじれエネルギー項を少し変化させると、 α ヘリックスや β シートなどの2次構造の形成傾向が大幅に変化することを昨年示した。よって、本年度は新しい主鎖のねじれエネルギー項を提唱した(Y. Sakae and Y. Okamoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* 75 (2006), in press)。

- b) 生体分子の系以外にもエネルギー極小状態が多数存在する複雑系では、拡張アンサンブル法の適用が有効である。特に、レナード・ジョーンズ系において、マルチバーリック・マルチサーマル法を適用して、相転移を調べている。

B-1) 学術論文

Y. SUGITA and Y. OKAMOTO, “Molecular Mechanism for Stabilizing a Short Helical Peptide Studied by Generalized-Ensemble Simulations with Explicit Solvent,” *Biophys. J.* **88**, 3180–3190 (2005).

K. MURATA, Y. SUGITA and Y. OKAMOTO, “Molecular Dynamics Simulations of DNA Dimers Based on Replica-Exchange Umbrella Sampling. I. Test of Sampling Efficiency,” *J. Theor. Comput. Chem.* **4**, 411–432 (2005).

K. MURATA, Y. SUGITA and Y. OKAMOTO, “Molecular Dynamics Simulations of DNA Dimers Based on Replica-Exchange Umbrella Sampling. II. Free Energy Analysis,” *J. Theor. Comput. Chem.* **4**, 433–448 (2005).

K. YOSHIDA, T. YAMAGUCHI and Y. OKAMOTO, “Replica-Exchange Molecular Dynamics Simulation of Small Peptide in Water and in Ethanol,” *Chem. Phys. Lett.* **412**, 280–284 (2005).

M. NISHINO, Y. SUGITA, T. YODA and Y. OKAMOTO, “Structures of a Peptide Fragment of β_2 -Microglobulin Studied by Replica-Exchange Molecular Dynamics Simulations—towards the Understanding of the Mechanism of Amyloid Formation,” *FEBS Lett.* **579**, 5425–5429 (2005).

Y. KAWASHIMA, Y. SUGITA, T. YODA and Y. OKAMOTO, “Effects of the Fixed End in Single-Molecule Imaging Techniques: A Replica-Exchange Molecular Dynamics Study,” *Chem. Phys. Lett.* **414**, 449–455 (2005).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

H. OKUMURA and Y. OKAMOTO, “Multibaric-multithermal ensemble simulations for fluid systems,” *Physica A* **350**, 150–158 (2005).

H. OKUMURA and Y. OKAMOTO, “Molecular simulations in the multibaric-multithermal ensembles,” *Comput. Phys. Commun.* **169**, 317–321 (2005).

B-3) 総説、著書

岡本祐幸、高田彰二, 「タンパク質のフォールディングシミュレーションから立体構造予測問題に迫る」, 特集「水と生体分子が織り成す生命現象」内, *現代化学* **408**, 47–53 (2005).

永瀬茂、岡本祐幸, 「コンピュータで巨大分子の形や性質を予測する」, 分子科学者が挑む12の謎, 分子科学研究所30周年記念委員会編, 化学同人, 第11章, pp. 169–186 (2005).

榮慶丈、岡本祐幸, 「PDBデータベースを用いたタンパク質力場パラメータの最適化」, *生物物理* **45**, 145–148 (2005).

奥村久土、岡本祐幸、「マルチパーリック・マルチサーマルアンサンブルにおけるレナード・ジョーンズ流体のシミュレーション」, 物性研究 85, 341–346 (2005).

B-4) 招待講演

Y. OKAMOTO, “Protein folding simulations by enhanced sampling techniques,” The 1st Symposium: Japanese Germany Frontiers of Science (JGFoS), Mainz (Germany), January 2005.

Y. OKAMOTO, “Transmembrane helix configurations of membrane proteins predicted by generalized-ensemble simulations,” Molecule-Based Information Transmission and Reception—Application of Membrane Protein Biofunction—(MB-ITR2005), Okazaki (Japan), March 2005.

岡本祐幸, 「自然に折りたたまる紐: タンパク質立体構造形成の計算機シミュレーション」, 名古屋大学理学部物理学科21世紀COEプログラム公開講演会, 名古屋, 2005年3月.

Y. OKAMOTO, “Protein folding problem and generalized-ensemble simulations,” The 11-th Japan-Korea Symposium: Frontier of Molecular Science, Okazaki (Japan), March 2005.

Y. OKAMOTO, “Comparisons and improvements of all-atom protein force fields,” The 2nd Open Workshop for the Scientific Research in Priority Areas: Water and Biomolecules, Tokyo (Japan), March 2005.

Y. OKAMOTO, “Generalized-ensemble simulations of protein folding,” US-Japan Symposium on Folding and Design, Philadelphia (U.S.A.), May 2005.

Y. OKAMOTO, “Molecular dynamics simulations of protein folding,” 2005 International Conference on Scientific Computation and Differential Equations, Nagoya (Japan), May 2005.

岡本祐幸, 「計算機シミュレーションでみるタンパク質の4次元構造」, 日本物理学会名古屋支部公開講演会「物理学とはなんだろう」, 名古屋, 2005年5月.

Y. OKAMOTO, “Rugged free energy landscapes of protein systems studied by generalized-ensemble simulations,” CECAM Workshop: Rugged Free Energy Landscapes: Common Computational Approaches in Spin Glasses, Structural Glasses and Biological Macromolecules, Lyon (France), June 2005.

Y. OKAMOTO, “Nanosimulation of protein folding,” 1st NAREGI International Nanoscience Conference, Nara (Japan), June 2005.

Y. OKAMOTO, “Generalized-ensemble algorithms and protein folding simulations,” The 1st CRIS International Symposium on Computational Science and Neuroscience, Sapporo (Japan), June 2005.

岡本祐幸, 「短いタンパク質の折り畳みシミュレーション」, 第1回バイオナノ研究会, 松島, 2005年9月.

岡本祐幸, 「スパコンによるタンパク質折り畳みのシミュレーション」, 名古屋大学情報連携基盤センター連続講演会第一回, 名古屋, 2005年9月.

H. OKUMURA, “Hydrodynamics in a nanoscale liquid: Comparisons of thermal relaxation processes with molecular dynamics,” CCP5 Workshop: Challenges in Mesoscale Models for Liquids: Simulation and Theory, Guildford (U.K.), October 2005.

岡本祐幸, 「短いタンパク質の折り畳みシミュレーション」, 第8回横幹技術フォーラム, 東京, 2005年11月.

奥村久土, 「新しい拡張アンサンブル法——マルチパーリック・マルチサーマル法——による液体の分子シミュレーション」, 第28回溶液化学シンポジウムプレシンポジウム, 京田辺, 2005年11月.

岡本祐幸,「タンパク質折り畳みの分子シミュレーション」,第19回分子シミュレーション討論会,岡崎,2005年11月.

奥村久士,「定温定圧アンサンブルを生成する拡張アンサンブルシミュレーション」,防衛大セミナー,防衛大学校,2005年12月.

Y. OKAMOTO, “All-atom protein force fields for folding simulations,” International Symposium on Frontiers of Computational Science 2005, Nagoya (Japan), December 2005.

B-7) 学会および社会的活動

文部科学省、学術振興会等の役員等

文部科学省計算科学技術推進ワーキンググループ委員 (2004-) .

JST戦略的創造研究推進事業CREST研究領域「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」領域アドバイザー (2005-) .

学会誌編集委員

生物物理, 会誌編集委員会委員 (2001-2002) .

物性研究, 各地編集委員 (2002-2004) .

Journal of Molecular Graphics and Modelling, International Editorial Board (1998-2000).

Molecular Simulation, Editorial Board (1999-) .

科学研究費の研究代表者、班長等

日本学術振興会未来開拓学術研究推進事業,「第一原理からのタンパク質の立体構造予測シミュレーション法の開発」,プロジェクトリーダー (1998年度-2002年度).

その他

アジア冬の学校の組織

SOKENDAI Okazaki Lectures: Asian Winter School, Okazaki, December 6-9, 2004.

高校生対象の講義

「生体分子の計算機シミュレーション」,平成16年度サイエンス・パートナーシップ・プログラム事業,南山高等学校女子部,名古屋,2004年7月.

B-8) 他大学での講義、客員

自然科学研究機構核融合科学研究所, 客員教授, 2005年4月 - .

東京大学大学院工学系研究科,「生体系の分子シミュレーション」(集中講義),物理工学特別講義Ⅰ(第一),2005年8月1日-3日.

奥村久士,「分子動力学シミュレーション——基礎から拡張アンサンブル法まで——」(集中講義),第17回液体の化学夏の学校,神戸,2005年8月.

B-9) 学位授与

村田克美, “Molecular Dynamics Simulations of DNA Dimers Based on Replica-Exchange Umbrella Sampling,” 2005年3月, 博士(理学)

伊藤 暁, “Development and Application of the Multi-Overlap Molecular Dynamics Methods,” 2005年3月, 博士(理学)

B-10)外部獲得資金

一般研究(C),「徐冷モンテカルロ法及びマルチカノカル法によるタンパク質の立体構造予測」,岡本祐幸 (1995年-1996年).

重点領域研究(公募),「新最適化アルゴリズムによるタンパク質の折れたたみ機構の研究」,岡本祐幸 (1995年).

重点領域研究(公募),「新最適化アルゴリズムによるタンパク質の折れたたみの研究」,岡本祐幸 (1996年).

重点領域研究(公募),「拡張アンサンブル法による蛋白質の立体構造予測」,岡本祐幸 (1997年).

基盤研究(B),「マルチカノカル法によるX線及びNMR実験データに基づく生体高分子の立体構造解析」,岡本祐幸 (1997年-1998年).

未来開拓学術研究推進事業,「第一原理からのタンパク質の立体構造予測シミュレーション法の開発」,岡本祐幸 (1998年-2002年).

特定領域研究(計画),「拡張アンサンブル法による蛋白質折り畳み機構の研究」,岡本祐幸 (2003年-2007年).

若手研究(B),「ナノスケールの非定常流を記述する流体力学の統計力学的検証」,奥村久士 (2005年-2007年).

C) 研究活動の課題と展望

拡張アンサンブル法を駆使して 様々な具体的な実験結果との比較ができるようになってきた。これからは 実験結果の検証ばかりでなく 新たな予測結果を提示して 新しい実験を提案できることを目指したい。また AMBERやCHARMMなどの生体高分子系における標準的なエネルギー関数(力場)のねじれエネルギー項の改善を目指してきたが、いよいよそのパラメータの精密化の段階にはいりつつある。このような標準的な力場の枠組みの中で最善のものを得ることを模索したい。

* 2005年4月1日名古屋大学大学院理学研究科教授

分子基礎理論第二研究部門

中 村 宏 樹 (教授 (兼)) (1981 年 8 月 16 日着任)

A-1) 専門領域：化学物理理論、化学反応動力学論

A-2) 研究課題：

- a) 化学反応の動力学
- b) 化学動力学のレーザー制御
- c) 多次元トンネル理論の構築と応用
- d) 分子機能の開発を目指して

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 化学反応の動力学: 実際の化学反応においては電子状態の変化する電子的に非断熱な化学反応が重要であることに鑑み、かかる反応を取り扱うための理論的手法の開発と具体的応用を進めてきた。量子力学的に正しい取り扱いが出来る緊密結合法は既に完成しており、3 原子系に適用出来る。これは、近似的手法の良さを調べるのに有効に利用出来る。一方、大次元系を扱うようにするために、一般化した TSH (Trajectory Surface Hopping) 法の開発を進めていたが、最終的に、Zhu-Nakamura (ZN) 理論を有効に利用した汎用性のあるコードを開発した。古典軌道を走らせながら、非断熱遷移を起こす場所と方向を見出し、ZN 公式で遷移を取り扱う。遷移の方向については、非断熱結合ベクトルが分からない場合でも、ヘシアンから見積もる手法を開発した。更に、軌道の転回点を見出し、トンネル効果をも取り入れることの出来るようになってきている。この手法を使えば通常の MD シミュレーションを、量子効果を入れた形に改良出来るはずである。また、位相効果をも取り入れた波束を用いた半古典力学的な手法の開発も行った。
- b) 化学動力学のレーザー制御: レーザーによって化学動力学過程を制御するための理論の開発を行った。化学動力学過程には、2 つの重要な要素がある：波束の電子的励起、及び、波束の断熱ポテンシャル上の動きである。この二つを自在に制御出来れば、様々な過程の制御が可能になる筈である。前者は、レーザー周波数の 2 次チャープを旨く行うことによって可能となる。エネルギー準位のときほど完璧ではないが、それでも 90% 以上の効率で制御することが出来る。現実の 3 原子分子などで実証した。後者を多次元系で効率良く行うために半古典力学的最適制御理論を構築した。凍結波束伝播法を用い極めて簡単な定式化を行うことに成功した。これについても、現実の 3 原子分子の異性化反応 (6 次元問題) を取り扱っている。厳密な量子力学的取り扱いでは 3 次元系も成功していない。
- c) 多次元トンネル理論の構築と応用: 現実の多原子分子に対して、対称二重井戸におけるエネルギー分裂、及び、トンネルを介しての崩壊現象に対する有効な理論を開発し、各種分子への応用を試み、実験との良い一致を得るなど成果を挙げている。計算時間のかかる高精度の量子化学計算を効率良く実行する方法をも考案した。HO₂、マロンアルデヒド、ビニルラジカル、蟻酸二量体などに適用し実験との良い一致を得ている。一方、高いレベルの量子化学計算を行わないと正しい結果が得られないことが示された。更に、振動励起状態のエネルギー分裂の理論をも構築し、振動励起による分裂の促進及び抑制の現象を解明した。
- d) 分子機能の開発を目指して: 分子が発現する機能の多くは非断熱遷移に由来していると考えられる。これを解明し制御することを目指して研究を進めている。一つはフォトクロミズムの例としてのシクロヘキサジエンとヘキサト

リエンの光による変換の研究である。 S_0 , S_1 , S_2 のポテンシャルエネルギー曲面の評価と共に、二つの重要な円錐交差での動力学を計算し、基本メカニズムを明確にした。励起過程及び初期波束の運動量分布を制御することによって変換効率を制御出来ることも判ってきた。もう一つの例は、水素原子の環状分子透過の現象である。コラニユレンを例に取り、二層目の炭素原子をボロンで置換すると水素を透過させることが出来ることが判った。これは以前我々が見つけた非断熱トンネルにおける完全反射現象の応用でもある。ナノチューブなどへの水素取り込みの可能性を示すものである。

B-1) 学術論文

A. KONDORSKIY and H. NAKAMURA, “Semiclassical Frozen Gaussian Propagation Method for Electronically Nonadiabatic Chemical Dynamics: Møller Operator Formulation and Incorporation of the Zhu-Nakamura Theory,” *J. Theor. Comput. Chem.* **4**, 89–102 (2005).

A. KONDORSKIY and H. NAKAMURA, “Semiclassical Formulation of Optimal Control Theory,” *J. Theor. Comput. Chem.* **4**, 75–87 (2005).

G. V. MIL’NIKOV, H. NAKAMURA and E. A. SOLOVEV, “Hidden Crossing Mechanism of Rotational Excitation of H_2O by Electric Pulse,” *J. Phys. B* **37**, 3419–3426 (2004).

H. TAMURA, S. NANBU, H. NAKAMURA and T. ISHIDA, “A Theoretical Study of Cyclohexadiene/Hexatriene Photochemical Interconversion: Multireference Configuration Interaction Potential Energy Surfaces and Transition Probabilities for the Radiationless Decays,” *Chem. Phys. Lett.* **401**, 487 (2005).

S. ZOU, A. KONDORSKIY, G. V. MIL’NIKOV and H. NAKAMURA, “Laser Control of Electronic Transitions of Wave Packet by Using Quadratically Chirped Pulses,” *J. Chem. Phys.* **122**, 084112 (2005).

H. NAKAMURA, “Nonadiabatic Transition and Chemical Dynamics: Multi-Dimensional Tunneling Theory and Applications of the Zhu-Nakamura Theory,” *J. Theor. Comput. Chem.* **4**, 127–137 (2005).

A. ISHKHANYAN, J. JAVANAINEN and H. NAKAMURA, “A Basic Two-State Model for Bosonic Field Theories with a Cubic Nonlinearity,” *J. Phys. A* **38**, 3505–3516 (2005).

G. V. MIL’NIKOV and H. NAKAMURA, “Instanton Theory for the Tunneling Splitting of Low Vibrationally Excited States,” *J. Chem. Phys.* **122**, 124311 (11 pages) (2005).

G. V. MIL’NIKOV, O. KÜHN and H. NAKAMURA, “Ground-State and Vibrationally Assisted Tunneling in the Formic Acid Dimer,” *J. Chem. Phys.* **123**, 074308 (2005).

A. KONDORSKIY, G. V. MIL’NIKOV and H. NAKAMURA, “Semiclassical Guided Optimal Control of Molecular Dynamics,” *Phys. Rev. A* **72**, 041401 (2005).

G. V. MIL’NIKOV, S. ZOU and H. NAKAMURA, “Incorporation of Nonadiabatic Transition into Wave-Packet Dynamics,” *J. Chem. Phys.* **123**, 141101 (2005).

B-4) 招待講演

H. NAKAMURA, “Chemical Dynamics and Molecular Functions,” 11th Japan-Korea Joint Symp. on Frontiers in Molec. Sci., Okazaki (Japan), March 2005.

H. NAKAMURA “Semiclassical Methods for Nonadiabatic Processes and Multi-Dimensional Tunneling,” CCP6 Workshop, Belfast (Ireland), April 2005.

H. NAKAMURA, “Chemical Dynamics and Molecular Functions,” Chinese National Conf. on Chemical Dynamics, Hangzhou (China), September 2005.

H. NAKAMURA, “Laser Control of Chemical Dynamics,” Pacifichem 2005, Honolulu (U.S.A.), December 2005.

H. NAKAMURA, “Zhu-Nakamura Theory and Nonadiabatic Chemical Dynamics,” Pacifichem 2005, Honolulu (U.S.A.), December 2005.

B-6) 受賞、表彰

中村宏樹, 中日文化賞 (2000).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

原子衝突研究協会委員 (1981-1994).

学会の組織委員

ICPEAQ 原子衝突物理国際会議 第9回組織委員会, 経理担当 (1979).

ICPEAQ 第17回及び第18回 全体会議委員 (1991, 1993).

ICPEAQ 第21回 準備委員会委員, 運営委員会委員 (1999).

AISAMP(アジア原子分子物理国際シンポジウム) Advisory committeeメンバー (1997, 2002).

Pacifichem 2000 シンポジウム組織者 (2000).

Workshop on Nonadiabatic Transitions in Quantum Mechanics. Internat. Advisory Committee Member (Moscow-Chernogolovka, August 2003).

文部科学省、学術振興会等の役員等

学術審議会専門委員 (1991-1995, 1998-2002, 2002-).

学会誌編集委員

Computer Physics Communication, Specialist editor (1986-).

Journal of Theoretical and Computational Chemistry, Executive editor (2001-).

J. Chem. Phys., Member of Editorial Board (2003-2005).

Int. Rev. Phys. Chem., Member of Editorial Board (2005-).

科学研究費の研究代表者、班長等

特定領域研究計画班代表者 (1999-2001).

基盤研究代表者 (1998-2000, 2001-2003).

特別推進研究代表者 (2003-2005).

その他

岡崎高校スーパーサイエンスハイスクール活動支援 (2002-2003).

分子研総括責任者.

講演「学問創造への挑戦——未来をになう皆さんへ」.

理化学研究所基礎科学特別研究員審査委員 (2003-2005).
理研基礎科学特別研究員制度推進委員会委員及び審査委員会委員 (2003-2005).
理研ジュニア・リサーチ・アソシエイト制度推進委員会委員 (2003-2005).
理研独立主幹研究員制度推進委員会委員 (2004-).
財団法人東海産業技術振興財団顧問 (2004-).
愛知県科学技術会議委員 (2004-).
東京大学物性研究所協議会委員 (2004-).

B-8) 他大学での講義、客員

九州大学総合理工学, 「非断熱過程入門」, 2005年2月7日-9日.

B-9) 学位授与

Oluwaponmile Oloyede, “Quasiclassical Studies of Chemical Reaction Dynamics with Inclusion of Tunneling and Nonadiabatic Transition,” 2005年9月, 博士(理学)

B-10) 外部獲得資金

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」, 中村宏樹 (2003年-2005年).
基盤研究(B), 「非断熱遷移と化学動力学諸問題の統合的理論研究」, 中村宏樹 (1998年-2000年).
特定研究(A), 「物質設計と反応制御の分子物理化学」, 中村宏樹 (1999年-2001年).
基盤研究(B), 「電子遷移を伴う多次元化学動力学理論の開発と応用」, 中村宏樹 (2001年-2003年).

信 定 克 幸 (助教授)(2004 年 6 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：分子物理学、電子動力学

A-2) 研究課題：

- a) 分子系における多電子ダイナミクスの実時間解析
- b) 有機分子で保護された金属クラスターの電子物性

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 素粒子などの原子核の内部構成粒子を考慮に入れなければ、分子は多数の原子核と多数の電子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区別できる。過去の分子科学におけるダイナミクスの研究では、主として多数の原子核を対象として、そのダイナミクスの問題に焦点が絞られていた。(正確に言えば、断熱近似の範囲内で電子系の自由度を原子核の自由度に取り込んでしまい、多数の原子系の問題を取り扱うこと、すなわち多原子ダイナミクスの問題に帰着する。) 当然ながら電子ダイナミクスも研究の対象に成り得るが、通常その変化は多原子ダイナミクスと比べると圧倒的に速く、実験的にも理論的にもその実時間観測・解析が難しく、十分に研究が行われていない。そこで、多電子系の実時間ダイナミクスの本質を理解すべく、強レーザー場中における銀クラスターの多重イオン化の理論的・数値計算的研究を行った。多電子ダイナミクスを理論的に取り扱うためには、電子相関を出来る限り正しく取り込みながら、電子の時間発展を記述しなければならないが、ここでは時間依存密度汎関数理論(TDDFT)に基づく数値的解析方法を採用した。その結果、銀クラスターのように価電子(s電子)と内殻電子(d電子)から構成されるような系では、s電子の動的变化を遮蔽するようにd電子が集団的に動き、この遮蔽効果のために多重イオン化率が抑制されることが分かった[*Chem. Phys. Lett.* **404**, 365–369 (2005)]。現在、ナノメートルサイズのリング状分子を対象として、円偏光レーザーパルス照射により誘起される電流の実時間ダイナミクスの研究を行っている。
- b) 複数の有機分子で保護(又は修飾)された金属クラスターは、しばしばMonolayer-Protected Metal Cluster(MPC)と呼ばれている。一般的にMPCは、裸の金属クラスターとは異なる化学的・物理的性質(例えば、線形・非線形光学応答、伝導性、磁化率、触媒作用、化学反応性など)を示すことから基礎理学・応用科学両方の観点から盛んに研究されている。本研究では、チオラート分子によって保護された金クラスターを対象として、その電子構造と光学的性質の解明を行った。その結果、チオラート分子中の硫黄原子が複数の金原子を架橋配位し、金クラスターを非常に安定化させることが分かった。また、吸収スペクトルの詳細な同定を行った。更に、王冠型をした非常に特徴的な構造を持つ金チオラート錯体の存在可能性を理論的に示し、その電子構造と光学的性質の解析を行った。これらの研究成果については、学術論文投稿準備中である。

B-1) 学術論文

K. SHIRATORI, K. NOBUSADA and K. YABANA, “Multiple Ionization of a Silver Diatomic Molecule in an Intense Laser Field,” *Chem. Phys. Lett.* **404**, 365–369 (2005).

Y. NEGISHI, K. NOBUSADA and T. TSUKUDA, “Glutathione-Protected Gold Clusters Revisited: Bridging the Gap between Gold(I)-Thiolate Complexes and Thiolate-Protected Gold Nanocrystals,” *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 5261–5270 (2005).

T. YASUIKE and K. SOMEDA, “Reply to Comment on ‘Origin of Light- Induced States in Intense Laser Fields and Their Observability in Photoelectron Spectra’,” *Phys. Rev. A* **71**, 017402 (3 pages) (2005).

Y. KUBOTA and T. ODAGAKI, “Resonant Transmission of a Soliton Across an Interface between Two Toda Lattices,” *Phys. Rev. E* **71**, 016605 (4 pages) (2005).

B-4) 招待講演

K. NOBUSADA, “Optical Response of Monolayer-Protected Gold Clusters,” Japan-Korea Joint Symposium on Frontiers in Molecular Science, Okazaki (Japan), March 2005.

信定克幸, 「Gold-Thiolate Clusters and Complexes: Electronic and Photochemical Properties」, 科研費特定研究(分子スピ
ン)金ナノ粒子勉強会, 岡崎, 2005年8月.

信定克幸, 「Photoinduced electron dynamics in Nanorings」, 電子励起と電子相関に関する研究会, 札幌, 2005年11月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本物理学会領域1(原子・分子分野)世話人 (2003-2004).

科学技術振興機構地域振興事業評価委員会専門委員 (2005-).

学会の組織委員

分子構造総合討論会プログラム委員 (2001).

日韓共同シンポジウム実行委員 (2005).

総研大アジア冬の学校実行委員 (2005-).

B-8) 他大学での講義、客員

産業技術総合研究所客員研究員, 2003年8月 - .

筑波大学計算科学研究センター共同研究員, 2004年8月 - .

B-10) 外部獲得資金

奨励研究(A), 「ヘムタンパク質に結合した一酸化炭素分子の振動エネルギー緩和の動力学」, 信定克幸 (2000年-2002年).

基盤研究(C), 「ナノメートルサイズの分子における多電子ダイナミクスの理論的研究」, 信定克幸 (2005年 -).

岩崎ファンド海外研究助成, 「DYNAM 2000 REACTIVE AND NON REACTIVE QUANTUM DYNAMICS」, 信定克幸 (2000年).

第1回理学未来潮流グラント, 「有限少数多体系における特異な現象の発見とその解釈」, 信定克幸 (2001年-2002年).

松尾学術研究助成金, 「貴金属クラスターの電子・イオンダイナミクスの理論的研究」, 信定克幸 (2002年-2004年).

C) 研究活動の課題と展望

これまでの分子科学におけるダイナミクスの研究では、多原子系のダイナミクスが主たる研究テーマであったが、最近の実験の目覚ましい進歩により、数フェムト秒からアト秒に至る超高速の多電子ダイナミクスの実時間観測が可能になってきた。しかしながら、多電子ダイナミクスの基礎理学的理解は全く十分ではなく、ましてや多電子ダイナミクスが今後、分子科学一般

や応用科学へどのように展開していくのかは、ほとんど分かっていない。そこで我々の研究グループでは、基礎理学的理解を目標として、理論的・数値的解析両方の観点から、多電子ダイナミクスの研究を行っている。これまでのところ、孤立系分子を対象として多電子ダイナミクスの研究を行ってきたが、今後は周りの環境と相互作用している分子系、特に電子のエネルギーの量子散逸を含む系の多電子ダイナミクスの理論的研究を行うことを計画している。例えば、表面吸着分子や溶媒と相互作用している分子、ヘテロな分子を多数含む大きな金属クラスターなどの系において、多電子がどのような振る舞いをするのか、特に超高速の多電子ダイナミクス（非線形光学応答や電荷移行反応）の過程に注目して研究を進めたいと考えている。また、現在進めている研究を電子ダイナミクスだけに限定せず、スピンダイナミクスや励起子ダイナミクスも含め、分子系における量子多体系ダイナミクスの実時間解析へと展開する予定である。

分子基礎理論第三研究部門

平 田 文 男 (教授)(1995 年 10 月 16 日着任)

A-1) 専門領域：理論化学、溶液化学

A-2) 研究課題：

- a) 溶液内分子の電子状態に対する溶媒効果と化学反応の理論
- b) 溶液中の集団的密度揺らぎと非平衡化学過程
- c) 生体高分子の溶媒和構造の安定性に関する研究
- d) 界面における液体の統計力学

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 溶液内分子の電子状態に対する溶媒効果と化学反応の理論
- a1) 巨大分子の静電ポテンシャル計算の高速化: 巨大分子の静電ポテンシャル計算の高速化: 近年、計算機及び計算手法の発展とともに生体分子などの巨大分子の計算が脚光を浴びている。我々のグループでは3D-RISMを用いてタンパク質の計算を行い、すでに幾つかの成功をあげている。この3D-RISMと*ab initio*を組み合わせた3D-RISM-SCFを本グループですでに提案しているが小さい分子に対して適用されたのみであった。これは3D-RISMでは溶質分子の作る静電ポテンシャルの計算コストが高いため、溶質分子が大きくなると計算が困難になるからである。そこで、新たに静電ポテンシャルの算出法を提案した。本方法では空間を溶質分子からの距離に応じて3つの領域に分割する。溶質原子の内部にあたる領域では、ポテンシャル無限大と近似することで容易に計算コストを省くことが出来る。また、溶質から十分遠い領域では部分電荷を用い計算コストを節約し、近距離では溶質の波動関数から静電ポテンシャルを直に評価することで精度を保った。実際に本方法を用い、生体分子の例としてMet-Enkephalinの計算を行い計算時間を激減させながら、精度を保てることを示した。[*J. Comput. Chem.* 27, 453 (2006) に既報]
- a2) 流体相(気、液)全領域における水の自己解離定数の決定: 近年、平田グループで提案したKovalenko-Hirata(KH) closureによりこれまで難しかった密度溶媒系の計算が可能になった。そこで、RISM-SCF/KHにより水の自己イオン化反応($2\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^-$)について超臨界領域を含む幅広い温度(300 ~ 800 K)及び密度(0.025 ~ 1.0 g/cm³)範囲での計算を網羅的に行った。自己解離定数、各分子種の双極子モーメント、分子構造等の温度・密度依存性において、実験値及びシミュレーションの結果と定性的な一致を得た。このように理論的に定性的な予測が出来るということは、産業分野における研究開発に大きな寄与を与えることが出来る。これはRISM-SCFは実験と比較して圧倒的に時間的・人的コストが低いからである。現在は超高速計算機網形成プロジェクト(NAREGI)の一環として多数の企業とRISM-SCFを用い共同研究を行っている。[*J. Phys. Chem. B*に印刷中]
- a3) 内部自由度をもつ分子からなる液体系の統計力学: ブタンやジクロロエタンなどのようにいくつかの構造異性体を持つ系でそのエネルギー差がそれほど大きくない場合、気相における平均構造と液体系におけるそれとは必ずしも同じではない。また、液体系においては温度や圧力によってその構造の比率が変化するため、分光学をはじめとする実験の重要な研究対象のひとつとされて来た。(わが国でもMizushimaらによる先駆的な研究がある。)このような液体系に対する理論的な取り扱いはいまだなされてきたが、それは多くの場合、液体系を構造異性体の混合系

とみなして、液体混合系の取り扱いを適用するか、または2面角などの構造パラメタ(オーダーパラメタ)を連続的に変化させながら自由エネルギー計算を行う手法に限られていた。以前に、Yoshida-Hirata-Munakataは分子内と分子間の分布関数を同時に決定するRISM理論の定式化を提案しているが、本研究ではこの理論をブタンおよびジクロルエタンの系に適用し、シミュレーションおよび実験と比較した。その結果、ゴーシュとトランスの存在比に関して、それらの実験結果と良好な一致を得た。[Chem. Phys. Lett. **420**, 135 (2006) に既報]

b) 生体高分子の溶媒と構造の安定性に関する研究

b1) 蛋白質の部分モル容積と圧力変性:部分モル容積は化学平衡や反応速度の圧力に対する応答を決定する重要な熱力学量である。特に、蛋白質の部分モル容積はその力学的構造安定性を反映する重要な物理量としてEdsallやKauzmannなどの先駆的な研究以来、生物物理の中心課題のひとつとなってきた。しかしながら、それを第一原理から理論的に求める試みは皆無であった。われわれは、自ら開発した二つの方法論、すなわち、3次元RISM理論とsite-site Kirkwood-Buff (SSKB)理論、に基づき蛋白質の部分モル容積を統計力学的に求めることに初めて成功し、昨年度の「リポート」で報告した。本年度はこの計算をより多くの蛋白質に敷衍するとともに、蛋白質構造の力学的安定性に関する新しい解析を行ったので以下に報告する。

圧力をかけた場合、蛋白質の構造は部分モル容積を小さくする方向に変化する(ル・シャテリエ則)。したがって、もし、二つの異なる圧力下での蛋白質の立体構造が知られていれば、高压での構造に対応する部分モル容積は定圧でのそれに比べて小さくなければならない。このこと自身はル・シャテリエ則のひとつであり単純な熱力学法則であるが、これまでこの法則を生体分子で理論的に確認した例はない。その理由のひとつは上に述べたように蛋白質の構造から部分モル容積を求める理論的方法が存在しなかったことによる。次に、高压下での蛋白質の構造も決定されていなかった。最近、Akasakaと彼の共同研究者によって、二つの圧力下でのリゾチームのX線構造が決定された。もし、その二つの構造に対する部分モル容積を同じ圧力下で決定することができれば、ル・シャテリエ則は分子レベルで証明される。我々はAkasakaらによって決定されたリゾチームの構造に対する部分モル容積を3次元RISM理論によって求めた。その結果、高压条件に対応する構造が低压下のそれに比べて約120 cc/molだけ小さな部分モル容積をもつことを明らかにし、ル・シャテリエ則を分子レベルで証明した。また、さらに詳細な解析の結果、高压構造の部分モル容積の減少に最も大きく寄与するのは蛋白質内の空隙(水分子が入り込むことができない隙間)であることが明らかになった。このような解析を実験的に行うことは不可能である。何故なら、高压下で決定された蛋白質の構造は低压条件下では不安定な構造であり、そのような構造の部分モル容積を実験的に求めることはできないからである。[J. Phys. Chem. B **109**, (2005) に既報]

b2) 蛋白質内部の空孔に閉じ込められた水分子を理論で「検出」:水はいわゆる溶媒として生体分子の構造安定性を決定する本質的因子であるばかりでなく、蛋白質内部の空孔や反応ポケット中にも存在し、その機能をコントロールする上で重要な役割を演じている。これまで実験的にはX線、中性子、NMRをはじめとして蛋白質内部の水分子を検出する様々な試みが行われてきた。しかし、理論的に蛋白質内部の水分子を「検出」した報告はない。本年度、われわれは蛋白質の水和に関して3次元RISM理論による興味深い計算結果を得た。蛋白質内に閉じ込められた水分子の分布関数が求まったのである。鶏卵の白身から取り出したリゾチームの天然構造(X線構造)を水に浸し、その系の3次元RISM方程式を解いて水分子の分布関数を求めたところ、蛋白質内部の空隙に4個の水分子が存在することを示す顕著なピークを見出した。蛋白質内部の空隙は極めてヘテロな環境にあり、統計力学が最も不得意とする問題である。このような問題に対する解が得られたこと自身、液体の統計力学の新しい一歩を意味する。しかしながら、この結果の意味するところはそれだけではない。酵素反応をはじめとする生体系の様々な機能は生体分子による基

質やリガンドの「認識」(分子認識)を本質的プロセスとして必ず含んでいるが、今回の結果はこの分子認識プロセスを解明する上での理論的な橋頭堡を築いたことを意味する。例えば、蛋白質による薬剤分子の認識を考えよう。薬剤分子を溶質として溶かし込んだ水溶液中の蛋白質の溶媒和構造を3次元RISMより求める問題は純水中のその単なる一般化であり、本質的困難はない。この計算によって得られた蛋白質内部の活性「認識」部位における水と薬剤分子の分布関数を解析すれば、それらの分子のどちらが蛋白質と強く結合しているかが解明できるはずである。[*J. Am. Chem. Soc. (Commun.)* **127**, 15334 (2005) に既報]

c) 界面における液体の統計力学

- c1) 気液界面の構造と臨界性に関する統計力学研究: 気液界面における密度はちょうど臨界点におけるそれと同様に巨視的なスケールの揺らぎを示す。この揺らぎはcapillary-waveとして知られており、中性子散乱やレーザー分光の標的となっている。一方、理論的に気液界面の構造を分子レベルで特徴づける研究はこれまでほとんど行われていない。その理由のひとつは気液界面では平均密度が場所によって大きく変わる(気体密度から液体密度まで)ことにある。もうひとつの理由はそれが巨視的なスケールで揺らぐからである。後者は密度の相関距離が発散することを意味する。これらはいずれも従来の液体統計力学において未解決になっている問題である。

われわれは昨年度の「リポート」において、これらの問題を一挙に解決する理論的枠組みを提案した。それはIOZ方程式(不均一液体のOrnstein-Zernike積分方程式)、LMBW方程式(一体密度関数を2体相関関数と関連づける方程式)およびKH-closureと連立させて解法するというもので、これにより気液界面の密度プロファイルとそこでの2体相関関数を求めることに初めて成功した。そして、気液界面の2体相関関数がちょうど臨界点におけるそれと同様の振る舞いを示すことを報告した。[*Chem. Phys. Lett.* **395**, 1 (2004)]

本研究ではDue-Henderson-Verletによって提案されたclosureを使い、気液界面における臨界性を調べた。その結果、気液相の密度差、揺らぎの相関距離および表面張力に関する臨界指数に対して、それぞれ $\beta = 0.4$ 、 $\nu = 0.65$ 、 $\mu = 1.28$ の値を得た。これらの値は平均場近似から得られる値と異なっており、実験や分子シミュレーションによって決定された値に近くなっている。これらの結果はIOZ方程式を使うことによって初めて得られたものであり、系の不均一性をあらわに考慮することが本質的であることを示している。[*Phys. Chem. Chem. Phys.* **7**, 4132 (2005) に既報]

- c2) 液液界面の分子論: 水と油の境界のようにふたつの液体が接触する領域(液液界面)は新しい化学反応の場として多くの注目を集めている。しかしながら、分子レベルでの液液界面の構造については実験的にも理論的にも未知の部分が多い。例えば、界面における各成分の平均濃度(密度)プロファイルは階段状の滑らかなカーブを描いて変化していくのか、あるいは揺らぎを伴っているのだろうか？ もし、揺らぎを伴っているとしたら、一体、どのようなスケールで揺らいでいるのだろうか？ これらに対する理論的な検討は皆無といっても過言ではない。その理由はこの問題が従来の液体統計力学の枠組みを大きく超える難しい問題だからである。この種の問題の難しさは系が不均一(平均濃度が一定ではない)だということにある。このため、通常の液体論ではいわば「入力」として与える平均濃度(密度)は位置の関数として求めるべき「未知数」となる。

本研究においてわれわれはヘキサンとメタノールの系にたいして不均一RISMとSSLMBW(site-site Lovett-Mou-Buff-Wertheim)理論の連立方程式をある近似のもとに解法し、その液液界面の構造を初めて理論的に明らかにした。その結果で特筆すべきことは、液液界面の濃度プロファイルが通常の教科書にあるような単調な階段状の関数ではなく、ナノメートルスケールの周期をもつ振動型の構造をもっていることである。このような振動型の濃度プロファイルは実験的には未だ検出されていない。[*Phys. Chem. Chem. Phys.* **7**, 1785 (2005) に既報]

B-1) 学術論文

- T. IMAI and F. HIRATA**, “Hydrophobic Effects on Partial Molar Volume,” *J. Chem. Phys.* **122**, 94509 (2005).
- A. KOBRYN, T. YAMAGUCHI and F. HIRATA**, “Pressure Dependence of Diffusion and Orientational Relaxation Time for Acetonitrile and Methanol in Water: RISM/Mode-Coupling Study,” *J. Mol. Liq.* **119**, 7–13 (2005).
- K. NISHIYAMA, T. YAMAGUCHI, F. HIRATA and T. OKADA**, “Solvation Dynamics in Water Investigated by RISM/Mode-Coupling Theory,” *J. Mol. Liq.* **119**, 63–66 (2005).
- T. IMAI, A. KOVALENKO and F. HIRATA**, “Partial Molar Volume of Proteins Studied by the Three-Dimensional Reference Interaction Site Model Theory,” *J. Phys. Chem. B* **109**, 6658–6665 (2005).
- A. KOBRYN, T. YAMAGUCHI and F. HIRATA**, “Site-Site Memory Equation Approach in Study of Density/Pressure Dependence of Translational Diffusion Coefficient and Rotational Relaxation Time of Polar Molecular Solutions: Acetonitrile in Water, Methanol in Water, and Methanol in Acetonitrile,” *J. Chem. Phys.* **122**, 184511–184524 (2005).
- A. KOVALENKO and F. HIRATA**, “A Molecular Theory of Liquid Interface,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7**, 1785–1793 (2005).
- T. IMAI, T. TAKEKIYO, A. KOVALENKO, F. HIRATA, M. KATO and Y. TANIGUCHI**, “Theoretical Study of Volume Changes Associated with the Helix-Coil Transition of an Alanine-rich Peptide in Aqueous Solutions,” *Biopolymers* **79**, 97–105 (2005).
- T. IMAI, R. HIRAOKA, A. KOVALENKO and F. HIRATA**, “Water Molecules in a Protein Cavity Detected by a Statistical-Mechanical Theory,” *J. Am. Chem. Soc. (Communication)* **127**, 15334–15335 (2005).
- A. KOVALENKO and F. HIRATA**, “A Molecular Theory of Liquid Interfaces,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7**, 1785–1793 (2005).
- I. OMELIAN, F. HIRATA and A. KOVALENKO**, “Criticality of a Liquid-Vapor Interface from an Inhomogeneous Integral Equation Theory,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7**, 4132–4137 (2005).
- S. -H. CHONG, A. J. MORENO, F. SCIORTINO and W. KOB**, “Evidence for the Weak Steric Hindrance Scenario in the Supercooled-State Reorientational Dynamics,” *Phys. Rev. Lett.* **94**, 215701 (2005).
- A. J. MORENO, S. -H. CHONG, W. KOB and F. SCIORTINO**, “Dynamic Arrest in a Liquid of Symmetric Dumbbells: Reorientational Hopping for Small Molecular Elongations,” *J. Chem. Phys.* **123**, 204505 (2005).

B-3) 総説、著書

- F. HIRATA**, “Molecular Theory of Solvation,” Kluwer-Springer Academic (2003).
- A. KOVALENKO and F. HIRATA**, “Interfacial Nanochemistry,” H. Watarai, N. Teramae, and T. Sawada, Eds., Kluwer Academic/Plenum Publishers, Chapter 5 (2005).
- 平田文男、今井隆志, 「水と生体分子の理論」, 現代化学 10月号 (2005).
- 平田文男, 「ごまめの歯ざしり」シリーズ, 化学, 化学同人, 1月号–12月号 (2005).

B-4) 招待講演

- 平田文男, 「グリッド環境を使ったナノ分野におけるリアルタイムコラボレーション」, NAREGIシンポジウム2005, 東京ファッションタウン, 2005年2月.

T. IMAI, A. KOVALENKO and F. HIRATA, “Partial Molar Volume of Protein Studied by Site-Site Kirkwood-Buff and RISM/3D-RISM Theories,” Hydration and Thermodynamics of Molecular Recognition, Tsakhadzor (Armenia), March 2005.
平田文男,「水 - アルコール混合系の構造、相分離、ダイナミクス」, 赤外放射光が拓く新しい物質・生命科学, 立命館大学 (草津), 2005年3月.

F. HIRATA, “New methodologies in computational nano-science facilitated by the GRID computing environment,” Ist NAREGI International Nanoscience Conference, Nara, June 2005.

平田文男,「理論化学の現状と課題:蛋白質 - 水相互作用を中心として」, 九重分光関連夏季セミナー2005「理論化学の現状と未来」, 九重共同研修所, 2005年7月.

F. HIRATA, “New methodologies in computational nano-science facilitated by the GRID computing environment,” The International Conference on MENS, NANO, and Smart System, Baff (Canada), July 2005.

F. HIRATA, “Molecular Theory of Fluid-Fluid Interfaces,” Chemistry Department, Rutgers University (U.S.A.), August 2005.

F. HIRATA, “Water Molecules in a Protein Cavity Detected by a Statistical Mechanics Theory,” Mathematics Department, Rutgers University (U.S.A.), August 2005.

平田文男、今井隆志,「界面における溶液構造の分子論」, 第96回触媒討論会, 熊本大学, 2005年9月.

平田文男,「ナノ科学の発展と先進シミュレーション」, 次世代スーパーコンピュータとシミュレーションの革新(国立情報学研究所主催), ホテルラフォーレ東京, 2005年9月.

平田文男、**A. KOVALENKO**、**I. OMELIAN**、今井隆志,「界面における溶液の統計力学」, 第7回近赤研セミナー「液体の構造スケールと分子間相互作用」, 関西学院大学, 三田, 2005年12月.

F. HIRATA, T. IMAI and A. KOVALENKO, “Solvation Structure and Thermodynamics of Protein Studied by the 3D-RISM Theory,” Pacificchem’05 Symposium “Interfacial Phenomena at Different Length and Time Scales,” Honolulu (U.S.A.), December 2005.

F. HIRATA, N. YOSHIDA and H. SATO, “Chemical Reactivity and Phase Behavior in Water Studied by the RISM-SCF Theory,” Pacificchem’05 Symposium “The Role of Water in Electron—Driven Processes,” Honolulu (U.S.A.), December 2005.

S. -H. CHONG, “Translational and rotational dynamics in supercooled molecular liquids,” 5th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Lille (France), July 2005.

B-6) 受賞、表彰

平田文男, 日本化学会学術賞 (2001).

佐藤啓文, 日本化学会進歩賞 (2002).

B-7) 学会及び社会的活動

学協会役員、委員

溶液化学研究会運営委員長 (2004-).

学会誌編集委員

Phys. Chem. Commun., Advisory Board.

Theoretical and Computational Chemistry, 編集委員.

B-10)外部獲得資金（分子研着任後）

重点領域研究(公募)「電極の原子配列を考慮した電極-溶液界面の統計力学理論」, 平田文男 (1997年-1999年).

特定領域研究(公募)「理論的アプローチによる繊維金属を含む生体内化学反応の解明」, 佐藤啓文 (1999年-2001年).

奨励研究(A)「溶液内分子の核磁気共鳴スペクトルに対する非経験的手法に基づく理論の開発」, 佐藤啓文 (1999年-2001年).

基盤研究(B)「化学反応に対する溶媒効果の分子論」, 平田文男 (2000年-2003年).

特定領域研究(計画)「統計力学密度汎関数理論に基づく液液界面構造の解明」, Andriy Kovalenko (2001年-2004年).

特定領域(計画)「生体内化学過程の統計力学理論」, 平田文男 (2003年-2007年).

超高速コンピュータ網形成プロジェクト「ナノサイエンス実証研究」, 平田文男(拠点長) (2003年-2007年).

若手研究(B)「過冷却状態における分子性液体の動的不均一性に関する理論的及び計算機を用いた研究」, 鄭誠虎 (2005年-2007年).

C) 研究活動の課題と展望

当研究グループでは, 数年前から 様々な界面における液体の構造と相転移を含む熱力学的挙動を解析する統計力学理論を構築している. 昨年度までに電極-溶液界面, 気液界面, 液液界面, および炭素細孔界面の問題について理論構築を行い, 界面における溶液の構造を分子レベルで解明して来た. とりわけ 昨年度行った気液・液液界面の研究は不均一な密度(濃度)分布をもつ流体系の構造を分子レベルで取り扱うことを初めて可能にしたものであり, 歴史的な意義を有する.

ところで, 液体との界面でもうひとつ重要なものがある. それは生体分子との界面である. この問題に関して 昨年度 極めて興味深い結果が得られた. すなわち, 蛋白質を水に浸して3次元RISM計算を行ったところ, 蛋白質周辺だけではなく, 蛋白質内部の空隙内に閉じ込められた水分子の分布が「観測」されたのである. しかも, その位置はX線で決定されたものとほぼ完全に一致していた. この結果は統計力学理論が蛋白質の内部水の位置を決定できたという歴史的な意義を有するだけではない. それは生体分子が営む様々な機能において本質的なプロセスである「分子認識」に対して, 液体の統計力学が極めて有効であることを意味する. 例えば, 酵素反応を考えてみよう. 酵素反応において基質分子同士やそれと酵素との電子のやりとりが重要であることは論をまたない. しかしながら「電子のやりとり」ができるためには基質分子は酵素の反応ポケットに取り込まれなければならない. また, 反応後には反応生成物が反応ポケットから吐き出されなければならない. しかしながら, これらのプロセスは反応ポケット内に存在する水分子の酵素に対する親和力(自由エネルギー)との競争関係で行われるのである. すなわち, 酵素反応においては酵素(反応ポケット)の基質分子に関する「分子認識」が反応性や反応速度にとって本質的な意味をもつ. 今回, 水に対して得られた結果は生体分子による基質やリガンドの「分子認識」過程に容易に一般化することができる. すなわち, 溶媒を「水」だけではなく水と基質分子を含む「溶液」に拡張するのである. この溶液系に対して3次元RISMの解析を行う. もし, 基質の酵素に対する親和力が水のそれに勝っていれば反応ポケット内に基質分子の分布を観測するだろう. これは「分子認識」以外の何者でもない.

本研究グループでは, 今後, この方法を酵素反応, 生体分子によるリガンドの結合, イオンチャネル, など広範な問題に応用していく計画である.

米 満 賢 治 (助教授) (1996 年 2 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：物性理論

A-2) 研究課題：

- a) 光誘起イオン性中性相転移における鎖間相互作用とコヒーレンス
- b) 1次元強相関電子系における光誘起ダイナミクス
- c) 有機導体の電荷秩序転移におけるクーロン相互作用と電子格子相互作用の協力効果
- d) 中性イオン性量子相転移近傍の量子常誘電性と電荷移動揺らぎ
- e) 有機電荷移動錯体と金属の界面を通じた電荷輸送における電子相関効果

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 交互積層型電荷移動錯体TTF-CAの光誘起相転移についてこれまで1次元モデルでダイナミクスを示したが、現実の物質には鎖間相互作用がある。イオン性相での鎖間引力が相図や格子定数の挙動に本質的な役割を果たしている。そこで鎖間相互作用を取り入れた拡張パイエルス・ハバードモデルの時間依存シュレディンガー方程式を解き、相転移ダイナミクスを調べた。イオン性相を照射すると電荷移動が光密度に対して閾値を示すのに対し、中性相を照射すると線型挙動を示すことは、孤立鎖と同様だった。前者ではモット絶縁体における電子相関のためになかなか動き出せない電子が閾値を越えて一斉に動く。後者ではバンド絶縁体における電子の運動が個別的で協調性を持たない。鎖間相互作用の大きさによって、光誘起イオン性中性相転移の動的挙動が大きく異なることもわかった。弱結合の場合、それぞれの鎖が初期格子揺らぎに依存して異なる光密度で相転移を開始するために、中途半端な光密度ではイオン性鎖と中性鎖が混在した終状態になる。TTF-CAにおけるような強結合の場合、最初の中性ドメイン形成は周囲のイオン性背景により抑制される。しかし一度中性ドメインが形成されると周囲にも中性ドメインを作ってこれらが位相をそろえて成長し、全体が中性になって終わる。実験で観測される巨視的相境界のコヒーレント運動には十分に強い鎖間相互作用が必要なことがわかった。
- b) 遷移金属(M)とハロゲン(X)が交互に並んだ1次元ハロゲン架橋金属錯体(MX鎖)は、M = Niの場合、電子相関に由来するモット絶縁体である。光照射直後の光学伝導度に金属的なドルーデ成分が観測されている。1次元ハバードモデルを厳密対角化してこの光誘起金属相を調べた。モット絶縁体を光照射するとホロンとダブロンとよばれる2種類のキャリアが生成され、それらが系を自由に動きまわることによって金属的な性質が現われた。このホロン・ダブロンの光生成は化学ドーピングによるキャリア注入と極めて類似していることを明らかにした。電子相関が弱いM = Pdの場合、CDW転移により並進対称性が破れてバンド絶縁体になるが、光を照射しても絶縁体のままである。Ni錯体とPd錯体の違いを説明するために電子間クーロン相互作用を最近接Mサイト間まで取り入れた1次元拡張ハバードモデルを用いて理論的解析を行った。M = Pdの場合は最近接サイト間クーロン相互作用が光生成キャリア間引力として強く作用するために励起子を形成して電流の流れにくい状態を作る。M = Niの場合は光生成キャリア間引力効果が相対的に弱くなるために金属状態を維持できる。この効果の違いはPd錯体とNi錯体における電子相関の強さの違いに起因した。
- c) バンド充填率が1/4の2次元有機導体で電荷秩序転移の研究が進んでいる。電荷整列状態が常磁性を示すため電子間相互作用が主役であることが明らかだが、転移は不連続で結晶構造に敏感である。そこで拡張ハバードモデルの

基底状態を厳密対角化により求めつつ、電子格子相互作用の効果を調べた。 θ 型で強い電荷不均化が知られている結晶の低対称構造に基づいた分子軌道重なりを用いると、高対称構造に基づいたものよりも弱いクーロン相互作用で電荷整列が起こる。また、適当な電子格子相互作用を用いれば、低温構造を仮定しなくともその構造がほぼ再現できることがわかった。このような電子間と電子格子間の相互作用の協力効果は、電荷秩序に有利な電荷揺らぎとスピン揺らぎを増強することにより起こる。さて、 α 型で電荷秩序転移における構造変化が小さいものについては、電子格子相互作用の効果も実際に小さい。これら格子効果の強さの傾向は最近の実験で観測された電荷融解の起こりにくさの傾向と一致している。

- d) 交互積層型電荷移動錯体DMTTF-QBr_nCl_{4-n}では組成や圧力により絶対零度で中性イオン性相転移が起きる。転移温度の圧力依存性とバレット公式的常誘電挙動から量子相転移とみなされている。一般に量子常誘電性は局所的な分極が量子揺らぎにより秩序化されないときに現れる。当該物質ではイオン性相において分極が現れるが、中性相においてのみ量子常誘電性が観測されている。この起源を考察するためにイオン性相の分極の向きを $S^z = +1$ と $S^z = -1$ で中性相を $S^z = 0$ で表し、量子ブルーム - エメリー - グリフィスモデルの平均場解を求めた。この擬1次元古典版はTTF-CAの強誘電および常誘電のイオン性相と中性相を再現する際の基礎となる。量子項のため電荷移動揺らぎが発生して電荷移動量は0でも1でもない中間の値をとる。その結果として、量子相転移点近傍の中性相でバレット公式的常誘電挙動が現れることがわかった。
- e) 有機電荷移動錯体結晶上に電界効果トランジスタを作成すると、その電流 - ゲート電圧特性は結晶の電子状態による。モット絶縁体であれば両極的特性が、バンド絶縁体であれば単極的特性が観測されている。この起源をチャンネルとソース / ドレイン電極を含め1次元化して考えた。界面での障壁形成に必要な静電ポテンシャルはポワソン方程式により求める。物質間の仕事関数差を考慮したハバードモデルの電流を計算し、この特性を再現した。しかしゲート電極は絶縁膜をととしてチャンネルに効果を及ぼすので、ポワソン方程式の境界条件として扱うには限界がある。もしチャンネルとソース / ドレイン電極の界面が本質的であればゲートをはずし、2つの電極にそれぞれ仕事関数の大きく異なる別の金属を使えばよい。この電流 - 電圧特性を調べれば、電子相関と界面障壁の絡み合いをみることができる。実際に結晶がバンド絶縁体のときのみ整流作用が得られることが実験で観測され、理論計算でも再現してこれを実証できた。モット絶縁体の場合、界面での障壁が高くて後方散乱が強くなるに応じて、結晶中のバンド充填率が半分からずれてウムクラップ散乱が弱くなる。その結果、電圧の符号でなく絶対値に応じた電流が流れることがわかった。

B-1) 学術論文

K. YONEMITSU, “Mechanism of Ambipolar Field-Effect Carrier Injections in One-Dimensional Mott Insulators,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 2544–2553 (2005).

N. MAESHIMA and K. YONEMITSU, “Photoinduced Metallic Properties of One-Dimensional Strongly Correlated Electron Systems,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 2671–2674 (2005).

M. INDERGAND, Y. YAMASHITA, H. KUSUNOSE and M. SIGRIST, “Effective Interaction between the Interpenetrating Kagome Lattices in Na_xCoO₂,” *Phys. Rev. B* **71**, 214414 (19 pages) (2005).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. YONEMITSU, “Theory of Photoinduced Phase Dynamics in Organic Charge-Transfer Complexes,” *J. Lumin.* **112**, 279–282 (2005).

J. KISHINE, T. OHARA, T. LUTY and K. YONEMITSU, “Interchain Coulomb-Lattice Relaxation and Multicriticality in Charge-Transfer Organic Complexes,” *Synth. Met.* **154**, 257–260 (2005).

K. YONEMITSU, “Photoinduced Dynamics and Nonequilibrium Characteristics in Quasi-One-Dimensional Electron Systems: Mott Insulators vs. Band Insulators,” *J. Phys.: Conf. Series* **21**, 30–37 (2005).

N. MAESHIMA and K. YONEMITSU, “Optical Responses of Photoexcited States in the One-Dimensional Ionic Hubbard Model,” *J. Phys.: Conf. Series* **21**, 183–188 (2005).

Y. YAMASHITA and K. YONEMITSU, “Quantum Ising Model Coupled with Conducting Electrons,” *J. Phys.: Conf. Series* **21**, 232–236 (2005).

N. MAESHIMA, K. OKUNISHI, K. OKAMOTO, T. SAKAI and K. YONEMITSU, “Field-Induced Phase Transitions and Long-Range Orders in the $S = 1/2$ Spin Bond-Alternating Chain with Frustrating Interaction,” *J. Phys. Soc. Jpn. Suppl.* **74**, 63–66 (2005).

A. MATSUO, K. HOSOKAWA, Y. NARUMI, K. OKUNISHI, N. MAESHIMA, T. ASANO, Y. AJIRO, N. ISHIDA, T. NOGAMI and K. KINDO, “Effect of Staggered Field on the Magnetization Process of $S = 1/2$ Antiferromagnetic Chains,” *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **159**, 158–162 (2005).

K. UEDA and Y. YAMASHITA, “Magnetism in Strongly Correlated and Frustrated Systems,” *Physica B* **359**, 626–632 (2005).

B-4) 招待講演

米満賢治, 「分子集合体の協調的電荷移動と非平衡物性」, 平成16年度第2期菅野シンポジウム, 東京大学駒場キャンパス, 2005年3月.

K. YONEMITSU, “Photoinduced Dynamics and Nonequilibrium Characteristics in Quasi-One-Dimensional Electron Systems: Mott Insulators vs. Band Insulators,” Second International Conference on Photo-induced Phase Transitions; Cooperative, Nonlinear and Functional Properties, Rennes (France), May 2005.

K. YONEMITSU, “Photoinduced Neutral-Ionic Transition Dynamics in Quasi-One-Dimensional Electron-Lattice Systems: Effects of Interchain Interactions,” International Symposium on Molecular Conductors—Novel Functions of Molecular Conductors under Extreme Conditions—, Hayama (Japan), July 2005.

前島展也, 「フラストレートした擬一次元系の磁場誘起非整合秩序」, 日本物理学会 2005年秋季大会 シンポジウム「低次元量子スピン系の新しい非整合秩序——スピンのスーパーソリッド——」, 同志社大学京田辺キャンパス, 2005年9月.

K. YONEMITSU, “Mechanism of Ambipolar Field-Effect Transistors on One-Dimensional Organic Mott Insulators,” The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, Honolulu (U.S.A.), December 2005.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本物理学会名古屋支部委員 (1996-97, 98-2000).

日本物理学会第56期代議員 (2000-01).

日本物理学会領域(分子性固体・有機導体分野)世話人 (2003-04).

学会誌編集委員

日本物理学会誌, 編集委員 (1998-99).

B-10) 外部獲得資金

重点領域研究(公募研究), 「半充填近傍のスピンギャップと束縛対生成に対するフォノンの効果」, 米満賢治 (1996年).

重点領域研究(公募研究), 「微小磁性体中の束縛された電子の運動と伝導性, トンネル現象の研究」, 米満賢治 (1997年).

奨励研究(A), 「二バンド系における強相関電子相と次元クロスオーバー」, 米満賢治 (1998年-1999年).

基盤研究(C), 「低次元分子性導体の電荷秩序と絶縁機構, 光誘起非線型ダイナミクス」, 米満賢治 (2000年-2002年).

基盤研究(C), 「分子性物質の光誘起相転移と非平衡秩序形成」, 米満賢治 (2003年-2006年).

特定領域研究(計画研究), 「極限環境下の分子性導体における集団的な電荷ダイナミクスの理論」, 米満賢治 (2003年-2007年).

産学連携等研究費(NAREGI ナノ磁性班), 「分子性物質におけるナノ構造からの非平衡相転移と電子物性」, 米満賢治 (2003年-2007年).

C) 研究活動の課題と展望

分子性物質を平衡状態から遠くにもっていったときの現象を理論的に研究している。そのうち光誘起相転移については、時間分解能の飛躍を伴った実験技術の進歩とともに、古典統計模型による確率論的時間発展から遍歴電子模型による決定論的時間発展へと理論的にも進展してきた。さらに物質及び電子状態に応じてかなり定量的に解析できるようになった。この中で今後飛躍的な進展が望める課題として、電子相関効果が特徴的に現れる1次元電子系における励起子効果や格子効果と光照射後超高速応答・緩和現象、広い時間スケールでの電荷揺らぎと電荷秩序化が観測されている2次元電子系における長距離クーロン相互作用と電子格子相互作用の協力効果と低温結晶構造及び光誘起電荷融解・臨界緩和現象、量子相転移近傍の光誘起巨大応答と量子臨界性の関連性などを挙げている。非線型感受率を通して初めて低次元有機導体とペロブスカイト酸化物における量子臨界性を統一的に理解できると考えている。これらとは別に、分子性物質と金属界面を通した電荷輸送における電子相関と集団運動の問題を、緩和過程から明らかにする。

3-3 分子構造研究系

分子構造学第一研究部門

岡 本 裕 巳 (教授) (2000 年 11 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：分子分光学、物理化学

A-2) 研究課題：

- a) 近接場光学的手法による超高時間空間分解分光システムの構築
- b) メソスコピックな構造を持つ分子集合体の構造とダイナミクスの観測
- c) 金属微粒子の素励起波動関数のイメージングと微粒子内ダイナミクスの観測
- d) 金属微粒子及びその凝集体 配列体における電場増強効果

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 分子・分子集団におけるナノメートルオーダーの空間的挙動と(超)高速ダイナミクスを探るための、近接場時間分解分光装置の製作と試料の測定を行っている。近接場光学顕微鏡はファイバプローブ方式による市販装置のパーツを改造したものと、閉回路制御方式のピエゾステージを用い、高い位置再現性・安定性を備えた自作装置を用いている。これらにフェムト秒Ti:sapphireレーザー等、ダイナミクス計測に必要な装置群を組み合わせ測定を行う。現時点で光学像の横方向空間分解能は50 nm程度、時間分解能は100 fs以上を同時に実現している。時間分解測定は、主として単一波長の時間分解吸収相関法で行っているが、検出光にフォトニッククリスタルファイバーで単色フェムト秒パルスブロードバンド光に変換し(パルス幅sub-ps ~ psレベル)、それを利用する二波長実験も可能となっている。また研究対象の拡大を念頭に、広帯域波長可変超短パルスレーザー光を得るため、同期励起光パラメトリック発振器を製作中である。更に、時間分解能の飛躍的な向上を目指し、空間位相変調器による分散補償を導入した装置を構築中である。
- b) 上述の装置を用いて、試料の測定と解析を行っている。所内外との共同研究として、鎖状ポルフィリン化合物や、自己組織化膜を形成するポルフィリン化合物、LB膜を生成するポリジアセチレン系化合物に関して、近接場分光法に基づいた研究を進行中である。ポルフィリン自己組織化膜では、自己組織化膜がクロモフォアのH会合体の単分子層(或いは数分子層以下)からなっていることを明らかにした。鎖状ポルフィリンでは、鎖内の長距離エネルギー移動を示唆する結果を得たが、解析中である。ポリジアセチレンLB膜では、膜の色相の差によるモルフォロジーの違いを分光学的に検討中である。
- c) 各種形状金属微粒子の分光及びダイナミクスの測定を、単一微粒子内で空間を分解して行っている。ロッドや三角プレート状の貴金属微粒子の近接場分光測定により、プラズモンモードの波動関数の二乗振幅に対応するイメージが得られることを示した。また光の波長やロッドのサイズにより、共鳴するモードが異なり、得られるイメージも対応して変化することを示した。この結果は、光学測定で波動関数の可視化を行ったという意義のみならず、ロッド全体にわたるコヒーレンスの存在や、双極子禁制遷移の局所励起による実現といった面においても意味があると考えられる。波動関数の可視化に関連して、近接場光学測定におけるプローブの影響に関する、実験的な系統的検討をも行っ

ており、機構内の理論研究者との共同研究を予定している。超高速時間分解測定では、微粒子内の位置によって全く緩和のスキーム(特に電子-格子緩和過程)が異なることを見いだしているが、その効果の一部は電子温度の上昇による光子状態密度の変化として解釈できることがわかりつつある。

- d) 貴金属微粒子を凝集・配列した試料の近接場領域での光学的性質に関する研究を、所外との共同研究で行っている。また微粒子と周囲のクロモフォアとなる分子との相互作用に関しても研究している。球状微粒子凝集体では以前から、微粒子間の空隙に強い電場増強がありそれが単分子レベルの表面増強ラマン散乱にかかわることが理論的に提案されている。今回これらのことを近接場イメージによって明確に実証することに成功した。

B-1) 学術論文

K. IMURA, T. NAGAHARA and H. OKAMOTO, “Near-Field Optical Imaging of Plasmon Modes in Gold Nanorods,” *J. Chem. Phys.* **122**, 154701 (5 pages) (2005).

K. IMURA, T. NAGAHARA and H. OKAMOTO, “Near-Field Two-Photon Induced Photoluminescence from Single Gold Nanorods and Imaging of Plasmon Modes,” *J. Phys. Chem. B* **109**, 13214–13220 (2005).

J. K. LIM, K. IMURA, T. NAGAHARA, S. K. KIM and H. OKAMOTO, “Imaging and Dispersion Relations of Surface Plasmon Modes in Silver Nanorods by Near-Field Spectroscopy,” *Chem. Phys. Lett.* **412**, 41–45 (2005).

T. NAGAHARA, K. IMURA, H. OKAMOTO, A. OGURO and H. IMAHORI, “Morphological and Spectroscopic Properties of Thin Films of Self-Assembling Amphiphilic Porphyrins on Hydrophilic Surface as Revealed by Scanning Near-Field Optical Microscopy,” *J. Phys. Chem. B* **109**, 19839–19844 (2005).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. NAGAHARA, K. IMURA and H. OKAMOTO, “Pump-probe near-field optical microscopy of molecular aggregates using supercontinuum,” *Ultrafast phenomena XIV*, Springer, pp. 434–436 (2005).

K. IMURA, T. NAGAHARA and H. OKAMOTO, “Ultrafast near-field microscope imaging of electron and phonon relaxation in single gold nanoparticle,” *Ultrafast phenomena XIV*, Springer, pp. 655–657 (2005).

B-3) 総説、著書

井村考平、永原哲彦、岡本裕巳、「金ナノロッドのプラズモンモードイメージングとダイナミクス」, *応用物理* **74**, 492–496 (2005).

岡本裕巳、「『近接場』の光で見えてきたナノの世界」, *総研大ジャーナル No. 8*, 10–12 (2005).

岡本裕巳、「第2版 標準化学用語辞典」, 日本化学会編, 丸善 (2005)(分担執筆)

岡本裕巳、「レーザー」, 「非線形光学過程」, 「時間分解赤外分光 - ピコ秒～フェムト秒の時間分解測定」, 第5版実験化学講座9「物質の構造I 分光 上」, 丸善, pp. 21–41, 459–464 (2005).

岡本裕巳、「光で分子の一瞬をとらえる」, 「分子科学者がいどむ12の謎」, 分子科学研究所編, 化学同人, pp. 79–95 (2005).

岡本裕巳、「光ナノ計測」, 「光科学研究の最前線」, 光科学研究の最前線編集委編, 強光子場科学研究懇談会, pp. 94–95 (2005).

B-4) 招待講演

H. OKAMOTO, “Nanometric wavefunction imaging and dynamics by near-field spectroscopy,” 11th Japan-Korea Joint Symposium on Frontiers in Molecular Science, Okazaki (Japan), March 2005.

岡本裕巳, 「動的近接場分光法と波動関数イメージング」, エクストリームフォトンクス研究, 和光, 2005年4月.

岡本裕巳, 「近接場光学による励起状態の波動関数のイメージング」, Imaging Science 第一回シンポジウム, 岡崎, 2005年8月.

井村考平, 「貴金属微粒子の近接場分光」, 先端的レーザー分光の若手シンポジウム, 和光, 2005年11月.

K. IMURA, T. NAGAHARA and H. OKAMOTO, “Wavefunction imaging and dynamics of gold nanorods by near-field spectroscopy,” 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, Honolulu (U.S.A.), December 2005.

B-6) 受賞、表彰

岡本裕巳, 光科学技術研究振興財団研究者表彰 (1994).

岡本裕巳, 分子科学研究奨励森野基金 (1999).

井村考平, 応用物理学会講演奨励賞 (2004).

井村考平, ナノオブティクス賞 (2005).

井村考平, 分子構造総合討論会奨励賞 (2005).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本化学会 トピックス小委員会委員 (1993-1996).

日本分光学会 編集委員 (1993-2001).

日本分光学会 東海支部幹事 (2001-).

日本化学会 東海支部常任幹事 (2003-2005).

分子科学研究会 事務局 (2004-).

学会の組織委員

The International Symposium on New Developments in Ultrafast Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (Tokyo), Organizing Committee (1995).

The Tenth International Conference on Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (Okazaki), Local Executive Committee (2001).

その他

スーパーサイエンスハイスクール(愛知県立岡崎高等学校)活動支援 (2003, 2004).

B-8) 他大学での講義、客員

東京工業大学大学院理工学研究科, 「COE量子ナノ物理学 特論」, 2005年6月.

B-10)外部獲得資金

基盤研究(C),「超高時間分解指紋領域赤外分光法による電子励起状態の特異な分子構造の研究」,岡本裕巳(1997年-1998年).

萌芽的研究,「近接場光学による液相の励起状態ダイナミクス観測の可能性」,岡本裕巳(1999年).

分子科学研究奨励森野基金,「高速ダイナミクス解明のための分光手法の開発と応用」,岡本裕巳(1999年).

基盤研究(B),「電荷分離した励起状態の分子構造とダイナミクス:ピコ秒赤外分光法による研究」,岡本裕巳(1999年-2000年).

基盤研究(B),「動的近接場分光法による励起伝播ダイナミクスの分子科学」,岡本裕巳(2004年-).

若手研究(B),「メソスコピック領域における金微粒子を用いた空間的エネルギー伝播の直接観測」,井村考平(2004年-).

倉田奨励金,「時空間コヒーレンス観測に向けた超高速近接場分光システムの開発」,岡本裕巳(2005年).

萌芽研究,「近接場分光法による素励起の波動関数イメージング」,岡本裕巳(2005年-).

特定領域研究(極微構造反応),「極微構造における素励起の時空間コヒーレンスの超高時間分解近接場分光」,岡本裕巳(2005年-).

C) 研究活動の課題と展望

2~3年前に我々の研究室での基本的な静的・動的近接場分光装置がほぼ完成し,その後メソスコピックな分子系・微粒子系に関する研究がかなり進展しつつあると感じている。有機分子系では所内外との共同研究も数件行い,それぞれ他の方法では得難い情報が引き出せたと考えている。今後もこのような方向を一つの軸として行く考えである。また金属微粒子に関しては波動関数をイメージし,時間変化を追跡すると言う新たな方向を打ち出す事ができ,その初期の研究フェーズ(手法と現象の確立)はほぼ終了したと思われる。これをさらに発展させることが今後の研究の方向の今一つの軸と考えており,既に一部次の段階に研究を進めつつある。一つには,波動関数イメージングを位相情報(符号)を含めて観察する手法に発展させる。また時間分解近接場分光の手法に関して,新技術を導入して格段の時間分解能の向上を目指す。これらによって励起直後の励起のコヒーレントな空間伝播や緩和の空間挙動の研究を行いたい。コヒーレンス消失後の散逸的な過程を時空間領域で研究するには,近接場下での熱的分光法も必要になると考えており,この方向でも実験方法の開発を進める。最近,これらの研究を進める中で,近接場分光法の基本的な特性がこれまで十分明確になっていないことが判ってきた。このような問題を解決しながら研究を進める必要がある(この点については,所外との共同研究を計画中である)。一方,これまでの金属微粒子の研究によって,金属微粒子の新たな性質・機能の可能性を見いだしつつあり,それらを発展させる方向も視野に入れたい。それらをすべて実現するにはマンパワーの不足を解決する事も重要な課題である。

分子動力学研究部門

横 山 利 彦 (教授)(2002 年 1 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：X線分光学、表面物性

A-2) 研究課題：

- a) X線磁気円二色性・磁気光学Kerr効果・磁化誘起第二高調波発生法などの分光学的手法を用いた磁性薄膜・ナノワイヤの表面分子化学的磁化制御の検討

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ナノスケール磁性薄膜は垂直磁化や巨大磁気抵抗などの興味深い磁気特性を示し、基礎科学的にも応用的な見地からも広く研究が行われている。特に、薄膜表面を分子吸着などで化学的に修飾することで磁気特性が劇的に改質されること(例えば、スピン再配列転移が生じるなど)に注目し、実験室における磁気光学Kerr効果(MOKE)やUVSOR-II BL4Bを用いたX線磁気円二色性法(XMCD)により検討を行ってきた。今年度は、これらに加えて、フェムト秒パルスレーザーを用いた、表面界面の磁性を効果的に測定できる磁気的第二高調波発生法(MSHG)システムを完成させた。MOKE、XMCD、MSHG法を用いて、Fe/Ni/Cu(001)薄膜における4次の直接交換相互作用の実測(4次の直接交換相互作用はこれまで例がないと思われる)Fe/Ag(001)薄膜へのO₂、NO、H₂吸着によるスピン再配列転移と垂直磁化不安定化の吸着種依存性、Co/Pd(111)薄膜へのCO、NO吸着によるスピン再配列転移と垂直磁化安定化機構、Cu単結晶ステップ表面上のCo薄膜の一軸異方的磁性、Fe/Cu(001)薄膜へのK吸着効果による磁化増大などに関して検討した。さらに、来年度完成に向けて、現在0.3 T、100 K程度の性能のXMCD測定系に、超高真空仕様超伝導磁石を導入し、7 T、2 Kでの測定が可能となるよう大改造を行っている最中である。

B-1) 学術論文

D. MATSUMURA, T. YOKOYAMA, K. AMEMIYA, S. KITAGAWA and T. OHTA, “CO Induced Spin Reorientation Transition of Co/Pd(111) Studied by XMCD and XPS,” *Phys. Scr.* **T115**, 583–585 (2005).

K. AMEMIYA, S. KITAGAWA, T. YOKOYAMA, D. MATSUMURA, H. ABE, H. WATANABE and T. OHTA, “Direct Observation of Magnetic Depth Profile with a Depth-Resolved X-Ray Magnetic Dichroism Technique,” *Phys. Scr.* **T115**, 1035–1037 (2005).

K. AMEMIYA, E. SAKAI, D. MATSUMURA, H. ABE, T. OHTA and T. YOKOYAMA, “Spin-Reorientation Transition of Ni/Cu(100) and CO/Ni/Cu(100): Separation of the Surface and Bulk Components of the X-Ray Magnetic Circular Dichroism Spectrum,” *Phys. Rev. B* **71**, 214420 (7 pages) (2005).

T. NAKAGAWA, H. WATANABE and T. YOKOYAMA, “Opposite Spin Reorientation Transitions Driven by a Magnetic Orbital Moment: Ultrathin Ni Films on Cu Surfaces,” *Phys. Rev. B* **71**, 235403 (5 pages) (2005).

M. MITSUMI, H. GOTO, S. UMEBAYASHI, Y. OZAWA, M. KOBAYASHI, T. YOKOYAMA, H. TANAKA, S. KURODA and K. TORIUMI, “A Neutral Mixed-Valent Conducting Polymer Formed by Electron Transfer between Metal d and Ligand π Orbitals,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **117**, 4164–4168 (2005).

X. -D. MA, T. YOKOYAMA, T. HOZUMI, K. HASHIMOTO and S. OHKOSHI, "Electronic States and Local Structures of the Photomagnetic Cu-Mo Cyanides $\text{Cu}_2\text{Mo}(\text{CN})_8 \cdot \text{H}_2\text{O}$ and $\text{Cs}_{0.5}\text{Cu}_{1.75}\text{Mo}(\text{CN})_8 \cdot 1.5\text{H}_2\text{O}$ Studied by X-Ray Absorption Fine Structure Spectroscopy," *Phys. Rev. B* **72**, 094107 (6 pages) (2005).

T. NAKAGAWA, H. WATANABE and T. YOKOYAMA, "Effect of Adsorbate Carbon on Spin Reorientation Transitions in Cu-Capped Ultrathin Ni Films on Cu(001)," *Surf. Sci.* **599**, 262–269 (2005).

B-4) 招待講演

横山利彦, 「磁性薄膜の表面化学的磁化制御」, 第28回日本応用磁気学会学術講演会シンポジウム分子スピン——新しい機能性の発現を目指して——, 宜野湾, 2004年9月.

T. YOKOYAMA, "Control of magnetism of ultrathin metal films by means of surface chemical modification," Post Conference of International Conference on Molecular Magnets, Tsukuba (Japan), October 2004.

横山利彦, 「ナノスケール磁性体の表面化学的磁化制御と評価——磁化誘起第二高調波発生法とその応用例——」, Post Conference of International Conference on Molecular Magnets, Nasu (Japan), September 2005.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光共同利用実験審査委員会実験課題審査部会委員 (2003.1-).

Executive Committee member of the International XAFS Society (2003.7-).

日本化学会関東支部幹事 (1999.3-2001.12).

日本XAFS研究会幹事 (2001.1-).

日本放射光学会評議員 (2004.1-2005.12).

日本放射光学会幹事 (2005.1-).

学会の組織委員

第11回X線吸収微細構造国際会議プログラム委員 (2000.8).

XAFS討論会プログラム委員 (1998, 1999, 2000, 2001, 2002, 2003, 2004, 2005).

日本放射光学会年会組織委員, プログラム委員 (2005).

学会誌編集委員

日本放射光学会編集委員 (2000.9-2002.8, 2004.1-).

日本放射光学会誌編集委員長 (2005.1-).

科学研究費の研究代表者、班長等

科学研究費補助金特定領域研究「分子スピン」総括班事務局 (2003-2006).

B-8) 他大学での講義、客員

名古屋大学大学院工学研究科, 「量子エネルギー工学特別講義」, 2005年10月-2006年3月.

B-10)外部獲得資金

基盤研究(C)(2),「バルク及び表面融解のミクロスコピックな検討」, 横山利彦 (1997年-1998年).

基盤研究(B)(2),「エネルギー分散型表面XAFS測定法の開発」, 横山利彦 (1999年-2001年).

基盤研究(A)(2),「表面磁気第二高調波発生法による磁性ナノ薄膜・ナノワイヤの表面化学的磁化制御の検討」, 横山利彦 (2003年-2005年).

特定領域計画研究,「ナノスケール薄膜・ワイヤ・クラスターの表面化学的磁化制御と評価」, 横山利彦 (2003年-2006年).

C) 研究活動の課題と展望

2002年1月着任以降、磁性薄膜の表面分子科学的制御を主テーマとして研究グループをスタートさせた。磁性薄膜の磁気的性質が分子吸着などの表面化学的な処理により劇的に変化する新しい現象の発見とその起源の解明を目指す。さらに薄膜にとどまらず、ナノワイヤ・ナノドットの磁気特性とその分子科学的制御に迫りたい。実験手法としては、超高真空表面磁気光学Kerr効果法、X線磁気円二色性法(UVSOR利用)、磁気的第二高調波発生法(フェムト秒Ti:Sapphireレーザー使用)、極低温超高真空走査トンネル顕微鏡を導入している。また、来年度の完成に向けて、X線磁気円二色性法システムの電磁石を現在の常伝導(最大0.3 T)から超伝導(最大7 T)に大改造する。さらに、2005年度において、紫外光励起光電子放出による磁気円二色性が仕事関数しきい値近傍で極端に増大する現象を発見した。これに基づき、新規課題として、これまで全く報告のない波長可変紫外レーザーを用いた磁気円二色性光電子顕微鏡を開発し、超高速時間分解も視野に入れた発展を計画している。

小澤 岳 昌 (助教授)(2005 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：分析化学、生物物理

A-2) 研究課題：

- a) 発光タンパク質を利用したタンパク質オルガネラ移行の低侵襲的動態解析法に関する研究
- b) 細胞内オルガネラ局在タンパク質の網羅的同定法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 生きている動植物個体内では、生体分子の濃度あるいは活性がダイナミックに変動し、相互にネットワークを構築して細胞そして個体としての高次機能を発現している。この生体分子の機能を解析するためには、生きた動植物個体に低侵襲的な「生体分子イメージング」のための基盤技術が必要である。我々は、タンパク質再構成系というペプチド結合の切断と再連結に基づくレポータータンパク質を開発し、タンパク質間相互作用や細胞内タンパク質の動態を検出するプローブ開発を進めてきた。本年度は発光タンパク質の一つ *renilla luciferase* (Rluc) の切断位置を決定し、split Rluc がスプライシング現象により再構成され、発光能が回復することを見出した。Split Rluc を用いて、標的タンパク質が細胞核内に移行した時、Rluc がスプライシングにより再構成し、発光検出可能なプローブを開発した。このプローブを用いて、ストレスによるグルココルチコイドリセプターの核内移行、タンパク質のリン酸化やコレステロール濃度変化によるタンパク質核内移行検出法を開発した。
- b) 真核細胞の重要な特色の一つは、膜で囲まれた細胞内オルガネラが存在することである。オルガネラは高次機能を有するタンパク質を膜内に取り込み、オルガネラ特有の機能を発揮する。このオルガネラの機能を解明するためには、オルガネラに含まれるタンパク質を網羅的に同定することが必要である。本年度は、細胞内小胞に輸送されるタンパク質を網羅的に確度良く同定する方法の開発に成功した。100万種以上の遺伝子ライブラリーから細胞内小胞に移行するタンパク質のみを高速スクリーニングできることを実証した。1,300クローンの遺伝子解析を行い、既知の細胞内小胞移行タンパク質に加え、27種の新規細胞内小胞移行タンパク質を同定した。開発した方法はペルオキシソームや核等他の細胞内オルガネラにも応用可能な一般性を有する。

B-1) 学術論文

S. B. KIM, T. OZAWA and Y. UMEZAWA, "Genetically Encoded Stress Indicator for Noninvasively Imaging Endogenous Corticosterone in Living Mice," *Anal. Chem.* **77**, 6588–6593 (2005).

S. B. KIM, R. TAKAO, T. OZAWA and Y. UMEZAWA, "Quantitative Determination of Protein Nuclear Transport Induced by Phosphorylation or by Proteolysis," *Anal. Chem.* **77**, 6928–6934 (2005).

S. B. KIM, T. OZAWA and Y. UMEZAWA, "A Genetically Encoded Indicator for Assaying Bioactive Chemicals that Induce Nuclear Transport of Glucocorticoid Receptor," *Anal. Biochem.* **347**, 213–220 (2005).

T. OZAWA, K. NISHITANI, Y. SAKO and Y. UMEZAWA, "A High-Throughput Screening of Genes that Encode Proteins Transported into the Endoplasmic Reticulum in Mammalian Cells," *Nucleic Acids Res.* **33**, e34 (2005).

T. OZAWA, "Methods of Analysis for Protein Dynamics in Living Cells Based on Protein Splicing," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **78**, 739–751 (2005).

B-3) 総説、著書

T. OZAWA and Y. UMEZAWA, “Inteins for Split-Protein Reconstitutions and Their Applications,” in *Nucleic Acids and Molecular Biology*, M. Belfort, ed., Springer-Verlag; Berlin, **Vol.16**, 307–323 (2005).

Y. UMEZAWA, T. OZAWA, M. SATO, H. INADERA, S. KANEKO, M. KUNIMOTO and S. HASHIMOTO, “Methods of Analysis for Chemicals that Disrupt Cellular Signaling Pathways: Risk Assessment for Potential Endocrine Disruptors,” *Environ. Sci.* **12**, 49–64 (2005).

小澤岳昌,「ミトコンドリア局在タンパク質を同定するプローブ分子」, 化学測定の辞典 梅澤喜夫編 朝倉書店 (2005) .

B-4) 招待講演

小澤岳昌,「プロテインスプライシングを用いた新規発光タンパク質の創出とバイオセンシング」, 第5回コンビナトリアル・バイオエンジニアリング研究会, 大阪, 2005年1月.

小澤岳昌,「プロテインスプライシングを用いたタンパク質再構成システムについて」, 第7回生命化学研究会シンポジウム, 仙台, 2005年1月.

小澤岳昌,「プロテインスプライシングを利用した新規リポータータンパク質の開発とその応用」, 第125年会日本薬学会, 東京, 2005年3月.

小澤岳昌,「プロテインスプライシングが拓く生体分子の時空間解析法」, 第18回九州分析化学若手の会春の講演会, 福岡, 2005年5月.

小澤岳昌,「発光プローブを用いた分子イメージングの新たな展開」, 第15回バイオイメージング学会学術総会, 東京, 2005年10月.

小澤岳昌,「スプリットルシフェラーゼを用いた生体内分子イメージング」, 日本分子生物学会第28回年会, 福岡, 2005年12月.

B-6) 受賞、表彰

小澤岳昌, 日本化学会進歩賞 (2004).

小澤岳昌, 文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2005).

B-6) 学会および社会的活動

学会の組織委員

東京コンファレンス2004実行委員 (2004).

日本化学会年会プログラム編成委員(2004-).

B-10) 外部獲得資金

住友財団基礎科学研究助成,「蛍光共鳴エネルギー移動による細胞内蛋白質間相互作用の可視化と細胞機能発現の解析」, 小澤岳昌 (1998年-2000年).

笹川科学研究助成,「インシュリン情報伝達系に基づく生理活性物質の化学選択性評価法の研究」, 小澤岳昌 (1999年-2000年).

日産科学振興財団奨励研究,「糖輸送蛋白質の蛍光プローブによる可視化に関する研究」, 小澤岳昌 (1999年-2001年).

奨励研究(A),「インシュリン情報伝達系に基づく生理活性物質の化学選択性評価法の創製」,小澤岳昌 (1999年-2001年).
武田科学振興財団一般研究奨励,「新規蛍光プローブ分子を用いた細胞内タンパク質ネットワークの網羅解析法」,小澤岳昌 (2002年-2004年).

若手研究(A),「プロテインスプライシング反応を利用した機能性プローブ分子の開発と応用」,小澤岳昌 (2003年-2006年).
科学技術振興機構さきがけ研究,「タンパク質のオルガネラ移行と遺伝子発現の非侵襲的時空間解析法の確立」,小澤岳昌 (2003年-2006年).

旭硝子財団奨励研究助成,「動物個体内での遺伝子発現を時空間解析する光プローブの開発」,小澤岳昌 (2004年-2006年).

C) 研究活動の課題と展望

蛍光・発光タンパク質のペプチド結合の切断と再連結を利用したタンパク質再構成系は,未知の生命現象を解明するための新たな基盤技術として,多くの応用可能性を有している。このタンパク質再構成系を更に展開し,新たな生体分子を標的とした機能性蛍光・発光タンパク質レポーターを開発する。開発するレポーターを用いて,動物個体に低侵襲的な生体分子イメージングを可能にする。生体分子及び生体内現象は際限なく存在するため,ターゲットとしての重要性,一般性,プローブ開発における独創性や実現可能性を総合的に判断し,標的分子を特定しその分子イメージング法の確立を目指す。平成17年12月よりグループに加わった竹内助手とともに,植物個体の分子イメージングのための基盤技術を新たに開発する。

3-4 電子構造研究系

基礎電子化学研究部門

西 信 之 (教授) (1998 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：クラスター化学、電子構造論、物理化学

A-2) 研究課題：

- a) 炭素 - 金属ハイブリッドナノ構造体の創成 (遷移金属アセチリド化合物を用いて炭素被覆ナノ金属ワイヤー、磁性ナノロッドを作る。)
- b) 還元法による π 電子系マトリックス中の金属ナノシート、ナノ粒子の生成とその機構。金属プラズモン励起によるナノ粒子間の相互作用
- c) 超高速分光法によるフォトクロミック反応、光異性化反応ダイナミクス
- d) 分子クラスターイオンにおける分子間相互作用と電荷移動・エネルギー移動
- e) 液体中でのクラスター形成による局所構造の発生と "Micro Phase" の生成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

我々は、物質がクラスターを単位として振る舞うことを明らかにすると共に、その有する特性を最大限に活かすための基礎研究を行っている。水素結合性分子集合系での気相クラスターの構造・反応・計算の仕事は、1980年代から続けているが、その決着は多くの場合精度の高い理論計算と実験との一致という道筋が決まった手法に依っており、東北大学、東京大学、九州大学との共同研究でこれを進めている。液相に於ける混合の問題、特にクラスター形成による局所構造の発生と2種の分子がクラスター集団レベルで初めて混合するという "Micro Phase" の生成を、分子間振動のラマン分光によって発見したが、今後は密度揺らぎに基づくレーリー散乱の裾の異常に注目して新しい展開を行おうとしている。

- a), b) 溶液中でのミクロな相分離は、実は、カーバイドのような多成分系にも見られる。これをその機構から明らかにし、積極的に利用してナノ構造体を構築しようというのが a) b) のテーマである。現在最も力を入れているのは、「光還元法による π 電子系マトリックス中の炭素 - 金属ハイブリッドナノ構造体の創成」というテーマで、有機 - 金属イオン性クラスター分子の結晶薄膜に光を照射し、電荷移動励起状態で有機陰イオンから金属陽イオンへの電子移動による中性化を実現すると、中性金属原子が集合してゆく。ある大きさ以上になると金属プラズモン励起状態を生成し、金属粒子の中で自由電子が発生し、光の電場によって双極子となり、この双極子同士が引き合って合体し、2次元に伸びたナノシートとなり、やがて厚さ10 nmから300 nmの大きな金属シートに成長するというものである。これは、熱励起が表面積最小の球状ナノ粒子を生じる現象と対照的であり、電場方向にシートの成長が見られる。紫外励起が有効であり、フォトマスクを用いたナノリソグラフにも成功している。即ち、未照射部分の結晶は溶媒によって除去されるが、光によって偏析した部分は溶媒に不溶であり有機部分は π 電子系で繋がった高分子となっている。この π 電子系で繋がった高分子は誘電体であり金属ナノシートとの界面で、表面プラズモンを生じる。ナノシートが光の波長よりはるかに短く、誘電体の中にこのようなシートが金属シートの厚さの2倍程度の間隔で分散したものの光学的性質にも興味をもたれる。更に、ナノシートの合体成長過程をお得意の低振動数ラマン分光によって追跡し、その機構を探っている。表面プラズモンが関わるラマン散乱は強度の大きな増強があり、極めて有効なア

ブローチになりうる。

一方、約1 eVのバンドギャップを持つn型半導体のCu₂C₂ナノワイヤーの合成に成功したが、これに熱をかけて銅ワイヤーに炭素が被覆したナノケーブルの作成等にも成功した。このシステムの構造と電気伝導特性を理論計算と実験の対応をさせながら調べている。

また、磁性への興味から様々な遷移金属アセチリド化合物の合成と構造、磁気特性を調べ、光や熱による様々なナノ合金生成、炭素複合体生成とナノ構造の発生を調べている。このような複合体は、純金属粒子の欠点である保持力の大きな増加が見られ、スピン反転温度も極めて高くなるという特徴を持っている。

- c) ジアリルエテンを初めとする様々なホトクロミックシステムや光異性化を示す分子系のフェムト秒・ピコ秒時間分解スペクトルの観測を通じて、これらの反応のダイナミクスを調べている。主として、九州大学、東京工業大学等との共同研究を主体としている。
- d) イオントラップトリプル四重極質量選別システムと、赤外・可視・紫外波長掃引レーザーシステムとを組み合わせ、質量選別された特定のクラスターに光を吸収させ、エネルギーが最終的には付着したアルゴン原子等を解離させることを利用して、クラスターの吸収スペクトルを測定している。得られたスペクトルと精密な理論計算によって得られたスペクトルを比べあわせて、構造決定を行っている。最近では金属イオンの水和構造の決定を行っている。東京大学、九州大学、広島大学および東北大学との共同研究が主体となっている。
- e) 混合系を中心とした液体の中のクラスター構造を、低振動数ラマン分光や液滴の断熱膨張による質量分析を中心に調べている。特に、溶質と溶媒のミクロな相分離状態について系統的な研究が行われている。

B-1) 学術論文

A. MURAOKA, Y. INOKUCHI, N. NISHI and T. NAGATA, "Structure of [(CO₂)_n(H₂O)_m]⁻ (n = 1–4, m = 1,2) Cluster Anions, 1. Infrared Photodissociation Spectroscopy," *J. Chem. Phys.* **122**, 094303 (2005).

K. WATANABE, A. KOKAJI, Y. INOKUCHI, I. RZEZNICKA, K. OHSHIMO, N. NISHI and T. MATSUSHIMA, "Orientation of Nitrous Oxide on Palladium (1 1 0) by STM," *Chem. Phys. Lett.* **406**, 474–478 (2005).

K. SAKOTA, C. OKABE, N. NISHI and H. SEKIYA, "Excited State Double Proton Transfer in the 7-Azaindole Dimer in the Gas Phase. 3. Reaction Mechanism Studied by Picosecond Time-Resolved REMPI Spectroscopy," *J. Phys. Chem. A* **109**, 5245–5247 (2005).

J. NISHIJO, C. OKABE, J. BUSHIRI, K. KOSUGI, N. NISHI and H. SAWA, "Formation of Carbon-Encapsulated Metallic Nano-Particles from Metal Acetylides by Electron Beam Irradiation," *Eur. Phys. J. D* **34**, 219–222 (2005).

S. -Y. LEE, B. -H. BOO, H. -K. KANG, D. -G. KANG, K. JUDAI, J. NISHIJO and N. NISHI, "Reexamination of the Structures and Energies of Li₂C₂ and Li₄C₄," *Chem. Phys. Lett.* **411**, 484–491 (2005).

J. NISHIJO, K. KOSUGI, H. SAWA, C. OKABE, K. JUDAI and N. NISHI, "Water-Induced Ferromagnetism in Cobalt Acetylide CoC₂ Nanoparticles," *Polyhedron* **24**, 2148–2152 (2005).

K. JUDAI, J. NISHIJO, C. OKABE, O. OHISHI, H. SAWA and N. NISHI, "Carbon-Skinned Metallic Wires and Magnetic Nanocrystals Prepared from Metal Acetylides," *Synth. Met.* **155**, 352–356 (2005).

B-4) 招待講演

N. NISHI, “Microscopic Phase Separation in Binary Mixtures of Hydrogen-bonding Molecules,” Indian Institute of Science Special Lecture, Bangalore (India), 2005年1月.

N. NISHI, “Carbon-skinned metallic wires and magnetic nanocrystals prepared from metal acetylides,” 国際会議「Optical Probe 2005」, Bangalore (India), 2005年1月.

B-5) 特許出願

特許番号:3413491,「質量分析用インターフェース、質量分析計および質量分析方法」, 西 信之(岡崎国立共同研究機構長), 米国特許, 特許番号:USPat. 6,620,624, 2000年.

特許番号:3733428,「磁気クラスター、磁気記録媒体、磁気クラスターの製造方法、および磁気記録媒体の製造方法」, 西 信之(岡崎国立共同研究機構長), US Pat. Appl. 10/347,600, 2002年.

特願2004-026797,「遷移金属アセチリド化合物、ナノ粉末、および遷移金属アセチリド化合物の製造方法」, 西 信之、小杉健太郎(自然科学研究機構長), 2004年.

特願2004-026839,「炭素被覆遷移金属ナノ構造体の製造方法、炭素被覆ナノ構造体パターンの製造方法、炭素被覆遷移金属ナノ構造体、及び炭素被覆ナノ構造体パターン」, 西 信之、小杉健太郎(自然科学研究機構長), 2004年.

B-6) 受賞、表彰

西 信之, 井上學術賞 (1991).

西 信之, 日本化学会學術賞 (1997).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員

Pacificchem2005 シンポジウム #110“ Frontiers in Structural and Functional Studies of Atomic and Molecular Clusters and Nano-Particles ”組織委員長.

文部科学省、学術振興会等の役員等

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (2004-2005).

学会誌編集委員

Chemical Physics Letters, member of Advisory Board (2005-2008).

科学研究費の研究代表者、班長等

文部科学省 ナノテクノロジー支援プロジェクト「分子・物質総合設計支援・解析支援プロジェクト」総括責任者.

その他

総合研究大学院大学物理科学研究科研究科長 (2004.4-2005.3).

B-8) 他大学での講義、客員

東京工業大学総合理工学部,「クラスターの科学」, 2005年11月17日.

B-10)外部獲得資金

基盤研究(B),「分子イオンクラスター蒸着法による高密度電荷集積と光刺激ダイナミクス」,西 信之 (1995年-1999年).

基盤研究(B),「水溶液中の特異なクラスター集合構造の発生と機能の発現」,西 信之 (1999年-2002年).

日本学術振興会未来開拓学術推進事業,「光によるスーパークラスターの創成とその光計測:単分子磁石の実現」,西 信之 (1999年-2004年).

文部科学省 ナノテクノロジー支援プロジェクト,「分子・物質総合設計支援・解析支援プロジェクト」,西 信之 (2002年-2006年).

基盤研究(B),「金属アセチリド化合物を用いたナノ複合金属炭素構造体の創成と構造科学」,西 信之 (2005年-2007年).

C) 研究活動の課題と展望

2004年にはナノレベルで金属原子と炭素原子のハイブリッド化合物をアセチリドとして実現し,更にこれを用いて金属原子結晶とグラファイトのような炭素層を接合し,金属に結合した皮革や炭素ナノチューブとして金属ワイヤーを包接することに成功した。2005年は,長年培ってきた励起3重項の長寿命と電荷移動状態励起による中性化反応,そしてクラスターの励起状態の性質に関する30年以上に亘る研究経験をナノの世界構築に最大限に活かした発見があった。電子顕微鏡の中に,金属ナノシートが光励起によってのみ出現するのである。溶液の世界で,水とアルコールがミクロスコピックな相分離をクラスターレベルで起こしていることを明らかにしてきたが,それと同じ熱力学的な理由から成分の偏析が起こり,熱では球状のナノ粒子が,光ではナノシートが生じ,異なった電子スペクトルを与えるのである。光の場合は,これら微小ナノシートが次々に集合して広い1枚のシートに合体してゆく。恐るべき光の場のなせる技である。フォトリソグラフで金属ナノ回路を大量生産することもできるが, π 電子系を含む誘電体ポリマーの中にナノシートがラメラ状に分散している初期の物質形態も大変興味深い。とにかく,まず様々な分光学的手法を動員してイメージング手法とカップルさせて,光子場におけるプラズモン励起状態粒子間の相互作用について研究を深めたい。更に,炭素と金属の系に珪素を入れ込んで有機物でも,金属でも,セラミックスでもない,しかし,いずれの性質をも具備した新しい高分子材料を開発してみたい。

電子状態動力学研究部門

大 森 賢 治 (教授)(2003 年 9 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：原子分子光科学、量子光学

A-2) 研究課題：

- a) アト秒精度のコヒーレント制御法の開発
- b) 量子論の検証実験
- c) コヒーレント分子メモリーの開発
- d) 分子ベースの量子情報科学
- e) 強光子場非線形過程の制御
- f) 高精度の化学反応制御

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) コヒーレント制御は、物質の波動関数の量子位相を操作する技術である。その応用は、量子コンピューティングや結合選択的な化学反応制御といった新たなテクノロジーの開発に密接に結び付いている。量子位相を操作するための有望な戦略の一つとして、物質の波動関数に波としての光の位相を転写する方法が考えられる。例えば、二原子分子に核の振動周期よりも短い光パルスを照射すると、「波束」と呼ばれる局在波が結合軸上を行ったり来たりするような状態を造り出す事ができる。この波束は複数の振動固有状態の重ね合わせであり、結合の伸び縮みに対応した古典的な運動をする。波束の発生に際して、数フェムト秒からアト秒のサイクルで振動する光電場の位相は波束の量子位相として分子内に保存されるので、光学サイクルを凌駕する精度で光の位相を操作すれば波束の量子位相を操作することができる。我々はこの考えに基づき、独自に開発したアト秒位相変調器(APM)を用いて、二つのフェムト秒レーザーパルス間の相対位相をサブ10アト秒レベルの精度で操作するとともに、このパルス対によって分子内に発生した二つの波束の相対位相を同様の精度で操作する事に成功した。さらに、これらの高度に制御された波束干渉の様子を、オングストロームの空間分解能とフェムト秒の時間分解能で観測する事に成功した。
- b) APMを用いて、分子内の2個の波束の量子干渉を100%のコントラストで完全制御する事に成功した。また、この高精度量子干渉を量子論的な重ね合わせ状態の検証に応用した。同様に、デコヒーレンス検出器として用いる事によって、熱的な分子集団の回転位相緩和や固体中の光学コヒーレントフォノンの発生に伴うデコヒーレンスを検出する事に成功した。
- c) 光子場の位相情報を分子波束の量子位相として転写する分子メモリーの開発を行なった。ここでは、フェムト秒光パルス対によって分子内に生成した2個の波束間の量子位相差をサブ10アト秒レベルの精度で操作し、これらの干渉の結果生成した第3の波束を構成する各振動固有状態のポピュレーションを観測することによって、それぞれの光パルスの位相情報が高精度で分子内に転写されていることを証明することができた。また、フェムト秒光パルス対の時間間隔をアト秒精度で変化させることによって波束内の固有状態のポピュレーションの比率を任意に操作できることを実証した。
- d) 分子メモリーを量子コンピューターに発展させるためには、 ρ で行ったポピュレーション測定だけでなく、位相の

測定を行う必要がある。そこで我々は ρ の第 3 の波束の時間発展を別のフェムト秒パルスを用いて実時間観測した。これによって、ポピュレーション情報と位相情報の両方を分子に書き込んで保存し、読み出すことが可能であることを実証した。振動固有状態の組を量子ビットとして用いる一分子量子コンピューターの可能性が示された。

- e) アト秒精度のコヒーレント制御法を、強光子場中の希ガス原子の越しきい値イオン化過程に応用する事に成功した。
- f) サブ10アト秒レベルの量子位相精度を達成したことによって電子励起状態を介した反応制御が可能になった。このような反応制御の第一段階として、3原子分子での高精度波束干渉実験の準備を進めている。多原子分子は複数の振動モードをもっているため、 ρ で開発した位相変調パルス発生装置とAPMを組み合わせたシンプルな波束干渉を用いて解離の分岐比を制御できる可能性がある。

B-4) 招待講演

K. OHMORI, “High-Precision Coherent Control of Molecules,” The Fourth Asian Photochemistry Conference, Taipei (Taiwan), January 2005.

K. OHMORI, “Phase Sensitive Memory in Molecular Wave Packets; READ and WRITE,” International Seminar on Atomic Processes in Intense Laser Fields and Related Many-Body Phenomena, Hayama (Japan), January 2005.

大森賢治, 「分子の内部量子状態を用いた光位相敏感メモリー」, 強光子場科学懇談会, 浜松, 2005年1月.

K. OHMORI, “Phase Sensitive Memory in Molecular Wave Packets; How to READ and WRITE with molecules,” Seminar at Pennsylvania University, Philadelphia (U.S.A.), February 2005.

K. OHMORI, “Phase Sensitive Memory in Molecular Wave Packets; How to READ and WRITE with molecules,” Seminar at Temple University, Philadelphia (U.S.A.), February 2005.

K. OHMORI, “Phase Sensitive Memory in Molecular Wave Packets; READ and WRITE,” 11th Japan-Korea Joint Symposium on Frontiers in Molecular Science, Okazaki (Japan), March 2005.

大森賢治, 「分子の内部量子状態を用いた光位相敏感メモリー」, 理研・分子研合同シンポジウム「エクストリームフォトリクス研究」, 和光, 2005年4月.

大森賢治, 「分子の内部量子状態を用いた光位相敏感メモリー」, 東京大学化学システム工学セミナー, 東京, 2005年6月.

大森賢治, 「アト秒への道」, ディスカッションリーダー, 分子科学シンポジウム, 岡崎, 2005年6月.

大森賢治, 「分子振動波束の時間位置分解観測と精密量子制御のためのイメージング表示」, 自然科学研究機構連携研究プロジェクト「Imaging Science」第1回シンポジウム, 岡崎, 2005年8月.

大森賢治, 「アト秒コヒーレント制御法の開発と応用」, 東京工業大学流動機構セミナー, 東京, 2005年10月.

K. OHMORI, “Visualizing Picometric Quantum Ripples of Ultrafast Wave-Packet Interference,” International Symposium on Ultrafast Intense Laser Science 4, Honolulu (U.S.A.), December 2005.

K. OHMORI, “Ultrahigh-Precision Coherent Control of Molecular Wave Packets,” Pacificchem 2005, Honolulu (U.S.A.), December 2005.

B-6) 受賞、表彰

大森賢治, 東北大学教育研究総合奨励金 (1995).

大森賢治, 光科学技術研究振興財団研究表彰 (1998).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

分子科学研究会委員 (2002-).

分子科学会設立検討委員 (2005-).

学会の組織委員

International Conference on Spectral Line Shapes 国際プログラム委員 (1998-).

21st International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions 準備委員, 組織委員 (1999).

The 5th East Asian Workshop on Chemical Reactions 組織委員長 (2001).

分子構造総合討論会実行委員 (1995).

第19回化学反応討論会実行委員 (2003).

原子・分子・光科学(AMO) 討論会プログラム委員 (2003-).

その他

平成16年度安城市シルバーカレッジ「原子のさざ波と不思議な量子の世界」.

岡崎市立小豆坂小学校 第17回・親子おもしろ科学教室「波と粒の話」.

B-7) 他大学での講義、客員

東北大学多元物質科学研究所, 客員教授, 2004年4月 - 2005年3月.

北海道大学工学部, 「超高速量子動力学 ~ 量子光学の基礎からアト秒分光まで ~ 」, 2005年11月16日 - 18日.

B-10) 外部獲得資金

基盤研究(A), 「サブ10アト秒精度の量子位相操作と単一分子量子コンピューティング」, 大森賢治 (2003年 - 2005年).

特定領域研究(2)「強レーザー光子場における分子制御」計画班, 「単一原子分子のアト秒コヒーレント制御」, 大森賢治 (2003年 - 2005年).

基盤研究(B), 「アト秒波束干渉制御法の開発と量子コンピューティングへの応用」, 大森賢治 (2001年 - 2002年).

特定領域研究(A)「物質設計と反応制御の分子物理化学」, 「ファンデルワールス半衝突反応のフェムト秒ダイナミクスと超高速光子制御」, 大森賢治 (1999年 - 2001年).

基盤研究(C), 「強レーザー場中の金属クラスターのクーロン爆発および高調波発生の実時間観測と制御」, 大森賢治 (1999年 - 2000年).

C) 研究活動の課題と展望

今後我々の研究グループでは APMを高感度のデコヒーレンス検出器として量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凝縮相・固体・表面に適用することによって「アト秒量子エンジニアリング」と呼ばれる新しい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行なっていきたい。

デコヒーレンスの検証と抑制: デコヒーレンスは物質の波としての性質が失われて行く過程である。量子論における観測問題と密接なつながりをもつ重要なテーマであるとともに、テクノロジーの観点からは、反応制御や量子情報処理のエラーを引き起こす主要な要因である。その本質に迫り、制御法を探索する。

高精度の化学反応制御:サブ10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であろう。

アト秒軟X線パルス源の開発と応用:強光子場中の高次非線形過程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。

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。

これらの研究の途上で量子論を深く理解するための何らかのヒントが得られるかもしれない。その理解はテクノロジーの改革を促すだろう。我々が考えている「アト秒量子エンジニアリング」とは、量子論の検証とそのテクノロジー応用の両方を含む概念である。

大 島 康 裕 (教授) (2004 年 9 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：分子分光学、化学反応動力学

A-2) 研究課題：

- a) 大振幅な構造変形運動に関する量子波束の生成と観測
- b) 非断熱相互作用による量子固有状態分布移動の実現
- c) 気相芳香族クラスターにおける分子間相互作用の精密決定

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) さまざまなタイプの分子について運動量子波束の追跡が行えるような、高い適応性を持ったフェムト秒実時間分光法の開発を進めている。特に、ねじれ振動のように大規模な構造変形へとつながる運動の量子波束観測に重点を置いている。昨年度において、相対位相をランダムに変調した同一波長パルス対を用いる干渉計測法 (COIN ; Coherence Observation by Interference Noise) により、*p*-フルオロトルエンの S_1-S_0 遷移におけるメチル基内部回転量子波束の観測に成功している。本年度は、より高強度のパルス対を用いることにより、非線形コヒーレント光学過程の 1 種である TRFD (Time-Resolved Fluorescence Depletion) による内部回転量子波束の観測に成功した。COIN と TRFD による結果を対照することにより、電子遷移の振電準位構造を特定できることを示した。*o*-フルオロトルエンでは、TRFD によって電子励起状態における内部回転量子波束が観測されたが、さらに *m*-クレゾールを対象とした測定を行うことにより、電子基底状態における量子波束の観測にも成功した。これらの結果により、一般の多原子分子においても、基底状態 → 励起状態 → 基底状態という経路にわたって、数%以上の効率でコヒーレントな分布移動が実現できることを実証した。
- b) 本年度より、高強度な極短パルス電場と分子とのインパルス的な相互作用によって量子固有状態分布を非断熱的に移動する手法の開発を開始した。具体的には、ジェット冷却により初期分布を制限した分子集団に、再生増幅フェムト秒チタンサファイアレーザーの基本波出力により非共鳴的に相互作用を加え、その後、ナノ秒レーザー光による共鳴多光子イオン化によって固有状態分布測定を行う。このための TOF 質量分析用真空チャンバーを新たに作成した。さらに、最も簡単な系である 2 原子分子の 1 例として NO を取り上げ、回転温度 ~2 K の Boltzman 分布で表されるスペクトルが、フェムト秒レーザーの照射によって有意に変化することを実証した。また、非断熱的な分布移動に関するモデル計算コードの開発も行った。
- c) 芳香環の関与する分子間相互作用ポテンシャルを精密に研究する目的で、TOF 質量選別法と組み合わせたレーザー分光によってベンゼンクラスターの電子遷移の観測を行っている。本年度は、 π 水素結合を有する典型的な系であるベンゼン - 水の 1:1 クラスターについて重点的に研究を行なった。2 重共鳴レーザー分光の一種であるホールバーニング法を適用することにより、小さな遷移強度しか持たない分子間モード励起バンドを高感度で検出することに成功した。水に関する 3 つの同位体種について測定を行い、観測された系統的なバンドシフトから振動モードの帰属を行った。特に、 40 cm^{-1} 以下という低波数領域に、特徴的な同位体シフトを示す極めて微弱な遷移が存在することを見出した。これらは水分子の 3 次元的な内部回転運動に対応した振動バンドであり、既に報告されている 6 次元動力学計算と比較すると、極めて大きく低波数側にずれている。この結果は、計算で用いられたモデルポテンシャルの形状に問題があり、実際はより異方性の低いポテンシャルであることを示すものである。また、HDO のクラス

ターでは H_2O や D_2O では禁制なバンドが明瞭に観測されるようになることから、非対称的な同位体置換によって分子間ポテンシャル自体が歪むことが明らかになった。

B-1) 学術論文

Y. OHSHIMA, K. SATO, Y. SUMIYOSHI and Y. ENDO, "Rotational Spectrum and Hydrogen Bonding of the H_2O -HO Radical Complex," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 1108-1109 (2005).

B-3) 総説、著書

大島康裕, 「レーザー誘起蛍光と関連技術」, 第5版実験化学講座9「物質の構造I 分光 上」, 日本化学会編, 丸善, 4.4章(2005).

B-6) 受賞、表彰

大島康裕, 分子科学研究奨励森野基金 (1994).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本分光学会装置部会企画委員 (1995-1999).

日本化学会近畿支部幹事 (2001-2003).

日本化学会東海支部幹事 (2005-).

分子科学研究会委員 (2004-).

分子構造総合討論会運営委員 (2004-).

学会の組織委員

The East Asian Workshop on Chemical Reactions, Local Executive Committee (1999).

分子構造総合討論会実行委員 (2002-2003).

化学反応討論会実行委員 (2005-2006).

学会誌編集委員

日本化学会誌(化学と工業化学) 編集委員 (2001-2002).

B-10) 外部獲得資金

一般研究(C), 「ラジカル反応における分子間相互作用」, 大島康裕 (1995年).

一般研究(B), 「溶媒和クラスター内エネルギー散逸過程の実時間領域測定」, 大島康裕 (1996年-1997年).

三菱油化化学研究奨励基金, 「分子配置の量子波束制御と化学反応コントロール」, 大島康裕 (1998年).

基盤研究(B), 「微視的溶媒和による無輻射過程の制御機構の解明」, 大島康裕 (1998年-2000年).

日本証券奨学財団研究調査助成, 「1重項酸素生成機構の分子論的解明」, 大島康裕 (2000年-2001年).

旭硝子財団研究助成, 「1重項酸素生成機構の分子論的解明」, 大島康裕 (2000年-2001年).

日本原子力研究所黎明研究, 「気体分子の配向完全制御と動的構造決定への応用」, 大島康裕 (2002年).

住友財団基礎科学研究助成, 「気体分子の配向完全制御と動的構造決定への応用」, 大島康裕 (2002年).

基盤研究(B),「孤立少数自由度系における構造相転移の実験的探索」, 大島康裕 (2002年-2004年).

光科学技術振興財団研究助成,「コヒーレント光による分子運動の量子操作」, 大島康裕 (2003年-2004年).

特定領域研究(強光子場分子制御)(公募),「強光子場による分子配列・変形の分光学的キャラクタリゼーション」, 大島康裕 (2003年-2005年).

C) 研究活動の課題と展望

極短パルス光を用いるa) b)の研究は順調に進捗したところであり,光パルスのパラメーターの最適化,さらに,波形整形技術の導入によって,目的とする運動状態のさらなる効率的な生成を追求したい。その上で,特定の運動状態から(光解離・異性化などの)化学反応を進行させる研究へと発展させる。c)に関しては,実験データを再現するモデルポテンシャルの構築が急務であり,国内外の理論研究者との共同研究の道を探りたい。また,電子基底状態における分子間振動準位構造についても幅広いエネルギー領域で高精度のデータを得るために,高分解能非線形コヒーレント分光を適用する予定である。そのために,現在着手しているフーリエ限界ナノ秒パルス光源の開発を至急進める。

3-5 分子集団研究系

物性化学研究部門

薬 師 久 彌 (教授)(1988 年 5 月 16 日着任)

A-1) 専門領域：物性化学

A-2) 研究課題：

- a) 分子導体における電荷秩序相の研究
- b) 電荷移動を伴う相転移の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 電荷の局在化に起因する金属・絶縁体転移では、クーロン反発エネルギーを最小にするために、電荷分布に濃淡が発生する。この濃淡は通常格子の変形と結合しており、ある特定の方向に電荷が配列する電荷秩序状態をとる。この現象は分子導体の伝導電子が遍歴性と局在性の境界領域に位置しているためであり、多くの分子導体で普遍的に起こる現象である。我々はこのような物質を振動分光法を用いて系統的に研究しているが、本年度は以下のような結果を得た。

(i)BEDT-TTF赤外活性モード：BEDT-TTF分子には三つのC=C伸縮振動モードがあるが、二つはラマン活性で一つは赤外活性である。いずれのモードの振動数も分子上の電荷(価数)に敏感であるが、振電相互作用の影響を受けない赤外活性モードは伝導面に垂直な偏光で測定できる大きな結晶が得られれば電荷分布を知るのに理想的なプローブとなる。この赤外活性モードの電荷と振動数シフトの関係を系統的に調べて、振動数より電荷を見積もるための経験式を得ることができた。

(ii) θ -(BEDT-TTF)₂CsZn(SCN)₄：この物質は低温まで金属を保持する θ -(BEDT-TTF)₂I₃と電荷秩序相転移を起こす典型的な物質である θ -(BEDT-TTF)₂RbZn(SCN)₄との中間のバンド幅をもつ物質である。この物質は低温で非線形伝導が報告され、電荷秩序相が成長していることが予想されているが、赤外・ラマン分光法では大きな振幅の電荷秩序相を見出すことはできなかった。この結果はNMRと一致しており、振幅の小さな電荷密度波が非線形伝導に寄与していると推測される。また、格子歪が発達していることも反射分光法により明らかにすることができた。

(iii) β'' -(BEDT-TTF)₄[(H₃O)M(C₂O₄)₃]Y (M = Ga, Y = C₆H₅NO₂; M = Cr, Y = C₆H₅NO₂; M = Fe, Y = C₆H₅CN)：低温で抵抗を増加させながら常圧で超伝導転移を示すこれらの物質は金属相と絶縁相の混在する不均一な電子相で構成されている。この絶縁相が電荷秩序相である可能性をラマン分光法により明らかにした。ただし、典型的な電荷秩序相に比べて密度波の振幅が小さいので、今後まだ検討の余地を残している。

(iv)(DI-DCNQI)₂Agの電子状態：(DI-TCNQI)₂Agはウィグナー型の電荷整列状態が提唱された最初の物質である。この物質の伝導鎖に垂直な偏光方向で赤外活性モードを観測し、複雑に分裂したC=CおよびC=N伸縮振動の帰属を行って、NMRと同様な電荷の不均化(0.25:0.75)がある事が分かった。また、パイロニックバンドの赤外・ラマン交互禁制則より、 $2k_F$ CDW+ $4k_F$ BOW模型を提唱した。この模型はNMRの予言する $4k_F$ CDW模型と異なっており、両者を包含する考えが必要である。

- b) イオン結晶であるビフェロセン-(F₁TCNQ)₃はイオンの価数を変化させる相転移を起こす。この物質の相転移が広い温度範囲で連続的に発現していることに興味を持ち、研究を開始した。従来、ビフェロセンの鉄の価数が変化していることが観測されていたが、F₁TCNQの価数が変化していることを赤外ラマン分光法で明らかにした。また、幅広い相転移の温度領域では高温相と低温相の分域が共存し、この分域の大きさが巨視的な大きさであることを明らかにした。

B-1) 学術論文

K. YAMAMOTO, K. YAKUSHI, M. MENEGHETTI and C. PECILE, “Bond and Charge Density Waves in the Charge Localized Phase of (DI-DCNQI)₂Ag Studied by Single-Crystal Infrared and Raman Spectra,” *Phys. Rev. B* **71**, 045118 (10 pages) (2005).

M. MAKSIMUK, K. YAKUSHI, H. TANIGUCHI, K. KANODA and A. KAWAMOTO, “Influence of the Cooling Rate on Low-Temperature Raman and Infrared-Reflection Spectra of Partially Deuterated κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂] Br,” *Synth. Met.* **149**, 13–18 (2005).

R. SWIETLIK, K. YAKUSHI, K. YAMAMOTO, T. KAWAMOTO and T. MORI, “Infrared and Raman Studies of the Phase Transition in the Organic Conductor (TTM-TTP)I₃,” *Synth. Met.* **150**, 83–92 (2005).

T. YAMAMOTO, M. URUICHI, K. YAMAMOTO, K. YAKUSHI, A. KAWAMOTO and H. TANIGUCHI, “Examination of the Charge Sensitive Vibrational Modes in ET Molecule,” *J. Phys. Chem. B* **109**, 15226–15235 (2005).

A. F. BANGURA, A. I. COLDEA, J. SINGLETON, A. ARDAVAN, A. AKUTSU-SATO, H. AKUTSU, S. S. TURNER, P. DAY, T. YAMAMOTO and K. YAKUSHI, “The Robust Superconducting State in the Low-Quasiparticle-Density Organic Metals β ”-(BEDT-TTF)₄[(H₃O)M(C₂O₄)₃]Y; Superconductivity due to Proximity to a Charge-Ordered State,” *Phys. Rev. B* **72**, 014543 (13 pages) (2005).

K. SUZUKI, K. YAMAMOTO, K. YAKUSHI and A. KAWAMOTO, “Infrared and Raman Studies of θ -(BEDT-TTF)₂CsZn(SCN)₄: Comparison with the Rapidly Cooled State of θ -(BEDT-TTF)₂RbZn(SCN)₄,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 2631–2639 (2005).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

M. INOKUCHI, A. NAGAOKA, I. SHIROTANI, H. KAWAMURA, K. YAKUSHI and H. INOKUCHI, “Optical studies of shear stress on thin films,” *Synth. Met.* **152**, 421–424 (2005).

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本化学会関東支部幹事 (1984-1985).

日本化学会東海支部常任幹事 (1993-1994, 1997-1998).

日本化学会職域代表 (1995-).

日本分光学会東海支部支部長 (1999-2000).

学会の組織委員

第3, 4, 5, 6, 7, 8回日中合同シンポジウム組織委員(第5回, 7回は日本側代表, 6回, 8回は組織委員長)(1989, 1992, 1995, 1998, 2001, 2004).

第5, 6, 7回日韓共同シンポジウム組織委員(第6回, 7回は日本側代表)(1993, 1995, 1997).

学会誌編集委員

日本化学会欧文誌編集委員(1985-1986).

文部科学省、学術振興会等の役員等

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員(2000-2001).

科学研究費委員会専門委員(2002-2005).

その他

新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)国際共同研究評価委員(1990).

チバ・ガイギー科学振興財団 選考委員(1993-1996).

東京大学物性研究所 共同利用施設専門委員会委員(1997-1998, 2001-2002).

東京大学物性研究所 物質設計評価施設運営委員会委員(1998-1999).

B-10)外部獲得資金

特定領域研究(A), 「分子性物質の電子相関と電子構造」, 薬師久弥(1994年-1996年).

特定領域研究(A), 「 π -d電子系分子導体の固体電子物性の研究」, 薬師久弥(1997年-1997年).

基盤研究(B), 「金属フタロシアニンを主とする π -d電子系の研究」, 薬師久弥(1997年-2000年).

特定領域研究(B), 「 π -dおよび π 電子系分子導体の磁性・電気伝導性の研究」, 薬師久弥(1999年-2001年).

特別研究員奨励費, 「分子性導体における電荷整列現象のラマン分光法による研究」, 薬師久弥(2001年-2002年).

基盤研究(B), 「分子性導体における電荷整列現象の研究」, 薬師久弥(2001年-2003年).

特定領域研究, 「分子導体における電荷の局在性と遍歴性の研究」, 薬師久弥(2003年-2007年).

奨励研究(A), 「顕微赤外共鳴ラマン分光法による種々の分子配列様式をもつ有機伝導体の電荷状態観測」, 山本 薫(2000年-2001年).

若手研究(B), 「遠赤外反射スペクトルによる二次元電荷整列系の電子構造解」, 山本 薫(2002年-2003年).

若手研究(B), 「伝導性電荷移動錯体の電荷秩序相における非調和分子振動と非線形光学効果」, 山本 薫(2005年-2006年).

C) 研究活動の課題と展望

θ -型BEDT-TTF塩の電子相図における高温相はバンド幅の広い物質では金属的であるが、バンド幅の狭い物質では高い伝導性を保ちつつも、金属と半導体の中間的な状態である。この状態は電気抵抗がほとんど温度に依存しない領域に現れ、振動分光法で眺めると電荷がほとんど止まって見え、空間的に不均一な電荷密度分布をもつ状態に見える。NMRでもある温度領域では不均一な数kHzという遅い電荷密度ゆらぎが観測されている。これらの不均一な構造はX線散漫散乱にも観測されているが、金属からウィグナー格子に至る中間状態としての統一的理解はまだ得られていない。電荷密度のゆらぎは屈折率のゆらぎを引き起こすので、光散乱法を用いてゆらぎの時間スケールを観測する実験を計画している。

電荷秩序状態と金属相との境界領域にある超伝導相では電荷ゆらぎを媒介とする新しい超伝導機構の理論が提案されて

いる。今年度実験を行った β'' -(BEDT-TTF)₄[(H₃O)Ga(C₂O₄)₃] C₆H₅NO₂では小さな振幅の不均化しか観測できず、電荷秩序相かどうか曖昧さが残っている。もっと大きな振幅をもつ β -(DMBEDT-TTF)₂PF₆の研究に着手しているが、高圧下超伝導転移前後の状態をラマン分光法で研究し、電荷秩序と超伝導の関係を明らかにすることを計画している。

電荷秩序相はその配列様式については良くわかってきたが、強誘電的性質についてはまだ始まったばかりである。本年度は α -(BEDT-TTF)₂I₃の強誘電相において、1.4 μ mを基本波とする強い第二高調波の発生を観測した。この第二高調波は中赤外領域の電荷移動吸収帯に共鳴していることを明らかにした。このことは電子変位型という新しい型の強誘電相ができていていることを示唆している。実際、立ち上がり1 ps以下、回復時間30 ps程度という高速のSHG応答性が予備的に観測されており、電子の変位が強誘電相を引き起こす事をさらに裏付ける結果である。他の電荷秩序系へと物質を広げることと第二高調波発生の機構を明らかにすること、また強誘電相の性質を電子・格子相互作用の観点からも明らかにしたいと考えている。

最後に、走査型レーザー顕微鏡をもちいて、ビフェロセン-(F₁TCNQ)₃の共存相温度領域における分域構造の温度依存性を観測し、相転移の機構を明らかにすることを計画している。

中 村 敏 和 (助 教 授) (1998 年 6 月 1 日 着 任)

A-1) 専門領域：物性物理学

A-2) 研究課題：

- a) 固体広幅NMRおよび低温構造解析による TMTTF 系電荷秩序形成の起源解明
- b) $(\text{TMTTF})_2\text{X}$ の異常 g シフト: 構造解析ならびに量子化学計算からのアプローチ
- c) $(\text{TMTTF})_2\text{X}$ の局所電荷密度: 放射光 X 線 MEM 解析
- d) ESR によるヘキサベンゾコロネンナノチューブの電子物性研究
- e) 光合成光化学系 II 反応中心の多周波 ESR 研究
- f) パルスおよび高周波 ESR を用いたスピン科学研究の新しい展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 我々は一次元有機導体の電荷秩序状態とその起源を理解するために、おもに微視的な観点から TMTTF 系の電子状態に関する研究を行ってきた。最近我々は、種々の TMTTF 塩に対する重水素効果による電荷秩序転移温度の顕著な上昇、四面体アニオンを有する $(\text{TMTTF})_2\text{ReO}_4$ に対して常磁性相における電荷秩序転移およびアニオン配向秩序化転移における電荷秩序の再配列の発見、スピンパイエルズ転移における電荷再秩序化の発見を報告した。TMTTF 系では温度低下とともに一般に二量体が徐々に小さくなるが、電荷秩序相は有るしきい値をこえたところが安定化するように見える。つまり、 $1/4$ 占有バンドにおける電荷秩序形成と $1/2$ 占有バンドにおけるモット - ハバード絶縁相との競合で電子相が支配されるとも言える。四面体アニオン系のスピナー重項基底状態は、純電子的な電荷秩序形成を凌駕するアニオンポテンシャルが、アニオン秩序化で形成し、電荷配列の再構築が起こるためと考えられる。これら一連の研究を通して TMTTF 系の電荷秩序形成 ($-\text{o}-\text{O}-\text{o}-\text{O}-$) の主たる起源が長距離クーロン相互作用によるものであり、系に寄らず普遍的なものであることを見いだした。
- b) 上記のように一次元電子系 $(\text{TMTTF})_2\text{X}$ の電子状態については、かなり理解が進んできた。しかしながら、依然として未解決な問題が存在する。たとえばいくつかの TMTTF 塩では、室温から 20 K までの広い温度領域で異常な g 値の振る舞いが観測される。この問題を理解するために、単結晶 ESR 測定および X 線結晶構造解析により分子構造と局所スピン分布に関して考察を行った。PF₆ 塩では g テンソルの主値が 300 K から 20 K という広い温度領域で緩やかにシフトし、同時に、主軸が a 軸を中心として回転する。この顕著な g テンソルの振る舞いの起源としては、まず分子・結晶構造の変化が容易に想像されるが、X 線結晶構造解析からは、有意な分子構造変化は観測されない。そこで、TMTTF 分子に隣接しているカウンターアニオンの静電ポテンシャル効果について考察を行った。各温度での X 線結晶構造解析から得られた原子座標を使用して、DFT-GIAO 法に基づいた g テンソルの理論計算を行った。その結果、実験から得られた g テンソルの主値、主軸の温度依存性を再現することができた。また、計算結果から TMTTF 分子上のスピン密度分布を見積もったところ、TMTTF - アニオン間の距離が変化することにより、静電ポテンシャルが変化を受け、4 つの S 原子のうち、最もアニオンに近い S 原子上のスピン密度が増加することが分かった。この分子内電荷分布の変化により、主軸の回転が生じたと考えられる。これは、TMTTF 系がとカウンターアニオンと近接しておりかつドナー - アニオン間距離が顕著に変化していることに起因している。PF₆ のようなバルキーなカウンター

イオン塩では、カウンターイオンの静電ポテンシャルがドナーの波動関数に摂動をもたらし、異常 g シフトが起こったと考えられる。

- c) 前述したようにTMTTF塩のうち比較的大きなカウンターイオンを持つ系では温度依存する異常 g シフトが観測される。このような異常は有機・無機固体にかかわらず非常に珍しいもので、その起源としてフロンティア軌道の変形が強く示唆されている。このような分子内自由度に着目した研究はほとんどなされて無いが、次世代の機能性物質開拓の上で重要であると考えている。また、研究が進んでいる電荷秩序形成問題に関しても、純電子的な $-O-O-O-O-$ 型の電荷秩序に関してはX線構造解析による観測はなされていない。そこで、 $(TMTTF)_2X$ の電荷分布状態を分子内レベルで明らかにするために、室温並びに低温でのKEK-PF放射光実験施設によるX線測定の結果から構造解析を行い、マキシマムエントロピー法(MEM)による局所電荷分布解析を行っている。現在、より厳密な解析を行うためにソフトウェア等の整備も行っている。
- d) ヘキサベンゾコロネン(HBC)ナノチューブは、13個のベンゼン環が融合したグラフェン構造をもつHBC分子に種々の化学修飾を施した誘導体を基本ユニットとしている。その基本ユニットが溶液中での自己組織化によりナノメートルサイズの直径をもつチューブ状ポリマーとして成長する。HBCナノチューブでは、カーボンナノチューブとは異なり、個々のHBCのグラフェン面がチューブの円周方向に沿ってらせん状に積層している。このためグラフェン面がチューブの中心軸方向を向いているカーボンナノチューブとは基本的に異なる π 電子共役系を構成しており、新規機能性ポリマーナノチューブ開拓の観点から興味深い。東大工・ERATO-SORSTの相田グループによりヨウ素などの化学酸化によるキャリアドーピングを行い高い電気伝導性を示すHBCナノチューブが開発された。我々は、この π 電子共役系をもつHBCナノチューブの電子状態をESRやNMRといった磁気共鳴測定法を用いて調べている。中性でのHBCナノチューブでは不純物に起因すると思われる極弱いESR信号が観測されるだけであるが、ヨウ素をドーピングすると大きなESR信号が観測される。強度やESR線幅は時間とともに増加し、約一ヶ月で飽和する。これらの結果から観測しているESR信号は、ヨウ素ドーピングによるキャリアに起因すると考えられる。飽和状態での無配向試料に対するESR線幅は約8 Gaussとヘテロ原子を含まない系としては非常に広く、遍歴性を示唆している。実際ESR線幅は温度低下とともに減少しており、Elliot機構つまり伝導電子のフォノンによる緩和が支配的と考えられる。ただしESR信号強度から見積もったスピン磁化率の温度依存性は、室温ではフラットであるが低温ではCurie-Weiss的に増大し、キャリアが低温では局在していることを意味している。Curie定数から見積もったキャリア濃度は8%程度でかなりのドーピングが進んでいる。さらに、キャリアドーピングに伴う g 値や線幅の解析を行い、電子状態の解析を行っている。
- e) 酸素発生光合成は、光化学系II(PSII)および光化学系I(PSI)とよばれる直列にはたらく二つの光化学反応系(電子伝達系)の協調により機能している。最近、酸素発生を担うPSII反応中心複合体の3次元構造が明らかにされたが、酸素発生中心マンガングラスターなど小分子の構造や分子配向の精確な決定には至っていない。我々は、シアノバクテリア由来PSII反応中心を対象に、常磁性分子種の電子・分子構造を選択的かつ微視的に明らかにするために多周波ESRによる研究を行っている。PSIIでは4核のMnクラスターを中心に電子伝達系が存在し、光酸化されたスペシャルペアはY_z分子より電子が供給され、そのY_z分子は水分子から引き抜いた電子をMnクラスターから受け取る。Mnクラスターは、水分解-酸素発生過程において異なった中間酸化状態をとる。各Mn原子の酸化の程度に応じてS₀, S₁, S₂, S₃, S₄と呼ばれる。S = 1/2の基底状態をとるS₂状態は各Mn核の核スピン $I = 5/2$ との超微細相互結合により特徴的なマルチラインを示す。このS₂状態の精確な g テンソルを決定するためW-bandでの測定を行った。さらに、過渡的常磁性種であるY_zラジカルに関する知見を得るために、光照射後およびアニール後での多周波ESR測

定も行った。Yzラジカルの精確なgテンソルを決定するため、現在さらに単結晶試料を用いた測定が進行中である。

- f) 分子研所有のパルスおよび高周波ESRを用いて、高分解能ESR・高エネルギー特性を利用した複雑なスピン構造の決定、多周波領域にわたるスピンドYNAMICS計測といった種々な点から、スピン科学研究展開を行っている。これまでに高度に発展してきたESR分光手法を物質科学へ展開するために、スピンをプローブとした分子構造・スピン間相互作用を決定し複雑分子系の機能性を探る、分子集合体におけるスピンドYNAMICS解析を行い、分子内自由度に絡んだ協力現象の可能性、分子集合体ならではの新規物性機能発現を目指す。今後さらに、当該グループだけでなく所外のESRコミュニティと連携を取り、パルス・高周波ESRの新たな可能性や研究展開を議論し、大学共同利用機関である分子研からのスピン科学の情報発信を行っていく。

B-1) 学術論文

R. CHIBA, K. HIRAKI, T. TAKAHASHI, H. M. YAMAMOTO and T. NAKAMURA, “Extremely Slow Charge Fluctuations in the Metallic State of the Two-Dimensional Molecular Conductor θ -(BEDT-TTF)₂RbZn(SCN)₄,” *Phys. Rev. Lett.* **93**, 216405 (4pages) (2004).

K. MAEDA, T. HARA and T. NAKAMURA, “ESR Study on Low-Dimensional Antiferromagnet α -(BEDT-TTF)₂PF₆ and ζ -(BEDT-TTF)₂PF₆(THF),” *Synth. Met.* **152**, 453–456 (2005).

K. NOMURA, K. ISHIMURA, N. MATSUNAGA, T. NAKAMURA, T. TAKAHASHI and G. SAITO, “Non-Linear Transport in the Incommensurate SDW Phase of (TMTTF)₂Br under Pressure,” *Synth. Met.* **153**, 433–436 (2005).

S. FUJIYAMA, M. TAKIGAWA, J. KIKUCHI, K. KODAMA, T. NAKAMURA, E. FUJIWARA, H. FUJIWARA, H. CHUI and H. KOBAYASHI, “Nuclear Spin-Lattice Relaxation in κ -(BETS)₂FeBr₄,” *Synth. Met.* **154**, 253–256 (2005).

F. NAD, P. MONCEAU, T. NAKAMURA and K. FURUKAWA, “The Effect of Deuteration on the Transition into a Charge Ordered State of (TMTTF)₂X Salts,” *J. Phys.: Condens. Matter* **17**, L399–L406 (2005).

K. FURUKAWA, T. HARA and T. NAKAMURA, “Deuteration Effect and Possible Origin of the Charge-Ordering Transition of (TMTTF)₂X,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 3288–3294 (2005).

B-4) 招待講演

T. NAKAMURA, “ESR Investigation of Charge Ordering Phenomena in (TMTTF)₂X,” ASIA-PACIFIC EPR/ESR SYMPOSIUM 2004 (APES’04), Bangalore (India), November 2004.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本物理学会 領域7世話人 (2000-2001).

日本物理学会 代議員 (2001-2003).

日本物理学会 名古屋支部委員 (2001-).

日本化学会 実験化学講座編集委員会 委員 (2002-).

電子スピンサイエンス学会 担当理事 (2004-).

Asia-Pacific EPR/ESR Society Secretary/Treasure (2004-).

学会誌編集委員

電子スピンスサイエンス学会編集委員 (2003).

電子スピンスサイエンス学会編集委員長 (2004-2005).

B-10)外部獲得資金

特定領域研究,「分子導体における電荷の遍歴性と局在性の研究」,代表者 薬師久弥(中村敏和は準代表者で実質独立)(2003年-2007年).

基盤研究(C)(2),「一次元有機導体の逐次SDW転移における電子状態の解明」,中村敏和 (2001年-2003年).

特定領域研究(B),「NMRによる遍歴 - 局在複合スピン系の微視的研究:新電子相の開拓」,中村敏和 (1999年-2001年).

特定領域研究(A)(2) 集積型金属錯体,「dmit系金属錯体の微視的研究:磁気構造と電荷局在状態」,中村敏和 (1999年).

奨励研究(A),「有機導体におけるFermi液体-Wigner結晶転移の可能性」,中村敏和 (1998年-1999年).

特定領域研究(A)(2) 集積型金属錯体,「微視的手法によるdmit系金属錯体競合電子相の研究」,中村敏和 (1998年).

C) 研究活動の課題と展望

本グループでは,分子性固体の電子状態(磁性,導電性)を主に微視的な手法(ESR, NMR)により明らかにしている。研究グループの所有機器としては3台の固体広幅NMR分光器が稼働している。有機導体に対しての研究をもとに強相関低次元電子系の未解決な問題の解明を行うとともに,新規な分子性物質の新しい電子相・新機能を探索している。また,分子スケールナノサイエンスセンター所有の,多周波(X-, Q-, W-bands)・パルスESRを用いた他に類を見ないESR分光測定を行い,分子性導体など種々の機能性物質に対して電子状態やスピン構造に関する研究を行っている。ESR測定を中心に多数の協力研究・共同研究を受け入れ,最先端のESR測定研究の展開を全世界に発信している。生体関連物質に対してもESRという強力な手法も行えるようになった。さらに,学術創成研究を契機として放射光での分子内精密電荷分布解析も進行中である。今後は高圧下・極低温下といった極端条件での測定システム構築を行うとともに,物質科学における磁気共鳴研究のあらたな展開を行っていく。

分子集団動力学研究部門

小 林 速 男 (教授) (1995 年 7 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：物性分子科学

A-2) 研究課題：

- a) 機能性分子性伝導体の開発と物性
- b) 単一分子性金属の開発と物性
- c) 分子集積体のナノ構造を利用した機能性分子物質の構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

有機伝導体の研究は半世紀を超える長い歴史を持っている。新規な有機伝導体の開発は特に、四半世紀以前の有機超伝導の発見以来急速に発展してきたが、単純な有機超伝導体の開発の時代は終わり、最近では分子物質の特性を生かした機能性をもつ分子性伝導体の開発が求められる様になった。現在私達が取り組んでいる主な研究を以下に略記する。

- a) 磁性超伝導体の研究は物性物理分野の中心課題の一つとして注目を集めてきた。私達は有機伝導体に取り込まれた局在磁気モーメントと π 金属電子の相互作用により出現する新規な磁気伝導物性を示す有機伝導体の研究を継続している。これまでも λ -BETS₂FeCl₄や κ -BETS₂FeBr₄で局在磁気モーメントと π 金属電子の相互作用に基づく磁場誘起超伝導や前例のない絶縁相 - 超伝導相 - 金属相スイッチング現象などの種々の磁気伝導物性を示す磁性有機超伝導体や初めての反強磁性有機超伝導体などを報告してきた。最近、共同研究者によって磁場誘起超伝導体 λ -BETS₂FeCl₄の高磁場中の抵抗の振る舞いが精密に調べられ、40年以前から理論的に予想されている超伝導のオーダーパラメーターが空間依存するFFLO状態となっていることを示すと考えられる特徴ある抵抗の磁場依存性が見いだされている。また、我々は「超伝導→絶縁体転移」を示す合金系 λ -BETS₂Fe_{1-x}Ga_xCl₄が特定の狭い x の範囲で、磁場下で超伝導が壊れるときに、金属状態と超伝導状態の間で、磁場にも温度にも(殆ど)依存しないという(恐らく)前例のない抵抗状態を示すことを発見した。この振る舞いの再現性をチェックするために半年近く再測定を繰り返した。また、 λ -BETS₂Fe_{1-x}Ga_xCl₄の T - x 相図を正確に決め、超伝導相、金属相、反強磁性絶縁相が交わる領域で特異的な相図を示すことも判明した。

また、最近我々はスピנקロスオーバー転移や光誘起スピン転移トラッピング現象を示す新規な光・磁性・伝導多重機能分子性伝導体の開発を進めている。最近スピン転移と電気抵抗の履歴現象がカップルした前例のない分子性伝導体を見いだした。伝導性を向上させることにより、光照射により磁性や伝導性を制御できる磁性分子性伝導体の開発の可能性が考えられる。一方、数年以前より試みている安定有機ラジカル部位を持つ π ドナー分子による伝導体は様々な可能性を秘めた系であり、新たな目標に向けた合成研究を進めている。

- b) 最近、初めての単一分子だけで出来た分子性金属結晶 Ni(tmdt)₂の3次元金属のフェルミ面の形状を微小結晶を用いた高磁場下のde Haas van Alphen (dHvA) 振動の実験や、第一原理バンド計算などによって明らかにした。また、Ni(tmdt)₂結晶と同型構造を持つAu(tmdt)₂結晶の物性測定では、結晶の質が向上すると共に以前には判らなかつた磁気転移の詳細などが明らかになりつつある。110 K近傍に常磁性 - 反強磁性転移が観測され、それは核磁気共鳴の実

験によっても確認された。このような「高温」で反強磁性 (SDW) 転移を示し、転移後も高伝導状態を保つ様な伝導体は従来の分子性金属では例がないもので、興味深い。また Au(tmdt)₂結晶はナノサイズの厚みを持つ新しいタイプの金属性ナノ結晶であることが判明し、そのキャラクタリゼーションを進めている。

- c) 近年、ナノポーラス構造を持つ分子結晶を利用した機能性分子物質の開発が大きな注目を集めるようになった。私達はナノポーラスフェリ磁性体 Mn₃(HCOO)₆および多くの類似物質の結晶を開発した。これまでにフェリ磁性体、弱強磁性体、反強磁性体などが得られているが、最近、我々はこのような物質の誘電的な特性に注目し研究を開始している。最近極めて大きな誘電率を持つ化合物を見いだしつつある。

B-1) 学術論文

H. B. CUI, S. OTSUBO, Y. OKANO and H. KOBAYASHI, “Structural and Physical Properties of λ -(BEST)₂MCl₄ (BEST = Bis(ethylenediseleno)tetrathiafulvalene; M = Fe, Ga) and Analogous Magnetic Organic Conductor,” *Chem. Lett.* 254–255 (2005).

S. ISHIBASHI, H. TANAKA, M. KOHYAMA, M. TOKUMOTO, A. KOBAYASHI, H. KOBAYASHI and K. TERAURA, “*Ab Initio* Electronic Structure Calculation for Single-Component Molecular Conductor Au(tmdt)₂ (tmdt = Trimethylenetetrathiafulvalenedithiolate),” *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 843–846 (2005).

Z. WANG, B. ZHANG, M. KURMOO, H. FUJIWARA, T. OTSUKA and H. KOBAYASHI, “Synthesis and Characterization of a Porous Magnetic Diamond Framework, Co₃(HCOO)₆, and Its N₂ Sorption Characteristic,” *Inorg. Chem.* **44**, 1230–1237 (2005).

S. UJI, T. TERASHIMA, T. TERAU, S. YASUZUKA, M. TOKUMOTO, H. TANAKA, A. KOBAYASHI and H. KOBAYASHI, “Superconductivity and Vortex Phases in the Two-Dimensional Organic Conductor λ -(BETS)₂Fe_xGa_{1-x}Cl₄ ($x = 0.45$),” *Phys. Rev. B* **71**, 104525 (7 pages) (2005).

B. ZHANG, Z. WANG, H. FUJIWARA, H. KOBAYASHI, M. KURMOO, K. INOUE, T. MORI, S. GAO, Y. ZHANG and D. ZHU, “Tetrathiafulvalene [Fe^{III}(C₂O₄)Cl₂]: An Organic-Inorganic Hybrid Exhibiting Canted Antiferromagnetism,” *Adv. Mater.* **17**, 1988–1991 (2005).

K. TAKAHASHI, H. CUI, H. KOBAYASHI, Y. EINAGA and O. SATO, “The Light-Induced Excited Spin State Trapping Effect on Ni(dmit)₂ Salt with an Fe(III) Spin-Crossover Cation: [Fe(qsal)₂][Ni(dmit)₂]CH₃CN,” *Chem. Lett.* 1240–1241 (2005).

H. CUI, K. TAKAHASHI, Y. OKANO, H. KOBAYASHI, Z. WANG and A. KOBAYASHI, “Dielectric Properties of Porous Molecular Crystals Containing Polar Molecules,” *Angew. Chem.* **117**, 6666–6670 (2005).

S. S. STANILAND, W. FUJITA, Y. UMEZONO, K. AWAGA, S. J. CLARK, H. CUI, H. KOBAYASHI and N. ROBERTSON, “A Unique New Multiband Molecular Conductor: [BDTA][Ni(dmit)₂]₂,” *Chem. Commun.* 3203–3206 (2005).

E. FUJIWARA, H. FUJIWARA, B. Z. NARYMBETOV, H. KOBAYASHI, M. NAKATA, H. TORII, A. KOBAYASHI, K. TAKIMIYA, T. OTSUBO and F. OGURA, “Molecular Conductors Based on *peri*-Ditellurium-Bridged Donors, 2,3-DMTTeA and TMTTeN,” *Eur. J. Inorg. Chem.* 3435–3449 (2005).

K. YAMAMOTO, E. FUJIWARA, A. KOBAYASHI, Y. FUJISHIRO, M. SAKATA, M. TAKATA, H. TANAKA, Y. OKANO and H. KOBAYASHI, “Single-Component Molecular Conductor [Zn(tmdt)₂] and Related Zn Complexes,” *Chem. Lett.* **34**, 1090–1091 (2005).

S. OTSUBO, K. TAKAHASHI, H. CUI, Y. OKANO and H. KOBAYASHI, “Organic Metals Based on Asymmetric π Donors PEDT-TSF, (PEDT-TSF)₂FeX₄ (PEDT-TSF = Pyrazinoethylenedithiotetraselenafulvalene; X = Cl, Br),” *Chem. Lett.* **34**, 1598–1599 (2005).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. KONOIKE, S. UJI, M. NISHIMURA, K. ENOMOTO, H. FUJIWARA, B. ZHANG and H. KOBAYASHI, “Magnetic Properties of Field-induced Superconductor, κ -(BETS)₂FeBr₄,” *Physica B* **359**, 457–459 (2005).

M. TOKUMOTO, H. TANAKA, T. OTSUKA, H. KOBAYASHI and A. KOBAYASHI, “Observation of Spin-flop Transition in Antiferromagnetic Organic Molecular Conductors Using AFM Micro-cantilever,” *Polyhedron* **24**, 2793–2795 (2005).

B-4) 招待講演

H. KOBAYASHI, “Design and Development of Molecular Systems with Novel Electronic Functions,” International Symposium on Frontier in Materials Design, Synthesis and Measurements, Awaji (Japan), March 2005.

H. KOBAYASHI, “Development and Physical Properties of New Magnetic Molecular Conductors,” International Symposium on Molecular Conductors, Hayama (Japan), July 2005.

H. KOBAYASHI, “Development and Physical Properties of New Magnetic Molecular Conductors,” Sixth International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets, Key West (U.S.A.), September 2005.

小林速男, 「分子集積によって作られる金属結晶」, 広島大学プロジェクト研究センター 未来材料開発プロジェクト研究センター研究会, 広島大学, 2005年3月.

B-6) 受賞、表彰

日本化学会学術賞 (1997).

B-7) 学会及び社会的活動

文部科学省、学術振興会等の役員等

学術審議会専門委員 (1999-2000).

特別研究員等審査会専門委員 (1999-2000).

学会誌編集委員

日本化学会トピックス委員 (1970-1972).

日本化学雑誌編集委員 (1981-83).

日本結晶学会誌編集委員 (1984-86).

日本化学会欧文誌編集委員 (1997-1999).

J. Mater. Chem., Advisory Editorial Board (1998-).

科学研究費の研究代表者、班長等

特定領域(B)「分子スピン制御による新機能伝導体・磁性体の構築」領域代表者 (1999-2001).

科学技術振興事業団 戦略的創造研究推進事業「高度情報処理・通信の実現に向けたナノ構造体材料の制御と利用」, 「新規な電子機能を持つ分子ナノ構造体の構築」研究代表者 (2002-).

その他

日本化学会学術賞選考委員 (1995).

東大物性研究所物質評価施設運営委員 (1996-1997).

東大物性研究所協議会委員 (1998-1999).

東大物性研究所共同利用施設専門委員会委員 (1999-2000).

B-10)外部獲得資金

基盤研究(B),「高圧下のX線単結晶構造解析技術と有機結晶の高圧固体化学」,小林速男 (1998年-2000年).

特定領域研究(BX 磁性分子導体),「分子スピン制御による新機能伝導体・磁性体に構築」,小林速男 (2001年-2003年).

戦略的創造研究推進事業(CREST),「新規な電子機能を持つ分子ナノ構造体の構築」,小林速男 (2004年-).

C) 研究活動の課題と展望

分子性伝導体の分野ではこれまでに膨大な知見が蓄積されている。最近分子性伝導体の研究は益々活発となっている。新しい傾向としては、これまで蓄積された知見を、新規な分子デバイスの開発という観点に結びつけて新たな光を当てようとする研究が数多く見られるようになった。(光、磁場、電場などの)外力によって分子物質の状態を制御し、伝導性を大幅にコントロールすることができるような新規な伝導体の開発を目指す研究も活発となった。スピנקロスオーバー転移を利用して新規な光 - 磁性 - 伝導、多重機能分子性伝導体の開発を目指そうとしている最近の私達の研究もその一例である。一方、私達がこれまで10余年間調べてきた磁性有機超伝導体の研究は基礎的な研究であるが、現在でも未知の興味深い(磁気)伝導物性を秘めているようである。また、最近長年の目標でもあった単一分子だけで出来た金属結晶が実現したが、同種の単一分子性伝導体で、100 Kを越える磁気転移を示す「分子性磁性金属」も見いだされた。この伝導体は有機 π 伝導層と磁性アニオンから構成されている従来の磁性有機伝導体とは異なり、同一の π 電子系が磁性も伝導も同時に担っているという、新しい分子性の「金属磁性体」である。また、分子性金属結晶の分子設計条件を更に吟味すれば、私達が発見したものとは異なるタイプの分子による単一分子性金属結晶を同様な考えに従って開発できることが判る。例えば、単一種の純有機分子だけで金属結晶や超伝導体を同様な設計に従って作ることも可能であると考えている。分子性伝導体の研究は分子物性研究の基本となる研究である。有機超伝導体の誕生から四半世紀を経て新しい発展の時代が再び現れようとしているのではないと思われる。伝導体以外では、誘電特性に注目したポーラスナノ空間を利用した新しい分子性誘電性物質の研究も興味深い発展を見せ始めており今後の展開が期待される。

3-6 相関領域研究系

相関分子科学第一研究部門

江 東 林 (助教授)(2005 年 5 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：無機化学、有機化学、高分子科学

A-2) 研究課題：

- a) 金属集積体を用いたスピン空間の構築と機能開拓
- b) 分子プログラムに基づいた光機能性ナノ構造体の構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 金属集積体を用いたスピン空間の構築と機能開拓:本研究は、空間形態が明確な高分子を活用することで、集積型金属錯体の高度な配列制御を通じて、ならびに、スピン活性ナノ物質群を創出することにより、小分子には見られない特異な機能を開拓することを目的とする。本年度では、スピン転移分子を無機ナノ空間に内包した新規なハイブリッド材料の創出と機能の開拓を目指した。具体的には、水溶性PEG鎖を導入したサイズの異なる一連のトリアゾールユニットを合成した。鉄(II)との配位重合反応を検討したところ、いずれもトリアゾール-鉄(II)配位高分子を与えることを見いだした。これは、ゾルゲル法によりメソポーラスシリカフィルムを合成するための鋳型ができたことで、今後メソポーラスシリカフィルムの合成やメソポーラスシリカフィルムドメイン構造を媒体とする究極の高密度記録材料としての応用を検討する。
- b) 分子プログラムに基づいた光機能性ナノ構造体の構築:本研究では、金属配位結合や水素結合、 π - π 相互作用などの分子間相互作用を利用・制御し、新規な光機能性ナノ構造体を創出し、小分子ユニットに見られない新しい機能の開拓を目指している。本年度では新規 π -共役分子の設計を行い、基本構成ユニットの合成を進めた。

B-1) 学術論文

T. FUJIGAYA, D. -L. JIANG and T. AIDA, "Spin-Crossover Dendrimer: Generation Number-Dependent Cooperativity in Thermal Spin Crossover," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 5484–5489 (2005).

W. -S. LI, D. -L. JIANG, Y. SUNA and T. AIDA, "Cooperativity in Chiroptical Sensing with Dendritic Zinc Porphyrins," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 7700–7702 (2005).

Y. -J. MO, D. -L. JIANG, M. UYEMURA, T. AIDA and T. KITAGAWA, "Energy Funneling of IR Photons Captured by Dendritic Antennae and Acceptor Mode Specificity: Anti-Stokes Resonance Raman Studies on Iron(III)-Porphyrin Complexes with a Poly(aryl ether) Dendrimer Framework," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 10020–10027 (2005).

W. -D. JANG, N. NISHIYAMA, G. -D. ZHANG, A. HARADA, D. -L. JIANG, S. KAWAUCHI, Y. MORIMOTO, M. KIKUCHI, H. KOYAMA, T. AIDA and K. KATAOKA, "Supramolecular Nanocarrier of Anionic Dendrimer Porphyrins with Cationic Block Copolymers Modified with Polyethylene Glycol to Enhance Intracellular Photodynamic Efficacy," *Angew. Chem., Int. Ed.* **44**, 419–423 (2005).

B-3) 総説、著書

D. -L. JIANG and T. AIDA, "Bioinspired Molecular Design of Functional Dendrimers," *Prog. Polym. Sci.* **30**, 403–411 (2005).

江 東林,「アンテナ効果」, デンドリティック高分子, NTS, 第3編第1章 (2005).

B-4) 招待講演

江 東林,「樹木状高分子を用いた機能性材料の開拓」, 日本化学会第85回春季年会(若い世代特別講演会), 横浜, 2005年3月.

江 東林,「デンドリマーを用いた光誘起電子移動系の構築」, 日本化学会第85回春季年会 特別企画「有機光化学の新展開——生命および未来材料へのアプローチ」, 横浜, 2005年3月.

江 東林,「光機能性デンドリマーの新しい展開」, 高分子学会・光反応・電子用材料研究会, 東京, 2005年3月.

江 東林,「デンドリマーを用いた水の光還元および水素発生」, 分子研研究会, 岡崎, 2005年12月.

B-5) 特許出願

特開2000-239373,「環状ポリアミンコアを有するデンドリマーとその錯体」, 相田卓三、江 東林、佐瀬正和、張 祐銅、加和 学, 2000年.

特開2000-239360,「デンドロン側鎖を有するポリフェニレンエチニレン、並びにこれを含有する樹脂組成物、発光性塗料、及び発光性シート状成形体」, 相田卓三、江 東林、佐藤崇郁、加和 学, 2000年.

特開2000-247931,「エステル基末端デンドロンの製造方法」, 相田卓三、江 東林、佐瀬正和、張 祐銅、加和 学, 2000年.

特開PCT WO 01/55251 A1国際出願番号PCT/JP01/00546,「Polymeric Micellar Structure」, 相田卓三、江 東林、大野大典、スタパート・ヘンドリック、西山伸宏、片岡一則, 2001年.

特開2001-206885,「イオン性ポルフィリン化合物」, 相田卓三、江 東林、大野大典、スタパート・ヘンドリック、西山伸宏、片岡一則, 2001年.

特開2001-206885,「高分子ミセル構造体」, 相田卓三、江 東林、大野大典、スタパート・ヘンドリック、西山伸宏、片岡一則, 2001年.

特願2003-431830,「新規な相転移型スピנקロスオーバーリアゾール鉄錯体」, 江 東林、藤ヶ谷剛彦、相田卓三, 2003年.

特願2004-42639,「水溶性デンドリマー分子ワイヤーおよびその合成方法」, 江 東林、相田卓三, 2004年.

特願2004-58529,「水溶性デンドリマー分子ワイヤーを用いた水の光分解触媒および水素の製造方法」, 江 東林、相田卓三, 2004年.

特願2004-64930,「デンドリマー分子ワイヤー、その合成方法およびそれよなる蛍光剤」, 江 東林、李 維実、相田卓三, 2004年.

特願2004-241670,「両親媒性ポルフィリン - フラレン2量体およびその自己組織化により形成されるナノチューブ構造体」, 江 東林、リチャード シャーウェ、砂 有紀、相田卓三, 2004年.

特願2004-252042,「車輪状マルチポルフィリンデンドリマーおよびその合成法」, 江 東林、李 維実、砂 有紀、相田卓三, 2004年.

特願2005-55321,「トリアゾール-鉄錯体からなる機能性有機ゲル」,江 東林、藤ヶ谷剛彦、相田卓三, 2005年.

特願2005-60283,「キラルセンサーおよびキラルセンシング方法」,江 東林、李 維実、砂 有紀、相田卓三, 2005年.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員

第二回デンドリマー国際会議実行委員 (2000).

B-10) 外部獲得資金

日本学術振興会奨励研究,「デンドリマー組織を用いた高反応性金属ポルフィリン錯体の空間的孤立化と新反応の開拓」,江 東林 (1997年-1998年).

日本科学協会笹川科学研究,「デンドリマーを用いた金属ポルフィリン錯体の孤立化」,江 東林 (1997年).

特定領域研究(A),「デンドリマーで被覆した分子ワイヤーの合成と機能」,江 東林 (1999年).

若手奨励研究(A),「赤外線を用いた人工光合成系の構築」,江 東林 (1999年-2000年).

科学技術振興機構 さきがけ研究・構造制御と機能領域,「樹木状金属集積体を用いたスピン空間の構築と機能開拓」,江 東林 (2005年-2008年).

C) 研究活動の課題と展望

1人での研究室のセットアップも無事終え、雑務からの解放感に浸りながら、これから実験に集中できることが何よりうれしい。来年には助手や大学院生などの加盟によりマンパワーのアップで研究室がいっそうにぎやかになると期待している。合成を基本とした我々の研究室から分子開発の物質ができることを信じて分子科学の新しい領域に積極的に取り組んでいく。

3-7 極端紫外光科学研究系

基礎光化学研究部門

小 杉 信 博 (教授) (1993 年 1 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：軟 X 線光化学、光物性

A-2) 研究課題：

- a) 軟 X 線内殻分光による分子間相互作用の研究
- b) 内殻励起を利用した禁制価電子状態の研究
- c) 内殻励起の理論的アプローチの開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 軟 X 線分光による分子間相互作用の研究: 孤立分子、分子クラスター、マトリックス分離した分子、低温で凝縮させた分子、分子イオンを含む分子結晶や高分子鎖等の電子構造を比較するために、種々の実験を行っている。100 eV を越える軟 X 線を使った内殻分光では局所的な電子構造が切り出せるので、最近の分光技術で可能になった 1 meV 精度の高分解能実験によって特定原子サイト周辺の弱い分子間相互作用を明らかにできる。さらに、我々の装置では、他の研究グループのものと比較して、小さなクラスターサイズの測定が可能であり、サイズに依存したいろいろなサイト(角、末端、面、クラスター内部など)での分子間相互作用を区別でき、それらの成分比からクラスターの大きさや構造が推定できる。また、内殻励起軟 X 線吸収エネルギーのシフト量(赤方、青方の違いもある)から分子間の配向もわかる。
- b) 内殻励起を利用した禁制価電子状態の研究: これまで内殻電子の大きなスピン軌道相互作用を利用して 1 重項基底状態分子から 1 光子イオン化で 4 重項状態を観測する共鳴光電子分光法、および 1 重項基底状態分子から 1 光子励起で 3 重項励起状態を観測する軟 X 線共鳴ラマン分光法の開発を行ってきた。これらの特徴ある実験手法は軟 X 線を利用することで可能となるものであり、どちらも 2 次光学過程を使う。特に軟 X 線発光を観測する装置は従来のものと全く違う新しい発想でデザインしたものであり、現在、エネルギー分解能 5000 を達成するところまで開発が進んでいる。
- c) 内殻励起の理論的アプローチの開発: 本グループで開発した軟 X 線吸収スペクトルの量子化学計算コード GSCF3 は世界の放射光施設(スウェーデン MAX、米 ALS、独 BESSY、独 DESY、カナダ CLS、米 Aladdin、伊 Elettra など)の利用者によって小さな分子から高分子などの大きな分子まで活用されているが、実験家が使う場合は Hartree-Fock レベルに留めていた。しかし、放射光源の性能向上によって内殻励起の実験研究が進んできており、実験家からも電子相関を考慮した実用的な計算コードの利用が要求されるようになった。現在、実験家のための使いやすい内殻励起計算用量子化学 CI コード GSCF4 を整備しているところである。

B-1) 学術論文

K. WIESNER, A. N. de BRITO, S. L. SORENSEN, N. KOSUGI and O. BJÖRNEHOLM, “Core Excitation in O₃ Localized to One of Two Symmetry-Equivalent Chemical Bonds: Molecular Alignment through Vibronic Coupling,” *J. Chem. Phys.* **122**, 154303 (6 pages) (2005).

T. HATSUI, H. SETOYAMA, N. KOSUGI, B. WASSERMANN, I. L. BRADEANU and E. RÜHL, “Photoionization of Small Krypton Clusters in the Kr 3d Regime: Evidence for Site-Specific Photoemission,” *J. Chem. Phys.* **123**, 154304 (6 pages) (2005).

N. KOSUGI, “Valence in the Rydberg/Continuum Region in Molecular Inner-Shell Spectroscopy,” *J. Electron Spectrosc.* **144**, 1203–1207 (2005).

T. HATSUI, H. SETOYAMA, E. SHIGEMASA and N. KOSUGI, “Design of a Novel Transmission-Grating Spectrometer for Soft X-Ray Emission Studies,” *J. Electron Spectrosc.* **144**, 1059–1062 (2005).

S. MASUDA, T. GEJO, M. HIYAMA and N. KOSUGI, “Vibronic Couplings in the C 1s-Rydberg and Valence Excitations of C₂H₂, Revealed by Angle-Resolved Photoion Yield Spectroscopy,” *J. Electron Spectrosc.* **144**, 215–218 (2005).

H. SETOYAMA, T. HATSUI and N. KOSUGI, “S 2p Excited States of OCS in Rare Gas Matrices,” *J. Electron Spectrosc.* **144**, 87–89 (2005).

M. HIYAMA and N. KOSUGI, “Ab Initio R-Matrix/MQDT Method for Near-Edge X-Ray Absorption Fine Structure,” *Phys. Scr.* **T115**, 136–139 (2005).

M. HIYAMA and N. KOSUGI, “Ab Initio R-Matrix/Multi-Channel Quantum Defect Theory Approach to Study Molecular Core Excitation and Ionization: GSCF4R,” *J. Theor. Comput. Chem.* **4**, 35–47 (2005).

M. HIYAMA and N. KOSUGI, “Ab Initio R-Matrix/Multi-Channel Quantum Defect Theory Applied to Molecular Core Excitation and Ionization,” *J. Electron Spectrosc.* **144**, 1223–1226 (2005).

B-3) 総説、著書

J. ADACHI, N. KOSUGI and A. YAGISHITA, “Symmetry-resolved soft X-ray absorption spectroscopy: Its application to simple molecules,” *J. Phys. B* **38**, R127–R152 (2005).

B-4) 招待講演

N. KOSUGI, “Energy shift in inner-shell excitation of molecular clusters,” The 354th WE-Heraeus Seminar on Structure and Dynamics of Free Clusters and Nanoparticles using Short Wavelength Radiation, Bad Honnef (Germany), September 2005.

N. KOSUGI, “Energy shift in inner-shell excitation of molecular clusters,” Department of Physics, Stockholm University, Stockholm (Sweden), September 2005.

N. KOSUGI, “Energy shift in inner-shell excitation of molecular clusters,” Department of Theoretical Chemistry, Royal Institute of Technology, Stockholm (Sweden), September 2005.

B-6) 受賞、表彰

小杉信博, 分子科学研究奨励森野基金研究助成 (1987).

樋山みやび, 第6回原子衝突研究協会若手奨励賞 (2005).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本放射光学会庶務幹事 (1994).

日本放射光学会評議員 (1994-1995, 1998-1999, 2002-2003, 2006-2007).

日本放射光学会将来計画検討特別委員会 (2001-2003).

日本放射光学会先端的リング型光源計画特別委員会 (2005-2006).

日本分光学会東海支部幹事 (1993-1997).

日本化学会化学技術賞等選考委員会委員 (2001-2002).

学会の組織委員

SRIシンクロトン放射装置技術国際会議国際諮問委員 (1994, 1997, 2000, 2003, 2005-2006).

VUV真空紫外光物理国際会議国際諮問委員 (2004-2012).

VUV-12, VUV-14真空紫外光物理国際会議プログラム委員 (1998, 2004).

ICESS-8,9,10電子分光及び電子構造国際会議国際プログラム委員 (2000, 2003, 2005-2006).

IWP光イオン化国際ワークショップ国際諮問・プログラム委員 (1997, 2000, 2002, 2005).

COREDEC 内殻励起における脱励起過程国際会議プログラム委員 (2001).

ICORS2006 第20回国際ラマン分光学会議プログラム委員 (2005-2006).

IWSXR 軟X線ラマン分光及び関連現象に関する国際ワークショップ組織委員長 (2005-2006).

XAFS-VII X線吸収微細構造国際会議プログラム委員及び実行委員 (1992).

XAFS-XI X線吸収微細構造国際会議組織委員及びプログラム委員 (2000).

XAFS-XII X線吸収微細構造国際会議国際諮問委員 (2003).

SRS-2シンクロトン放射と材料科学国際会議組織委員 (1998).

ICFA-24 次世代光源に関する先導的ビームダイナミクス国際ワークショップ組織委員 (2002).

原子分子の光イオン化に関する王子国際セミナープログラム委員 (1995).

アジア交流放射光国際フォーラム組織委員及び実行委員 (1994, 1995, 2001, 2004).

日仏自由電子レーザーワークショップ副組織委員長 (2002).

XAFS討論会プログラム委員 (1998, 2000, 2001, 2002, 2003, 2004, 2005).

ISSP-6 放射光分光光学国際シンポジウムプログラム委員 (1997).

文部科学省、学術振興会等の役員等

文部科学省科学技術・学術審議会専門委員(研究計画・評価分科会) (2005-2006).

大学共同利用機関法人準備委員会自然科学研究機構検討委員 (2003).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (1997-1999).

日本学術振興会国際科学協力事業委員会委員 (2002-2003).

新技術開発事業団創造科学技術推進事業研究推進委員 (1985-1990).

大学共同利用機関法人自然科学研究機構教育研究評議員 (2004-2006).

高エネルギー加速器研究機構運営協議員会委員 (2001-2003).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所運営協議員会委員 (2001-2003).

高エネルギー加速器研究機構加速器・共通研究施設協議員会委員 (2001-2003).

東京大学物性研究所軌道放射物性研究施設運営委員会委員 (1994-).

日本学術会議放射光科学小委員会委員 (2003-2005).

広島大学放射光科学研究センター顧問 (1996-1999).

学会誌編集委員

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Editorial Board member (2005-).

その他

極紫外・軟X線放射光源計画検討会議光源仕様レビュー委員会委員 (2001-2002).

SPring-8 (BL01B1, BL27SU, R&D) 評価委員会委員 (2002, 2003, 2004).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光共同利用実験審査委員 (1997-2001).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光研究施設評価分科会委員 (2001-2002).

B-7) 他大学での講義、客員

名古屋大学工学研究科結晶材料工学専攻非常勤講師, 特別講義, 2005年2月1日.

B-9) 学位授与

益田周防海, 「簡単な分子の内殻励起状態における価電子ダイナミクス」, 2005年3月, 博士(理学)

B-10) 外部獲得資金

基盤研究(B), 「内殻励起による分子性遷移金属化合物の光物性研究」, 小杉信博 (1999年-2001年).

基盤研究(B), 「内殻励起を利用したスピン禁制イオン化・励起状態の研究」, 小杉信博 (2003年-2005年).

科学技術振興調整費(若手任期付研究員支援), 「次世代軟X線発光分光器の開発」, 初井宇記 (2003年-2006年).

C) 研究活動の課題と展望

内殻電子が絡む研究は, 内殻励起特有の新しい現象の発見・理解やそれらの研究のための実験的・理論的方法論の開拓という観点から見直すとまだ多くの課題が残されている。我々は分子系(気体, クラスタ, 希ガスマトリックス, 固体, 表面吸着)に対して直線偏光軟X線を励起源として内殻励起過程とその脱励起過程(解離イオン放出, 電子放出, 軟X線放出)の研究を続けている。ここ6年間は脱励起過程の研究に重点を置いており, 特に基底状態からの直接過程では見ることでない価電子領域のイオン化・励起状態の研究を展開している。内殻励起状態を中間状態とするこの種の二次光学過程では, 寿命の短い内殻励起状態の寿命幅に支配されない高分解能分光が可能となるが, 遷移確率の少ない過程でもあるので, 高輝度で高分解能軟X線分光の最新技術を導入することが不可欠である。現在, 高度化されたUVSOR光源の性能をフルに引き出せるように, アンジュレータ, 分光器, 測定装置のマッチングを最適にした最新の軟X線ビームラインを建設し, クラスター研究用光電子分光システムと高分解能軟X線発光分光システムを完成させたところである。今後, 測定試料の状態に依らないその場観測可能な分光法としての方法論の確立と基礎過程の研究を展開していく。

菱 川 明 栄 (助教授)(2003 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：光子場物理化学

A-2) 研究課題：

- a) 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
- b) 極短パルス光による反応イメージングと制御

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 強光子場中分子ダイナミクスの解明:分子内のクーロン場に匹敵するほどの極めて強い光子場における分子は摂動領域に比べて本質的に大きく異なったふるまいを示す。特に、光子場と分子との強い結合によって生じる「光ドレスト状態」においては、そのポテンシャル曲面の形状が光パルス形状に応じて刻一刻と変化するため、これを利用した化学反応コントロールや新奇反応経路の開拓へ向けた新たな展開が期待されている。このような強光子場における分子ダイナミクスを明らかにするために、これまで用いてきたコインシデンス運動量画像法とポンプ・プローブ計測を組み合わせることによって、その核ダイナミクスの実時間追跡(133 fs–3 ps)を行った。その結果、強光子場(0.2×10^{15} W/cm², 60 fs)において生成したCS₂²⁺においては2体解離過程CS₂²⁺ → CS⁺ + S⁺に加えて、エネルギー的には不利な3体解離過程CS₂²⁺ → S⁺ + C + S⁺が効率よく起きていることが見いだされ、強光子場におけるポテンシャル曲面変化に伴って対称伸縮振動方向への核波束の運動が誘起されることがわかった。
- b) 極短パルス光による反応イメージングと制御:光パルス照射後の分子のふるまいを構造の変化として実時間計測するために、サブ10フェムト秒レーザーパルスによるクーロン爆発イメージング、および超短パルス軟X線を用いた内殻光電子のホログラムを利用した新規手法の開発を進めている。これによって光吸収に伴う化学反応過程の理解へ向けた新たなアプローチを創出するとともに、レーザー場と分子の相互作用に関する新たな原理の発見と高効率な分子反応制御手法の探索を目指している。現在のところ、高強度短パルスレーザーの改良を行い、サブ10フェムト秒極短パルス(~8 fs, 400 μJ/pulse)の発生に成功しており、この光源を利用したポンプ・プローブ計測を進めている。

B-1) 学術論文

A. HISHIKAWA, M. UYAMA and K. YAMANOCHI, “Probing the Ultrafast Nuclear Motion in CS₂²⁺ in Intense Laser Fields,” *J. Chem. Phys.* **122**, 151104 (4 pages) (2005).

M. UYAMA, A. HISHIKAWA and K. YAMANOCHI, “Concerted and Sequential Coulomb Explosion Process of N₂O in Intense Laser Fields by Coincidence Momentum Imaging,” *J. Chem. Phys.* **123**, 154305 (8 pages) (2005).

B-4) 招待講演

A. HISHIKAWA, “Polyatomic molecules in intense laser fields studied by coincidence momentum imaging,” 9th East Asian Workshop on Chemical Reactions, Daejeon (Korea), March 2005.

菱川明栄, 「サブ10フェムト秒強光子場における分子過程」, 第1回『粒子相関と配向・偏極で探る有限量子系のダイナミクス』研究会, 高エネルギー加速器研究機構, つくば, 2005年6月.

B-6) 受賞、表彰

菱川明栄, 原子衝突研究協会若手奨励賞 (2000).

菱川明栄, 日本分光学会賞論文賞 (2001).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本分光学会企画委員 (1999-2003).

原子衝突研究協会企画委員 (2001- 2003).

分子科学研究会委員 (2002-).

日本分光学会中部支部幹事 (2003-).

強光子場科学懇談会企画委員 (2004-).

学会の組織委員

分子構造総合討論会プログラム委員 (2000).

分子構造総合討論会シンポジウム「レーザー場による分子過程コントロール」主催者 (2000).

日本分光学会装置部会・理研合同シンポジウム「強光子場の科学とその応用」主催者 (2000).

日本分光学会装置部会・理研合同シンポジウム「超短パルス電子線・X線技術の現状と新展開」主催者 (2002).

第8回東アジア化学反応ワークショップ主催者 (2004).

B-8) 他大学での講義、客員

京都大学大学院理学研究科, 「光子場物理化学」, 2005年11月16日, 12月5日.

京都大学大学院理学研究科化学専攻, 客員助教授, 2005年4月 - .

B-10) 外部獲得資金

松尾学術助成, 「強光子場中分子の電子相関ダイナミクス」, 菱川明栄 (1999年).

基盤研究(C), 「多原子分子ドレスト状態の高分解能干渉ドップラー分光」, 菱川明栄 (1999年).

基盤研究(B)(2), 「同時計数運動量測定による強光子場中多原子分子ドレスト状態の解明」, 菱川明栄 (2000年-2001年).

若手研究(A), 「電子 - イオンコインシデンス運動量計測による強光子場中分子ダイナミクス」, 菱川明栄 (2002年-2004年).

特定領域研究 (公募), 「分子ドレスト状態における核波束実時間追跡: コインシデンス画像法によるアプローチ」, 菱川明栄 (2004年-2005年).

科学技術振興機構戦略的創造事業さきがけ, 「光電子ホログラフィーによるレーザー場反応追跡」, 菱川明栄 (2005年-2009年).

C) 研究活動の課題と展望

高強度極短パルスフェムト秒レーザーおよびレーザー高次高調波を用いた超高速分子ダイナミクスの解明に取り組む。

反応動力学研究部門

宇理須 恒 雄 (教授)(1992年5月1日着任)

A-1) 専門領域：電子シンクロトロン放射光光化学反応、ナノバイオエレクトロニクス

A-2) 研究課題：

- a) 放射光エッチングによるSi表面の微細加工とその表面への生体情報伝達システムの構築と生命機能の発現
- b) 生体材料のAFMおよび赤外反射吸収分光法(BML-IRRAS)による評価
- c) 神経細胞ネットワーク診断素子開発と基礎医学応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 放射光エッチングの特性を生かして、生体情報システムとSi電子回路システムの融合を目指す。前者はイオンによる電気伝導系で後者は電子による電気伝導系である。両者を結合する基本素子は膜タンパクのイオンチャンネルである。Si基板に貫通穴を形成し、そこに脂質二重膜/イオンチャンネル集積構造を形成しチャンネル前後に電極を取り付けた構造(イオンチャンネル電流記録素子)を作成する。2005年度は、分子研装置開発の多大な協力を得て、Si基板に貫通穴を形成する技術をほぼ確立、微細貫通穴形状のさらなる高度制御のためのXeF₂放射光エッチングシステムを構築、Siを基板とする基本素子を、サスペンデッドメンブレン構造で製作し、グラミシジンをチャンネルとする単一イオンチャンネル電流の計測に成功した。サポータッドメンブレン構造の素子は製造技術が一旦確立すれば、安定性、再現性などの点で優れていると考えられているがまだ、製作の成功例がない。この素子製作の重要な一歩として、脂質二重膜によるギガオームシール形成に成功した。
- b) 脂質二重膜/膜タンパク集積系は、脂質-タンパクやタンパク-タンパク相互作用を調べる興味深い反応場と言える。この構造と機能の研究は分子科学の新分野であるとともに、上記の素子構造形成にも重要である。2005年度はシリコン基板表面に共有結合で固定したアビジン分子の配向をBML-IRRASとAFMで解明、ベシクルフュージョンで平面脂質二重膜を形成する場合の形成速度や膜質が固体基板表面のOH基密度に依存することを発見、同様な方法による二重膜形成において、形成速度への脂質と基板表面の静電相互作用の影響を調べた、tethered supported membrane構造を形成する技術を開発し、これにグラミシジンを導入した。ユニークなマイクロドメイン構造とグラミシジンの凝集構造を観測した。膜タンパク集積において基板と二重膜の間の水の層の存在の重要性を示した。
- c) 上記のイオンチャンネル電流記録素子は、通常のパッチクランプ法と比較した場合、Si基板表面の多数の点でイオンチャンネル電流を測定できる点が大きな特徴である。この事に着目し、Si基板表面に神経細胞ネットワークを培養し、複数の点でイオンチャンネル電流を計測できる素子を提案し製作を開始した。従来行われている蛍光観察を併用して、神経細胞ネットワークの新しい時空間計測が可能となる。このテーマは統合バイオサイエンスセンターの富永教授との共同研究として進める。2005年度はPDMSによるマイクロ流体回路と薬液供給系を作成、イオンチャンネル電流計測用の前置増幅器の設計と製作、神経細胞の培養とマイクロ流体回路の形成、などの実験を進めた。

B-1) 学術論文

T. URISU, Md. M. RAHMAN, H. UNO, R. TERO and Y. NONOGAKI, “Formation of High Resistance Supported Lipid Bilayer on the Surface of Si Substrate with Microelectrodes,” *Nanomedicine* **1**, 317–322 (2005).

H. WATANABE, Z. -H. WANG, S. NANBU, J. MAKI, T. URISU, M. AOYAGI and K. OOI, “H Atom-Induced Oxidation Reaction on Water-Terminated Si Surface, $2\text{H} + \text{H}_2\text{O}/\text{Si}(100)-(2\times 1)$: A Theoretical Study,” *Chem Phys. Lett.* **412**, 347–352 (2005).

Z. -L. ZHANG, T. HARA, H. OGURI, Y. -J. MO, M. AOYAMA, H. YOSHIDA, Y. -H. KIM, Md. M. RAHMAN, R. TERO and T. URISU, “Fluorescence Recovery after Photobleaching Apparatus Using Second Harmonic of 1120 nm Semiconductor Laser for Illumination,” *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* **3**, 254–257 (2005).

R. TERO, N. MISAWA, H. WATANABE, S. YAMAMURA, S. NANBU, Y. NONOGAKI and T. URISU, “Fabrication of Avidin Single Molecular Layer on Silicon Oxide Surfaces and Formation of Tethered Lipid Bilayer Membranes,” *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* **3**, 237–243 (2005).

N. MISAWA, S. YAMAMURA, R. TERO, Y. NONOGAKI and T. URISU, “Orientation of Avidin Molecules Immobilized on COOH-Modified $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$ Surfaces,” *Chem. Phys. Lett.* **419**, 86–90 (2005).

Y. NONOGAKI and T. URISU, “Synchrotron Radiation Induced Si–H Dissociation on H-Si(111)- 1×1 Surfaces Studied by In-Situ Monitoring in the Undulator-STM System,” *J. Vac. Sci. Technol., A* **23**, 1364–1366 (2005).

Md. M. RAHMAN, Y. NONOGAKI, R. TERO, Y. -H. KIM, H. UNO, Z. -L. ZHANG, T. YANO, M. AOYAMA, R. SASAKI, H. NAGAI, M. YOSHIDA and T. URISU, “Giant Vesicle Fusion on Microelectrodes Fabricated by Femto Second Laser Ablation Followed by Synchrotron Radiation Etching,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **44**, L1207–L1210 (2005).

R. TERO, T. URISU, H. OKAWARA and K. NAGAYAMA, “Deposition of Lipid Bilayers on the OH-Density-Controlled Silicon Dioxide Surfaces,” *J. Vac. Sci. Technol., A* **23**, 751–754 (2005).

Z. -H. WANG, T. URISU, G. RANGARAO, S. NANBU, J. MAKI, M. AOYAGI, H. WATANABE and K. OOI, “Assignment of Surface IR Absorption Spectra Observed in the Oxidation Reactions: $2\text{H} + \text{H}_2\text{O}/\text{Si}(100)$ and $\text{H}_2\text{O} + \text{H}/\text{Si}(100)$,” *Surf. Sci.* **575**, 330–342 (2005).

B-4) 招待講演

T. URISU, “Integration of lipid bilayer/membrane protein on Si and application to biosensors-as one of the major subjects in the post-genome,” The third international Forum on Post-Genome technologies (3’ IFPT)- Molecular diagnosis and Bio-Nanoscience, Guilin (China), April 2005.

T. URISU, “The membrane-protein biosensor fabricated by top-down and bottom-up nanotechnologies,” China NANO 2005, Beijing (China), June 2005.

T. URISU, “The membrane-protein biosensor and nanotechnologies,” First Annual Meeting, American Academy of Nanomedicine, Baltimore (U.S.A.), August 2005.

宇理須恒雄,「バイオセンサーに向けたシリコンへの膜タンパク集積に関する研究」, ヒューマンライフサイエンスフォーラム, インテックス大阪, 2005年10月.

宇理須恒雄,「膜タンパク・脂質二重膜の固体表面上への集積とバイオセンサー応用」, 奈良商工会議所, 2005年7月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

レーザー学会評議員 (1983-1985).

日本放射光学会評議員 (1993-1994, 1997-1998, 2001-2002).

電気学会, 放射光励起プロセス技術調査専門委員会幹事 (1992-1994).

電気学会, 放射光による材料加工技術調査専門委員会委員長 (1994-1997).

大型放射光施設安全性検討委員会委員 (1993-).

東北大学電気通信研究所研究外部評価委員 (1995-).

日本工業技術振興協会, 放射光の半導体への応用技術研究委員会顧問委員 (1995-2000).

新機能素子研究開発協会, 新世紀素子等製造評価技術の予測委員会 / ハードフoton技術研究部会委員 (1995).

姫路工業大学ニュースパル利用検討委員会委員 (1996-1998).

姫路工業大学ニュースパル新素材開発利用専門委員会委員 (1999-2000).

近畿通産局, 超次世代原子デバイスの自己形成技術に関する調査委員会委員 (1997-1998).

電気学会, 放射光・自由電子レーザプロセス技術調査専門委員会委員 (1997-1999).

放射線利用振興協会, 放射線利用技術指導研究員 (1997.11.18-20).

日本原子力研究所, 研究嘱託 (1998.4-2002.3).

科学技術庁, 「顕微光電子分光法による材料, デバイスの高度分析評価技術に関する調査」調査推進委員会委員 (1998-1998).

科学技術庁, 「顕微光電子分光法による材料, デバイスの高度分析評価技術に関する調査」研究推進委員会委員 (1999-2000).

日本原子力研究所, 博士研究員研究業績評価委員 (1998-1999).

佐賀県シンクロtron光応用研究施設整備推進委員会委員 (2000-2001).

科学技術振興調整費「顕微光電子分光法による材料・デバイスの高度分析評価技術に関する研究」研究推進委員 (1999-2002).

科学技術振興調整費「カーボンナノチューブエレクトロニクス研究」外部運営委員 (2001-2003).

日本学術振興会学術創生研究費書面審査委員 (2001).

科学技術交流財団「ナノ反応場とバイオエレクトロニクスインターフェイス制御研究会」座長 (2001.4-2003.3).

日本原子力研究所研究評価委員会, 光科学研究専門部会専門委員 (2002.11.1-2003.3.31).

電気学会「量子放射ビームを用いたナノ・バイオプロセッシング技術調査専門委員会」アドバイザー (2004.5-).

日本表面科学会評議員 (2003.4-).

日本放射光学会評議員 (2003.4-2006.12).

学会の組織委員

マイクロプロセス国際会議論文委員 (1992-).

第1回光励起プロセスと応用国際会議論文委員 (1993).

VUV-11組織委員会, プログラム委員会委員 (1993-1995).

International Workshop on X-ray and Extreme Ultraviolet Lithography, 顧問委員 (1995-2000).

SRI97組織委員会プログラム委員会委員 (1995-1997).

SPIE's 23rd Annual International Symposium on Microlithography, 論文委員 (1997).
 SPIE's 24th Annual International Symposium on Microlithography, 論文委員 (1998).
 SPIE's 25th Annual International Symposium on Microlithography, 論文委員 (1999).
 レーザ学会第19回年次大会プログラム委員 (1998-1999).
 レーザ学会第23回年次大会プログラム委員 (2002-2003).
 UK-JAPAN International Seminar, 組織委員長 (1999, 2000).
 Pacificchem 2000, Symposium on Chemical Applications of Synchrotron Radiation, 組織委員 (2000).
 MB-ITR2005, 組織委員長 (2005).

学会誌編集委員

JJAP特集論文特別編集委員 (1992-1993).
 電気学会, 電子情報システム部門誌特集号編集委員 (1995-1996).
 JJAP特集論文特別編集委員 (1998).
Appl. Surf. Sci., 編集委員 (2001-2003).
e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, Advisory Board (2003).
 日本真空協会「真空」誌編集部会委員 (2004-).
 日本表面科学会, 出版委員 (2005.6-2006.5)

B-8) 他大学での講義、客員

宇理須恒雄, 名古屋大学工学部集中講義, 2005年12月14日.
 宇理須恒雄, 放送大学客員教授, 2005年6月1日-2006年3月31日.

B-9) 学位授与

Md. Mashiur Rahman, 「Fabrication of lipid bilayer giga-ohm seals on silicon-based microelectrodes」, 2005年9月, 博士(学術)
 Kim Yong-Hoon, 「Formation of supported membranes and characterization by atomic force microscopy, fluorescence microscopy and IRRAS」, 2005年9月, 博士(理学)

B-10) 外部獲得資金

基盤研究(C)(2), 「内殻電子励起による単一分子加工と新素材創製への応用」, 宇理須恒雄 (1997年-1999年).
 総合研究大学院大学, 共同研究, 「化学的ナノ加工の基礎の確立」, 宇理須恒雄 (1996年-1998年).
 基盤研究(B), 「放射光励起反応による新ナノ反応場の構築とSTMによる評価」, 宇理須恒雄 (2000年-2003年).
 総合研究大学院大学, 共同研究, 「シリコン基板上への生体機能物質の集積——ナノバイオエレクトロニクス of 構築——」, 宇理須恒雄 (2001年-2003年).
 特定領域研究(公募研究), 「放射光赤外反射吸収分光による膜タンパク・脂質二重膜表面反応場の極微構造解析」, 宇理須恒雄 (2005年-2006年).

C) 研究活動の課題と展望

パッチクランプ法は細胞生物学の分野で最も多く利用されている計測技術であるが、その測定系は高度な除震設備と法拉デーケージによる電氣的誘導雑音の遮蔽を必要としている。それと比較して、我々を含む生き物においてはそのようなものがいっさい装備されていないにもかかわらず、振動や電気誘導雑音の影響を全く受けないで、生命機能維持に必要な信号伝達が常時行われている。この違いはなぜか？ この素朴な疑問について私は、生物においては、信号伝達を電気信号と化学物質信号とを交互に組み合わせて伝達し、かつ、それぞれがナノレベルの微小素子あるいは回路となっており、全体がそれらの高度な集積体として機能を発現していることにより、外部擾乱に強いシステムとなっているものとする。私はこのような集積構造自体、およびこのようなものを人工的に作るのに（自分の専門である）放射光エッチングとシリコンの素材としての長所が役立つことに興味を持ち、細胞膜構造を、分子構造の明確な化学物質を素材として、微細加工をほどこしたシリコン表面に自己組織反応により形成し、この集積体の構造と物性を解明するとともに、生命機能を発現させることをめざす。また、このような集積構造体の形成術を応用し神経細胞ネットワーク診断素子を開発し、アルツハイマーなどの神経細胞変性疾患の原因解明研究への応用をはかる。構造や物性の解明においてはAFM、STM、我々が開発した新赤外反射吸収分光BML-IRRAS、ナノ加工、分子動力学計算など分子科学の最先端的手法を適用し、表面化学の新分野開拓と位置づけて研究を進める。

見 附 孝一郎 (助教授)(1991 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：化学反応素過程、軌道放射分子科学

A-2) 研究課題：

- a) レーザーと軌道放射を組合せたポンプ・プローブまたは2重共鳴分光
- b) 高分解能斜入射分光器の研究開発とフラーレン科学への利用
- c) 極端紫外超励起状態や高励起イオン化状態の分光学と動力学
- d) 原子・分子・クラスターの光イオン化研究に用いる粒子同時計測法の開発
- e) 極端紫外域の偏極励起原子の光イオン化ダイナミクス

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 紫外モードロックレーザーとアンジュレータ光を組み合わせ、電子振動励起分子の光イオン化や光解離のダイナミクス、イオンの前期解離ダイナミクスなどに関する研究を行った。レーザーパルスとマルチバンチ放射光を厳密に同期させることで、分解能約500 psの時間分解ポンププローブ測定が可能である。また、レーザー誘起蛍光励起分光やレーザー多光子イオン化分光を起用することによって、超励起状態から解離生成したイオンまたは中性フラグメントの内部状態の観測を初めて実現した。フラグメントの回転分布から、解離の際のエネルギー分配について議論した。また、特定の化学結合を選択的に切断したり、特異的な化学反応を起こすような光励起過程を実現するための方法論の開発と実用化を目標としている。具体的には可視又は近赤外レーザーで生成する振動励起した水分子に放射光(20–1000 eV)を照射して、振動基底分子の放射光解離とは全く異なる反応分岐比や分解確率を得るという実験をフォトンファクトリーで開始した。
- b) 軌道放射光施設に、気相光励起素過程の研究を目的とした高分解能高フラックスの斜入射分光器を建設した。25から160 eVの光子エネルギーの範囲で、フラックス 10^{10} 光子/秒と分解能3000が同時に達成された。SまたはBr原子を含む分子のそれぞれ2p電子と3d電子を励起して、偏光に対して水平または垂直方向に飛来した解離イオンを検出することで、励起状態の対称性を分離した吸収スペクトルの測定を行った。続いて平成13年度から「フラーレンの軟X線分光専用ビームライン」の実用化を目指して、実験ステーションの改良と調整を施した。そしてフラーレンや金属内包フラーレンの吸収および光電子スペクトルの測定を行っている(装置に関し特許出願中)。最近では C_{60} や C_{70} の吸収曲線に見られる巨大共鳴ピーク(～20 eV)に付随する形状共鳴遷移を初めて観測した。また高分解質量分析計を用いて多価イオンやフラグメントの収量曲線を正確に決定し、求めたしきい値や極大値を検討した結果、通常の分子では予想もつかない興味深い現象を観測した。将来的には、遷移金属原子の4d電子励起軟X線巨大共鳴が、炭素ケージの中でどのような影響を受けるかを実験的に明らかにすることが最大の目標である。
- c) 軌道放射光施設に分子線光解離装置を製作し、 CO_2 、 SO_2 、ハロゲン化メチル、フロンなど20種余の分子についてイオン対を生成する過程を初めて見いだした。また、同施設の直入射分光器ラインに2次元掃引光電子分光装置を建設し、 NO 、 C_2H_2 、 OCS 、 SO_2 、 CS_2 、 HI 等の2次元光電子スペクトルを測定した。さらに、アンジュレータ斜入射分光器ラインで、 OCS や H_2O の極端紫外励起状態の緩和過程で放出される可視・紫外発光を検出し、蛍光分散および蛍光励起スペクトルを測定した。以上、得られた負イオン解離効率曲線、2次元光電子スペクトル、蛍光スペクトル等から、超励起状態のポテンシャルエネルギー曲面を計算しイオン化状態との電子的結合を評価したり、自動イオン化や前期

解離のダイナミクスおよび分子の2電子励起状態や解離性イオン化状態の特質などについて考察した。

- d) 正イオン・負イオン同時計測法を初めて開発し、複数の光解離過程の識別と放出されるイオンの並進エネルギーの測定を可能とした。また、光電子・イオン飛行時間同時計測法により始状態が選別されたイオンの光解離の研究を行った。
- e) 直線偏光した放射光を用いて、基底状態原子をそのイオン化ポテンシャルより低いリユドベリ状態へ共鳴遷移させ、放射光の偏光方向に偏極した特定量子状態の励起原子を高密度で生成させる。この偏極原子(=始状態)を、直線偏光した高出力レーザーによってイオンと電子にイオン化させる(=終状態)。光電子角度分布の解析と理論計算を併用して、選択則で許される複数の終状態チャンネルの双極子遷移モーメントの振幅と位相差を決定した。究極的には、希ガス偏極原子の光イオン化における「量子力学的完全実験」を目指している。このテーマに関連して、円錐型の高効率角度分解電子エネルギーアナライザーを設計・製作し、感度や各種分解能などの性能を評価した(特許取得)。

B-1) 学術論文

J. KOU, T. MORI, Y. KUBOZONO and K. MITSUKE, "Photofragmentation of C_{60} in the Extreme Ultraviolet: Statistical Analysis on the Appearance Energies of C_{60-2n}^{z+} ($n \geq 1, z = 1-3$)," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7**, 119 (2005).

K. MITSUKE, "Photofragmentation Mechanisms of H_2O Studied by Ultraviolet Dispersed Spectroscopy," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144-147**, 131 (2005).

T. MORI, J. KOU, Y. HARUYAMA, Y. KUBOZONO and K. MITSUKE, "Absolute Photoabsorption Cross Section of C_{60} in the Extreme Ultraviolet," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144-147**, 243 (2005).

J. KOU, T. MORI, Y. KUBOZONO and K. MITSUKE, "Photofragmentation of C_{60} in Valence Ionization," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144-147**, 247 (2005).

K. MITSUKE, T. MORI, J. KOU, Y. HARUYAMA and Y. KUBOZONO, " $4d \rightarrow 4f$ Dipole Resonance of the Metal Atom Encapsulated in a Fullerene Cage: $Ce@C_{82}$," *J. Chem. Phys.* **122**, 064304 (2005).

K. MITSUKE, T. MORI, J. KOU, Y. HARUYAMA, Y. TAKABAYASHI and Y. KUBOZONO, "Photoion Yield Curves of $Dy@C_{82}$ in the Vacuum UV Region," *Int. J. Mass Spectrom.* **243**, 121 (2005).

B-4) 招待講演

見附孝一郎,「フラーレンの共鳴励起・イオン化・多段階離」,宇宙空間原子分子過程研究会,宇宙科学研究本部,相模原,2005年1月。

見附孝一郎,「ナノ分子場中の原子と光の相互作用——金属内包フラーレンに軟X線巨大共鳴は存在するか?」,(財)光科学技術研究振興財団 平成16年度講演会,浜松名鉄ホテル,浜松,2005年3月。

見附孝一郎,「高性能直入射分光器を用いた原子分子研究の現状と将来」,UVSORワークショップ——ビームライン高度化,真空紫外領域の強化,分子科学研究所,岡崎,2005年3月。

K. MITSUKE, "Photofragmentation of C_{60} , C_{70} and $Ce@C_{82}$ in the Extreme Ultraviolet," The 9th East Asian Workshop on Chemical Reactions, Daejeon (Korea), March 2005.

K. MITSUKE, "Photoionization Dynamics and Fragmentation Kinetics of Fullerenes and Endohedral Metallofullerenes in the Extreme Ultraviolet," International Symposium on (e,2e), Double Photoionization and Related Topics, Buenos Aires (Argentina), July 2005.

見附孝一郎,「金属内包フラーレンの軟X線吸収とイオン化」,分子研研究会——金属内包フラーレン研究の新展開,基礎と応用,分子科学研究所,岡崎,2005年11月.

K. MITSUKE, “Photoionization of Solitary C₆₀, C₇₀ and Endohedral Metallofullerenes,” Workshop on the Beamlines of National Synchrotron Radiation Laboratory, Hefei, Anhui (P. R. China), November 2005.

K. MITSUKE, “Photoionization Dynamics of Solitary C₆₀, C₇₀ and Endohedral Metallofullerenes in the Extreme Ultraviolet,” 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, Symposium on Synchrotron Radiation Research in the Pacific Rim: Emerging Techniques and Applications, Honolulu (U.S.A.), December 2005.

B-5) 特許出願

特開昭61-163551;特公平07-046595,「質量分析方法」,近藤 保、見附孝一郎、朽津耕三(近藤 保) 1985年.

特許番号:3665032,「高分解能電子エネルギー分析器」,見附孝一郎(JST) 2002年.

特願2004-089485,特開2005-276679,「高沸点物質の光イオン化質量分析装置」,見附孝一郎、江潤卿、森崇徳(JST) 2004年.

特願2004-212365,「多成分液体の相分離点の検出方法及びその検出装置」,加藤仁、片柳英樹、西川恵子, 2004年.

B-6) 受賞、表彰

見附孝一郎,日本化学会欧文誌BCSJ賞(2001).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

原子衝突研究協会委員(1987, 1998-2003).

原子衝突研究協会,企画委員(1996-2003).

学会の組織委員

質量分析連合討論会,実行委員(1993).

第9回日本放射光学会年会,実行委員(1995-1996).

第12回日本放射光学会年会,組織委員およびプログラム委員(1998-1999).

第15回化学反応討論会,プログラム委員および実行委員長(1998-1999).

International Symposium on Photo-Dynamics and Reaction Dynamics of Molecules, Okazaki, Cochair(1998-1999).

原子衝突協会第25回研究会,実行委員(1999-2000).

International Workshop on the Generation and Uses of VUV and Soft X-ray Coherent Pulses, Lund, Sweden, Member of the Program Committee(2001)(真空紫外・X線コヒーレント光の発生と利用に関する国際集会,プログラム委員)

XIV International Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics, Cairns, Australia, Member of the Program Committee(2003-2004)(第14回真空紫外光物理国際会議,プログラム委員)

IV International Conference on Atomic and Molecular Data and their Applications, Toki, Japan, Member of the Program Committee(2003-2004)(第4回原子分子データとその利用に関する国際会議,プログラム委員)

第19回日本放射光学会年会,組織委員,実行委員およびプログラム委員長(2005-2006).

第22回化学反応討論会,プログラム委員および実行委員(2005-2006).

原子衝突研究協会第31回研究会,実行委員(2005-2006).

その他

東京大学物性研究所高輝度光源計画推進委員会測定系小委員会委員 (1998-2003).

SepersOR高輝度光源利用者懇談会幹事 (1999-2002).

All Japan高輝度光源利用計画作業委員 (2002-2004).

B-8) 他大学での講義、客員

東京大学物性研究所, 嘱託研究員, 2000年4月-2005年3月.

B-10) 外部獲得資金

重点領域研究, フリーラジカルの科学, 「クラスターおよび凝縮系に生成する超励起状態の動力学」, 見附孝一郎 (1993年-1995年).

井上科学振興財団, 井上フェロー研究奨励金, 「レーザーと軌道放射の同時吸収による化学結合の選択的開裂」, 見附孝一郎 (1997年-1999年).

日本学術振興会, 重点研究国際協力派遣研究員, 「米国バークレー研究所ALS施設への派遣」, 見附孝一郎 (1998年).
分子科学研究奨励森野基金, 学術集会開催援助金, 「International Symposium on Photo-Dynamics and Reaction Dynamics of Molecules」, 見附孝一郎 (1999年).

大幸財団, 学会等開催助成金, 「International Symposium on Photo-Dynamics and Reaction Dynamics of Molecules」, 見附孝一郎 (1999年).

基盤研究(C), 「放射光とレーザーの同時照射による分子の多光子電子励起」, 見附孝一郎 (1998年-2000年).

松尾科学振興財団, 学術研究助成, 「放射光励起で生成した偏極原子のレーザー光イオン化——光イオン化完全実験を目指して」, 見附孝一郎 (1998年).

基盤研究(B), 「レーザーと放射光を組合わせた振動高次倍音励起分子の光解離制御」, 見附孝一郎 (2002年-2004年).
光科学技術研究振興財団, 研究助成, 「ナノ分子場中の原子と光の相互作用——金属内包フラーレンに軟X線巨大共鳴は存在するか?」, 見附孝一郎 (2002年-2003年).

大幸財団, 海外学術交流研究助成, 「XIV International Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics」, 見附孝一郎 (2004年).

独立行政法人科学技術振興機構, 平成17年度シーズ育成試験研究, 「新奇高沸点物質の質量分析装置の開発と実用化試験」, 見附孝一郎 (2005年-2006年).

C) 研究活動の課題と展望

光電子分光, 蛍光分光, 質量分析, 同時計測法などを用い, 気相分子やクラスターの光イオン化過程の詳細を研究する。また, 真空紫外領域の中性超励起状態の分光学的情報を集積しその動的挙動を明かにしたい。近い将来の目標としては, 軌道放射と各種レーザーを組合せて, 振動励起分子の放射光解離による反応分岐比制御, 偏極原子の光イオン化ダイナミクスを角度分解光電子分光法で研究し, 放出電子とイオン殻内の電子との相互作用の本質を理解すること, 励起分子や解離フラグメントの内部状態を観測し, 発光・解離・異性化・振動緩和などの過渡現象をポンプ・プローブ法や2重共鳴法で追跡することの3つが挙げられる。

3-8 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) (2001 年 10 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：計算化学、理論化学、計算機シミュレーション

A-2) 研究課題：

- a) 溶液中における溶質分子振動量子動力学の計算機シミュレーション
- b) 溶液中におけるプロトン移動の量子力学
- c) 量子液体とその中で溶媒和に関する理論的研究
- d) 水溶液中における両親媒性溶質分子の自己集合体生成
- e) 超臨界流体の構造と力学

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 分子振動波ピュレーション緩和や振動状態間デコヒーレンスなど、溶液中における溶質の量子力学を取り扱うことのできる計算機シミュレーション手法の開発を進めている。これまですでに、調和振動子浴近似に従った経路積分影響汎関数理論に基づいた方法論や、注目している溶質の量子系に対しては時間依存のシュレディンガー方程式を解きながらも溶媒の自由度に対しては古典的なニュートンの運動方程式を仮定する量子-古典混合系近似に従った方法論を展開してきているが、これらにより、溶液中における量子系の非断熱な時間発展を一定の近似の下で解析することが可能となった。特に前者の方法では個々の多フォノン過程を分割して定量的に表すことができ、これに基づいてエネルギーの溶媒自由度への散逸経路や溶媒の量子効果などを明らかにしてきた。さらには、コヒーレント状態の力学に関し、密度行列の非対角項の時間発展を追跡することにより量子ビートを観察し、位相緩和についても詳細な解析を行ってきた。また後者の方法では個々の溶媒分子の運動と溶質量子系とのカップリングを時間に沿って観察することができ、これに基づいて、気相に特徴的な衝突過程による緩和が無極性溶質のような短距離相互作用系に対しては液体においても支配的であることを示してきた。今年度は特に、溶質の状態間のデコヒーレンスが溶媒の運動により生じる過程を直接解析し得る方法論を確立すべく、様々な定式化を行った。
- b) 量子-古典混合系近似に基づいて、水溶液中における分子内プロトン移動の量子力学シミュレーションによる検討を進めている。今年度は、状態間デコヒーレンスの速い系を有効に記述し得るサーフィスホッピングの枠組みの中で、透熱表示によるシミュレーションに用いられる運動方程式の書き下し等、方法論の確立に努めた。モデル系に対する予備的な計算では、振動励起に端を発する熱的な活性化過程を経るプロセスと、トンネリングによるプロセスとが系の条件に応じて自然に生じるシミュレーションを実現している。これにより、プロトンの移動と溶媒分子の運動との相関など、移動機構についての動的解析が可能となる。
- c) 常流動ヘリウムや超流動ヘリウムなど量子液体の構造と力学、そしてこれら量子液体中に溶質を導入した際の溶媒和構造や力学について、方法論の開発を含めて研究を進めてきている。前者については交換を考慮しない経路積分モンテカルロ法や積分方程式論、そして経路積分セントロイド分子力学法などを用いて解析を進め、ヘリウ

ムの動的性質や溶媒和構造などを明らかにしてきている。一方、後者に対しては粒子の交換をあらわに考慮した上で、溶液系の静的な性質の研究に適した形での経路積分ハイブリッドモンテカルロ法を提案しこれまでにすでに超流動を実現し、不純物を含む溶液系へと展開してきている。

- d) ミセルや二重層膜に代表されるような水溶液中における両親媒性溶質分子の集団的な自発的構造形成に対するシミュレーション手法を確立することを目的として、自由エネルギー計算を含めた大規模MD計算を行っている。これまでに、特に大規模なMD計算を効率よく実行することを可能とするため、原子数にして百万個オーダーの計算が可能な高並列汎用MD計算プログラムの開発を行ってきた。今年度は特に、これに基づいて、イオン性、非イオン性の両親媒性分子が水溶液中に生成する球状ミセル、棒状ミセルなどに対して熱力学的積分法に基づいたシミュレーションを行い、得られた自由エネルギーより安定性のミセルサイズ依存性の検討を行った。また、これらミセルの形成過程そのもののダイナミックスの検討も開始した。
- e) 超臨界水の示す構造と動力学について、大規模系に対する分子動力学シミュレーションを実施し、臨界タンパク光の発生に対応する強い小角散乱や臨界減速などを良好に再現した上で、分子論的な立場から詳細な検討を行ってきた。今年度は、超臨界水中における親水性溶質分子の振動エネルギー移動過程について、平均場近似による量子古典混合系近似に基づいたシミュレーションを実施し、緩和時間の密度依存性は見かけ上衝突過程を示唆するものであることを再現した上で、シミュレーションによる直接観察から分子論的には実際はこれが非衝突的な過程に基づいていることを明らかにした。

B-1) 学術論文

M. SATO and S. OKAZAKI, “A Study of Molecular Vibrational Relaxation Mechanism in Condensed Phase Based upon Mixed Quantum-Classical Molecular Dynamics. I. A Test of IBC Model for the Relaxation of a Nonpolar Solute in Nonpolar Solvent at High Density,” *J. Chem. Phys.* **123**, 124508 (10 pages) (2005).

M. SATO and S. OKAZAKI, “A Study of Molecular Vibrational Relaxation Mechanism in Condensed Phase Based upon Mixed Quantum-Classical Molecular Dynamics. II. Noncollisional Mechanism for the Relaxation of a Polar Solute in Supercritical Water,” *J. Chem. Phys.* **123**, 124509 (9 pages) (2005).

M. SATO and S. OKAZAKI, “Mixed Quantum-Classical Molecular Dynamics Study of Vibrational Relaxation of CN^- Ion in Water: An Analysis of Coupling as a Function of Time,” *J. Mol. Liq.* **119**, 15–22 (2005).

B-4) 招待講演

岡崎 進, 「ナノ分子集合体構造形成の分子動力学シミュレーション」, ナノスケール秩序構造形成への計算機科学の活用, 厚木, 2005年1月.

岡崎 進, 「化学・高分子科学と計算科学」, J-PARCの中性子科学と計算科学, つくば, 2005年3月.

S. OKAZAKI, “Molecular dynamics study of vibrational energy relaxation and dynamics of coherence of solute molecule in solution,” EMLG/JMLG 2005, Prague (Czech), September 2005.

S. OKAZAKI, “Path integral influence functional theory for vibrational energy transfer and dynamics of coherence between the states for a solute in solution,” Pacifichem2005, Honolulu (U.S.A.), December 2005.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

分子シミュレーション研究会幹事 (1998-).

理論化学研究会世話人会委員 (2002-).

溶液化学研究会運営委員 (2004-).

学会の組織委員

第19回分子シミュレーション討論会実行委員長 (2005).

文部科学省、学術振興会等の役員等

日本学術振興会第139委員会委員 (2000-).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2004-2005).

総合科学技術会議分野別推進戦略(情報通信分野)WG委員 (2005-).

学会誌編集委員

分子シミュレーション研究会「アンサンブル」, 編集委員長 (2004-).

B-8) 他大学での講義、客員

東京大学教養学部, 「熱力学B」, 1998年4月 - .

金沢大学, 総合科目「コンピュータにより拓かれた新しい科学」, 2005年12月21日.

C) 研究活動の課題と展望

溶液のような多自由度系において、量子化された系の動力学を計算機シミュレーションの手法に基づいて解析していくためには、少なくとも現時点においては何らかの形で新たな方法論の開発が要求される。これまでに振動緩和や量子液体についての研究を進めてきたが、これらに対しては、方法論の確立へ向けて一層の努力を続けるとともに、すでに確立してきた手法の精度レベルで解析可能な現象や物質系に対して具体的に計算を広げていくことも重要であると考えている。また、電子状態緩和や電子移動反応への展開も興味深い。

一方で、超臨界流体や生体系のように、古典系ではあるが複雑であり、また巨大で時定数の長い系に対しては計算の高速化が重要となる。これには、方法論そのものの提案として実現していく美しい方向に加えて、グリッドコンピューティングなど計算アルゴリズムの改良やさらには現実の計算機資源に対する利用効率の高度化にいたるまで様々なレベルでのステップアップが求められる。このため、複雑な系に対する計算の実現へ向けた現実的で幅広い努力が必要であるとも考えている。

森 田 明 弘 (助教授)(2004 年 1 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：計算化学、理論化学

A-2) 研究課題：

- a) 界面和周波発生分光の理論とシミュレーション
- b) 分子軌道法に基づく電子分極の分子モデリング
- c) 気液界面の物質移動と不均質大気化学

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 可視 - 赤外の和周波発生分光法は、界面構造を光学的にプローブする実験手法として広く用いられるようになってきた。しかし得られたスペクトルを解釈する上では、しばしば経験的なフィッティングなどに伴う曖昧さがつきまとい、界面構造を分子レベルで同定する上で實際上大きな障害となっている。そこで近年我々は分子シミュレーションによって得られる界面構造から和周波発生スペクトルを直接に計算する方法論を提案し、その開発を進めている。本年は水および水溶性電解質界面を例にして計算手法やモデリングの改良およびチューニングを行い、かつ計算科学研究センターの資源を活用して従来以上の大規模並列計算を行った。その結果計算精度を明らかに向上させ、実用的な解析に向けて実験との定量的な比較を行うことができるレベルに達しつつある。電解質水溶液の場合、イオンの分子モデルを精密化する必要性も明らかになってきた。
- b) 電子分極の効果は、凝縮相中での分子間相互作用を記述する上で非常に重要であるのみならず、上記(a)の課題とも関連して物質の光学的性質を分子レベルでモデル化する上でも中心的な物性となる。電子分極に関して以前に我々は、相互作用サイト表示に基づくcharge response kernel (CRK) 理論を提唱し、分子軌道法によって電子分極を非経験的に計算し取り扱う方法論を与えた。本年はそれを拡張し改良することによって、分子内振動および電子分極を一般的かつ精確に表現できる分子モデリングの手法の開発を行った。まず電子相関を実用レベルで取り込めるように、CRK理論を密度汎関数をベースに定式化した。また部分電荷の定義における不安定性は従来モデルの問題として残されていたが、それを取り除くようにCRK理論に改良をほどこした。これらの成果をプログラム化し、電子状態プログラムパッケージGAMESS-UKに組み込んだ。
- c) 気液界面の物質移動は大気環境化学などで基礎に重要な問題であるのみならず、界面自体の性質やミクロなダイナミックスとバルク相中のマクロな拡散や溶解度などの熱力学とが絡み合った典型的なマルチスケールの問題である。現象論的な速度論を理解するには、界面とバルク相の両方の効果を正しく接続する必要がある。そこで分子シミュレーションと流体拡散方程式の数値計算を併用して、実験的な境界条件に即して現象論の速度を定量的に分割して評価する方法を開発した。とくに従来連続液滴法の実験から水の凝結係数が0.23と報告されていた値は、全系の定量的な解析を行うことによって微視的には~1であることを見出した。これは界面物質移動の実験と分子動力学計算によるミクロな界面ダイナミックスとの不一致を解決することができた例である。

B-1) 学術論文

S. IUCHI, A. MORITA and S. KATO, "Electronic Relaxation Dynamics of Ni²⁺ Ion Aqueous Solution: Molecular Dynamics Simulation," *J. Chem. Phys.* **123**, 024505 (2005).

A. MORITA, M. SUGIYAMA, S. KODA and D. R. HANSON, “Reply to “Comment on ‘Mass Accommodation Coefficient of Water: Molecular Dynamics Simulation and Revised Analysis of Droplet Train/Flow Reactor Experiment,’”” *J. Phys. Chem. B* **109**, 14747–14749 (2005).

T. ISHIDA, “Polarizable Solute in Polarizable and Flexible Solvents: Simulation Study of Electron Transfer Reaction Systems,” *J. Phys. Chem. B* **109**, 18558–18564 (2005).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

A. MORITA and T. ISHIDA, “Charge Response Kernel Theory based on Ab Initio and Density Functional Calculations,” *Lecture Series on Computer and Computational Sciences* Brill Academic Publishers; Leiden, **4**, 663–666 (2005).

B-3) 総説、著書

岡崎 進、森田明弘, 「分子科学者が挑む12の謎」第10章, 分子科学研究所編, 化学同人, 151–167 (2005).

B-4) 招待講演

森田明弘, 「気液界面における物質移動の理論」, 分子研究会「大気科学における不均質系の分子科学」, 岡崎, 2005年1月.

森田明弘, 「可視 - 赤外SFG表面分光の理論計算の開発」, NAREGIナノサイエンス実証研究第3回公開シンポジウム, 岡崎, 2005年2月.

A. MORITA, “Theory and Simulation of Interfacial Sum Frequency Generation Spectroscopy,” 11th Japan-Korea Joint Symposium—Frontiers in Molecular Science, Okazaki (Japan), March 2005.

森田明弘, 「界面和周波分光の理論計算法の発展」, 名大物質国際研第2回SFG研究会, 名古屋, 2005年3月.

A. MORITA, “Theoretical Calculation of Sum Frequency Generation Spectroscopy,” University of California, Berkeley (U.S.A.), November 2005.

森田明弘, 「NAREGI分子研拠点における産学連携の取り組み」, 第19回分子シミュレーション討論会, 岡崎, 2005年11月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員

分子構造総合討論会実行委員 (2003).

第19回分子シミュレーション討論会実行委員 (2005).

科学研究費の研究代表者、班長等

奨励研究(A)-若手研究(B) 代表者 (2001-2002).

基盤研究(C) 代表者 (2003-2005).

B-10) 外部獲得資金

奨励研究(A)-若手研究(B), 「成層圏エアロゾル表面での不均質大気化学の理論的研究」, 森田明弘 (2001年-2002年).

基盤研究(C), 「大気中エアロゾル表面構造と物質移動に関する理論的研究」, 森田明弘 (2003年-2005年).

山田科学振興財団派遣援助, 「大気中エアロゾル表面構造の理論的研究」, 森田明弘 (2001年).

C) 研究活動の課題と展望

分子研に赴任後2年目となって研究グループが整備できてきた。界面和周波分光の理論計算は世界的にも新しい試みであり、フロンティアを広げることに貢献したい。単に理論の方法論を提案するだけでなく実用的な解析手法に育てるには、解決すべき点も多く、確かにchallengingな問題である。まず既存の分子力場だけでは和周波分光の計算に対応できないため、新たな分子モデリング手法の開発から取り組む必要がある。また系が大きくなるにつれて大規模計算も実際上不可欠であり、巨大な計算資源を効率良く使うノウハウも大いに求められる。幸いスーパーコンピュータが身近にある環境にあり、分子科学者の立場で計算機を先端的に使いこなすことも研究活動の課題である。その一方、従来の理論の枠内でパラメータとしてempiricalに扱われていた部分を分子レベルで理解していくことで、理論そのものを深めていく方向性も重要である。今後は水溶性の界面のみならず、炭化水素鎖のC-H領域や過渡的な界面構造など、計算で取り扱うことのできる系を広げていく予定である。

南部伸孝(助手)(1992年7月1日～2005年3月31日)^{*}

A-1) 専門領域：理論化学、計算化学、分子物理

A-2) 研究課題：

- a) 化学反応の量子動力学
- b) 機能分子の理論探索——非断熱遷移を利用した分子設計
- c) 連成シミュレーションの構築と応用——ナノスケール分子の構造解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 電子励起状態が関与する化学反応を主な研究対象に理論研究を行ってきた。特に、このような系においては、非断熱遷移が重要であり、量子論に基づく核の運動の取り扱いが重要となる。そこで、比較的計算資源を必要としない、時間依存シュレディンガー方程式を解く方法を用い、反応微分断面積の決定が可能となるコードの開発を行っている。一方、三原子分子の光解離過程の研究で特によく現れる非断熱遷移の現象の一つである Renner-Teller効果があるが、その効果を取り入れることが可能なコードの開発を行った。具体的には、 H_2O^+ および SiH_2 分子の振動回転準位を求め、実験的にも未知である電子励起状態に関する分光定数の決定を行い、未帰属な吸収スペクトルの帰属に成功した。
- b) フォトクロミズムや視覚の初期過程におけるレチナルの光異性化過程には、非断熱遷移過程が現れる。そこで、この過程を利用して分子スイッチ・ゲートを作ろうという目論みを行っている。まず、非断熱遷移を起こす一次元系を取り上げる。そのような系には量子現象に特有な完全反射現象と完全透過現象が現れる。この完全反射現象は、まさに今までである入射エネルギーでは物質が透過していたのに、この量子現象が現れることにより、見事にすべて反射されることとなる。一方、完全透過現象は、完全反射現象とは全く異なり、すべてを透過する現象である。そこで、この二つの現象をうまく利用して分子スイッチ・ゲートを実現しようという理論的提案を最近行っている。特に、カーボンナノチューブによる水素吸蔵への応用を目的に、シクロペンタジエン及びホウ素置換したコランニユレニルラジカルと水素原子の系を用いたモデルを基に、可能性を探った。その結果は、約25%程度の透過確率を得ることを見出した。
- c) 現在の理学、工学、社会学の現象は一つのモデルで表すことができるほど単純明快なものではなく、これまでのように単一の手法でシミュレーションを行うには、限界がある。より現実に近い時間経過を追う実験や、複合した現象の解析をシミュレーションしたいという要望に応えるのが、連成シミュレーションである。連成シミュレーションは、シミュレーション対象の全体を複数の部分系に分割し、部分系の計算途中でお互いのデータを変換しながら全体を説く手法である。それは、現象を理解するために全体のシステムを部分に分割して考えてみる手法があり、また全体が複雑に絡み合っているように見える現象の中にも、部分要素間の相互作用が本質的であるとみなせる場合があるためである。現在、連成シミュレーションを分子から構成されるナノスケール構造物に対して行うため、分子軌道法と分子動力学法および構造力学計算と分子動力学計算に関するプログラムの開発を行っている。

B-1) 学術論文

Z. -H. WANG, T. URISU, H. WATANABE, K. OOI, G. R. RAO, S. NANBU, J. MAKI and M. AOYAGI, “Assignment of Surface IR Absorption Spectra Observed in the Oxidation Reactions : $2\text{H} + \text{H}_2\text{O}/\text{Si}(100)$ and $\text{H}_2\text{O} + \text{H}/\text{Si}(100)$,” *Surf. Sci.* **575**, 330–342 (2005).

H. TAMURA, S. NANBU, T. ISHIDA and H. NAKAMURA, “Ab Initio Potential Energy Surfaces for the Cyclohexadiene/Hexatriene Photochemical Interconversion,” *Chem. Phys. Lett.* **401**, 487–491 (2005).

I. TOKUE, K. YAMASAKI, S. MINAMINO and S. NANBU, “Theoretical Transition Probabilities for the $\text{A}^2\text{A}_1\text{-X}^2\text{B}_1$ System of H_2O^+ and D_2O^+ and Related Franck-Condon Factors Based on Global Potential Energy Surfaces,” *J. Theor. Comput. Chem.* **4**, 225–245 (2005).

I. TOKUE, K. YAMASAKI and S. NANBU, “Vibrational Energies for the X^1A_1 , A^1B_1 , and B^1A_1 States of $\text{SiH}_2/\text{SiD}_2$ and Related Transition Probabilities Based on Global Potential Energy Surfaces,” *J. Chem. Phys.* **122**, 144307–144316 (2005).

J. -I. CHOE, S. -K. CHANG, S. LEE and S. NANBU, “Ab Initio Calculated Structures of Conformers for 1,3-Dimethoxy-*p*-tert-Butylcalix [4] crown-5-Ether Complexed with Potassium Cation,” *THEOCHEM* **722**, 117–123 (2005).

R. TERO, N. MISAWA, H. WATANABE, S. YAMAMURA, S. NAMBU, Y. NONOGAKI and T. URISU, “Fabrication of Avidin Single Molecular Layer on Silicon Oxide Surfaces and Formation of Tethered Lipid Bilayer Membranes,” *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* **3**, 237–243 (2005).

H. WATANABE, S. NANBU, Z. -H. WANG, J. MAKI, T. URISU, M. AOYAGI and K. OOI, “Theoretical Study of the Oxidation Reaction for the H Atom-Induced Water-Terminated Si Surface $2\text{H} + \text{H}_2\text{O}/\text{Si}(100)\text{-(}2\times 1\text{)}$,” *Chem. Phys. Lett.* **412**, 347–352 (2005).

B-3) 総説、著書

南部伸孝, 「 N_2O の光分解と同位体効果」, 「大気化学——分子科学によるアプローチ——」, 第一章 (2005) (特定領域研究「大気化学・燃焼における新規ラジカル連鎖反応」平成13年度～15年度, 代表 豊橋技術科学大学(元京大理学部) 驚田伸明 (2005年) における研究成果の一つとして総説を執筆した)

B-4) 招待講演

S. NANBU, “A new proposal of the molecular design with the aggressive use of the non-adiabatic phenomena,” The 9th East Asian Workshop on Chemical Reactions, Seoul (Korea), March 2005.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員

The 9th East Asian Workshop on Chemical Reactions 2005年3月, ソウル(韓国), プログラム委員 (2004-2005).

学会誌編集委員

量子化学文献データベース(QCLDB)編集委員 (2003-).

C) 研究活動の課題と展望

研究課題(a)については、四原子反応への拡張を中心に研究を進める。六自由度系でもあることから、今まで使われてきた超球座標を用いた緊密結合微分方程式を数値的に解くのではなく、量子波束の時間発展方法を用いる。また、Trotter公式に基づく時間発展の方法ではなく、チェビシェフ次数発展法を用い、数値計算における丸め誤差の皆無や計算コストの削減を行い、六自由度系の化学反応動力学を行う。その一方で同じ系を使い、半古典論である凍結ガウス関数波束発展法の可能性を探る。扱う系は、研究課題(b)とも関係する電子励起状態が反応に関与するものを選び、その反応に関するポテンシャルエネルギー面も自ら決定する。このような系を取り上げることにより、反応の特異性がどのようにして起こるのか？ また、レーザー制御などによってその特異性を変化させ、化学反応が制御できるかを探り、実験への指針を与える。

研究課題(b)を特に推進する。非断熱トンネル現象を利用した分子機能の制御と開発を目的とする。その中で特に最近、環状分子にその機能をうまく発現させる可能性を見出している。つまり、まさに分子スイッチ・ゲートとして提案したモデルに対する現実系としての可能性を持つ結果を得はじめている。そこで、この分子とその類似系について同様な理論計算を行い、分子スイッチ・ゲートの実現を目指す。一方、モデル計算ではあるが、中空のフラーレンに金属を内包させるには、この分子スイッチ・ゲートがとてもよいモデルとなるのでなかろうかと考えている。従って、どこまで可能か分からないが、フラーレンやカーボンナノチューブ等の中空分子にものを入れるという化学を、化学反応動力学の基礎理論を使って挑みたい。具体的には水素吸蔵方法を理論計算により最近見出し、提案している。今後が楽しみである。

研究課題(c)については、開発を始めたばかりであり、未知数である。

* 2005年4月1日九州大学情報基盤センター助教授

計算分子科学第二研究部門

斉 藤 真 司 (教授) (2005 年 10 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：理論化学

A-2) 研究課題：

- a) 凝縮系の多次元分光法の理論研究
- b) 溶液、生体高分子の構造変化ダイナミクスの理論研究
- c) 過冷却状態、相転移ダイナミクスの理論研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 水の複雑なダイナミクス・運動の様相を解析するために、多次元分光法、とくに 2 次元ラマン分光法の理論・数値解析を進めてきた。平衡分子動力学法および非平衡分子動力学法を用いて 2 次元ラマン分光法の解析を行った結果、おもに並進運動に由来する非調和ダイナミクスにより、負の応答を示すシグナルが t_2 軸近傍に現れることが明らかにした。また、分極率を通して平衡振動と並進運動が結合していることも明らかとし、これら並進運動間、並進 - 平衡振動間の結合は 2 次元スペクトルにおいては、和周波・差周波ピークとして観測・解析できることも示した。氷やアモルファス氷の 2 次元ラマン分光法についても解析を行った結果、2 次元ラマン分光法は光カー効果などの 1 次元ラマン分光法に比べ、氷 Ih 構造の非等方性、氷とアモルファス氷の構造の違い、アモルファス氷 (LDA、HDA、VHDA) 間の構造の違いにも敏感であることを明らかにした。
- b) イオンチャネルのイオンの透過機構の解析を行った。とくに、 K^+ チャネルをモデル化し、チャネル部分を同程度の径と長さを持つカーボンナノチューブで置き換え、イオン透過のダイナミクスについて解析をおこなった。その結果、ナノチューブへの進入、内部での移動、ナノチューブからの通過にともない、ナノチューブ内部の水の平衡振動の明確なスペクトル拡散が明らかになった。実際の系では、アミノ酸残基のスペクトルの変化を観測することで、チャネル部分のイオンの移動のダイナミクスを観測できると予想される。また、チャネル部分とイオンの相互作用によりバルク部分のイオンの移動は単純な拡散よりも速く、この結果を反映し、チャネル内の安定サイト間のイオンの移動のダイナミクスは指数関数よりも速くなっていることを明らかにした。
- c) 液体を急冷すると、融点で結晶化せずに過冷却液体、さらにはガラスとなる。とくに、過冷却液体では、温度低下により相対的に相互作用が増すために、通常の液体状態に比べ揺らぎの影響が顕著となる。過冷却水の分子動力学計算を行い、分子の運動を調べた。また、ラマン分光や周波数依存熱容量を解析した結果、約 60、200、500 cm^{-1} に見られる分子振動のピーク位置の温度依存性はほとんど見られないが、過冷却水における著しい運動の遅延は水素結合ネットワークの組み替え運動によることを明らかにした。さらに、等積・等圧熱容量の温度依存性の解析から、過冷却水においては密度揺らぎが非常に大きく、低密度液体と高密度液体の間での揺らぎの大きさを明らかにした。

B-1) 学術論文

T. YAGASAKI, K. IWAHASHI, S. SAITO and I. OHMINE, "A Theoretical Study on Anomalous Temperature Dependence of pK_w of Water," *J. Chem. Phys.* **122**, 144504 (9 pages) (2005).

T. UEMURA, S. SAITO, Y. MIZUTANI and K. TOMINAGA, “Isotope Dilution Effects on the Hydroxyl Stretch Bands of Alcohols,” *Mol. Phys.* **103**, 37–44 (2005).

A. SHUDO and S. SAITO, “Slow Relaxation in Hamiltonian Systems with Internal Degrees of Freedom,” *Adv. Chem. Phys.* **130**, 375–421 (2005).

B-3) 総説、著書

斉藤真司, 「吸収・反射分光 5.1 概要」, 第5版実験化学講座9「物質の構造I 分光 上」, 日本化学会編, 丸善 (2005).

B-4) 招待講演

S. SAITO and I. OHMINE, “Theoretical study of two-dimensional Raman spectroscopy of liquids,” Pacifichem2005, Honolulu (U.S.A.), December 2005.

S. SAITO, “Two-dimensional Raman spectroscopy of liquid and solid water,” Czech-Japan Theoretical Chemistry Symposium, Prague (Czech), September 2005.

S. SAITO, “Two-dimensional Raman spectroscopy of liquids,” Telluride Scientific Research Conference on “Nonlinear ultrafast spectroscopy in fluids,” Telluride (U.S.A.), June 2005.

S. SAITO, “Two-Dimensional Raman Spectroscopy and Molecular Dynamics of Liquids,” Japan-Korea Symposium, Okazaki (Japan), March 2005.

斉藤真司, 「液体の運動と多次元振動分光法」, スーパーコンピュータワークショップ2005, 岡崎, 2005年3月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

理論化学討論会世話人会委員 (2002-).

B-8) 他大学での講義、客員

東京大学大学院総合文化研究科, 「関連基礎科学特別講義Ⅰ(溶液の分子論的ダイナミクスと分光解析)」, 2005年11月30日-12月2日.

東京大学大学院総合文化研究科, 客員助教授, 2005年4月- .

B-10) 外部獲得資金

基盤研究(B)(2), 「化学反応および相転移ダイナミクスの多次元振動分光法による理論解析」, 斉藤真司 (2004年度-2006年度).

基盤研究(C)(2), 「凝縮系の揺らぎおよび非線形分光に関する理論研究」, 斉藤真司 (2001年度-2002年度).

基盤研究(C)(2), 「溶液内化学反応と高次非線形分光の理論研究」, 斉藤真司 (1999年度-2000年度).

奨励研究(A), 「溶液の高次非線形分光と化学反応ダイナミクスの理論研究」, 斉藤真司 (1997年度-1998年度).

C) 研究活動の課題と展望

我々は、凝縮系の2次元ラマン分光法の解析を進めてきた。これまでに、液体二硫化炭素や水、氷、アモルファス氷の解析を行い、2次元ラマン分光法が非調和ダイナミクスや構造の違いに敏感であることを明らかにした。実験研究は行われていないが、現在、水の2次元遠赤外分光法についても解析を進めている。また、多次元中性子散乱への理論展開を進めている。また、生体系ダイナミクスの解析としてイオンチャネルの解析を行い、チャネル部分へのイオン拡散のダイナミクスが単純な拡散過程より速いことを明らかにした。今後、生体系における構造変化ダイナミクス、機能性への関連についても解析を進めていきたい。さらに、過冷却水のダイナミクスについて解析を行っている。この解析を進め、液体の性質(strong ,fragile)がどのように変わりうるのか、Kauzmannパラドックス回避の分子論的機構などについて明らかにしていきたい。

3-9 錯体化学実験施設

錯体化学実験施設は1984年に専任教授と流動部門(錯体合成)より始まり、次第に拡大してきた。現在の研究活動としては、錯体触媒研究部門での、主として後周期遷移金属を利用した次世代型有機分子変換に有効な新機能触媒の開発を推進している。従来の不斉錯体触媒開発に加え、遷移金属錯体上へ両親媒性を付与する新手法を確立することで、「水中機能性錯体触媒」「高立体選択的錯体触媒」「分子性触媒の固定化」を鍵機能とした錯体触媒を開発している。また、遷移金属錯体に特有の反応性に立脚し、遷移金属ナノ粒子の新しい調製法の開発、調製されたナノ金属の触媒反応特性の探索を実施しつつある。錯体物性研究部門では、プロトン濃度勾配を利用した水の酸化的活性化による新規酸化反応活性種の創造ならびに金属錯体による二酸化炭素の活性化を行っている。熱力学的に有利な反応から不利な反応へのエネルギー供給を目指して酸化反応と還元反応を組み合わせによるエネルギー変換の開発も行っている。また、窒素、硫黄、セレン等と金属の間に結合をもつ無機金属化合物の合成と多核集積化を行い、錯体上での新しい分子変換反応の開発を目指し研究を進めている。客員部門として配位結合研究部門があり、超分子化学と金属クラスターの化学を研究している。これらの現在の研究体制に将来新たに専任部門などを加えてさらに完成した錯体研究の世界的拠点となるべく計画を進めている。

錯体物性研究部門

田 中 晃 二 (教授) (1990年3月16日着任)

A-1) 専門領域：錯体化学

A-2) 研究課題：

- a) 金属錯体を触媒とする二酸化炭素の多電子還元反応
- b) 水およびアミン配位子の酸化的活性化による新規酸化反応活性種の創造
- c) 化学エネルギーと電気エネルギーの相互変換を目指した反応系の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 2電子1プロトンの酸化還元反応で触媒的な有機ヒドリド供給体の開発、その結果ケトン、アルデヒドを電気化学的に還元することが可能となった。
- b) プロトン濃度に依存したアコ - 、ヒドロキソ - 、オキソ - 金属錯体の酸 - 塩基平衡反応に配位子の酸化還元反応を共役させることにより、オキシラジカル配位子の安定化に成功し、末端酸素と金属が単結合で結合したオキシラジカルRu錯体の単離と構造解析に成功した。またオキシラジカルRu錯体のEPRスペクトルから末端酸素とジオキソレン骨格に二つの不對スピンを有し、3重項と1重項の電子状態が平衡系で存在することが明らかとなった。
- c) アンミン錯体由来のアミノラジカル錯体を活性種とするアルコール酸化反応を見出した。
- d) プロトン濃度に依存したアコ金属錯体とヒドロキソ金属錯体との可逆反応にチオレン配位子の酸化還元反応を共役させるとチオレン配位子のイオウ上に電子が蓄積され、酸素付加が起こることを見出した。この反応は物質の酸

素酸化に対して基本的な概念を提供することが期待される。一方、近接した2つの金属錯体上でアコヒドロキソおよびオキソ基の変換を行うと極めて良好な水の4電子酸化反応の触媒となることを見出した。

B-1) 学術論文

H. SUGIMOTO, Y. FURUKAWA, M. TARUMIZU, H. MIYAKE, K. TANAKA and H. TSUKUBE, “Synthesis and Crystal Structures of $[\text{W}(\text{3,6-dichloro-1,2-benzenedithiolate})_3]^{n-}$ ($n = 1, 2$) and $[\text{Mo}(\text{3,6-dichloro-1,2-benzenedithiolate})_3]^{2-}$: Dependence of the Coordination Geometry on the Oxidation Number and Counter-Cation in Trigonal-Prismatic and Octahedral Structures,” *Eur. J. Inorg. Chem.* 3088–3092 (2005).

T. KOIZUMI, T. TOMON and K. TANAKA, “Synthesis, Structures and Electrochemical Properties of Ruthenium (II) Complexes Bearing Bidentate 1,8-Naphthyridine and Terpyridine Analogous (N,N,C)-Tridentate Ligands,” *J. Organomet. Chem.* **690**, 4272–4279 (2005).

H. SUGIMOTO, M. HARIHARA, M. SHIRO, K. SUGIMOTO, K. TANAKA, H. MIYAKE and H. TSUKUBE, “Dioxo-Molybdenum(VI) and Mono-oxo-Molybdenum(IV) Complexes Supported by New Aliphatic Dithiolene Ligands: New Models with Weakened Mo:O Bond Characters for the Arsenite Oxidase Active Site,” *Inorg. Chem.* **44**, 6386–6392 (2005).

H. OHTSU and K. TANAKA, “Electronic Structural Changes between Nickel(II)-Semiquinonato and Nickel(III)-Catecholato States Driven by Chemical and Physical Perturbation,” *Chem. Eur. J.* **11**, 3420–3426 (2005).

T. TOMON, T. KOIZUMI and K. TANAKA, “Electrochemical Hydrogenation of $[\text{Ru}(\text{bpy})_2(\text{napy-}\kappa\text{N})(\text{CO})]^{2+}$: Inhibition of Reductive Ru–CO Bond Cleavage by a Ruthenacycle,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **44**, 2229–2232 (2005).

T. KOIZUMI and K. TANAKA, “Synthesis, Chemical- and Electrochemical Properties of Ruthenium(II) Complexes Bearing 2,6-Bis(2-naphthyridyl)pyridine,” *Inorg. Chim. Acta* **358**, 1999–2004 (2005).

T. KOIZUMI, T. TOMON and K. TANAKA, “Synthesis and Electrochemical Properties of Bis(bipyridine)ruthenium(II) Complexes Bearing Pyridinyl- and Pyridinylidene Ligands Induced by Cyclometalation of N'-Methylated Bipyridinium Analogs,” *J. Organomet. Chem.* **690**, 1258–1264 (2005).

T. TOMON, T. KOIZUMI and K. TANAKA, “Stabilization and Destabilization of the Ru–CO Bond during the 2,2'-Bipyridine-6-Onato (bpyO)-Localized Redox Reaction of $[\text{Ru}(\text{terpy})(\text{bpyO})(\text{CO})](\text{PF}_6)_3$,” *Eur. J. Inorg. Chem.* 285–293 (2005).

H. SUGIMOTO, M. HARIHARA, M. SHIRO, K. SUGIMOTO, K. TANAKA, H. MIYAKE and H. TSUKUBE, “Dioxo-Molybdenum(VI) and Mono-oxo-Molybdenum(IV) Complexes Supported by New Aliphatic Dithiolene Ligands: New Models with Weakened Mo:O Bond Characters for the Arsenite Oxidase Active Site,” *Inorg. Chem.* **44**, 6386–92 (2005).

T. WADA and K. TANAKA, “Reversible Bond Formation and Cleavage of the Oxo Bridge of $[\text{Ru}_2(\mu\text{-O})(\text{dioxolene})_2(\text{btpyxa})]^{3+}$ [btpyxa = 2,7-Di-*tert*-butyl-9,9-dimethyl-4,5-bis(2,2':6',2''-terpyrid-4'-yl)xanthene] Driven by a Three-Electron Redox Reaction,” *Eur. J. Inorg. Chem.* 3832–3839 (2005).

T. FUJIWARA, R. OKAMURA and K. TANAKA, “Structural Characterization of Ruthenium-Dioxolene Complexes with $\text{Ru}^{\text{II}}\text{-SQ}$ and $\text{Ru}^{\text{II}}\text{-Cat}$ Frameworks,” *Chem. Lett.* 1562–1563 (2005).

H. SUGIMOTO, M. TARUMIZU, K. TANAKA, H. MIYAKE and H. TSUKUBE, “A New Series of Molybdenum-(IV), -(V), and -(VI) Dithiolate Compounds as Active Site Models of Molybdoenzymes: Preparation, Crystal Structures, Spectroscopic/Electrochemical Properties and Reactivity in Oxygen Atom Transfer,” *Dalton Trans.* **21**, 3558–3565 (2005).

T. KOIZUMI and K. TANAKA, “Reversible Hydride Generation and Release from the Ligand of $[\text{Ru}(\text{pbn})(\text{bpy})_2](\text{PF}_6)_2$ Driven by a Pbn-Localized Redox Reaction,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **44**, 5891–5894 (2005).

H. SUGIMOTO, T. SAKURAI, H. MIYAKE, K. TANAKA and H. TSUKUBE, “Mononuclear Five-Coordinate Molybdenum(IV) and -(V) Monosulfide Complexes Coordinated with Dithiolene Ligands: Reversible Redox of Mo(V)/Mo(IV) and Irreversible Dimerization of $[\text{Mo}^{\text{V}}\text{S}]^-$ Cores to a Dinuclear $[\text{Mo}^{\text{V}}_2(\mu\text{-S})_2]^{2-}$ Core,” *Inorg. Chem.* **44**, 6927–6929 (2005).

B-6) 受賞、表彰

日本化学会学術賞 (1999).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

地球環境関連研究動向の調査化学委員会委員 (1990-93).

錯体化学会事務局長 (1990-).

科学技術振興事業団・戦略的基礎研究「分子複合系の構築と機能」の研究代表者 (2000-2005).

学会の組織委員

第30回錯体化学国際会議事務局長 (1990-94).

第8回生物無機化学国際会議組織委員 (1995-97).

文部科学省、学術振興会等の役員等

学術審議会専門委員(科学研究費分科会)(1992-94, 2003-).

文部省重点領域研究「生物無機化学」班長 (1992-94).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (1996-97, 2001-).

次世代研究探索研究会・物質科学系委員会委員 (1997).

社団法人近畿化学協会評議員 (1999-2002).

NEDO技術委員 (2001-2002).

B-8) 他大学での講義、客員

東京大学大学院理学研究科, 2005年.

C) 研究活動の課題と展望

遷移金属上での一酸化炭素と求核試薬との反応は有機合成の最も重要な素反応の一つである。二酸化炭素は金属 - η^1 - CO_2 錯体を形成させると速やかに金属 - CO錯体に変換可能であるが、二酸化炭素還元条件下では金属 - CO結合の還元的開裂が起こりCOが発生する。したがって、二酸化炭素有機合成のC1源とするためには CO_2 由来の金属 - CO結合を開裂させることなく各種の試薬と反応させる方法論の開発にかかっている。還元型の配位子を CO_2 還元の電子貯蔵庫として使用するのみならず金属 - CO結合へのヒドリドの供給により、金属 - CO結合の還元を目指している。さらに CO_2 の多電子還元反応は、電気エネルギーから化学エネルギーへの変換手段としても大きな期待がかけられる。

アコ金属錯体からのプロトン解離平衡に配位子の酸化還元反応を共役させると溶液のプロトン濃度でオキソラジカル配位子を有する金属錯体の生成が可能となる。その結果、プロトン濃度勾配から電気エネルギーへのエネルギー変換ならびに酸化型オキソ金属錯体を触媒とする有機化合物の酸化反応への応用が期待される。

川 口 博 之 (助 教 授) (2000 年 5 月 1 日 着 任)

A-1) 専門領域：無機合成化学

A-2) 研究課題：

- a) 多座配位子の錯体化学
- b) 金属錯体による小分子活性化

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 3つのフェノキシド基を3脚型に配置した配位子を金属に導入する手法を開拓した。3脚型配位子をもつ金属錯体の特異なカゴ型構造をもつこと、そのカゴ内部で直線状 agostic 相互作用が安定化されること等を見出した。
- b) アニソール-フェノキシド混合型配位子をもつジルコニウムのベンジル錯体を反応場として、水素分子と一酸化炭素をアレーンへと変換する合成サイクルを構築した。この合成サイクルは、水素分子の活性化、一酸化炭素の水素化およびC-O結合切断、C-C結合形成、オキソ配位子の活性化反応から形成されている。

B-1) 学術論文

T. KOMURO, T. MATSUO, H. KAWAGUCHI and K. TATSUMI, "Synthesis of a Vanadium(III) Tris(arylthiolato) Complex and Its Reactions with Azide and Azo Compounds; Formation of a Sulfenamide Complex via Cleavage of an Azo N=N Bond," *Inorg. Chem.* **44**, 175–177 (2005).

W. ZHAO, J. FAN, Y. SONG, H. KAWAGUCHI, T. OKAMURA, W. -Y. SUN and N. UHEYAMA, "Synthesis, Crystal Structures and Properties of Novel Copper(II) Complexes Obtained by Reactions of Copper(II) Sulfate Pentahydrate with Tripodal Ligands," *Dalton Trans.* 1509–1517 (2005).

H. KAWAGUCHI and T. MATSUO, "Complexes of Tantalum with Triaryloxides: Ligand and Solvent Effects on Formation of Hydride Derivatives," *J. Organomet. Chem.* **690**, 5333–5345 (2005). (special issue "Organometallic Chemistry—The Next Generation")

L. -Y. KONG, Z. -H. ZHANG, H. -F. ZHU, H. KAWAGUCHI, T. OKAMURA, M. DOI, Q. CHU, W. -Y. SUN and N. UHEYAMA, "Copper(II) and Zinc(II) Complexes Can Fix Atmospheric Carbon Dioxide," *Angew. Chem., Int. Ed.* **44**, 4352–4355 (2005).

F. AKAGI, T. MATSUO and H. KAWAGUCHI, "Titanium and Zirconium Complexes of Preorganized Tripodal Triaryloxide Ligands," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 11936–11937 (2005).

Z. -H. ZHANG, T. OKAMURA, Y. HASEGAWA, H. KAWAGUCHI, L. -Y. KONG, W. -Y. SUN and N. UHEYAMA, "Syntheses, Structures, and Luminescent and Magnetic Properties of Novel Three-Dimensional Lanthanide Complexes with 1,3,5-Benzenetriacetate," *Inorg. Chem.* **44**, 6219–6227 (2005).

T. MATSUO and H. KAWAGUCHI, "A Synthetic Cycle for H₂/CO Activation and Allene Synthesis Using Recyclable Zirconium Complexes," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 17198–17199 (2005).

B-4) 招待講演

H. KAWAGUCHI, “Activation of Dinitrogen and Carbon Monoxide by Transition Metal Aryloxide Complexes,” International Symposium on Frontier in Materials Design, Synthesis and Measurements, Hyogo (Japan), March 2005.

H. KAWAGUCHI, “Electron Deficient Metal Hydride Complexes Supported by Phenoxide-based Multidentate Ligands,” First International Conference on Chemistry of Coordination Space, Okazaki (Japan), November 2005.

川口博之, 「前周期遷移金属ヒドリド錯体反応場による分子変換反応の開拓」, 分子研研究会「未来型分子触媒の創製」, 岡崎, 2005年12月.

H. KAWAGUCHI and T. MATSUO, “Activation of Dinitrogen and Carbon Monoxide by Early Transition Metal Complexes Bearing the Triaryloxide Ligands,” Pacifichem 2005, Honolulu (U.S.A.), December 2005.

B-10) 外部獲得資金

奨励研究(A), 「末端カルコゲニド配位子をもつモリブデンおよびタングステン錯体の合成と反応」, 川口博之 (1996年).

奨励研究(A), 「金属 - カルコゲン多重結合をもつ第4-7族遷移金属錯体の合成と反応」, 川口博之 (1997年-1998年).

徳山科学技術振興財団研究助成, 「キュバン型金属 - 硫黄クラスターの高度集積化」, 川口博之 (2001年).

若手研究(A), 「架橋型フェノキシド配位子をもつ金属錯体による小分子活性化」, 川口博之 (2002年-2004年).

特定領域研究(2), 「多座フェノキシド配位子を用いた錯体反応場の構築と小分子活性化」, 川口博之 (2003年).

特定領域研究(2), 「多座アリールオキシド配位子を用いた錯体反応場の構築」, 川口博之 (2004年-2005年).

特定領域研究, 「多座配位子による配位空間制御に基づく反応活性高分子錯体の設計と機能化」, 川口博之 (2005年).

C) 研究活動の課題と展望

これまでに、我々が独自に合成した金属錯体を基盤に、小分子(窒素分子、一酸化炭素、水素分子)の新しい変換反応を見出した。今後、小分子の活性化反応を試金石に、金属中心および配位子が金属錯体の特性に及ぼす効果を精査する。

3-10 研究施設

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

小 川 琢 治 (教授) (2003 年 2 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：有機化学、ナノサイエンス

A-2) 研究課題：

- a) サブマイクロメータ長 π 共役ポルフィリンワイヤーの合成と表面上での自己組織化
- b) 有機分子の構造を利用した金ナノ粒子の自己組織化の制御
- c) 金ナノ粒子 / 有機分子 2 次元構造体の電気特性の研究
- d) カーボンナノチューブ / 有機分子複合体の形成と分子スケールでの電気特性の研究
- e) 分子定規法によるナノギャップ電極の作成とこれを用いた電子素子の研究
- f) 二探針電導性原子間力顕微鏡 (分子スケールプローバー) の作成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 昨年度までに $1\ \mu\text{m}$ に近い長さを持つ π 共役ポルフィリンワイヤーが様々な表面上で多様な自己組織化様態を示し、高次の構造体を作ることを見出してきた。即ち、展開条件により (I) 高さ約 $0.4\ \text{nm}$ 、鎖間距離約 $5\ \text{nm}$ で並んだ矩形構造体、(II) 高さ約 $0.4\ \text{nm}$ 、鎖間距離約 $10\ \text{nm}$ で並んだ構造体、(III) 高さ約 $1.0\ \text{nm}$ 、鎖間距離約 $15\ \text{nm}$ で並んだ構造体の 3 種類ができる。今年度は、この多様性を説明するために分子動力学計算による解析を行った。その結果、ポルフィリンワイヤーは、絡み合ってラセン構造を取るよりは、ポルフィリン面をお互いに平行に保った形で二本並ぶ構造を取りやすいことが分かった。このことから、高さが約 $1.0\ \text{nm}$ 、鎖間距離約 $15\ \text{nm}$ の構造体は、おそらくポルフィリンワイヤーが π スタックした二本鎖が並んだ構造であろうと思われる。更に、ポルフィリンの中心金属への配位を利用して、この高次の構造体を鋳型とした金ナノ粒子の 1 次元組織化に成功した。
- b) 共役ポルフィリンワイヤーを鋳型として用いた金ナノ粒子の 1 次元組織化以外に、分子自体の形態を利用して金ナノ粒子の 1 次元自己組織化にも成功した。
- c) 金の電極存在下で、金ナノ粒子と有機ジチオールを混合するだけで、二次元金ナノ粒子集合体が電極間に形成できる。例えば、ノナチオフェンジチオールを分子として用いた場合、一つの金ナノ粒子集合体の大きさはおおよそ $6\ \text{nm}$ と見積もられるが、AFM で測定した膜厚が $18\text{--}24\ \text{nm}$ であるので 3 - 4 層程度の薄膜で有ることがわかる。単に二つの原料を混合しただけであるのに、不定形の集合体にならずかなり均一な膜になる点が興味深い。その機構についてはまだ明らかになっていない。このデバイスの電流 - 温度特性から、伝導は分子を通ってのトンネル機構と熱励起型の伝導機構の二つの重ね合わせであると考えている。分子の構造が変わると、できる集合体のモルフォロジーが変わったり、電気特性が変わることも明らかにしており、分子の特性を活かした電子素子作成の一手法として興味深い。
- d) これまでの単分子電気特性計測の結果のかなりのものが実は分子を計測していなかった可能性が指摘されてきて

おり、分子の電気特性を計測する際に本当に対象分子を計測しているのかどうかの確認が重要である。最も確実な方法は、対象分子の分子像を計測しながら計測する走査プローブ顕微鏡の手法であり、有機自己集合膜を用いたAFMやSTMの結果は信頼性の高い結果を与えている。しかし、孤立分子の横方向の電導性を計測することは困難であった。孤立分子の横方向の電導性を計測するには、絶縁性の基板を用いる必要があるが、絶縁性の基板を用いるとSTMを用いることはできない。また、接触型のAFMを用いると絶縁性基板での計測はできるが、カンチレバーが対象分子に触るので分子が動く可能性が高く計測が困難である。この矛盾を解決する手法としてPCI-AFMがある。これは、分子画像を計測する際にはタッピングモードを用いて分子を引きずらないようにし、電気計測を行うときにのみ分子に接触する方法である。この手法を用いると孤立した単一分子の横方向の電気特性を、分子の画像と同時に計測することが可能になる。この手法を用いる場合には、対象分子の片端に電極金属を蒸着する必要がある。しかし、蒸着した金属を電極として用いると最小の膜厚が数10 nmは必要であり、平均的な分子の大きさ(1–5 nm)よりも遙かに大きいため、電極周辺での計測が困難になる。この問題点を解決するためにカーボンナノチューブを電極として計測することを考えた。カーボンナノチューブは、直径が1 nm程度であり構造により金属的な電導性を示すものもある。このため、カーボンナノチューブを電極として用いると、電極上から電極から離れている部分まで連続的に単一分子の電気特性の計測が可能になる。これを実証するために、ポルフィリン単分子とポルフィリンワイヤーを用いた実験を行った。ポルフィリン分子が吸着した部分と吸着していない部分が区別でき、分子が存在する部分では整流性が現れ、分子が存在しない部分では対照的な曲線となることがわかった。

- e) 分子定規法を用いて、5–10 nmのギャップを持つ電極を作成し、電極間に一定の大きさの金ナノ粒子を入れ電気特性を測定したところ、計算通りのクーロンブロック特性が得られた。他の手法で、このレベルのギャップの電極を再現性良く正確なギャップ幅で作成することは困難であり、分子定規法の手法の優秀さが確認できた。(物材機構 長谷川グループとの共同研究)
- f) 二探針走査トンネル顕微鏡 (STM) は完成して、Si(7×7)の原子像が見えることを確認した。二探針以上の走査トンネル顕微鏡でこのレベルの原子分解能を持つものは世界初であり、設計の正しさが確認できた。現在、これを原子間力顕微鏡に拡張する作業を行っているが、そのために必要なカンチレバーの作成を行っているところである。(物材機構 長谷川グループとの共同研究)

B-1) 学術論文

H. UNO, Y. YAMASHITA, M. KIKUCHI, H. WATANABE, T. OGAWA, H. N. YAMADA and N. ONO, “Photo Precursor for Pentacene,” *Tetrahedron Lett.* **46**, 1981–1983 (2005).

H. YAMADA, Y. YAMASHITA, M. KIKUCHI, H. WATANABE, T. OKUJIMA, H. UNO, T. OGAWA, K. OHARA, K. MUKAI and N. ONO, “Novel Photochemical Synthesis of Pentacene and Its Derivatives,” *Chem. Eur. J.* **11**, 6212–6220 (2005).

B-3) 総説、著書

小川琢治, 「単分子の電気特性を調べる新たな流れ」, 化学9月号 (2005).

小川琢治, 「単一分子デバイス」, 第5版実験化学講座28, 日本化学会編, 丸善, 第3章第1節第1項, p.179–197 (2005).

B-4) 招待講演

小川琢治, 「分子電子素子のためのナノ構造体の形成」, 九州大学工学研究院応用化学講演会, 福岡, 2005年1月.

T. OGAWA, “Construction of Nano-structures for Molecular Electronics,” 11th Japan-Korea Joint Symposium on Frontiers in Molecular Science, Okazaki (Japan), March 2005.

H. TANAKA, “Electronic Property of Porphyrin on SWNT Electrode Measured by Point Contact Imaging Atomic Force Microscopy,” Seminar for Atomic Scale Electronics, Gotemba (Japan), April 2005.

小川琢治, 「有機・無機ナノ構造体の形成と電気特性の計測」, 島根大学理工学部講演会, 松江, 2005年9月.

T. OGAWA, “Construction of molecular nano-structures and their electronic properties,” The Brazilian Society of Materials Research 2005, Recife (Brazil), October 2005.

田中啓文, 「ナノ伝導計測と超微細ナノファブリケーション」, オリンパスセミナー, 長野県上伊那郡辰野町, 2005年10月.

T. OGAWA, “Construction of molecular nano-structures and their electronic properties,” International Symposium on Molecular Scale Electronics, Tsukuba (Japan), December 2005.

H. TANAKA, “Organic molecules Working as Nanodevices on Single-Walled Carbon Nanotube Wiring,” Seminar for Atomic Scale Electronics, Karuizawa (Japan), December 2005.

B-5) 特許出願

特願平11-360274, 「電気特性評価装置」, 長谷川剛、中山知信、奥田太一、田中啓文、青野正和, 1999年.

特願2002-064264, 「分子集積回路素子」, 松本卓也、川合知二、桑原裕司、小川琢治、松井真二(科学技術振興事業団), 2002年.

特願2002-223978, 「分子ワイヤ」, 小川琢治、千原恵里、馬場美幸(科学技術振興事業団), 2002年.

特願2002-223975, 「分子ワイヤおよびその製造方法」, 小川琢治、小澤寛晃(科学技術振興事業団), 2002年.

特願2002-223971, 「有機金属錯体およびその製造方法ならびにそれを用いた電荷保持材料および単電子トランジスター」, 小川琢治、遠藤弘章(科学技術振興事業団), 2002年.

特願2004-351330, 「安定化無機ナノ粒子、安定化無機ナノ粒子群、安定化無機ナノ粒子の製造方法及び安定化無機ナノ粒子の利用方法」, 荒木幸一、小川琢治、水口英輔(独立行政法人科学技術振興機構), 2004年.

特願2004-65033, 「新規ポルフィリン化合物とその超分子構造体」, 佐藤弘一、小川琢治(株) 荏原製作所, 2004年.

特願2005-203190, 「整流素子」, 田中啓文、矢島高志、小川琢治, 2005年.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

有機合成協会 幹事 (1997-1998).

国際高等研究所 特別研究「次世代エレクトロニクスに向けての物質科学とシステムデザイン」 プロジェクトメンバー (2001-2005).

応用物理学会 有機分子・バイオエレクトロニクス分科会 幹事 (2002-2004).

国際高等研究所「電子系の新しい機能」 プロジェクトメンバー (2005-).

学会の組織委員

The First International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics 組織委員 (2000).

Asia Nano 2002, 組織委員 (2002).

Molecular and Bio-electronics International Conference 2, 組織委員 (2003).

Asia Nano 2004, 組織委員 (2004).

International Symposium on Nano-organization and Function, 組織委員 (2004).

分子エレクトロニクス研究会, 組織委員 (2004).

文部科学省、学術振興会等の役員等

文部科学省 科学技術政策研究所科学技術動向研究センター 専門調査員 (2000-).

日本学術振興会産学協力研究委員会「分子ナノテクノロジー研究委員会」委員 (2001-).

日本学術振興会「次世代エレクトロニクスに向けての物質科学とシステムデザインに関する研究開発専門委員会」委員 (2001-2005).

文部科学省学術審議会専門委員会科研費審査委員 (2003-).

日本学術振興会「電子系の新しい機能に関する研究開発専門委員会」委員 (2005-).

その他

独立行政法人通信総合研究所基礎先端部門関西先端研究センターナノ機構グループ 併任職員 (2000-).

東京大学物性科学研究所 嘱託研究員 (2000-2001).

産業総合研究所 客員研究員 (2002-).

科学技術振興事業団 戦略的基礎研究「精密分子設計に基づくナノ電子デバイス構築」 チームアドバイザー (2002-).

B-8) 他大学での講義、客員

島根大学理工学部, 「物質化学特別講義」, 2005年9月28日-30日.

B-10) 外部獲得資金

一般研究(C), 「有機銅錯体によるsp²炭素活性化機構の研究」, 小川琢治 (1995年).

重点領域研究, 「含ビスマス-インターエレメント化合物の研究」, 小川琢治 (1997年-1999年).

西田記念基礎有機化学研究助成, 「機能性有機分子の合成とマイクロ電極アレイを用いた有機分子デバイス化の研究」, 小川琢治 (1997年).

委任経理金, 住友金属鉱山, 小川琢治 (1997年-).

長瀬科学技術振興財団, 小川琢治 (1998年).

基盤研究(B), 「分子エレクトロニクスに最適化した光機能性有機分子の合成と物性の研究」, 小川琢治 (1999年-2001年).

科学技術振興事業団さきがけ研究21, 「ナノ電極/有機分子組織体による次世代電子素子の創出」, 小川琢治 (1999年-2002年).

基盤研究(C)企画調査, 「分子スケールエレクトロニクス」, 小川琢治 (2000年).

科学技術振興事業団戦略的基礎研究, 「巨大ポルフィリンアレーのメゾスコピック構造デバイス」, 小川琢治 (2001年-2006年).

萌芽研究, 「機能性有機分子による単電子トランジスターの構築」, 小川琢治 (2002年-2003年).

基盤研究(A),「ナノ環境を利用した有機分子高次組織体の構築とその電子物性の研究」, 小川琢治 (2003年-2006年).
 委任経理金 ビジョンアーツ(株),「分子エレクトロニクスに関する研究」, 田中啓文 (2004年).
 萌芽研究,「ナノ球リソグラフィーとシャドーコーン方によるナノロッド配列の作製とその光学特性評価」, 田中啓文 (2004年-2005年).
 文部科学省科学技術試験研究「ナノテクノロジー・材料を中心とした融合新興分野研究開発」に関する研究開発,「原子スイッチを用いた次世代プログラマブル論理演算デバイスの開発——ナノギャップ形成に関する研究」, 小川琢治、田中啓文 (2005年-).
 委任経理金 ビジョンアーツ(株),「分子エレクトロニクスに関する研究」, 田中啓文 (2005年).
 研究助成石川カーボン科学技術振興財団,「カーボンナノチューブ配線上でナノデバイスとして動作する平面分子に関する研究」, 田中啓文 (2005年).
 研究助成島津科学技術振興財団,「単層カーボンナノチューブ配線上へのナノサイズ分子デバイスの配置と点接触電流イメージング原子間力顕微鏡を用いた特性評価」, 田中啓文 (2005年).

C) 研究活動の課題と展望

長期的な展望としては、分子の概念の拡張と、その新しい系の物性を計測する新しい手法を開発することで、これまでに無い現象を発見することを目的としている。新しい概念の分子として、狭義の分子が金属構造体(金属ナノ粒子、金属ナノロッド)と作る複合体や、それが更にナノ電極のような巨視的な構造体と共有結合している系を考えている。これまでの考えでは後者は「素子」であり「分子」とは捉えられないが、それぞれの構造体が原子レベルで形状が揃っており、その構造体が個々の要素では現れなかった性質を持つようになると「分子」の定義に合うのではないかと考えている。現時点では、まだ個々の「素子」間のばらつきが大きいのが、ばらつきが無いように作成することで新たな地平が見えてくると期待している。

多田 博一 (助教授) (2000 年 4 月 1 日 ~ 2005 年 3 月 31 日) *

A-1) 専門領域 : 有機エレクトロニクス、分子スケールエレクトロニクス

A-2) 研究課題 :

- a) 有機薄膜電界効果トランジスターの作製と動作機構の解明
- b) ナノギャップ電極の作製と有機デバイスへの応用
- c) シリコン - 炭素ナノインターフェースの構築
- d) スピン偏極STMの開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 仕事関数の異なるソース、ドレイン電極を用いることにより、有機トランジスターにおけるキャリアの注入を検討した。アルミニウムと金を電極として用いることにより、電子と正孔を効率よく注入し、再結合による発光を確認した。
- b) リソグラフィー法により作製したマイクロギャップ電極を、電気メッキにより太らせ、ナノメートルサイズのギャップを有する電極を作製した。
- c) 水素終端シリコン(111)面に1-アルケンなど末端に2重結合を有する分子を反応させることにより、均一な単分子薄膜の作製を行ない、内部多重反射赤外分光法により、成長素過程を調べた。また、超高真空中でシリコン表面に分子を反応させ、STMにより電流 - 電圧特性を調べた。
- d) 液体ヘリウム温度で、銅および金清浄表面に吸着したフタロシアニン分子像を観察した。 dI/dV 測定により、吸着により誘起された新しい電子状態の生成を確認した。

B-1) 学術論文

E. FUJIWARA, M. TAKADA, Y. YAMASHITA and H. TADA, "Field-Effect Transistors Based on Single-Crystalline Wires of Bis-(1, 2, 5-Thiadiazolo)-p-Quinobis(1, 3-Dithiole)," *Jpn. J. Appl. Phys.* **33**, L82-L84 (2005).

T. SAKANOE, E. FUJIWARA, R. YAMADA and H. TADA, "Preparation of Organic Light-emitting Field-Effect Transistors with Asymmetric Electrodes," *Chem. Lett.* **34**, 494-495 (2005).

R. YAMADA and H. TADA, "Manipulation of Droplets by Dynamically Controlled Wetting Gradients," *Langmuir* **21**, 4254-4256 (2005).

S. ANDO, J. NISHIDA, E. FUJIWARA, H. TADA, Y. INOUE, S. TOKITO and Y. YAMASHITA, "Novel p- and n-Type Organic Semiconductors with an Anthracene Unit," *Chem. Mater.* **17**, 1261-1264 (2005).

S. ANDO, J. NISHIDA, H. TADA, Y. INOUE, S. TOKITO and Y. YAMASHITA, "High Performance n-Type Organic Field-Effect Transistors Based on π -Electronic Systems with Trifluoromethylphenyl Groups," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 5336-5337 (2005).

M. TAKADA and H. TADA, "Scanning Tunneling Microscopy and Spectroscopy of Phthalocyanine Molecules on Metal Surfaces," *Jpn. J. Appl. Phys.* **44**, 5332-5335 (2005).

M. TAKADA and H. TADA, “Direct Observation of Adsorption-Induced Electronics States by Low Temperature Scanning Tunneling Microscopy,” *Ultramicroscopy* **105**, 22–25 (2005).

NARASO, J. NISHIDA, S. ANDO, J. YAMAGUCHI, K. ITAKA, H. KOINUMA, H. TADA, S. TOKITO and Y. YAMASHITA, “High Performance Organic Field-Effect Transistors based on p-Extended Tetrathiafulvalene Derivatives,” *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 10142–10143 (2005).

M. AKHTARUZZAMAN, N. KAMATA, J. NISHIDA, S. ANDO, H. TADA, M. TOMURA and Y. YAMASHITA, “Synthesis, Characterization and FET Properties of Novel Dithiazolylbenzothiadiazole Derivatives,” *Chem. Commun.* 3183–3185 (2005).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

応用物理学会講演プログラム委員 (2003-).

応用物理学会有機分子バイオエレクトロニクス分科会常任幹事 (1995-1997, 1999-2001).

化学技術戦略推進機構 インターエレメント化学ワーキンググループ委員 (2000-2001).

化学技術戦略推進機構 コンビナトリアル材料化学産官学技術調査委員会委員 (2000-2001).

電気学会ハイブリッドナノ構造電子材料調査専門委員会委員 (1997-1999).

学会の組織委員

国際固体素子・材料コンファレンス(SSDM)論文委員 (2003-2004).

光電子機能有機材料に関する日韓ジョイントフォーラム組織委員 (2000-2003).

環太平洋国際化学会議におけるシンポジウム “Ordered Molecular Films for Nano-electronics and Photonics,” 組織委員 (2000).

学会誌編集委員

「応用物理」編集委員 (2003-2004).

「表面科学」編集委員 (1994-1996).

B-8) 他大学での講義、客員

京都大学工学研究科電子工学専攻, 「分子エレクトロニクス」, 2000-2005年.

大阪府立大学工学部機能物質科学科, 「特殊講義」, 2005年.

B-10) 外部資金獲得

基盤研究(B)(2), 「シリコン - 炭素共有結合を起点とする3次元分子組織体の構築」, 多田博一 (2003年-2006年) .

萌芽研究, 「スピン偏極STMを用いた分子の磁気特性の観察と制御」, 多田博一 (2004年-2006年).

C) 研究活動の課題と展望

有機電界効果トランジスターに関する研究では 移動度の向上とフレキシブル化を目指した研究が活発に行われており、キャリアの注入過程や輸送過程などの基礎的知見の重要性が認識されている。我々は、電極の種類や表面状態に着目し、キャリアの注入を制御することにより新しいデバイスの可能性を探っている。すでに電子と正孔の同時注入による発光型トランジ

スターの作製に成功したが、今後は、発光効率をより向上させ有機レーザーなどへ展開を図る。

分子スケールデバイスの構築を目指して、メッキによるナノギャップ電極の作製とシリコン上の有機分子の組織化に関する研究を遂行してきた。前者では、10 nm程度のギャップを持つ電極の作製方法を確立した。今後は、より薄い電極の作製を試み、実際に分子を挟み込んで特性を調べる。シリコン上の有機分子では、STMを用いた局所電気伝導度の計測を行い、基板の種別(P型、N型)や伝導度の影響を調べる。

極低温STMでは、安定して分子像および微分コンダクタンス像の観察が可能となっている。磁性探針を用いることにより、局所的なスピンの情報を得ることを目指す。

* 2005年4月1日大阪大学大学院基礎工学研究科教授

鈴木 敏 泰 (助教授)(1998 年 1 月 1 日着任)

A-1) 専門領域 : 有機合成化学

A-2) 研究課題 :

- a) 電界効果トランジスタのための有機半導体の開発
- b) 有機 EL 素子のため高効率燐光錯体の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) パーフルオロチオフェンオリゴマーの3量体から5量体 (PF-*n*T; *n* = 3, 4, 5) までの合成とキャラクタリゼーションを行った。微分パルスボルタメトリー (DPV) の測定によると、それらの酸化および還元電位は、無置換体に比べプラス側にシフトしている。電気化学的に決められたエネルギーギャップは、溶液のUV-vis-NIR吸収スペクトルから得られたものと一致した。パイ共役的な性質は、FTラマンスペクトルにより純粋な固体および薄い塩化メチレン溶液中において調べられた。それによるとパイ共役は最も長いオリゴマーにおいても飽和には至らず、溶液中では連続したチオフェンユニットのコンフォメーションは平面から大きくねじれていない。DFT および TDDFT 計算を B3LYP/6-31G** レベルで行い、最適分子構造、原子電荷分布、フロンティア軌道のエネルギーとトポロジー、ラマン散乱に関連した基準振動モード、主要な光学吸収を与える垂直一電子励起についての情報を得た。

B-1) 学術論文

Y. INOUE, Y. SAKAMOTO, T. SUZUKI, M. KOBAYASHI, Y. GAO and S. TOKITO, "Organic Thin-Film Transistors with High Electron Mobility Based on Perfluoropentacene," *Jpn. J. Appl. Phys., Part 1* **44**, 3663–3668 (2005).

T. TSUZUKI, N. SHIRASAWA, T. SUZUKI and S. TOKITO, "Organic Light-Emitting Diodes Using Multifunctional Phosphorescent with Iridium-Complex Core and Charge-Transporting Dendrons," *Jpn. J. Appl. Phys., Part 1* **44**, 4151–4154 (2005).

R. M. OSUNA, R. P. ORTIZ, M. C. R. DELGADO, Y. SAKAMOTO, T. SUZUKI, V. HERNÁNDEZ and J. T. L. NAVARRETE, "Synthesis and Characterization of Three Novel Perfluoro-Oligothiophenes Ranging in Length from the Trimer to the Pentamer," *J. Phys. Chem. B* **109**, 20737–20745 (2005).

B-4) 招待講演

T. SUZUKI, "Perfluoropentacene: High-Performance p-n Junctions and Complementary Circuits with Pentacene," International Fluorine Conference in Toyama, Toyama (Japan), November 2005.

B-10) 外部獲得資金

基盤研究(C), 「有機EL素子のためのアモルファス性有機電子輸送材料の開発」, 鈴木敏泰 (1999年-2000年).

基盤研究(BX 展開), 「フッ素化フェニレン化合物の有機ELディスプレイへの実用化研究」, 鈴木敏泰 (2000年-2001年).

基盤研究(BX 一般), 「有機トランジスタのためのn型半導体の開発」, 鈴木敏泰 (2002年-2003年).

C) 研究活動の課題と展望

最近、次世代の有機電子材料として「単一分子素子」や「ナノワイヤー」等のキーワードで表される分野に注目が集まっている。SPM技術の急速な発展により、単一分子メモリ、単一分子発光素子、単一分子ダイオード、単一分子トランジスタなど基礎研究が現実的なものとなってきた。一個の分子に機能をもたせるためには、従来のバルクによる素子とは異なった分子設計が必要である。計測グループとの密接な共同研究により、この新しい分野に合成化学者として貢献していきたい。現在行っている有機半導体の開発は、単一分子素子研究の基礎知識として役立つものと信じている。

田 中 彰 治 (助 手) (1989 年 4 月 1 日 着 任)

A-1) 専門領域：非ベンゼン系芳香族化学、分子スケールエレクトロニクス

A-2) 研究課題：

- a) 大型分子内における単一荷電キャリアーの外的制御原理の探索
- b) 各種基板表面における鎖状大型分子の合目的分子配列に関する研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 本研究は、単一大型分子内に合目的な量子井戸構造を構築し、個々の荷電キャリアーの保持と移動の外的制御を行なうこと(単一分子内電子回路)を目指すものである。パイ共役分子鎖内の荷電キャリアのサイズはおよそ2 nm 長程度とされ、よってその整数倍、半整数倍の分子鎖長をもつ被覆型分子群の一般的合成法をまず開拓してきた。本年度では、約30 nmまでの被覆主鎖(1 nm 刻みで指定可)にアリゲータクリップ型アンカー、平面接合型アンカー、側鎖副アンカー等を導入(位置は両端、片端、真ん中も指定可能)するスキームを確立した。現在、四つの分子計測グループの四種のナノギャップ電極系における計測実験上の要求に応じ、適当な分子サイズとアンカーを組み合わせたモノを供給、またはフィードバックをうけて修正合成を進めている。さらに次の研究ステージに進むため、「場所とサイズと深さを指定できるポテンシャル井戸の構築法」についても検討を行なった。現在までに、5-12 nm長の主鎖の中央部に1-2 nm長の低エネルギーギャップ部位(特にLUMOレベルに段差が大)の選択的導入に成功している。井戸の複数個導入による分子内バリアの構築を現在進めている。
- b) 本項目は、横浜市大・横山 G との共同研究に基づく。嵩高いブロック状置換基と長鎖状の置換基を合せもつオリゴマー分子は、分子形状に明確な凸凹構造を有するため、従来明瞭な観測が困難であった分子内配座異性体や鏡像異性体の識別が容易であることを明らかにした。またこの凸凹構造のため、従来の鎖状分子では認められなかった分子集合様式も観測できた。本年度は、この知見をベースに新たな大型分子組織化戦略を確立するため、凸凹構造を有する一連の中・大型鎖状分子をパルスジェット法により各種基板に定着させ、その分子内配座と分子配列について検討を始めた。パルスジェット法の実験条件確立まで時間を要しているが、現在10 nm 長級分子の単一分子観測まで成功している。

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員

分子研分子物質開発研究センター・特別シンポジウム「分子スケールエレクトロニクスにおける新規分子物質開発」主催者(1998).

応用物理学会・日本化学会合同シンポジウム「21世紀の分子エレクトロニクス研究の展望と課題——分子設計・合成・デバイスからコンピュータへ——」日本化学会側準備・運営担当(2000).

第12回日本MRS学術シンポジウム:セッション H「単一電子デバイス・マテリアルの開発最前線～分子系・ナノ固体系の単一電子デバイス～」共同チェア(2000).

First International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics 組織委員(2001).

B-10)外部獲得資金

一般研究(C),「多段階酸化還元系を含む真性伝導 π 共役ポリマーの創出」, 田中彰治 (1994年-1995年).

基盤研究(C)(2),「定序配列・低エネルギーギャップ型高次ヘテロ環 π 共役オリゴマーの構築」, 田中彰治 (1996年-1997年).

基盤研究(C)(2),「高度の電子輸送能を有するナノスケール単一分子電線の創出」, 田中彰治 (1998年-1999年).

基盤研究(C)(2),「シリコンナノテクノロジーとの融合を目指した機能集積型巨大パイ共役分子の開発」, 田中彰治 (2000年-2001年).

C) 研究活動の課題と展望

実のところ何を測っているのか良く分からないかも.....というのが単一分子伝導度計測実験の最大の問題点である。何故そんなのが報告になるのか不可解であるが、人のことは言わないでおこう。分子+基板の計測試料系自体を「必要以上.....」と言われるほど吟味、洗練するというアホな努力を行なうのみである。本研究では、単一分子伝導度計測系の実空間観測を必須条件とし、そのための技術的無理難題は須くナノギャップ電極作成者、ナノ領域観測・計測者、分子開発者の各々が、自らの出身分野の誇りにかけて粉砕する約定になっている。あとには引けぬのである。

ナノ触媒・生命分子素子研究部門

魚 住 泰 広 (教授) (2000 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：有機合成化学、有機金属化学

A-2) 研究課題：

- a) 完全水系メディア中での触媒反応
- b) 高機能ハイブリッド金属錯体触媒・金属ナノ触媒の設計・開発
- c) 新しい遷移金属錯体の創製

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) パラジウム錯体触媒, ロジウム錯体触媒などを両親媒性高分子によって機能修飾することで, これら遷移金属錯体触媒有機変換工程の多くを完全水系メディア中で実施することに成功した。水中不均一での高立体選択的触媒反応の開発を世界にさがけて成功した。
- b) 高分子分散型ナノ粒子金属触媒(有機高分子 - 金属粒子のハイブリッド), メソポーラスシリカ担持分子性遷移金属錯体(無機担体 - 有機金属のハイブリッド), 金属架橋高分子の自己集積触媒(架橋構造と触媒機能のハイブリッド)を開発した。マイクロ流路内の層流界面での自己集積錯体触媒膜の創製に成功した。
- c) 新しいピンサー錯体の合成方法論を確立した。新方法論によって従来にない全く新しいピンサー錯体合成が可能となり, その物性, 反応性を明らかとしつつある。

B-1) 学術論文

K. TAKENAKA, M. MINAKAWA and Y. UOZUMI, “NCN Pincer Palladium Complexes: Their Preparation via Ligand Introduction Route and Their Catalytic,” *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 12273–12281 (2005).

Y. UOZUMI and M. KIMURA, “Asymmetric π -Allylic Etherification of Cycloalkenyl Esters with Phenols in Water Using a Resin-Supported Chiral Palladium Complex,” *Tetrahedron: Asymmetry*, web-edition, doi:10.1016/j.tetasy.2005.11.021 (2005).

Y. UOZUMI and M. KIKUCHI, “Controlled Monoarylation of Dibromoarenes in Water with a Polymeric Palladium Catalyst,” *Synlett* 1775–1778 (2005).

Y. NAKAI and Y. UOZUMI, “Cycloisomerization of 1,6-Enynes: Asymmetric Multistep Preparation of a Hydrindane Framework in Water with Polymeric Catalysts,” *Org. Lett.* **7**, 291–293 (2005).

Y. UOZUMI, H. TANAKA and K. SHIBATOMI, “Asymmetric Allylic Amination in Water Catalyzed by an Amphiphilic Resin-Supported Chiral Palladium Complex,” *Org. Lett.* **6**, 281–283 (2004).

R. NAKAO, H. RHEE and Y. UOZUMI, “Hydrogenation and Dehalogenation under Aqueous Conditions with an Amphiphilic Polymer-Supported Nanopalladium Catalyst,” *Org. Lett.* **7**, 163–165 (2005).

Y. M. A. YAMADA, H. TABATA, M. ICHINOHE, H. TAKAHASHI and S. Ikegami, “Oxidation of Allylic Alcohols, Amines, and Sulfides Mediated by Assembled Triphase Catalyst of Phosphotungstate and Non-Cross-Linked Amphiphilic Copolymer,” *Tetrahedron* **60**, 4087–4096 (2004).

Y. M. A. YAMADA, K. TAKEDA, H. TAKAHASHI and S. IKEGAMI, “Assembled Catalyst of Palladium and Non-Cross-Linked Amphiphilic Polymer Ligand for the Efficient Heterogeneous Heck Reaction,” *Tetrahedron* **60**, 4097–4105 (2004).

K. C. NICOLAOU, S. VYSKOCIL, T. V. KOFTIS, Y. M. A. YAMADA, T. LING, D. Y. -K. CHEN, W. TANG, G. PETROVIC, M. O. FREDERICK, Y. LI and M. SATAKE, “Structure Revision and Total Synthesis of Azaspiracid-1, Part 1: Intelligence Gathering and Tentative Proposal,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **43**, 4312–4318 (2004).

K. C. NICOLAOU, T. V. KOFTIS, S. VYSKOCIL, G. PETROVIC, T. LING, Y. M. A. YAMADA, W. TANG and M. O. FREDERICK, “Structure Revision and Total Synthesis of Azaspiracid-1, Part 2: Definition of the ABCD Domain and Total Synthesis,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **43**, 4318–4324 (2004).

Y. M. A. YAMADA, “Self-Assembled Complexes of Non-Cross-Linked Amphiphilic Polymeric Ligands with Inorganic Species: Highly Active and Reusable Solid-Phase Polymeric Catalysts,” *Chem. Pharm. Bull.* **53**, 723–739 (2005).

H. HAMAMOTO, Y. SUZUKI, Y. M. A. YAMADA, H. TABATA, H. TAKAHASHI and S. IKEGAMI, “A Recyclable Catalytic System Based on a Temperature-Responsive Catalyst,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **44**, 4536–4538 (2005).

Y. M. A. YAMADA, “Development of Novel Solid-phase Polymeric Catalysts for Organic Syntheses,” *J. Pharm. Soc. Jpn.* **125**, 749–770 (2005).

B-3) 総説、著書

魚住泰広, 「高分子固定化遷移金属錯体触媒による水中有機変換反応」, *触媒* 550–555 (2005).

山田陽一、魚住泰広, 「精密高分子錯体の環境触媒への応用」, *高分子* **54**, 83 (2005).

山田陽一, 「スクリプス研究所ニコラウ研へようこそ」, *化学* (3), 50–53 (2005).

山田陽一, 「次世代型固相担持遷移金属触媒」, *ファルマシア* **41**, 639–644 (2005).

山田陽一, 「新しい固相触媒の創製とその応用」, *薬事日報* 平成17年3月25日号 (2005).

B-4) 招待講演

Y. UOZUMI, “Development of Heterogeneous Aquacatalysis toward Ideal Organic Synthesis,” 科学技術振興機構, Symposium on “New-Generation Catalysis for New-Generation Synthesis,” 福岡, 2005年1月.

Y. UOZUMI, “Heterogeneous Aquacatalysis with Amphiphilic Resin-Supported Palladium Complexes,” 2nd International Conference on Green and Sustainable Chemistry, Washington, DC (U.S.A.), June 2005.

Y. UOZUMI, “Heterogeneous Aquacatalysis with Amphiphilic Resin-Supported Palladium Complexes,” 9th Annual Green Chemistry and Engineering Conference, Washington, DC (U.S.A.), June 2005.

魚住泰広, “Heterogeneous Aquacatalysis toward Ideal Organic Synthesis,” 有機合成化学協会関西支部, 明日の有機合成化学, 大阪, 2005年9月.

Y. UOZUMI, “Asymmetric Heterogeneous Aquacatalysis Toward Ideal Organic Synthesis,” The Third International Symposium on Integrated Synthesis 2005, Osaka, September 2005.

Y. UOZUMI, “Heterogeneous Aquacatalysis toward Ideal Organic Synthesis,” Department Lecture, Chinese University of Hong Kong, Hong Kong (China), October 2005.

Y. UOZUMI, “Heterogeneous Aquacatalysis toward Ideal Organic Synthesis,” Department Lecture, Hong Kong University, Hong Kong (China), October 2005.

Y. UOZUMI, “Aquacatalysis with Polymeric Palladium Complexes toward Ideal Organic Synthesis,” The International Symposium on Dynamic Complexes, Sendai, October 2005.

Y. UOZUMI, “Aquacatalysis with Polymeric Palladium Complexes toward Ideal Organic Synthesis,” Joint US-Japan Workshop on Sustainable Chemical Synthesis, Honolulu (U.S.A.), December 2005.

山田陽一, 「新しい固相触媒の創製と有機合成反応への展開」, 大阪大学産業科学研究所セミナー, 大阪, 2005年2月.

山田陽一, 「新しい固相触媒の開発と有機合成反応への展開」, 第125回日本薬学会年会(日本薬学会奨励賞受賞講演), 東京, 2005年3月.

山田陽一, 「新しい固相触媒の創製とその応用」, 名古屋市立大学特別講演会(日本薬学会東海支部共催), 2005年5月.

B-5) 特許出願

US 2004097738/JP 2004161963, “Polymer-carrying optically active binaphthyl-type oxazoline compound,” Uozumi, Yasuhiro; Hoche, Heiko; Sumi, Kenzo. U.S. Pat. Appl. Publ., 2004年.

JP 2003261584, “Preparation of solid-phase supported-bidentate phosphines and solid-phase supported-bidentate phosphine-palladium or rhodium complexes as catalysts,” Uozumi, Yasuhiro, Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 2003年.

WO 2002072644, “Solid-phase-supported transition metal catalysts,” Uozumi, Yasuhiro; Nakao, Ryu, PCT Int. Appl., 2002年.

JP 2001328993, “Preparation of optically active phosphines as catalysts for asymmetric synthesis,” Uozumi, Yasuhiro; Shibatomi, Kazutaka, Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 2001年.

JP 10287691, “Optically-active bisoxazolylbiaryl-palladium complexes and preparation of heterocycles by asymmetric Wacker-type cyclization using the complexes,” Hayashi, Tamio; Uozumi, Yasuhiro; Kato, Kazuhiko, Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 1998年.

JP 10287663, “Preparation of optically active heterocyclic compounds by asymmetric Wacker-type cyclization of olefins,” Hayashi, Tamio; Uozumi, Yasuhiro, Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 1998年.

JP 09235289, “Tertiary phosphines, their transition metal complexes, and regioselective and stereoselective preparation of optically active organosilicon compounds using the complexes as catalysts,” Hayashi, Tamio; Uozumi, Yasuhiro, Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 1997年.

JP 07247234, “Preparation of racemic or optically active 1-phenylnaphthalene derivatives,” Hayashi, Tamio; Uozumi, Yasuhiro, Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 1995年.

JP 07223976, “Preparation of optically active aromatic hydrocarbons,” Hayashi, Tamio; Uozumi, Yasuhiro, Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 1995年.

EP 647647/JP 07149776/JP 07224073, “Preparation of tertiary phosphines and their transition metal complexes as catalysts for asymmetric synthesis reactions,” Hayashi, Tamio; Uozumi, Yasuhiro; Iwakura, Kazunori; Kurimoto, Isao; Minai, Masayoshi, Eur. Pat. Appl., 1995年.

JP 06199875, “Preparation of optically active trichlorosilanes,” Hayashi, Tamio; Uozumi, Yasuhiro; Tanahashi, Asako, Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 1994年.

JP 05255351, “Preparation of optically active silylbicycloalkane or -alkene compounds,” Hayashi, Tamio; Uozumi, Yasuhiro, Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 1993年.

JP 05255285, “Stereoselective preparation of vinylmorpholines or vinylpiperazines,” Hayashi, Tamio; Uozumi, Yasuhiro; Tanahashi, Asako; Kyoi, Takao, Jpn. Kokai Tokkyo Koho, 1993年.

EP 503884/JP 05017491/ JP 2733880/ US 5231202, “Preparation of optically active binaphthylphosphines as components of enantioselective hydrosilylation catalysts,” Hayashi, Tamio; Uozumi, Yasuhiro; Yamazaki, Akiko; Kumobayashi, Hidenori, Eur. Pat. Appl., 1992年.

特開2005-47864, 「芳香族オレフィンの新規合成法」, 池上四郎、山田陽一、高橋秀依、竹田幸司, 2003年.

特開2003-236388, 「新規遷移金属錯体触媒 およびそれを用いるビアリール化合物の合成法」, 池上四郎、山田陽一、高橋秀依, 2002年.

特開2003-33659, 「新規タングステン触媒 およびそれを用いるアリル型アルコールのエポキシ化法」, 池上四郎、山田陽一、高橋秀依, 2001年.

B-6) 受賞、表彰

魚住泰広, 有機合成化学協会研究企画賞 (1992).

魚住泰広, 日本薬学会奨励賞 (1997).

山田陽一, 有機合成化学協会研究企画賞 (1998).

山田陽一, 井上研究奨励賞 (2000).

山田陽一, 日本薬学会奨励賞 (2005).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

地球環境産業技術研究機構(RITE)技術評価分科会委員会 (2002-2004).

コンビナトリアル・ケミストリー研究会代表幹事 (1998-).

有機合成化学協会支部幹事 (1998-).

学会の組織委員

名古屋メダル実行委員 (2000-).

International Conference on Organic Synthesis 実行委員 (2002-2004).

IUPAC meeting “Polymer in Organic Chemistry 2006” 実行委員 (2004-2006).

文部科学省、学術振興会等の役員等

日本学術振興会第116委員会委員 (1998-).

日本学術振興会科学研究費補助金第一次審査員 (2002-).

科学振興調整費審査委員 (2003-2004).

振興調整費「新機能材料開発に資する強磁場固体NMR」研究運営委員 (2004-).

学会誌編集委員

日本化学会速報誌編集委員 (2001-2002).

SYNLETT誌アジア地区編集主幹 (2002-).

SYNFACT誌編集委員 (2005-).

*Tetrahedron Asymmetry*誌アドバイザー - ボード (2002-).

*SYNFACT*誌寄稿委員, 山田陽一 (2005-).

その他

科学技術振興機構CREST研究「水中での精密分子変換を実現するナノ遷移金属触媒創製」, 研究リーダー.

B-8) 他大学での講義、客員

京都大学教授, 併任, 2002年-2005年.

B-10) 外部獲得資金

基盤研究(B) 展開研究)「水中での触媒的有機合成プロセス:環境負荷物質のゼロエミッション化」, 魚住泰広 (1999年-2001年).

基盤研究(B) 一般研究)「水中有機合成を実現する両親媒性固相担持触媒の開発」, 魚住泰広 (1999年-2000年).

特定領域研究(公募:領域番号283)「触媒的不斉ワッカー反応」, 魚住泰広 (1999年-2001年).

特別研究員奨励費,「高効率アリル位不斉酸化を実現する錯体触媒の開発研究」, Heiko Hocke (2000年-2001年).

特定領域研究(公募:領域番号412)「高い不斉誘起能を持つ新規複素環ユニット開発」, 魚住泰広 (2001年-2003年).

特定領域研究(計画:領域番号420)「完全水系中での遷移金属触媒反応場」, 魚住泰広 (2002年-2005年).

基盤研究(A) 一般研究)「水中で機能する高分子分散型複合金属ナノ触媒の創製」, 魚住泰広 (2003年-2006年).

受託研究(RITE)「優秀研究企画」, 魚住泰広 (2001年-2002年).

受託研究(マイクロ化学プロセス組合:NEDO・再委託) 魚住泰広 (2002年-2004年).

受託研究(日本化学会:科学振興調整費・再委託) 魚住泰広 (2000年).

受託研究(第一製薬) 魚住泰広 (2001年-2002年).

受託研究(科学技術振興機構) 魚住泰広 (2003年-2004年).

奨学寄付金(日産化学)「新規有機合成手法開発研究助成」, 魚住泰広 (2000年-2005年).

奨学寄付金(ゼリア新薬)「学術研究助成」, 魚住泰広 (2000年-2001年).

奨学寄付金(クラレ)「学術研究助成」, 魚住泰広 (2000年-2001年).

奨学寄付金(高砂香料)「不斉合成触媒開発研究助成」, 魚住泰広 (2000年-2005年).

奨学寄付金(和光純薬)「学術研究助成」, 魚住泰広 (2000年).

奨学寄付金(旭硝子財団)「学術研究助成」, 魚住泰広 (2000年-2001年).

奨学寄付金(上原記念生命科学財団)「学術研究助成」, 魚住泰広 (2001年).

奨学寄付金(住友財団)「基礎科学研究助成」, 魚住泰広 (2001年).

研究奨励金(東レ財団)「科学研究助成」, 魚住泰広 (2002年).

科学技術振興機構CREST研究,「水中での精密分子変換を実現するナノ遷移金属触媒創造」, 魚住泰広 (2002年-2007年).

若手研究(B),「高活性な相間移動固相触媒の創製と有機合成反応への展開」, 山田陽一 (2002年).

若手研究(B),「高分子マトリックス化金属固相触媒の創製」, 山田陽一 (2004年-2007年).

留学助成金(上原生命科学記念財団)「海外留学助成金」, 山田陽一 (2003年).

奨学寄付金(上原記念生命科学財団)「学術研究助成」, 山田陽一 (2005年).

C) 研究活動の課題と展望

数年前にゼロからのスタートを切った精密有機分子変換反応のaqueous-switching ,heterogeneous-switchingの試みも十分な成果と蓄積を得て、現時点では高度な立体選択機能を合わせ持った触媒の開発に至り、さらには数段階の炭素-炭素結合形成を経る多段階有機合成の全工程・全操作を有機溶剤を全く用いずに実現しつつある。その過程で従来の有機合成手法では獲得し得ない疎水性相互作用に立脚した新規な反応駆動概念を提案することができた。今後さらに基礎科学的論証を重ねる予定である。

またナノパラジウム粒子の高分子マトリクス内での発生・分散と固定化に成功し、アルコール酸化やハロゲン化芳香族の脱ハロゲン反応など、グリーン化学の中心課題を解決しつつある。他の金属種に適用範囲を拡張しつつある。さらにメソポーラスシリカ担持分子性遷移金属錯体、金属架橋高分子の自己集積触媒を開発に注力しつつあり、マイクロ流路内の層流界面での自己集積錯体触媒膜の創製に成功した。

独自に開発した高立体選択的不斉ユニットであるpyrroloimidazolone骨格ならではの有効な利用を推進しつつあり、上述の水中不斉触媒プロセスの達成に加えて、新しいピンサー型錯体触媒の設計・開発に至っている。その過程で見いだしたリガンド導入法によるピンサー錯体構築は従来の種々のピンサー型錯体調製と全く異なる錯体形成経路を経ることから、従来法では合成困難であった立体規制に富むピンサー型錯体の自在調製に道筋をつけた。発展に注力したい。

現時点では競争的研究資金の獲得も順調であり、研究設備などは充足している。大学院生ならびに博士研究員の確保も問題ない。しかし2年以内に現在の競争的研究資金は終了することから、その先の研究環境・活力を維持する上で今こそ従来以上の学術成果の達成が重要である。

永 田 央 (助教授)(1998 年 3 月 16 日着任)

A-1) 専門領域：有機化学、錯体化学

A-2) 研究課題：

- a) 空間制御された大型有機分子内での電子移動
- b) 光励起電子移動を利用した触媒反応の開発
- c) 金属ナノ粒子・有機分子複合体の合成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) コア部分にポルフィリン、骨格部分にフェロセニル基を持つ dendritic 分子の電子移動挙動について詳細に調べた。フェロセニル基の酸化電位は dendritic 分子の世代には依存せず一定の値をとることから、各フェロセニル基は特別な相互作用を持たず独立に酸化される。ところが、パルスボルタメトリーの結果から電極電子移動の速度定数を見積もると、ポルフィリンの酸化に比べてフェロセニル基の酸化が遅いことが示唆された。溶媒・支持電解質を含めた分子動力学計算の結果から、律速段階は(高分子系でよく見られる)電解質の再配置ではなく、分子そのものの配向変化であると考えられる。
- b) 新規錯体触媒の開拓のため、低原子価コバルト錯体の合成と電気化学特性について検討した。1価コバルト・ジホスフィン錯体の新規合成法を開発し、従来法とくらべて行程数を 1 / 3 に短縮することに成功した。また、同じ配位子を持つ 3 価錯体を別ルートで合成し、1 価錯体と同一の電気化学的挙動を示すことを確認した。
- c) 三脚型チオエーテルオリゴマーを用いた金ナノ粒子の安定化について検討した。5-アリルオキシ-1,3-キシリレン基を 9 個持つオリゴマーは直径 1.5 nm 程度のナノ粒子と安定な複合体を作るが、1 個のナノ粒子に対して多数のオリゴマー分子が結合している。ナノ粒子のサイズと形に合わせて分子設計を行えば 1:1 複合体の生成が期待できるが、自由度の大きな三脚型分子の 3 次元構造を予測することは容易ではない。そこで、キシリレン基のベンゼン環をビフェニル・ナフタレン・フルオレン等で置き換えた分子を構成要素として想定し、コンビナトリアル計算化学を用いて有望な構造を探索した。得られた構造は化学的直感と一致するもので、このような手法は複雑な分子の設計に有用であると言える。

B-1) 学術論文

Y. HOSOKAWA, S. MAKI and T. NAGATA, "Gold Nanoparticles Stabilized by Tripod Thioether Oligomers: Synthesis and Molecular Dynamics Studies," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **78**, 1773–1782 (2005).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本化学会東海支部代議員 (1999-2000).

B-10)外部獲得資金

奨励研究,「光化学系IIの機能モデルを目指すポルフィリン含有複合超分子系の合成」,永田 央 (1997年-1998年).

萌芽研究,「無機ナノ粒子を包含する単一分子素子を用いた光合成物質変換」,永田 央 (2003年-2004年).

特定領域研究(公募研究),「デザインされた空孔を持つ有機分子と金属ナノ粒子の1:1複合体の調製」,(2004年-2005年).

C) 研究活動の課題と展望

これまで一貫して光合成モデルを意識した分子の合成に取り組んできたが,モデル化学が生体分子に近付くためには,これまで以上に複雑な内部構造を持った分子を自由に設計できる方法が必要であると感じている。研究課題の(c)は光合成モデルという点では少し脇道に入ったテーマ(もともと人工光合成で使われるコロイド系を分子モデルに持ち込むことが狙いだった)だが,複雑な分子の設計法という点で新しい方向に進み始めた感触を得ている。今後は,この方向を(a), (b)の課題にも取り入れて,生体分子のモデル化学の新局面を開いていきたい。

櫻井英博(助教授)(2004年4月1日着任)

A-1) 専門領域：有機化学

A-2) 研究課題：

- a) ボウル型共役化合物の合成手法の開発と物性評価
- b) 金属ナノクラスターを触媒とする新規反応の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 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や錯体触媒への応用を目指している。今年度は、ボウル自身にキラリティを有する含窒素ヘテロバッキーボウルの骨格合成に初めて成功した。
- b) ナノメートルサイズの金属クラスターはバルク金属とも単核金属錯体とも異なる特性を示すことから、従来にない触媒の開発が期待される。特に金は金属表面と分子との相互作用が弱く、ほとんど触媒活性がないが、ナノ粒子においては酸化触媒としての活性が発現することが固体担持触媒において報告されている。本研究は、同センターナノ光計測研究部門の佃達哉助教授のグループとの共同研究で、昨年度開発した1.3 nm平均の粒子サイズを有する水溶性金クラスターが、アルコール酸素酸化反応に対して極めて高活性を示し、しかも触媒活性に対して顕著なサイズ効果が観測されることを見出した。この金クラスターは、同様に調製したパラジウムクラスターよりも高い活性を示し、また、速度論的同位体効果の違いなどから、金とパラジウムでは異なる反応機構で反応が進行していることが示唆された。

B-1) 学術論文

- H. SAKURAI, M. T. S. RITONGA, H. SHIBATANI and T. HIRAO, "Synthesis and Characterization of *p*-Phenylenediamine Derivatives Bearing an Electron-Acceptor Unit," *J. Org. Chem.* **70**, 2754–2762 (2005).
- H. SAKURAI, K. SUGITANI, T. MORIUCHI and T. HIRAO, "Synthesis and Characterization of Neutral and Oxidized Forms of (Benzimidazolyldiene)pentacarbonyl-Chromium(0) Complexes," *J. Organomet. Chem.* **690**, 1750–1755 (2005).
- H. FUJII, H. SAKURAI, K. TANI, K. WAKISAKA and T. HIRAO, "Bright and Ultimately Pure Red Electrophosphorescent Diode Bearing Diphenylquinoxaline," *IEICE Electronics Express* **2**, 260–266 (2005).
- H. TSUNOYAMA, H. SAKURAI, Y. NEGISHI and T. TSUKUDA, "Size-Specific Catalytic Activity of Polymer-Stabilized Gold Nanoclusters for Aerobic Alcohol Oxidation in Water," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 9374–9375 (2005).
- H. SAKURAI, T. DAIKO, H. SAKANE, T. AMAYA and T. HIRAO, "Structural Elucidation of Sumanene and Generation of Its Benzylic Anions," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 11580–11581 (2005).
- L. MAO, T. MORIUCHI, H. SAKURAI, H. FUJII and T. HIRAO, "New Tridentate Cyclometalated Platinum(II) and Palladium(II) Complexes of *N*,2-Diphenyl-8-quinolinamine: Syntheses, Crystal Structures, and Photophysical Properties," *Tetrahedron Lett.* **46**, 8419–8422 (2005).

B-4) 招待講演

櫻井英博、佃達哉,「金ナノクラスターを擬均一系触媒として用いる水中での有機合成反応」,大阪大学産業科学研究所
附属産業科学ナノテクノロジーセンターセミナー「ナノ超分子触媒の将来展望」,茨木, 2005年2月.

櫻井英博,「お椀型共役化合物の合成戦略」,筑波大学先端学際領域研究センター新物質創製研究アспект公開セミナー, つくば, 2005年8月.

B-5) 特許出願

特願2001-320762, 特開2003-128608,「ヒドロキシビアリール化合物の製造方法」, 平尾俊一、櫻井英博(平尾俊一、三菱化学(株))
2001年.

PCT/JP2003/015207(特願2002-348751) WO2004-050641,「アニリン系オリゴマーないしポリマー、その製造方法、有機EL
素子及びその製造方法、並びに、光電変換有機デバイス」, 平尾俊一、櫻井英博(関西ティー・エル・オー(株)) 2002年.

PCT/JP2004/000678(特願2003-024462) WO2004-067446,「スマネンおよびその製造方法」, 平尾俊一、櫻井英博、大光
太郎(財)大阪産業振興機構) 2003年.

特願2003-197957, 特開2005-035902,「ジカルボニル化合物及びその金属錯体並びにこれを用いた発光材料及び発光素
子」, 藤井祐行、平尾俊一、櫻井英博、谷 和恭(三洋電機(株)) 2003年.

特願2004-052742 (US 2005-64123), 特開2005-239648 (US 2005-191527),「キノキサリン構造を含む有機金属化合物及
び発光素子」, 藤井祐行、平尾俊一、櫻井英博、谷 和恭、Mao Lisheng(三洋電機(株)) 2004年.

特願2004-091341, 特開2005-272411,「含窒素五員環構造を含む有機金属化合物及び発光素子」, 藤井祐行、平尾俊一、
櫻井英博、谷 和恭(三洋電機(株)) 2004年.

特願2004-224096, 特開2006-045062,「分子集合体」, 平尾俊一、櫻井英博、大光太郎(国立大学法人大阪大学、(株)日本
触媒、ダイセル化学工業(株)(株)カネカ) 2004年.

特願2005-219143,「有機半導体およびそれを用いた電子機器」, 平尾俊一、櫻井英博、雨夜徹、大光太郎、森宏一、坂根裕之、
呉學亮、中村潤一、吉兼正能、日色知樹(国立大学法人大阪大学、(株)日本触媒、ダイセル化学工業(株)(株)カネカ) 2005
年.

特願2005-350574,「トリアザスマネン類、及び、その製造方法」, 櫻井英博、東林修平(大学共同利用機関法人自然科学研
究機構) 2005年.

B-6) 受賞、表彰

櫻井英博, 有機合成化学協会研究企画賞 (2002).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本化学会東海支部代議員 (2005-).

B-10) 外部獲得資金

奨励研究(A),「クロム錯体の特徴を利用した光触媒のデザインと立体選択的光反応の開発」, 櫻井英博 (1995年).

奨励研究(A),「アシルクロマト錯体を用いた有機合成反応の開発」, 櫻井英博 (1999年-2000年).

特定領域研究(A)(公募研究)「Pd(0)/Cr(CO)₆/CO系による効率的新規カルボニル化反応の開発」, 櫻井英博 (1999年).

科学技術振興調整費,「高度な光機能を発現する有機金属分子システムの創製」, 櫻井英博 (2002年-2003年).

若手研究(B),「金属カルベノイドの実用的発生法と精密有機合成への応用」, 櫻井英博 (2003年-2004年).

特定領域研究(公募研究)「動的カルベン錯体の設計と機能」, 櫻井英博 (2003年).

特定領域研究(公募研究)「ボウル型共役配位子を有する金属錯体の動的挙動と機能」, 櫻井英博 (2004年-2005年).

倉田奨励金,「触媒的1電子酸化反応系の構築」, 櫻井英博 (2000年).

ノバルティス科学振興財団,「アシル金属種を用いた新規合成手法の開発」, 櫻井英博 (2000年).

医薬資源研究振興会研究奨励,「還元反応の再構築: 金属亜鉛を用いた還元反応による多官能性化合物の選択的合成法の開発」, 櫻井英博 (2001年).

近畿地方発明センター研究助成,「ボウル型共役炭素化合物のテラーメイド合成」, 櫻井英博 (2002年).

徳山科学技術振興財団研究助成,「ヘテロフラレン合成を指向したボウル型共役化合物合成法の開発」, 櫻井英博 (2004年).

石川カーボン研究助成金,「バッキーボウル分子の一般的合成法の開発と物性評価」, 櫻井英博 (2004年).

旭硝子財団研究助成,「ヘテロフラレン合成を指向したバッキーボウル分子の自在合成」, 櫻井英博 (2005年-2006年).

住友財団基礎科学研究助成,「お椀型共役化合物「バッキーボウル」の自在合成」, 櫻井英博 (2005年).

C) 研究活動の課題と展望

研究室も2年目を迎え、新たにIMSフェローと大学院生が加わり、ようやく研究体制が整いつつある。今年度は大部分の時間を割いている合成研究に関わる設備の充実を中心に行い、少人数ながらも効率的で、大人数の大学グループにも充分に対抗できる合成環境が構築できたものと自負している。

佃グループとの共同研究による金ナノクラスター触媒の化学は順調に発展し、他大学との協力研究にまでつながってきている。今後は基礎・応用の両面で「いかに見せるか」が重要な課題である。

バッキーボウルの化学についても、グループメンバーの努力により、ようやく分子研発の新分子が生まれてきており、本分野もこれからは徐々に「見せる」段階に入ってくることを期待している。

新物質の評価のためには、最低限の物性を自身で測定する必要があるが、今後は合成機器から測定機器へ、設備投資をシフトしていく必要がある。

ナノ光計測研究部門

松 本 吉 泰 (教授) (2003 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：表面科学、分子分光学

A-2) 研究課題：

- a) 時間分解第二高調波発生による固体表面核波束ダイナミックスの研究
- b) 時間分解多光子光電子分光による有機半導体薄膜、および、有機半導体 / 金属界面における電子緩和・移動ダイナミックス
- c) 時間分解和周波分光における金属表面上での振動ダイナミックス
- d) チタニア表面での金ナノクラスターの構造と膜形成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 清浄な金属表面における光刺激脱離や多くの光化学反応が研究されてきたが、金属との相互作用による極めて迅速な電子緩和により、その量子効率はいささか小さい。したがって、大部分の電子励起状態にある吸着種は脱励起されるが、それに伴い吸着種内、あるいは、吸着種と表面間の振動が励起される。しかし、このような多くの吸着種がたどる振動励起状態とそのダイナミックスはこれまでほとんど研究されてこなかった。そこで、本研究課題では電子状態間の遷移に伴いどのように吸着種の振動がコヒーレントに励起でき(振動核波束の生成)、また、その振動核波束のダイナミックスをフェムト秒領域でのポンプ・プローブ表面第二高調波発生の実験により調べた。本年度はPt(111)表面に吸着したCsにおけるコヒーレント振動(Cs-Pt伸縮振動モード)の減衰挙動に関する温度、被覆率依存性を詳細に調べた。その結果、コヒーレント振動の位相緩和にはCsの横方向の低波数モードとの結合が重要であることを見出した。また、Csが(2×2)などの超構造をとる場合、非常に良く似た振動周波数を持つ成分が存在することを見出した。そこで、フェムト秒パルスを整形し、一連のパルス列を作りその時間間隔をちょうどどちらかの振動の周期にあわせたポンプ光により、この2つのモードのどちらかを選択的に励起することに成功した。さらに、コヒーレント励起のメカニズムを明らかにするために、密度汎関数法による第一原理量子化学計算を行い、コヒーレント振動励起に関与する電子状態について考察を行った。
- b) 有機半導体を用いたEL素子において、その薄膜中や金属との界面における電子移動や緩和がきわめて重要な素過程である。そこで、本研究課題では紫外光電子分光により有機半導体薄膜の占有電子状態を明らかにすると共に、フェムト秒時間分解多光子光電子分光により、励起状態の緩和過程を実時間で観測した。本年度は、有機LEDにおける発光層や電子輸送層として使われる代表的なAlq₃分子と金属表面との界面における電子移動ダイナミックスを研究し、電子移動に直接関与する単分子層におけるAlq₃分子の負イオン状態を同定することに成功した。また、時間分解2光子光電子分光の結果、この状態の寿命は31 fsというきわめて短寿命であることを見出した。次いで、TiO₂(110)表面に吸着したZnフタロシアニン薄膜の電子状態と電子移動ダイナミックスについての研究を行った。この結果、薄膜内の電子緩和ダイナミックスは薄膜の厚みに大きく依存することがわかった。また、界面での電子移動に比べて膜内にある分子間の電子移動はかなり遅く、チタニア基板への電子移動は、これと直接相互作用をしている吸着層第一層目のフタロシアニンが重要であることがわかった。

- c) 時間分解和周波分光装置を立ち上げ、これを用いた金属表面における振動緩和に関する研究を開始した。Pt(111)表面に吸着したCOの単分子層の上にさらに氷結晶をエピタキシャルに成長させた。可視光の励起パルスにより金属表面中の電子温度は急速に上昇し、このホット電子はCOの表面方向の低波数モードを励起する。この励起・脱励起のダイナミクスは和周波スペクトルにおけるCO伸縮振動モードのピーク形状の時間変化をモニターすることにより知ることができる。そこで、水分子と相互作用することにより、励起されたCOの振動エネルギーの散逸過程がどのように影響されるかを研究している。
- d) チタニア表面上の金ナノクラスターはバルクの金には見られない触媒反応を誘起することが知られている。しかし、そのメカニズムはまだよくわかっていない。そこで、チタニアの単結晶表面とサイズ選択されたチオレート保護基を持つ金ナノクラスターを用いて、この表面上での金ナノクラスターの膜形成、膜構造、酸素プラズマエッチングによる保護基除去の影響をXPSや走査型トンネル顕微鏡を用いて明らかにしようとしている。

B-1) 学術論文

- K. WATANABE, N. TAKAGI and Y. MATSUMOTO**, “Femtosecond Wavepacket Dynamics of Cs Adsorbates on Pt(111): Coverage and Temperature Dependences,” *Phys. Rev. B* **71**, 085414 (9 pages) (2005).
- D. INO, K. WATANABE, N. TAKAGI and Y. MATSUMOTO**, “The Electronic Structure and Femtosecond Electron Transfer Dynamics at Noble Metal/tris-(8-hydroxyquinoline) Aluminum Interfaces,” *Phys. Rev. B* **71**, 115427 (10 pages) (2005).
- K. WATANABE, N. TAKAGI and Y. MATSUMOTO**, “Mode Selective Excitation of Coherent Surface Phonons on Alkali-Covered Metal Surfaces,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7**, 2697–2700 (2005).
- O. NAKAGOE, K. WATANABE, N. TAKAGI and Y. MATSUMOTO**, “In-situ Observation of CO Oxidation on Ag(110) (2×1)-O by Scanning Tunneling Microscopy: Structural Fluctuation and Catalytic Activity,” *J. Phys. Chem. B* **109**, 14536–14543 (2005).
- D. INO, K. WATANABE, N. TAKAGI and Y. MATSUMOTO**, “Electron Transfer Dynamics from Organic Adsorbate to a Semiconductor Surface: Zinc-Phthalocyanine on TiO₂(110),” *J. Phys. Chem. B* **109**, 14536–14543 (2005).
- Y. MATSUMOTO, K. WATANABE and N. TAKAGI**, “Excitation Mechanism and Ultrafast Vibrational Wavepacket Dynamics of Alkali-Metal Atoms on Pt(111),” *Surf. Sci.* **593**, 110–115 (2005).

B-3)) 総説、著書

- 渡邊一也、松本吉泰、「コヒーレント表面フォノンの超高速ダイナミクス」, *応用物理* **74**, 1316–1321 (2005).
- 渡邊一也、松本吉泰、「フェムト秒時間分解第2高調波発生による表面吸着種の振動ダイナミクス」, *表面科学* **26**, 662–666 (2005).

B-4) 招待講演

- Y. MATSUMOTO**, “Coherent excitation and decay dynamics of vibrational wavepackets on metal surfaces,” International Quantum Electronics Conference 2005 and the Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics 2005 (IQEC and CLEO-PR), Tokyo (Japan), July 2005.

Y. MATSUMOTO and K. WATANABE, “Selective excitation of coherent vibrational motions of adsorbate on metal surfaces by tailored fs laser pulses,” International Symposium on Surface Science and Nanotechnology (ISSS-4), Omiya (Japan), November 2005.

Y. MATSUMOTO, “Excitation and ultrafast dephasing of coherent adsorbate-substrate vibration on metal surfaces,” 355th Wilhelm and Else Heraeus-Seminar on Ultrafast Dynamics of Collective Excitations in Solids, Vitte, Hiddensee islands (Germany), September 2005.

Y. MATSUMOTO, D. INO, K. WATANABE and N. TAKAGI, “Electron Transfer Dynamics at Interfaces between Organic Thin Films and Metals Studied by fs Time-resolved Two-photon Photoelectron Spectroscopy,” 2005 MRS Fall Meeting, Boston (U.S.A.), November 2005.

Y. MATSUMOTO, M. FUYUKI, D. INO, K. WATANABE and N. TAKAGI, “Excitation mechanism and ultrafast relaxation dynamics of coherent vibrational modes at the metal surfaces covered with alkali-metal atoms,” Pacificchem 2005, Honolulu (U.S.A.), December 2005.

B-6) 受賞、表彰

Hanse Wissenschaftskolleg (Fellow of Hanse Institute for Advanced Studies), Germany (2002).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本化学会東海支部代議員 (1993-1994).

学会の組織委員

第1回 日米分子科学若手ワークショップ 組織代表者 (1991).

第8回 化学反応討論会 プログラム委員 (1992).

第51回 岡崎コンファレンス 組織委員 (1994).

分子研研究会「分子 - 表面ダイナミクス」 組織委員 (1995).

大阪大学50周年記念シンポジウム「固体表面動的過程」 組織委員 (1995).

IMS International Conference 組織委員 (1997).

分子構造総合討論会 プログラム委員 (1997).

Ninth International Conference on Vibrations at Surfaces 組織委員 (1997).

2000環太平洋国際化学会議 組織委員 (2000).

第2回表面エレクトロニクス研究会 実行委員長 (2000).

第2回分子科学研究会シンポジウム 組織委員 (2003).

10th International Workshop on Desorption Induced Electronic Transition プログラム委員 (2004).

分子構造総合討論会運営委員会 幹事 (2004-).

5th Symposium on Ultrafast Surface Dynamics 実行委員長 (2004-).

The tenth ISSP International Symposium (ISSP-10) on Nanoscience at Surfaces 組織委員 (2005-).

分子科学研究会 幹事 (2005-).

第22回化学反応討論会実行委員長 (2005-).

文部科学省、学術振興会等の役員等

日本学術振興会学術参与 (1999-2004).

科学技術・学術審議会学術分科会科学研究費補助金審査部会理工系委員会委員 (2003-2005).

科学研究費の研究代表者、班長等

総合研究大学院大学グループ研究「光科学の新展開」研究代表 (1997-1999).

その他

総合研究大学院大学光科学専攻長 (1999-2001).

総合研究大学院大学先導科学研究科科長 (2001-2005).

B-10) 外部獲得資金

基盤研究(A)(2), 「表面ナノ構造物質を用いた反応制御」, 松本吉泰 (1999年-2001年).

特別研究員奨励費, 「金属表面上の自己組織化膜におけるフェムト秒電子移動ダイナミクス」, 松本吉泰 (2001年-2002年).

基盤研究(B)(2), 「表面光反応の2次元サブナノマッピング」, 松本吉泰 (2002年-2003年).

特定領域研究(A)(2), 「金属酸化物単結晶・色素吸着系における電子ダイナミクス」, 松本吉泰 (2001年-2004年).

特定領域研究(A)(2), 「チタニア表面上での金ナノ構造物質の電子状態と電子ダイナミクス」, 松本吉泰 (2005年-2006年).

基盤研究(S), 「時空間マッピングによる固体表面反応機構の解明」, 松本吉泰 (2005年-2010年).

C) 研究活動の課題と展望

表面科学反応研究としては「固体表面上でのレーザー誘起反応ダイナミクス」の研究課題のもとで金属や半導体の清浄表面に吸着した分子種の光誘起過程に関する研究に従事してきた。これをさらに発展させる方向で 2光子光電子分光、表面第2高調波発生などの非線形分光により固体表面における超高速現象の解明、表面コヒーレントフォノンの実時間観測と制御など、新しい観点から光誘起過程の機構と動的挙動に関する分子論的な理解を深めることに研究の主眼を置いている。また、原子・分子レベルの分解能を持つ走査型トンネル顕微鏡による実空間観測により、吸着種の幾何学的構造と固体表面における反応の空間・時間発展を明らかにすることも主要な研究課題の一つである。今後は、化学種を識別する能力を持った時間・空間分解スペクトロスコープやマイクロスコープの手法を新たに開発し、不均一反応の根源的な理解を促進する。

佃 達 哉 (助教授)(2000 年 1 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：物理化学、クラスター科学

A-2) 研究課題：

- a) 有機保護金属クラスターの精密合成と構造評価
- b) 擬均一系金クラスターの触媒機能の探索・解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 原子・分子レベルで組成が規定されたチオール保護金クラスターを系統的かつ大量に合成し、それらの基本的な構造・物性と組成の相関を明らかにすることを目指している。
- a1) チオール保護金クラスターの安定性はチオールの分子骨格による影響を受けるため、単離されたコアサイズは必ずしも共通した原子数列をとらない。これに対して、 $\text{Au}_{25}(\text{SR})_{18}$ という組成を持つクラスターは、チオールの種類によらず高い安定性を示し、主生成物として生成することを見いだした。
- a2) 金クラスターのホスフィン配位子をチオールに交換する際に、 $\text{Au}_{25}(\text{SR})_{18}$ が選択的に得られることを見いだした。この選択性は、 $\text{Au}_{25}(\text{SR})_{18}$ がチオールによるエッチング反応に対して高い耐性を持つためであり、これを利用することにより大量の(100 mg 程度) $\text{Au}_{25}(\text{SR})_{18}$ を合成することが可能となった。
- a3) SPring8などの放射光施設を利用して、金クラスターの幾何構造のサイズ依存性や金クラスターの磁性に対する表面被覆の効果に関する測定を行った。
- b) 擬均一系金クラスターの触媒作用の基本原理を理解し、さらには機能性有機分子との複合化によって新たな機能をもつナノ触媒の創製を目指している。
- b1) 水溶性ポリマー PVP で安定化された金ナノ粒子を 1.3~9.5 nm の領域でサイズ選択的に調製し、水中におけるアルコール酸化触媒作用に対する活性を比較した。その結果、サイズが小さいほど活性が高くなることを見いだした。これは、微小金クラスターのみが酸素分子を活性化することによるものであると考えられる。
- b2) チオール化されたシクロデキストリンで保護された金クラスターを合成した。直径 1 nm のクラスターには 2 分子のシクロデキストリンが吸着しており、その分子認識能を利用して、1 次元鎖構造を自己組織的に形成することに成功した。

B-1) 学術論文

Y. NEGISHI, K. NOBUSADA and T. TSUKUDA, "Glutathione-Protected Gold Clusters Revisited: Bridging the Gap between Gold(I)-Thiolate Complexes and Thiolate-Protected Gold Nanocrystals," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 5261–5270 (2005).

H. TSUNOYAMA, H. SAKURAI, Y. NEGISHI and T. TSUKUDA, "Size-Specific Catalytic Activity of Polymer-Stabilized Gold Nanoclusters for Aerobic Alcohol Oxidation in Water," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 9374–9375 (2005).

Y. SHICHIBU, Y. NEGISHI, T. TSUKUDA and T. TERANISHI, "Large-Scale Synthesis of Thiolated Au_{25} Clusters via Ligand Exchange Reactions of Phosphine-Stabilized Au_{11} Clusters," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 13464–13465 (2005).

Y. NEGISHI, H. TSUNOYAMA, Y. YANAGIMOTO and T. TSUKUDA, "Subnanometer-Sized Gold Clusters with Dual Molecular Receptors: Synthesis and Assembly in One-Dimensional Arrangements," *Chem. Lett.* **34**, 1638–1639 (2005).

B-3) 総説、著書

佃 達哉, 「表面修飾された金属ナノクラスターの化学的調製法と機能」, ナノマテリアルハンドブック, 国武豊喜監修, NTS, 320-24 (2005).

B-4) 招待講演

T. TSUKUDA, "Thiolated Gold Clusters: Bridging the Gap between Gold(I)-Thiolate Complexes and Thiolate-Protected Gold Nanocrystals," Optical Probes 2005, Bangalore (India), January 2005.

T. TSUKUDA, "Structures, Stabilities and Reactivities of Size-Selected Gold Clusters Encapsulated in Organic Shells," 11th Japan-Korea Joint Symposium on Frontiers in Molecular Science, Okazaki (Japan), March 2005.

佃 達哉, 「有機・金クラスター複合体のサイズ選択的合成と構造・反応性」, 21世紀COE京都大学化学連携教育研究拠点「化学研究所第2回有機元素化学セミナー」, 京都, 2005年3月.

佃 達哉, 「コアシェル型有機金クラスターの精密合成と構造・機能解析」, 2005年度第2回神戸大学VBLナノフォトリック技術セミナー, 神戸, 2005年7月.

佃 達哉, 「ナノマテリアルにおける階層構造の制御と機能発現」, 連携サマースクール, 湯河原, 2005年7月.

佃 達哉, 「組成制御されたチオラート保護金クラスターの安定性と電子構造」, 分子スピニンポジウム「金ナノ粒子勉強会」, 岡崎, 2005年8月.

佃 達哉, 「金属クラスター・金属ナノ粒子研究の基礎と最前線」, 第45回分子科学若手の会夏の学校, 滋賀県高島郡, 2005年8月.

根岸雄一, 「チオール単分子膜で保護された金クラスターの化学組成と安定性」, 第58回コロイドおよび界面化学討論会, 宇都宮, 2005年9月.

佃 達哉, 「コアシェル型有機金クラスターの精密系統合成と構造・機能解析」, 中央大学第5回ナノテク金曜コロキウム, 東京, 2005年10月.

佃 達哉, 「金ナノクラスターの空気酸化触媒作用に対するサイズ効果」, 分子研研究会「未来型分子触媒の創製」, 岡崎, 2005年12月.

佃 達哉, 「組成規定された有機分子保護金クラスターの基礎物性と機能」, 第49回イオン反応研究会「荷電ナノ物質の新展開」, 名古屋, 2005年12月.

T. TSUKUDA, "Size-Specific Catalytic Activity of Gold Nanoclusters Encapsulated in Organic Shells," PACIFICHEM 2005, Honolulu (U.S.A.), December 2005.

T. TSUKUDA, "Isolation and Characterization of Glutathione-Protected Gold Clusters: Evolution from Gold(I)-Thiolated Complexes to Thiolate-Protected Gold Nanocrystals," PACIFICHEM 2005, Honolulu (U.S.A.), December 2005.

B-5) 特許出願

特願2005-234252, 「Au₂₅クラスターの選択的大量合成方法」, 七分勇勝、根岸雄一、佃 達哉、寺西利治(筑波大学), 2005年.

B-6) 受賞、表彰

佃 達哉, 第11回井上研究奨励賞 (1995).

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本化学会東海支部代議員 (2003-2004).

電気学会光・量子場ナノ科学応用技術調査専門委員会委員 (2005-).

学会の組織委員

第13回日本MRS学術シンポジウムセッションチェアー (2001).

第16回日本MRS学術シンポジウムセッションチェアー (2005).

文部科学省、学術振興会等の役員等

文部科学省学術調査官 (2005-).

学会誌編集委員

「ナノ学会会報」編集委員 (2003-2004).

B-10) 外部獲得資金

第7回貴金属に関わる研究助成金制度MMS賞, 佃 達哉 (2005年).

第7回井上フェロー採用, 「機能性有機分子と金クラスター複合化によるナノ反応場の精密構築」, 佃 達哉 (2005年-2007年).

基盤研究(C)(2), 「単分子膜保護金属サブナノクラスターの電子状態と発光メカニズム」, 佃 達哉 (2004年-2005年).

住友財団研究助成, 「有機・金ナノクラスター複合体の精密合成と触媒機能の探索」, 佃 達哉 (2004年).

総研大共同研究, 「有機・無機ナノ粒子複合体の構造と機能」, 佃 達哉 (2002年-2004年).

若手研究(B), 「化合物半導体クラスターにおける量子現象の解明——単分散したクラスターの合成法の利用」, 根岸雄一 (2002年-2004年).

奨励研究(A), 「分子クラスター負イオンの電子構造と化学反応過程」, 佃 達哉 (1998年-1999年).

奨励研究(A), 「分子クラスター表面における光誘起反応のダイナミクスに関する研究」, 佃 達哉 (1997年).

C) 研究活動の課題と展望

助手の根岸 ポスドクの角山に加えて、新たにポスドクの柳本, Chaki 技術補佐員の甲斐の計3名を迎え入れることができた。また、所内の櫻井, 信定, 松本, 横山グループをはじめとする国内外の研究者との共同研究も順調に進んでいる。チオール保護金属クラスターの構造・安定性・物性に関して様々な測定を行ったので、系統的な理解が得られるものと期待している。また、単結晶X線構造解析によるチオール保護金クラスターの構造決定に挑戦したい。一方、触媒機能に関しては、有機分子の特徴を生かした金クラスターの高機能化とともに、金クラスター表面での反応機構を明らかにするためのモデル触媒の創製にも取り組みたい。

先導分子科学研究部門（客員・流動研究部門）

加 藤 晃 一（教授）（2004 年 10 月 16 日着任）＊）

A-1) 専門領域：NMR 構造生物学、糖鎖構造生物学

A-2) 研究課題：

- a) 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
- b) NMR を利用した生体高分子の相互作用と内部運動の解析
- c) 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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 高等生物を構成するタンパク質の多くは糖鎖修飾を受けた糖タンパク質として存在している。しかしながら、糖鎖由来の NMR シグナルは一般にスペクトル上での重なり合いが激しくこれまで解析が困難であった。そのために、本グループではこれまで糖タンパク質の安定同位体標識法の確立を行ってきた。また NMR 測定では高い磁場を用いれば、高い分解能と感度上昇を期待できる。安定同位体標識 (^{13}C , ^{15}N , ^2H) を施した IgG の Fc 領域を対象として超高磁場 NMR 装置により各種多次元 NMR を測定した。その結果 Fc のポリペプチド主鎖・糖鎖に由来するシグナルを高い分解能と感度で観測することに成功した。また、超高磁場 NMR 装置は“natively unfolded protein”とよばれる、特定の高次構造を形成していない試料に対しても有効である。natively unfolded protein である α -synuclein は NMR シグナルの重なりが激しく解析が困難であったが、超高磁場 NMR 装置の世界最高分解能を積極的に活用することによりシグナルが分離して観測され、帰属が著しく容易となった。
- b) 920 MHz 超高磁場 NMR 装置を用いて高マンノース型糖鎖 ($\text{Man}_9\text{GlcNAc}_2$) と細胞内レクチン (VIP36) の相互作用解析を行った。 $\text{Man}_9\text{GlcNAc}_2$ の Man-D1, Man-D2, Man-D3 に由来するアノメリックシグナルは 500 MHz の NMR 装置ではシグナルは重なっていたが、920 MHz の超高磁場 NMR スペクトルでは完全に分離して観測された。 $\text{Man}_9\text{GlcNAc}_2$ に VIP36 を添加していったところ、Man-4, Man-C, Man-D1 に由来するシグナルに選択的なシグナルの広幅化が観測された。これらのシグナルは $\text{Man}_9\text{GlcNAc}_2$ の D1 アームに由来することから、VIP36 は高マンノース型糖鎖の主に D1 アームを認識して結合することが明らかとなった。また多ドメインタンパク質のドメイン間相互作用を明らかにするために、残余双極子相互作用によるドメインの相対配置の決定を試みた。残余双極子カップリング (RDC) 値は通常数 Hz と小さな値であるが、このパラメータは磁場に依存し、超高磁場での観測は有効である。マルチドメインタンパク質であるプロテインジスルフィドイソメラーゼ (PDI) の $b'a'$ ドメインを対象に、バイセルやファージなどの配向媒体を用いて残余双極子カップリング値を求めることに成功した。活性部位の酸化還元状態によって、RDC 値が変化することより、そのドメイン配置が大きく変化することが明らかとなった。
- c) 水に不溶性の生体高分子は、溶液 NMR 法が適用できない。固体 NMR はこのような試料の構造解析に対して威力を発揮する。今年度は固体測定のためのハード・ソフト両面のセットアップが完了し、 β -グルカンのような多糖をモデル化合物として、 CP-MAS , MAS-J-HMQC , HETCOR などの測定を感度よく行うことに成功した。

B-1) 学術論文

S. SEKIYA, Y. YAMAGUCHI, K. KATO and K. TANAKA, “Mechanistic Elucidation of the Formation of Reduced 2-Aminopyridine Derivatized Oligosaccharides and Their Application in Matrix-Assisted Laser Desorption/Ionization Mass Spectrometry,” *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **19**, 3607–3611 (2005).

T. INADA, T. TERABAYASHI, Y. YAMAGUCHI, K. KATO and K. KIKUCHI, “Modulation of the Catalytic Mechanism of Hen Egg White Lysozyme (HEWL) by Photochromism of Azobenzene,” *J. Photochem. Photobiol. A* **175**, 100–107 (2005).

Y. KAMIYA, Y. YAMAGUCHI, N. TAKAHASHI, Y. ARATA, K. KASAI, Y. IHARA, I. MATSUO, Y. ITO, K. YAMAMOTO and K. KATO, “Sugar-Binding Properties of VIP36, an Intracellular Animal Lectin Operating as a Cargo Receptor,” *J. Biol. Chem.* **280**, 37178–37182 (2005).

M. AKUTSU, M. KAWASAKI, Y. KATOH, T. SHIBA, Y. YAMAGUCHI, R. KATO, K. KATO, K. NAKAYAMA and S. WAKATSUKI, “Structural Basis for Recognition of Ubiquitinated Cargo by Tom1-GAT Domain,” *FEBS Lett.* **579**, 5385–5391 (2005).

H. YAGI, N. TAKAHASHI, Y. YAMAGUCHI, N. KIMURA, K. UCHIMURA, R. KANNAGI and K. KATO, “Development of Structural Analysis of Sulfated N-Glycans by Multi-Dimensional HPLC Mapping Methods,” *Glycobiology* **15**, 1051–1060 (2005).

M. NAKASAKO, T. OKA, M. MASHUMO, H. TAKAHASHI, I. SHIMADA, Y. YAMAGUCHI, K. KATO and Y. ARATA, “Conformational Dynamics of Complementarity-Determining Region H3 of an Anti-Dansyl Fv Fragment in the Presence of Its Hapten,” *J. Mol. Biol.* **351**, 627–640 (2005).

M. KAWASAKI, T. SHIBA, Y. SHIBA, Y. YAMAGUCHI, N. MATSUGAKI, N. IGARASHI, M. SUZUKI, R. KATO, K. KATO, K. NAKAYAMA and S. WAKATSUKI, “Molecular Mechanism of Ubiquitin Recognition by GGA3 GAT Domain,” *Genes Cells* **10**, 639–654 (2005).

T. KIMURA, K. IMAISHI, Y. HAGIWARA, T. HORIBE, T. HAYANO, N. TAKAHASHI, R. URADE, K. KATO and M. KIKUCHI, “ERp57 Binds Competitively to Protein Disulfide Isomerase and Calreticulin,” *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **331**, 224–230 (2005).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. KATO, Y. YAMAGUCHI, T. HIRAO, T. SUZUKI, Y. YOSHIDA and K. TANAKA, “NMR structural biology of sugar-recognizing ubiquitin ligase involved in glycoprotein degradation,” *Glycoconjugate J.* **22**, 218–219 (2005).

Y. KAMIYA, H. TSUKAKOSHI, Y. YAMAGUCHI, N. TAKAHASHI, Y. ARATA, K. KASAI, Y. IHARA, I. MATSUO, Y. ITO, K. YAMAMOTO and K. KATO, “Sugar-binding, properties of VIP36, an intracellular animal lectin operating as a cargo receptor,” *Glycoconjugate J.* **22**, 217 (2005).

H. IWASE, N. TAKAHASHI, K. KATO, A. ITOH, T. TAKATANI, N. IWANAMI and Y. HIKI, “Glycoform of N-linked oligosaccharide of tonsillar IgA1, and aberrant IgA1 prepared from the serum by asialo-, agalacto-IgA1-sepharose column and their involvement in IgA nephropathy,” *Glycoconjugate J.* **22**, 360–361 (2005).

B-3) 総説、著書

- 加藤晃一,「NMRによる糖鎖構造解析」, 未来を拓く糖鎖科学, 金芳堂, 24-25 (2005).
- 加藤晃一,「NMRによる糖タンパク質の立体構造解析」, 未来を拓く糖鎖科学, 金芳堂, 62-63 (2005).
- 加藤晃一、高橋禮子,「GALAXY:糖鎖構造解析支援ウェブアプリケーション」, 未来を拓く糖鎖科学, 金芳堂, 423-424 (2005).
- 加藤晃一、坂田絵理、大隅良典,「細胞内タンパク質分解」, タンパク質科学 構造・物性・機能, 化学同人, 第12章, 531-544 (2005).
- 山口芳樹、矢木宏和、加藤晃一,「MSを用いた糖鎖構造解析」, ファルマシア 41, 1065-1069 (2005).
- 神谷由紀子、山口芳樹、加藤晃一,「NMRを利用した糖鎖構造生物学」, 糖鎖科学の新展開, NTS, 76-83 (2005).
- 加藤晃一、高橋禮子,「糖鎖構造解析を支援するためのウェブアプリケーション“ GALAXY ”」, バイオデータベース利用法 検索からバイオインフォマティクスへ, 学進出版, 117-129 (2005).
- 栗本英治、鈴木麻衣子、加藤晃一,「バイオテクノロジーによる味覚修飾タンパク質クルクリンの産生と甘味料としての応用」, 化学と工業 58, 838-840 (2005).

B-4) 招待講演

- K. KATO**, “NMR and Sugar Library in Glycomics,” 特定領域研究「糖鎖によるタンパク質と分子複合体の機能調節」第3回公開シンポジウム, Tokyo (Japan), January 2005.
- K. KATO**, “NMR Structural Biology of Glycoproteins,” Strategies for the acquirement of functional diversity of proteins, Tokyo (Japan), January 2005.
- 加藤晃一,「NMR構造生物学とグライコミクス」, 第1回21世紀COE若手研究者研究討論会, 京都, 2005年3月.
- 加藤晃一,「NMRを利用した構造グライコミクス」, 文部科学省ナノテクノロジー総合支援プロジェクト成果発表会「分子・物質に視点をのいたナノテクノロジー・ナノサイエンスIII」, 岡崎, 2005年3月.
- 加藤晃一,「NMRと糖鎖ライブラリーを利用した構造糖鎖生物学」, よこはまNMR構造生物学会 甲斐荘先生退官記念講演会, 横浜, 2005年3月.
- 加藤晃一、山口芳樹、高橋禮子,「NMRと糖鎖ライブラリーを利用した構造グライコミクスへのアプローチ」, 日本薬学会第125年会, 東京, 2005年3月.
- K. KATO, Y. YAMAGUCHI, Y. KAMIYA, T. HIRAO, H. YAGI and N. TAKAHASHI**, “NMR structural biology of glycoproteins: Structures, dynamics, and interactions,” 2nd Workshop the Netherlands-Japan, Utrecht (The Netherlands), April 2005.
- 加藤晃一、坂田絵理、住吉 晃、内海真穂、山口芳樹,「神経変性疾患のNMR構造生物学」, 特定領域研究「病態脳」夏のワークショップ, 長野, 2005年8月.
- 加藤晃一,「Carbohydrate-protein interactions probed by NMR and sugar library」, 第78回日本生化学会大会, 神戸, 2005年10月.
- 加藤晃一、坂田絵理、住吉 晃、内海真穂、山口芳樹,「神経変性疾患にかかわるタンパク質のかたち」, 第14回日本バイオイメージング学会学術集会, 東京, 2005年10月.
- K. KATO**, “NMR and Sugar Library approaches to protein sociology,” International Symposium on Life of Proteins, Awaji (Japan), October-November 2005.
- 加藤晃一,「NMRを利用した構造グライコミクス」, 第3回糖鎖科学コンソーシアム, 東京, 2005年12月.

加藤晃一、鈴木麻衣子、栗本英治、「味覚修飾タンパク質クルクリンの構造・機能解析」, 第42回植物化学シンポジウム, 名古屋, 2005年12月.

B-5) 特許出願

特願2004-28323, 「糖鎖の選択的末端糖残基同位体標識法」, 加藤晃一、高橋禮子、山口芳樹(株)島津製作所、(株)グライエンス) 2004年.

特願2004-28324, 「糖鎖構造解析手法」, 岩本慎一、関谷禎規、田中耕一、加藤晃一、高橋禮子、山口芳樹(株)島津製作所) 2004年.

特願2004-28688, 「新規甘味タンパク質及びその製法」, 加藤晃一、栗本英治、栗原良枝、葦沢悟、鈴木榮一郎、榛葉信久(味の素(株)) 2004年.

特願2005-167015, 「アミノピリジン標識糖鎖の質量分析法」, 関谷禎規、田中耕一、加藤晃一、山口芳樹(株)島津製作所) 2005年.

B-6) 受賞、表彰

加藤晃一, 日本薬学会奨励賞 (2000).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本バイオイメーjing学会 評議員 (1995-).

日本生化学学会 評議員 (2002-).

日本糖質学会 評議員 (2003-).

その他

株式会社グライエンス 科学技術顧問 (2004-2005).

株式会社グライエンス 取締役 (2005-).

B-8) 他大学での講義、客員

名古屋大学大学院生命農学研究科, 生命技術科学特別講義, 「NMR構造生物学:基礎と応用」, 2005年1月13-14日.

名古屋大学大学院工学研究科, バイオマテリアル基礎論, 「NMR構造生物学の基礎と応用」, 2005年6月10日.

東京理科大学大学院, 生物有機化学特論, 「グライコミクスとNMR構造生物学」, 2005年10月28日.

B-10) 外部獲得資金

基盤研究(C)(2), 「NMR情報に基づく免疫グロブリンFcレセプターの分子認識とシグナル伝達機構の解明」, 加藤晃一 (1997年-1998年).

持田記念医学薬学振興財団研究助成金, 「NMR情報に基いた免疫グロブリンFc領域におけるタンパク質間相互作用メカニズムの解明と制御」, 加藤晃一 (2000年).

医科学応用研究財団研究助成金, 「尿路結石マトリクスを構成する糖タンパク質オステオポンチンの分子構造と生活習慣病の病態との相関の解析」, 加藤晃一 (2000年).

武田科学振興財団 薬学系研究奨励金,「構造生物学的アプローチによる免疫系複合糖質の立体構造形成と分子認識機構の解析」,加藤晃一 (2001年).

山田科学振興財団 研究援助金,「糖タンパク質の立体構造形成および分子認識機構の構造生物学的解析」,加藤晃一 (2001年).

島津科学技術振興財団研究開発助成金,「生体分子間相互作用および生体超分子の計測を指向したエレクトロスプレーイオン化質量分析装置の開発」,加藤晃一 (2001年).

内藤記念科学振興財団研究助成金,「多機能型シャペロン・カルレチキュリンの分子認識機構の解明」,加藤晃一 (2001年).

財団法人病態代謝研究会研究助成金,「神経変性疾患に関与する細胞内タンパク質品質管理システムの構造生物学的研究」,加藤晃一 (2001年).

名古屋市立大学特別研究奨励費,「NMRを利用したオステオポンチンの分子構造解析」,加藤晃一 (2001年).

基盤研究(B),「免疫系で機能する複合糖質の立体構造形成と分子認識機構に関する構造生物学的研究」,加藤晃一 (2001年-2002年).

(財)氷谷糖質科学振興財団研究助成金,「NMRを利用した糖タンパク質の機能発現メカニズムの解析」,加藤晃一 (2002年).

特定領域研究「タンパク質の一生」,「タンパク質社会における糖鎖の機能解明を目指したNMR構造生物学」,加藤晃一 (2003年-2004年).

特定領域研究「ゲノム情報科学」,「糖タンパク質の構造グライコミクスを展開するためのデータベース構築」,加藤晃一 (2003年-2004年).

財団法人科学技術交流財団,「糖鎖科学名古屋拠点研究会」,加藤晃一 (2003年-2004年).

(独)科学技術振興機構(プラザ育成研究調査),「糖鎖ライブラリーを活用したグライコミクス解析システムの開発」,加藤晃一 (2004年).

経済産業省中部経済産業局(地域新生コンソーシアム研究開発事業),「糖鎖ライブラリーを活用した新規マイクロアレーの開発」,加藤晃一 (2004年-2005年).

特定非営利活動法人バイオものづくり中部,「糖鎖分科会」,加藤晃一 (2005年).

特定領域研究「グライコミクス」,「NMRを利用した構造グライコミクス」,加藤晃一 (2005年-2006年).

萌芽研究,「味覚修飾タンパク質クルクリンの機能発現メカニズムの解明と応用」,加藤晃一 (2005年-2006年).

C) 研究活動の課題と展望

超高磁場NMR装置にて威力を発揮するTROSY法と重水素デカップルを組み合わせた3重共鳴測定が可能となるように整備を進める。また、超高磁場NMR測定の際の効率的な水由来のシグナル消去法を開発する。さらに、固体NMR法により不均一系・凝集系に対して解析を行うことを計画している。

* 本務は名古屋市立大学大学院薬学研究科教授

高 橋 正 彦 (助教授)(2003 年 4 月 1 日 ~ 2005 年 3 月 31 日)^{*}

A-1) 専門領域：分光学、原子分子物理

A-2) 研究課題：

- a) 電子運動量分光による電子構造の研究
- b) 配向分子の電子運動量分光の開発による分子軌道の可視化と電子 - 分子衝突の立体ダイナミクス
- c) 配向分子の光電子角度分布による光イオン化ダイナミクスの研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 分子軌道は今や物質科学から生命科学に亘る自然科学の広範な分野で基礎的概念である。その理由の一つは、福井謙一先生のフロンティア軌道理論が端的に示すように、反応性など分子の性質の多くが分子の外側に大きく広がった価電子軌道の形によって決まることであろう。そうした分子軌道の形そのものを観測しようとする実験的試みの一つに、歴史的に有名な電子線コンプトン散乱実験の発展形である、電子運動量分光がある。我々は画像観測法を応用した装置の開発を行い、検出効率を数桁改善することに成功した。この成果を踏まえて、従来は困難であった、軌道の曖昧さの無い帰属や pole strength (spectroscopic factor) 分布など幾つかの課題へ本分光を応用してきた。
- b) 分子軌道毎の波動関数形測定というユニークな特質がありながら、電子運動量分光の分子科学への応用は未だ定性的段階に止まる。その最大の原因は、対象とする気相分子の空間的ランダム配向により、実験結果が空間平均したものになってしまうことである。この実験的困難を克服するため、我々は、電子運動量分光過程で生成する非弾性散乱電子、電離電子、解離イオンの3つの荷電粒子間のベクトル相関の測定を行う装置を開発し、配向分子の電子運動量分光を世界に先駆けて可能とした。これにより、分子軌道の三次元観測とその物理的基礎をなす電子 - 分子衝突の立体ダイナミクスの研究を進めている。
- c) 電子衝突と相補的な光衝突実験を、主として物構研グループと共同で行っている。振動構造を分離した配向分子の光電子角度分布の測定など、光イオン化ダイナミクスのより詳細な研究を進めている。

B-1) 学術論文

N. WATANABE, Y. KHAJURIA, M. TAKAHASHI and Y. UDAGAWA, "Electron Momentum Spectroscopy of Valence Satellites of Neon," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **142**, 325–334 (2005).

A. V. GOLOVIN, J. ADACHI, S. MOTOKI, M. TAKAHASHI and A. YAGISHITA, "Inner-Shell Photoelectron Angular Distributions from Fixed-in-Space OCS Molecules," *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **38**, L63–L68 (2005).

M. EHARA, Y. OHTUSKA, H. NAKATSUJI, M. TAKAHASHI and Y. UDAGAWA, "Theoretical Fine Spectroscopy with SAC-CI Method: Outer- and Inner-Valence Ionization Spectra of Furan, Pyrrole, and Thiophene," *J. Chem. Phys.* **122**, 234319 (10 pages) (2005).

M. TAKAHASHI, N. WATANABE, Y. KHAJURIA, Y. UDAGAWA and J. H. D. ELAND, "Observation of a Molecular Frame (e,2e) Cross Section: An (e,2e+M) Triple Coincidence Study on H₂," *Phys. Rev. Lett.* **94**, 213202 (4 pages) (2005).

A. V. GOLOVIN, J. ADACHI, S. MOTOKI, M. TAKAHASHI and A. YAGISHITA, “Inner-Shell Photoelectron Angular Distributions from Fixed-in-Space OCS Molecules: Comparison between Experiment and Theory,” *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **38**, 3755–3764 (2005).

N. WATANABE, Y. KHAJURIA, M. TAKAHASHI, Y. UDAGAWA, P. S. VINITSKY, YU. V. POPOV, O. CHULUUNBAATAR and K. A. KOZAKOV, “(e,2e) and (e,3-1e) Studies on Double Processes of He at Large Momentum Transfer,” *Phys. Rev. A* **72**, 32705 (11 pages) (2005).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

M. TAKAHASHI, T. SAITO and Y. UDAGAWA, “An Investigation of the Two Outermost Orbitals of Glyoxal and Biacetyl by Electron Momentum Spectroscopy,” in “*Electron Scattering from Atoms, Molecules, Nuclei and Bulk Matter*,” C. T. Whelan and N. J. Mason, Eds., Kluwer Academic/Plenum Publishers; New York, 265–278 (2005).

B-3) 総説、著書

高橋正彦, 「物理科学、この一年」『原子・分子物理』, *パリティ* **20**, 6–8 (2005).

高橋正彦, 「荷電粒子の検出」, 第5版実験化学講座10「物質の構造II 分光 下」, 日本化学会編, 丸善, 315–320 (2005).

B-4) 招待講演

M. TAKAHASHI, “(e,2e) Experiments with Spherically-Averaged and Fixed-in-Space H₂ Molecules,” International Symposium on Analysis and Control of Molecular Quantum Processes, Tohoku University (Japan), July 2005.

M. TAKAHASHI, “(e,2e) Experiments with Randomly Oriented and Fixed-in-Space H₂ Molecules,” XXIV International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Rosario (Argentina), July 2005.

M. TAKAHASHI, “Probing Electron Momentum Densities of Molecular Orbitals Using New Multichannel (e,2e) Spectrometers,” The 14th International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, Campinas (Brasil), July 2005.

N. WATANABE, Y. KHAJURIA, M. TAKAHASHI, Y. UDAGAWA, P. S. VINITSKY, YU. V. POPOV, O. CHULUUNBAATAR and K. A. KOZAKOV, “(e,3–1e) Study on Double Ionization of He at Large Momentum Transfer,” The 13th International Symposium on Polarization and Correlation in Electronic and Atomic Collisions and the International Symposium on (e,2e), Double Photoionization and Related Topics, Buenos Aires (Argentina), July 2005.

M. TAKAHASHI, “Coincidence Imaging Study on (e,2e) Reaction Dynamics of H₂ at Large Momentum Transfer,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2005), The #186 Symposium “Imaging Probes of Spectroscopy and Dynamics,” Honolulu (U.S.A.), December 2005.

高橋正彦, 「電子線コンプトン散乱で見る電子構造と衝突ダイナミクス」, 第768回分子研コロキウム, 分子科学研究所, 2005年2月.

高橋正彦, 「電子線で見る衝突立体ダイナミクス」, 第1回「粒子相関と配向・偏極で探る有限量子系のダイナミクス」研究会, 高エネルギー加速器研究機構, 2005年6月.

高橋正彦, 「電子線コンプトン散乱で見る分子軌道: 配向分子の電子運動量分光の現状と展望」, 第3回計測フロンティア研究部門セミナー「波動関数(電子オービタル)をみる計測技術の展開」, 産業技術総合研究所, 2005年11月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

原子衝突研究協会, 企画委員 (1998-).

原子衝突研究協会, 補充委員 (2002-).

学会の組織委員

分子研研究会「光、電子および重粒子衝突ダイナミクスの現状と展望」主催者 (2002).

International Symposium on (e,2e), Double Photoionization and Related Topics (Buenos Aires, Argentina, 2005), International Advisory Committee.

International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC), General Committee (2005-2008).

International Symposium on (e,2e), Double Photoionization and Related Topics (Roma, Italy, 2006), International Scientific Committee.

学会誌編集委員

Special Issue of J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. (Vol. 142, 2005), “Recent Advances in Electron Spectroscopy of Atoms and Molecules,” Guest Editor.

その他

出前授業, 「光と原子・分子の世界」, 仙台市立金剛沢小学校, 2001年9月.

原子衝突セミナー講師, 「電子オービタルを見る: 電子運動量分光の現状と展望」, 東工大, 2002年4月.

分子科学若手の会夏の学校講師, 「電子運動量分光で見る電子構造と衝突ダイナミクス」, 飯坂温泉, 2003年8月.

雑誌「パリティ」20周年記念号「物理科学、この20年」, 「原子・分子」分野編者 (2005).

B-8) 他大学での講義、客員

Tsinghua University, 「(e,2e) Ionization-Excitation of H₂」, Beijing (China), 2004年3月.

物質材料科学研究所, 客員研究員, 2003年-2004年.

B-10) 外部獲得資金

文部省長期在外若手研究員, 「同時計測画像観測法の開発と光電子・解離イオンのベクトル相関の研究」, 高橋正彦 (1997年-1998年 英国Oxford大).

基盤研究(C), 「(電子・電子・イオン)三重同時計測法による分子軌道の3次元観測」, 高橋正彦 (1999年-2000年).

基盤研究(B), 「配向分子の電子運動量分光」, 高橋正彦 (2001年-2003年).

萌芽研究, 「配向分子による電子線非弾性散乱の立体ダイナミクス」, 高橋正彦 (2002年-2003年).

萌芽研究, 「コンプトン散乱の衝突立体ダイナミクス」, 高橋正彦 (2004年-2006年).

基盤研究(A), 「波動関数形の3次元観測法の確立と運動量分光の構築」, 高橋正彦 (2004年-2007年).

奨励研究(A), 「気体X線散乱法を用いた電子相関の研究」, 渡辺昇 (2000年).

若手研究(B), 「気体X線散乱実験を用いたクーロン孔の直接観測」, 渡辺昇 (2002年-2003年).

若手研究(B), 「電子衝撃二重イオン化を用いた電子相関の研究」, 渡辺昇 (2004年-2006年).

C) 研究活動の課題と展望

光や電子、多価イオンといった種々のprojectileによる原子分子のイオン化に、光電効果とコンプトン効果が共に重要な役割を担うことは周知である。これら二つの効果は物理的性質が互いに大きく異なるので、標的原子分子の電子構造や散乱立体ダイナミクスの異なる側面を我々に見せてくれるはずである。しかしながら、これまでの分子科学は、主としてレーザーや放射光を用いた光電効果による研究が数多く行なわれてきているのに対し、コンプトン効果に基礎を置く研究は遥かに少ない。我々は、今後とも、コンプトン散乱の物理のより詳細な理解を試み、従来とは異なる新しい視点からの分子科学への貢献を目指す。

* 2005年4月1日東北大学多元物質科学研究所助教授

解 良 聡 (助手)(2003 年 4 月 1 日 ~ 2005 年 3 月 31 日)^{*}

A-1) 専門領域：有機薄膜物性、電子分光

A-2) 研究課題：

- a) 高分解能光電子分光法による巨大分子吸着系の電子状態
- b) 内殻励起による有機薄膜の表面選択反応

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 多原子から構成される有機分子が構造異方性を持つことは自明であるが、その薄膜状態における吸着分子の配向の異方性と電子状態の関連は正しく理解されていない。これは吸着界面における種々の因子(吸着サイトの不均一性による相互作用の多様化が最も大きい)が複雑に絡み合った結果、本質的な現象が見えにくくなっているためである。グラファイト基板上の有機分子吸着系は、多くの相互作用を単純化することができる点で、こうした種々の複雑化した問題(エネルギー準位接合、分子間相互作用、キャリアダイナミクス)を議論する上で極めて有効である。本研究ではこうしたグラファイト上の高配向有機薄膜に対して、高分解能光電子分光法による電子状態の詳細な議論を行っている。一例として、分子内双極子を持つOTiフタロシアニン分子は膜の作製条件により、お互いの相互作用により双極子をうち消すように配向するアイランド構造と、基板との相互作用により双極子を配列した層構造の2種類を示す。このとき各々の膜構造の違い(配向変化による電気二重層によるポテンシャル面の形成)によって観測される価電子帯エネルギー位置は大きく変化した。一方、均一に配向した単分子膜において、巨大分子吸着系としては異例ともいえる振動と価電子帯ホールとの結合に基づく電子状態の微細構造を検出し、この分野における新たな議論展開の場を切り開いた。さらにペンタセン配向単分子膜の系において、気相状態と理論計算による詳細な比較検討により、固体(単分子膜)における結合定数および振動エネルギーの変化を捉えることに成功した。
- b) 軟X線を用いた内殻電子励起による吸収端微細構造(NEXAFS)は非占有準位に関する多くの情報を含んでいる。さらに励起状態の局在性を利用することで、特定の化学結合を選択的に切断することができるというような興味深い現象を示す。このような選択的結合切断と分子の励起状態は深く関連しており、新たな分子加工技術(分子メス)と共に励起状態の帰属評価法としての効果も期待される。これまでフッ素化有機化合物に関して、軟X線照射と共に放出されたイオン種および収量の励起波長依存性から、分子の結合切断と励起状態の関係を調べてきた。これにより表面近傍からの選択的なフッ素イオン放出が生じていることが明らかとなった。また放出イオンの励起波長依存性を測定することでNEXAFSスペクトルの非占有状態の帰属を行うことができた。

B-1) 学術論文

H. YAMANE, S. NAGAMATSU, H. FUKAGAWA, S. KERA, R. FRIEDLEIN, K. K. OKUDAIRA and N. UENO, "Hole-Vibration Coupling of the Highest Occupied State in Pentacene Thin Films," *Phys. Rev. B* **72**, 153412 (4 pages) (2005).
A. PATNAIK, K. K. OKUDAIRA, S. KERA, H. SETOYAMA, K. MASE and N. UENO, "Polarized Near-Edge X-Ray-Absorption Fine Structure Spectroscopy of C₆₀-Functionalized 11-Amino-1-Undecane Thiol Self-Assembled Monolayer: Molecular Orientation and Evidence for C₆₀ Aggregation," *J. Chem. Phys.* **122**, 154703 (9 pages) (2005).

- K. K. OKUDAIRA, E. KOBAYASHI, S. KERA, K. MASE and N. UENO**, “Ion Desorption Induced by F1s Region Transitions of Poly(tetrafluoroethylene),” *Surf. Sci.* **593**, 297–302 (2005).
- H. YAMANE, H. FUKAGAWA, H. HONDA, S. KERA, K. K. OKUDAIRA and N. UENO**, “Fine Structure of the Highest Occupied Band in OTi-Phthalocyanine Monolayer,” *Synth. Met.* **152**, 297–300 (2005).
- M. SHIONOIRI, I. YAMAMOTO, M. ONOUE, S. KERA, K. K. OKUDAIRA and N. UENO**, “Substrate Dependent Anisotropic Surface Diffusion of Indium Atoms on PTCDA Thin Films Studied by PEEM,” *Synth. Met.* **152**, 301–304 (2005).
- K. K. OKUDAIRA, T. WATANABE, S. KERA, E. KOBAYASHI, K. MASE and N. UENO**, “Site-Specific Ion Desorption of Fluorinated Phthalocyanine Studied with Electron-Ion Coincidence Spectroscopy,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144-147**, 461–464 (2005).
- H. FUKAGAWA, H. YAMANE, S. KERA, K. K. OKUDAIRA and N. UENO**, “UPS Fine Structures of Highest Occupied Band in Vanadyl-Phthalocyanine Ultrathin Film,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144-147**, 475–478 (2005).
- M. ONO, H. YAMANE, H. FUKAGAWA, S. KERA, D. YOSHIMURA, K. K. OKUDAIRA, E. MORIKAWA, K. SEKI and N. UENO**, “UPS Study of VUV-Photodegradation of Polytetrafluoroethylene (PTFE) Ultrathin Film by Using Synchrotron Radiation,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **236**, 377–382 (2005).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- S. NAGAMATSU, S. KERA, K. K. OKUDAIRA, T. FUJIKAWA and N. UENO**, “Multiple-Scattering Approach, to Angle-Resolved Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy of Large Molecules,” *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* **3**, 1–5 (2005).
- H. YAMANE, H. FUKAGAWA, S. NAGAMATSU, M. ONO, S. KERA, K. K. OKUDAIRA and N. UENO**, “Direct Observation of the HOMO-hole/Vibration Coupling in Pentacene Thin Films by means of High-Resolution Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy,” *IPAP Conf. Ser.* **6**, 19–22 (2005).
- M. ONO, H. YAMANE, H. FUKAGAWA, S. KERA, D. YOSHIMURA, E. MORIKAWA, K. SEKI and N. UENO**, “Possibility of the Fermi Level Control by VUV-Induced Doping of an Organic Thin Film: Polytetrafluoroethylene,” *IPAP Conf. Ser.* **6**, 27–30 (2005).
- S. KERA and N. UENO**, “Deep Insight into a Valence Hole in Organic Semiconductors: High-Resolution Ultraviolet Photoemission Spectroscopy,” *IPAP Conf. Ser.* **6**, 51–56 (2005).
- H. FUKAGAWA, H. YAMANE, S. KERA, K. K. OKUDAIRA and N. UENO**, “Effects of the Dipole Density on the Electronic Structures of Oriented Thin Films of the Polarized Organic Molecule,” *IPAP Conf. Ser.* **6**, 73–75 (2005).
- K. K. OKUDAIRA, E. KOBAYASHI, H. YAGI, S. KERA, K. MASE and N. UENO**, “Site-Specific Ion Desorption of Poly(tetrafluoroethylene) Studied Using Electron-Ion Coincidence Spectroscopy,” *IPAP Conf. Ser.* **6**, 80–83 (2005).
- S. NAGAMATSU, M. ONO, S. KERA, K. K. OKUDAIRA, T. FUJIKAWA and N. UENO**, “Multiple Scattering Approach to Polarization-Dependent F K-edge XANES Spectra of Polytetrafluoroethylene,” *IPAP Conf. Ser.* **6**, 84–87 (2005).

B-3) 総説、著書

- 瀬戸山寛之、解良 聡、奥平幸司、原正彦、上野信雄,「準安定励起原子電子分光法による自己組織化単分子膜の研究：表面電子状態と表面選択反応」, *真空* **48**, 421–425 (2005).

B-10) 外部獲得資金

日本学術振興会特別研究費,「メタステーブル原子をプローブとする有機超薄膜表面の電子状態の研究」, 解良聡 (1998年-2000年).

若手研究(B),「高度に配向を規定した有機積層膜の電子状態と価電子帯スペクトル構造の真の原因」, 解良聡 (2002年-2004年).

若手研究(A),「巨大分子吸着系における価電子帯ホール・振動結合:有機電荷輸送機構の解明」, 解良聡 (2005年-2007年).

C) 研究活動の課題と展望

紫外電子分光法による有機薄膜の膜構造および電子状態の研究は、高性能有機デバイスの開発という応用化の側面のみならず、有機分子吸着系における表面・界面特有の現象を調べるといふ基礎学術的な面からも多くの興味深いテーマが残されている。グラファイト上の吸着分子系は有機薄膜における光電子スペクトルの価電子帯微細構造の研究に極めて有効であることがわかったため、今後そのバンド幅やエネルギー位置に着目して詳細な実験を系統的に行い、その起源を明確にすることが課題となる。また観測された価電子帯微細構造は、電荷ポンピングやホール振動カップリングなど、吸着分子の分子振動に誘起された界面現象であると考えられ、有機超伝導体などの有機電気伝導機構を紐解く鍵となると期待できる。今後は、結合定数の大きくなると予想されるカルコゲン原子を含んだ有機分子系の薄膜を作成し、その分子振動とのカップリング状態の検出を狙う。逆に、相互作用が大きな系では電子状態の高エネルギー分解能・角度分解能測定により、分子間相互作用に基づく薄膜面内方向エネルギーバンド分散に関する議論を行う。これらを統括して、有機分子薄膜におけるキャリア輸送機構に代表されるような種々の問題を解明し、この分野における学術的基盤の確立を目指す。

* 2005年4月1日千葉大学大学院助手

極端紫外光研究施設

加 藤 政 博 (教授)(2000 年 3 月 1 日着任、2004 年 4 月 1 日昇任)

A-1) 専門領域：加速器科学、放射光科学、ビーム物理学

A-2) 研究課題：

- a) シンクロトロン放射光源の研究
- b) 自由電子レーザーの研究
- c) 相対論的電子ビームを用いた光発生法の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 2003年度に成功裏に立ち上がった光源加速器 UVSOR-II の更なる性能向上に向けた開発研究を継続している。UVSOR-II の高輝度という優れた特徴は一方でビーム寿命の短縮をもたらす。この問題を解決するためにその第一段階として高周波加速空洞の増強を2005年春に実施しビーム寿命の改善を確認した。また、この問題に対する究極的な解決策としてトップアップ入射による一定電流運転の導入を引き続き検討している。UVSOR-II で光源の主力となっているアンジュレータの4号機となる可変偏光アンジュレータの設計を行い、2006年夏の導入を目指して製作を進めている。
- b) 高度化された光源加速器 UVSOR-II の高品質電子ビームを自由電子レーザーに用いることで従来よりも短波長域での大強度発振が可能となった。高度化以前には発振可能波長限界に近かった250 nm付近で数100ミリワットの高い平均出力を得、生体物質への照射実験に供した。またフランスの研究グループと協力し、蓄積リング自由電子レーザーの発振メカニズムやレーザー場のダイナミクスに関する研究を継続している。フィードバックによるレーザー品質の改良に成功した。また、外部から導入したレーザーと電子ビームを相互作用させることでレーザーの三倍高調波を発生することに成功した。これは将来の高品質ビームを使った短波長コヒーレント光生成の基礎研究である。
- c) 通常のシンクロトロン放射光に比べて桁外れに強いコヒーレント放射光をテラヘルツ領域において生成することに成功した。ある種のビーム不安定性により電子ビーム上に波長程度の密度揺らぎが形成されコヒーレント放射が起きているものと解釈しており、その発生メカニズムについて研究を継続している。また、外部から導入した極短パルスレーザーにより、人為的に密度の変調を形成し、コヒーレント放射光を発生する試みに成功した。

B-1) 学術論文

- A. MOCHIIHASHI, M. KATOH, M. HOSAKA, K. HAYASHI, J. YAMAZAKI, Y. TAKASHIMA and Y. HORI**, “Ion Trapping Phenomenon in UVSOR Electron Storage Ring,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **44**, 430–437 (2005).
- Y. NONOGAKI, M. KATOH, K. MATSUSHITA, M. SUZUI and T. URISU**, “Construction of the Undulator Beamline Equipped with a UHV-STM for Observations of Synchrotron Radiation Stimulated Surface Reaction,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144-147**, 1113–1116 (2005).
- Y. TAKASHIMA, M. KATOH, M. HOSAKA, A. MOCHIIHASHI, S. KIMURA and T. TAKAHASHI**, “Observation of Intense Bursts of Terahertz Synchrotron Radiation at UVSOR-II,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **44**, L1131–L1133 (2005).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員

加速器科学研究発表会世話人 (2001-2003).

加速器学会設立準備委員会委員 (2003).

加速器学会組織委員 (2004-).

学会誌編集委員

放射光学会誌編集委員 (2000-2002).

科学研究費の研究代表者、班長等

科学研究費補助金基盤研究(B)(2)代表者 (2003-2004).

科学研究費補助金基盤研究費(B)代表者 (2005-).

その他の委員

日中拠点大学交流事業(加速器科学分野)国内運営委員会委員 (2000-).

佐賀県シンクロトン光応用研究施設・光源装置設計評価委員 (2001-).

むつ小川原地域における放射光施設整備に係る基本設計等調査評価会(加速器)委員 (2001-).

B-8) 他大学での講義、客員

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所, 客員教授, 2004年- .

東京大学物性研究所, 嘱託研究員, 2002年- .

B-10) 外部獲得資金

基盤研究(B)(2), 「電子蓄積リングによる遠赤外コヒーレント放射光の生成」, 加藤政博 (2003年-2004年).

基盤研究(B), 「レーザーと電子ビームを用いたテラヘルツコヒーレント放射光の生成」, 加藤政博 (2005年-).

C) 研究活動の課題と展望

UVSOR高度化計画は成功裏に終了し、現在は、高度化された加速器群の性能を最大限引き出す努力を継続している。当面の課題であったビーム寿命については、2005年に実施した高周波加速空洞の増強により改善された。次のステップであるトップアップ運転の実現に向けて、シンクロトンのフルエネルギー化、放射線遮蔽増強を進めている。一方、高度化で増設された直線部へのアンジュレータの導入も進めており、2006年夏には4台目となる可変偏光型のアンジュレータを導入する予定である。設計は完了し、現在製作を進めている。

自由電子レーザーに関しては、光源リングの高度化により深紫外から真空紫外領域での高出力化、高安定化が視野に入ってきた。現在は円偏光深紫外レーザー光の生体物質への照射実験を行っているが、今後、真空紫外域での発振実現を目指して研究を進めていく予定である。また、発振メカニズムやレーザー場のダイナミクスといった自由電子レーザーの基礎的な研究、フィードバックの手法によるレーザー品質の向上という実用的な研究の両方をフランスのグループと共同で開始したが、極めて安定な発振が実現できているUVSORならではの興味深いデータが既に得られており、今後も共同研究を継続していきたいと考えている。

昨年度導入した極短パルスレーザーにより、テラヘルツ領域でのコヒーレント放射の生成、真空紫外領域でのコヒーレント高調波発生に成功した。今後は実用化を意識して、更に研究を進めていきたいと考えている。

繁 政 英 治 (助教授) (1999 年 5 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：軟 X 線分子分光、光化学反応動力学

A-2) 研究課題：

- a) 内殻励起分子の光解離ダイナミクスの研究
- b) 内殻電離しきい値近傍における多電子効果の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 内殻励起分子の解離ダイナミクスの詳細を解明するためには、振動分光が可能な高性能分光器が必要不可欠である。90 ~ 600 eV のエネルギー範囲で、分解能5000以上を達成する事を目指して、不等刻線平面回折格子を用いた斜入射分光器をBL4Bに建設した。この分光器を用いて、簡単な分子の内殻電離しきい値近傍における多電子励起状態の探索に関係した実験装置の開発研究や、光解離ダイナミクスの研究を行うための電子 - イオン多重同時計測装置のテスト実験を行っている。このビームラインである程度実験技術を確立した後、アンジュレーターラインBL3U等のより高輝度な放射光を利用した実験研究を行う方針で研究を進めている。なお、今年度は、二件の国際共同研究によるUVSOR利用実験を実施した。
- b) 分子の多電子励起状態は、圧倒的に大きな断面積をもつ内殻イオン化連続状態に埋もれており、観測は容易でない。しかし、多電子励起状態の崩壊で特徴的に生成されるもの、例えば準安定解離種やEUV発光、或いは負イオンフラグメントを積極的に検出することにより、多電子励起状態を高感度に検出できる可能性がある。我々は、特に準安定解離種に注目し、プローブとしての有用性を調べるため、UVSORのBL4Bにおいてテスト実験を行った。窒素分子のK殻励起領域における全EUV発光収量を測定した結果、丁度しきい値の位置にブロードなピークが観測された。その後BL3Uで実施したイオンとの同時計測実験から、このピークは二原子分子の内殻電離しきい値近傍で一般的に見られるものであり、その成因は、内殻正孔状態の形成とその崩壊過程において、低エネルギー電子が解離イオンによって再捕獲されるというメカニズムで説明されることが分かった。

B-1) 学術論文

Y. HIKOSAKA and E. SHIGEMASA, “Velocity Imaging Spectrometer for Negative Fragment Ions: Application to Dynamics of O₂ and N₂O Ion-Pair Dissociation,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **148**, 5–10 (2005).

Y. HIKOSAKA, P. LABLANQUIE and E. SHIGEMASA, “Efficient Production of Metastable Fragments around the 1s Ionization Threshold in N₂,” *J. Phys. B* **38**, 3597–3605 (2005).

P. LABLANQUIE, S. SEINERMAN, F. PENENT, T. AOTO, Y. HIKOSAKA and K. ITO, “Dynamics of Double Photoionization near the Ar 2p Threshold Investigated by Threshold Electron-Auger Electron Coincidence Spectroscopy,” *J. Phys. B* **38**, L9–L18 (2005).

T. AOTO, Y. HIKOSAKA, R. HALL, F. PENENT, P. LABLANQUIE and K. ITO, “Origin of Threshold Electrons Produced in Decay of the Xe 4d⁻¹np Resonance,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **142**, 319–323 (2005).

T. KANEYASU, T. AZUMA and K. OKUNO, “Collision Dynamics of the Kr⁸⁺ + N₂ System Studied by a Multi-Coincidence Technique,” *J. Phys. B* **38**, 1341 (2005).

T. KANEYASU, T. AZUMA and K. OKUNO, "Collision Dynamics of MCI-Molecule Systems Studied by Multi-Coincidence Technique," *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **235**, 352 (2005).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. HATSUI, H. SETOYAMA, E. SHIGEMASA and N. KOSUGI, "Design of a Novel Transmission-Grating Spectrometer for Soft X-Ray Emission Studies," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144-147**, 1059-1062 (2005).

F. PENENT, P. LABLANQUIE, R. I. HALL, J. PALAUDOUX, K. ITO, Y. HIKOSAKA, T. AOTO and J. H. D. ELAND, "Coincidence Auger Spectroscopy," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144-147**, 7-11 (2005).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本放射光学会渉外委員 (2005-).

学会の組織委員

日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウム組織委員 (1999-2001).

第19回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウム実行委員 (2005).

SRI06シンクロトロン放射装置技術国際会議プログラム委員 (2005).

学会誌編集委員

Synchrotron Radiation News, Correspondent (2001.10-).

日本放射光学会学会誌編集委員 (2005-).

その他

東京大学物性研究所共同利用施設専門委員 (2005-).

B--10) 外部獲得資金

基盤研究(B), 「内殻励起分子に特有な分子構造変化を伴う緩和過程の研究」, 繁政英治 (2000年-2002年).

基盤研究(B), 「分子の内殻電離しきい値近傍における多電子効果の研究」, 繁政英治 (2003年-2005年).

C) 研究活動の課題と展望

原子分子のような孤立系における最も重要な研究テーマの一つは、やはり電子関連の問題であって、独立粒子モデルでは説明できない現象の観測とその物理的な解釈を与えることが最大の関心事と言える。中でも、一つの光子の吸収により複数の電子が励起される多電子励起状態は、分子場中を運動する電子間の相関に基づくものであり、多電子励起状態の理解は我々が「分子」というものを正しく描写するために必要な基礎的情報の一つとして重要である。一般に分子の多電子励起状態は、圧倒的に大きな断面積をもつ内殻イオン化連続状態に埋もれており、観測は容易でない。しかし、多電子励起状態の崩壊で特徴的に生成されるもの、例えば中性励起フラグメントやEUV発光、或いは負イオンフラグメントを積極的に検出することにより、多電子励起状態を高感度に検出できる可能性がある。近年、我々は、先述した準安定解離種の検出と共に、負イオンフラグメントの検出に着目している。多電子励起状態の対称性についての直接的な情報を得ることを目指して、負イオンフラグメントの運動量を決定できる画像観測装置の立ち上げを行っている。これらにより、分子の内殻電子の励起に伴う多電子励起状態に関する理解が飛躍的に深まることが期待される。予備的な実験はBL4Bで集中的に実施するが、更なる

高分解能化には、アンジュレータービームラインを利用した実験が望ましい。BL3Uのみならず、SPring-8での利用実験も計画している。また、二次元画像観測装置を組み合わせた正負イオン同時計測法、及び正イオン画像観測装置と高効率電子エネルギー分析器を組み合わせた電子・イオン同時計測法の開発も併せて行っていく。

木 村 真 一 (助教授)(2002 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：物性物理学、放射光科学

A-2) 研究課題：

- a) 多重極限下赤外・テラヘルツ分光と角度分解光電子分光による強相関電子系の電子状態の研究
- b) 放射光を使った新しい分光法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 多重極限下赤外・テラヘルツ分光と角度分解光電子分光による強相関電子系の電子状態の研究: 赤外・テラヘルツ分光と角度分解光電子分光は、どちらも物質の伝導を担っているフェルミ準位近傍の電子状態の研究に適しており、それらを組み合わせることで、光電子分光による電子占有状態ばかりでなく非占有状態の情報も得ることができる。我々はそれらの実験条件に合わせた第一原理電子状態計算を組み合わせることで、強相関電子系の電子状態の総合的な情報を得ている。本年度は、部分的に重水素化した κ -(ET)₂Cu[N(CN)₂]Brの磁場下での超伝導・絶縁体・金属転移の電子状態変化、完全に重水素化した同物質の圧力によるモット転移による電子状態変化、SrFe₄Sb₁₂のスピンの揺らぎとのカップリングによる重い準粒子生成、強相関半導体SmSの圧力による絶縁体・金属転移のバンド構造変化を上記手法で観測し、物性の起源に関する情報を得た。
- b) 放射光を使った新しい分光法の開発: UVSOR-IIでは、高分解能三次元角度分解光電子分光とテラヘルツ顕微分光法、SPring-8では多重極限環境下赤外分光法の開発がほぼ終了した。今年度は、次年度に設置される直入射領域 ($h\nu = 7 \sim 40$ eV) の高分解能・高フラックス分光器を使った角度分解光電子分光ビームライン(新BL7U)を設計した。このビームラインは、UVSOR-IIの高輝度性を使って入射スリットをなくしたため、光電子分光に必要な高フラックスかつ高分解能が実現できるようにした。また、光源に縦・横の直線偏光が作り出せるアンジュレータを採用することで、波動関数の対称性も分離可能である。この分光器に最新鋭の光電子分析器を取り付けることで、全励起エネルギーでエネルギー分解能 1 meV 以下での角度分解光電子分光が可能になるように設計した。このビームラインは2006年夏に設置される予定である。

B-1) 学術論文

H. J. IM, T. ITO, J. B. HONG, S. KIMURA and Y. S. KWON, "Continuity of Ce 4f Electronic Structure across the Quantum Critical Point: A Resonant Photoemission Study on CeNi_{1-x}Co_xGe₂," *Phys. Rev. B* **72**, 220405(R) (4 pages) (2005).

T. NISHI, S. KIMURA, T. TAKAHASHI, Y. MORI, Y. S. KWON, H. J. IM and H. KITAZAWA, "Infrared Spectroscopy under Multi-Extreme Conditions: Direct Observation of Pseudo Gap Formation and Collapse in CeSb," *Phys. Rev. B* **71**, 220401(R) (4 pages) (2005).

T. NISHI, S. KIMURA, T. TAKAHASHI, T. ITO, H. J. IM, Y. S. KWON, K. MIYAGAWA, H. TANIGUCHI, A. KAWAMOTO and K. KANODA, "The Origin of the Phase Separation in Partially Deuterated κ -(ET)₂Cu[N(CN)₂]Br Studied by Infrared Magneto-Microspectroscopy," *Solid State Commun.* **134**, 189–193 (2005).

I. ZEREC, W. CARRILLO-CABRERA, V. VOEVODIN, J. SICHELSCHEIDT, F. STEGLICH, Y. GRIN, A. YARESKO and S. KIMURA, "Influence of Cage Distortions on the Electronic Structure and Optical Properties of Ba₆Ge₂₅," *Phys. Rev. B* **72**, 045122 (7 pages) (2005).

- B. K. LEE, J. B. HONG, J. W. KIM, K. -H. JANG, E. D. MUN, D. Y. KIM, M. H. JUNG, S. KIMURA, T. PARK, J. -G. PARK and Y. S. KWON**, “Kondo Ground States and Non-Fermi-Liquid Behavior in $\text{CeNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ge}_2$,” *Phys. Rev. B* **71**, 214433 (9 pages) (2005).
- Y. TAKASHIMA, M. KATOH, M. HOSAKA, A. MOCHIIHASHI, S. KIMURA and T. TAKAHASHI**, “Observation of Intense Bursts of Terahertz Synchrotron Radiation at UVSOR-II,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **44**, L1131–L1133 (2005).
- J. SICHELSHMIDT, V. VOEVODIN, V. PACHECO, YU. GRIN, F. STEGLICH, T. NISHI and S. KIMURA**, “Optical Investigations of the Clathrate $\alpha\text{-Eu}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$,” *Eur. Phys. J. B* **46**, 363–366 (2005).
- H. OKAMURA, T. MICHIZAWA, T. NANBA, S. KIMURA, F. IGA and T. TAKABATAKE**, “Indirect and Direct Energy Gaps in Kondo Semiconductor YbB_{12} ,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 1954–1957 (2005).
- H. OKAMURA, T. KORETSUNE, S. KIMURA, T. NANBA, H. IMAI, Y. SHIMAKAWA and Y. KUBO**, “Carrier-Induced Infrared Magnetic Circular Dichroism in the Magnetoresistive Pyrochlore $\text{Ti}_2\text{Mn}_2\text{O}_7$,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 970–974 (2005).
- T. ITO, A. CHAINANI, T. HARUNA, K. KANAI, T. YOKOYA, S. SHIN and R. KATO**, “Temperature Dependent Luttinger Surfaces,” *Phys. Rev. Lett.* **95**, 246402 (4 pages) (2005).
- Y. HOSOI, N. KOCH, Y. SAKURAI, H. ISHII, T. U. KAMPEN, G. SALVAN, D. R. T. ZAHN, G. LEISING, Y. OUCHI and K. SEKI**, “Structural Study of Thin Films of Neutral and Potassium-doped Oligophenylenes on $\text{Cu}(100)$,” *Surf. Sci.* **589**, 19–31 (2005).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- S. KIMURA, T. NISHI, Y. MORI, Y. SUMIDA, T. TAKAHASHI, Y. S. KWON, H. J. IM and H. KITAZAWA**, “Infrared study on CeSb under high pressures,” *Physica B* **359-361**, 190–192 (2005).
- K. SODA, K. SHIMBA, S. YAGI, M. KATO, T. TAKEUCHI, U. MIZUTANI, T. ZHANG, M. HASEGAWA, A. INOUE, T. ITO and S. KIMURA**, “Electronic structure of bulk metallic glass $\text{Zr}_{55}\text{Al}_{10}\text{Cu}_{30}\text{Ni}_5$,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144-147**, 585–587 (2005).
- Y. SAKURAI, T. YOKOYAMA, Y. HOSOI, H. ISHII, Y. OUCHI, G. SALVAN, A. KOBITSKI, T. U. KAMPEN, D. R. T. ZAHN and K. SEKI**, “Study of the interaction of tris-(8-hydroxyquinoline) aluminum (Alq_3) with potassium using vibrational spectroscopy: Examination of the possible isomerization upon K-doping,” *Synth. Met.* **154**, 161–164 (2005).

B-3) 総説、著書

- 木村真一、池本夕佳, 「放射光赤外顕微分光とイメージング」, *放射光* **18**, 290–297 (2005).

B-4) 招待講演

- S. KIMURA**, “Infrared spectroscopy under multi-extreme conditions: Direct observation of pseudo gap formation and collapse in CeSb ,” International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources, Rathen (Germany), June 2005.
- S. KIMURA**, “Optical and photoelectrical studies on electronic structure of $\text{CeNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ge}_2$,” Festkörperphysikalisches Kolloquium, Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe, Dresden (Germany), June 2005.

S. KIMURA, “Infrared Spectroscopy on Electronic Structure of Deuterated κ -(ET)₂Cu[N(CN)₂]Br under Pressures,” International Symposium on Molecular Conductors, Hayama (Japan), July 2005.

S. KIMURA, “Terahertz synchrotron radiation: present and future,” International Workshop on Terahertz Technology, Osaka (Japan), November 2005.

木村真一, 「CSRの利用研究」, 第18回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 佐賀, 2005年1月.

木村真一, 「放射光リングからのテラヘルツ光の利用」, 理研・分子研合同シンポジウム エクストリームフォトニクス研究, 和光, 2005年4月.

木村真一, 「赤外放射光の利用研究と表面科学への展開」, 第25回表面科学講演大会, 大宮, 2005年11月.

B-6) 受賞、表彰

木村真一, 日本放射光学会・第5回若手奨励賞 (2001).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本放射光学会行事幹事 (2005-2006).

日本放射光学会渉外幹事 (2003-2004).

学会の組織委員等

International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources 2007, Chair, International Advisory Board (Awaji Island, Japan, September 2007).

International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources 2005, International Advisory Board (Rathen, Germany, June 2005).

第19回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 組織委員長, プログラム委員, 実行委員 (2005).

次世代光源計画ワークショップ——未来光源が開くサイエンス——, 実行委員長 (日本放射光学会主催, 岡崎, 2005年8月).

第18回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, プログラム委員 (2004).

第17回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 組織委員, プログラム委員 (2003).

第16回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 組織委員, プログラム委員 (2002).

第15回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, プログラム委員 (2001).

第14回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 組織委員, プログラム委員 (2000).

第13回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, プログラム委員 (1999).

文部科学省、学術振興会等の役員等

(財)高輝度光科学研究センター・利用研究課題選定委員会分科会委員 (2003-2007).

(財)高輝度光科学研究センター・ナノテク支援課題審査委員会委員 (2003-2007).

B-8) 他大学での講義、客員

大阪大学大学院基礎工学研究科, 集中講義「物性物理工学特別講義」, 2005年6月8-10日.

名古屋大学大学院工学研究科, 集中講義「量子工学特論I」, 2005年10月6-7日.

神戸大学理学部物理学科,「電磁力学」,2005年5月9-10,16-17日.

東京大学物性研究所,嘱託研究員,1995年4月-.

(財)高輝度光科学研究センター,外来研究員,1999年4月-.

東京大学物性研究所,嘱託研究員,2003年4月-.(伊藤助手)

(財)理化学研究所播磨研究所,非常勤連携研究員,2003年4月-.(伊藤助手)

B-10)外部獲得資金

特定領域研究(公募),「モット転移系有機超伝導体の高圧・高磁場下の電子状態」,木村真一(2004年-2005年).

若手研究(A),「電子相関が強い系の多重極限環境下における物性発現メカニズムの分光研究」,木村真一(2002年-2004年).

萌芽研究,「シンクロトロン放射光を使ったテラヘルツ顕微分光法の開発」,木村真一(2002年).

(財)ひょうご科学技術協会・奨励研究助成,「多重極限環境下における物質の電子状態の赤外分光」,木村真一(2001年).

(財)ひょうご科学技術協会・海外研究者招聘助成金,「 CeSbNi_x ($x > 0.08$)の金属絶縁体転移の光学的研究」,木村真一(2000年).

科学技術振興事業団・さがけ研究21,「赤外磁気光学イメージング分光による局所電子構造」,木村真一(1999年-2002年).

日本原子力研究所・黎明研究,「赤外・テラヘルツ磁気光学素子としての低密度キャリアf電子系の基礎研究」,木村真一(1999年).

(財)稲森財団・助成金,「テラヘルツ磁気光学材料としての少数キャリア強相関伝導系の研究」,木村真一(1999年).

(財)島津科学技術振興財団・研究開発助成金,「テラヘルツ磁気光学分光法の開発」,木村真一(1999年).

(財)実吉奨学会・研究助成金,「赤外イメージング分光による磁性体の局所電子構造の研究」,木村真一(1999年).

(財)マツダ財団・研究助成金,「テラヘルツ磁気光学素子としての強相関4f電子系の基礎研究」,木村真一(1998年).

奨励研究(A),「赤外磁気光学効果による強相関伝導系物質の低エネルギー励起の研究」,木村真一(1997年-1998年).

若手研究(B),「角度分解光電子分光によるスピン配列した磁性薄膜における電子状態」,伊藤孝寛(2005年-2007年).

C) 研究活動の課題と展望

2002年着任以降、UVSOR-IIで立ち上げてきた2つのビームラインである高分解能三次元角度分解光電子分光装置(BL5U)と赤外・テラヘルツ分光装置(BL6B)は、現在順調に稼動しており、世界的なレベルでの研究が遂行できている。今後は、UVSOR-IIの特長を生かした真空紫外領域に特化した高分解能・高フラックスの分光器を用いた三次元角度分解光電子分光(BL7U)を展開していく予定である。そのための分光器は2006年夏に建設が行われる。このビームラインを用いて、物性をつかさどるフェルミ準位極近傍の電子状態(フェルミオロジー)の研究を行っていく。BL6Bでは、高い強度・輝度を生かして、これまでに世界的に見てもほとんど行われていないテラヘルツ顕微分光が可能になった。この装置を使って、温度依存性のみならず、高圧・高磁場下や1 K以下の極低温下の電子状態を物性の出現に絡めて理解していく。これらの2つの実験手法を解釈するために、第一原理電子状態計算も行っており、実験条件に即した理論計算も可能になっている。以上の結果をコンシステントに説明することで、物性の起源の電子状態の本質を理解できるものと考えている。

分子制御レーザー開発研究センター

猿 倉 信 彦 (助教授) (1996 年 2 月 15 日 ~ 2005 年 12 月 31 日)

A-1) 専門領域：量子エレクトロニクス、非線形光学

A-2) 研究課題：

- a) テラヘルツ電磁波の発生とその応用
- b) 紫外新光学材料とその光源開発への応用

A-3) 研究活動の概要と主な成果

- a) テラヘルツ電磁波の発生とその応用：近年の研究に置ける重点課題の一つは、テラヘルツ電磁波に関する研究である。テラヘルツ電磁波とは電波と光の境界の、振動数1 THz (波長300 μm) 付近の電磁波で、これまで適当な光源や検出器がないため研究が進んでいなかった。我々は、磁場中の半導体にチタンサファイアレーザーにより汎用化された超短パルスレーザー光を照射することで、高平均出力のテラヘルツ電磁波発生に成功した。我々が発見した、磁場印加によるInAs基板からの電磁波の増強に関しては、理論研究者による新増強メカニズムの提唱もされつつある。また東北大金研・渡辺教授の協力の下、超高磁場下でのテラヘルツ電磁波発生について実験を行い、発生したテラヘルツ電磁波強度の、特異な磁場強度依存現象を発見し、その発生機構の解明に取り組んでいる。さらに光源の高性能化や小型化、分光学への応用を目指して研究を継続中である。我々が開発した新光源を用いた研究としては、神戸大の富永教授とのタンパクの溶液の分光研究、千葉大の西川教授との超臨界流体などの分光研究、日本分光やアイシン精機との計測器開発などがある。

それに加え現在は、従来のバルク素材を活用したテラヘルツ光工学の限界を超えるべく、様々なナノ構造を持つ新素材の探索も始めている。台湾国立交通大学のPan教授や産総研の板谷らとは、MQWやDBR構造を持つ半導体非線形デバイスの研究が進行中であり、東工大の山瀬教授との研究ではナノクラスターを用いた設計可能な新非線形材料を発見した。これらの新素材の活用や外場での物性制御による遠赤外・中赤外での新非線形光学の開拓とその物性研究に取り組んでいる。

- b) 紫外新光学材料とその光源開発への応用：近年のもう一つの重点課題は、素材研究者と共同で行っている、新光学素子や新レーザー結晶・非線形結晶による光デバイス開発である。三菱マテリアルとの研究では、新非線形結晶LB4によりYAGレーザーの第5高調波が発生可能であることを発見した。またロシアのDubinskii教授や東北大の福田教授と、セリウム添加フッ化物による紫外固体レーザー開発を行った。これまで紫外の波長可変レーザーは、赤外・可視レーザーの波長変換しか方法がなかったが、新結晶を用いた発振器によって、波長可変紫外レーザー光の直接・高効率発生に成功した。この新素材が赤外領域におけるチタンサファイアと同様に重要であることを、科技団・東工大の細野教授とともに、全固体紫外超短パルスレーザーを構築することにより示した。この「紫外のチタンサファイア」、「あるいは」固体のエキシマ」としてセリウム添加フッ化物レーザーを使用し、新材料の真空紫外領域におけるバンド端発光特性の評価や、新レーザー媒質・非線形材料の探索を行っている。

B-1) 学術論文

- H. OHTAKE, S. ONO and N. SARUKURA**, “Enhanced Generation of Terahertz Radiation from Semiconductor Surfaces with External Magnetic Field,” *Terahertz Optoelectronics, Topics in Appl. Phys.* **97**, 99–116 (2005).
- K. YAMAMOTO, K. TOMINAGA, H. SASAKAWA, A. TAMURA, H. MURAKAMI, H. OHTAKE and N. SARUKURA**, “Terahertz Time-Domain Spectroscopy of Amino Acids and Polypeptides,” *Biophys. J.* **89**, L22–L25 (2005).
- L. H. HAI, N. D. HUNG, A. QUEMA, G. DIWA, H. MURAKAMI, S. ONO and N. SARUKURA**, “Ce³⁺-Doped LiCaAlF₆ Crystals as a Solid-State Ultraviolet Saturable Absorber and Role of Excited State Absorption,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **44**, 7984–7986 (2005).
- G. DIWA, A. QUEMA, E. ESTACIO, R. POBRE, H. MURAKAMI, S. ONO and N. SARUKURA**, “Photonic-Crystal-Fiber Pigtail Device Integrated with Lens-Duct Optics for Terahertz Radiation Coupling,” *Appl. Phys. Lett.* **87**, 151114 (2005).
- S. ONO, R. E. OUENZERFI, A. QUEMA, H. MURAKAMI, N. SARUKURA, T. NISHIMATSU, N. TERAOKUBO, H. MIZUSEKI, Y. KAWAZOE, A. YOSHIKAWA and T. FUKUDA**, “Band-Structure Design of Fluoride Complex Materials for Deep-Ultraviolet Light-Emitting Diodes,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **44**, 7285–7290 (2005).
- S. ONO, H. MURAKAMI, A. QUEMA, G. DIWA, N. SARUKURA, R. NAGASAKA, Y. ICHIKAWA, H. OGINO, E. OHSHIMA, A. YOSHIKAWA and T. FUKUDA**, “Generation of Terahertz Radiation Using Zinc Oxide as Photoconductive Material Excited by Ultraviolet Pulses,” *Appl. Phys. Lett.* **87**, 261112 (2005).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- G. DIWA, A. QUEMA, M. GOTO, H. MURAKAMI, S. ONO and N. SARUKURA**, “Highly Flexible and Strongly Polarization-Preserving Teflon Photonic Crystal Fiber Waveguide for Terahertz Radiation,” *Optical Terahertz Science and Technology (OTST 2005)*, March 14-16, Orlando, Florida, USA, MB7 (2005).
- S. ONO, H. MURAKAMI, A. QUEMA, G. DIWA, N. SARUKURA, R. NAGASAKA, Y. ICHIKAWA, E. OHSHIMA, H. OGINO, A. YOSHIKAWA and T. FUKUDA**, “Terahertz-Radiation Generation from Zinc Oxide Photoconductive Switch,” *Optical Terahertz Science and Technology (OTST 2005)*, Orlando, Florida, USA, March 14-16, MC5 (2005).
- S. ONO, H. TAKAHASHI, A. QUEMA, G. DIWA, H. MURAKAMI, N. SARUKURA and M. HASSELBECK**, “High Frequency Component of Terahertz-Radiation Spectrum Enhanced by Using an Excitation Source with Short Pulse Duration on an *n*-type InAs Immersed in Magnetic Field,” *Optical Terahertz Science and Technology (OTST 2005)*, March 14-16, Orlando, Florida, USA, ME5 (2005).
- A. QUEMA, G. DIWA, H. MURAKAMI, S. ONO, N. SARUKURA and G. JANAIRO**, “Highly Sensitive Detection of the Onset of Solid-State Phase Transition in an Endocrine-Disrupting Estrogen-Like Chemical Using Terahertz Radiation,” *Optical Terahertz Science and Technology (OTST 2005)*, March 14-16, Orlando, Florida, USA, WB5 (2005).
- H. MURAKAMI, G. DIWA, R. E. OUENZERFI, A. QUEMA, S. ONO, N. SARUKURA, T. NISHIMATSU, N. TERAOKUBO, H. MIZUSEKI, Y. KAWAZOE, H. SATO, A. YOSHIKAWA and T. FUKUDA**, “Possibility of wide-gap fluoride hetero-structures for deep ultraviolet optical devices,” *International Conference on Coherent and Nonlinear Optics/ International Conference on Lasers, Applications, and Technologies (ICONO/LAT 2005)*, May 11-15, St. Petersburg, Russia, IWD4 (2005).

- H. MURAKAMI, G. DIWA, A. QUEMA, S. ONO, N. SARUKURA, H. L. HOANG and H. D. NGUYEN**, “Ce³⁺:LiCaAlF₆ crystals as a solid-state ultraviolet saturable absorber,” *International Conference on Coherent and Nonlinear Optics/International Conference on Lasers, Applications, and Technologies (ICONO/LAT 2005)*, May 11-15, St. Petersburg, Russia, IFA2 (2005).
- H. MURAKAMI, S. ONO, A. QUEMA, G. DIWA, N. SARUKURA, R. NAGASAKA, Y. ICHIKAWA, E. OHSHIMA, H. OGINO, A. YOSHIKAWA and T. FUKUDA**, “Generation of terahertz radiation from zinc oxide photoconductive switch,” *International Conference on Coherent and Nonlinear Optics/International Conference on Lasers, Applications, and Technologies (ICONO/LAT 2005)*, May 11-15, St. Petersburg, Russia, IFQ6 (2005).
- A. QUEMA, G. DIWA, H. MURAKAMI, H. TAKAHASHI, M. SAKAI, S. ONO and N. SARUKURA**, “Emergence of magneto-plasma effect from InAs under the Voigt configuration depicted by the evolution of terahertz radiation spectrum,” *International Conference on Coherent and Nonlinear Optics/International Conference on Lasers, Applications, and Technologies (ICONO/LAT 2005)*, May 11-15, St. Petersburg, Russia, ISG2 (2005).
- R. POBRE, A. QUEMA, H. MURAKAMI, S. ONO and N. SARUKURA**, “Modal analysis of teflon photonic crystal fiber as a terahertz waveguide,” *Joint 30th International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 13th International Conference on Terahertz Electronics (IRMMW-THz 2005)*, September 19-23, Williamsburg, Virginia, USA, MC5-4 (2005).
- A. QUEMA, G. DIWA, E. ESTACIO, H. MURAKAMI, S. ONO, N. SARUKURA, L. REMPILO and R. QUIROGA**, “Uncharacteristic behavior in low temperature of conductive polypyrrole detected by temperature-dependent terahertz transmission spectroscopy,” *Joint 30th International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 13th International Conference on Terahertz Electronics (IRMMW-THz 2005)*, September 19-23, Williamsburg, Virginia, USA, MC5-36 (2005).
- E. ESTACIO, A. QUEMA, G. DIWA, H. MURAKAMI, S. ONO, N. SARUKURA, A. SOMINTAC and A. SALVADOR**, “Observation of below-bandgap excited terahertz emission in the action spectra of GaAs/AlGaAs multiple quantum wells,” *Joint 30th International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 13th International Conference on Terahertz Electronics (IRMMW-THz 2005)*, September 19-23, Williamsburg, Virginia, USA, TB3-1 (2005).
- G. DIWA, A. QUEMA, E. ESTACIO, H. MURAKAMI, S. ONO and N. SARUKURA**, “Channeling terahertz (THz) radiation into a Teflon photonic crystal fiber waveguide by means of a lens duct in a THz pigtail assembly,” *Joint 30th International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 13th International Conference on Terahertz Electronics (IRMMW-THz 2005)*, September 19-23, Williamsburg, Virginia, USA, TB3-6 (2005).
- H. MURAKAMI, S. ONO, A. QUEMA, G. DIWA, E. ESTACIO, N. SARUKURA, R. NAGASAKA, Y. ICHIKAWA, E. OHSHIMA, H. OGINO, A. YOSHIKAWA and T. FUKUDA**, “Zinc oxide single crystal as substrate for photoconductive antenna device generating radiation in the terahertz frequency region,” *Joint 30th International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 13th International Conference on Terahertz Electronics (IRMMW-THz 2005)*, September 19-23, Williamsburg, Virginia, USA, WC5-35 (2005).
- G. DIWA, A. QUEMA, H. MURAKAMI, S. ONO and N. SARUKURA**, “Terahertz Pigtail Using Lens Duct to Facilitate Launching of Terahertz Radiation into Plastic Photonic Crystal Fiber Waveguide,” *Conference on Lasers and Electro-Optics/Quantum Electronics and Laser Science Conference (CLEO/QELS 2005)*, May 24-26, Baltimore, Maryland, USA, CTuD7 (2005).

- G. DIWA, R. E. OUENZERFI, A. QUEMA, H. MURAKAMI, S. ONO, N. SARUKURA, T. NISHIMATSU, N. TERAOKUBO, H. MIZUKESHI, Y. KAWAZOE, H. SATO, A. YOSHIKAWA and T. FUKUDA**, “Prospects of Wide-Gap Fluoride Hetero-Structures for Deep Ultraviolet Optical Devices,” *Conference on Lasers and Electro-Optics/Quantum Electronics and Laser Science Conference (CLEO/QELS 2005)*, May 24-26, Baltimore, Maryland, USA, CThT1 (2005).
- S. ONO, H. MURAKAMI, A. QUEMA, G. DIWA, N. SARUKURA, R. NAGASAKA, Y. ICHIKAWA, E. OHSHIMA, H. OGINO, A. YOSHIKAWA and T. FUKUDA**, “Generation of Terahertz Radiation from Photoconductive Switch on Zinc Oxide Single Crystal,” *Conference on Lasers and Electro-Optics/Quantum Electronics and Laser Science Conference (CLEO 2005/QELS 2005)*, May 24-26, Baltimore, Maryland, USA, CThX6 (2005).
- G. DIWA, H. TAKAHASHI, A. QUEMA, M. SAKAI, H. MURAKAMI, S. ONO, N. SARUKURA, G. NISHIJIMA and K. WATANABE**, “Evolution of Terahertz Radiation Spectrum Stimulated by the Emergence of Magneto-Plasma Effect on Various InAs Surfaces under the Voigt Configuration,” *Conference on Lasers and Electro-Optics/Quantum Electronics and Laser Science Conference (CLEO/QELS 2005)*, May 24-26, Baltimore, Maryland, USA, CFM6 (2005).
- H. L. HOANG, H. D. NGUYEN, G. DIWA, A. QUEMA, H. MURAKAMI, S. ONO and N. SARUKURA**, “Ce³⁺:LiCaAlF₆ Crystals as a Solid-State Ultraviolet Saturable Absorber and Role of Excited State Absorption,” *Conference on Lasers and Electro-Optics/Quantum Electronics and Laser Science Conference (CLEO/QELS 2005)*, May 24-26, Baltimore, Maryland, USA, JTuC37 (2005).
- G. DIWA, A. QUEMA, S. ONO, N. SARUKURA, H. L. HOANG, H. D. NGUYEN et al.**, “Ce:LiCAF crystals as a solid-state ultraviolet saturable absorber and role of excited state absorption,” *International Quantum Electronics Conference 2005 and the Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics 2005 (IQEC/CLEO-PR 2005)*, July 11-15, Tokyo, Japan, CF13-7 (2005).
- G. DIWA, A. QUEMA, S. ONO, N. SARUKURA, Y. KAWAZOE, T. FUKUDA et al.**, “Formulation of design principle utilizing wide-gap fluoride hetero-structures for deep ultraviolet optical devices,” *International Quantum Electronics Conference 2005 and the Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics 2005 (IQEC/CLEO-PR 2005)*, July 11-15, Tokyo, Japan, CTuN4-5 (2005).
- R. POBRE, A. QUEMA, H. MURAKAMI, S. ONO and N. SARUKURA**, “Single mode characteristics of Teflon photonic crystal fiber (PCF) in the sub-terahertz (THz) region,” *International Quantum Electronics Conference 2005 and the Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics 2005 (IQEC/CLEO-PR 2005)*, July 11-15, Tokyo, Japan, CWK2-3 (2005).
- G. DIWA, A. QUEMA, H. MURAKAMI, S. ONO and N. SARUKURA**, “Design and fabrication of terahertz pigtail with a lens duct for launching terahertz radiation into plastic photonic crystal fiber waveguide,” *International Quantum Electronics Conference 2005 and the Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics 2005 (IQEC/CLEO-PR 2005)*, July 11-15, Tokyo, Japan, CWK2-4 (2005).
- E. ESTACIO, A. QUEMA, S. ONO, N. SARUKURA, A. SOMINTAC and A. SALVADOR**, “Terahertz radiation in below-bandgap, optically pumped GaAs/AlGaAs multiple quantum wells in magnetic field,” *International Quantum Electronics Conference 2005 and the Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics 2005 (IQEC/CLEO-PR 2005)*, July 11-15, Tokyo, Japan, JFH3-7 (2005).

S. ONO, A. QUEMA, N. SARUKURA, R. NAGASAKA, Y. ICHIKAWA, T. FUKUDA *et al.*, “Terahertz radiation generation from photoconductive switch fabricated on zinc oxide single crystal,” *International Quantum Electronics Conference 2005 and the Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics 2005 (IQEC/CLEO-PR 2005)*, July 11-15, Tokyo, Japan, JFH4-6 (2005).

A. QUEMA, G. DIWA, S. ONO, N. SARUKURA, L. REMPILO and R. QUIROGA, “Terahertz transmission spectroscopic analysis of para-toluenesulphonate-doped polypyrrole films at various temperatures,” *International Quantum Electronics Conference 2005 and the Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics 2005 (IQEC/CLEO-PR 2005)*, July 11-15, Tokyo, Japan, JThC3-P7 (2005).

A. QUEMA, M. SAKAI, M. TOMURA, M. AKITA, S. ONO, N. SARUKURA *et al.*, “Terahertz spectroscopic detection of solid-state phase transition onset and low-frequency absorption peak in aromatic biochemicals,” *International Quantum Electronics Conference 2005 and the Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics 2005 (IQEC/CLEO-PR 2005)*, July 11-15, Tokyo, Japan, JThC3-P8 (2005).

A. QUEMA, G. DIWA, E. ESTACIO, G. DE LOS REYES, C. PONSECA JR., H. MURAKAMI, M. SAKAI, M. TOMURA, M. AKITA, S. ONO and N. SARUKURA, “Terahertz spectroscopic detection of solid-state phase transition onset and analysis of biochemicals suspected to mimic natural hormones,” *Joint Conference on Ultrafast Optics V and Applications of High Field and Short Wavelength Sources XI (UFO/HFSW 2005)*, September 25-30, Nara, Japan, TuP-24 (2005).

A. QUEMA, E. ESTACIO, H. TAKAHASHI, G. DIWA, G. DE LOS REYES, C. PONSECA JR., M. SAKAI, H. MURAKAMI, S. ONO, N. SARUKURA, G. NISHIJIMA and K. WATANABE, “Magneto-plasma effect on various InAs surface orientations under Voigt configuration depicted by the change in the terahertz radiation spectrum,” *Joint Conference on Ultrafast Optics V and Applications of High Field and Short Wavelength Sources XI (UFO/HFSW 2005)*, September 25-30, Nara, Japan, TuP-25 (2005).

A. QUEMA, G. DIWA, E. ESTACIO, G. DE LOS REYES, C. PONSECA JR., H. MURAKAMI, S. ONO and N. SARUKURA, “Terahertz (THz) pigtail assembly utilizing a lens duct for effective coupling of THz radiation into Teflon photonic crystal fiber waveguide,” *Joint Conference on Ultrafast Optics V and Applications of High Field and Short Wavelength Sources XI (UFO/HFSW 2005)*, September 25-30, Nara, Japan, W2-1 (2005).

H. MURAKAMI, E. ESTACIO, A. QUEMA, G. DE LOS REYES, S. ONO, N. SARUKURA, Y. ICHIKAWA, H. OGINO, A. YOSHIKAWA and T. FUKUDA, “Terahertz radiation from photoconductive switch fabricated from a zinc oxide single crystal,” *Joint Conference on Ultrafast Optics V and Applications of High Field and Short Wavelength Sources XI (UFO/HFSW 2005)*, September 25-30, Nara, Japan, W2-3 (2005).

E. ESTACIO, A. QUEMA, G. DIWA, G. DE LOS REYES, H. MURAKAMI, S. ONO, N. SARUKURA, A. SOMINTAC and A. SALVADOR, “Action spectra of GaAs/AlGaAs multiple quantum wells exhibiting terahertz emission peak at excitation energies below the bandgap,” *Joint Conference on Ultrafast Optics V and Applications of High Field and Short Wavelength Sources XI (UFO/HFSW 2005)*, September 25-30, Nara, Japan, W2-4 (2005).

E. ESTACIO, A. QUEMA, R. POBRE, G. DIWA, C. PONSECA, G. DE LOS REYES, S. ONO, H. MURAKAMI, A. SOMINTAC, J. P. SY, C. ISON, A. SALVADOR and N. SARUKURA, “Below-bandgap excited, terahertz emission of optically pumped GaAs/AlGaAs multiple quantum wells,” *The 12th International Conference on Unconventional Photoactive Systems (UPS-12)*, October 2-6, Sendai, Japan, Oral-25 (2005).

G. DE LOS REYES, A. QUEMA, E. ESTACIO, C. PONSECA JR., G. DIWA, H. MURAKAMI, S. ONO and N. SARUKURA, “Terahertz (THz) spectroscopic detection of solid-state phase transition onset in a biochemical suspected to mimic natural hormones,” *The 12th International Conference on Unconventional Photoactive Systems (UPS-12)*, October 2-6, Sendai, Japan, Oral-26 (2005).

E. ESTACIO, S. ONO, A. QUEMA, H. MURAKAMI, G. DIWA, G. DE LOS REYES, C. PONSECA, R. NAGASAKA, Y. ICHIKAWA, E. OHSHIMA, H. OGINO, A. YOSHIKAWA, T. FUKUDA and N. SARUKURA, “Terahertz photo-conductive antenna from a Zinc oxide single crystal substrate,” *The 12th International Conference on Unconventional Photoactive Systems (UPS-12)*, October 2-6, Sendai, Japan, P4 (2005).

C. S. PONSECA JR., G. DIWA, A. QUEMA, E. ESTACIO, H. MURAKAMI, S. ONO and N. SARUKURA, “Coupling of terahertz (THz) radiation into a Teflon photonic crystal fiber (TPCF) waveguide using a lens duct in a THz pigtail assembly,” *The 12th International Conference on Unconventional Photoactive Systems (UPS-12)*, October 2-6, Sendai, Japan, P33 (2005).

A. QUEMA, E. ESTACIO, G. DIWA, G. DE LOS REYES, C. PONSECA JR., H. MURAKAMI, S. ONO and N. SARUKURA, “Teflon photonic crystal fiber waveguide for terahertz radiation,” *The 23rd SPP Physics Congress (SPP2005)*, October 26-28, Iloilo City, Philippine (2005).

E. ESTACIO, A. QUEMA, G. DIWA, C. PONSECA, G. DE LOS REYES, S. ONO, H. MURAKAMI, N. SARUKURA, J. P. SY, A. SOMINTAC, C. ISON and A. SALVADOR, “Below-bandgap excited terahertz emission in GaAs/AlGaAs multiple quantum wells,” *The 23rd SPP Physics Congress (SPP2005)*, October 26-28, Iloilo City, Philippine (2005).

B-3) 総説、著書

猿倉信彦, 「遷移金属結晶レーザー」, レーザーハンドブック第2版, レーザー学会編, オーム社 (2005).

村上英利、猿倉信彦, 「テラヘルツ波の発生方法」, テラヘルツテクノロジー, 大森豊明監修, (株)エヌ・ティー・エス (2005).

B-4) 招待講演

N. SARUKURA, “Analysis of biomolecular behavior using terahertz radiation and development of integrated terahertz optics,” International Conference on Coherent and Nonlinear Optics/International Conference on Lasers, Applications, and Technologies (ICONO/LAT 2005), St. Petersburg (Russia), May 2005.

N. SARUKURA, “Development of Integrated Terahertz Optics,” The 23rd SPP Physics Congress (SPP2005), Iloilo City (Philippine), October 2005.

S. ONO, “Prospects of Wide-Gap Fluoride Hereto-Structures for Deep Ultraviolet Optical devices,” The 23rd SPP Physics Congress (SPP2005), Iloilo City (Philippine), October 2005.

E. ESTACIO and N. SARUKURA, “Below-band gap excited terahertz emission in GaAs/AlGaAs multiple quantum wells,” Second National Symposium on Crystal Growth of Laser Related Materials, Chennai (India), December 2005.

B-5) 特許出願

特願平10-018498, 「高出力遠赤外光発生方法及びその装置」, 猿倉信彦、大竹秀幸 (JST) 1998年.

特願平10-048318, 「THz電磁波発生制御方法」, 腰原伸也、猿倉信彦、嶽山正二郎、宗片比呂夫、南不二雄 (財) 神奈川科学技術アカデミー) 1998年.

特願平11-253632,「固体レーザー装置」, 猿倉信彦、大竹秀幸(JST) 1999年 .

特願2000-32977,「非同軸プリュースター角励起高効率レーザー発振方法」, 町田博、小関俊政、猿倉信彦、福田承生((株) トーキン) 2000年 .

特願2000-109977,「分光素子と遠赤外分光装置」, 猿倉信彦、鈴木光一、矢野隆行、大竹秀幸(JST) 2000年 .

特願2000-312715,「ホログラムの製造方法および装置」, 細野秀雄、平野正浩、猿倉信彦、河村賢一(JST) 2000年 .

特願2000-331796,「発光材料及びそれを用いた光源装置」, 川辺豊、山中明生、花村榮一、堀内大嗣、猿倉信彦、大竹秀幸(JST) 2000年 .

特許番号:3398638,「発光ダイオードおよび半導体レーザーとそれらの製造方法」, 細野秀雄、太田裕道、折田政寛、河村賢一、猿倉信彦、平野正浩(JST、太田裕道、折田政寛) 2000年 .

特願2001-30410,「真空紫外線用光学部品」, 佐藤浩樹、町田博、島村清史、福田承生、猿倉信彦(エヌイーシートーキン(株)) 2001年 .

特願2001-30975,「フッ化リチウムカルシウムアルミニウム単結晶及びその製造方法」, 佐藤浩樹、町田博、島村清史、福田承生、猿倉信彦(エヌイーシートーキン(株)) 2001年 .

特願2001-31172,「フッ化物結晶からなる真空紫外領域用光学部材および光学部材用コーティング材」, 佐藤浩樹、町田博、島村清史、福田承生、猿倉信彦(エヌイーシートーキン(株)) 2001年 .

特願2001-102296,「フッ化物結晶からなる真空紫外領域用光学部材および光学部材用コーティング材」, 佐藤浩樹、町田博、島村清史、福田承生、猿倉信彦(エヌイーシートーキン(株)) 2001年 .

特願2001-114429,「微細加工装置」, 武貞正樹、腰原伸也、猿倉信彦、斎木敏治、物部秀二、松田一成、成毛辰頼、高松公一、村上英利((財) 神奈川科学技術アカデミー) 2001年 .

特許第3551317,「光学材料」, 村上英利、猿倉信彦、大竹秀幸、山瀬利博、西 信之、井上克也(岡崎国立共同研究機構長) 2001年 .

特願2002-122776,「レーザ加工方法及びレーザ加工装置」, 猿倉信彦、腰原伸也、武貞正樹、斎木敏治、物部秀二、穂坂紀子、松田一成、小野晋吾((財) 神奈川科学技術アカデミー) 2002年 .

特願2003-81884,「テラヘルツ電磁波光源」, 杉浦利治、吉田睦、大竹秀幸、廣住知也、猿倉信彦、高橋啓司(アイシン精機(株)) 2003年 .

特願2003-397644,「波長変換方法および波長変換装置」, 政田元太、白石浩之、関根一郎、猿倉信彦、鈴木祐仁、小野晋吾(三菱マテリアル(株)) 2003年 .

B-6) 受賞、表彰

猿倉信彦, 電気学会論文発表賞 (1994).

猿倉信彦, レーザー研究論文賞 (1998).

猿倉信彦, JJAP論文賞(ERATO 河村他)(2001).

和泉田真司, 大幸財団学芸奨励生 (1998).

劉振林, レーザー学会優秀論文発表賞 (1998).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員

Ultrafast Phenomena, program committee (1997-2002).
Ultrafast Phenomena, local committee (2003-2004).
Advanced Solid- State lasers, program committee (1999-2002).
応用物理学会プログラム委員 (1997-2002).
レーザー学会年次大会実行委員 (1998-).
レーザー学会中部支部組織委員 (1998-)
電気学会光量子デバイス技術委員 (1998-).
電気学会アドバンスコヒーレントライトソース調査専門委員会委員長 (2001-2002).
Femtosecond Technologyプログラム委員 (1998-1999).
Ultrafast Optics, program committee (2002-).
THz 2003, program committee (2002-2003).
Laser and Nonlinear Optical Materials, program committee (2002-2003).
Conference on Laser and Electro-Optics/ Pacific Rimプログラム委員 (2002-).
第28回赤外とミリ波に関する国際会議プログラム委員 (2002-2003).

学会誌編集委員

レーザー研究, 編集委員 (1997-).
JJAP編集委員 (1999-).
JJAP Head Editor (2001-).
IEEE JSTQE編集委員 (2000-2001).

B-8) 他大学での講義、客員

名古屋工業大学, 「機能工学特別講義III」, 2004年4月-2005年3月.

B-10) 外部獲得資金

奨励研究(A), 「新紫外波長可変レーザーを用いた全固体高出力超短パルスレーザーシステム」, 猿倉信彦 (1996年-1998年).
奨励研究(A), 「紫外波長可変レーザー結晶を用いた高エネルギー出力抽出への試み」, 猿倉信彦 (1999年-2000年).
特定領域研究(B)(2), 「高強度テラヘルツ電磁波による画像新知覚化システムの構築」, 猿倉信彦 (1999年-2001年).
奨励研究(A), 「連続波レーザー光励起増幅器によるフェムト秒モード同期固体レーザーの高平均出力化」, 猿倉信彦 (2001年-2002年).
基盤研究(B)(2)(展開), 「高強度テラヘルツ電磁波を利用した環境ホルモン物質高感度小型検出システムの開発」, 猿倉信彦 (2001年-2004年).
特定領域研究(2), 「テラワット紫外全固体超短パルスレーザーの開発」, 猿倉信彦 (2003年).
特定領域研究(2), 「非同軸配置のパラメトリック増幅法による真空紫外超短パルスレーザー開発」, 猿倉信彦 (2004年-2005年).
萌芽研究, 「真空紫外高輝度発光ダイオードを用いた画像計測システム」, 猿倉信彦 (2005年-2007年).

学振特別研究員奨励費,「光結晶ファイバーを用いたテラヘルツ波ピグテイルによる生体分子の実時間計測近接場顕微分析装置の開発」, Alex Quema (2004年-2005年).

若手研究(B),「紫外全固体レーザーのテラワット化にむけた高効率、高出力な新增幅器の開発」, 小野晋吾 (2004年-2006年).

科学技術振興事業団,「高出力遠赤外発生装置」, 猿倉信彦 (1999年).

科学技術振興事業団,「紫外レーザー材料の開発」, 猿倉信彦 (1999年-2000年).

中小企業総合事業団(NEDO再受託),「強磁場増強THz放射による時系列変換時間分解分光システムの研究開発」, 猿倉信彦 (1999年-2000年).

C) 研究活動の課題と展望

遠赤外超短パルスレーザーには,その実用という点において ミリワット級のアベレージパワーを持つテラヘルツ放射光源が必要となる。我々のグループでは,半導体基板に強磁場を印加したテラヘルツエミッタを用いることで,平均出力でサブミリワット級のテラヘルツ電磁波光源を実現し,今まで非常に難しいとされていたテラヘルツ領域の時間分解分光も容易に行うことが可能となった。現在我々は,これを分光測定に実際に使用し,タンパク質の分光測定やナフトール異性体の同定,ナフトール単結晶の構造相転移現象の観測など,すでにいくつかの成果を上げつつある。また,レンズダクトを使用した,テラヘルツ光を扱う新たな光学デバイスや,テラヘルツ領域だけでなく,可視・近・中赤外領域でも透明な新たな光学材料の開発など,テラヘルツ光を物性測定ツールとして用いるのに必要な周辺技術についても研究を行っている。これらを通し,テラヘルツ分光を新たな物性物理分野として確立しようと努力している。

また新紫外光学材料については,これまでの研究で,セリウム添加フッ化物結晶による紫外波長可変全固体レーザーの開発に成功した。今後はこれを用い,新たな紫外非線形材料の探索や新紫外レーザー結晶の特性評価などの物性研究を行う予定である。

平等拓範(助教授)(1998年2月1日着任)

A-1) 専門領域：量子エレクトロニクス、光エレクトロニクス、レーザー物理、非線形光学

A-2) 研究課題：マイクロ固体フォトンクスの研究

- a) 材料探索と素子開発に関する研究
- b) 高輝度光発生に関する研究
- c) 非線形光学波長変換に関する研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a1) 発振スペクトルの高純度化と高効率化の観点より、1990年にはNd:YVO₄の優位性を見出しマイクロチップ構造とする事を提案。さらに、1993年にYb:YAG、1997年にはセラミックYAGへと展開を図り、当該分野を創出、牽引してきた。ここで、Yb:YAGは原子量子効率91%と非常に高いもののレーザー下準位が基底準位群内に属する準四準位系であるため長らくレーザーには適さないとされてきた。1994年にはYb:YAGのモデルを提案、高効率発振のための条件を明らかにしスロープ効率75%の高効率動作と単一縦モード発振を最初の実証した。並行して、日本の固有技術であるセラミック固体レーザーの可能性を検討し、単結晶では不可能であった高濃度添加Nd:YAGセラミックの高効率発振、非線形波長変換による緑色光発生を初めて実証した。驚くべき事に、一般に用いられるNd:YAGですら、その基礎となるパラメータやモデルに問題が残っていた。そこで新たに光学特性評価法とその過程で見出した直接励起法の有用性を提案、室温にて効率80%と従来の量子限界をも超える高効率レーザー発振に、Nd:YAG、Nd:YVO₄、Nd:GdVO₄などを用いて成功した。ところで、レーザー光のコヒーレンスを損なわずに任意の波長に変換する手法として非線形光学波長変換がある。特に、材料の透明波長領域において任意に位相整合可能な擬似位相整合(QPM)法に関して注目が集まっている。しかしながら、QPM材料として有名なLiNbO₃(LN)は光損傷閾値が低く寸法にも制約があった為、問題となっていた。また、MgO添加LN(MgLN)は光損傷耐性が高いもののQPM構造の作製は困難とされていた。そこで分極反転法の基礎に立ち返った検討を行い、2000年にはその場観察法を、2002年にはQPM作製法を確立した。これにより高効率で多機能な波長変換が可能となった。
- a2) レーザー媒質の理想的動作状態を実現するための界面処理法を開発し、セラミック技術と併せる事で、わずか5 mm 直径、300 μm 厚の結晶から準CWで約500 Wの出力をスロープ効率60%で、CWでは最大340 Wと加工機並の大出力をスロープ効率40%で得る事に成功した。出力密度にして57 kW/cm²にも至り角砂糖サイズから60 kW程度の出力が得られる勘定になる。また、同系統の材料を用いる事で280 fsまでの超短パルス光発生にも成功した。一方、共振器長わずか15 mmの受動QスイッチNd:YAGマイクロレーザーにおける偏光制御法を確立することで、単一周波数、直線偏光、回折限界($M^2 = 1.05$)で尖頭出力1.7 MW、輝度にして $B = 137 \text{ TW/sr-cm}^2$ の高輝度光をLD駆動平均電力16 mW/パルスで得た。別の指標として輝度温度(物質への光照射による昇温の理論限界を示す)を用いるなら $1.7 \times 10^{20} \text{ K}$ に至る。このような高輝度温度光の発生に、手のひらサイズ、バッテリー駆動程度の低消費電力で成功した。御存知のように、太陽表面輝度温度は6000 K程度に留まるもので、いかに高輝度な状態であるかが分かる。このため波長変換などの非線形効果が顕著になるだけでなくプラズマ発生や金属などへの加工も可能になる。
- a3) 単色高輝度パルスいわゆる高輝度温度光は、非線形光学波長変換に最適であり、レーザー出力端にLBO結晶を配置するだけの簡単構成で尖頭出力数100 kWの高出力可視光(第2高調波、532 nm)、紫外光(第3高調波、355 nm)の発

生が可能となった。さらに、MgLN結晶を用いた光パラメトリック発生によるテラヘルツ波(波長約200 μm)では、従来の大型装置を用いた場合に比べ、閾値を1/100に低減すると共に、破壊に至るまでの損傷閾値を6倍以上改善できた。また、QPM構造をMgLNに施した周期分極反転LN(PPMgLN)を用いて1 Wを越えるCW緑色光の発生、CW数100 mWながら変換効率70%の青色光発生、単行波長変換で初めてのマイクロレーザーからの3倍波CW紫外光発生にも成功した。一方、中赤外光に関しては、当研究室で開発した素子厚5 mmの大口径PPMgLNを用いた光パラメトリック発振器にて、出力77 mJの高エネルギーパルスで70%以上の効率で発生させる事に成功した。さらには、QPMに複屈折位相整合の概念を導入し、周期構造による超短パルス光の高機能波長変換が可能な事を初めて実証した。

B-1) 学術論文

Y. SATO, T. TAIRA, O. NAKAMURA and Y. FURUKAWA, “Stark Levels, Selection Rules, and Polarized Cross Sections of Yb:GdVO₄ Single Crystal,” *OSA TOPS* **98**, 13–17 (2005).

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Periodically Poled 5mm-Thick MgO-Doped Congruent LiNbO₃ for High Power/Energy Wavelength Conversion,” *OSA TOPS* **98**, 97–101 (2005).

J. SAIKAWA, Y. SATO, T. TAIRA, O. NAKAMURA and Y. FURUKAWA, “879-nm Direct-Pumped Nd:GdVO₄ Lasers: 1.3- μm Laser Emission and Heat Generation Characteristics,” *OSA TOPS* **98**, 183–187 (2005).

N. PAVEL, Y. SATO, T. TAIRA, Y. TAMAOKI and H. KAN, “Generation of 5 W Continuous-Wave Green Power at 531 nm Based on a Frequency-Doubled Nd:GdVO₄ Micro-Laser Pumped into the Emitting Level at 879 nm,” *OSA TOPS* **98**, 462–467 (2005).

N. PAVEL, T. TAIRA, K. MIZUUCHI, A. MORIKAWA, T. SUGITA and K. YAMAMOTO, “Continuous-Wave 456-nm Blue Light Generation in a Bulk Periodically Poled MgO:LiNbO₃ Crystal,” *OSA TOPS* **98**, 468–472 (2005).

M. TSUNEKANE, T. DASCALU and T. TAIRA, “High-Power Operation of Diode Edge-Pumped, Microchip Yb:YAG Laser Composed with YAG Ceramic Pump Wave-Guide,” *OSA TOPS* **98**, 603–607 (2005).

N. PAVEL, V. LUPEI and T. TAIRA, “1.34- μm Efficient Laser Emission in Highly-Doped Nd:YAG under 885-nm Diode Pumping,” *Opt. Express* **13**, 7948–7953 (2005).

M. TSUNEKANE and T. TAIRA, “High-Power Operation of Diode Edge-Pumped, Glue-Bonded, Composite Yb:Y₃Al₅O₁₂ Microchip Laser with Ceramic, Undoped YAG Pump Light-Guide,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **44**, L1164–L1167 (2005).

N. PAVEL and T. TAIRA, “High-Power Continuous-Wave Intracavity Frequency-Doubled Nd:GdVO₄-LBO Laser under Diode Pumping into the Emitting Level,” *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **11**, 631–637 (2005).

Y. SATO and T. TAIRA, “Comparative Study on the Spectroscopic Properties of Nd:GdVO₄ and Nd:YVO₄ with Hybrid Process,” *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **11**, 613–620 (2005).

J. YI, H. ISHIZUKI, I. SHOJI, T. TAIRA and S. KURIMURA, “Infrared Laser Spectra from an Optical Parametric Oscillator Using 5 mol.% MgO-Doped Periodically Poled Lithium Niobate,” *J. Korean Phys. Soc.* **47**, 439–443 (2005).

A. MORIKAWA, K. MIZUUCHI, T. SUGITA, K. YAMAMOTO, N. PAVEL and T. TAIRA, “Efficient Green and Blue Light Generation Using SHG Devices with Periodically Poled Structures,” *Rev. Laser Eng.* **33**, 671–675 (2005). (in Japanese)

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “High-Energy Quasi-Phase-Matched Optical Parametric Oscillation in a Periodically Poled MgO:LiNbO₃ Device with a 5 mm $\times$ 5 mm Aperture,” *Opt. Lett.* **30**, 2918–2920 (2005).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Periodical poling in 5mm-thick MgO-doped congruent LiNbO₃ crystals for high-power wavelength conversion,” *OSA Topical meeting on Advanced Solid-State Photonics*, MB26 (2005).
- N. PAVEL, T. TAIRA, K. MIZUUCHI, A. MORIKAWA, T. SUGITA and K. YAMAMOTO**, “Continuous-wave 456-nm blue light generation in a periodically poled MgO:LiNbO₃ by single-pass frequency doubling of a 912-nm Nd:GdVO₄ laser,” *OSA Topical meeting on Advanced Solid-State Photonics*, MB27 (2005).
- J. SAIKAWA, Y. SATO, T. TAIRA, O. NAKAMURA and Y. FURUKAWA**, “Efficient 1341-nm laser emission and heat generation characteristics in Nd:GdVO₄ laser under direct 879-nm pumping,” *OSA Topical meeting on Advanced Solid-State Photonics*, MB48 (2005).
- Y. SATO, J. SAIKAWA, T. TAIRA, O. NAKAMURA and Y. FURUKAWA**, “Spectroscopic properties of Yb:GdVO₄ single crystal: Stark levels, selection rules, and polarized cross sections,” *OSA Topical meeting on Advanced Solid-State Photonics*, MF8 (2005).
- N. PAVEL, Y. SATO, T. TAIRA, Y. TAMAOKI, and H. KAN**, “Generation of 5W continuous-wave green power at 531 nm based on a frequency-doubled Nd:GdVO₄ micro-laser pumped into the emitting level at 879 nm,” *OSA Topical meeting on Advanced Solid-State Photonics*, MF19 (2005).
- M. TSUNEKANE, T. DASCALU and T. TAIRA**, “High-power operation of diode edge-pumped, composite microchip Yb:YAG laser with ceramic pump wave-guide,” *OSA Topical meeting on Advanced Solid-State Photonics*, TuB43 (2005).
- R. BHANDARI and T. TAIRA**, “Widely tunable CW and Q-switched operation of thin-rod Yb:YAG laser,” *Conference on Lasers and Electro-Optics CLEO 2005*, CMA6 (2005).
- J. SAIKAWA, Y. SATO, T. TAIRA, O. NAKAMURA and Y. FURUKAWA**, “Efficient 1.3-μm laser oscillation and heat generation characteristics in Nd:GdVO₄ laser under direct pumping into ⁴F_{3/2} emitting level,” *Conference on Lasers and Electro-Optics CLEO 2005*, CMS6 (2005).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Fabrication and characterization of 5-mm-thick periodically poled MgO:LiNbO₃ device,” *Conference on Lasers and Electro-Optics CLEO 2005*, CFC7 (2005).
- J. YI, H. ISHIZUKI, I. SHOJI, T. TAIRA and S. KURIMURA**, “Generation of Mid-IR laser by PPMgLN OPO/DFG configuration,” *Conference on Lasers and Electro-Optics CLEO 2005*, JTuC11 (2005).
- Y. SATO, T. TAIRA and A. IKESUE**, “Spectroscopic properties of all-ceramic composite with layer-by-layer of Nd:Y₃Al₅O₁₂ and Nd:Y₃ScAl₄O₁₂,” *Conference on Lasers and Electro-Optics CLEO 2005*, JTuC28 (2005).
- N. PAVEL, T. TAIRA, M. IWAI, T. YOSHINO and M. IMAEDA**, “Deep blue generation at 456 nm in a periodically poled MgO:LiNbO₃ ridge-type waveguide by single-pass frequency doubling of a Nd:GdVO₄ micro-laser,” *Conference on Lasers and Electro-Optics CLEO 2005*, JTuC30 (2005).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “High-energy optical-parametric oscillator by using 5 mm × 5 mm aperture periodically poled MgO:LiNbO₃,” *CLEO/EUROPE 2005*, CD4-1-MON (2005).
- T. DASCALU and T. TAIRA**, “Highly efficient new pumping configuration for microchip solid state laser,” *CLEO/EUROPE 2005*, CA7-2-THU (2005).
- Y. SATO, T. TAIRA and A. IKESUE**, “Designing of spectroscopic characteristics in all-ceramic composite with layer-by-layer of Nd:Y₃ScAl₄O₁₂ and Nd:Y₃Al₅O₁₂,” *CLEO/EUROPE 2005*, CA-14-MON (2005).

N. PAVEL, T. TAIRA, M. IWAI, T. YOSHINO and M. IMAEDA, “Blue generation at 456 nm by single-pass frequency-doubling of a Nd:GdVO₄ micro-laser in a periodically poled MgO:LiNbO₃ ridge-type waveguide,” *CLEO/EUROPE 2005*, CA-18-MON (2005).

N. PAVEL and T. TAIRA, “Efficient 1.06 and 1.34-μm laser emission of highly-doped Nd:YAG under 885-nm diode pumping into the emitting level,” *CLEO/EUROPE 2005*, CA-19-MON (2005).

R. BHANDARI, T. KAMIYA and T. TAIRA, “Widely tunable and high repetition rate Q-switching in Yb:YAG laser,” *CLEO/EUROPE 2005*, Munich, Germany, June 12-17, CA-20-MON (2005).

N. PAVEL and T. TAIRA, “High-power multi-pass pumped microchip Nd:GdVO₄ laser,” *CLEO/PR 2005*, CTuI3-5, 275–276 (2005).

Y. SATO and T. TAIRA, “Hybrid process for measurement of spectroscopic properties of Nd:GdVO₄,” *CLEO/PR 2005*, CW12-5, 622–623 (2005).

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Quasi-phase matched optical-parametric oscillation by using 5 mm-thick periodically poled MgO:LiNbO₃,” *CLEO/PR 2005*, QWL2-4, 649–650 (2005).

N. PAVEL, V. LUPEI and T. TAIRA, “Efficient laser emission at 1.3 μm and thermal effects in Nd:YAG under diode pumping into the ⁴F_{3/2} emitting level,” *CLEO/PR 2005*, CThI1-5, 1174–1175 (2005).

H. SAKAI, A. SONE, H. KAN and T. TAIRA, “Diode-pumped passively Q-switched high-brightness microchip lasers,” *CLEO/PR 2005*, CThI2-2, 1246–1247 (2005).

S. HAYASHI, K. SHINDO, H. SAKAI, H. KAN, T. TAIRA and K. KAWASE, “Terahertz-wave parametric generator pumped by a microchip Nd:YAG laser,” *CLEO/PR 2005*, JFH4-1, 1755–1756 (2005).

B-3) 総説、著書

T. TAIRA, M. TSUNEKANE and T. DASCALU, “Diode edge-pumped microchip composite Yb:YAG laser,” *Rev. Laser Eng.* **33**, 228–235 (2005).

T. TAIRA, “Visible micro solid-state lasers,” *Rev. Laser Eng.* **33**, 655–661 (2005).

平等拓範, 「レーザー基礎」, 「レーザーハンドブック」, レーザー学会編, オーム社, 編幹事, I編, pp. 1–45 (2005).

平等拓範, 「全固体レーザー」, 「レーザーハンドブック」, レーザー学会編, オーム社, 章担当主査, 15章, pp. 295–324 (2005).

平等拓範, 「マイクロチップ用レーザー材料」, 「レーザーハンドブック」, レーザー学会編, オーム社, 12.4章, pp. 206–214 (2005).

平等拓範, 「概要」, 「レーザーハンドブック」, レーザー学会編, オーム社, 第15.1章, pp. 295–305 (2005).

平等拓範, 「マイクロチップレーザー」, 「レーザーハンドブック」, レーザー学会編, オーム社, 第15.3章, pp. 311–319 (2005).

平等拓範, 「光波制御マイクロチップレーザー」, *光科学研究の最前線* **15-4**, 60–61 (2005).

B-4) 招待講演

平等拓範, 「Advanced Solid-State Photonics 国際会議報告」, (財)光産業技術振興協会, 光材料・応用技術研究会, 岡崎, 2005年3月.

平等拓範, 「Ndバナデイトレーザーの基本特性と展望」, 理研シンポジウム～バナデイトレーザーの新展開～, 埼玉, 2005年4月.

平等拓範,「高輝度マイクロチップレーザーの新展開」, 豊田中央研究所, 愛知郡長久手, 2005年4月.

平等拓範, 石月秀貴,「マイクロチップレーザーの新展開」特別シンポジウム「横断・融合的学術としての光・光量子科学」, 東京大学, 東京, 2005年4月.

平等拓範,「半導体レーザー励起固体レーザー材料」, Laser Expo 2005, レーザー学会主催特別セミナー, パシフィコ横浜, 2005年4月.

平等拓範,「広帯域波長可変マイクロチップレーザー」, 理研・分子研合同シンポジウム「エクストリームフォトニクス研究」, 理化学研究所, 埼玉, 2005年4月.

T. TAIRA, “Thick PPMgLN based nonlinear wavelength conversion,” Pusan National University, Busan (Korea), May 2005.

T. TAIRA, “New advanced lasers—ceramic and microchip laser—,” Yeungnam University, Kyongsan (Korea), May 2005.

T. TAIRA, “Edge pumped Yb:YAG microchip laser,” Advanced Lasers and Their Applications, Cheju National University, Jeju-do (Korea), May 2005.

T. TAIRA, “High power microchip laser,” Stanford University, CA (U.S.A.), May 2005.

M. TSUNEKANE, T. DASCALU and T. TAIRA, “High-power, diode edge-pumped, single-crystal Yb:YAG/ceramic YAG composite microchip Yb:YAG laser for material processing,” Conference on Lasers and Electro-Optics CLEO 2005, Baltimore, Maryland (U.S.A.), May 2005.

T. TAIRA, “Laser operation with near quantum-defect slope efficiency in Nd-vanadate lasers,” CLEO/PR 2005, Tokyo (Japan), July 2005.

T. TAIRA, “Chromatic micro-lasers,” Joseph Fourier University, Saint Martin (France), June 2005.

T. TAIRA, “Micro-photonics toward chromatic laser,” Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris (France), June 2005.

T. TAIRA, “Chromatic micro solid-state lasers,” Institute of Atomic Physics, Bucharest (Romania), August 2005.

T. TAIRA, “The promise of laser ceramics as high power microchip laser,” Topical Problems of Nonlinear Wave Physics 2005, St.-Petersburg-Nyzhny Novgorod (Russia), August 2005.

T. TAIRA, “Advanced solid-state microchip lasers,” Hamburg University, Hamburg (Germany), August 2005.

T. TAIRA, “Ceramic micro solid-state lasers,” 1st International Laser Ceramics Symposium, Warsaw University of Technology, Warsaw (Poland), September 2005.

A. IKESUE, K. YOSHIDA, T. KAMIMURA, Y. L. AUNG and T. TAIRA, “Ceramic lasers of normal and composite type,” 1st International Laser Ceramics Symposium, Warsaw University of Technology, Warsaw (Poland), September 2005.

平等拓範,「光制御マイクロレーザーの可能性～手のひらサイズ高輝度レーザーとクルマの接点～」, (社)自動車技術会, 自然科学研究機構, 岡崎, 2005年9月.

T. TAIRA, “Thick periodically poled MgO-doped LiNbO₃ devices and their applications,” The 18th Annual Meeting of the IEEE Lasers & Electro-Optics Society (LEOS 2005), Hilton Sydney, Sydney (Australia), October 2005.

T. TAIRA, “Promise of periodically poled MgO-doped LiNbO₃ devices,” Macquarie University, Sydney (Australia), October 2005.

B-5) 特許出願

特許番号:2060958,「データ処理装置」, 平等拓範, 松尾雅仁(三菱電機(株)), 1988年(CPUのパイプライン処理法)

特許番号:2618723,「テスト回路」,平等拓範、是松次郎(三菱電機(株))1989年.(符号理論を適用したマイクロプロセッサのテスト回路)US Patent, No. 5,247,525.

特開平6-88979,「Qスイッチ・第2高調波発生複合素子」,平等拓範、小林喬郎(住友セメント(株))(株)応用光電研究室、平等拓範、小林喬郎)1992年.

特開平10-84155,「固体レーザ装置」,平等拓範、鈴木剛(株)リコー)1996年.US Patent, No. 6,026,101.

特開平11-46026,「レーザー励起固体レーザーの設計法」,平等拓範(平等拓範、ホーヤ(株))1997年.

特開2000-216468,「レーザ発振器」,佐々木基、小関良治、平等拓範(澁谷工業(株))1999年.

特開2001-220223,「レーザー媒質およびその製造方法、ならびにそのレーザー媒質を用いたレーザー発振器」,池末明生、吉田國雄、平等拓範(レッドゴールド(株))2000年.

特開2002-136506,「血糖値検出装置」,佐々木基、小関良治、平等拓範(澁谷工業(株))2000年.

特許番号:3503588,「固体レーザ発振装置」,佐々木基、小関良治、平等拓範(澁谷工業(株))2000年.

特開2002-223021,「レーザ発振素子、レーザ発振装置、レーザ発振素子用共振器、及びレーザ発振素子共振器用ホスト結晶」,石井満、平等拓範、今枝美能留(日本碍子(株))2001年.

特開2002-372731,「波長変換、光演算素子」,栗村直、平等拓範、谷口浩一(三菱電線工業(株)栗村直、平等拓範)2001年.

特開2003-15175,「固体光源装置」,山本修平、平野嘉仁、庄司一郎、平等拓範、栗村直(三菱電機(株))2001年.US Patent, No. 6738397

特開2003-75876,「角膜手術装置」,山田毅、笠松充男、栗村直、平等拓範(株)ニデック)2001年.

特開2003-86873,「受動Qスイッチレーザ」,酒井博、曽根明弘、菅博文、平等拓範(浜松ホトニクス(株))2001年.

特開2003-198019,「レーザ光源」,菅博文、曽根明弘、酒井博、平等拓範、ニコライ・パベル、ボイク・ルペイ(浜松ホトニクス(株))2001年.

特開2003-158325,「受動Qスイッチレーザ」,酒井博、曽根明弘、菅博文、平等拓範(浜松ホトニクス(株))2002年.

特許番号:3585891,「光学素子」,平等拓範、庄司一郎(JST)2002年.

特開2003-332657,「レーザーシステム」,和田智之、小川貴代、平等拓範、庄司一郎、佐藤庸一、ボイク・ルペイ、ニコライ・パベル(株)メガオプト)2002年.

特開2004-119487,「レーザ装置」,平等拓範、ニコライ・パベル、ボイク・ルペイ、庄司一郎(JST)2002年.

特開2004-152817,「レーザ装置」,平等拓範、トライアン・ダスカル、ニコライ・パベル(JST)2002年.

特開2004-356479,「レーザー装置」,平等拓範、トライアン・ダスカル(JST)2003年.

特願2003-275522,「レーザ装置」,菅博文、曽根明弘、平等拓範、古川保典(岡崎国立共同研究機構長、(株)オキサイド、浜松ホトニクス(株))2003年.

特願2003-375057,「固体レーザー装置」,平等拓範、常包正樹(JST)2003年.

特願2004-87361,「レーザー装置」,平等拓範、常包正樹(JST)2004年.

特願2004-87362,「固体レーザー装置の光ガイドの光入射窓」,平等拓範、常包正樹、トライアン・ダスカル(JST)2004年.

特願2004-87363,「固体レーザー装置」,平等拓範、常包正樹(JST)2004年.

特願2004-282428,「レーザ装置」,平等拓範、佐藤庸一、玉置善紀(自然科学研究機構、(株)オキサイド、浜松ホトニクス(株))2004年.

特願2004-280425,「レーザ装置」,平等拓範、ニコライ・パペル、玉置善紀(自然科学研究機構、(株)オキサイド、浜松ホトニクス(株)),2004年.

特願2004-258947,「受動Qスイッチレーザ装置」,平等拓範、酒井博、菅博文(自然科学研究機構、浜松ホトニクス(株)),2004年.

特願2005-132191,「レーザ点火装置」,姉崎幸信、金原賢治、阿部亜紀、吉永融、平等拓範((株)デンソー、(株)日本自動車部品総合研究所、自然科学研究機構),2005年.

特願2005-132192,「レーザ光源」,阿部亜紀、金原賢治、姉崎幸信、平等拓範((株)日本自動車部品総合研究所、自然科学研究機構),2005年.

特願2005-204070,「レーザ発振装置」,金原賢治、阿部亜紀、姉崎幸信、平等拓範((株)日本自動車部品総合研究所、自然科学研究機構),2005年.

B-6) 受賞、表彰

斎川次郎,応用物理学会北陸支部発表奨励賞(1998).

平等拓範,第23回(社)レーザー学会業績賞(論文賞)(1999).

平等拓範,第1回(財)みやぎ科学技術振興基金研究奨励賞(1999).

池末明生、平等拓範、吉田國雄,第51回(社)日本金属学会金属組織写真奨励賞(2001).

庄司一郎,第11回(2001年秋季)応用物理学会講演奨励賞(2001).

池末明生、鈴木敏之、佐々木優吉、平等拓範,(社)日本ファインセラミックス協会技術振興賞(2002).

平等拓範,平成16年度文部科学省文部科学大臣賞(第30回研究功績者)(2004).

NICOLAIE PAVEL, The ROMANIAN ACADEMY Awards, The “Constantin Miculescu” Prize (2004).

斎川次郎、佐藤庸一、池末明生、平等拓範,第29回(社)レーザー学会業績賞(進歩賞)(2005).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

平等拓範,レーザー学会,レーザー素子機能性向上に関する専門委員会幹事(1997-1999).

平等拓範,レーザー学会,研究会委員(1999-).

平等拓範,電気学会,高機能全固体レーザと産業応用調査専門委員会幹事(1998-2002).

平等拓範,レーザー学会,レーザー用先端光学材料に関する専門委員会委員(2000-2002).

平等拓範, LASERS 2001, 国際会議プログラム委員(2001).

平等拓範(社)レーザー学会,学術講演会プログラム委員(2001-2004).

平等拓範, NEDO 評価委員(2004).

平等拓範(財)光産業技術振興協会,光材料・応用技術研究会幹事(2004-).

平等拓範, CLEO/Pacific Rim 2005, 国際会議プログラム委員(2005).

平等拓範,(社)レーザー学会,評議員(2005-).

平等拓範, Advanced Solid-State Photonics, 国際会議プログラム委員(2005-).

平等拓範, 23rd International Laser Radar Conference, 国際会議実行委員(2005-).

平等拓範, Int. Conf. “Micro- to Nano-Photonics—ROMOPT 2006,” プログラム委員(2005-).

科学研究費の研究代表者、班長等

平等拓範, 奨励研究(A) (No. 08750054) (1995).

平等拓範, 重点領域(2) (No. 07246220)(1995), (No. 08236216)(1996), (No. 09222207)(1997).

平等拓範, 奨励研究(A) (No. 10750245) (1998-1999).

平等拓範, 基盤(B)(2) 展開研究(No. 10555016) 研究代表者 (1998-2000).

平等拓範, 特別研究奨励費(No. 10-98381) 研究代表者 (1999-2000).

平等拓範, 基盤(B)(2) 一般研究(No. 11694186) 研究代表者 (1999-2001).

平等拓範, 地域連携推進研究(No. 12792003) 研究代表者 (2000-2002).

平等拓範, 科学技術振興調整費 <産学官共同研究の効果的な推進>(輻射制御直接励起マイクロチップレーザー)
研究代表者 (2002-2005).

平等拓範, 基盤(A)(2) 一般研究(No. 15206073) 研究代表者 (2003-).

B-8) 他大学での講義、客員

福井大学, 非常勤講師, 1999年 - .

理化学研究所, 客員研究員, 1999年 - .

物質・材料研究機構, 客員研究員, 2001年 - .

B-9) 外部獲得資金

奨励研究(A), 「半導体レーザー励起高効率単一縦モード発振Yb:YAGリングレーザーの研究」, 平等拓範 (1995年).

重点領域研究(2), 「有機材料による近赤外域多機能マイクロチップ光パラメトリック発振器の研究」, 平等拓範 (1995年-1997年).

奨励研究(A), 「波長多重高密度記録光メモリのための新型青緑域波長可変高コヒーレントレーザーの提案」, 平等拓範 (1998年-1999年).

基盤研究(B)(2)(展開), 「広帯域波長可変超短パルス光源のための高出力Yb:YAGモードロックレーザーの開発」, 平等拓範 (1998年-2000年).

特別研究員奨励費, 「非線形波長変換に適した高輝度レーザーシステムの開発研究」, 平等拓範 (1999年-2000年).

基盤研究(B)(2)(一般), 「大出力小型固体レーザーによる広帯域赤外光発生に関する研究」, 平等拓範 (1999年-2001年).

地域連携推進研究費(2), 「界面制御による高機能光計測用波長可変クロマチップレーザーの開発研究」, 平等拓範 (2000年-2002年).

基盤研究(A)(2)(一般), 「次世代セラミックレーザー」, 平等拓範 (2003年-2005年).

産学官共同研究の効果的な推進, 「輻射制御直接励起マイクロチップレーザー」, 平等拓範 (2002年-2004年).

地域新生コンソーシアム, 「ヒートシンク一体型Yb:YAGマイクロチップデバイスの開発」, 平等拓範 (2004年-2005年).

NEDO, 「カラーリライタブルプリンタ用高効率小型可視光光源“ Tri Color Laser ”の研究開発」, 再委託(研究代表 リコー)
(2004年-2007年).

応用光電研究室, 「Yb:YAGレーザ研究助成」, 平等拓範 (1996年).

HOYA(株), 「Ybレーザ研究助成」, 平等拓範 (1996年).

(株)ユニタック, 「半導体レーザー励起固体レーザーに関する研究補助」, 平等拓範 (1997年).

HOYA(株) R&Dセンター, 「高安定化Yb固体レーザーの研究助成」, 平等拓範 (1997年).

HOYA(株)「LD励起Yb:YAG及びYb:ガラスレーザーの研究開発」, 平等拓範 (1998年).

三菱電機(株)「擬似位相整合波長変換デバイスに関する研究助成」, 平等拓範 (1999年).

(株) 澁谷工業「高性能レーザー開発研究の支援」, 平等拓範 (1999年).

カンタム(株)「マイクロチップレーザーの研究助成」, 平等拓範 (1999年).

(財) 光科学技術研究振興財団「高機能レーザー応用のための新型青緑光域波長可変高コヒーレントYb:YAGマイクロチップレーザーの開発研究」, 平等拓範 (1999年-2000年).

(株) 澁谷工業「LD励起固体レーザー研究補助」, 平等拓範 (2002年).

三菱電機(株)「高出力Yb:YAGレーザーの研究」, 平等拓範 (1996年).

リコー応用電子研究所「固体レーザーに関する研究」, 平等拓範 (1996年).

科学技術振興事業団「高精度応用計測をめざした多機能な中・遠赤外光発生デバイスの開発研究」, 平等拓範 (2000年).

浜松ホトニクス(株)「高輝度波長可変クロマチップレーザーの研究」, 平等拓範 (2000年).

澁谷工業(株)「LD励起固体Yb:YAGレーザーモジュールの研究開発」, 平等拓範 (2000年).

(財) 福井県産業支援センター「超短パルスマイクロチップレーザー及び超短パルス増幅器の開発」, 平等拓範 (2000年).

(財) 福井県産業支援センター「中赤外領域波長可変高出力OPOの開発」, 平等拓範 (2000年).

浜松ホトニクス(株)「高輝度波長可変クロマチップレーザーの研究」, 平等拓範 (2001年).

(財) 福井県産業支援センター「超短パルスマイクロチップレーザー及び超短パルス増幅器の開発」, 平等拓範 (2001年).

(財) 福井県産業支援センター「中赤外領域波長可変高出力OPOの開発」, 平等拓範 (2001年).

(株) リコー「擬似位相整合波長変換デバイスの高出力化の研究」, 平等拓範 (2001年).

(株) ニコン「水晶を用いた擬似位相整合非線形光学素子の開発」, 平等拓範 (2001年).

浜松ホトニクス(株)「高輝度波長可変クロマチップレーザーの研究」, 平等拓範 (2002年).

浜松ホトニクス(株)「ホットバンド励起Nd:YAGレーザー」, 平等拓範 (2002年).

(財) 福井県産業支援センター「超短パルスマイクロチップレーザー及び超短パルス増幅器の開発」, 平等拓範 (2002年).

(財) 福井県産業支援センター「中赤外領域波長可変高出力OPOの開発」, 平等拓範 (2002年).

(株) リコー「高出力擬似位相整合非線形波長変換デバイス用高アスペクト分極反転法の開発」, 平等拓範 (2002年).

浜松ホトニクス(株)「高輝度波長可変マイクロチップレーザーの研究」, 平等拓範 (2003年).

(財) 福井県産業支援センター「超短パルスYb:YAGレーザーの開発」, 平等拓範 (2003年).

(株) リコー「小型・高出力波長変換レーザー光源の研究」, 平等拓範 (2003年).

サンクス(株)「Yb:YAGパルスレーザー」, 平等拓範 (2003年).

松下電器産業(株)「レーザーディスプレイ用マイクロチップレーザーの研究」, 平等拓範 (2003年).

浜松ホトニクス(株)「高輝度マイクロチップレーザーの研究」, 平等拓範 (2004年).

(財) 福井県産業支援センター「超短パルスYb:YAGレーザーの開発」, 平等拓範 (2004年).

(株) リコー「側面励起型小型高出力緑/青色レーザー光源の研究」, 平等拓範 (2004年).

サンクス(株)「Yb:YAGパルスレーザー」, 平等拓範 (2004年).

松下電器産業(株)「レーザーディスプレイ用マイクロチップレーザーの研究」, 平等拓範 (2004年).

(株) 日本自動車部品総合研究所・(株) デンソー「マイクロチップレーザーを用いたパルスレーザーの高輝度化研究」, 平等拓範 (2004年).

(財) 福井県産業支援センター「超短パルスYb:YAGレーザーの開発」, 平等拓範 (2005年).

(株)日本自動車部品総合研究所・(株)デンソー、「マイクロチップレーザによるレーザイグニッションの基礎研究」, 平等拓範 (2005年).

松下電器産業(株)「レーザーディスプレイ用マイクロチップレーザの研究」, 平等拓範 (2005年).

オプトウェア(株)「超小型マイクロチップQ-スイッチグリーンレーザの開発」, 平等拓範 (2005年).

サンクス(株)「Yb:YAGパルスレーザ」, 平等拓範 (2005年).

浜松ホトニクス(株)「マイクロチップレーザの光増幅に関する研究」, 平等拓範 (2005年).

浜松ホトニクス(株)「赤色マイクロチップレーザの研究」, 平等拓範 (2005年).

(株)リコー、「側面励起型小型高出力緑／青色レーザー光源の研究」, 平等拓範 (2005年).

C) 研究活動の課題と展望

先端的レーザー光源の中で、特にビーム高品質化(空間特性制御)ならびに短パルス化(時間特性制御)などの高輝度化,そしてスペクトルの高純度化を広い波長領域(スペクトル特性制御)でコンパクト化と同時に実現することは、極めて重要な課題である。そこで、固体材料のマイクロドメイン構造を機能設計する事で、光の発生制御を行う「マイクロ固体フォトニクス」の基盤構築に向けた研究を提案する。これにより分子科学のフロンティアの開拓が為されるものと期待される。

安全衛生管理室

戸村正章(助手)(2004年6月1日着任)

A-1) 専門領域：有機化学、構造有機化学、有機固体化学

A-2) 研究課題：

- a) 分子間の弱い相互作用による分子配列制御と機能性分子集合体の構築
- b) 新しいドナーおよびアクセプター分子の合成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) クロラニル酸と種々の窒素配位子を用いて、Bifurcateな水素結合系超分子シントンを開発し、その分子配列制御能を検討した。その結果、この超分子シントンにより、無限の一次元テープ構造を様々な分子系において構築できることを明らかにした。この系では、分子のスタッキングは、ほとんどの場合、分離積層型であり、分子配列がある程度予測可能であることを示唆している。また、ピイミダゾリウム化合物の種々の包接共結晶の結晶構造を詳細に解析することにより、その分子配列制御能を検討した。
- b) 1,2,5-チアジアゾール、1,3-ジチオール、ピラジン、チアゾール、オキサジアゾールなどのヘテロ環を有する新しいドナーおよびアクセプター分子を合成・開発した。これらの中には、ヘテロ原子間の相互作用により特異な分子集合体を形成するものや、高伝導性の電荷移動錯体およびラジカルイオン塩の成分分子となりうるものがあった。さらに、チアゾールとオキサジアゾールをもつ分子に関しては、有機分子デバイスへの応用を目的として、そのFET特性や電子輸送能、ホールブロッキング特性について検討し、興味ある知見を得た。

B-1) 学術論文

K. ONO, T. IWAO, H. UCHIUMI, T. SUZUKI, M. TOMURA, M. OHKITA and K. SAITO, "Molecular Arrangement in the Cocrystals of 1,1',3,3'-Tetramethyl-2,2'-bi-1*H*-imidazolium Bis(tetraphenylborate) with Ketone, Aldehyde, and Nitrile as Guest Molecules," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **78**, 867–872 (2005).

K. ONO, S. EZAKA, A. HIGASHIBATA, R. HOSOKAWA, M. OHKITA, K. SAITO, M. SUTO, M. TOMURA, Y. MATSUSHITA, S. NAKA, H. OKADA and H. ONNAGAWA, "Macrocyclic and Acyclic Bis(2,5-diphenyl-1,3,4-oxadiazole)s with Electron-Transporting and Hole-Blocking Ability in Organic Electroluminescent Devices," *Macromol. Chem. Phys.* **206**, 1576–1582 (2005).

M. AKHTARUZZAMAN, N. KAMATA, J. NISHIDA, S. ANDO, H. TADA, M. TOMURA and Y. YAMASHITA, "Synthesis, Characterization and FET Properties of Novel Dithazolybenzothiadiazole Derivatives," *Chem. Commun.* 3183–3185 (2005).

NARASO, J. NISHIDA, M. TOMURA and Y. YAMASHITA, "TTF Derivatives Containing Fused-Pyrazine Rings for Novel Donor-Acceptor Systems," *Synth. Met.* **153**, 389–392 (2005).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本化学会コンピューター統括委員会CSJ-Web統括的管理運営委員会委員 (2001-2002).

日本化学会広報委員会ホームページ管理委員会委員 (2003-).

C) 研究活動の課題と展望

有機固体における電気伝導性、磁性、光学的非線形性などの物性の発現には、その分子固有の特質のみならず、集合体内でどのように分子が配列しているかということが大いに関与している。そのため、このような機能性物質の開発には分子配列および結晶構造の制御、つまり、分子集合体設計ということが極めて重要である。しかしながら、現状では、簡単な有機分子の結晶構造予測さえ満足には成し遂げられていない。このことは、逆に言えば、拡張 π 電子系内に、水素結合などの分子間の弱い相互作用を導入し、種々の分子集合体を設計・構築するという方法論には、無限の可能性が秘められているということを示している。今後は特に、ヘテロ原子間相互作用・C-H $\cdots\pi$ 相互作用・立体障害といった新しいツールによる分子集合体設計に取り組みたい。また、この分野の研究の発展には、新規化合物の開発が極めて重要であるので、「新しいドナーおよびアクセプター分子の合成」の研究課題も続行する。さらに、以上のような研究活動と安全衛生管理業務の効率的な両立を常に念頭に置いている。

3-11 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

青 野 重 利（教授）（2002年5月1日着任）

A-1) 専門領域：生物無機化学

A-2) 研究課題：

- a) 一酸化炭素センサータンパク質 CooA の構造と機能に関する研究
- b) 酸素センサータンパク質 HemAT の構造と機能に関する研究
- c) 新規なセンサータンパク質 DcrA の単離とその性質の解明
- d) ヘムを活性中心とする新規な脱水酵素の構造と機能に関する研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 好熱性一酸化炭素酸化細菌 *Carboxydotherrmus hydrogenoformans* 中に含まれる CooA ホモログタンパク質 (Ch-CooA) の結晶化条件を検討し、その単結晶を得た。得られた結晶を用いた X 線結晶構造解析により、分子中のヘムにイミダゾールが結合したイミダゾール結合型 Ch-CooA の構造解明に成功した。分子中のヘムには His82 およびイミダゾールが軸配位子として配位していた。イミダゾールは、CO 結合型 Ch-CooA において CO が結合するサイトに結合しており、その結果、還元型ヘムに配位していた N 末端はヘムから解離し、ヘム鉄からは約 16 オングストローム離れたところに位置していることが分かった。これまでに報告されている *Rhodospirillum rubrum* 由来の CooA (Rr-CooA) の還元型における構造と、今回得られた構造を比較した結果、イミダゾール結合型 Ch-CooA 中のヘムは、ヘムの α - γ メソ軸回りに 180 度、軸配位子の配位軸回りに 30 度回転していることが明かとなった。軸配位子の配位軸回りの回転は、イミダゾール結合に際し、還元型ヘムの第 6 配位子である N 末端がヘムから解離したことによって誘起されたものと考えられる。N 末端領域に存在する Met5 のカルボニル酸素とイミダゾール間に水素結合が形成されていることも分かった。この水素結合の存在により、ヘムから解離した N 末端領域のコンフォメーション変化、およびヘムの回転、移動が抑制されていると推定される。CooA の生理的なエフェクターである CO がヘムに配位した場合には、上記のような水素結合による抑制は存在しないと考えられるため、イミダゾールが配位した場合よりもより大きくヘムが回転（あるいは移動）するものと思われる。
- b) 枯草菌中に含まれる HemAT は、本細菌の酸素に対する走化性制御系において酸素センサーとして機能するシグナルトランスデューサータンパク質である。本年度は、昨年度に引き続き、共鳴ラマンスペクトル法を用い、HemAT による酸素センシング機構の解明を行った。その結果、HemAT 中のヘムに酸素分子が結合した酸素化型 HemAT では、His86 とヘムのプロピオン酸基との間で特異的な水素結合が形成されていることが分かった。また、酸素以外の気体分子 (CO および NO) がヘムに結合した場合には、His86 とヘムのプロピオン酸基との間の水素結合は形成されないことも分かった。His86 を Ala に置換した H86A 変異体を用いて同様の測定を行った結果、本変異体では当然のことながら 86 番残基とプロピオン酸基との間の水素結合は形成されない。さらに野生型で観測されるヘムに配位した酸素分子と Thr95 との間の水素結合が、本変異体では形成されていないことが分かった。このことは、HemAT への酸

素結合により、まずHis86とヘムのプロピオン酸基との間で特異的な水素結合が形成されることでCEループ(His86が存在している部分)のコンフォメーション変化が誘起され、それがThr95が位置するEヘリックスの構造変化へとつながっていることを示している。このような一連の構造変化は、酸素が結合した場合にのみ誘起される。なぜならば、COやNOが結合した場合には、構造変化の引き金となるHis86とヘムのプロピオン酸基との間の水素結合形成が起こらないため、一連の構造変化も起こらないものと考えられる。

- c) 新規なセンサータンパク質として、硫酸還元菌*Desulfovibrio vulgaris*中に含まれるDcrAタンパク質の発現系の構築を行い、その性質についての検討を行った。本年度は、昨年度に引き続き、膜タンパク質であるDcrAのペリプラズムドメイン(DcrA-N)のみを発現させ、得られたDcrA-Nの諸性質の解明を行った。大腸菌を用いたDcrA-Nの発現に際しては、DcrAがタンパク質部分に共有結合したc型ヘムを含むと予想されることから、c型ヘムの生成に必要なアクセサリタンパク質を共発現させた発現系を用いた。その結果、DcrA-Nはタンパク質部分と共有結合したc型ヘムを含む成熟型として得られることが分かった。これまでに報告されているヘム含有型センサータンパク質はすべてb型ヘムをセンサーの活性中心として有しており、c型ヘムを活性中心とするセンサータンパク質はDcrAが初めての例である。DcrA-N中に含まれるヘムは、酸化型では第6配位子として水分子が配位した6配位高スピン構造をとる。ところがヘム鉄が還元された還元型DcrA-Nでは、2つのアミノ酸残基が配位した6配位低スピン型となる。また、還元型DcrA-Nは配位飽和な状態にあるにも関わらず、COと容易に反応し、CO結合型を生成することが分かった。DcrA-Nの電気化学的酸化還元滴定を行い、その酸化還元電位を測定したところ、-250 mV (vs. NHE) という、非常に低い酸化還元電位を示した。この値は、DcrA-Nと同様なc型ヘムを有する通常のチトクロムcの値に比べ、約500 mVも低い値である。DcrAが酸素、あるいは酸化ストレスのセンサーとして機能するため、このような低い酸化還元電位を有しているものと推定される。
- d) アルドキシム脱水酵素はアルドキシムの脱水反応によりニトリルを生成する反応を触媒する新規なヘム含有酵素である。本年度は、*Bacillus* sp. OxB-1株由来のアセトアルドキシム脱水酵素(OxB)の構造機能相関の解明を目的とした研究を行った。OxBはモノマー構造を有しており、酵素1分子中に1分子のb型ヘムを有している。Hisが軸配位したヘムは、酸化型ではさらに水分子が配位した6配位高スピン構造を、還元型ではHis配位の5配位高スピン構造を有していることが分かった。本酵素は、分子中のヘムが還元型である場合が活性型であり、ヘムが酸化型の場合には不活性型であることが分かった。興味深いことに、活性型酵素のみならず、不活性型酵素にもOxBの基質であるフェニルアセトアルドキシムが結合することが分かった。基質はOxB中のヘムに配位するが、ヘムが酸化型の場合と還元型の場合では、基質の配位様式が異なっていることが明かとなった。すなわち、不活性型である酸化型ヘムには基質の酸素原子がヘム鉄に配位するのに対し、活性型である還元型ヘムには基質の窒素原子がヘム鉄に配位することが分かった。また、基質周辺のヘムポケットに存在するHis306が触媒残基として機能することにより、ヘムに配位した基質の脱水反応が進行することが分かった。

B-1) 学術論文

S. YOSHIOKA, K. KOBAYASHI, H. YOSHIMURA, T. UCHIDA, T. KITAGAWA and S. AONO, "Biophysical Properties of a c-Type Heme in Chemotaxis Signal Transducer Protein DcrA," *Biochemistry* **44**, 15406–15413 (2005).

K. KOBAYASHI, S. YOSHIOKA, Y. KATO, Y. ASANO and S. AONO, "Regulation of Aldoxime Dehydratase Activity by Redox-Dependent Change in the Coordination Structure of the Aldoxime-Heme Complex," *J. Biol. Chem.* **280**, 5486–5490 (2005).

S. INAGAKI, C. MASUDA, T. AKAISHI, H. NAKAJIMA, S. YOSHIOKA, T. OHTA, T. KITAGAWA and S. AONO, "Spectroscopic and Redox Properties of a CooA Homologue from *Carboxydothemus hydrogenoformans*," *J. Biol. Chem.* **280**, 3269–3274 (2005).

B-4) 招待講演

S. AONO, "Molecular mechanism of gene regulation by the heme-based CO sensor protein," Molecule-Based Information Transmission and Reception: Application of Membrane Protein Biofunction (MB-ITR2005), Okazaki (Japan), March 2005.

S. AONO, "Molecular mechanism of functional regulation for the heme-based sensor proteins," 12th International Conference on Biological Inorganic Chemistry (ICBIC 12), Ann Arbor (U.S.A.) July–August 2005.

B-7) 学会および社会的活動

文部科学省、学術振興会等の役員等

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (2005-).

日本学術振興会国際事業委員会書面審査員 (2005-).

学会誌編集委員

J. Biol. Inorg. Chem., Editorial Advisory Board (2002-2004).

B-8) 他大学での講義、客員

広島大学理学部, 非常勤講師, 2005年4月-2006年3月.

B-10) 外部獲得資金

重点領域研究(A)「特殊反応場触媒」, 「金属蛋白質中に含まれる遷移金属クラスターの生体特殊反応場による機能制御」, 青野重利 (1995年-1996年).

重点領域研究(A)「天然超分子」, 「DNA認識能を有する蛋白質超分子機能の金属イオンによる制御機構に関する研究」, 青野重利 (1995年-1996年).

チバ・ガイギー科学振興財団 研究奨励金, 「一酸化炭素による遺伝子発現の制御: COセンサーとして機能するヘムを含む新規なDNA結合転写調節蛋白質の構造と機能に関する研究」, 青野重利 (1996年).

特定領域研究(A)「生体金属分子科学」, 「遷移金属含有型転写調節因子による遺伝子発現調節機構に関する研究」, 青野重利 (1996年-1999年).

住友財団 基礎科学研究助成, 「一酸化炭素をエフェクターとする新規な転写調節因子の生物無機化学的研究」, 青野重利 (1997年).

旭硝子財団 奨励研究助成, 「一酸化炭素による遺伝子発現の調節に関与する新規な転写調節因子CooAに関する研究」, 青野重利 (1998年).

特定領域研究(A)「標的分子デザイン」, 「一酸化炭素をエフェクターとする転写調節因子の一酸化炭素応答およびDNA認識機構」, 青野重利 (1998年-2000年).

基盤研究(C), 「シグナルセンサーとしてのヘムを有する転写調節因子の構造と機能に関する研究」, 青野重利 (2000年-2001年).

特定領域研究「生体金属センサー」,「一酸化炭素センサーとして機能する転写調節因子CooAの構造と機能」, 青野重利 (2000年-2004年).

基盤研究(B),「ヘムを活性中心とする気体分子センサータンパク質の構造と機能」, 青野重利 (2002年-2003年).

萌芽研究,「気体分子センサータンパク質の構造機能解析とそのバイオ素子への応用」, 青野重利 (2002年-2003年).

東レ科学研究助成金,「気体分子による生体機能制御のケミカルバイオロジー」, 青野重利 (2003年).

基盤研究(B),「生体機能制御に関与する気体分子センサータンパク質の構造と機能」, 青野重利 (2004年-2006年).

特定領域研究「配位空間の化学」,「タンパク質配位空間を利用した気体分子センシングとシグナル伝達」, 青野重利 (2003年).

C) 研究活動の課題と展望

これまでの研究において,一酸化炭素 酸素などの気体分子が生理的なエフェクター分子として機能するセンサ - タンパク質が,ヘムを活性中心として含む これまでに例のない新規なヘムタンパク質であることを明らかにしてきた。COセンサータンパク質CooAに関しては,その結晶構造の解明に成功したが これは生理的には不活性型の構造であった。今後は,活性型および標的DNAとの複合体の構造解明を目指して研究を進める予定である。酸素センサ - タンパク質HemATに関しては,酸素の選択的センシング機構に関してはかなりなところまで明らかになってきたので,今後さらに研究を進め,HemATが関与するシグナル伝達機構の全貌解明を目指したい。また,CooA,HemAT以外の新規なヘム含有型センサ - タンパク質を始めとし,これまでに無い新規な機能を有する金属タンパク質の構造・活性相関の解明を目指して研究を進めたい。

藤 井 浩 (助教授)(1998 年 3 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：生物無機化学、物理化学

A-2) 研究課題：

- a) 酸化反応に関与する非ヘム金属酵素反応中間体モデルの合成
- b) 亜硝酸還元酵素の反応機構の研究
- c) 小分子をプローブとした金属酵素の活性中心の構造と機能の相関
- d) 位置特異的ミューテーションを用いた基質配向制御による酵素機能変換

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 生体内には、活性中心に金属イオンをもつ金属酵素と呼ばれる一群のタンパク質が存在する。これらの中で酸化反応に関与する金属酵素は、その反応中に高酸化状態の反応中間体を生成する。この高酸化状態の反応中間体は、酵素反応を制御するキーとなる中間体であるが、不安定なため詳細が明らかでない。酸化反応に関わる金属酵素の機能制御機構を解明するため、それらのモデル錯体の合成を行った。立体障害を導入した新規サレン鉄錯体を合成した。1 電子、2 電子酸化生成物を種々の物理化学的手法により検討した。その結果、サレン鉄錯体では、鉄イオンが酸化される、配位子のサレンがフェノキシラジカルに酸化されることがわかった。
- b) 地中のバクテリアの中には、嫌気条件で硝酸イオンを窒素に還元する一連の酵素が存在する。これらの過程で、亜硝酸イオンを一酸化窒素に還元する過程を担う酵素が亜硝酸還元酵素である。銅イオンを活性中心にもつ本酵素の反応機構をモデル錯体から研究した。銅 1 価亜硝酸錯体とプロトンとの反応を低温ストップフローにより追跡した結果、反応中間体の検出に成功した。速度論解析から構造を推定し、新たな反応機構を提唱することができた。
- c) 自然界にある窒素や酸素などの小分子は、金属酵素により活性化され、利用される。活性中心の金属イオンに配位した小分子は、配位する金属イオンの種類、配位子、構造によりその反応性を大きく変化させる。このような多様な反応性を支配する電子構造因子がなにかを解明するため、磁気共鳴法により研究を行っている。金属イオンやそれに配位した小分子を磁気共鳴法により直接観測して、電子構造と反応性の関わりを解明することを試みている。シアニオンをプローブとしてFixLを研究した。その結果、活性中心近傍のアルギニン残基の役割を明らかにすることができた。
- d) 酵素は、高い反応選択性を示すことがよく知られている。酵素の活性中心にある基質結合に関わるアミノ酸残基に着目し、基質の中で反応させたい部位が活性サイトに来るような酵素を設計し、作成した。この手法に従い、酵素選択性を持たない酵素に選択性を持たせることに成功した。

B-1) 学術論文

M. KUJIME and H. FUJII, "Synthesis of Sterically Hindered Tris(4-imidazolyl)carbinol Ligands and Their Copper(I) Complexes Related to Metalloenzymes," *Tetrahedron Lett.* **46**, 2809–2812 (2005).

T. MATSUI, A. NAKAJIMA, H. FUJII, K. M. MATERA, C. T. MIGITA, T. YOSHIDA and M. IKEDA-SAITO, "O₂- and H₂O₂-Dependent Verdoheme Degradation by Heme Oxygenase. Reaction Mechanisms and Potential Physiological Roles of the Dual Pathway Degradation," *J. Biol. Chem.* **280**, 36833–36840 (2005).

T. KURAHASHI, Y. KOBAYASHI, S. NAGATOMO, T. TOSHA, T. KITAGAWA and H. FUJII, "Oxidizing Intermediates from the Sterically Hindered Salen Iron Complexes Related to the Oxygen Activation by Nonheme Iron Enzymes," *Inorg. Chem.* **44**, 8156–8166 (2005).

B-4) 招待講演

藤井 浩, 「一原子酸素添加酵素における酸素分子活性化の化学」, チトクロームP450研究会, 神戸, 2005年7月.

藤井 浩, 「モデル錯体や発現酵素を使った金属酵素機能発現メカニズムの解明とその応用」, 生体関連化学若手フォーラム, 岡崎, 2005年9月.

H. FUJII, "¹³C and ¹⁵N NMR of Iron Bound Cyanide Ions of Ferric Heme Proteins: Useful Probe for Studying Hydrogen Bonding Networks in the Active Site," Seventh International Conference of Peroxidases, Fukuoka (Japan), September 2005.

B-8) 他大学での講義、客員

名古屋市立大学薬学部, 大学院特別講義, 「磁気共鳴を用いた金属酵素の研究 原理と応用」, 2005年6月29日.

B-10) 外部獲得資金

奨励研究(A), 「ヘム酵素の軸配位子が多様な酵素機能を制御する機構の解明」, 藤井 浩 (1997年-1999年).

重点領域研究(公募)「生体金属分子科学」, 「チトクロームc酸化酵素反応中間体モデル錯体の構築と反応機構の研究」, 藤井 浩 (1997年-1998年).

上原記念生命科学財団 研究奨励金, 「ヘムオキシゲナーゼにおける反応特異性およびヘム代謝機構の研究」, 藤井 浩 (1999年).

重点領域研究(公募)「生体金属分子科学」, 「¹⁷O-NMRによる銅-酸素錯体の配位した酸素の電子構造と反応性の研究」, 藤井 浩 (1999年).

内藤財団 科学奨励金, 「ヘムオキシゲナーゼによる位置特異的ヘム代謝機構の解明」, 藤井 浩 (2000年).

基盤研究(C), 「合成ヘムとミオグロビン変異体による亜硝酸還元酵素モデルの構築と反応機構の研究」, 藤井 浩 (2000年-2002年).

基盤研究(B), 「単核非ヘム酵素反応中間体としての高酸化オキソ錯体の合成と反応性の研究」, 藤井 浩 (2002年-2004年).

基盤研究(B), 「立体構造にもとづく基質結合サイトの再構築による酵素反応選択性の制御」, 藤井 浩 (2004年-2007年).
大幸財団 海外学術交流助成金, 「第3回ポルフィリンとフタロシアニンに関する国際会議での研究発表」, 藤井 浩 (2004年).

特定領域研究(公募)「配位空間」, 「金属酵素のナノ反応空間における基質の配向および反応選択性の制御」, 藤井 浩 (2005年-2006年).

C) 研究活動の課題と展望

これまで生体内の金属酵素の構造と機能の関わりを、酵素反応中間体の電子構造から研究してきた。金属酵素の機能をより深く理解するためには、反応中間体の電子状態だけでなく、それを取り囲むタンパク質の反応場の機能を解明することも重

要であると考え。これまでの基礎研究で取得した知見や手法を活用し 酵素タンパクのつくる反応場の特質と反応性の関係を解明していきたいと考える。また これらの研究を通して得られた知見を発展させ 酵素機能変換法の新概念を確立できるよう研究を進めたいと考える。

北 川 禎 三 (教授) (1983 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：振動分光学、生物物理化学

A-2) 研究課題：

- a) 蛋白質の超高速ダイナミクス
- b) タンパク質高次構造による機能制御と紫外共鳴ラマン分光
- c) 生体系における酸素活性化機構
- d) 金属ポルフィリン励起状態の振動緩和及び構造緩和
- e) 振動分光学の新技术の開発
- f) 呼吸系及び光合成反応中心における電子移動/プロトン輸送のカップリング機構
- g) NOレセプター蛋白の構造と機能
- h) タンパク質のフォルディング/アンフォルディングの初期過程
- i) センサーヘム蛋白質のセンシング及び情報伝達機構
- j) DNA フォトリアーゼのDNA修復機構の解明
- k) β_2 ミクログロブリンのアミロイド形成機構の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

時間分解共鳴ラマン分光法と赤外分光法を主たる実験手法とし、反応中間体や励起状態のように寿命の短い分子種或いは顕微鏡サイズの蛋白質構造体の振動スペクトルを観測することにより、反応する分子の動的構造や会合による高次構造変化を解明して、構造と機能との関係を明らかにする研究を進めている。扱う物質としては金属タンパク質とアミロイド化蛋白質が主で、次のように分類される。

- a) ピコ秒時間分解ラマンによるタンパク質超高速ダイナミクス。ミオグロビンCO付加体の光解離・再結合過程をピコ秒可視ラマン分光で追跡した。The Chemical Records第1巻にそのまとめ論文が掲載されている。時間分解紫外共鳴ラマンも同時に調べている。フィトクロムの研究では水谷助手が井上賞を受賞した。1997年には、水谷助手(現神戸大助教授)のミオグロビンのヘム冷却過程の研究結果が雑誌Scienceに掲載された。水谷博士はその一連の研究が評価されて森野研究奨励賞を受賞した。光合成反応中心タンパク等も取り扱っている。現在は、小分子を検出するセンサー蛋白のセンシング及びシグナリング機構の解明の研究にもこの方法を用いている。
- b) タンパク質高次構造による機能制御と紫外共鳴ラマン分光。ヘモグロビンの4次構造を反映するラマン線を見つけ归属した。また200 nm付近のレーザー光でラマン散乱を測定できる実験系を製作し、タンパク質高次構造の研究に応用した。1分子が約300残基からなるタンパク分子中の1個のチロシンやトリプトファンのラマンスペクトルの抽出に成功し、それが4次構造変化の際にどのように変化しているかを明らかにした。
- c) 生体系における酸素活性化機構。 $O_2 \rightarrow H_2O$ を触媒するチトクロム酸化酵素、 $O_2 \rightarrow H_2O + SO$ を触媒するチトクロムP-450、 $H_2O_2 \rightarrow H_2O$ を触媒するペルオキシダーゼ等のヘム環境の特色、その反応中間体である高酸化ヘムの $Fe^{IV}=O$ 伸縮振動の検出等、この分野の国際的フロンティアをつくっている。小倉助手(現兵庫県立大教授)のチトクロム酸化酵素による O_2 還元機構の研究は1993年の化学会進歩賞受賞の荣誉に輝いた。その研究成果が「分子細胞生物学」第4版(H. Lodishら著、野田春彦ら訳、東京化学同人)のような教科書に掲載されるにいたっている。また総研大生

でこの仕事をしていた廣田君(現京薬大助教授)はその学位論文に対し井上賞を受賞した。現在は、バクテリアのシトクロム酸化酵素数種について、外国と共同研究を進めている。

- d) 金属ポルフィリン励起状態のダイナミクス。ピコ秒時間分解ラマンが現在の仕事の中心。振動緩和の測定で振動エネルギー再分配に新しい発見をして1999年に *J. Chem. Phys.* に印刷された。ポルフィリンの一重項、三重項励起状態をナノ秒ラマンで調べる一方、金属ポルフィリンダイマーの励起状態 π - π 相互作用をピコ秒ラマンで見つけた。数ピコ秒で起こる振動エネルギー再分布にモード選択性もみつけて、BCSJのAccount論文として掲載されるにいたっている。
- e) 新しい原理を用いたフーリエ変換ラマン分光計の試作、及びCCDを用いたスキャニング・マルチチャンネルラマン分光器の試作、紫外共鳴ラマン用回転セル、酵素反応中間体測定用フローラマン装置の製作、ナノ秒温度ジャンプ装置の製作、ダイオードレーザーを光源とする高感度赤外分光法の開発、高分子量蛋白質の高分解能紫外共鳴ラマンスペクトル測定装置の製作、サブナノ秒時間分解紫外共鳴ラマン測定系の製作等。
- f) 有機溶媒中のキノン、及びその還元体の紫外共鳴ラマン分光とバクテリア光合成反応中心タンパク中のキノンA、Bの共鳴ラマンスペクトルの観測。キノンの中性形、電気還元したアニオン形のラマンスペクトルの溶媒依存性の解明、同位体ラベルユビキノンの解析に向かって研究を展開した。キノンを電子供与体とする呼吸系末端酸化酵素であるチトクロム bo_3 についても2004年に研究報告を *J. Biol. Chem.* に出した。
- g) ウシ肺から可溶性グアニレートシクラーゼを単離・精製し、その共鳴ラマンスペクトルを観測した。反応生成物のサイクリックGMPがNOの親和性を制御することを初めて指摘した。この研究を行った院生の富田君(東北大助手を経て、現米国NIH博士研究員)は1997年度の総研大長倉賞、及び1998年度井上賞を受賞した。CO結合体に2種の分子形があり、YC-1のようなエフェクターを入れると分子形は1種類になり、活性は200倍近くなる。COとYC-1の協同効果がある。そのCOは普通の測定条件では光解離しないように見え、YC-1無しの場合と様子が異なる。YC-1の結合モードについて詳しい解析をした。昆虫細胞を用いて本酵素を大量発現させ、その共鳴ラマンスペクトルを調べる方向に研究を展開中。
- h) ナノ秒温度ジャンプ法を用いてウシのリボヌクレアーゼAの熱アンフォルディングのナノ秒時間分解ラマンの測定に成功。タンパク質のナノ秒温度ジャンプでは世界で初めてのデータである。高速ミキシングセルを用い、アポミオグロビンのマイクロ秒域のフォルディング中間体を紫外共鳴ラマンで検出する事に初めて成功した。
- i) 環境因子としてCO、NO、 O_2 等の2原子分子を特異的に検出し、合目的の生理的応答をつくり出すセンサー蛋白質のうちでヘムをもつものに対象を絞り、各蛋白質が2原子分子を識別するメカニズム、検出後にそれを機能発現部位に伝達するメカニズムを時分割紫外共鳴ラマン分光法を用いて明らかにする。 O_2 センサーについては、大腸菌のDos、細菌のHemATについて、COについては脳のNPAS2、細菌のCooA等について現在集中的に研究を展開している。
- j) DNAの損傷を受けた部分を光の作用で修復する酵素を大腸菌でクローニングし、それを大量発現する。その蛋白に補酵素であるFADやMTHFを結合させた時の蛋白の構造変化を紫外共鳴ラマン法で検出すると共に、その蛋白が損傷を受けたDNAと相互作用する様子を調べる。更にそこへ青色光を照射してDNAが修復される途中の構造を検出して、そのメカニズムを明らかにしていく。
- k) 免疫蛋白の抗原結合部位に相当する β_2 ミクログロブリンは透析治療を長く続けた患者の血液中に集積され、突然アミロイド線維を形成する。そのアミロイド線維の顕微偏光赤外スペクトルを測定して、線維中の蛋白分子の構造を論じる。また、紫外共鳴ラマン分光法によりこの分子のモノマーとフィブリル状態の構造の違いを明らかにする。こ

の蛋白の#11-21残基でフィブリルをつくらせたものについては既に報告したが #20-41残基や#76-91残基,それらの混合物でつくったフィブリルについても測定を進める。特に 高次構造形成に誘導減少があるかどうかを明らかにするためにシード効果を調べ,分子間相互作用の実質を解明していく。

B-1) 学術論文

- X. ZHANG, H. FURUTACHI, S. FUJINAMI, S. NAGATOMO, Y. MAEDA, Y. WATANABE, T. KITAGAWA and M. SUZUKI**, “Structural and Spectroscopic Characterization of (μ -Hydroxo or μ -Oxo)(μ -Peroxo)Diiron(III) Complexes: Models for Peroxo Intermediates of Non-Heme Diiron Proteins,” *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 826–827 (2005).
- H. FURUTACHI, K. HASHIMOTO, S. NAGATOMO, T. ENDO, S. FUJINAMI, Y. WATANABE, T. KITAGAWA and M. SUZUKI**, “Reversible O–O Bond Cleavage and Formation of a Peroxo Moiety of a Peroxocarbonate Ligand Mediated by an Iron(III) Complex,” *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 4550–4551 (2005).
- K. ITOH, H. HAYASHI, H. FURUTACHI, T. MATSUMOTO, S. NAGATOMO, T. TOSHA, S. TERADA, S. FUJINAMI, M. SUZUKI and T. KITAGAWA**, “Synthesis and Reactivity of a (μ -1,1-Hydroperoxo)(μ -Hydroxo)Dicopper(II) Complex: Ligand Hydroxylation by a Bridging Hydroperoxo Ligand,” *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 5212–5223 (2005).
- H. HIRAMATSU, Y. GOTO, H. NAIKI and T. KITAGAWA**, “Structural Model of the Amyloid Fibril Formed by β_2 -Microglobulin #21-31 Fragment Based on Vibrational Spectroscopy,” *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 7988–7989 (2005).
- Y. J. MO, D. L. JIANG, M. UYEMURA, T. AIDA and T. KITAGAWA**, “Energy Funneling of IR Photons Captured by Dendritic Antennae and Acceptor Mode Specificity: Anti-Stokes Resonance Raman Studies on Iron(III) Porphyrin Complexes with a Poly(Aryl Ether) Dendrimer Framework,” *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 10020–10027 (2005).
- S. INAGAKI, C. MASUDA, T. AKAISHI, H. NAKAJIMA, S. YOSHIOKA, T. OHTA, B. PAL, T. KITAGAWA and S. AONO**, “Spectroscopic and Redox Properties of a CooA Homologue from *Carboxydotherrmus hydrogenoformans*,” *J. Biol. Chem.* **280**, 3269–3274 (2005).
- K. MATSUURA, S. YOSHIOKA, T. TOSHA, H. HORI, K. ISHIMORI, T. KITAGAWA, I. MORISHIMA, N. KAGAWA and M. R. WATERMAN**, “Structural Diversities of Active Site in Clinical Azole-Bound Forms between Sterol 14 α -Demethylases (Cyp51s) from Human and *Mycobacterium tuberculosis*,” *J. Biol. Chem.* **280**, 9088–9096 (2005).
- T. UCHIDA, E. SATO, A. SATO, I. SAGAMI, T. SHIMIZU and T. KITAGAWA**, “CO-Dependent Activity-Controlling Mechanism of Heme-Containing CO-Sensor Protein, Neuronal PAS Domain Protein,” *J. Biol. Chem.* **280**, 21358–21368 (2005).
- Z. Q. LI, B. PAL, S. TAKENAKA, S. TSUYAMA and T. KITAGAWA**, “Resonance Raman Evidence for the Presence of Two Heme Pocket Conformations with Varied Activities in CO-Bound Bovine Soluble Guanylate Cyclase and Their Conversion,” *Biochemistry* **44**, 939–946 (2005).
- Y. NAGANO, J. G. LIU, Y. NARUTA and T. KITAGAWA**, “UV Resonance Raman Study of Model Complexes of the Cu_B Site of Cytochrome *c* Oxidase,” *J. Mol. Struct.* **735-736**, 279–291 (2005).
- K. OINUMA, H. KUMITA, T. OHTA, K. KONISHI, Y. HASHIMOTO, H. HIGASHIBATA, T. KITAGAWA, Y. SHIRO and M. KOBAYASHI**, “Stopped-Flow Spectrophotometric and Resonance Raman Analyses of Aldoxime Dehydratase Involved in Carbon-Nitrogen Triple Bond Synthesis,” *FEBS Lett.* **579**, 1394–1398 (2005).

S. YAMAGUCHI, A. KUMAGAI, S. NAGATOMO, T. KITAGAWA, Y. FUNAHASHI, T. OZAWA, K. JITSUKAWA and H. MASUDA, “Synthesis, Characterization, and Thermal Stability of New Mononuclear Hydrogenperoxocopper(II) Complexes with N₃O-Type Tripodal Ligands Bearing Hydrogen-Bonding Interaction Sites,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **78**, 116–124 (2005).

R. KOUDO, H. KUROKAWA, E. SATO, J. IGARASHI, T. UCHIDA, I. SAGAMI, T. KITAGAWA and T. SHIMIZU, “Spectroscopic Characterization of the Isolated Heme-Bound PAS-B Domain of Neuronal PAS Domain Protein 2 (NPAS2) Associated with Circadian Rhythms,” *FEBS J.* **272**, 4153–4162 (2005).

S. NAGATOMO, M. NAGAI, Y. MIZUTANI, T. YONETANI and T. KITAGAWA, “Quaternary Structures of Intermediately Ligated Hemoglobin and Influences from Strong Allosteric Effectors; Resonance Raman Investigation,” *Biophys. J.* **89**, 1203–1213 (2005).

J. M. STEVENS, T. UCHIDA, O. DALTRUP and S. J. FERGUSON, “Covalent Cofactor Attachment to Proteins: Cytochrome *c* Biogenesis,” *Biochem. Soc. Trans.* **33**, 792–795 (2005).

B-4) 招待講演

北川禎三, 「からだで活躍する金属イオン: 金属と人の暮らしの化学」, 総合研究大学院大学第7回先導科学科学術講演会「生命・光」, 総研大葉山本部共通棟講義室, 2005年2月.

北川禎三, 「生物学・生理学・分子科学・生命環境科学を統合するバイオサイエンス新領域の開拓」, 総研大協同研究報告会, 統計数理研究所, 2005年4月.

T. KITAGAWA, Y. -J. MO, D. -L. JIANG, M. UYEMURA and T. AIDA, “Anti-Stokes Resonance Raman Evidence for Energy Funneling of IR Photons Captured by Dendritic Antennae on Iron(III)-Porphyrin Complexes with Poly(aryl ether) Dendrimer Framework,” 12th Intl. Conf. on Time-Resolved Vibrational Spectroscopy, NIST, Gaithersburg (U.S.A.), May 2005.

北川禎三, 「センサー蛋白質の情報検出及び伝達メカニズム」, 生化学若い研究者の会京都支部, キャンパスプラザ京都, 2005年6月.

北川禎三, 「ヘム蛋白質における情報伝達と動的構造」, JTS研究会「分子系の構造と電子状態」, SPring-8 中央管理棟講堂, 2005年9月.

T. KITAGAWA, “Resonance Raman Investigation of the P Intermediate of Bovine Cytochrome *c* Oxidase and a Model of Its Cu_B-Heme Dinuclear Center,” Max-Planck-Institut für Biophysik, Frankfurt (Germany), June 2005.

T. KITAGAWA, “Resonance Raman Investigation of Effects of YC-1 and GTP on Structure of CO-bound Heme of Soluble Guanylate Cyclase,” 2nd Intl. Conf. of cGMP Generators, Effectors, and Therapeutic Implications, Potsdam (Germany), June 2005.

T. KITAGAWA, Y. -J. MO, D. -L. JIANG and T. AIDA, “Energy funneling of IR photons captured by dendritic antennae on iron(III)porphyrin complexes with a poly(aryl ether) dendrimer framework probed by anti-Stokes resonance Raman spectroscopy,” ICMAT & IUMRS-ICAM 2005 Conference, Singapore Convention and exhibition Center (Singapore), July 2005.

T. KITAGAWA, “Effects of YC-1 and GTP on NO-bound heme structure of soluble guanylate cyclase,” 12th Intl. Conf. on Biological Inorganic Chemistry, Ann Arbor (U.S.A.), July 2005.

T. KITAGAWA, “Resonance Raman investigation of dynamical properties of heme proteins in relation to signal transduction by gas sensor proteins,” Inst. of Chem. Academia, Sinica (Taiwan), October 2005.

T. KITAGAWA, “Structural changes in the heme moiety upon binding of YC-1 and GTP to soluble guanylate cyclase,” 3rd Taiwan Bioinorg. Chem. Symp., Kaohsiung (Taiwan), October 2005.

T. KITAGAWA, “Unique applications of resonance Raman spectroscopy to metalloporphyrins,” Dept. of Chem. Natl. Taiwan Univ. (Taiwan), October 2005.

T. KITAGAWA, “Structural chemistry of cytochrome *c* oxidase; What have been solved and unsolved on its reaction mechanism?” COE International Symposium 2005 and ‘Assembly and Reconstitution of Membrane Proteins and Cellular Molecular Machineries,’ Osaka Univ. (Japan), November 2005.

T. KITAGAWA, B. PAL, Z. LI, S. TAKENAKA and S. TSUYAMA, “Rapid recombination of CO in the activated form of CO-bound soluble guanylyl cyclase,” Symposium (#230) on ‘Structures, Dynamics, and Function of Biomolecules and Water,’ Pacificchem, Honolulu (U.S.A.), December 2005.

B-6) 受賞、表彰

北川禎三, 日本化学会学術賞 (1988).

小倉尚志, 日本化学会進歩賞 (1993).

水谷泰久, 井上研究奨励賞 (1995).

廣田 俊, 井上研究奨励賞 (1996).

北川禎三, 日本分光学会賞 (1996).

富田 毅, 総研大長倉賞 (1997).

富田 毅, 井上研究奨励賞 (1998).

水谷泰久, 森野研究奨励賞 (2001).

北川禎三, 日本化学会賞 (2002).

平松弘嗣, William F. Meggers Award (2005).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

IUPAC Associate Members of Commission on Biophysical Chemistry (1996. 1-).

日本分光学会東海支部幹事 (1986.4-1991.3).

日本分光学会評議員 (1987-).

日本化学会東海支部代議員 (1986-1988).

日本化学会東海支部幹事 (1988-1990).

日本化学会化学展92 企画委員会副委員長 (1991).

日本化学会賞推薦委員 (1994).

日本化学会学会賞選考委員 (1998), 委員長 (1999).

日本生化学会評議員.

日本化学会東海支部副支部長 (1999).

日本化学会東海支部支部長 (2000).
中部化学連合討論会実行委員長 (2000).
日本化学会東海支部監査役 (2001-2002).
日本化学会理事 (2002-2003).
日本化学会副会長 (2003-2004).

学会の組織委員

International Conference on Raman Spectroscopy, International Steering Committee (1988-1994).
International Conference on Time Resolved Vibrational Spectroscopy, International Organizing Committees (1989-).
11th International Conferens on Photobiology, Symposium organizer (1992).
Vth Intr1. Conf. on Time-resolved Vibrational Spectroscopy(Tokyo), Local Organizing Committee (1991).
Symposium on Recent Developments in Vibrational Spectroscopy, International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (one of organizers).
Co-organization: US-Japan Symposium on “Ligand Binding to Myoglobin and Hemoglobin” Rice University, Houston, March, 1-5 (1997).
Co-organization: US-Japan Symposium on “Proton Coupled Electron Transfer” Kona,Hawaii, Nov. 11-15 (1998).
Co-organization: Symposium in International Chemical Congress of Pacific Basin Societies “Raman Spectroscopy: Coming Age in the New Millennum” Hawaii, Dec 14-18 (2000).
Co-organization: 10th International Conference on Time-resolved Vibrational Spectroscopy, Okazaki, May 21-25 (2001).
Organizer: 2002 IMS COE Conference “Dynamical Structures and Molecular Design of Metalloproteins,” Nov. 18-21 (2002).
Organizer: AsBIC-1 “The First Asian Meeting of Bioinorganic Chemistry,” Okazaki, March 7-10 (2003).
Chairman of International Steering Committee of “Asian Conference on Biological Inorganic Chemistry.”

文部科学省、学術振興会等の役員等

文部省学術審議会科研費分科会理工系小委員会委員 (1997-1998).
日本学術会議化学研究連絡委員会委員 (1997-1999).
文部省学術審議会専門委員会科研費審査委員 (1991-1993, 1995-1998, 2000-).
日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (1992-1993, 1994-1995, 1996-1997, 1998-1999, 2000-2001).
日本学術振興会国際科学協力委員会委員 (1998-2000).
日本学術振興会未来開拓事業委員会複合領域専門委員 (1998-2001).
科学技術庁研究開発局評価委員 (1994).
さきがけ研究アドバイザー (生体分子の形と機能:2000- ,光と制御:2003-).
大学評価 工学部評価専門委員 (2002-2003).
文部科学省21世紀教育・研究COE選考委員(化学・材料部門)(2002-2004).
日本学術会議第20期会員 (2005-2008).
日本学術振興会理工系科研費審査委員会 (2006).

学会誌編集委員

Journal of Physical Chemistry, Advisory Board (1993-1997).

Chemical Physics, Advisory Board (1993-).

Journal of Molecular Liquids, Editorial Board (1993-).

Asian Journal of Physics, Advisory Board (1991-).

Biospectroscopy, Editorial Board (1993-).

Journal of Raman Spectroscopy, Advisory Board (1995-).

Journal of Biological Inorganic Chemistry, Advisory Board (1995-1997).

Journal of Biological Inorganic Chemistry, Editorial Board (1999-2002).

Journal of Inorganic Biochemistry, Editorial Board (2001-2004).

Chemistry Letters, 編集委員 (2003-2004).

Bulletin of Chemical Society of Japan, Advisory Board (2005-).

科学研究費の研究代表者、班長等

重点研究「生物無機」班長 (1991-1993).

総合研究(B)班長 (1994, 1995).

重点研究「生体金属分子科学」領域代表者 (1996-1999).

特定領域研究(A)「未解明鍵物質」班長 (2000-2002).

基盤研究(A) (2001-2002).

基盤研究(S) (2002).

特別推進研究 (2002-2006).

B-8) 他大学での講義

北川禎三, 大阪大学理学研究科, 「生体分子の振動分光学」, 2005年7月12日-13日.

B-10) 外部獲得資金

特定領域研究(A), 「生物無機科学における構造と特異機能の研究」, 北川禎三 (1991年-1993年).

基盤研究(B), 「振動分光学による生体NO作用機能の解明」, 北川禎三 (1995年-1996年).

基盤研究(B), 「ナノ秒ジャンプ法を用いた蛋白質高次構造変化の時間振動分光学的研究」, 北川禎三 (1997年-1999年).

特定領域研究(A), 「生体機能における金属イオンの特異的作用の分子科学」, 北川禎三 (1996年-1999年).

研究成果公開促進費 第15回大学と科学シンポジウム, 「生物と金属」, 北川禎三 (2000年).

特定領域研究(A), 「未解明生物現象を司る鍵化学物質」, 北川禎三 (2000年-2002年).

基盤研究(A), 「時間分解振動分光法による蛋白質高次構造変化の機能に果す役割」, 北川禎三 (2001年).

基盤研究(S), 「時間分解紫外共鳴ラマン法によるセンサー蛋白質の環境感知, 情報伝達及び機能発現機能の解明」, 北川禎三 (2002年).

特別推進研究, 「蛋白質動的な高次構造検出法の開発及びそれを用いた蛋白質構造・機能相関の解明」, 北川禎三 (2002年-2006年).

C) 研究活動の課題と展望

- a) タンパク質高次構造の速いダイナミックスとそのセンサー蛋白質における重要性:時間分解共鳴ラマン分光
- b) 生体NOの合成及び反応機構:時間分解赤外分光
- c) 蛋白質の分子内情報伝達機構の構造化学:紫外共鳴ラマン分光
- d) チトクロム酸化酵素における電子移動とプロトン輸送とのカップリング機構の解明
- e) 生体における酸素活性化機構:高酸化状態中間体の構造決定
- f) ヘムを含むセンサー蛋白のセンシングと機能実行メカニズム
- g) ナノ秒温度ジャンプ装置の制作とそれを用いた蛋白質フォールディング/アンフォールディングの追跡
- h) タンパク質の高感度顕微赤外分光: β_2 ミクログロブリンを材料とし,アミロイド化による配向フィブリルの偏光赤外測定により,蛋白の2次構造を明らかにすると共にフィブリル化のきっかけをつくるシード効果を調べる。
- i) DNAフォトリアーゼによるDNA修復機構:大腸菌のフォトリアーゼをクローニングし,その蛋白を大腸菌で作らせて,紫外共鳴ラマンスペクトルを調べる。補酵素結合による蛋白の構造変化,DNAとの結合様式,青色光照射による光修復機構の解明を目指す。

以上のテーマを中心に時間分解振動分光の手法をシャープに生かした研究を進めて行きたい。

4．点検評価と課題

4-1 電子構造研究系

国内評価委員会開催日：平成17年12月28日

委員 山内 薫（東大院理，教授）
福村 裕史（東北大院理，教授）
西 信之（分子研，教授）
大森 賢治（分子研，教授）
大島 康裕（分子研，教授）

オブザーバ 中村 宏樹（分子研，所長）

国外評価委員面接日：平成18年3月6日～7日

委員 A. Welford Castleman, Jr. (Professor, Pennsylvania State University)

4-1-1 点検評価国内委員会の報告

電子構造研究系の構成員は、現在、基礎電子化学研究部門に西 信之教授、電子状態動力学研究部門に大森賢治教授、大島康裕教授の3名である。この3名に対して、国内委員2名と外国人評価委員1名が系の評価にあたった。

所外委員との全体討論

所 長：19年度からを目途とした分子研の組織再編を考えている。全体を4領域に大きく分け、各領域に施設を割り振るような組織となるだろう。現在、43研究グループがあるが、この規模をグループ数で保つか、グループ内の構成を少し増やし、グループ数を減らすかを考慮中である。分子研としては、現在は、大学から大学院生が入りにくい状況にあると判断している。外国からの人材の導入も含めて検討すべきであろう。

所外委員A：今日の報告では、3名の教授から大変レベルの高い話を聞くことができた。西教授の研究の内容は予想を超えていた。まとまった話を聞くと、思想や流れがよくわかる。大森教授の内容は、大変ファインな研究であり、量子情報の制御、干渉など大変面白い内容を含んでいる。ここまで判っており、ここが大事である、ここが面白いということを更にアピールする工夫がもっと必要であろう。固体の系に入るのも面白いが、困難な問題もあるだろう。大島教授の研究は、高分解能分光と超高速レーザーを組み合わせた興味深いものである。東北大学の三上研究室の研究内容と大変似ているという印象を持った。知の最前線で新しい研究分野を開拓するという認識を更に強めてもらいたい。分子間ポテンシャル等を正確に求めることは重要であり、溶液等の研究にも広まるだろう。

所外委員B：西教授の研究は、新しい材料を提供するのではと期待される。大森教授は若手のホープであり、干渉効果をうまく使った独創的な研究を行っている。気体のみならず、固体のパラ水素の研究は面白い。量子力学の基礎となることに、観測の問題を取り入れて考えている。大島教授は、量子状態の分布として回転の問題を捉えている。分光学としては古い問題と思われやすいので、波及効果を考えて訴える必要があるのではないか。分子間ポテンシャルの決定という仕事に多くの人への説得力を増す努力をされる必要があるだろう。全体的に、大変高いレベルの仕事が行われているという印象を持った。

今回の評価は研究内容についての評価が主体であり，組織等に関しては現在再編作業が進行中であることと，その中で電子構造研究系が物質科学系と光分子科学系の2領域に別れることに関しても，所内所外の各委員の納得が得られた。以下に所外委員からの評価文を載せる。

4-1-2 国内委員の意見書

委員 A

電子構造研究系に所属する西グループ，大森グループ，大島グループの研究活動は，総体として極めて高いレベルにあると評価できる。以下，項目別に評価結果を示す。

研究分野における役割と位置付け

分子科学研究所の役割は分子科学の分野において世界を先導する研究を行い，国際社会に向けて成果を発信し，人類の知の地平を拡げて文化的貢献を行うことと考えられる。電子構造研究分野においては，これまで良く知られている分子系については，その基礎的知見は十分に明らかにされており，新しい物質系の探索とその物性の解明へと研究の方向は進みつつある。西グループの研究の一部である炭素-金属ハイブリッドナノ構造体の研究はこのような方向性を持ったものと位置づけることができる。一方，簡単な分子系を用いる場合には，現象自体が未解明の問題に挑むことになる。大森グループと大島グループの取組んでいる可干渉フェムト秒パルス光による分子の電子状態と振動状態の位相制御は，このような方向性を持ったものとして位置づけることができる。いずれの方向においても，これらのグループの目指しているものは世界を先導する成果につながっている。

研究内容と研究者の評価

西グループの研究において特筆すべきは，金属と炭素を含む新しい構造を有する物質系の開拓である。特にナノ物質の磁性は大変ホットな分野であり，世界的にも注目を集めうる成果と考えられる。透過型電子顕微鏡などの分析機器を用いて行う研究スタイルは物質科学の方向に少し傾き過ぎているかもしれないが，電子構造研究の視点は一貫しており，今後も確実な発展が期待できる。このグループは同時に，液体中における局所クラスター構造についても非常に基礎的な研究を行ってきており，従来の教科書を書きかえるほどの成果をあげつつある。研究レベルは極めて高い。

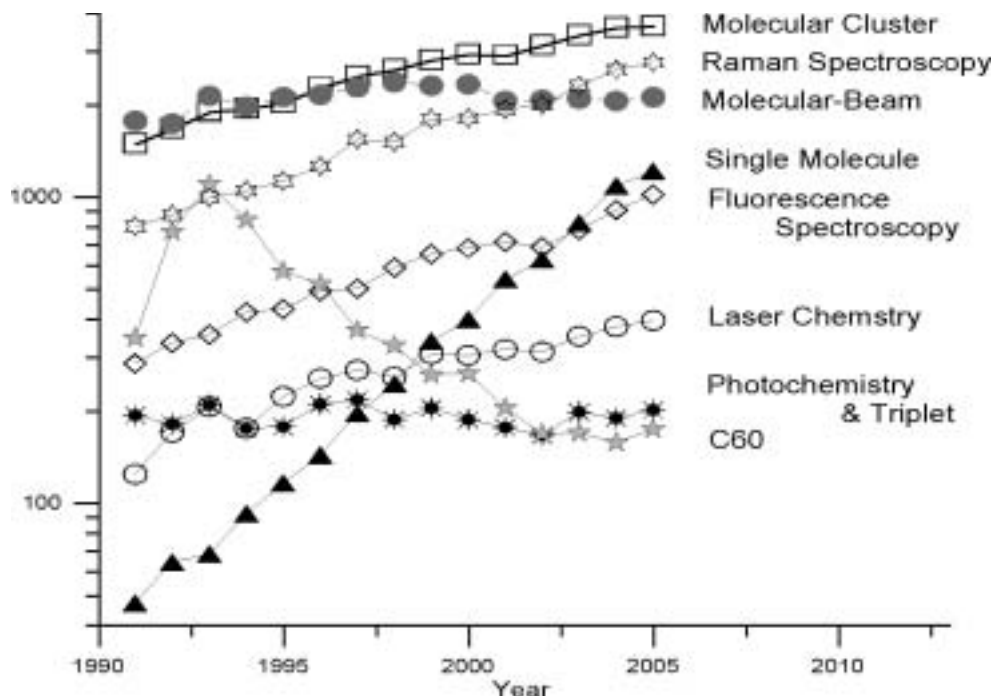
大森グループは，東北大学で行っていた研究をさらに精緻に行える実験系を組上げ，フェムト秒光位相制御の実験的な極限にまで辿りついている。その研究成果は，*Science* 誌および *Phys. Rev. Lett.* 誌に受理されており，分子線中の分子波束の制御と観測の技術はまぎれも無く世界トップレベルにある。今後，固体を試料として研究を行うという方向には幾多の困難が予想されるが，十分な実力があるものと期待できる。量子コンピューターへと発展させる試みは興味深い，用いる分子系の個性に応じた特徴が出せれば，電子構造研究の一分野として開花する可能性もある。但し，「量子論の検証」というとき，その目指すところをわかりやすく説明する必要性が感じられた。

大島グループはスタートしてから間も無いが，干渉計測法あるいは時間分解蛍光ディップ法などを用いて分子の内部回転波束を観測するなどの成果をあげつつある。ベンゼン-水のクラスターを用いた分子間相互作用ポテンシャルの精密測定なども一定の評価ができる。研究者のポテンシャルは十分に高く，研究を進めていけば新たな発展があるものと期待される。但し，既におおまかに明らかになっていることをより細かく定量的にしていくという研究は，質的发展を伴わないことが多いことを忘れないよう研究の方向を見守る必要があろう。現時点での評価は早すぎると判断した。

研究分野の重要度

量子力学は写真定着技術に支えられた分光學にその実験的手法の起源があり、熱力学も蒸気機関のエネルギー効率の理解に源がある。新しい技術の誕生とともに物理化学は様相を変えてきた。技術は、ある時は研究対象そのものであり、また研究手法の革新によって見えなかったものが見えてくるという貢献もある。フェムト秒レーザーを用いた分子位相制御の研究はこの流れの中にあるものと考えられ、現代の電子構造研究の中で重要な要素技術のひとつであろう。新しいナノ材料の科学は、物質合成法自体が新しい技術を伴うものであり、電子構造研究の中で極めて重要な分野である。

ここで、ISI Web of Knowledge を用いた特定分野の論文数の年次変化を調べた結果を紹介する。題名、キーワード、あるいはアブストラクトにそれぞれの単語を含む論文数の変化は下図に示す通りである。“Cluster”などの単語は、遺伝子、天文などの分野でも使われており注意深く排除してある。興味深いのは、1991年より2005年までの間に、Molecular Cluster、Raman Spectroscopy、Fluorescence Spectroscopy、Laser Chemistry などの分野で論文数はおよそ3倍に伸びている。一方、Molecular-Beam と Photochemistry & Triplet では、ほぼ横ばいである。「分子ビーム」の場合には毎年2000編の論文が出版されていることから研究層の厚さが見てとれるが、新たな応用の方向が開けていないためか、他の分野に比べて伸びが無い。「ラマン分光」や「蛍光分光」など、決して新しくない測定技術も「クラスター」や「レーザー化学」と同様に伸びているのは、生物科学、材料科学への応用展開がなされているためではないだろうか。C60は1993年にピークがあり衰退しているが、「単一分子」は急速に伸びている。ここには示さなかったが、「ナノ化学」も「単一分子」と同様に20～30倍の伸びである。以上のように、「クラスター」が重要な研究分野として伸びていくことは十分に予想できる。一方、分子ビームとしての研究はタンパクや核酸などの生物試料を用いるなど、工夫が必要になってくるであろう。



全体について

西信之教授，大森賢治教授，大島康裕教授から構成される電子構造研究系の研究グループは，それぞれ極めて独創性の高い研究を進めており，その研究は，質と量ともに世界をリードするものである。なかでも，西教授のグループの炭素と金属のハイブリッドナノ構造体の形成に関する研究，大森教授のグループにおけるアト秒エンジニアリングの展開，大島教授のグループの分光学と超短パルスを組み合わせた新しい研究手法の開拓には感銘を受けた。

西教授のグループについて

西教授のグループでは，物質の混合と分離に関する基本的なテーマを一貫して取り扱い，その根源を明らかにすべく研究を展開している。確固たるクラスター技術，分光技術，表面分析技術に裏打ちされた研究によって，新規物質系である炭素 - 金属混合ナノ構造体を発見し，その構造変化過程を明らかにした点は顕著な業績である。

エタノールと水，酢酸と水の系において，局所構造と溶解過程の関係を質量分析法とラマン分光によって解明した研究は，混合溶液系とはどのようなものであるかという基本にミクロスコピックな視点から明快な解釈を与えたものである。また，これまで信じられてきた酢酸二量体の幾何学的構造が実は正しくなく，ノンサイクリック型であることを突き止めたことは，全体の研究の流れから見れば枝葉の成果かも知れないが，溶液系のミクロスコピック構造に関する先入観に警鐘を鳴らすものであり，基本的かつ重要な成果である。

FeC_2 を基本構成要素とするナノクラスターの研究では，イオン結晶が，電荷移行を経ると同時に構造変形を起こし，その結果，グラファイト状のカーボン原子によって鉄のクラスターが囲まれる構造をとるという新規な現象を発見し，「炭素の皮に包まれた金属クラスター」という新物質システムの構築に成功した意義は大きい。この物質については，大きな保持力が見出されるなど，新しい素材の開発につながる可能性がある。

また，クラスター構造を出発点としたレーザー励起や加熱により金極ナノフィルムや，炭素皮膜をもつナノワイヤーを生成させるなど，機能性物質の合成に混合クラスターの持つ特徴を最大限に生かしている。これらの独創的な研究手法と成果は，これからの材料開発の先鞭であると同時に，物質創成に「混合系の自己組織化」を活用するという新概念を導入したものであり高く評価されるべきものである。

大森教授のグループについて

大森教授のグループでは，独自に開発したアト秒位相変調器を用い，2つの超短パルスレーザーの相対位相をアト秒の精度で制御することに成功したばかりか，それを用いて，分子内にコヒーレントな波束を用意し，アト秒精度でそれを制御した。これは，時間分解能を極限まで高め，量子干渉を利用して分子の核間距離をオングストローム以下の精度で制御したことに相当する。

大森教授は，その分子に書き込まれた量子位相を「情報」として意義づけ，気相の分子に量子情報を書き込むことに成功した。そして，これに留まることなく，この量子干渉を，デコヒーレンス過程を追跡するために利用し，固体パラ水素中における分子系のデコヒーレンスの研究を進めている。一連の仕事は，アト秒エンジニアリングという，分子科学を基礎とする新しいエンジニアリングの分野を切り開くものであると同時に，量子力学の基礎や観測の問題にも関わるものであり，高く評価されるべきものである。そして，今後のさらなる展開が期待できる。

大島教授のグループについて

大島教授のグループでは、フェムト秒レーザーと高分解能レーザーを組み合わせることにより、実時間領域の情報と周波数領域の情報から分子のダイナミクスを理解するという独自のアプローチを展開している。大島グループは、平成16年9月より発足した新しいグループであるが、すでに、分子研において新しい研究成果を挙げており、発足以来、研究室の立ち上げに全力を尽くしてきたことがうかがわれる。

相対位相をランダムに変調したパルス対を用いる干渉計測により、分子内のメチル基の内部回転に関するダイナミクスの情報を得るなど、興味深い結果が得られている。さらに、強光子場において分子が起こす非断熱過程を、その固有状態の分布の変化として捉えた研究は、強レーザー場で分子がいかに関転励起されるかという基本問題に、分光学の立場から明快な解答を与えるものであり、高く評価されるべき仕事である。

その他にも、原理的に新しい分光手法の開拓とともに分子のダイナミクスに関する理解を深める努力を進めており、将来の新分野の開拓につながるものと、これからの発展が大いに期待される。

4-1-3 国外委員の評価

原文

Report on the Department of Electronic Structure following a visit to IMS on 6/7 March 2006

Dear Director General H. Nakamura:

It has been a distinct pleasure to meet with them on March 6th to 8th, 2006, and discuss the work of the professors who serve as group heads in the Electronic Structure Department of the IMS. The department continues to be staffed by world class researchers, and the Department Head and Institute Director are to be congratulated for their success in maintaining high standards in retaining faculty and also in attracting and hiring new ones. Two relatively new hires (Professors Ohmori and Ohshima) have allowed the programs of the department to be broadened by undertaking some exciting new directions, one which is focused on a combination of quantum control problems and also the test of concepts at the boundary of classical-quantum theory. Professor Ohmori's recent accomplishments in the area of wave packet propagation, with two papers about to be published in *PRL* and *Science*, are especially noteworthy. These findings, including planned studies, are likely to have major impact on our fundamental understanding of ways to achieve quantum control, and also have the potential of providing answers to fundamental questions regarding the behavior of matter at the quantum level. Achievements in this area are likely to provide high visibility. Another new direction has been initiated in the department by Professor Ohshima, in the area of photochemistry. The novel concept is to employ wave packet control to influence molecular motion and hence chemical dynamics. Attaining the ability to photochemically effect molecular motions would be a major accomplishment and is a very promising avenue of research clearly worth pursuing. A second related activity involves determining intermolecular potentials, and a third, deducing the structure of clusters. The alignment of rotational states employing high intensity light fields is a promising area of endeavor as are studies to be devoted to obtaining the sensitivity needed for deducing structural properties of clusters through the use of STIRAP with high coherence allowing complete population transfer. Focusing on obtaining intermolecular potentials for a variety of molecular systems offers the promise of providing information that will be widely used by others who endeavor to calculate the structures of complex systems, especially those involving hydrogen bonding.

The continuing and expanding effort of the Department Head's own individual work is providing the basis for the cohesiveness of the program as it impacts on detailed understanding of phenomena and intermolecular interactions responsible for the properties of matter of nanoscale dimensions, including quantum effects and property changes with individual variations in the molecules/atoms comprising selected mixed systems. This area is likely to give rise to the discovery of new phenomena, and with its focus on materials and nanoscale science, can serve to unify many of the objectives of research underway in the various departments at the IMS.

It has been interesting for me to follow one of the threads that permeates throughout the work of the Department Head that has served to bridge the gaseous and condensed state. Through comprehensive work on mixed systems, the scientific findings have provided the scientific community with insights of unprecedented detail concerning bonding and in some cases the existence of cluster aggregates that retain their structure in the condensed phase, and hence influence the properties of the bulk systems. Particularly enlightening in this regard are studies of hydrogen bonded mixed systems involving alcohols, and organic acids with water. The new fundamental studies have unified understandings derived from cluster science, structural considerations, spectroscopic studies and thermochemistry, and the breadth derived from these findings will provide insights of value in many areas including biochemistry where hydrogen bonding is central to behavior, and will pave the way for future studies on more biologically relevant molecules. Equally valuable are studies focused on "soft-hard" and "hard" systems that relate to other aspects of nanoscale science.

During the visit I was informed that consideration is being given to reorganizing the departmental structure of IMS to one that might have as its focus, "Regions," perhaps with themes such as: Materials Molecular Science; Photo-molecular Science; Theoretical and Computational Molecular Science; and Bio and Coordination Compounds Molecular Science. This organizational structure would be in keeping with the current activities under way at IMS, and would alleviate the problems that presently exist where some departments are essentially sub-critical in size. In view of the broad interest throughout the world in the field of nanoscience, and the impressive center already existing at IMS, it will be necessary to retain such a unit title, even if the subject can be easily subsumed in the Region: Materials Molecular Science.

During the last day, an opportunity arose for me to tour the laboratories of six other professors, two of whom were available for discussions. Professor Kitagawa described a fascinating aspect of his research having to do with protein molecular recognition/sensing of small (diatomic) molecules such as CO, NO and O₂. Interesting discussions with Professor Matsumoto provided me the opportunity to learn about an important area of work pertaining to the photochemistry of adsorbates on metal surfaces which he is probing using ultrafast laser techniques. I was also very pleased to have had an opportunity to tour laboratories dealing with the interaction of light with gold nanoparticles, the synthesis of gold particles of specific atomic composition and the study of some of their reactive characteristics, a tour of the extremely impressive 920 MHz NMR facility, and one of the nanoscience laboratories where molecular systems are synthesized and subsequently characterized. Each of the research associates which gave me a tour of these other laboratories, did a splendid job in describing their work and its objectives. It is clear that IMS attracts outstanding individuals from many scientific fields as assistants, coworkers, and potential future leaders in science.

Another observation I wish to comment about concerns the facilities available at IMS for conducting forefront research, as well as the high quality research personnel who have such original and innovative ideas to pursue. These factors would seem to position IMS to be able to continue being one of the leaders in the world in conducting first class science. But this opportunity to stay at the fore is clearly going to be eroded by the budget situation, and concomitant understaffing. There is an urgent need to increase the number of both junior as well as senior scientists, as well as research associates and students. It is imperative that the government

redress this intolerable situation, before the situation of the Institute becomes irreversible. Furthermore, while it is admirable for individuals to interact with industry, and also for the institute to pass on scientific and technological findings that will stimulate new developments and hence help the nation's economy, first class science cannot be accomplished if the institute were to become an arm of industry, with the motivation for work prompted primarily by industry driven application based research. Care must be taken that such a situation does not arise.

As we both recognize, one of the greatest needs of IMS is to have more highly qualified personnel; especially significant would be the acquisition of a larger number of graduate students conducting their research under the direction of your scientific staff members. I was pleased to learn that the present situation of having too few students may be partially alleviated through a new JSPS program for students from Asian countries. It may be worthwhile acting on this opportunity immediately by encouraging some of your more articulate group leaders to travel to these countries and make contact with prospective candidates. They must be prepared to convey to them the exciting work in progress and the opportunities available for participating in science at the "cutting edge." After a detailed personal conversation with prospective students, it should be possible to sort out the most promising qualified candidates.

Another problem you evidently face is similar to that in the US and elsewhere, namely too little interest in the field of science on the part of the upcoming generation of students. It may be worthwhile to initiate an "outreach program" in which again, your more articulate group leaders make visits to undergraduate colleges and advanced high schools throughout Japan, giving talks about their exciting work. Perhaps involving some of their teachers in research during school vacation periods might be useful as these faculty members could end up as valuable ambassadors between their schools and the IMS.

Finally, in response to your wish about possible future areas of research emphasis, in addition to the fields currently being pursued, I believe the areas of nanoscale materials involving: 1) laying the fundamental science for the design of new heterogeneous catalysts with selected reactivities; 2) and devising scientific concepts for the formation of materials with desired properties through cluster assembly, are both research areas worth pursuing.

I hope my observations and comments are of some value to you. I thank you and your scientific staff for the interesting, informative and friendly interactions during my visit. I look forward to my return visit as councilor in early winter/late fall. Best wishes for a successful new research year.

Sincerely,

A. WELFORD CASTLEMAN, JR.

Eberly Distinguished Chair in Science

Evan Pugh Professor

親愛なる中村宏樹所長：

2006年3月6日から8日にかけてIMSの電子構造研究系の教授の皆様にお会いし、その仕事について議論できたことは格別の喜びです。この研究系は世界的なスタッフを揃えており、系の主幹および研究所所長はその高い水準の維持に成功しこれからも優秀な新人を集めるであろうことを祝福します。二人の比較的新しい採用者（大森教授と大島教授）は、研究系の計画がいくつかの刺激的な新しい方向を目指すことによって拡がりをもたらすことに貢献しています。その一つは、量子制御問題の組み合わせと古典 - 量子理論の境界における概念の検証に中心が置かれています。大森教授の最近の業績、波束の伝搬という領域における業績は、*PRL* と *Science* 誌に出版されようとしています、十分に価値の高いものでしょう。これらの発見は、計画的な研究の上に成り立っていますが、量子制御を実現する基本的な理解の方法に大きなインパクトを与えそうであり、物質の振る舞いに関する量子論的なレベルでの基本的な問題に解答を与える可能性が高いものです。この領域での彼の業績は高い注目を浴びるでしょう。もう一つの新しい方向が、光化学の分野で大島教授によって開始されようとしています。彼の新しい概念は、分子の運動に影響を与える、従って化学動力学に影響を与える波束の制御を取り入れています。分子の運動に光化学的な影響を与えうるということは、大変期待できる研究の道であり明らかに実行する価値があると言えます。二番目の問題に関連する活動は、分子間ポテンシャルの決定に関わるものであり、三番目のそれはクラスターの構造を演繹的に決める仕事でしょう。高強度の光の場を用いた回転状態の整列という問題は、完全な分布の転移を可能にする高いコヒーレンスを持った STIRAP を導入し、クラスターの構造的な特性を導き出すのに必要な検出感度を到達しようとする努力によって将来を約束された領域となるでしょう。多様で多数の分子系に対して分子間ポテンシャルを得る事への集中的な努力は、特に水素結合を含む複合体の構造の計算を行おうとする人々に広く情報を与えることは確実でしょう。

系の主幹自身の、継続的であり拡がりつつある仕事は、凝集現象という研究プログラムの基礎を与えつつあり、ナノスケールの次元での物質の性質を決める分子間の相互作用や現象の詳細な理解にインパクトを与えるものでしょう。これは、選択された混合系をつくる分子 / 原子系における量子効果や個々の多様性を有する性質の変化を含んでいます。この領域は、新しい現象の発見をもたらすでしょうし、物質科学やナノスケール科学に焦点を当てることによって IMS の多くの研究系で進行している研究の目的を融合させるでしょう。

私にとっては、系の主幹の、気相と固相とを繋げるであろう仕事を貫く研究の本筋に興味があります。混合系における集中的な仕事を通して、その発見が科学者のコミュニティに化学結合に関するこれまでになかった詳細な洞察を与えるでしょう。ある場合には、凝縮相に於いてもその構造を保ったクラスターの集合体が存在し、物質の性質を決めているわけです。特に、この意味で重要な仕事は、水とアルコール、あるいは水と有機酸類の混合系における水素結合の役割の解明でしょう。この新しい基礎的な研究は、クラスター科学、構造解析、分光学的な追求、そして熱力学的な考察などから導かれた理解を統一するものであり、これらの発見から導かれた広い視野は、生物化学の分野を含む水素結合が中心的な振る舞いを果たしている多くの領域に価値ある識見を与えるでしょうし、より生物に関わる分子系のこれからの研究への道を開いたと言えるでしょう。ナノスケール科学の他の見方に関連して、“柔らかな物質 - 固い物質の混合系”そして“固い物質の混合系”に焦点をあてた研究も同様に価値のあるものでしょう。

私の訪問の間に、IMSの系の再編についての考えを聞かされました。“領域”おそらく、物質分子科学、光分子科学、

理論・計算分子科学，そして生物・錯体分子科学のようなテーマに焦点が絞られているのでしょう。この再編は，現在のIMSの活動状況に応じたものでしょうし，現在の編成の下で幾つかの系の単独の存在が抱える問題を軽減するでしょう。また，それはすでにIMSが有する印象的なセンターではあるのですが，ナノ科学の分野で世界的な広い興味という視野から見た場合，たとえこの課題が容易に包括されうるものであっても，物質分子科学という領域名を保有することは必要なことでしょう。

昨日，6名の他の系の教授の研究室を訪問する機会を持ちました。その内の2名の教授とのディスカッションが持てました。北川教授は，CO，NO，及びO₂のような小さな（2原子）分子の蛋白分子認識／検知に関する魅力ある研究について話して頂きました。松本教授との興味深い議論からは，超高速レーザー技術によってプローブされる金属表面の吸着分子の光化学に関した重要な領域について学ぶ機会を持つことができました。また，他の研究室の見学の中で特別の原子組成を持つ金ナノ粒子の合成とその特異的な反応特性を紹介され，また，特に印象深かった920MHzのNMR装置，そして分子システムが合成され続いて解析されるナノ科学研究室等のツアーは大変楽しいものでした。それぞれの研究室を案内して頂いた研究助手の皆さんは，彼らの仕事とその目的の説明に申し分なく務めを果たしてくれました。IMSが多くの科学の領域から助手や共同研究者，そして科学の近い将来のリーダーとなるべき人材を集めていることは明らかです。

私がコメントしたいもう一つの所見は，先端研究を行う為のIMSの装置群と，独創的で革新的なアイデアを遂行する研究者の高い質についてです。これらは，IMSが第一級の科学を展開する世界のリーダーとしての位置を保ち続けるための要素と言えるでしょう。しかしながら，この第一級の地位を保ち続ける機会というのは，予算の状況が悪くなったりスタッフの削減などが行われると忽ち損なわれる可能性があります。緊急に，シニアな研究者とともに若い研究者，助手や学生を増やす必要があります。政府は，研究所の状況が取り返しのつかないものになる前に，この耐え難い状況を是正する必要があるでしょう。更に，研究者が個々人の立場で企業と交流し，国の経済を助けるような科学的技術的な新発見を可能にすることは推奨すべき事ではありますが，企業によって支援された応用重視の仕事が導入され研究所が企業の片腕となるようなことがあれば第一級の科学水準を保ち続けることは出来なくなるでしょう。そのような事が起こらないように十分に注意しなければなりません。

我々が共に認識しているように，IMSの最も大きなニーズの一つは，より高度な資質をもつ人材を確保することです。特に重要なことは，科学スタッフメンバーによって指導される大学院生を多く獲得することです。現在の大学院生が余りにも少ない状況は，アジアの国々から学生を集める新しい日本学術振興会のプログラムの遂行によって変わるであろうことを知って嬉しく思います。この機会に何人かの能弁なグループリーダーがこれらの国々を回り，直接に候補者と接触するように直ちに行動する価値があるでしょう。これらの学生を，現在進んでいる刺激的な研究に積極的に携わらせ，科学の最前線に関わる機会を与えなければなりません。将来性の高い学生たちとの微に行った個人的な触れあいがあって初めて，最も将来性の高い上質の候補者を選び出すことが出来るのです。

あなた方が明らかに直面しているもう一つの問題は，合衆国のみならず世界のあらゆる所での問題と同様ではありますが，これから育ってくる次世代の学生たちが科学の分野に殆ど興味を示していないということです。これに対しても，積極的なグループリーダーが日本全国の大学の学部や優れた高等学校に出かけて行って，科学の面白さを伝える「出張サービスプログラム」を開始することも必要でしょう。学校の休み期間に，何人かの研究における教師を含めて，これらの教員メンバーが結果的に学校とIMSの間の価値ある親善大使となることは大変有用でしょう。

最後に，現在進行していると同時に，これからどのような研究領域が重要になるかとの指摘の要請に応えて，私は

次のようなナノスケール物質領域が価値あるものと信じます。それは、1) 選択的な反応性を持つ不均一触媒の設計への基礎科学の構築と、2) クラスターの集合組織によって必要な特性を有する物質の生成への科学的な概念を構築することです。

私の観察と意見が貴方にとって幾ばくかの価値あるものであることを希望します。私の訪問中に、興味深く有益な情報を与えられ、親しく接して頂いた研究者の皆様に感謝いたします。来年の初冬か晩秋に運営顧問として再び戻ってくることを楽しみにしています。新しい研究の年度の成功を祈っています。

敬具

A. ウェルフォード キャスルマン、ジュニア

エバリー科学特別職

エバン ピュー教授

4-2 極端紫外光科学研究系

国内評価委員会開催日：平成17年12月1日

委員 太田 俊明（東大院，教授）
大門 寛（奈良先端大，教授）
宇理須恒雄（分子研，教授）
小杉 信博（分子研，教授）
加藤 政博（分子研，教授）
オブザーバ 見附孝一郎（分子研，助教授）
菱川 明栄（分子研，助教授）
繁政 英治（分子研，助教授）
木村 真一（分子研，助教授）

国外評価委員面接日：平成18年1月9日～11日

委員 Joseph Nordgren（Professor, Uppsala University）

4-2-1 点検評価国内委員会の報告

国内委員による評価は，面接により，以下の研究グループの研究活動に関して行った

（1）極端紫外光科学研究系

- ・宇理須グループ（反応動力学研究部門）
- ・小杉グループ（基礎光化学研究部門）
- ・見附グループ（反応動力学研究部門）
- ・菱川グループ（基礎光化学研究部門）

（2）UVSOR

- ・加藤グループ（光源加速器開発研究部、電子ビーム制御研究部）
- ・繁政グループ（光化学測定器開発研究部）
- ・木村グループ（光物性測定器開発研究部）

全体討論

委員 E：分子研で行う放射光科学やUVSORの今後の問題についてご意見をいただきたいと思います。率直なご意見をお願いします。外部の放射光科学研究者はどのようなことを分子研あるいはUVSOR施設に期待されるのでしょうか。

委員 A：日本にとってVUV軟X線の高輝度光源は絶対必要である。東大の計画はなくなったので，分子研で高輝度光源を作っていただけるとよいのですが。

委員 B：技術的には問題ないが，建設費の要求が認められるかが最大の問題である。

委員 C：場所も問題である。

委員 A：UVSORは学術的に幅広くVUV軟X線の光源として，日本でUVSORでしかできない実験のできるビームラインがある。国内に大きな軟X線リングができるまで，VUV軟X線領域の研究の中心として，頑張ってもらいたい。

- 委員 A：今は UVSOR をアップグレードしてトップアップ運転が出来るようにする事は重要である。
- 委員 D：マイクロスペクトロスコピーは備え付けの実験ステーションでなくてはできない。日本には、共同利用で使えるマイクロスコピーのビームラインが皆無であり、分子研で整備すると良いのではないかと思う。
- 委員 E：マイクロスコピーではサイエンスとしてはどういうことが重要ですか。
- 委員 D：2原子分子、3原子分子などのシンプルな分子についてはすでに多くの研究がある、新しいフィールドという問題を考えるとしたら、気体と表面の間だと思う。表面特有の問題は面白い。表面は据え付けの装置でなくてはできない研究が多い。なかなか、共同利用でそのようなことが出来るところはなく、UVSOR はその点やりやすい。赤外と真空紫外の領域で日本で一番良いビームラインが出来ている。UVSOR ならではという仕事が沢山出来ると思う。
- 委員 D：ユーザーと加速器の人の距離が近いのも実験がやりやすく、UVSOR の長所である。
- 委員 E：東大計画の資料を送ってくださったが、応用という意味ではバイオの研究はUVSORでできますでしょうか。
- 委員 B：赤外は SPring-8 よりビームの性質が良い。軟 X 線より高いところでは SPring8 の方がよい。分子研の人も SPring-8 をどんどん使うべきだ。生物分野については、X 線顕微鏡で、ウォーターウィンドウの 350 eV ~ 500 eV 付近で UVSOR を利用した非常にユニークなことが出来るのでは。
- 委員 C：UVSOR はビームエミッタンスが 10 nm ラジアンを切るリングではないのでマイクロスコピーを本格的にやるのはむづかしい。
- 委員 B：マイクロスコピーについては企業のニーズが高い。
- 委員 C：この分野ではカナダのヒッチコックが活躍しているが、全部応用研究である。
- 委員 D：単なるマイクロスコピーではなく、マイクロスペクトロスコピーでサイエンスを行うことを考えるべきである。
- 委員 B：マイクロスコピーで役立つと思われることはドメインの問題などがあるが、分子研でやる問題は少ないのではないか。
- 委員 B：分子研は分子研としての、化学の問題をやれる強みがある。
- 委員 B：分子研そのものの存在意義を考えその中で UVSOR の役割を考えればよい。その意味ではアップグレードで十分機能している。分子研が放射光専門の研究所になる必要は無い。
- 委員 D：そういう観点からは、レーザーと放射光の二重共鳴の研究はもっとすすめられなかったのか。世界で見てもそのようなことがやれる所はない。そこにレーザーの先端グループがいてそれと組み合わせられる場所はない。
- 委員 B：放射光と FEL の組み合わせでポンププローブをやったが、レーザーで出来ないことをやるのは難しい。
- 委員 B：それくらいなら、UVSOR でコヒーレント発振が可能なテラヘルツ領域でやる方が戦略的に有利だ。また、X 線 FEL が理研で始まるが、その利用のための要素研究を分子研でやれると良いのではないか。理研の FEL が出来た段階でメインユーザーとなれるのではないか。日本は加速器は出来るが、それを使う人が十分育っていないのではないか。
- 委員 E：理研 FEL のエネルギー領域はどのようなですか。
- 委員 B：プロトタイプ機は 20 eV (60 nm) であるが、そのあとは一気にハード X 線の FEL に行く。
- 委員 C：X 線 FEL は放射光の延長ではなく、レーザーの延長としてとらえるべきである。そこで、分子研ならではのアイデアを出せると利用研究でリーダーシップをとれる。

委員 B：理研がやろうとしてはいるが、ユーザーのポテンシャルは外国の方が高い。理研はトップダウンでやろうとしている。5～6年先に出来たときに使える人が日本にいないのではないのか。今提案されているのは外国でやっていることばかりだ。

委員 B：分子科学としてX線 FEL を使える問題があるのではないのか。世界のどこでもやっていないことに挑戦して欲しい。ユニークな提案をしていただけると素晴らしい。強光子場の問題など面白いのではないのか。

委員 C：強光子場の問題は短波長になると不利になるので、この分野でX線 FEL を有利に使うことは難しい。

オプザーB：強光子場も面白いが、X線 FEL では短パルス性を利用したポンプ・プローブ計測への展開が興味深い。

オプザーA：非常に面白い話を聞かせていただいた。系と施設の関係で言えば、系と施設が一丸となってやって欲しい。ぜひ独創的な研究にチャレンジしてやって下さい。

委員 E：現在分子研では系と施設の組織改編の問題を議論しているが、この問題について何かご意見はありますか。

委員 B：UVSOR は本当に少ない人数で良くやっている。

委員 B：UVSOR施設が分子研内の他施設と同じレベルにおかれているのはバランスがおかしい。系と同じレベルにして良いのではないのか。

委員 C：ホームページの組織図では系と同列にしてもらった。UVSOR側からみればユーザーとの交流もうまくいっており組織上の問題は特に無いと思う。

委員 E：それではそろそろ時間となりますので、この辺で終了とさせていただきます。本日は大局的な見地から色々貴重なご意見をお聞かせいただき有り難うございました。

4-2-2 国内委員の意見書

委員 A

全体的な観点からの意見

UVSOR はわが国においては放射光の化学への応用を主眼においたユニークな放射光施設であるが、これまで PF、SPring-8 の陰に隠れて目立たない存在という感じが否めなかった。その大きな原因が、リングが第二世代であり、しかも低エネルギーであるために軟X線領域までしか利用できないということがあったと思われる。しかし、最近のリングの upgrade と各種アンジュレーターの導入によって、PF と遜色ない性能をもった施設になった。確かに、それでも高輝度リングではなく、硬X線が利用できないということから、利用の範囲と手法は狭まるが、現在の UVSOR の特長をフルに活かせば、十分世界との競争力をもった研究が可能である。ただ、PF、SPring-8 のような本格的な放射光利用施設ではなく、限られたスタッフによって維持運転されていることから、全方位の研究展開は難しいし、するべきではなく、的を絞った研究に特化すべきであろう。

小杉グループ

小杉教授は内殻励起分子分光の理論計算においては、世界でも高く評価されており、二原子分子、三原子分子の内殻励起スペクトルの詳細な解析と、外国との活発な共同研究を行っている。

そして、最近では分子からクラスター化学に展開して、クラスターにおける表面と内部緩和の違いの問題を取り扱い、興味ある結果を出している。これらの研究成果は一つ一つが十分論文発表できる内容と思われるが、最近の総説にまとめて書いているだけで、少し残念な感じがする。

これも UVSOR の運営の問題だけでなく、副所長として分子研全体の管理運営にかかる時間が多いことが大きな原因

と考えられる。管理職にあるものには研究の活性を維持するためには、助手、あるいはポスドクをつけるなどの配慮があっても良いように思われる。

一方で、小杉グループの初井助手が中心になって、斬新なアイデアを各所に取り入れた発光分光装置を開発しているが、これが実用可能になれば吸収、発光、光電子分光に理論を加えることによって非常にレベルの高い内殻分光の研究グループになることが期待される。

できることならば、もう少しマンパワーを増やして活性化を図る努力を研究所がすべきであろう。

宇理須グループ

宇理須教授はNTTから分子研に着任したこともあって、応用からみた基礎研究という観点を持っている。最近はじめたシリコン薄膜上の膜タンパクトランジスターの開発は独創性があり、工学、医学の研究者の興味を引く面白い研究である。これまでの研究と全く異なる生物学の世界に飛び込んで、新しい切り口からタンパク質の機能解明を目指していることに、高い敬意を表したい。特に、印象深かったことは、グラミシジンAのAFM観測から、この膜タンパクが環境によってそのモルフォロジーが大きく変わることを見出したことであり、X線構造解析、NMR解析だけでこれらの膜タンパクの構造や機能を議論している世界の構造生物学者に警鐘を鳴らすものとして、今後の研究の展開が楽しみである。トランジスター開発までにはまだ長い道のりと、工学系、生物関係の専門家との共同研究が不可欠となろうが、是非とも突き進んでほしい。ただ、残念なことは発表雑誌が化学系のものであり、できればこのような研究に関心をもつ読者がいる生物医学系の雑誌への投稿を心がけてほしい。

見附グループ

見附助教授を中心としたグループは放射光とレーザーを組み合わせた研究で有名である。今回の研究紹介は専らフラーレン、金属フラーレンの光イオン化と光解離に関するものであり、電気炉と膜厚系を組み合わせた新しい昇華装置を開発し、それを用いた実験であった。それ自身は興味深いものであったが、これが今後どのように発展していくかについての展望が今ひとつはっきりしなかった。せっかくの放射光分光、レーザー分光技術を併せ持つ見附グループなので、これらを組み合わせた新しい研究への展開を期待したい。

菱川グループ

菱川助教授は分子研着任2年半であり、強光子場での分子の光化学反応の制御という新しい研究分野の開拓を目指して研究をすすめている。放射光軟X線と可視光の二重励起も検討しているがこれは、かなり難しい挑戦になりそうである。JSTのさきがけ研究(2005 - 2008)も認められ、順調に進んでいるようで、今後の進展が楽しみである。

繁政グループ

繁政助教授は着任6年半になり、初期に行なっていた対称性分離分光法を更に発展させて、内殻イオン化に伴う分子解離ダイナミクスの研究を始めている。準安定解離種や負イオンの検出など新しい取り組みが見られ、今後の発展が期待される。ただ、内殻イオン化の研究には軟X線領域で強力な放射光源が必要とされるが、残念なことにUVSORではあまりこの要求を満たすビームラインが無く、主な研究の場をPFやSPring-8にしているのが現状である。内殻励起とイオン化の過程を調べる研究グループは少数ながらわが国で世界の先端を行っており、今後は強固なチームワークをもって研究を推進されることを望む。

木村グループ

最近、赤外から遠赤外領域をカバーする非常に明るいビームラインと、高分解能でビームを絞った真空紫外領域のビームラインを建設している。これらは世界的にも高い競争力をもったものになり、低エネルギーリングである UVSOR の特徴あるビームラインとして今後どのように利用していくかがキーとなる。赤外ビームラインでは高い取り込み角 (216 mrad) によって SPring-8 よりも二桁高い強度で、しかもテラヘルツ領域 (8 cm^{-1}) まで利用可能である。これまで専ら強相関係物質や希薄近藤半導体の電子状態の研究などに応用しており、ユニークな研究成果を挙げている。この分野は化学、生物も高い関心をもっており、新規開拓も期待される。一方、真空紫外のビームラインでは高分解能光電子分光装置をとりつけて Fermiology を念頭においており、赤外吸収と情報をあわせることで新しい発展が期待できる。ただ、せっかく UVSOR のビームラインであるから、強力な赤外光を用いた分子科学研究という観点からのアプローチがもう少しあっても良いように思われる。

加藤グループ

加速器を専門とするスタッフは少数であるが、非常に着実に upgrade に努力しており、これまでも高輝度化に向けた改造でほぼ PF 並みのエミッタンスまでにいたっている。そして、これからの最大の課題は top up 運転の実現である。UVSOR のように小型のリングでは寿命が短いために、top-up 運転のご利益は非常に大きい。この実現に向けて最大限の努力を払って欲しい。一方、UVSOR の加速器グループは先代の浜 宏幸氏 (現 東北大) より RF 加速による FEL の開発も行っており、世界でも今後の進展が注目されている。

補足：

世界の放射光科学は X 線 FEL に向けて進みつつある。これは大強度、フェムト秒パルス、コヒーレント X 線という、従来の放射光とは全く異なった光源であり、わが国でも理研グループが SPring-8 のサイトに建設を始めている。わが国の加速器技術はユニークでオリジナリティに富んでいるが、肝心のサイエンスの関してはこれまでの Stanford, DESY で検討されてきたものの域をでていない。わが国独自の研究プロジェクトが無い。分子科学研究所、および、極端紫外研究系のスタッフはレーザーと放射光に習熟した数少ない研究グループであり、XFEL を利用する研究者集団としても先鋭的なグループになりうるように思われる。理研 FEL が利用可能になるのは 2010 年以降になると思われるが、それまでに UVSOR を用いた予備実験を始めることも一つ検討に値するのではないだろうか。

委員 B

全体的な観点からの意見

それぞれが UVSOR を十分活用して特徴のある研究成果を上げており、感心した。加速器系スタッフと研究系スタッフの協力がうまくいっており、ここでしかできない、ここだからこそできる、という研究が進展している。リングが小さいために VUV と低エネルギーの SX しか使えないという制約はあるが、HiSOR や立命館に比べるとはるかに自由度の高いリングであり、加速器スタッフの努力による近年の高度化が大変うまく行っており、低エネルギー放射光施設としては世界的に第一級のものとなってきている。高度化されたビームラインは日本における貴重な VUV の設備となるため、分子の研究のみならず全国の研究者に広く活用してもらい、恩恵を与えて刺激と情報を受け取るという良い循環になっていくことを希望する。

小杉グループ

本グループは、分子の光イオン化スペクトルの理論的解釈の領域で世界的に信頼され、貢献している。理論だけでなく実験として、孤立系分子とクラスターに取り組んでおり、クラスターでは内部と表面でのエネルギーの違いなどを明確にしている。放射光の特徴を活かした実験と、それを支える理論とを駆使し、分子や分子間相互作用の詳細を明らかにしていく地道で着実な基礎研究を推進していることは高く評価される。装置が充実してきているにもかかわらず、学生が少なく、若手・後継者の養成のためにも学生の確保が望まれる。論文を書く時間が無いとのことで、良い論文が Impact Factor の小さな雑誌に載っているのは残念である。

菱川グループ

レーザーの超強光子場で解離した全てのイオンの運動量を相関計測するという高度な技術で解離過程のダイナミクスを解明している。また、アト秒領域の超短パルス軟X線光源を開発するなど、高いポテンシャルを持っている。今後の発展が期待される。

宇理須グループ

放射光エッチングによりSi表面に微細加工を施し、そこにイオンチャンネルを持つ人工細胞膜を乗せてチャンネル電流を測定することに成功している。世界的にユニークな研究として注目される。機構内の他の研究所(生理学研究所)とも共同研究を実現している特徴あるグループである。一般の興味を引ける研究テーマであるので、是非画期的な成果を出して欲しい。

見附グループ

フラーレンの多価イオンやフラグメントの収量曲線を測定し、段階的解離の計算機による再現に成功している。特許も申請するような装置の開発から行って、放射光の特徴を活かした研究を推進している姿勢は高く評価される。

加藤グループ

UVSOR-IIの高度化、高輝度化や自由電子レーザーの研究を成功裏に推進している実績は高く評価される。マシン系の優れた協力があるからこそ、他の実験系の研究者の成果が出ているのであり、非常にうまく協力関係が構築されている。また、テラヘルツ領域のコヒーレント放射光の生成に成功したことは最先端の成果であり、今後の進展に大きな期待が持てる。UVSOR-IIIも期待している。

繁政グループ

高性能分光器の立ち上げや新しい発光分光器の開発など、高性能の装置の開発によって独自の対称性分離分光法などの高分解能化につなげる意欲的な姿勢は高く評価される。EUV発光など新しい手法にも取り組んでおり、今後の発展が期待される。

木村グループ

赤外のみならずテラヘルツ分光まで行っている特徴あるグループである。共同研究・論文数ともに多く、非常にActiveに活躍していることは高く評価される。世界最高の光強度を持つビームラインに設置されたテラヘルツ顕微鏡の今後の活躍が期待される。

4-2-3 国外委員の評価

原文

Report on the scientific activities at the Department of Vacuum UV Photoscience and UVSOR following a visit to IMS on 9–11 January, 2006

Prof. Joseph Nordgren

Uppsala University

Department of VUV Photoscience

Professor Nobuhiro Kosugi

The success in keeping the UVSOR facility at a continued competitive level is undoubtedly to a large part thanks to the insightful and talented management of professor Kosugi. At the same time he is pursuing molecular physics research, experimental as well as theoretical, at an internationally well-recognized level. This is a noteworthy achievement. The main areas of interest are in the study of chemical bonding and excitation dynamics, in molecular interaction in clusters and molecular solids, and also in solid state physics. The experimental methods that professor Kosugi is using are symmetry-resolved photoabsorption, photoemission spectroscopy and lately soft X-ray fluorescence spectroscopy. He is also conducting a research programme in quantum chemistry, and he has developed widely used codes for theoretical calculations related to molecular inner shell spectroscopy.

Among the studies conducted by professor Kosugi one notices an application of the angular resolved photoion yield technique in the assignment of features in photoabsorption spectra, *e.g.* that of acetylene. By analyzing this spectrum using calculated potential energy surfaces the $C1s-3\sigma_u^*$ valence state coupled via a bending mode with the π^* state together with the $3s\sigma_g$ Rydberg state was found to be responsible for a particular observed feature. An interesting approach is also the use of blue respectively red shifts of photoabsorption features to determine geometrical conformations in molecular clusters, and a noteworthy achievement is the measurement of a shift of the Ar 2p-4s line due to the 0.4 pm reduction in bond length induced by lowering the temperature from 16 K to 8 K. Quite noteworthy is also the study on the electronic structure of DNA by resonant photoemission, where it could be concluded from evidence of local character of unoccupied states that conductivity is associated with electron hopping rather than charge transfer.

Among significant experimental system developments made in professor Kosugi's group the recent design of a new kind of soft X-ray fluorescence spectrometer is particularly interesting. This design is based on imaging non-spherical grazing incidence optics (Wolter type) and a transmission grating. This design has unique features and already with the present grating and detector (future performance enhanced components are likely to become available) the performance is impressive.

Professor Kosugi, who has a wide international network and collaborations, his list of published papers steadily increasing, is an internationally renown and respected scientist, who continues to contribute to the basic understanding of core and valence photoionization processes in a significant way.

Associate professor Akiyoshi Hishikawa

Professor Hishikawa came to the Institute in 2003, and he is conducting a research programme in ultra-fast dynamics of molecules in intense laser fields. The study of conditions at the atomic level where perturbative methods completely fail as the strength of the

external field is comparable to that of the internal field is of considerable interest. Modern lasers are able to produce such conditions and professor Hishikawa is focussing on structural deformations and multiple bond breaking using a recently developed method, coincidence momentum imaging. The technique allows the determination of the momentum and ejection directions of all the fragment ions ejected in the dissociation induced. By analyzing the correlation of the determined momentum vectors professor Hishikawa is reconstructing the nuclear motion evolution on the “light dressed” potential energy surfaces. This allows detailed information to be obtained regarding the dynamics of the intense laser field induced state.

Issues like how the molecular orientation with respect to the polarization of the laser light influences the Coulomb explosion evolution has been studied in detail by professor Hishikawa. Among the successful studies carried out in recent time one on the dissociation of acetonitrile in intense laser field is particularly informative. By varying the laser pulse width the effects of structural deformation and alignment could be controlled and the ejection directions determined in a selective manner. This allowed the study of paths and time scale of the migration of hydrogen in the dissociation process. Professor Hishikawa is also pursuing higher harmonic generation of laser light to produce VUV radiation, a field of great interest and expectations.

Professor Hishikawa is a relative newcomer at IMS and he has built up his activities during the last two years. The publication record of professor Hishikawa speaks for his talent, and one notices that he has a significant number of papers with more than 10 citations, one showing close to 50 citations.

Professor Tsueno Urisu

Professor Urisu has a background in surface chemistry and work at the NTT company before coming to IMS 14 years ago, and he has since then been engaged in synchrotron radiation (SR) induced surface reactions to produce surface structures on silicon. SR stimulated surface reactions show distinct advantages in terms of material selectivity, high spatial resolution and low contamination, and it is therefore very suitable for fabrication of nanostructured materials. Professor Urisu has been pursuing this research at IMS and he has applied various characterization techniques in his work, such as STM and AFM.

Lately, professor Urisu has to some extent switched gears and focussed on the field of biomaterial function, applying his great knowledge base and skills in surface science, silicon microstructuring and characterization techniques. A project of dignity in professor Urisu’s research programme is to realize a reliable method for sensing ion channel activity by means of a patch clamp method. Here he has to fabricate device structures that allow him to access a single ion channel in a lipid membrane and apply an electronic circuitry for signal detection. There are a number of difficulties and obstacles that have to be mastered in order to attain reliable and accurate measurement conditions, and professor Urisu is pursuing a path towards realization of this goal. In this work he needs (and has ample access to) expertise in a number of different fields. This makes his work truly an advanced multi-disciplinary activity, and Professor Urisu keeps publishing at an impressive pace together with his collaborators.

Associate professor Koichiro Mitsuke

Professor Mitsuke has extensive experience in the field of molecular photoionization research. A peek in the bibliographic database shows an impressive list of frequently cited publications from his work. He is particularly engaged in the study of photoinduced fragmentation that takes place as a result of the decay of highly excited states through autoionization, predissociation, vibronic coupling and internal conversion. Such studies reveal detailed information about the dynamics of the dissociation processes.

Professor Mitsuke has constructed an instrument for study of two-dimensional photoelectron detection, which monitors the

electron yield as a function of incoming photon energy and electron kinetic energy. This instrument is used to obtain information about the dynamics of the photofragmentation process. Furthermore, he is also studying the fluorescence that can be emitted from a highly excited state or by being induced by laser light in order to detect the dissociation fragments. Examples of studies conducted in recent time by professor Mitsuke using fluorescence detection, are the photofragmentation of water and the neutral dissociation of HI. In another kind of experiment professor Mitsuke is using laser light to combine with synchrotron radiation in order to study photodissociation of highly vibrationally excited molecules, in particular aiming at selective bond breaking.

In studies of fullerenes professor Mitsuke has shown that these molecules can store considerable amounts of energy as delivered by a high energy VUV photon without dissociating. This is explained in terms of a redistribution of energies into the very many different modes of vibration, which renders the molecule high stability against fragmentation. Endohedral fullerenes have also been subject to study by professor Mitsuke in several cases, highlighting the photoabsorption enhancement and interference effects due to the metal atom.

Professor Mitsuke conducts carefully designed experiments and with insight and advanced analysis he is able to keep his scientific output at a high level, providing new knowledge of great interest to the community.

UVSOR Facility

Professor Masahiro Katoh

The UVSOR facility was subject to a major upgrade during 2003 under the very able leadership of professor Katoh. By changes in the magnetic lattice the emittance could be lowered from 160 nm-rad to 27 nm-rad. By that this facility takes a fore-front position among low-energy storage rings, and in addition, by constructing in-vacuum undulators highly brilliant soft X-rays could be delivered without impairing the life-time properties. The changes also gave room for more straight sections, which is a prerequisite for the further development of the facility in terms of performance and availability. The whole operation was carefully planned and executed without unnecessary disturbance to the operations.

Professor Katoh is presently working on further upgrades and advancements of the facility. Top-up mode is under development, which will bring significant improvement in terms of average intensity. This has to be accompanied by stretching the energy of the injection system, as well as installing radiation shielding, which is already in progress.

The improved quality of the electron beam resulting from the recent upgrade of the UVSOR facility has brought advantages to the free electron laser installed in the storage ring. In test experiments the anticipated gain has been confirmed and presently work is underway to realize a new in-vacuum optical klystron for radiation in the deep UV and VUV. Other significant technical developments that are underway or in the planning are the coherent Terahertz radiation generation project, the slicing of the electron beam by a laser to achieve ultra-short pulses, and plans for even further decreased emittance by another lattice change.

It is obvious that professor Katoh possesses great skills as an accelerator physicist and as a leader of the machine operations and technical development of the source.

Associate professor Shinichi Kimura

Professor Kimura has been working at IMS since 2002, bringing in a somewhat different scientific field into the Institute of Molecular Science, solid state spectroscopy and studies of strongly correlated condensed systems. He is using photoemission spectroscopy as well as optical measurement techniques based on the use of infrared radiation to study electronic structure and

magneto-optical properties of strongly correlated materials and other materials with special electronic properties. Professor Kimura has been and is still engaged in the design and development of experimental systems for synchrotron radiation.

The research program of professor Kimura includes studies of rare earth and transition metal systems, for instance various cerium compounds, under different conditions such as varying magnetic field, pressure and temperature, as well as controlled combinations of these parameters. In the studies he is able to address important questions such as, for example, pseudo-gap formation, effects of spin fluctuations at critical points, and quasi-particle behaviour. The research programme also includes studies of organic (super)conductors as well as skutterudites and clathrates, compounds that have quite special structure and display unusual electronic properties.

In the past professor Kimura has been engaged in the design of beamlines both at UVSOR and SPring-8, and lately he has in particular worked on instrumentation projects at UVSOR concerning Terahertz spectroscopy at extreme conditions and the design and reconstruction of two undulator beamlines. Also, he has been involved in a project on coherent Terahertz radiation generation.

Professor Kimura has a wide network of collaborators at Universities in Japan and overseas, with whom he has scientific collaboration, and he shows a steady pace of publishing in good journals. He is frequently invited to lecture at international meetings and in colloquia at laboratories. Professor Kimura is certainly a talented scientist with a firm basis in both advanced experimental methods and in the physics of solid matter.

Associate professor Eiji Shigemasa

The main interest of professor Shigemasa lies in the field of core excitation dynamics. This involves studies of multi-excited states, post-collision interaction and deexcitation processes using coincidence techniques, Auger and fluorescence spectroscopy and momentum imaging methods. Professor Shigemasa has designed experimental equipment for these kinds of experiments, including beamlines at UVSOR, electron and fluorescence analyzers and coincidence detectors.

In various high resolution and symmetry resolved studies professor Shigemasa is addressing questions about the mechanisms for double photoionization, the formation of negative ion fragments and metastable fragments, and the anisotropy of dissociation product emission. In particular, the momentum imaging spectrometer designed by professor Shigemasa offers a number of interesting assets. It allows very large detection efficiency ; it provides information on fragment internal energies through kinetic energy measurements and it delivers symmetry information on excited states by means of polarization dependence of transition moments. Using a toroidal electron analyzer built by professor Shigemasa angular and energy distributions are determined, which are used to establish potential energy curves and to elucidate details of the dynamics of the excitation-deexcitation processes involved.

Professor Shigemasa has long standing collaboration with internationally well known scientists in the atomic and molecular community, and especially two *Phys. Rev. Letters* a few years ago on angular correlations in molecular Auger decay and non-dipole electron emission effects in fixed-in-space molecules bear witness of this successful multi-national cooperation.

2006 年 1 月 9 日 ~ 11 日分子研訪問時に実施した極端紫外光科学研究系と UVSOR 施設の研究活動に関する報告

ウプサラ大学教授ジョセフ・ノルドグレン

極端紫外光科学研究系

小杉信博教授

UVSOR施設が絶えず競争力のある水準に保つことに成功している理由の大部分は疑いもなく小杉教授の見識ある優れた管理運営のおかげである。と同時に彼が分子物理学研究を実験と理論の両面で推進していることも国際的によく認知されている。これは注目すべき業績である。興味の中心は化学結合や励起ダイナミクスの研究、クラスターや分子固体における分子間相互作用、さらには物性物理学にある。小杉教授が用いている実験手法は対称性分離光吸収、光電子分光であり、最近では軟X線発光分光もある。彼はまた量子化学の研究プロジェクトを主導しており、彼の開発した分子内殻分光学に関連した理論計算コードは広く使われている。

小杉教授が主導している研究の中で、まず、光吸収スペクトルに現れる構造を帰属するため、角度分解光イオン収量法を応用した研究がある。例えばアセチレンでは、計算で求めたポテンシャル曲面を解析することで、 $3s\sigma_g$ リュドベリー状態とともに振動モードを通じて π^* 状態と結合した $C1s-3\sigma_u^*$ 価電子状態が特異な吸収構造の原因であることを見つけている。また、光吸収が青方シフトするか赤方シフトするかを用いてクラスター内の分子の幾何学的配向を決める話も興味深い。固体アルゴンの温度を 16 K から 8 K に冷却すると原子間距離が 0.4 pm (0.004 Å) 減少することで Ar2p-4s 励起がシフトすることを測定できたことも注目すべき成果である。共鳴光電子分光法による DNA の電子構造の研究も極めて注目すべきものである。

小杉教授のグループで開発している重要な実験装置の中で、新しい軟X線発光分光器のデザインは特に興味深い。このデザインは非球面斜入射光学系（ウォルター型）と透過型回折格子に基づいている。このデザインはいろいろ独創的な特徴を持っており、すでに現時点での回折格子と検出器を用いた性能（将来、性能強化されたコンポーネントが手にはいるようである）に感心した。

小杉教授は広い国際ネットワークを持って共同研究を行い、発表論文も順調に増えている。また、重要な手法で内殻と価電子の光イオン化過程の基礎的理解に継続的に貢献している科学者として国際的に有名であり、評判も高い。

菱川明栄助教授

菱川助教授は2003年に分子科学研究所に着任し、強レーザー場における分子の超高速ダイナミクスに関する研究を推進している。内部場に匹敵する強度を持ち、摂動論的方法が完全に破綻するような外場存在下における原子レベルの研究は極めて興味深い。菱川助教授は、最新のレーザーを用いて生成させたそのような条件下における分子構造変形過程および多重結合解離過程の研究に、新たに開発したコインシデンス運動量画像法を用いて取り組んでいる。この手法は解離過程によって生成したすべての解離イオンの持つ運動量と放出方向を決定することができる。得られた運動量ベクトルの相関に基づいて、菱川助教授は「光ドレスト状態」ポテンシャル曲面における核運動時間発展の再構築を行っており、これによって強レーザー場によって誘起された状態のダイナミクスに関する詳細な情報を得ている。

菱川助教授はレーザー偏光方向に対する分子配向がクーロン爆発過程に及ぼす影響などの問題について詳細な研究

を行っている。レーザーのパルス時間幅を変化させることによって、構造変形過程や配向を制御し解離方向の選択的なコントロールを可能とした。最近の成功した研究のなかでも、アセトニトリルの強レーザー場における解離過程に関するものは重要な知見を与えており、解離過程における水素移動過程経路やその時間スケールについての研究を可能としている。菱川助教授はレーザー高次高調波を用いた真空紫外光の発生にも並行して取り組んでいるが、これは大変興味深く期待に満ちた研究分野である。

菱川助教授は分子科学研究所に比較的最近着任し、この2年間で研究活動を積み重ねてきている。菱川助教授は引用件数が10件を超える論文を数多く発表してきており、そのうちの一つの引用件数は50件に届こうとしている。この発表論文記録は彼の才能を示すものである。

宇理須恒雄教授

宇理須教授は表面化学のバックグラウンドを持っており、分子研に来る14年前まではNTTで働いていた。それ以来、放射光誘起表面化学反応によりシリコン表面に構造を作る研究に従事してきた。放射光誘起表面反応は、材料選択性、高い空間分解能、低汚染と言う点で明確な優位性を有しており、従って、ナノ構造材料の製作に非常に適している。宇理須教授は分子研でも継続してこの研究に取り組んでいる。また、STM、AFMなど多様な評価技術をこの研究に適用している。

最近、宇理須教授は研究の方向を少し変え、表面科学、シリコン微細加工および評価技術における彼の膨大な知識基盤と熟練を生かして生体材料の機能の分野に焦点を合わせた研究を始めた。宇理須教授の研究計画で高く評価されるプロジェクトは、パッチクランプの手法によりイオンチャンネルの活動を検出するための信頼できる方法を実現させることである。そのため、彼は脂質膜中にある単一イオンチャンネルを検出できるデバイス構造を作る必要がある。また、信号検出のために電子回路を応用する必要がある。信頼性が高く正確な計測を達成する条件を整えるためには乗り越えなくてはならない幾多の困難と障害が待ち受けており、宇理須教授はこの到達目標に向かって今、道を切り開いているところである。このような研究では多くの異なった分野の専門的知識を必要とするが、彼はそのためにいろいろなルートを持っている。これによって彼の研究が真に先端的で学際的なものとなっている。また、宇理須教授は彼の共同研究者とともに驚くほどのペースで論文発表を維持している。

見附孝一郎助教授

見附助教授は分子の光イオン化の研究分野で多岐に渡る経験を持つ。文献データベースを見れば彼の幾つかの論文が頻繁に引用されていることがわかる。見附助教授は超励起状態の種々の崩壊過程（自動イオン化、前期解離、振電結合、内部転換など）、及びその結果起こる光誘起分子解離に関する研究に特に携わっている。こういった研究から光解離ダイナミクスの詳細を明らかにしてきた。

見附助教授は光電子強度を入射光子エネルギーと電子運動エネルギーの2変数関数として測定する「2次元光電子検出」の研究のための装置を作り上げた。この装置は光イオン化や光解離のダイナミクスの情報を得る目的で使用された。さらに彼は高励起状態の分子やイオンからの蛍光（発光分散分光）や放射光解離フラグメントをレーザー照射して生ずる蛍光（レーザー誘起蛍光）などについても研究した。蛍光検出や光電子検出を用いた最近の研究例としては、水の光解離とヨウ化水素の中性解離等の仕事が上げられる。もう一つの類の実験として、見附助教授は放射光とレーザーを組み合わせ、振動高次倍音励起分子の光解離を開始している。この研究は選択的な化学結合の解離を目指したものである。

見附助教授はフラーレンの極端紫外光吸収の研究も行っており、かなり大きな余剰エネルギーが渡されてもフラーレンはそれを長時間貯蔵しうることを示した。これは、異なる多くの振動モードに内部エネルギーが再配分されて、フラーレン親イオンが解離を起こさずに安定化されるためである。数種類の金属内包フラーレンの光吸収過程も見附助教授の研究主題の一つであり、金属原子の内殻励起に基づく共鳴現象と干渉効果に着目して研究を進めている。

見附助教授は実験を入念に立案し遂行し、彼の洞察力と先進的解析を用いて高水準の科学的成果を出し続けている。同時に、関連分野の研究者の興味をかき立てる新しい知識を供給し続けている。

UVSOR 施設

加藤政博教授

UVSOR は2003年に加藤教授の強力な指導の元、大幅な高度化が行われた。電磁石配列の再構成により電子ビームのエミッタンスを 160 nm-rad から 27 nm-rad へ低減することに成功した。これにより UVSOR は性能において低エネルギーシンクロトロン光源の先頭に立つことができた。真空封止型のアンジュレータを導入により、ビーム寿命を損なうことなく輝度の高い軟 X 線を供給することができるようになった。また高度化によりリング内に更に多くの直線部が作り出されたことで、今後も施設の性能・可能性をいっそう拡大できる余地を作り出した。この計画は必要以上に施設の運営に影響を与えないように注意深く計画され実行された。

加藤教授は、現在も施設の更なる高度化に向けて研究を継続している。現在は、トップアップ運転モードを開発中であるが、これはシンクロトロン光の平均強度を大幅に向上させることが期待できる。この運転モードの実現には入射器のエネルギー増強と放射線遮蔽の強化が必要であるが、これらは既に進行中である。

UVSORの高度化による電子ビームの品質向上は装着されている自由電子レーザーの性能向上にも結びついている。レーザー増幅率の向上が既に確認されており、光クライストロン装置の高度化による深紫外・真空紫外領域での発振実現が視野に入ってきている。これ以外にも、重要な技術開発としては、コヒーレントテラヘルツ光の生成、レーザーバンチスライス法による極短放射光パルスの生成、光源加速器の更なる低エミッタンス化が進行中もしくは計画中である。

加藤教授が加速器研究者として、また、光源開発・光源運転維持のリーダーとして優れた能力を有していることは明白である。

木村真一助教授

木村助教授は2002年から分子研に勤めており、分子研に多少違った科学分野である固体分光や強相関伝導系の研究をもちこんでいる。彼は、光電子分光や赤外放射光を使った光学測定を手段として、強相関伝導系や特殊な電子的な性質を持つ他の物質の電子状態や磁気光学的性質を研究している。木村助教授は、以前から継続的に放射光の実験装置のデザインと開発に従事している。

木村助教授の研究分野は、磁場・圧力・温度のパラメータをコントロールすることで作り出された異なる状態で、希土類や遷移金属系、たとえばさまざまなセリウム化合物などの研究を行っている。この研究で、彼は重要な問題、たとえば擬ギャップの形成や量子臨界点におけるスピン揺らぎの効果、準粒子の振る舞いなどの問題に取り組むことができる。研究対象は、有機（超）伝導体、スクッテルダイトやクラスレート化合物などかなり特殊な構造や異常な電子的性質を持つものも含んでいる。

過去において、木村助教授は UVSOR や SPring-8 のビームラインの設計を手がけてきており、最近では特に UVSOR

において極端条件下のテラヘルツ分光や2つのアンジュレータビームラインの設計と再構築の装置建設プロジェクトを行っている。また、テラヘルツコヒーレント放射光発生プロジェクトにも参加している。

木村助教授は国内や海外の大学との共同研究において広いネットワークを持っており、科学的な共同研究を実施し、高い評価の雑誌への出版を安定したペースで行っている。彼は、しばしば国際集会や研究所のコロキウムに招待されている。木村助教授は、疑いもなく先端的な実験手法と固体物質の物理の両方に確固たる基礎を持った有能な科学者である。

繁政英治助教授

繁政助教授の主たる興味は、内殻励起分子のダイナミクスにあり、これには多電子励起状態やPCI(衝突後相互作用)効果、脱励起過程が含まれる。オージェ電子や蛍光を組み合わせた同時計測法により研究を行っている。繁政助教授は、この種の実験を行うための電子エネルギー分析器や蛍光分光器などの装置類や同時計測法の開発を始め、UVSORにビームラインを建設した。

様々な高分解能分光実験、特に、対称性分離分光法による実験を通じて、現在、繁政助教授は二重イオン化のメカニズムや非等方的な生成物の放出、負イオンや準安定解離種の生成のメカニズムについて関心を持っている。繁政助教授により設計された運動量画像観測装置は多くの興味深い利点がある。まず、検出効率が高いこと。次に、運動エネルギー測定により、フラグメントの内部エネルギーの情報が得られること。また、遷移モーメントの偏光依存性から励起状態の対称性に関する情報が得られることが上げられる。繁政助教授が製作したダブルトロイダル型電子エネルギー分析器は、エネルギーと角度分布を同時に決定することができるので、分子の二価イオン状態のポテンシャルエネルギー曲線を決定したり、内殻正孔状態の脱励起のダイナミクスの詳細を解明することができる。

繁政助教授は、原子分子の分野でよく知られた研究者達との国際的な共同研究を長く続けており、特に数年前 *Phys. Rev. Letters* に出版された配向分子からのオージェ電子放出と非双極子的な光電子放出という二つの論文は、国際共同研究の成功を如実に物語っていると言える。

4-3 岡崎統合バイオサイエンスセンター

国内評価委員会開催日：平成17年11月2日

委員 阿久津秀雄（阪大蛋白研，教授）
杉浦 幸雄（同志社女子大薬，教授）
青野 重利（岡崎統合バイオ，教授）
北川 禎三（岡崎統合バイオ，教授）
藤井 浩（岡崎統合バイオ，助教授）

国外評価委員面接日：平成17年10月17日～18日

委員 Denis L. Rousseau
(Professor and University Chairman, Albert Einstein College of Medicine of Yeshiva University)

4-3-1 点検評価国内委員会の報告

評価委員会に先立ち，所外評価委員には，各研究グループの資料（業績リスト，主要論文別刷り）をあらかじめ送付した。評価委員会当日は，各研究グループにおいて約1時間の面接を，2名の所外評価委員それぞれが別途実施した。その後，全員が集まり，所外評価委員から全般的な感想，意見をいただくとともに意見交換を行った。

意見交換内容

所内委員C：本日は，お忙しい中統合バイオの外部評価においでいただきありがとうございました。先ほど，統合バイオに所属する3教官の研究内容を各グループ毎に点検していただきました。統合バイオには，もう一つ教授ポストがあります。これら4つの教官ポストを使って，今後統合バイオがどのように発展していったら良いのか，ご意見をお伺いしたいと思います。

所外委員A：木下先生がおられた時は，研究分野の面で広がりがありましたが，現在はある意味では3つの研究グループの研究分野が近接し，焦点がしぼられています。今後，統合バイオに所属する研究グループの研究分野を絞っていくのか，複数の視点から取り込んでいくのかが問題だと思います。

所内委員C：個人的な意見では，4つのグループの中で，全部とは言わないが2つ以上のグループが協力関係をもてるような研究分野であったほうが良いと思います。

所内委員D：個人的には，どちらが良いか今はまだ結論がでていません。ただ，統合バイオが，学際領域であり国際的に発展しつつある分野の幾人かの研究者を集めて，日本の中心となることをめざしてもよいのではないかと思います。

所外委員A：現状では，日本における生物無機化学のセンター的役割を果たされていると思います。限られたポストをどのように配置して発展させるかは，いずれにせよ難しい問題だと思います。

所内委員D：ポストの数が少ないので，全部の分野をカバーすることは難しいと思います。せいぜい2つくらいの分野になると思います。

所外委員B：分子科学という成熟した分野での成果を，統合バイオに生かしていくことは大切であると思います。そのためには，どういう人をとるかが最も大切だと思います。分野を拘束してしまうのは，良くないと思います。組織を作る上では，人の問題が最も重要だと思いますが，その中で多少なり協力関係が作れるのが望ましいと思います。もう一つ，これまでにこの研究所が作ってきた財産，たとえば北川先生がやっ

てこれたラマンの研究などを、今後もうまく生かしていけないかと考えます。

所内委員 E：私も、バランスを考えながらもある研究分野の面で特化し、世界の中での統合バイオの存在価値を示すことが大切だと思います。

所内委員 D：私も人を重視して採用していくことが大切だと思います。

所内委員 C：分子研の研究グループの大きさは、2つのグループが協力すると大学での1講座に相当し、ちょうどいいサイズではないでしょうか。

所内委員 D：分子研では研究グループのサイズが小さいので、グループ同士が協力関係をもち相乗効果が得られる環境が必要だと思います。

所外委員 B：分子研では大学院生をコンスタントにとることが難しいので、グループ同士が協力関係をもつことが大切だと思います。

所内委員 C：ある程度特定分野に特化していると、「その分野の研究をするなら統合バイオ」というようになり、学生もとりやすくなると思います。

ところで、以前は統合バイオの人事選考を行うとき、統合バイオの教官が選考委員会に加わることはできませんでしたが、今度、統合バイオの教官が専門委員会レベルで選考委員会に加わるできるようになりました。その委員会で、どのくらい統合バイオの教官が発言権をもつべきか、ご意見をいただきたいと思います。

所外委員 B：私は、統合バイオの教官がかなり中心的に発言してしかるべきだと思います。統合バイオの教官が、統合バイオの将来についての意見を言い、その上で分野の違う方の意見を求めていくのが適当だと思います。まったく分野外の人だけで選考していくのは変ですね。統合バイオの教官の発言する場がないのは、論外ですね。

所内委員 C：以前の人事システムでは、人事委員会メンバーが個人的に統合バイオの教官に意見を求めることはありましたが、人事委員会のメンバーにバイオ関係の人が含まれていませんでした。それぞれの人事委員が、それぞれ違った専門の人からの意見を参考にして選考していくことは、危険だと思います。

所外委員 B：私もそう思います。個人の意見は、偏りがある場合が多いです。人事委員が専門でない場合、その個人的な意見を鵜呑みにして選考することがあり、危険です。統合バイオの教官などが人事委員に含まれば、専門的な知識もあり広い視野から発言できるので、発言する機会を作る必要があると思います。

所内委員 C：私もそう思います。バイオを専門とする複数の人事委員がいれば、統合バイオからの委員も含め個々の発言が妥当かどうか判断できると思います。

所外委員 A：分子研の人事のやり方は、かなり大学とは違いますよね。決められた人事委員がすべての分野の人事を行っています。分子研設立当初は、それで良かったのですが、研究所の研究分野が広がると難しくなるのではないのでしょうか。大学などでは、採用する分野に応じてその分野の専門家を含めその都度選考委員会を組織します。

所内委員 D：今回の人事では、まだ最終的に決定はしていませんが、統合バイオの教官が専門委員として選考委員会に加わることになるでしょうから、その点は良くなったと思います。

所内委員 C：基生研や生理研の関わる統合バイオの人事では、それぞれ統合バイオの教授を含めた専門の近い人達の委員会が作られ選考が行われていますが、分子研の人事委員会は常置の委員会で、2年間同じ人がすべての分野の人事選考にあたります。分野によっては、選考が難しくなることもあります。今度の人事で、

統合バイオの意見がどの程度反映されるか見てみる必要があります。

それでは、選考委員の選考の仕方はどうでしょうか？ 現状では、統合バイオから5～6名を推薦し、そこから3名選考されます。

所内委員D：統合バイオに所属する教授が選考され、その上でさらに外部の専門家が加わるのがいいと思います。

所外委員A：最初の試みとしては、いいと思います。まずやってみる事です。

所外委員B：統合バイオは、分子研から見ればかなり境界領域にあると思います。だから統合バイオの教官が関わり、その上で外部の専門家が加わるのがいいと思います。そこにバイオの専門家が一人もいない時、ちゃんとした選考ができるか疑問が残ります。

所内委員C：従来の常置的な委員会による選考を続けていくのであれば、選考委員の選考の仕方考えたほうがいいと思います。

ここで話題を変え、次に統合バイオの予算の独立性についてのご意見を伺いたいです。今度、連携研究が採択され統合バイオの予算が初めてできました。これまでは独自の予算がなく、統合バイオとしての活動ができませんでした。統合バイオの予算がある程度与えられ、統合バイオの中で審議して活用していくような自由度がある方が、独立した組織としては望ましいと思いますが、いかがでしょうか？

所外委員A：連携研究の事で、いろいろな所長とお話する機会をもちましたが、一番気にされていることは、統合バイオへ出している研究室へのサポートの仕方が3つの研究所で違い、そのため共通のルールを作り予算を充てることが難しいという印象を持っておられると感じました。

所内委員C：統合バイオの研究室は、研究所の派生物だ、統合バイオで研究している人は自分の研究所の人だ、という認識があるのです。だから、統合バイオの各研究員の考え方も統合バイオのためにするのではなく、各研究所のためにするという考え方ができてしまうのです。この考え方は問題で、将来、統合バイオが1つの組織として評価を受けるのだという意識が、各研究員にないと困ります。統合バイオに來ている予算が、ちゃんと配分されていれば問題ないのですが、3研究所に等分された後それにプラスαして、統合バイオの各研究員に配られます。各研究員は、統合バイオという組織に予算が配分されている事を知らずに、全額研究所から配分されているように間違っただけの解釈をする恐れが高いのが現実です。各所長は、自分のところのプラスαが非常に大きいと思っています。だから発言権は各研究所にあると思っています。

所外委員B：ある程度独自の予算がないと、統合バイオの活動ができないと思います。単なる寄せ集めではなく、統合バイオを発展的に独立させるくらいの気構えでそれぞれの親研究所が応援していかなければいけないでしょう。それが、結局は親元の研究所も良くなることだと思います。新しい組織を作るときは、みんなが応援していくという気持ちでないとはいけません。親元の研究所が応援していく、そしてその組織が良くなるのが親元の研究所も良くなる、そういう気持ちでないとはいけません。そのためには、予算建てをすべきで、同じ敷地にいるのだから、話あえばできることだと思います。

所内委員C：それがなかなか難しいです。ルールが簡単にできません。3研究所の協力があれば、多くの問題が解決されると思います。

所外委員A：統合バイオの教官で、明大寺地区におられる方はいるのですか？

所内委員C：います。しかしその方は、今度他大学に異動されるので、その後、どうなるかはわかりません。しかしその方の後任についても我々が議論できればいいのですが、先ほどお話ししたような状況です。

所外委員 A：統合バイオの教授会などを通して、意見を反映させることができないでしょうか？

所内委員 C：発言できると思いますが、発言したいという動きを作っていけないとできないと思います。

所外委員 A：一つの場所に集まっていると、独自の予算を作りやすいと思います。

所内委員 C：統合バイオの建物ができた時でも、統合バイオの人が入るという考え方ではなく、各研究所に3分の1ずつの領地があり、そこにだれが入るかは各研究所の問題だという考え方がありました。そのため、一つにまとまりにくかったのです。3研究所の所長が新しい施設を育てよう、サポートしようという姿勢で運営していただけたらいいのですが、それぞれが利権を伸ばそうという感じではうまくいきません。財政的にも統合バイオの運営費のようなものを作ってもらい、統合バイオのみんなでその使い方を議論していけば、求心力も生まれてくると思います。

最後にそれ以外で、お気づきの点がありましたら、何でも結構ですのご自由にご意見をお願いします。

所外委員 A：統合バイオの分子研以外の先生とお話する機会をもちましたが、統合バイオの分子研以外の方の研究方向として分子レベルでの研究を展開していきたいという話を聞き、それは分子研と共通面があるのでないかと思いました。これは、今後、統合バイオを世の中にアピールする上で、大きなポテンシャルを持ったものと思いました。

所外委員 B：私が期待することは、こういう研究所だからこそ、今までもそうでしたが、今後も基礎的な研究を伸ばしていただきたいと思います。ちゃんとした基礎的研究を行えるところは少ないです。大切な基礎研究を伸ばしていただきたいと思います。特に統合バイオは、今後の学問の発展の一つの方向だと思います。先ほどの話に戻りますが、3つの研究所が、統合バイオを応援していく、そしてできれば将来的には独立できるように応援していただきたいと思います。そういう意味では、予算面のサポートをしていただければ、もう少し独自の活動ができると思います。せっかくこんなにいいものを作られたのですから、場所はずでにできているので、人とお金を含め3つの要素を考えて、ここを発展させていく必要があると思います。

所内委員 C：ありがとうございました。私も、3研究所が統合バイオを育てるつもりで、そして育てたことが3研究所の功績であるという気持ちでいて欲しいです。

4-3-2 国内委員の意見書

委員 A

平成17年11月2日に統合バイオサイエンスセンターを訪れ、分子科学研究所兼務教員（北川禎三教授、青野重利教授、藤井浩助教授）より研究の進捗状況を伺い、岡崎統合バイオサイエンスセンター分子研兼務教員グループの現状と将来について討論した。

統合バイオサイエンスセンターは分子科学研究所（以下分子研）、基礎生物学研究所、生理学研究所が共同して創設したセンターであり、法人化後も3研究所が共同して運営する研究センターとなっている。法人化により岡崎国立共同研究機構が廃止されたため、機構内での位置づけが不明確になっていると伺った。本研究センターでの分子研グループの役割は分子科学の立場から生命科学に寄与していくことであり、この間の成果は生物無機化学を中心に本センターに重要な貢献をしていることを示す。一時、木下一彦教授を迎えて、分野を広げる試みを行なったが、同教授の転出によりその試みは休止している。

研究内容においては、生物無機化学、特にヘムタンパク質の分野において共鳴ラマンスペクトルを用いて世界をリー

ドする研究業績をあげ、分子研および統合バイオサイエンスセンターを世界、および日本における生物無機化学研究の中心となった。ガスセンサーヘムタンパク質に関するグループ内の共同研究は大きな成果を上げている。本グループは常に新しい方法の開発を通じて、新しい分野の開拓に成功してきたが、高速時間分解紫外共鳴ラマン分光や高感度フーリエ赤外分光法を用いることによりヘムからタンパク質そのものへ解析対象を広げ、さらにタンパク質のフォールディング・アンフォールディング機構の解析や、アミロイド形成機構の解析など新しい分野に切り込んでいる。一方では統合バイオサイエンスセンターに相応しく生物学的手法と化学的手法を巧みに用いることにより、ヘムタンパク質の構造と機能にセンサータンパク質という視点から新しい領域を開いた。特に CooA に関する研究は見事である。その研究は酸素センサー等他のタンパク質に展開しつつある。また、酸化反応に関与する非ヘム金属酵素反応中間体モデルの合成、シアンイオンをプローブとしたヘムタンパク質活性中心の特性と機能の関係等を独自の立場から明らかにする研究でも実績を上げている。

これらの研究実績に鑑み、統合バイオサイエンスセンターの分子研兼務の研究グループは全体として分子科学の手法を用いて世界の研究を牽引する重要な役割を果たしていると判断できる。この研究グループの研究分野は世界的にみても、国内的にみても依然として生物無機化学の重要な分野となっている。このことは当該研究グループ出身の研究者が国内の多くの大学・研究機関の中核的研究者になっていること、北川教授の業績リストから分かるように国内外の研究者が共同研究をしに訪れており、それが研究成果として結実していることに現れている。

統合バイオサイエンスセンター分子研兼務教員グループにとって木下彦教授が早稲田大学に異動したことは大きな損失であった。木下教授はバイオサイエンスセンターの公募で採用されており、公募の内容と同センターの現実の間の矛盾がその原因の一つになっていると伺っている。折角の優秀な人材がその力を十分に発揮することなく、センターを去らなければいけなくなった事実は今後への重要な問題を提起していると思う。これは本質的には分子研だけの問題ではなく、岡崎の3研究所全体の問題である。しかし、分子研は当事者でもあり、研究所として可能な努力をしていく必要があるのではないだろうか。法人化により問題は複雑になっており、誰もが納得する解決法がすぐに見つかるとは思えない。しかし、3研究所の夢を担ってスタートした統合バイオサイエンスセンターとそこで働く研究者の研究活動が本来の目的を達成できるようサポートしていくべきではないだろうか。まずは十分なコミュニケーションが取られることが重要である。これらの点はさまざまな困難を克服して、現在の分子科学の研究分野を切り開いてきた分子研には十分可能なことだと思う。

委員 B

全体評価

岡崎統合バイオサイエンスセンターの生体分子研究部門（北川研）、生物無機化学研究部門（青野研）および生体物理研究部門（藤井研）は分子科学研究所に源を持つ研究部門である。分子科学は多くの科学の中でも最も成熟した学問の一つであり、科学の変化によって分子科学の伝統的な境界は大きく広がり、とりわけ生物・医学との境界領域に新しいフロンティアが期待されている。当該研究部門は真に「生物の理解と生体の制御」を解明するため、分子科学と生命科学を融合することによって、新しい領域を開拓しようとしている。具体的には、タンパク質高次構造による機能制御と紫外共鳴ラマン分光、呼吸系および光合成反応中心における電子移動プロトン輸送のカップリング機構、センサーヘムタンパク質のセンシング* および情報伝達過程、新規な分子センサータンパク質の単離とその性質の解明、小分子をプローブとした金属酵素の活性中心の構造と機能の相関などの研究課題が精力的に展開され、数多くの優れた研究成果を挙げている。分子科学と生命科学を融合させ、生命の秘める本質的原理の解明と理解を目指す岡崎統合

バイオサイエンスセンターならではのチャレンジ精神溢れる研究の取り組みである。最先端の装置・施設を有し、センター内外との共同研究も活発に行われている。この分野は新しい学問領域として国内外において注目されている。いわゆる「ケミカルバイオロジー」もこの研究領域の一つであり、基礎的研究でありながら将来、医学応用など社会貢献も期待できる楽しみな分野と考えられる。これ迄の研究所の枠を超えた新学問領域の開拓という統合バイオサイエンスセンターの設置理念を実現するため、世界を先導する優れた研究成果を出すべく大いに邁進していただきたいものである。また親元の分子科学研究所に対しては、新しい組織である統合バイオサイエンスセンターの自立と発展を促すためにも人的・資金的に最大限の助力をお願いしたい。

4-3-3 国外委員の評価

原文

1. Comments and Advice about the Department

The Department from the IMS in the Integrative Bioscience Center has been highly productive over the past five years. At present, the Department consists of three research groups: Those of professors Fujii, Aono and Kitagawa. Each group has complementary research skills and interest and they have selected projects to study in which each can contribute in a very significant way.

This is clearly a case where the whole is greater than the sum of the individual parts and it represents the type of collaboration for which many institutions strive but very few achieve. The combination of having expertise in model complexes, in several protein systems and state-of the art spectroscopy in the type of mixture that leads to very sound and insightful studies. There are two central aspects of the Department that have led to its success: The Laser Spectroscopy Resource Center and a well-defined and collaborative focus on heme protein chemistry.

The Laser Spectroscopy Resource Center

The centerpiece of the department is the Laser Spectroscopy Resource Center built up over the past several years by Professor Kitagawa. As I examined the Center, it became clear that it is a world class center that is utilized not only by Japanese investigators but by investigators from all over the world. This Center has served as an attraction point for international scientists to carry out innovative research. Indeed, Professor Kitagawa lists 50 investigators from all over the world who have collaborated on research projects at the Center over the past five years. When they come to the Center it is both valuable for them and for the students and the scientists in the IMS as each learn from each other. It also affords opportunity for international scientists to learn about all of the projects that are going on in the Integrative Bioscience Center. We have such Centers in the United States that are supported by the National Institutes of Health. They are the research Resource Centers and they make available high technology instrumentation in all areas of Bioscience to the scientific community. They are highly valued as it is very important to have in one place a large selection of specialized equipment in order to make rapid advances in the competitive scientific fields. Among the ~70 Research Resource Centers in the United States there are only two which have some of the capabilities of that of Professor Kitagawa-the one at MIT under the leadership of Professor Michael Field and the one at the University of Pennsylvania under the leadership of Professor Robin Hochstrasser. I was a member of the review committee for the last evaluation of the Center at the University of Pennsylvania and it received an outstanding evaluation, but the Center at Pennsylvania is no better than that assembled and directed by Professor Kitagawa. It is my understanding that the present plan is to deconstruct Professor Kitagawa's Center when he retires.

I am sure that all of the equipment will be well utilized in other laboratories, but a cohesive Center will be permanently lost. Instead, it is my recommendation that the IMS maintain the Laser Spectroscopy Center and a new Director for it is brought in to run and expand it even more. I believe that a technological advantage, presently enjoyed by Japanese scientists, will be lost if the Center is dismantled.

A Focus on Porphyrin and Heme Protein Chemistry

The primary work that goes on in the Department focuses on porphyrins and heme proteins. Hemes are arguably the most important and versatile redox centers in Biology. This is because they can play so many diverse roles, ranging from electron transfer, to oxygen storage, to oxygenation of organic substrates, to generation of signaling molecules, to serving as molecular biosensors, to name but a fraction of their many functions. Most significantly, work coming from the Department has made significant advances in many different areas of heme protein chemistry, such as heme based gas sensors, oxygen activating proteins, high-valent heme intermediates and heme degrading proteins. In each of these cases the work has been published in the leading journals such as the *Journal of the American Chemical Society* and the *Journal of Biological Chemistry*. Furthermore, it is important to note that their studies have received international recognition resulting in invitations to speak at major conferences and invitations to write in-depth review articles about their work, such as those written for the *Accounts in Chemical Research* and *Coordination Chemistry Reviews*.

Obviously, all areas of biochemistry/biophysics cannot be covered by only three research groups. It is necessary to be selective in choosing projects. If each of the research groups were working on projects that were unrelated, they would not be able to achieve such a high impact. By focusing on metallo-enzymes and specializing in heme proteins, the Department has maximized the impact it can have given its limited size.

Future Directions

I recognize that soon the Department will change as Professor Kitagawa will retire and Professor Fuji will move to a different institution. When they are replaced, it should be with individuals who have interests that complement each other so as to achieve the same type of synergy that has existed in the past. Continuing to focus on some aspects of metalloproteins would be a wise direction to follow and it will fit in with the interests of Professor Aono. In addition, metalloproteins lend themselves to a variety of different types of studies as they offer spectroscopic “handles” to study the functional properties of the protein. Furthermore, their diversity allows for studies to focus on inorganic, organic or biochemical properties. Thus, it will fit in with the general goals of the IMS that have a very broad scope.

Another important direction to consider as a centerpiece of the Department is that of membrane proteins. This is a research area that has already been initiated by Professor Kitagawa through the research grant he wrote that establishes a collaboration with the Institute for Protein Research at Osaka University. The Program entitled “Assembly and reconstruction of membrane proteins and cellular molecular machineries” is a very important. Membrane proteins make up about one third of the proteome of the cell. Nevertheless, the understanding of their structures, mechanisms and interactions are far-less well understood compared to those of water-soluble proteins, owing to the difficulties in dealing with membrane-bound proteins. The need for new work in this area was highlighted in the December 1, 2005 issue of *Nature* in which an “Insight” series of papers was devoted to Membrane Biology. Over the next several years, many new developments are anticipated in the understanding of membrane proteins so it could be a very

fruitful research area for the Department from IMS in the Integrative Bioscience Research Center.

In Summary, it will be most important the Department from the IMS in the Integrative Bioscience Center to maintain a highly collaborative group of investigators who have complementary strengths and common interests in some significant problems. I also wish to re-emphasize the importance of maintaining the Laser Spectroscopy Research Center. It is through such centers that major advances can occur and with which both Japanese and international scientists can have a technological advantage over those who do not have access to such a state-of-the-art center.

Sincerely yours,

Denis L. Rousseau, Ph. D.

Professor and University Chairman

Department of Physiology and Biophysics

2. General comments about the IMS

The IMS has an outstanding reputation in the scientific community. As we move ahead in the new century it is appropriate to evaluate the types of research efforts that will be needed to maintain its high reputation. In the US, there are clear changes that are happening in the sciences especially in chemical, biochemical and biophysical fields. If you look back several years ago at various Science and Technology reports, each discipline and sub-discipline was isolated. This has dramatically changed. It is now well recognized that advances in the future will depend on collaborative work in which scientists with very different skills will come together to address problems.

Research in the 21st Century

The new approach for scientific research is being stressed in both the biological and chemical sciences fields. For example, in *The NIH Roadmap* for biological research in the 21st century presented in 2003 by Elias Zerhouni, the NIH director, [*Science* **302**, 63 (2003)], one of the three themes is “Research Teams of the Future.” The idea is that they must be far more interdisciplinary than in the past to address complex problems. To devise and use state-of-the-art technologies will require the expertise of physical scientists, biological scientists, mathematicians, engineers, computer scientists and others. One of the other themes is “New Pathways to Discovery” in which advances will depend on an extensive “toolbox” in which researchers will have access to new technologies, databases, and other new resources.

In the Chemical Sciences a similar need for interdisciplinary is being stressed as described in the National Academy of Science report published in 2003 entitled “*Beyond The Molecular Frontier: Challenges for Chemistry and Chemical Engineering.*” In the Executive Summary of this over 200 page report it is stated: “We conclude that science has become increasingly interdisciplinary, and it is critical that the disciplinary structures within our fields not hinder the future growth of chemical sciences into new areas. Interdisciplinary refers here both to the strong integration from the molecular level to the process technology level within the chemical sciences and to the intersections of the chemical sciences with all the natural sciences, agriculture, environmental science, and medicine, as well as materials science, physics, information technology, and many other fields of engineering.”

The Integrative Bioscience Research Center

It is clear from the Direction for future research discussed above that the leadership of the IMS was very wise and forward-thinking when it established the Integrative Bioscience Research Center.

Bringing together groups from the IMS, NIBB and NIPS is exactly the way future research teams can make significant new discoveries and advances. One would hope to have strong collaborative interactions within each Institute as well as interactions between those from the different Institutes.

Certainly, the three from the IMS, Professors Kitagawa, Aono and Fujii, have achieved to goal of establishing strong collaborations between their research groups. However, it appears that there have not been strong collaborations between the groups from the different Institutes and in the future greater efforts should be made to establish collaborations between the scientists from these different Institutes. In addition, this is a perfect time to establish strong interactions between the Integrative Bioscience Research Center and the Research center for Molecular Scale Nanoscience and Coordination Chemistry.

Research Directions

The directions for the research programs should be established by two criteria. 1. What are important problems that can be addressed by the available personnel with the available resources; and 2. Considerations should be given in the selection of problems in which the strongest overlap between the groups can be achieved. These two have been met in the past among the IMS researchers as the focus on heme proteins with the combination of advanced spectroscopy with expertise in several heme protein systems and model compounds gave outstanding synergy that has led to significant advances in the understanding of these systems. Because of the vast number of physiological functions involving heme proteins, which play such extensive and diverse roles in biology it should be an area in which collaborations between the research groups from the IMS and those from the NIPS and the NIBB could establish fruitful that could take the research to a new level.

The general area of heme protein structure, function and spectroscopy also lends itself nicely to research on single molecule processes and nanotechnology. As you well recognize, single molecule studies and nanotechnology are important new scientific areas that will have an enormous impact in the future. Indeed, the advances from research in this area are so highly regarded that the National Institutes of Health in the US has established an “Alliance for Nanotechnology in Cancer” in which it is projected that through the power of nanotechnology there is goal to eliminate suffering and death from cancer by the year 2015. While I think this is too optimistic a promise, it does underscore the great expectations from this type of research. Nanotechnology is a wide open field and is a general area in which research groups in the IMS could establish fruitful collaborations with the members of the Research Center for Molecular Scale Nanoscience and Coordination Chemistry. The ongoing work dendrimers in the group of Professor Kitagawa could fit well into such a collaboration as dendrimers are a very important class of nanomaterials.

The existing expertise in Raman spectroscopy and fluorescence can be adapted to study kinetics, structure and protein folding, for example, on the single molecule level.

Another important area to consider is that of membrane proteins. This is a research area that has already been initiated by Professor Kitagawa through the research grant he wrote that establishes a collaboration with the Institute for Protein Research at Osaka University. Membrane proteins make up about one third of the proteome of the cell. Nevertheless, the understanding of their structures, mechanisms and interactions are far-less well understood compared to those of water-soluble proteins, owing to the difficulties in dealing with membrane-bound proteins. The need for new work in this area was highlighted in the December 1, 2005

issue of *Nature* in which an “Insight” series of papers was devoted to Membrane Biology. Over the next several years, many new developments are anticipated in the understanding of membrane proteins so it could be a very fruitful research area for IMS and could involve several research groups.

In order to maintain high research standard, it is necessary to have a large number of young people around. Apparently, the Grant for the membrane protein studies obtained by Professor Kitagawa has been used to support several post-docs and students. This is extremely important. The young scientists are the ones who do the work and bring in fresh ideas. Greater support for post-docs by the Institute would be a way to accelerate the research programs and cultivate new ideas and directions.

In Summary, I want to congratulate you for establishing the Integrative Bioscience Research Center and re-emphasize the importance of continuing strong support for the Center and advances that may be made by further enhancing collaborative projects. The research directions should be selected by their importance for the advancement of scientific understanding and for their potential for fruitful multidisciplinary collaborations.

Sincerely yours,

Denis L. Rousseau, Ph, D.

Professor and University Chairman

Department of Physiology and Biophysics

訳文

1. 岡崎統合バイオサイエンスセンターに関するコメントならびにアドバイス

岡崎統合バイオサイエンスセンターの中の分子科学研究所を兼務する研究部門は、過去5年間にわたり高い業績を挙げている。現在、当該部門は北川教授、青野教授、藤井助教授の3つの研究グループから構成されている。各研究グループは、それぞれに相補的な研究手法ならびに研究への興味を有しており、互いに重要な寄与ができるような研究テーマを設定し、研究を行っている。これにより、当該部門は個々の研究グループの単なる足し合わせ以上のものとなっており、多くの研究機関が努力しながらもなかなか達成することが困難である共同研究のよい例となっている。モデル化合物、種々のタンパク質、および精緻な分光学的手法の専門家が集まることにより、堅実で洞察力に富んだ研究を進めるための組み合わせとなっている。当該研究部門の成功例として次の2点を挙げることができる。それは、レーザー分光学装置のセンターとしての役割とヘムタンパク質に焦点を合わせた共同研究体制である。

レーザー分光学装置のセンター

当該研究部門の中心の一つは、これまでに北川教授により構築されたレーザー分光学装置のセンターとしての役割である。今回の評価において、本センターが日本の研究者だけでなく、世界各国の研究者に利用されていることが良く分かった。本センターは、優れた研究を実施するため、世界中の研究者を引き付ける役割を果たしている。事実、北川教授は過去5年間の間に、世界各国の50名の研究者と共同研究を実施している。これら共同研究者が訪れることは、互いに学ぶことができるため、彼等自身にとって有益であるのみならず、分子研の学生、研究者にとっても有益である。また、世界各国の研究者に、岡崎統合バイオサイエンスセンターで実施されている研究を知ってもらう良い機会でもある。アメリカ合衆国でも、NIHから助成を受けている同様なセンターがある。これらは研究機器センター

(Research Resource Centers) であり、バイオサイエンスのあらゆる分野において、研究コミュニティに対し高度な実験装置の使用機会を提供している。競争的な環境にある科学分野において、素早く最先端の状況を維持するためには、ある 1 ケ所に特殊な機器をまとめて設置することが非常に重要である。アメリカ合衆国にある 70 ケ所程の Research Resource Centers の中でも、北川教授の構築したものに匹敵するものは、2 ケ所しかない。1 つは、マサチューセッツ工科大学の Michael Feld 教授のもので、もう 1 つはペンシルバニア大学の Robin Hochstrasser 教授のものである。私は、ペンシルバニア大学の当該センターの評価委員の一員であった。ペンシルバニア大学の当該センターは、評価において高い評価を得たが、ペンシルバニア大学の当該センターは北川教授の構築したものより優れている訳では無い。北川教授の退職に伴い、北川教授の構築したセンターもなくなってしまうと聞いている。もちろん、現在ある機器は他の研究室で有効に利用されるであろうが、センターとしての役割はなくなってしまう。私は、分子研が管理者を置き、レーザー分光学センターを維持、発展させることを提案したい。もし本センターを無くしてしまえば、現在日本の研究者が享受している技術的な優位性は失われてしまうものと考える。

ポルフィリンおよびヘムタンパク質の化学への集中

当該部局では、ポルフィリンおよびヘムタンパク質に焦点をあてた研究が行われている。ヘムは、生物学において最も重要であり、広く利用されている酸化還元反応の活性中心である。その理由は、電子伝達、酸素貯蔵、有機基質の酸素化、シグナル分子生成、分子バイオセンサー等の多彩な役割を果たすことができるからである。当該部局における研究において、ヘム含有型センサー、酸素活性化タンパク質、高原子価ヘム反応中間体、ヘム分解などヘムタンパク質に関する様々な研究分野において顕著な業績が挙げられている。これらの研究成果は、*J. Am. Chem. Soc.*、*J. Biol. Chem.* などのトップジャーナルに掲載されている。さらに、主要な国際会議での招待講演、*Accounts in Chemical Research*、*Coordination Chemistry Reviews* 等の総説誌への執筆を依頼されるなど、これらの研究成果は国際的にも認知されていることは特筆に値する。生物化学、生物物理学のすべての分野を 3 グループでカバーすることが不可能であることは明らかである。研究プロジェクトを選択する際には、いくつかの選択肢がある。もし、それぞれの研究グループが互いに関係の無いプロジェクトを進めた場合には、存在感を示すことは難しいであろう。金属タンパク質、なかでもヘムタンパク質に集中することにより、当該部局は限られたサイズの中で、存在感を最大限に発揮している。

将来の方向性

北川教授は退職、藤井助教授は将来的には他に異動しなければならないため、当該部局の構成は早晩、変化することになる。二人の後任を選ぶ際、これまでのように互いに相乗効果が望めるような候補者を後任とすべきであろう。金属タンパク質関連の研究に焦点をあて続けることが賢明な方向性であると思われるし、このことは残る青野教授の研究上の興味とも一致している。さらに、金属タンパク質は、その機能を研究する際に分光学的な取扱いが可能であるため、様々なタイプの研究を行うことが可能である。また、その多様性から、無機化学、有機化学、あるいは生化学的な取り組みが可能でもある。幅広い視点を有する分子研の目指すところとも一致するであろう。

当該部局で取り組むべき別の重要な方向性として、膜タンパク質がある。これに関しては、北川教授が中心となり大阪大学蛋白質研究所との間ですでに連携研究が開始されている。「膜タンパク質の構築、再構成と細胞分子装置」と題された研究プログラムは重要なものである。膜タンパク質は細胞中の全タンパクの 3 分の 1 を占めている。にもかかわらず、その取り扱いの困難さ故に、膜タンパク質の構造、機構、相互作用などに関する理解は、可溶性タンパク質に比べてはるかに遅れている。本研究分野における新たな研究の必要性は、*Nature* の 2005 年 12 月 1 日号（本号の

“ Insight ” の特集が膜生物学にあてられている)でも取り上げられている。向こう何年間かの間に、膜タンパク質の理解に関しては多くの新展開が予想され、分子研を兼務する教員から構成される岡崎統合バイオサイエンスセンターの部局にとっても魅力有る研究領域と成り得るであろう。

最後に、分子研を兼務する教員から構成される岡崎統合バイオサイエンスセンターの部局において、重要な問題に対して共通の興味を持ち、相補的な役割を果たし得る、共同研究グループを維持することが最も重要である。レーザー分光学センターを維持することの重要性について、再言しておきたい。研究に大きな進展を得ること、このような優れたセンターを利用できない研究者に比べて、国内、国外の研究者が技術的な優位性を享受できるのは、まさにこのセンターを通じてのものである。

2. 分子科学研究所に関する一般的提言

分子研は科学コミュニティにおいて高い評価を得ている。新世紀を迎え、その高い評価を維持するためにはどのようなタイプの研究努力が必要であるかを検討することが適当である。アメリカでは、科学分野、特に化学、生物化学、生物物理分野において明らかな変化が現れている。数年前の科学、技術に関する報告書を振り返ってみると、それぞれの学問分野はそれぞれで孤立していた。このような状況は決定的に変化している。現在では、大きく異なった技能を有する科学者が共同して問題に取り組む共同作業によって、将来的な発展がもたらされるものと認識されている。

21世紀における研究

生物科学および科学分野においては、科学研究に関する新たな取り組み方に関する言及がなされている。例えば、2003年にNIHのディレクターであるElias Zerhouniによって示された21世紀の生物学的研究に関する「NIHロードマップ」(*Science* **302**, 63 (2003))によれば、そこでの3つの主題の一つは「Research Teams of the Future」である。この論点は、複雑な問題に対応するためには、これまでよりもより境界領域的でなければならないということである。洗練された技術を考案し、それを利用するためには、物理科学者、生物科学者、数学者、技術者、コンピューターサイエンティスト等々の専門知識が要求される。別の主題として、「New Pathways to Discovery」が挙げられる。科学技術の発展は、包括的な「工具箱 (toolbox)」、すなわち、研究者が利用する新規な技術、データベース、および種々の新規な研究資源などに拠るところが大きいであろう。

化学分野においても、「Beyond the Molecular Frontier: Challenges for Chemistry and Chemical Engineering」と題し、2003年に米国科学アカデミーから出版された報告書で述べられているように、同様な境界領域的研究の取り組みへの必要性が強調されている。200頁以上におよぶ本報告書中、概要において、次のように述べられている：「科学は益々境界領域的なものに成りつつある。既存の学問体系が、新分野に向かったの化学の将来的な発展を阻害しないことが重要である。ここで言う境界領域とは、化学分野における分子レベルからプロセス技術レベルに至るまでの統合、化学とその他の自然科学、農学、環境科学、薬学、材料科学、物理、情報工学、および種々の工学分野との相互乗入れを指している。」

岡崎統合バイオサイエンスセンター

上記で述べたような将来的な研究の方向性の議論からも、岡崎統合バイオサイエンスセンター設立に際しての分子

研のリーダーシップは非常に賢明であり未来志向であったことは明らかである。分子研，基生研，生理研から互いに研究グループが集まっていることは，重要で新規な発見，進展をもたらすことができる将来的な研究形態への確かな道筋である。各研究所内，ならびに研究所間での強固な連携，共同研究が望まれる。分子研に所属する3教員，北川教授，青野教授，藤井助教授は，それぞれの研究グループ間での強固な連携，共同研究体制を確立している。しかしながら，他の研究所との間の共同研究体制はそれほど確立はされておらず，今後，他の研究所との間の共同研究体制をさらに強める努力が望まれる。さらに付け加えるなら，今が，岡崎統合バイオサイエンスセンターと分子スケールナノサイエンスセンター，錯体グループとの連携を強化する好機であると考えられる。

研究の方向性

研究プログラムの方向性は，次に述べるような二つの判断基準に従って決定されるべきである。研究者が利用可能な研究資源によって追求し得る研究課題で重要なものは何か。研究グループ間での強固な連携が可能であるような研究課題の選択について考慮すべきである。分子研を兼務する岡崎統合バイオの研究グループでは，上記二つの判断基準に合致した成果をあげている。すなわち，これまで先進的な分光学的実験手法と様々なヘムタンパク質ならびにモデル化合物に関する専門的知識とを駆使し，ヘムに関する研究に焦点を当てることにより大きな成果を挙げるといふ素晴らしい相乗効果を示している。ヘムタンパク質の場合も含め，生理機能には多種多様なものがあり，生体系において多種多様な役割を果たしている。したがって，このような研究分野においては，分子研，基生研，生理研の研究グループ間での連携，共同研究により，研究をさらなる新しいレベルに展開し得るものと思われる。

ヘムタンパク質の構造，機能，分光学的な研究は，単一分子プロセスやナノテクノロジーに関する研究にも役立つものである。良く知られているように，単一分子プロセスやナノテクノロジーに関する研究は，将来的に非常に大きなインパクトを持った新しい研究分野である。この研究分野の発展は非常に重要であるとみなされており，米国 NIH は2015年までにナノテクノロジーを用いた癌制圧を目標としたプロジェクト，「Alliance for Nanotechnology in Cancer」を設立している。この目標設定はかなり楽観的であると思われるが，このような研究分野への大きな期待を強調するものである。ナノテクノロジーは前途有望な研究分野であり，分子研を兼務する岡崎統合バイオの研究グループと分子スケールナノサイエンスセンター，錯体化学グループとの実りある連携が可能な分野でもある。デンドリマーは非常に重要なナノ材料の一種でもあることから，北川教授の研究グループにおいて進行中のデンドリマーに関する研究は，上記の連携を考える際にも適当なものであろう。北川グループのラマンおよび蛍光分光法に関する専門的知識は，単一分子レベルでの反応速度論，構造，タンパク質フォールディング等の研究に適用可能である。

今後考慮すべきもう一つの重要な研究分野は，膜タンパク質に関する研究である。本研究分野の研究は，既に北川教授が中心となり，大阪大学蛋白質研究所との連携研究としてスタートしている。膜タンパク質は，全タンパク質の3分の1を占めているにもかかわらず，膜タンパク質の取り扱いの困難さにより，それらの構造，反応機構，相互作用等の理解は可溶性タンパク質に比べて大きく遅れている。本研究分野における新たな取り組みの必要性は，「膜生物学」を特集として取り上げた，*Nature* の2005年1月号で大きく取り上げられている。向こう何年間かの間に，膜タンパク質の理解に関しては多くの新展開が予想され，分子研にとっても魅力ある研究領域と成り得るであろう。

高い研究水準を保つためには，多くの若い研究者の存在が必要不可欠である。北川教授を中心とする膜タンパク質に関する連携研究においては，数名のポスドク，学生に対し研究費が援助されている。このような取り組みは，非常に重要である。若手研究者は研究実施の主体であり，研究に新しいアイデアを持ち込むものである。研究所によるポスドク雇用の充実，研究プログラムを進展させ，研究の新しい方向性をもたらす方策であろう。

最後に、貴研究所が岡崎統合バイオサイエンスセンターを設立したことに敬意を表したい。また、岡崎統合バイオサイエンスセンターならびに、さらなる共同研究の促進への強力で継続的な支援の重要性を再度強調しておきたい。研究の方向性は、科学的理解の向上、境界領域での実り多い連携の可能性などの観点からみた重要性によって選択されるべきである。

4-4 運営顧問による点検評価

4-4-1 小間 篤運営顧問

分子科学研究所への提言

分子科学研究所（以下分子研と略す）の運営顧問会議のメンバーの一人として、提言をさせていただく。以下にも述べるが、国立大学並びに大学共同利用機関の法人化とともに、日本の学術研究、高等教育のあり方が大きく変わりつつあり、その行方は不透明な部分が多い。その中で分子研のあり方についてもよく検討し、次の体制、戦略を立てるべき時期にあると思う。

組織

岡崎統合バイオサイエンスセンターの発足により、明大寺と山手の両地区にまたがって分子研のアクティビティが展開される形になった。さらに、新たな定員拡充が容易でない国の財政状況下で統合バイオセンターの発足がなされた結果、自分の所属する系とは異なる系の主幹を併任するなどのいびつな構造をとることが余儀なくされている。この問題の解決の策として、分子研内に置かれた系・施設のあり方検討会では、現在の研究系を廃し、研究所の組織を3から4の研究領域に大きく分け、研究領域はいくつかの研究部門と関連施設から構成する一方、明大寺、山手地区にまたがる研究領域も作る計画が提案されている。定員の拡充が今後も見込めない現状を考えると、上記の案は大変現実的な案と思う。更に細部をつめた検討を進めていただきたい。

分子研は自然科学研究機構の中に置かれた研究所として法人化がなされた結果、5研究所を束ねた機構の中での一体的運営が求められることになった。しかし現実には、機構本部が置かれている東京神谷町と研究所が置かれている三鷹、岡崎、土岐とは地理的にも離れており、相互の行き来には相当の時間を要する上、研究所間の研究分野、適切な運営のあり方に大きな違いがあって、一体的運営が無理な点も多く、このままでは機構法人の実を挙げて行くのはむずかしいように思われる。分子研だけでは解決できない問題であるが、今後、よりゆるい研究所連合の形を目指した機構の構造改革を目指して行くことが必要であろう。

人事

大変残念なことであるが、法人化とともに、運営費交付金の中の人件費が毎年1%ずつ減額されていく仕掛けが導入された。その結果、常勤教職員の数を毎年減少させていかなければならなくなり、この対応策を考える事が是非とも必要となっている。競争的資金を導入して博士研究員などの任期付きポストを用意することでそれを補う考え方もあるが、任期後のキャリアパスの設計が十分なされておらず、有能な研究者を博士研究員に迎えることがむずかしい状況が顕在化しつつある。腰を据えて優れた研究成果を挙げてテニユア付のポジションに移っていく事を定着化させるには、多くの博士研究員のポストのような3年程度の短い任期ではなく、任期付きであっても最低5年以上の任期があり、当初設定された任期後も2年程度の猶予が与えられるポジションが必要と思われる。分子研は以前から助手ポストについては、上記に近い運用をしてきているが、上述のように人件費削減とともに、この助手ポストについても減少を避け得ない状況である。これを補うには、競争的資金の間接経費部分の一体的運用により、個々の競争的資金にリンクした任期ではなく、研究所全体（ないし機構全体）で最低5年以上の任期を保証するポストを作っていくことが一つの方法かと思われる。

共同利用

国立大学及び大学共同利用機関の法人化により、各法人ごとに最適化する仕組みは導入されたが、各法人ごとでなく、国全体の学術進展の観点から最適化する仕組みも同時に導入すべきであったのに、それが十分なされていないのは、大きな問題である。制度設計の観点から言えば、後者については、大学共同利用機関法人がその役割を担うべきだと考えられ、大学共同利用機関法人は、共同利用について今まで以上に、配慮することが求められていると思う。分子研は、UVSOR やスーパーコンピュータ等、一大学では整備、維持がむずかしい大型施設や、分子科学分野の先端的研究機器を、全国の大学研究者の利用に供しているが、今後はそのようなハードウェアの共同利用だけではなく、日本の分子科学の発展に必要な各種研究プロジェクトの提案、国際会議の主催などを率先して進め、法人ごとに閉じた体制を横断する仕掛けを積極的に提案し、国に必要な予算を要求していく事が求められよう。

大学院教育

分子研は総合研究大学院大学の基盤研究機関の一つとして、大学院教育にも大きな努力をしてきた。分子研における研究のアクティビティの高さに惹かれて、全国から優秀な大学院生が分子研に集まり、分子研において研究指導を受け、博士の学位を得た後、多くの修了生が国内外の大学・研究機関において活躍している。平成17年度からは従来の博士課程後期3年制から、博士課程前期も含む5年一貫制に移行したが、入学院生の数にややかげりが見られる。この傾向が平成17年度のみのものであれば問題ないが、国立大学の法人化後、各大学が大学院生数の確保に走る傾向のありで、一度分子研の専攻に入学を決めた学生が、出身大学の指導教官の強い勧めにより、その大学の大学院への進学に変えるなどの事例が出ていることを考慮すると、相当の努力をしなければ、来年度以降もこの傾向が続くおそれがある。毎年若い優秀な学生が分子研の専攻に入学し、分子研で研鑽を積むことは、分子研の教員にとっても大変良い刺激となりプラスになる点が多いので、定常的に大学院生が分子研に来るようにすべく、さまざまな努力をすべきである。各大学の非常勤講師の要請を積極的に受け、学部学生に魅力的な授業をして、分子研の大学院専攻を目指すようにリクルートすることも一つの方法であろう。分子研における最先端の研究のアクティビティを理解して、そこで学位を取りたいと強く希望するには、場合によっては学部段階では無理かもしれないので、博士課程前期の入学者だけでなく、博士課程後期からの編入学生が増えるようにすることも、もう一つの方法であろう。

以上思いつくままに、いくつかの提言をさせていただいたが、分子研のアクティビティの向上に役立てていただけたら幸いである。

5．将来計画及び運営方針

法人化から3年が経過したが、まだ完全に軌道に乗ったとは言えない状況である。国の厳しい財政状況をも踏まえ、基礎科学の更なる発展を目指して研鑽と努力を重ねる必要がある。

分子研における各施設・センターの現状と将来計画、組織の見直しと再編の検討等の議論が進められ、次ページ以降にそれらが詳しく纏められている。前者については、分子スケールナノサイエンスセンターの920MHz NMRの有効活用が進んでおり成果が挙がっていること、計算科学研究センター(岡崎共通研究施設)に新しいスーパーコンピューターが導入され、通常では実行不可能な大型計算を可能とすること、極端紫外光研究施設においてトップアップ運転等を行い研究の質を更に高めること、装置開発室で所外からの注文をも受ける体制を拡充すること、等々が主な事項である。また、組織再編等については、検討委員会での議論を踏まえて、現在の研究系と施設を4領域(理論・計算分子科学、光分子科学、物質分子科学、生命・錯体分子科学(仮称))に再編すること(平成19年度実施予定)、及び、一部教授への助手2名の配分などの具体的検討が始まっている。

国際共同研究では、アジア・コア・プログラムが認められ、従来分子研が独自に行ってきた分子科学国際共同研究計画と共にこれを有効に活かし、アジアに於ける基礎科学の振興と共同研究の推進を押し進め、世界における分子科学拠点としての活動を深めたい。また、予算の関係で中断されていた岡崎コンファレンスを復活する予定でもある。

平成17年度概算要求で認められた連携融合事業である「エクストリーム・フォトニクス」、及び、委託事業として進めている「ナノ総合支援プロジェクト」は共に順調に成果を挙げつつある。一方、NAREGI事業は平成18年度から、国家プロジェクトとしての「最先端・高性能汎用スーパーコンピューターの開発利用」に衣替えして新たなスタートを切っている。分子研はそのグランドチャレンジアプリケーションで学術的基礎研究の責任を全うすることになっている。

最後に、「化学系汎用機器全国・地域共同利用ネットワークの構築」の計画を全国の国立大学の化学系機関との協力のもとに現在進めている。国の財政状況の悪化に伴い、研究の基盤を支える汎用機器の拡充が十分に出来ない状況になっている。この状況を少しでも改善すると共に機器の効率的利用を行うために、「既存機器の復活再生」と「新規機器の重点的購入」の計画を進めている。全国を12地域に分割し、復活再生機器も新規購入機器も地域毎(場合によっては全国規模)の共同利用に供することを必須条件として取りまとめ、概算要求を行なう計画である。分子研独自の平成19年度新規概算要求としては、昨年度同様「触媒分子科学の推進と情報発信」(北大触媒化学研究センターとの連携)及び「超高磁場核磁気共鳴装置の周辺整備とそれによる機能性分子開拓」(拠点形成)を予定している。

5-1 分子スケールナノサイエンスセンター

自然科学研究機構分子科学研究所分子スケールナノサイエンスセンター規則第2条に、ナノセンターの設置目的として「センターは、原子・分子レベルでの物質の構造及び機能の解明と制御、新しい機能を備えたナノ構造体の開発及びその電子物性の解明を行い、これらが示す物理的・化学的性質を体系化した新しい科学を展開するとともに、ナノサイエンス研究に必要かつ共通性のある物性機器、研究設備の集中管理を行い、これらを研究所内外の研究者の利用に供し緊密な連携協力の下で共同研究等を推進することを目的とする。」との記載がある。即ち、センターは「ナノサイエンス研究を行う」機能と、「ナノサイエンス研究に必要かつ共通性のある設備等の集中管理・共同研究の推進」という機能が要求されていることになる。

以下の方法でこの二つの機能を果たすことができると考えている。

5-1-1 ナノサイエンス研究の推進について

・研究グループ毎の独自テーマの遂行とセンター内外での共同研究の推進

ナノサイエンスという言葉は非常に広い意味を含んでおり、必ずしもその概念範囲が確立したものではない。ナノサイエンスセンターの研究教育職員は、様々な研究のバックグラウンドを持っており、そうしたバックグラウンドを元にして、自由な発想を堅持しながら、ナノサイエンス上の共通課題に取り組む共同研究を行うことで、分子研独自のナノサイエンスの創出が可能になると考えている。共通課題を探索する仕組みとして、今年度からナノセンターにおいては定期的に研究交流会を行い、各研究グループからの最新の研究成果の紹介とフリーディスカッションを行うことにした。この中で出た共同研究の萌芽を育てる仕組みを作ることが必要となるであろう。

ナノサイエンスセンターを構成する三研究部門は、それぞれ下記のように独自テーマを遂行する。

[分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門]

分子スケール電子素子とは、一つの機能単位が分子レベル(～1 nm 程度)の電子素子の総称である。その実現はナノサイエンスの代表的な課題であり、集合体の性質によらない一つの分子の電気特性を明らかにする、分子や無機ナノ構造体の高次の自己組織化を制御する、パルク電極と有機・無機ナノ構造体の界面の状態を明らかにするなど基礎科学的に重要な課題を含むと同時に、将来の超微細電子素子の基礎を築くという応用面での重要性も併せ持っている。これを実現するためには、合成化学、物性物理、ナノ電子計測、表面科学、計算機科学、数学など幅広い分野の研究者の協力が必要であり、これまでの科学の分野を横断したフロンティア分野であることは明らかである。

本研究部門においては、このような視点の元で次のような具体的課題を、3つの研究グループで行い、分子スケール電子素子という新分野を開拓する。

(1) 高性能の電気特性を示す新規有機分子の開発

集合体レベルでキャリア移動度の高い分子の設計・合成、単分子レベルで高電導性を持つ分子の設計・合成、単分子レベルで光応答性、電界発光能を持つ分子の設計・合成と、それら分子の素子化と物性の研究を行う。また、新規の無機ナノ構造体の開発および、無機・有機ナノ構造体の高次複合系の研究も行う。

(2) 有機分子の電子素子化における課題の解決

有機分子と電極界面の解析、制御の研究。新たなナノレベルの電極作成法の開発、有機・無機ナノ構造体の高次自己組織化の制御などの研究を行う。

(3) 単分子電子計測に必要な分子設計，合成，新規計測手法の開発

単分子計測が容易になる分子の設計，合成，ならびに新規のプロープ顕微鏡の開発などの計測手法の研究を行う。
更にこうした新たな分子系や，新規計測手法を利用した研究所内外の共同研究を進め，新規分野の開拓を行う。

[ナノ触媒・生命分子素子研究部門]

21世紀を迎え，今日の研究支援機器の発達などに伴い，従来は均一触媒と捉えられてきた溶液相における触媒反応特性のより包括的な理解（分子集合体，コロイド種などを含む）や，不均一触媒（固体触媒，ナノ粒子触媒など）の分子レベルでの理解が可能となりつつある。また生体触媒機能に見られる複雑な分子，電子，エネルギーの授受は理想的化学変換のショーケースと捉えることができる。これら生体分子素子の働きを分子レベルで俯瞰しそのシステムをフラスコ反応として取り出す試みは，新世代の触媒システム・化学変換工程の開拓に直結する。これら生体触媒の機能発現に決定的な役割を果たしているのもまた液相における分子レベルのナノ構造である。

触媒化学の鍵を握るのはナノスケールでの構造的情報であり，もう一つは分子，電子，エネルギーの流れに起因する分子のインターラクティブな動的挙動や空間的な不均一性である。すなわち今や触媒化学における均一 - 不均一，分子性 - 固体，などの境界は混然と成りつつあり「ナノ」というキーワードの下で本質的な理解が進みつつある。本研究部門では分子科学者の視点からこれらナノスケールで触媒化学を見つめ，理解し，設計し，その構造 - 機能の新局面を開拓する。

今後は，分子レベルでの化学現象の理解・設計・開発を進めつつ，特に従来の単位工程としての化学変換反応に留まらず，より大きな化学変換システムの開発研究に邁進する。それら化学変換システムを司る触媒などの機能性分子には複合的機能の集積化が求められることから，従来の小分子レベルでの設計を越え，ナノスケールでの機能分子開発が必然的に要求される。

また，機能開発と並行して学際的連携によるナノスケールでの分子挙動に基づく新分野の開拓を目指す。特に本部門で開発する新物質を基盤とすることで，既存物質系の研究では到達しがたい独自の分子科学を創成する。

[ナノ光計測研究部門]

金属ナノ構造物質は，不均一触媒反応においてきわめて重要な役割を果たしており，また，プラズモン共鳴に基づく光電場強度の増強など分光学的，および，光化学の立場からもきわめて興味深い物質である。本研究部門では，金属ナノ構造物質の構造，物性，および，反応性にわたる総合的な研究を展開し，サイズ特異性・サイズ依存性の発現の起源を追求する。

金属ナノ構造物質の調製方法としては，よくコントロールされた金属酸化物表面への真空中での金属蒸着などのドライな環境の下で行うものと，有機単分子膜に保護されたコロイド状の金属ナノ構造物質を溶液中で調製するウェットな方法などを採用する。特に後者の方法では，原子レベルでサイズ制御された金属クラスターを系統的に作り分けが可能であり，この利点を活かした精巧なモデル構造体の構築を目指す。

調製された金属ナノ構造物質の幾何学的構造は，TEM，STM，AFM などにより明らかにすると共に，その電子構造は紫外光電子分光，2光子光電子分光などにより明らかにする。特に，この物質の光非線形効果や光化学において重要と考えられる電子ダイナミックスをフェムト秒時間分解2光子光電子分光によって解明する。

金属ナノ構造物質表面での反応性を明らかにするためには，まず吸着種の同定とその吸着状態を明らかにする必要がある。このために，反射赤外吸収分光や和周波発生分光を行う。特に，後者はピコ秒の時間分解能を有するため，金

属ナノ構造物質表面での反応における中間体の検出に適しており、これらの知見から反応機構の解明、および、反応の制御法の開拓を行う。また、これらの基礎的な知見に基づいて、金属ナノ構造物質と有機分子からなる触媒系を設計・合成し、均一系での触媒反応過程を ATR-FTIR などを用いて in-situ に追跡する。

5-1-2 ナノサイエンス研究に必要かつ共通性のある設備等の集中管理

・新規大型機器導入の努力と、既存機器の効率的維持管理

全国の大学における研究環境を見ると、およそ 1 億円未満の価格帯の中型機器を揃えて全国共同利用に供する必要性は減ってきたと認識している。ナノ支援により導入された 920MHz 核磁気共鳴装置 (NMR) は、主にナノセンターの職員により維持管理されているが、その価格や維持管理に必要な資源の大きさから考えて、全国共同利用として重要な設備である。現在、先導分子科学研究部門 (客員研究部門) の加藤教授、笹川助手を中心として、技術職員 1 名と JEOL からの出向職員 1 名により全国共同利用サービスを行っている。利用者は、全国から来て頂いており、物理時間でほぼ 100% の利用率を誇っている。サービス内容に対する評価も高く、全国で唯一の共同利用高磁場 NMR として重要視されている。今後予想されるマシンタイムの混雑を解消するために、同等の分光器を持つ 600MHz 程度の NMR を補助機として導入予定でいる。また、今後の発展や高度の共同利用体制を維持するために NMR を用いた研究をする教育研究職員を常勤職員として採用することの重要性も認識している。

ESR も、分子研が誇る大型装置のひとつであり、これを用いた研究をする教育研究職員の重点化と装置の更新の必要性も認識している。

これまでに導入されている機器も、共同利用の実績から判断して必要度が高いと思われる機器については、重点的に更新・改良を行うことにした。利用度が低い装置については、修理が困難になった段階で、廃棄もしくは研究グループ等への移管をすることにした。

新規の共用中型～小型装置をどのような基準で導入し、どのような体制で維持管理するかについては、今後更なる議論が必要である。

また、NMR 以外の大型機器の導入についても、次のような設備の導入に努力する。

・ナノファブリケーション設備の導入

既に全国の大学には何カ所かにナノファブリケーション設備が導入されているが、分子研の研究環境に存在することで初めて可能になる研究テーマがある。これが、新たなナノサイエンス研究の芽になることは間違いないと考えている。

・独自装置の開発とその共同利用の可能性の探索

独自装置の開発は研究そのものであり、その成果を共同利用に供することには抵抗があることが多いが、最先端研究において本当に重要な装置・設備は市販していない可能性が高い。そうした装置・設備を共通性の高い予算で作成して、共同利用に供する可能性を検討することも必要であると考えている。

・技術職員の充実、維持管理予算の拡充

高度の設備を最大限に利用するためには、高度の技術的サポートが必要となる。こうした技術支援を行う人材の探索、養成を行い、その技術力にふさわしい処遇を用意することが今後益々重要になる。また、これらの大型機器はその維持経費も大きく、これまでの維持管理予算の範囲ではカバーしきれず、研究経費に食い込みつつある。こうした事態を改善するための予算処置が必要となる。

・明大寺地区のヘリウム液化機について

明大寺地区のヘリウム液化機は，設置後既に17年が経過しており，できるだけ早期の更新が必要である。

他の大学・研究所から見た場合の，共同利用研の魅力は，単に大型設備がそこに有る事ではなく，その設備を最大限に活かして高度の研究を行っている研究者が周辺にいることである。そのためには分子研の独自性を活かした設備の開発・導入と，既存大型設備の性能を最大限に活かせる人事交流の両面が必要であり，そうした観点で運営を行っていきたい。

5-2 極端紫外光研究施設 (UVSOR)

現在，文部科学省の科学技術学術審議会・研究評価部会・次世代放射光源計画評価作業部会及び日本放射光学会の先端的リング型光源計画特別委員会でUVSOR施設を含む既存放射光施設についても検討を行っているところである。このような背景の中，平成18年2月10日 UVSOR 運営委員会で UVSOR の光源加速器およびビームライン利用研究の将来計画について議論した。その結果をホームページ上で公開し，利用者の意見も聴取した。以下はそのまとめである。

5-2-1 光源加速器の将来計画

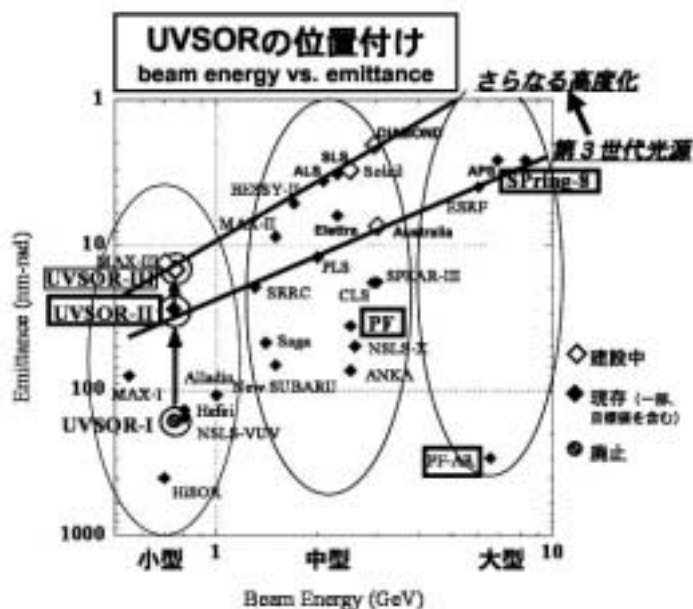
2003年に実施した大規模な光源加速器改造及び挿入光源の更新，それに引き続く高周波加速空洞の増強により UVSOR は UVSOR-II へと生まれ変わり，電子ビームエネルギー 1 GeV 以下のシンクロトロン光源としては今や世界でも最も高輝度（低エミッタンス）となった。このエネルギー領域ではスウェーデンで建設中の MAX-III が UVSOR-II を上回る低エミッタンスとなるものと予想される。今後も世界最高性能の光源性能を維持し，さらに，この高性能を利用研究に最大限活かしていくために，光源加速器群の高度化を継続する。その骨子は

トップアップ運転の実現

ラティスの再改造による高輝度化

加速器の再配置によるアンジュレータの増強

である。これらを実現することで UVSOR-II は次世代光源 UVSOR-III へとステップアップできる。その一方，UVSOR 施設の特徴となっている新しい光発生法に関する開発研究をさらに推し進めていく。以下では各項目について説明する。（図参照）



(1) トップアップ運転の実現

トップアップ運転とは，寿命により時間とともに強度の低下する電子ビームに絶えず電子の補給を続けることでビーム強度を一定に保つものである。ビーム入射による中断なしで利用研究が行えるため研究の効率が向上することはい

うまでもなく、シンクロトロン光強度が一定に保たれることで測定条件が全く変動しないことからデータの質も格段に向上する。

トップアップ運転を実現する上で、ハードウェア面では、電子入射器のフルエネルギー化と放射線遮蔽の増強の2つが必須である。現在、入射器の最大エネルギーは600 MeVであり UVSOR-II に入射後、750 MeV まで加速している。入射器の設計を見直した結果、電磁石電源の増強のみで750 MeV まで最大エネルギーを上げることが可能であるとの見通しを得た。2006年夏に電磁石電源の更新を行う予定で既に作業を開始している。一方の放射線遮蔽の増強についても段階的に進めており、2006年夏に完了する予定である。その後1年程度をかけて、入射路のフルエネルギー化、インタロックシステムの構築、入射効率向上のためのマシンスタディなどを行い、技術的な問題を解決した後、必要な認可を受け、ユーザー運転に導入することになる。

(2) ラティスの再改造による高輝度化

ラティスの再改造の中心は、2003年の高度化改造で手をつけなかった偏向電磁石を更新し、複合機能型とするものである。ビームラインへの影響をなくすために偏向半径を従来と同じ値に保ちながら、磁極形状をテーパ状にすることでビーム収束力を発生する。励磁用電源は現在のものでそのまま使えるように設計する方針である。また、真空ダクトも現状のもので使用できる見通しであるが、一部老朽化が進んでいるものについてはこの機会に更新する。この改造により現在建設中の MAX-III と同等の世界トップクラスの高い電子ビーム輝度が実現できる。また、一部の収束電磁石が不要となるために、これらを撤去することで直線部を更に拡張することができる。

(3) 加速器の再配置によるアンジュレータの増強

拡張された直線部を最大限活用するために、ビーム入射点を B1 - 2 間の短直線部へ移動し、高周波加速空洞など直線部に配置されている機器類の再配置を行い、4本の長直線部全てをアンジュレータ設置可能とする。最終的に4m直線部4本と1.5m短直線部2本にアンジュレータが設置できるようになる。

増強された直線部のうち1本(B8 - B1間)は長いビームラインの建設が難しいことから、新しい光源開発専用として整備する。2基のアンジュレータを直列に配置し、自由電子レーザー、レーザー高調波発生、フェムト秒アンジュレータ光生成、コヒーレントテラヘルツ光生成を実現できるステーションを検討している。B4 - 5間に設置され、放射光利用と光源開発研究に併用されている可変偏光アンジュレータは、BL5Uとして放射光利用専用とする。現在、光クライストロン用となっている磁石配列を純粋なアンジュレータのものに戻すことで輝度及びスペクトル特性が向上する。

(4) 自由電子レーザーの高度化

自由電子レーザーは、電子ビームの高輝度化により波長200 - 300 nmの短波長域で100 mW超の実用レベルの高出力が得られるようになった。波長可変性、偏光可変性、更に放射光との完全同期という特性を活かして、希ガスの二光子励起実験、生体物質への照射実験などに利用されてきた。通常型レーザーと競合する波長域であるが、利用者が必要とする波長を直ちに供給できる円偏光レーザー光源設備として活用される道が、現在、開けつつある。また、蓄積リング自由電子レーザーとしては世界的にも最も安定且つ強力であり、共振器型自由電子レーザーの基礎技術開発を行うための世界的拠点としての役割を担っている。5Uは放射光利用専用にし、1Uに新たな専用ステーションを建設する。

(5) 新しい光発生法の研究推進

2005年度より開始した外部レーザーと電子ビームを併用した光発生法の研究では、わずか数ヶ月の研究期間で、コヒーレントな大強度テラヘルツ光の生成、コヒーレント高調波の生成に成功し、世界的にもトップレベルの研究が行えるようになった。無論、国内では他の追隨を許していない。これはUVSOR-IIのビームエネルギーが低いために可視領域のレーザーと電子ビームを効率よく相互作用させることができること、UVSOR-II加速器群が比較的小型で小回りがきくために実験装置の構築・立上りが極めて短期間で行えることによるところが大きい。UVSOR-II加速器の特長を最大限活かせる研究分野であり、また、将来の超高性能電子加速器を用いた短波長コヒーレント光発生法の基礎となる技術開発も含まれており、今後も1Uに拠点を移すなど強力に推進し、小型リングの位置づけを確固たるものにしていく。

5-2-2 ビームライン利用研究の将来計画

分子科学の大きな柱である光分子科学では、レーザー光源・放射光源の性能を活かし切って先端的研究を推進していくことが目標になっている。現状の放射光科学においては光源そのものの性質が末端のサイエンスを大きく左右する状況を脱していないため、世界的競争の中で絶えず光源と分光器の性能向上が不可欠である。と同時に光源の特性を十分引き出すための測定装置の性能向上も不可欠である。レーザーの短波長化は進んでいるが、VUVから軟X線にかけて分光器を使って自由にエネルギー領域を選択できる特徴は放射光以外にはあり得ない。一方、フェムト秒パルスでコヒーレントな特性を持つ光源はレーザー（直線加速器を使った自由電子レーザーも含む）以外にはあり得ない。このような先端のレーザーの特性から見れば、放射光のパルス特性は前時代的となっており（特にUVSORのように周長が短く電子ビームエネルギーの小さな小型リングでは）、通常の放射光を利用する限り、連続光的に使ったサイエンスに集中した方がよくなってきていると考えられる。

UVSOR-IIへの高度化の前までのUVSOR施設では光量（フラックス）の多さと得られる光の波長の広さを利用する典型的な第2世代光源における研究が中心であった。UVSOR光源加速器のラティスはChasman-Green型といって直線部を多数持てるいわゆる第3世代高輝度（低エミッタンス）光源の基本形になっているが、偏向電磁石からの放射光を専ら利用してきた流れではその特徴を生かし切ってこなかったことになる。世界的な主流が第2世代光源から第3世代光源に切り替わり、直線部に挿入したアンジュレータの高輝度性を利用した高分解能分光研究にシフトしている中で、UVSOR施設でも5年ほど前から光源加速器を本来の第3世代光源として強化し直す高度化の検討を進め、平成14年度にはその予算が認められた。UVSOR-IIに生まれ変わってからは、世界トップクラスの高分解能分光研究に重点を移しており、光源の高輝度性を十分引き出すためのビームライン（分光器と測定装置）の性能向上を進めてところである。

(1) アンジュレータ利用研究

現在、ハードウェア的には4mの長直線部が3カ所、1.5mの短直線部が2カ所に通常のアンジュレータが挿入できる。現在建設中のものを含めると残されるものは1.5mの短直線部が一カ所だけである。

浅いVUV アンジュレータ	BL7U 高分解能固体光電子分光
深いVUV アンジュレータ	BL5U 高分解能固体光電子分光、新しい光発生法の研究（FEL等）
軟X線領域アンジュレータ	BL3U 高分解能光電子・吸収・発光分光
軟X線領域アンジュレータ	BL6U 分光ラインは未設置
未設置直線部	BL4U

BL7U

現在建設中の BL7U は固体物性研究で最も重要なフェルミ端～価電子帯の高分解能光電子分光実験を可能とする国際的に競争力のあるアンジュレータビームラインであり、深いVUV領域のアンジュレータ光を利用できる BL5U とはエネルギー領域が相補的で、6 eV ～ 40 eV をカバーする。第3世代高輝度 VUV・軟X線光源計画が東京大学の事情で頓挫したために、UVSOR で早急に対応すべき研究分野となり、施設利用が前提になっている。ただし、国際的に競争力のあるラインなので、以下のような運用を当面考えている。

- ・立ち上げ後 2 ～ 3 年間は優れた所外研究者とともに協力研究や課題研究を中心に成果を挙げる。
- ・その後、施設利用で利用者を拡大する

BL5U

既存の BL5U は 10 ～ 250 eV の広いエネルギー範囲をカバーし、円・直線偏光が使える施設利用汎用アンジュレータビームラインである。末端の装置とアンジュレータはそのままで現分光器さえ高度化すれば国際的に競争力のあるラインに生まれ変わる。しかし、BL7U を作る以上、BL5U は当面運用を止め、その維持費運用に加え、BL5U の末端の装置を BL7U で転用して使うこと、また、アンジュレータは自由電子レーザー等、光源グループの R&D で利用していくことを当面の方針とした。ところが、その後の見積りで BL7U 用に装置を改造すると予算がかなりかかることが判明した。また、BL7U があったとしても 40 eV ～ 250 eV の領域の固体研究用アンジュレータが国内的にも非常に少なく、分光器を高度化しなくても需要が非常に高いことも確認された。さらに、光源グループによる新しい光発生法の開拓的研究を発展させて実用フェーズまで持っていくには新たに BL1U で展開した方が有利であるとの判断もなされた。以上の結果、BL7U の末端装置は BL5U からの転用ではなく新たに導入することにし、BL5U は現状で利用を続け、BL7U 建設後に予算を獲得して分光器を更新する方針になった。

BL3U

BL3U は SPring-8 では利用が不可能な低い軟X線領域をカバーするもので、世界トップレベルの分子科学研究を展開するために他にない超高分解能装置（クラスター光電子分光装置と軟X線発光分光装置）を開発整備しているものである。所内研究・協力研究用ラインであるが、今後、装置が順調に成果を出せるようになった暁には施設利用的な利用も考えていく。

BL6U、BL4U

BL6U には BL3U と同じタイプで長さが約半分の真空封止軟X線アンジュレータが設置されるが、当面、スリットレス分光器導入のためのビーム位置精密制御に関する R&D のために使う。もともとは R&D のために製作された真空封止アンジュレータ 1 号機として BL7U に設置されていたが、R&D で使う前に所内研究者側の強い要望で照射ライン化されたので、R&D を行う時間がとれなかったものである。1、2 年の R&D 後、具体的な分光器の建設を考える。BL6U 分光器新設と BL5U 分光器更新の優先順位は、今後、放射光科学の動向や UVSOR 利用者の動向を見極めて決める予定である。

BL4U の建設はさらにその先になると考えているが、挿入光源や分光技術の開発研究も見極めながら将来計画を立案する。

(2) 新しい光発生法による利用研究開拓

すでに述べたが、現在、BL5Uを使って行っているいろいろな新しい光発生法研究はBL1Uに最適な挿入光源を建設することで新たな展開を図る。その際、BL1Aは移設することになる。FELについては200 nm以下を実用モードにして、超高分解能光電子分光や価電子帯の表面磁性顕微分光などの開拓研究を行う。また、大強度コヒーレントテラヘルツ光による伝導電子励起分光も実現させる。高調波発生やフェムト秒パルス発生などに対応する利用研究も考えていく。

(3) 偏向電磁石ビームライン利用研究

アンジュレータラインの強化によりアンジュレータで行うのと同じ種類の実験を偏向電磁石ラインで行う意義はなくなった。その一方で高輝度化によって、ビームの広がりが小さくなったため偏向電磁石からの放射光を水平分散200 mrad以上でも非常に精度良く集光することが可能になっている。通称マジックミラーと呼ばれるミラーで集光する。そのことを生かせば偏向電磁石ビームラインであっても以前よりはるかに高フラックスで高分解な実験ができる。今後は、水平分散を小分けにしてビームラインをむやみに増設することはせずに、マジックミラーを導入して、8カ所の偏向電磁石にはそれぞれ分光器を1基ずつ設置する方針にしている。ビームラインの名前の付け方もアンジュレータラインはU、偏向電磁石ラインはBとして、統一を図る。直線部で挿入光源を入れていないところではUの代わりにAの名前を使うラインが若干、残っているが、今後、挿入光源の導入計画に合わせて廃止か空いたBポートに移設するかを考える。この方針によると8カ所の直線部と8カ所の偏向電磁石部に最大16基の分光器が入ることになる。現在、ビームラインは13本（施設利用9本、所内研究・協力研究用4本）まで絞り込まれている。

BL6B

マジックミラーを使った赤外・テラヘルツ領域の施設利用分光ラインである。放射光によるテラヘルツ分光ラインとしては世界最強であり、高輝度性を利用した顕微分光などイメージング技術も併用して利用研究を拡大していく。

BL1B、BL7B

VUVの浅い領域をカバーする施設利用分光ラインである。同じエネルギー範囲のアンジュレータラインBL7Uは高輝度を要求する高分解能光電子分光を中心にしているが、BL1B、BL7Bは輝度を要求しない光吸収・発光分光を中心にしている。VUVレーザー固体素子の評価、物性基礎データ測定、材料評価にルーチン的に利用している研究者が多い。可視・紫外から真空紫外まで基本的な光学的性質を押さえるのに不可欠な汎用ラインとして重要であり、他施設は力を入れていないこともあり、UVSORで今後も維持の必要がある。

BL5B、BL8B2、BL2B

これらの分光ラインではVUVから浅い軟X線がカバーされる。例えば、炭素で考えると、価電子準位と内殻電子準位のギャップに当たるエネルギー領域であり、価電子のイオン化や高い励起を起こす。同じエネルギー範囲の施設利用アンジュレータラインとしてはBL5Uがある。BL5Uは高分解能光電子分光中心に利用が図られているのに対し、施設利用ラインのBL5BとBL8B2ではそれぞれ特徴的な利用がなされている。BL5Bは機器校正用装置が常設されているユニークなラインであり、反射率の測定などが行われている。この種の実験では高いエネルギー分解能を必要としないので、分光器はかなり古くなってはいるが、当面、そのまま維持することを考えている。BL8B2では放射線損傷

や帯電，真空汚染などの可能性があって取り扱いの難しい有機薄膜・界面の研究を中心に精力的に光電子分光実験を行っている。分光器は建設後20年経っているが，これまで光学素子の再コート以外の手は入れずに，末端の装置の整備を行ってきた。分子科学の一つの重要分野を支えている他にない装置なので，施設利用の需要はいつも100%を越えている。施設としては，分光器の老朽化が深刻になる前に再構築について考えておく必要がある。また，BL2Bは比較的新しい所内研究・協力研究用ラインであり，現在，気相分子を対象とした研究が行われている。UVSORが得意とするこのエネルギー領域で多様な利用研究に対応するためには，将来的にBL2Bの施設利用ラインへの転用も視野に入れておく必要があろう。

BL8B1、BL4B

偏向電磁石部で炭素～酸素の内殻電子準位をカバーできる軟X線ビームラインは2基ある。同じエネルギー範囲のアンジュレータラインとしてはBL3Uがある。施設利用ラインBL8B1は主に固体の吸収分光に利用されているが，分光器が老朽化しており利用者の増加は望めない。BL8B1とBL8B2はブランチを作らない方針もあり再構築を考え始める必要がある。一方，BL4Bは比較的新しく建設された所内研究・協力研究用ラインであり，現在，活発な協力研究・民間利用によって気相分子，表面磁性，生体関連分子，半導体材料，触媒等に関する研究が行われている。将来的には施設利用ラインへの転用も視野に入れているが，BL4Bは現在100%の利用率(需要は150%程度ある)なので，BL8B1をBL4Bに切り替えるだけでは済まない。化学にとって重要なこのエネルギー領域で多様な利用研究に対応するためには，他施設との競争力を見極めながら新たに偏向電磁石ラインあるいはアンジュレータライン(BL6U)の建設も検討する必要がある。

BL1A

UVSORで最も高エネルギーの軟X線を供給する二結晶分光器の施設利用分光ラインである。UVSORのような低エネルギー施設ではあまり得意とするエネルギー領域ではなく現在は1基だけになった。他施設では使い勝手がよくないためか，現在，固体材料や触媒関係の比較的手の研究者が固体の吸収分光を中心に利用している。今後も汎用ラインとしての整備が必要であろう。ただし，UVSORの臨界波長よりも短波長側は光強度の点で非常に不利であり，BL1Aではシグナル強度を稼ぐために試料を塗布した電子増倍管を使った測定が行われている。このような測定方法は改善の余地がある。光源の方で強度を稼ぐにはマジックミラーを用いてフラックスを上げるようにするか，挿入光源(BL4Uで対応可能)を利用するかが考えられるが，一方で分光結晶の放射線損傷が大きな問題になる(過去にUVSORでのウィグラー利用で経験済み)。回折格子の利用も検討する必要がある。光源グループのBL1U建設計画に合わせて移設か再構築かを考える。

5-3 分子制御レーザー開発研究センター

5-3-1 分子制御レーザー開発研究センターの現状と今後

分子制御レーザー開発研究センターは、旧機器センターからの改組拡充によって平成9年4月に設立された。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、特殊波長レーザー開発研究部の3研究部において所内課題研究及び調査研究を行う他、多数の共同利用機器、小型貸出機器を保有、維持管理し、利用者の便に供している。

各研究部には助教授及び助手が各1名配置され、またセンター共通の技術支援には技術課の3名の技術職員が当たっている。放射光同期レーザー開発研究部は猿倉助教授が担当し、分子研UVSORとの同期実験に向けた基礎的レーザー光学技術の開発の他、大出力紫外パルスレーザーやコヒーレントテラヘルツ光源の開発などの成果を挙げており、これらの成果をもとに平成18年1月から大阪大学レーザー・エネルギー学研究センターに教授として転出した。特殊波長レーザー開発研究部は平等助教授が担当し、分子科学の新たな展開を可能とする波長可変な特殊波長（特に赤外域）レーザーの開発の他、マイクロチップレーザー光源等の開発を行っており、産業界からも注目される成果を挙げている。分子位相制御レーザー開発研究部は、分子制御のための時間的特性を制御したレーザーの開発と反応制御実験を目的として設置されたが、佐藤助教授が平成12年に転出した後、現在欠員となっている。

このように、3つのうち2研究部の担当者が転出したことは、本センターの活動の低下を余儀なくするものであるが、今後の本センターのあり方を根本的に見直す時機が到来したともいえる。今後のあり方については、本センターの外部評価を昨年度行い、当該センター運営委員会で議論を行った。その結果、形骸化した現行の課題研究を見直し、現研究部にとらわれず、研究所内の光科学関連研究者を結集した新たなセンター組織作りを検討すべきであるとの強い提案があった。

これを受けて、当該センターの専任教員とレーザーを中心的に用いて研究を行っている研究系の教員、特に、エクストリームフォトリクス事業に参画している研究者を交えた検討会を開催し、当該センターの今後のあり方を議論した。その結果、センター専任教員から分子研で開発された新物質を用いることも含めたレーザー開発に特化したセンター案も出されたが、光源のみを開発するセンターではなく、分子科学における広い意味での光科学研究の新しい展開の拠点としての研究センターとすべきであるとの意見が多数を占めた。

現在、分子研全体の研究系・施設の見直しが進んでおり、研究の柱の一つとして「光分子科学領域」を設置することが検討されている。この領域にはレーザーを用いた分子科学研究者が当然参画し、これらの研究者群が当該領域において中心的な役割を果たすグループの一つとして活動することが期待されている。したがって、上述した光分子科学というより広い分野の研究を支え、また、それを発展させるための中核となるセンターとして当該センターをとらえることは、時宜にかなったものといえよう。今後、研究系・施設の組織見直しの進展にあわせてさらに具体的なセンターのあり方を検討する予定である。

5-4 装置開発室

5-4-1 施設利用

装置開発室は、平成17年度後期より所外からも実験装置の開発・製作を施設利用として受けることとし、17年12月末までに9件の利用申請を受け付けた。申請の内容はいずれも分子科学の面白い問題に関係するものであり装置開発室職員の技術向上にはプラスであった。また、基礎生物研究所などからも申請を受け、自然科学研究機構内にも貢献する実績を積みつつある。施設利用として所外からの依頼業務を受ける体制に変更する事にもなって装置開発室の運営委員会を新たに設置した。これまでの運営委員会は各研究系および施設から選出された所内委員で行われていたが、所外の研究者および技術者を含めた委員会とし、運営委員会規定も新たに制定した。

5-4-2 技術職員

装置開発室の担当する領域は機械工作、電子回路工作、ガラス工作の三つがあり、依頼業務の7～8割を機械工作が占めている。装置開発室は分子科学の新展開に必要な新しい装置を開発すると同時に、日常の実験に必要な機器類を迅速に製作するという二つの役割をもっている。これらの業務は先の割合ように機械工作に集中し、特に迅速性に対して不満の声もある。技術職員数の配置は機械7(短時間契約職員2含む)、電子回路3、ガラス1とした配置となっており、人員数の比としては妥当であるが個々の技術職員の技術力、業務に対するモチベーションに差があることが問題点の一つになっている。事例として、迅速な処理業務が求められるあまり、技術力や処理能力のある一部の中堅職員に様々な業務が集中し、研究支援の貢献度が高いにもかかわらず、旧公務員制度の範囲でしか評価されないため「やる気」を失ってしまう事があった。

今後、所内の支援業務や施設利用をさらに充実させて行くためにも、上記の問題点に対策していく必要がある。

5-4-3 基盤技術

装置開発室はUVSOR施設の創設とともに超高真空技術や精密駆動・制御を手がけてきた事で、これらの製作技術は装置開発室の基盤技術として持つことができた。しかし、この分野は現在、民間の方がかなり成熟し一般化してきたため、よほど特殊な物でない限り装置開発室でなければできない技術としての位置づけが薄れている。そこで研究系の要請に応えられる新たな基盤技術を確立していく必要性があった。現在、機械グループはマイクロガラス流路、PDMS用の微細構造金型、超精密スリットなどの開発として「マイクロ加工技術」、電子回路グループはバイオ関連などの研究をターゲットとした小型化するアナログ・デジタル混在の「大規模集積回路設計技術」を新たな基盤技術として進めている。

5-4-4 設備

分子研創設時の機械設備がいまだ現役で使用されているものがあるが、一部には老朽化も進んだ物もある。また、新技術に対応していくためにも最新の機器を導入する設備更新は重要な課題である。平成13年度から精密ワイヤー放電加工機を導入しその後、測定顕微鏡、CNC旋盤が設備され16年度末には小型の走査電子顕微鏡が導入された。17年度末にも微細加工における評価能力を強化する測定設備等が所長の配慮で設置が予定されている。

5-4-5 外部運営委員からの意見

前述した項目 1 ～ 3 に関して17年度に行った装置開発室運営委員会での議論を総括して、外部委員より将来計画をふまえた意見をまとめて頂いたので以下に記載する。

[外部委員 A]

1. 組織の意義

委員長のご意見と同じく、独創的な研究を行うためには、短期間で実験装置を作ることのできるサポート体制がぜひとも必要である。外部委員としても、上記の観点から、ぜひこの組織が発展することを希望する。

問題点の整理

委員会で指摘された問題点：評価を公平に行うことが難しく、待遇が働きを反映していない。このためよくできる人がやる気をなくしやすい。

問題点の解決のために

上記はどの大学においても共通する問題である。まず、楽しく仕事ができるよう、システムを改善する必要がある。楽しければやる気を持って仕事に取り組むことができる。また、働きに対し評価を行い、待遇に反映できるようにすることが重要であろう。

できるだけ興味の持てる仕事を受けられるよう、事前協議を綿密に行う。装置開発室の力が発揮できる仕事を優先し、メーカーでできる仕事の優先度を落とす。このためには良いコーディネーターが必要であり、その能力開発が必要。能力評価、仕事内容・時間などの評価を通じて、待遇を決める。資格取得（情報処理技術者など）を奨励して、評価の一つとする。

作成した装置を利用した研究の成果を発表する際には謝辞をつけるよう、依頼を受けるときに取り決める。謝辞の数を評価に使うことができ、また装置開発室の広報にもなる。

外部の仕事を請ける場合、秘密保持協定（今までに蓄積したノウハウの拡散を防ぐ）を結び、特許取得も奨励する。また内部・外部を問わず、作成した装置を利用した研究の成果を発表する際には謝辞をつけるよう取り決め、評価・広報に役立てる。

外部資金導入も積極的に行う。外部資金導入を進めるために、共同利用研究施設としての考え方の整理が必要。行うなら、資金受け入れのための規則整備を行う。会社を作って外部からの委託に対応することも検討する価値があるろう。

外部資金導入額も評価に利用できる。

人件費固定、年次削減というネガティブ思考ではなく、外部資金獲得、特許獲得などを通じ、組織が発展できるように、外部資金導入を進めるべき。

岡崎近辺には自動車産業などで熟練した技術者が多いので、特にリタイアした技術者に活躍していただくことも、組織を発展させるために考えていただきたい。これを行うためにも別会社を作ったほうがやりやすいのではないかな？

しかし技官の人は兼業などが制度上難しいので、外部の仕事を受け、働きに応じて見返りを受けられる制度を作ることができるかどうか、要検討。

[外部委員 B]

装置開発室運営に関する意見を述べたいと思いますが、その前に私どもの職場の現状について報告いたします。技術部は5課20係47名より構成されています。部の仕事は、大型ヘリカル装置(LHD)に關しての仕事が中心となり、建設、周辺装置製作、運転業務を研究系と分担して行っています。装置が大型なために、課や係でグループを組んで業務を行うことが多く、部課長制が機能しております。例えば研究者から要望が出された装置をLHDに取り付ける場合には、その装置が実際に取り付け可能かどうかを装置技術課が周りにある装置との空間的な干渉や構造などのチェックを行い問題が無ければ、研究者と共に取り付け作業を行いますが、装置が大きいために30tクレーンを使用し、免許保持者が運転台で操作し、玉がけ者が補助者と協力して装置に玉がけして運転者に無線で操作を指示します。それと作業の安全を監視する監視者が付きます。このように作業が数名の連携で行われます。

LHD建設時にはプラズマ点火の時期が決まっていたので、約10年間にわたり年度毎の工程表を作成し、技術部でも毎月日程の管理を行い業務に遅れがある場合には、人の配置換えや増員するなどして業務の遅れがないよう、工程管理はかなり厳しくなされて来ました。運転期に入ってもLHD実験成果は科学技術総合会議(首相が議長)で審査され4段階評価を受けて、その成果結果で予算に影響が出ますので、実験期間中は実験が出来る状態に装置を保つことは技術部として最大目標とし、真空漏れや液化機故障時は装置技術課を中心にチームを組み、休日・深夜を問わず復旧に努めています。

加熱技術課は大電力加熱装置を、計測技術課は大型プラズマ計測装置を、また制御技術課は中央制御装置や超伝導コイルに流す電流制御について建設・運転などを担当しています。また定まった運転については技術職員とほぼ同数の運転員が従事しています。

分子研装置開発室の業務は、私どもの職場の技術部製作技術課の業務が似ていると思います。製作技術課は資材管理(定員1)機械加工(定員2名)と電子回路(定員1、支援職員1)の3部門があります。15年まではガラス工作担当者が居たのですが、定員削減もあり業務量を考慮し人員の採用を止めました。装置開発室とは工作部門で今までも交流があり、特に相互に自分のところに無い工作機械について相互利用しようとしてきました。

私どもの研究機関の研究者は分子研に比べて研究者の異動が少なく、自分で装置の開発を行うことが多いために仕事の量はかなり多くあります。特に実験開始前の7~9月は業務量が増加して超過勤務時間も多くなりますので部品の外注化を進めています。

装置開発室の活性化についてですが、技術課組織全体とも絡んだ問題となるとと思います。独立した組織である以上は、人事や予算等の執行について権限が必要だと思います。私どもの職場では部課長制が業務の性格上機能しており上司が部下の仕事の評価が出来ますので、その評価に基づいた人事を行っています。また技術部予算を請求し研修や運転業務に必要な物品の購入にあてています。予算規模としては装置開発室と同じ程度ですが、工作機械などの購入に対しては別途予算請求をしています。

・評価と昇進

技術職員が非常に興味のある技術課題を持ち自主的に研究者と連携を持ちながら、研究に役立つ技術業務を進めて行くのが理想的ですが現実にはそうは行かないと思います。その場合に技術職員にどの様にやる気を持たせるかが問題となってきます。上司が部下の仕事を見ていて評価し、その評価により昇進していく仕組みをつくることですが、評価により昇進、昇格を決める場合には年功序列を崩さざるを得ないと思います。

・マネジメント

製作する装置が大きくなると一分野の技術，一人の技術者のみでは対応が出来なくなります。そうした場合にポストの上の者は他分野の技術と複数人の技術職員を取り纏めて業務を行うことになりますが，全体の技術を知っていて適切に業務を振り分けて工程を管理できる人材の育成も大切なことになります。

・超過勤務

また業務が増えた場合の超過勤務手当での支払いですが，民間同様，業務報告があるいは超過勤務命令書にもとづいて支払われるべきだと思います。私どもの研究機関では技術部だけでなく管理部も実質超過勤務にもとづいて超過勤務手当を支払っております。これは法人化にあたり，技術部の会議の中で方針を出して実行したものです。私どもの研究機関ではプラズマ実験期間中は朝 8 時 35 分の実験会議から始まって実験終了は 18 時 45 分で，その後超伝導コイルの電流立ち下げや装置の点検，コンディショニングなど 22 時になるので技術部として 8 時間の 3 つの勤務時間パターンをつくり交代勤務制を実施しています。

これらの対応は装置開発室だけで実行した場合に合意が得られるかという問題があるので，課全体で考えなければならない課題だと思います。

・研修

技術力向上のためには技術研修が不可欠であり，公的機関・民間で実施されている研修に参加する機会を多くもつべきと考えます。また他機関の技術職員で技術を持っている人がいれば技術交流できるようにすべきと思います。装置開発室は過去に名大や北陸先端大学と人事交流を行ってきた経験を今後も活かすようにしたら良いと思います。

以上装置技術室についての提案を申し上げましたが，あまりまとまりのない提案となってしまう申し訳ありません。

[外部委員 C]

分子科学研究所装置開発室は，独創的な技術を修得するため，外部からの業務も積極的に受け入れ，分子研内部の要望に対しても，良く貢献されていると思います。また，研究者への技術支援の他に，技術研究会の開催，技術開発研究費の獲得，アニュアルレポートの作成，他機関との人事交流，共同開発等全国の同様な組織の中では非常にアクティビティの高い組織であります。自然科学の研究を遂行する上で，今後とも装置開発室の果たす役割は極めて重要であります。

(今後の提案)

- ・分子科学研究所の研究の質が常に世界最先端であり，そのような研究者からの技術的要望があり続けることが重要である。装置の設計・製作の内製と外注の住み分けをどのようにするか考え，民間になく装置開発室で固有技術を確認することが将来を考える上で必要である。装置開発室で技術力を高めた技官を逆に数年単位で個別研究室に派遣してより技術を高度化する制度を作ってもよいのでは
- ・装置開発室においては，設計・開発と加工の分業制が徹底しているので加工技術や真空・極低温技術等の未熟なスタッフが設計や開発を担当することになり，技術コンサルタント業務や技術開発業務をさらに向上させるために，内部でのスタッフの教育システムを再検討する必要がある。設計・開発スタッフにおいても高度な技能を持つ職員(現在の機械工作担当の非常勤職員)のもとで技術教育を受ける等のシステムも必要である。研究・教育内容の急速な変化に対し，スタッフの適正な再配置等も必要である。技官の技術力を無駄にしないためにも機構内の交流・移動等配置換えが容易になる仕組みも必要である。

(外部の依頼業務について)

- ・ 外部に装置開発室の技術を提供する時は , その論文等においては , その技術の依存度にもよるが , 連名を基本とすべきである。
- ・ 装置開発室の技術を会社等に自由に流出しないようにある程度の装置設計の権利を保持するべきである

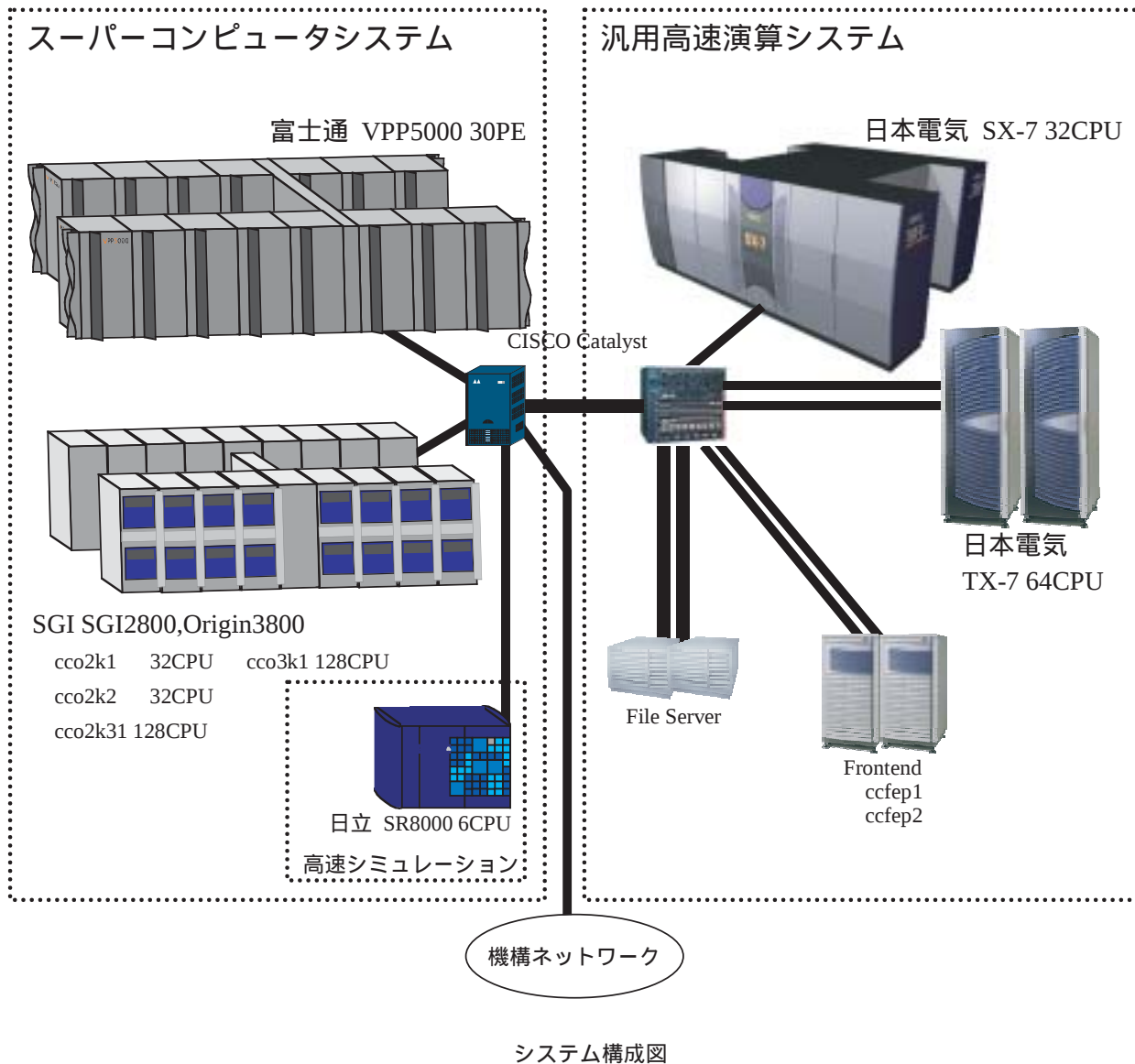
(業務の把握について)

- ・ 業務報告において , 週単位でどの業務に何時間を費やしたかを報告するシステムにして , 個人の業務が外部からきちんと見えるようにすること。その業務記録を個人や組織としての業績に活用するべきである。
- ・ 各スタッフに装置開発室の将来計画案を作成してもらうこと。また , 1 年間の技術の目標を作成してもらい , 1 年 (半年) ごとにその達成度を評価し , 教育システム等を検討すべきである。
- ・ 装置開発部門は利益を生み出すことが本来の業務ではないが , 今後は企業のような利益を求める概念も必要であり , 年間どの程度の成果を個人や組織が生み出しているのかの試算も必要である。それによって組織や個人の将来計画に活用すべきである。
- ・ 法人化とともに , 装置開発室でも能力評価が取り入れられる具体的な方策を検討するべきである。

上記のように外部委員を含めた運営委員会の意見等から現在までの運営における課題が明確になっており , 特に技術職員の問題は装置開発室の今後のあり方にも大きく影響する問題であるため , それらに対応する対策を今後行っていく必要がある。

5-5 計算科学研究センター

2006年1月現在の計算機システムの概要を下図に示す。図の左側は2000年3月に導入されたスーパーコンピュータシステムで、図の右側は2003年3月に更新されて山手地区に設置された汎用高速演算システムである。



スーパーコンピュータシステムは、富士通製 VPP5000 と SGI 製 Origin から構成されている。VPP5000 は1CPU 当たりの最高演算性能が 9.6 Gflops のベクトル演算装置30台から構成され、各 CPU に 8 ～ 16 GB の主記憶装置をもつベクトル並列計算機である。一方、SGI Origin は1CPU 当たりの最高演算性能が 0.6 ～ 0.8 Gflops のスカラー演算装置 320CPU から構成され、1CPU 当たり 1 GB の主記憶をそれぞれの CPU から共有メモリとしてアクセスが可能な分散共有方式の超並列計算機である。VPP5000 では高速なベクトル演算能力を活かした大型ジョブの逐次演算処理や 8 台以上のベクトル演算装置を使った大規模なベクトル並列演算が可能である。Origin2800/3800はNon Uniform Memory Access (NUMA) 方式と呼ばれる論理的な共有メモリ機構を有する。NUMA は主記憶装置が各 CPU に分散して配置されているため CPU から主記憶へのアクセス速度が非等価ではあるが、利用者プログラムから大容量のメモリを容易に利用す

ることができるので、大規模な並列ジョブの実行が可能となる。高速シミュレーションシステムの日立製 SR8000 は、主に機構内における利用を目的として運用されている。

一方、2003年3月に導入された汎用高速演算システムは、NEC 製 SX-7 で構成される主システムと TX-7 で構成される副システムとから成る。NEC SX-7 は1CPU あたり 8.8 Gflops の最高演算能力を持ち、256 GB の共有メモリに結合された 32CPU の演算装置から構成され、総合演算性能 282.5 Gflops の共有メモリ型ベクトル計算機である。また、TX-7 は4 GB のメモリを持ち最大 4 Gflops の演算性能を有する CPU を32台搭載したノードを基本単位として構成されている。本システムは2 ノードから成り、合わせて 64CPU、256 GB、256 Gflops の総合性能を有する分散メモリ型スカラー計算機である。このうち主システムは高速演算、大容量メモリを活用した大規模分子科学計算に用いられ、また副システムは分子科学計算に加え、ホモロジー検索を主としたバイオサイエンス分野での利用に供されている。

2005年度も132の研究グループの総数514名にもおよぶ全国の利用者に共同利用施設として広くサービスを提供し、計算科学分野の中核的拠点センターとしての役割を果たしている。計算科学研究センターには、超高速コンピュータ網形成プロジェクト (NAREGI) のナノサイエンス実証研究のために、2004年3月から総理論演算能力が 10 Tflops の大型計算機システムが導入されている。アプリケーション開発拠点としての研究推進はもとより、事務局と計算機システムの運用という重要な役割を果たしている。

高速パソコンクラスターの最近の普及によりセンターへの期待と役割がこれまでとは大きく変化してきている。これに答えるために、通常の研究室レベルでは不可能な大規模計算を実行できる計算環境を提供するために、2006年6月にスーパーコンピュータを更新する。

2006年7月より運用を開始する新システム「超高速分子シミュレータ」は、これまでの共同利用のスーパーコンピュータシステム(富士通 VPP5000, SGI2800/Origin3800)の後継機である。新システムは、量子化学、分子シミュレーション、固体電子論、反応動力学などの共同利用の多様な計算要求に応えうるための汎用性があるばかりでなく、ユーザーサイドのPCクラスターで実行が不可能な大規模計算を実行できる性能がある。新システムは富士通のPrimeQuestとSGIのAltix 4700から構成される共有メモリ型スカラー計算機で、両サブシステムは同一体系のCPU(Intel Itanium2)およびOS(Linux 2.6)をもとに、バイナリ互換性を保って一体的に運用される。システム全体として総演算性能8 Tflopsで総メモリ容量 10 TByte 超である。

PrimeQuest サブシステムは、64CPU コア /256 GB からなる SMP ノード10台で構成される。演算ノード間は 16 GB/s のバンド幅で相互接続され、大規模な分子動力学計算などノード間をまたがる並列ジョブを高速で実行することができる。Altix 4700 サブシステムは4 ノード構成からなり、各ノードは 160CPU コア / 2,064 GB を有する NUMA 型の共有メモリシステムである。さらに本サブシステムには、磁気ディスク装置 SGI TP9700 がジョブ作業領域として提供され、実効容量 104 TB および総理論読み出し性能 12 GB/s を有するディスク I/O を実現する。本サブシステムは大容量(最大 2 TB)の共有メモリおよび超高速ディスク I/O に特徴をもち、大規模で高精度な量子化学計算を可能とする。

新システムの導入にあたって運用面でも、世界をリードする計算科学研究を本センターから発信していくことができるよう、大規模ユーザのために新たに施設利用Sを設定する。審査により、年間3 - 4件程度の利用グループに本システムを優先的に使用していただき、従来の共同利用の枠を超えた超大規模計算の環境を提供する。また、シンポジウムや研究会を開催して人的交流を促進すると同時に、内外の研究者の支援のもとに若手研究者や大学院生の育成のための教育プログラムを進めて、計算科学の裾野を拡げていく。ナショナルセンターとして大きく機能していくために、国内に加えて多国間共同研究など国外の研究グループ(特にアジア地域の研究者)との国際共同研究支援のあり方を検討していく。これらの実行にはセンターの人的パワーの補強が強く求められている。

5-6 系と施設の在り方等の検討

分子研の今後の進むべき方向とその受け皿となる研究体制（特に研究系及び施設の在り方）を探るために系・施設の在り方等検討委員会が設置された。委員会メンバーは以下の8人である。

青野重利（岡崎統合バイオサイエンスセンター教授、関連領域研究系教授）

魚住泰広（分子スケールナノサイエンスセンター教授）

大森賢治（電子構造研究系教授）

川口博之（錯体化学実験施設助教授）

小杉信博（極端紫外光科学研究系教授、極端紫外光研究施設長、研究総主幹、委員会まとめ役）

中村敏和（分子集団研究系助教授）

松本吉泰（分子スケールナノサイエンスセンター教授、分子制御レーザー開発研究センター長、人事部会長）

森田明弘（計算分子科学研究系助教授、計算科学研究センター助教授）

4月15日（金）、5月27日（金）にそれぞれ2時間強の時間を掛けて、各事項について現状と問題点を洗い出し、それらの改善に対する基本方針について議論した。その内容を報告書（案）にまとめ、6月17日（金）に所長参加のもと、さらに3時間以上かけて意見交換し、各事項について現状、基本提案、参考意見をまとめた。ここで報告するのは2005年6月30日時点のものである。ただし、参考意見部分は、その後、所長が中心になって主幹施設長会議で他の可能性を含めて具体化への議論を進めている内容を反映していないので、ここでは削除した。今後、教授会議等でも議論を行い、その結果、改組の必要が認められれば、平成19年度から実施に移す予定である。

5-6-1 研究系の在り方

(1) 現状

研究系については創設来、それぞれ長い歴史があり、主幹教授を中心に日本に於ける各研究分野を代表する研究が推進されてきたが、今や、研究分野の広がりや複合化、複雑化によって、教授あるいは助教授の研究グループを単位として4グループ程度でひとつの研究分野を構成できる状況ではなくなった。所内での研究系間の交流が盛んであれば、現状の組織でも問題はないが、実際のところは研究系間の交流は限定的でしかない。

以前は、研究所の重要事項については研究系が中心になって議論をまとめてきたが、その後、研究グループ数の増加や研究施設の研究者の増加とともに、議論の単位に施設を含める必要が出てきた。主幹会議も主幹施設長会議となった。その結果、研究所としての意見の集約がなかなか難しくなっている。その一方で、岡崎3研究所の連携によって発足した岡崎統合バイオサイエンスセンターに所属する分子研関係の研究グループは、分子研では分子構造、関連、ナノセンターに分散して併任しており、統合バイオ所属の分子研関係の研究グループの意見をボトムアップ的に集約し、それを分子研として議論することが困難な構図が続いている。

法人化後いろいろな雑務を行うことが多くなっている研究主幹は年功序列的に決められており、場合によっては自分の所属する系とは異なる系の研究主幹を併任することさえある。また、法人化の影響により緊急事項や重要事項については、主幹施設長会議とは別に、機動性のある執行部的な組織（所長、研究総主幹（評価担当）、研究連携担当、人事・広報担当）で議論することが多くなっており（以下では執行部と呼ぶ）、系を単位としたボトムアップ的な運営が必ずしも行われない場面が増えている。

(2) 基本提案

以上の現状の問題点を改善するために以下のような基本的な方向性を本委員会では提案する。

現在の研究系は廃止する。分子科学を広い視点で捉えることができるように分子研全体で研究領域（従来と違う意味での“研究系”である）を3～4に大きくまとめることが妥当であるとする。明大寺、山手両地区で研究領域を分けるのではなく、両地区にまたがる研究領域を構成することで、日頃の交流を増やすことも盛り込む。

これによって、研究主幹（研究領域主幹）は3～4人と少なくなるが、所長とともに研究所の重要事項を検討する組織は現在の執行部の位置づけを考えれば3～4人の研究主幹だけで構成しても問題ないであろう。むしろ、現執行部はトップダウン的運営であるのに対し、新しい執行部ではそれぞれの研究領域（“研究系”）を実際、とりまとめている研究主幹が構成するので、自動的にボトムアップ的要素も盛り込むことが出来る。このような執行部構成にした場合に、研究主幹に加えて、研究総主幹あるいは副所長が必要かどうかは、別途、その選考方法と位置づけから考え直す必要がある（本委員会ではこの部分については議論せず）。

研究領域（“研究系”）を構成する研究部門については、現在、1グループから3グループで1研究部門を構成しているところを、できるだけ3グループ程度で1研究部門を構成するようにする。1研究部門に所属する教授グループ、助教授グループの数は特に固定せず、必要に応じて教授1名＋助教授2名、教授2名＋助教授1名、教授3の構成が選択できることとする。なお、1研究部門の基本は3グループとして、所長の判断で1グループを追加することも可能とする。ただし、その部門で1グループが転出あるいは停年で解散したときは所長に1グループを返還し、基本の3グループに戻すこととする。（所長の判断で、引き続き、1グループ追加されることも可能）

各研究部門には部門長を置くようにする。研究所の雑務は研究主幹レベルではなく、部門長が分担するのがよいであろう。施設長も部門長と同レベルに置くことになる。今の主幹施設長会議は部門長・施設長会議となる。運営会議メンバーを構成する教授は、研究主幹以外は、教授会議で人事選考部会委員を選んでいる手順に従って部門長・施設長から適任者を選ぶのがよいであろう。

統合バイオ4グループは所内に対応研究部門（仮称：生命分子科学研究部門）を設置し、計算分子科学研究系（研究部門）と同じような位置づけとする。

5-6-2 施設の在り方

(1) 現状

この30年を振り返ると、施設については研究系よりも組織の変化が激しい。特に後半の15年の間に本質的なところでの変化が起きている。分子研設立当初は研究者と技術者が同じ施設に属して共同利用業務に貢献してきたが、その後、技術者だけで対応できる施設からは研究者がいなくなった。長期間、研究者が内部にいない状況が続くことで、研究系との関係が希薄になって施設設備の更新や補充も滞る事態になった。一方、所外からの共同利用業務の負担の少ない施設には研究系と変わらない研究グループ構成が採られるようになり、施設の共通装置の強化よりも、各研究グループの強化に重きが置かれるようになった結果、共通装置の維持更新の予算計画が利用する研究系（施設外）が関われない形で遅延してしまうケースや、研究系（施設外）の研究者が共通装置の維持等に関わらざるを得ないケース

が生じている。後者の方式は所外利用者が以前の支援を施設にお願いしようにも担当者がわからなくなるばかりでなく、研究者の異動とともに所内に担当者が誰もいない事態にもなる。さらに、共同利用に重要な中型機器を更新しようにも責任を持って対応する担当部署が施設に存在しない状況にもなりかねない。

(2) 基本提案

以上の現状の問題点を改善するために以下のような基本的な方向性を本委員会では提案する。

共同利用機関としては施設利用と協力研究・課題研究の2本建てを堅持し、どちらか一方に偏らないバランスの取れた運営が望まれる。施設利用は施設の高度な装置や高度な技術力を所内外に公開して分子科学研究の推進に貢献するものである。施設利用者コミュニティや施設運営委員会を通じて所外の声を反映させながら、研究所として施設の強化を図っていく必要がある。一方、協力研究・課題研究は各研究部門の研究者（施設に研究者を置く場合は施設の研究者も含む）が主導的に所外の研究者と連携をとって必要に応じて関連施設も活用しながら対等に研究するものである。

法人化後、新しい概念として出てきた研究機関同士の連携は、基本的には協力研究・課題研究的な考え方で関連研究領域（“研究系”）が責任を持って取り組むものである。その際、個人ベースの協力研究・課題研究と違う側面が大きいため、関連研究領域においては、できる限り、共通の研究資産である関連施設の高度な装置や高度な技術力を強化・促進するようにし、長期的には施設利用を含めて広く分子科学コミュニティや周辺分野（連携分野）で優れた成果を出せるように工夫するものとする。

新しい研究領域（“研究系”）は、研究部門と関連施設から構成されている。同じ研究領域に属する各研究部門が積極的に連携して施設を支援・強化することが望まれる。施設内に研究者を置く場合は、その研究領域に属する研究部門の総意に基づくことを前提とする。施設は本来、所内研究者に異動があろうとも分子科学コミュニティ（所内を含む）に対して高度な研究支援業務を継続的に行うところであり、それが構造的に難しくなっている施設はその施設が属する研究領域（“研究系”）が中心になってその組織を早急に立て直す必要がある。各施設における専任研究職員の増強についての意見は、定員を増やす方向ではなく原則的に同じ研究領域（“研究系”）の中での配置換えでの対応で考える。

上記提案のような同じ研究領域（“研究系”）の中での連携ばかりでなく、研究領域（“研究系”）を越えて分野横断的に研究部門・研究施設（全部である必要はない）が連携して特定の研究を推進するための研究領域間連携組織を必要に応じて構成できるようにする。時限は付けるが、評価によって延長は可能とする。現在の分子スケールナノサイエンスセンターは研究領域間連携組織の位置づけとなる。

新機器センター（仮称）を設置する。研究所創設以来、所内外の研究者の支援をしてきた施設の流れから見れば、ナノセンターは、極低温センター、化学試料室、機器センター（レーザーセンターが引き継いだもの以外の部分）の機能を引き継ぐ立場にあるが、これら旧来の機能はナノセンター所属の研究者が進む方向とは必ずしも一致していない。現在、ナノセンターでは弱体化しつつある極低温センター、化学試料室、機器センターの機能を新機器センターでは

再び強化発展させるとともに、ナノサイエンス関係の共用装置や920MHz NMR装置を含めて所内外の共同利用を推進していく組織にする。

技術職員は高度な専門性と技術力を高めて高度な研究支援業務（分子研の特徴となるような高度な大型装置の維持と高度化、高度な技術力を持った技術集団の養成と共同利用への貢献、所内研究者が進める高度な研究に対する支援など）に貢献することが期待される。そのためには施設の設備を充実する一方、技術職員に対し、施設だけに閉じた形ではなく、最先端の分子科学研究の現場で腕を磨く環境を与えることが重要である。研究職員側は最先端の分子科学研究の現場を施設に置くか、研究部門に置くかについて、分子科学研究の将来動向も念頭に置きながら見極める必要がある。

5-6-3 IMS フェロー制度

(1) 現状

最近では、IMSフェローは教授グループには1名が保証されている（ただし、外部資金等でポストを独自に雇うことが出来る場合には所長が定めたルールに従って配分されないことがある）。また、1名保証ルールはないもののかなりの助教授にIMSフェロー1名の配分ができるように予算の運用を行い、毎年20名を越える採用が実現している。IMSフェローは、グループに依らず応募のあった候補者全体から所長が主幹会議に諮って選考するのではなく、まず所長が10程度のグループにポストを配分し、そのグループリーダー自身の選考結果を尊重して決定することがほとんどである。前者の方式をとっていた15年以上前はポスト数も限られており、他に日本学術振興会奨励研究員の制度（現在の特別研究員（PD）よりもはるかに狭き門）しかなかった時代であり、IMSフェローも狭き門であったし、分子研独自のポスト制度として知名度も高かった。

最近の方式は所内での競争もなく、教授・助教授全員にポストが許す限り、公平に配分されるように改善されてきている。それに加え、現在、科研費を含む外部資金でIMSフェローと同じ雇用条件でのポストを自分の判断で雇うことが始まっている。法人化後は、所長から配分される研究所の研究費で雇用することも事実上、可能である。さらにCRESTなどの外部資金でポストを雇用した場合の雇用条件は、IMSフェローより格段に優れたものになっている。そのため、IMSフェローが外部資金を使った雇用条件の優れたポストと同じグループに属したときの待遇格差の問題も指摘されるようになった。また、分子研外では、理化学研究所の基礎科学特別研究員等が端緒となって広がったスーパーポスト的な制度も増えており、相対的にIMSフェローの魅力は薄れ、分子研の名だけで優れたIMSフェロー候補を呼べる時代ではなくなっている。

(2) 基本提案

以上の現状の問題点を改善するために以下のような基本的な方向性を本委員会では提案する。

新たな“IMSフェロー”制度を開始する。人数を厳選し、雇用条件も優れ、若手人材源として所外他制度との競争力も持たせたものにする。昔のIMSフェローは任期途中でやめることを禁止していたが、この“IMSフェロー”ではそのような強制的なルールを適用しなくても定着率が向上するようなものに築き上げる必要がある。優れた雇用条件にする方策として、定員外の年俸制で雇用する特任助手を“IMSフェロー”と呼ぶようにすることが考えられる。

現在の形のIMSフェロー制度は廃止する。現在のIMSフェローの雇用条件と同じ条件のポスドクは、所長から配分される研究費（ポスドクの人件費・研究費に対する支援がある程度含まれているとする）や自分が取得した外部資金によって、各リーダーの判断で自然科学研究機構で定めた雇用条件に従って、随時、雇用してよいものとする。この方式のメリットは、各グループリーダーの判断で研究費を物件費に充てず人件費に使うことになるため、自律的傾向が増すことである。なお、ひとつの予算枠で1年間雇用することが困難な状況も予想されるため、複数の財源を使ってひとりのポスドクを採用できるように予算上の工夫が必須である。

5-6-4 助手制度

(1) 現状

分子研の助教授人事は競争も激しく、採用された人たちは滞ることなく、短い内に成果を挙げて、研究所が誇る高い人事流動の源になっている。一方、教授の方はほとんど停年まで長期間、研究所で研究を続ける。数々の議論の後、数年前に停年を60歳から65歳まで延ばしたが、そのこと自身は、直接、教授のアクティビティにつながる話ではない。むしろ、この10年ほどの間に、助教授グループの構成は変わっていないが、新しく着任した教授のグループが小型化してしまっており、事態は深刻である。具体的には、以前なら助手2名、研究技官1名の構成が取れるケースが多かったが、今は助手1名、IMSフェロー1名しか配分がない。その大きな原因は教授グループが9（助教授は3）も増えてしまったことにある。そのことは教授・助教授1グループあたりの研究費が減る原因にもなっている（所長はオーバーヘッドによって各研究者の研究費を減らさない努力をしているが、その一方でオーバーヘッドの犠牲になっている部局がある事態も深刻である）。

国内における最近のポスドク制度の充実の裏に助手ポストの減少がある。分子研も改組要求の度に助手ポストが減少してしまった。大学院を卒業した後、別の大学・研究機関で研究するチャンスを作るのにポスドク制度の充実が確かに重要である。しかし、分子研のように外から来て、ある期間経ったら外に出ることを義務づけている場合の若手育成策は、短期雇用のポスドクではなく、助手制度の充実の方にあると言える。その際、教授グループの果たす役割は助教授より大きいと考えられる。

(2) 基本提案

以上の現状の問題点を改善するために以下のような基本的な方向性を本委員会では提案する。

教授には若い内から助手2名を配分する。そのための人件費・研究費の運用として約10年の間に増えてしまった研究グループを減らすことを考えるべきである。5-6-1で議論したように各研究部門（現在の系）をスリム化し、他の分野と連携をとりやすくする形に移行することが望ましい。学問の動きを的確に捉えて分子研で花を咲かせて、それを大学に伝えていくためには、流動がほとんどない教授の数よりも流動に貢献している助教授の数を相対的に増やすことが肝要である。

5-6-5 併任制度と客員制度

(1) 現状

これまで併任制度は、助教授が教授として転出した場合など、残務整理や任期途中の助手・IMSフェローのため、一定期間（最大1年）転出者に対して運用されるケースだけであり、その他の運用については考えたことがなかった（岡

崎共通研究施設との併任や総合研究大学院大学との併任は別として）、分子研の研究環境を生かした新しい分野を分子研の専任として推進していただける教授を探しても見つからないことがある。分子研では教授に比較して助教授にはそのような問題はない。かと言って客員制度による研究協力だけでは限界がある。

分子研には国内研究者と国外研究者を雇用できる客員制度がある。外国人の場合は最低でも3ヶ月間、研究所に滞在して研究するため、専任に近い働きをすることが可能であり、分子研の名で論文を書く。ただし、教授会議メンバーではない。一方、国内研究者の場合は自動的に教授会議メンバーとなるが、外国人と違って実質的に分子研で長期滞在して研究を行っている人は例外的で、現在、先導分子科学研究部門の専任の客員教授1名だけである。教授会議に占める客員の割合は30%にも達している。本来は客員は国内外に関わらず、専任に近い扱いであった。そのため、研究費に加えて、居室や実験室が与えられ、国内研究者については教授会議の構成メンバーまでになっていた。しかし今は、実験室を持つ客員も減少し、教授会議の出席率も低くなってしまった。国内の客員の人々が論文を書く場合に分子研の客員として所属を書く人がどのくらいいるであろうか。Annual Reviewに客員の研究成果も記載されているが、著者所属として分子研が明記されていない論文は本来は除外しないとおかしい。所長から配分される研究費が分子研所属を論文で明記できない程度のお話であるのなら予算配分の意味はない。

(2) 基本提案

以上の現状の問題点を改善するために以下のような基本的な方向性を本委員会では提案する。

各研究領域（“研究系”）に定員を定めない客員研究部門（外国人客員部門や先導分子科学研究部門を含む）を置き、同じ研究領域の専任研究部門及び施設で話し合って研究分野を定めて公募することとする。加えて、分子研に滞在して独自の研究を展開する客員については分野を限らず公募する。いずれも、教授会議メンバーにふさわしい研究者が選べるように、公募を厳選して実質的なものに改善すべきであり、現在の客員定員に縛られる必要は全くない。また、法人化前の流動研究部門のように専任の客員部門としての運用は先導分子科学研究部門だけに限定せず、どの研究領域の客員研究部門でも必要に応じて対応可能とする。

他大学からの併任の充実を提案する。分子研の一員として優れた業績を挙げただけなのであれば、専任教授にこだわりすぎて当該分野の人事選考を困難にしまう必要もない。現在、2年短期（1年のみ延長可能）の助手を配分している先導分子科学研究部門客員教授に対する例外的措置は新たな併任制度と見なすことができる。しかし、ここで提案しているのは、運用上は異なるもので、専任教授グループが教授の停年などで解散する際に後任教授ポストを他大学の教授の併任で運用するという提案である（人件費削減の効果がある）。後任教授を公募する際に専任でも併任でもよいとすることも考えられる。

5-6-6 分子研 OB とコミュニティ

(1) 現状

分子研で停年を迎える人は教授や一部の技術職員に限られており、それ以外の人にとって分子研は通過点でしかない。この通過点を有意義に過ごせるように分子研はこれまで努力してきた。しかし、それだけでは分子研に対する帰属意識は生まれない。この30年間、分子研を巣立っていった多くの人たちに分子研は何ができていたのだろうか。“卒業”後も分子研が共同研究に貢献できれば問題ない。しかし、そのようなケースは一部の施設を除いて稀である。分子研

の“卒業生”というだけでは分子研を支えるコミュニティの一員にはなり得ない（分子研に対して特別な思い入れのある、現在、60歳を越える分子研創設に関わった人たちは例外的である。30周年記念に参加下さった顔ぶれを思い返せばそのことがわかる）。“卒業生”を通じて若い世代が分子研に高い関心を持つことが最近、減っているように感じる。また、聞くところによると総研大生は分子研の同窓生という意識を持たないように教育を受けているという。制度上は確かにそうであり、また、自分の指導教員が分子研から転出したあとでは分子研が出身校という意識が消えるのは仕方ないことかも知れない。流動性が高いための弱点とも言える。

ところで、創設来、分子研レターズという出版物を出版してきた。この出版物の主たる目的は共同利用・共同研究に参加した研究者が所属している大学等への報告書である。研究所としてはコミュニティに配布するという意識で作成してきたもののはずである。ところが、研究会報告など分子研レターズから消えてしまったものもあり、現在の分子研レターズを共同利用・共同研究の報告書に位置づけるには少々無理がある。その役目はホームページや分子研レポートに部分的に移行している。分子研レターズには研究所の中の活動紹介もある。この場合、想定されている読者は主に“在校生”である。必ずしも外向きではない。現在、分子研レターズは不完全ながら“卒業生”（客員を含む）にも配布されており、想定されている読者に“卒業生”を含めているのかも知れない。しかし、転出時以外で“卒業生”に積極的に執筆依頼しているわけではなく、総研大生やポスドクとして通過した“卒業生”に配布されているわけではない。

分子研を支える研究者コミュニティは創設期には分子科学研究会に限られていたが、今はもっと広く、いろいろな研究分野集団が分子研と関わりを持っている。分子科学研究会と分子科学若手の会だけを分子研が研究会などでいつまでも支援するのは所内的にも変に思う人が増えている。分子研を知ってもらうには広く研究分野集団を見る必要がある。分子研の内部の研究者はそれぞれ自分の関連する研究分野集団と関わっており、十分に分子研は貢献しているという意見もある。また、活発な人事流動を通していろいろな研究分野集団と関わっているという意見もある。しかし、コミュニティの問題はそれだけで済まずわけにはいかない研究所の存在理由という大きな問題である。分子科学研究会でさえも分子研との関わりは激減している。

(2) 基本提案

以上の現状の問題点を改善するために以下のような基本的な方向性を本委員会では提案する。

組織として“卒業生”に対して何ができるかを考えた場合、そのひとつの案として分子研レターズという場を活用することを提案する。これまでの分子研レターズの役割は分子研レポートに完全移行する。30周年の機会に同窓会を作る話が所内外で出ているが、若い世代に対しては同窓会という入れ物は意味がない。むしろ、若い世代に分子研に対する愛着を持ってもらうには、分子研の研究活動や今後の進んでいく道を“在校生”と“卒業生”が協力して伝えることが重要である。分子研レターズの編集に教授と助教授ばかりでなく、助手以下の若い世代の人たちや“卒業生”を加えることも提案する。

今は大学共同利用機関として分子研がいろいろな研究分野のコミュニティに果たす義務というものを改めて見直す時期である。この観点では、所内的に分野横断的な情報交換が不足気味なものも是正する必要がある。予算がないということで中止になってしまった岡崎コンファレンスなど、所外（特に若い世代）から見て分子研と関わりたいと思うようなインセンティブを与えるものを“卒業生”を含む分子科学のコミュニティに対して絶えず提供できるように工夫することを提案する。

6．中期計画に対する取組

以下では，中期計画（平成16年度～21年度）の第2年度に分子科学研究所（岡崎共通研究施設の岡崎統合バイオサイエンスセンターと計算分子科学研究センターから併任している研究グループを含む）として取り組んだ内容を中期計画の各項目に対して報告する。これに基づき，平成18年度の年度計画を策定したので，参考資料として最後に添付する。

6-1 研究機構の教育研究等の質の向上に関する目標を達成するためにとるべき措置

6-1-1 研究に関する目標を達成するための措置

(1) 研究水準及び研究の成果等に関する目標を達成するための措置

(機構共通)

大学共同利用機関法人自然科学研究機構（以下「本機構」という。）は、天文学、物質科学、エネルギー科学、生命科学等、自然科学分野（以下「各分野」という。）における研究所等の役割と機能を充実させる。

また、統合バイオサイエンスセンターにおける研究の推進など、研究所間の連携による新たな分野形成の可能性を検討する。

国際専門誌上や国内外の学会、討論会等で研究成果を積極的に公表する。

研究所等に研究所長等の諮問機関として所外研究者を含む運営会議を置き、共同研究計画に関する事項、研究者人事等に関する事項及びその他機関の運営に関する重要事項で研究所長等が必要とするものについて諮問する。

各専門分野において国内の外部委員を含む委員会にて自己点検を行い、国際的に第一線で活躍する著名な研究者による評価に基づいて研究水準・成果の検証を行う。

自らの研究水準を高めるとともに、高度な研究者を養成し大学等研究機関に輩出する。

本機構では、構成5大学共同利用機関（国立天文台、核融合科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所、分子科学研究所）において、当該研究分野コミュニティを代表とする外部委員を含む運営会議をそれぞれ設置し、各機関長（研究所長）は運営会議に対して各機関の運営のための諮問を行っている。平成17年度、分子科学研究所では2回の運営会議が開催され、共同利用・共同研究に関する事項、研究所の教育研究職員の人事、研究組織・研究支援組織の見直し、その他重要事項について審議した。また、所長の諮問により研究顧問会議及び運営顧問会議を開催し、研究面、運営面について議論した。

さらに、各機関では、国内外からの外部委員を含む評価組織を設置し、各専門分野の研究の成果と進捗状況、研究施設の運営と将来計画、研究者個人の業績などについて自己点検及び外部評価を実施している。平成17年度、分子科学研究所では2名の外国人運営顧問による研究者評価及び数名の国内評価委員による4つの研究系・研究施設の研究者評価、組織評価を実施した。

(分子科学研究所)

個々の研究の詳細については本リポートの各研究グループの研究活動の項（研究系および研究施設の現状）を参照のこと。

分子科学分野において、光・X線・電子線・磁場等の外場、極低温等を利用する最先端の物理化学的方法、分子物質の設計・合成手法、超高速計算機による理論シミュレーション等を駆使し、分子及び分子集合体の構造・機能等に関する実験研究並びに理論研究を行う。

化学反応や分子物性を支配する普遍的な因子を理論的に解明し、反応予測や新物性の設計を可能とする分子理論を構築する。

理論分子科学研究所を中心に、昨年度に引き続き、ナノ構造と元素の特性を利用した機能性分子の設計と計算、分子シミュレーションにおける新しい拡張アンサンブル法の開発、朱・中村理論による分子機能の開発と制御、時間依

存密度汎関数理論に基づく多電子ダイナミクスの実時間解析, 3D-RISM 理論による水中の蛋白質の自由エネルギーと部分モル容積の計算, 光誘起イオン性中性相転移におけるフォノン・コヒーレンスの解明などの研究を進めた。

精緻で高度な分子分光法を発展させ, 分子や分子集合体の状態評価手法としての確立を図る。併せて, 実用的な物性評価装置, 計測装置を提案する。

分子構造研究系, 電子構造研究系を中心に, 近接場顕微鏡による電場分布計測法, 分子の内部量子状態を用いた量子ゲートと量子アルゴリズム, 非断熱量子状態分布移動法, 蛋白質の細胞内動態を発光検出するイメージング法の開発などを行い, 分子分光学の基礎と応用の発展に貢献した。

分光学や光化学反応の光源として, 新しいレーザーの開発及び放射光による極端紫外光源の開発を行い, さらに化学反応動力学や新物質創成等の利用研究を推進する。

分子制御レーザー開発研究センター, 分子構造研究系, 電子構造研究系, 極端紫外光科学研究系, 分子スケールナノサイエンスセンターの連携により, エクストリーム・フォトリクス連携事業を立ち上げ, レーザー光源, レーザー顕微分光法, レーザーによる反応制御法の開発に着手した。また, 極端紫外光研究施設において, リング型自由電子レーザーの短波長化・パワーアップ, コヒーレントテラヘルツ光発生, 高次高調波発生, フェムト秒パルス発生など次世代を目指した放射光源開発を行った。

新しい機能を有する分子, ナノスケール分子素子, 分子性固体等を開発し, 物質開発の指針を確立するための物性研究を行う。

分子集団研究系, 分子スケールナノサイエンスセンター, 錯体化学実験施設を中心に, 磁性有機超伝導体・電荷秩序系分子導体の電子状態の解明, ナノ構造体とその電気物性の解明, 有機トランジスタ素材の開発, 金属ナノ触媒の開発, 非平面共役化合物の構築法の確立, 柔軟ナノ分子の動的挙動の解明, 酸化反応に活性な新規金属錯体開発, 合成ガスの分子変換サイクルの構築に関する研究を進めた。

実験では解明不可能な化学現象・物理現象の根元的な理解を深めるため, 理論及びコンピュータシミュレーションによる研究を進める。

計算分子科学研究系, 計算科学研究センターを中心に, 分子動力学法等高性能, 高並列プログラムの開発を進め, ミセル等の巨大系や界面など複雑な分子集合体に対する分子科学研究を進めた。

(2) 研究実施体制等の整備に関する目標を達成するための措置

(機構共通)

本機構に研究連携委員会及び研究連携室を設置して, 研究所等の間の研究連携並びに研究交流の促進を図る。

研究連携室の活動の中では, 分子科学研究所と核融合科学研究所がまとめ役となって「自然科学における階層と全体」というプロジェクトを走らせている。半年毎にシンポジウムを開催し, 自然科学の本質に関わる新分野形成への努力を行っている。また, 「イメージングサイエンス」のテーマに対しても積極的に協力し, 分野を超えた議論を行っている。分子科学研究所が主導しているのは, 「巨大計算新手法の開発と分子・物質シミュレーション中核拠点の形成」プロジェクトで, 自然科学の様々な分野に用いられている種々のシミュレーション手法の相互の特徴を取り入れた新しい複合的手法の開発拠点形成が行われている。

本機構研究連携室を中心に知的財産の創出・取得・管理・活用を積極的に行うため、システムを整備し、効果的な活用を促進する。

分子科学研究所では知的財産委員会を毎月開催し、特許の申請の推進を図ると共に、年々増加する特許の権利所属審査、商標申請の検討等を行っている。また、利益相反委員会を組織し、利益相反マネジメントの遂行体制を整えている。

各研究所等は、定期的に自己点検及び外部評価を行い、その結果に基づき、研究の質の向上に努めるとともに適正な研究実施体制等の整備を図る。

分子科学研究所では、研究所の運営方法・全体的活動に対する評価と、各研究グループの研究活動に対する評価を約3年に一度行っている。前者の評価委員は外国人運営顧問（法人化前の外国人評議員）と運営顧問、後者の評価委員は研究系・施設毎に最低2名の所外研究者（外国人を含む場合あり）としている。平成17年度は、電子構造研究系、極端紫外光科学研究系、極端紫外光研究施設、岡崎統合バイオサイエンスセンター（分子科学研究所関連研究部門）の外部評価を行った。外国人を含む運営顧問の評価も実施した。研究所、研究系、施設に対する全体的な評価結果については本分子研リポートに掲載されているが、それ以外に非公開の評価結果が所長に報告されている。非公開のものには研究者個人の評価が含まれている。また、全研究グループリーダーの研究ヒアリングを行い、研究顧問による評価を実施した。さらに、60歳を迎える教授に対し国内外の研究者若干名による評価が行われた。これらについての評価結果はすべて非公開のものとして各委員から所長に報告があった。

適切なポストドクトラル・フェローシップの構築を検討する。また、研究支援を行うスタッフの充実と資質の向上を図る。

分子科学研究所では、平成17年度は運営費交付金からポスドク（呼称IMSフェローとしてコミュニティで定着している。任期2年であるが審議を経て3年目の延長は可能）を26名雇用した。なお、運営費交付金以外の財源によるその他のポスドクは44名である。教授研究グループ数、助教授研究グループ数はそれぞれ約20であるので、平均すると各研究グループに1～2名のポスドクがいることになる。なお、従来から優秀なIMSフェローを獲得するために、以下のような制度を設けている。原則として採用は4月。毎年6月までに研究所内でIMSフェローの配分希望調査を行い、所長はそこから10名程度、配分する研究グループを決定。公募するかどうかはグループリーダーの判断に任される。公募する場合の期間は9月から12月の3ヶ月。候補が決まり次第、所長に推薦し、所長の判断を仰ぐ。その後、主幹施設長会議、教授会議を経て最終的に2月までに採用を決定。所長はIMSフェローに助手と同額の研究校費を配分。なお、推薦した候補の採用が認められなかったり、優れた候補が見つからなかったりしたグループリーダーは所長にポストを返上することになっている（採用決定まで時間的余裕があれば、次の配分先候補研究グループに配分する）。

他研究機関、大学、企業との研究者の交流を促進するための研究部門の充実を図る。

分子科学研究所では、客員研究部門を設置することで、通常の利用を越えた共同研究を推進する仕組みを持っている。客員研究職員は教授会議に参加し、研究所の運営にも関わることができる体制をとっている。分子研にほとんど常駐して研究を行う客員研究職員については所内研究職員に準拠する研究環境（予算、研究スペース、研究支援者などの配分）を所長が与えている。

本機構内の共通研究施設，センターとの兼担制度を設け，境界領域の分野の発展を促す。

岡崎共通研究施設（岡崎統合バイオサイエンスセンター，計算科学研究センターなど）との一体的運営による研究推進を目的として，関連する基礎生物学研究所，生理学研究所及び分子科学研究所の研究教育職員・技術職員を岡崎共通研究施設に勤務命令させる制度を設けて，運用している。また，岡崎統合バイオサイエンスセンター及び計算科学研究センターの分子科学研究所関連研究教育職員は全員同時に分子科学研究所の職員になる方式を採用している。

（分子科学研究所）

大学との連携を基に一定期間，分子科学研究所の一員として研究に専念できる制度の構築に努める。

全国唯一の装置である 920MHz NMR を用いた研究を強力に進展させるために，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に専任的客員教授 1 名と専任助手 1 名を採用し，その研究に必要な周辺設備の充実を行った。

研究系と施設が適切に連携した柔軟性ある組織に再編・整備するとともに，研究成果を上げるため，研究設備の利用促進と整備を行う。

組織再編を具体化するため，研究系と施設の在り方に関する検討を行った。

6-1-2 共同利用等に関する目標を達成するための措置

(1) 共同利用等の内容・水準に関する目標を達成するための措置

（機構共通）

各専門分野における共同利用・共同研究の内容や水準を向上させるための基本的方策を策定し，具体的運営に関して，運営会議に諮り審議する。

本機構では，共同利用・共同研究・研究会の具体的運営は，各機関の運営会議の審議を受けて，基本的方策を策定している。分子科学研究所では，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。最大 3 年間有効），協力研究（所内の教授または助教授と協力して行う研究），研究会（所内外の研究者によって企画される 20～40 人規模の研究討論会），施設利用の枠で半年ごとに公募している。平成 17 年度は研究者当たりの協力研究の実施時間などに関する総枠規制の緩和や随時受付制度を導入した。

各専門分野において成果を上げるため，本機構の所有する特徴ある大型装置や大型施設を活用した共同利用・共同研究を推進する。また，共同研究の相手方機関の設備・研究環境も活用できるよう，必要に応じて本機構研究者を派遣する等，双方向性のある研究体制を整備する。

本機構では，共同利用・共同研究・研究会は，公募を原則としている。分子科学研究所では，主幹施設長会議，教授会議で公募要領の見直しを行っている。計算科学研究センターのスーパーコンピュータや極端紫外光研究施設（UVSOR 施設）の放射光実験装置の利用促進のため，施設利用での対応ばかりでなく，課題研究と協力研究においても利用を可能としている。共同利用・共同研究環境の整備強化を目指し，全国の国立大学法人と連携して化学系汎用機器共同利用ネットワークの各地域拠点・全国拠点の組織化に向けた活動を開始した。

共同利用公募を行い、利用者の代表を含む委員会で、審査によりテーマを採択する。共同利用・共同研究の運用全般について外部委員を含む委員会で検証し、検証結果を運用に反映させる。

分子科学研究所では、所外委員を含む共同研究専門委員会を運営会議の下部組織として位置づけて設置し、共同利用・共同研究・研究会についての申請課題の採否案作成、実施方法の見直しなどについて検討し、運営会議で最終決定している。施設利用については各施設に置かれた運営委員会で申請課題の採否を決定している。施設利用の検証については各施設の外部評価によって行っている。その結果は本分子研リポートで公開している。

我が国の代表的な学術研究機関として、各専門分野の国際的窓口としての機能を向上させ、国際的共同研究、相互の共同利用及び国際的協定に基づいた様々な協力活動を積極的に行う。

分子科学研究所では、日本学術振興会の諸制度を利用した国際共同研究、研究所の外国人客員研究部門の運用に加え、「物質分子科学」「光分子科学」「化学反応ダイナミクス」の重点3分野に関して独自の国際共同研究制度（平成17年度は10件を選定）を開始し、中国及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、イタリア等からの研究者の短期訪問による共同研究を実施した。東アジアにおける多国間共同研究を推進するため、中国科学院化学研究所、韓国高等科学技術院自然科学部、台湾中央研究院原子與分子科學研究所とともに日本学術振興会のアジア研究教育拠点事業（アジア・コア・プログラム）に応募し、平成18年度からの実施が採択された。

共同研究・共同利用の実施、募集、成果等について情報公開を積極的に行い、新たな利用者や研究者の発掘に努めるとともに、利用者の便宜に供する。

分子科学研究所では、共同利用・共同研究・研究会の募集については研究所のホームページに掲載するとともに、学会誌に掲載している。申請書式も電子化されている。研究成果に関しては Annual Review、本分子研リポート、分子研レターズ、各施設の Activity Report 等で公表している。

共同利用・共同研究環境の整備強化や情報ネットワーク等インフラストラクチャーの整備を行う。

分子科学研究所では、共同利用・共同研究・研究会等で滞在する研究者に対して所内研究者と同水準の情報ネットワークの利用を可能とするための規則を設けて運用している。

コミュニティの研究者の参画を得て計画の具体的立案及び研究課題の抽出を行う。

分子科学研究所では、コミュニティの研究者を半数程度含む、運営会議の下に置かれた共同研究専門委員会及び各施設の運営委員会で半年毎に検討を進めている。また、毎月開催する教授会議には客員研究職員もメンバーとして全員、参加し、共同利用などの議論に参加している。

国内外との共同利用・共同研究を通じて学際的な研究の推進にも恒常的に取り組む。

分子科学研究所においては、分野間連携における学際的研究拠点の形成に向けて、「巨大計算新手法の開発と分子・物質シミュレーション中核拠点の形成」を推進し、その中で国際シンポジウムを開催し、国際連携のあり方についても検討を進めた。分子科学研究所独自のものとして「物質分子科学」「光分子科学」「化学反応ダイナミクス」の重点3分野に関して国際共同研究制度を継続的に実施している。

共同利用・共同研究を推進するため、高度な実験・観測装置を開発整備する。

分子科学研究所では、各施設の運営委員会で半年毎に議論し、大型装置、中型装置の高度化計画を策定しながら、予算獲得に向けて活動している。

(分子科学研究所)

放射光及びレーザーを光源とする先端的光科学研究設備について、高度な共同利用・共同研究を推進する。また、国内外の放射光科学の研究動向を見極めて大型研究施設の整備を進める。

レーザー分子科学分野では外部評価結果を参考に、エクストリーム・フォトンクス連携事業などを中心とした精選された研究主題について所内外での高度な連携研究に着手した。また、極端紫外光研究施設については、科学技術・学術審議会次世代放射光源計画評価作業部会、日本放射光学会先端的リング型光源計画特別委員会などで国内外の放射光科学の研究動向を見極めながら、世界トップの高輝度小型放射光リングとして、施設整備を進めている。

巨大計算に向かっている計算科学、生物分子科学、ナノ分子科学の国内外における動向を見極めて超大型計算機の整備を進め、高度な共同利用・共同研究を推進する。また、超高速コンピュータ網形成プロジェクト(NAREGI)【H15～19までの期限付きプロジェクト】を推進する。

「超高速コンピュータ網形成プロジェクト」は科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 情報科学技術委員会の高い評価を得て、「ナノサイエンス実証研究」も2006年に開始される「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用——ナノ分野グランドチャレンジ研究」へとさらに展開されることとなった。一方で「巨大計算手法の開発による分子・物質シミュレーション中核拠点の形成」事業を開始したほか、計算科学研究センターの超高速分子シミュレータの導入業務を行い、共同利用における巨大計算課題の新設等も行った。

高磁場核磁気共鳴装置等の先端的分光分析・物性評価装置について、高度な共同利用・共同研究を推進する。

高磁場核磁気共鳴装置(NMR)の全国共同利用サービスのために、分子スケールナノサイエンスセンターの技術職員1名を採用し、更にメーカーからの技術者1名を訪問研究員として受け入れた。高度の協力研究推進のために、NMRを専門とする専任的客員教授1名と専任助手1名を配置している。さらに、文部科学省が実施しているナノテクノロジー総合支援プロジェクトの中で分子科学研究所が京都大学、九州大学と共に担当している「分子・物質総合設計・解析支援プログラム」において、ナノ物質創製・物性評価・構造決定・ナノスケール分子観察・分子物質操作加工などを行うための10種の装置群を公開し、さらに理論計算支援を行っている。利用課題件数は年々増加し、平成17年度は130件の課題(民間利用も受け入れている)を実施した。これらの実績に基づき、利用者のニーズに応えるべく、第2期の計画を立案し、更に有効な支援プログラムの展開を図ることを検討している。

(2) 共同利用等の実施体制等に関する目標を達成するための措置

(機構共通)

本機構に属する研究所等は、それぞれの特徴を生かして共同利用等の実施体制等に関して以下のような措置をする。

国内外の研究者との幅広い共同利用・共同研究を実施するための必要な施設、設備の研究環境を整備するとともに資源配分の公平性と透明性を図り、積極的な推進及び円滑な運営を目指して、組織、体制を構築する。

各機関では、機器開発を推進する組織や設備の整備を行った。分子科学研究所では、装置開発室と各研究者・施設

の連携によって、機器の開発をおこなっている。さらに、全国の国立大学法人与連携して化学系汎用機器共同利用ネットワークの各地域拠点・全国拠点の組織化を検討している中で、分子科学研究所は全国拠点として化学機器の設備整備を図るように検討を進めている。

資金・設備等を活用し、萌芽的研究及びその共同研究を進める。

本機構では、外部委員を含んだ共同研究委員会等（分子科学研究所では共同研究専門委員会）を設置して、共同利用・共同研究・研究会の計画の採択、実施体制の検討を行っており、その際、長期に確立した共同研究よりも萌芽的研究を優先させる方針になっている。また、極端紫外光研究施設では初心者の研究グループへの旅費配分人数を増やすなどの工夫を行っている。

共同利用・共同研究の成果は、出版物等多様なメディアを利用し公表する。

各機関では、共同利用・共同研究・研究会の成果を要覧、年報（Annual Review, Activity Report）等（分子科学研究所では、他に分子研レポート、分子研レターズ）の出版物で公表するとともに、学術雑誌への掲載又はホームページにより研究成果を公表している。各報道機関にも成果発表している。

共同利用・共同研究の運営・成果に関する外部評価を行い、その結果を将来構想等に反映させる。

各機関の主たる研究内容等について経営協議会及び教育研究評議会に報告するとともに、外部協議員、評議会員の意見を聴取している。分子科学研究所では、外部評価をもとに将来計画委員会を開催し、研究所全体で将来計画を策定し、本分子研レポートにその結果を掲載している。

共同利用・共同研究における技術者の技術力向上のため、研修等を実施する。

（実施済。詳細省略）

特別共同利用研究員等若手研究者に対する研究支援の強化を図る。

（実施済。詳細省略）

共同利用者用の宿泊施設等の研究環境を整備する。

（実施済。詳細省略）

実験・観測データの公開を一層進めるとともに、広く利用できるデータベースを構築する。

（分子科学研究所には該当しない）

6-1-3 教育に関する目標を達成するための措置

(1) 大学院への教育協力に関する目標を達成するための措置

（機構共通）

大学共同利用機関としての特長を生かした特色ある教育を実施する。大学院教育を機構の重要項目として位置づけ、総合的に大学院教育を検討する組織を機構に設ける。また、具体的事項（受託、単位認定、研究教育等）について検討する組織として、各研究所に委員会を設置する。

各機関では、専攻委員会を設置している。分子科学研究所では、構造分子科学専攻委員会と機能分子科学専攻委員会が置かれており、原則として8月を除く毎月第3金曜日の午前中に開催している。

平成18年度から5年一貫制を導入する国立天文台、核融合科学研究所及び分子科学研究所では、入試を実施した。

研究所等は、総合研究大学院大学と緊密に連携・協力し、特色ある大学院博士課程教育を以下の専攻において実施する。

- ア 核融合科学研究所に設置された核融合科学専攻
- イ 基礎生物学研究所に設置された分子生物機構論専攻
- ウ 国立天文台に設置された天文科学専攻
- エ 生理学研究所に設置された生理科学専攻
- オ 分子科学研究所に設置された構造分子科学専攻及び機能分子科学専攻

6専攻の教員346名が学生164名に対して52講義(専攻をまたぐ共通科目を含む)、115演習を実施し、単位認定した。また、44人(内、論文博士5人)の博士の学位を授与した。分子科学研究所では、それぞれ次のような数値になっている。教員70名、学生41名、8講義、33演習、11人(論文博士なし)。また、各専攻におけるセミナー、英語教育等の総合的教育に加えて、分子科学研究所では、「総研大岡崎レクチャーズ:アジア冬の学校」、「夏の体験入学」、「第15回分子科学研究所オープンハウス」を実施した。

東京大学大学院理学系研究科、名古屋大学大学院理学研究科、同工学研究科との協力による大学院教育を実施する。分子科学研究所では、連携大学院制度に基づき、京都大学大学院理学研究科と教員の交流を実施(平成17年度は学生交流はなし)。

研究所等は、国立大学法人の要請により連携大学院制度や特別共同利用研究員制度により大学院教育に協力する。本機構では、110名の特別共同利用研究員(分子科学研究所は14名)を受入れ、大学院教育を行った。

リサーチアシスタント制度の活用などにより、大学院生に対する支援を行う。本機構では、201名のリサーチアシスタント(分子科学研究所は45名)を採用し、研究者育成を行った。

学生に多様な教育の機会を与えるとともに、カウンセリングなど心と体のケアにも配慮する。分子科学研究所では、研究科共通専門基礎科目の開講や英語教育を行っている。また、外部委託によるカウンセラーを配置し、年10回のカウンセリングを実施した。

(2) 人材養成に関する目標を達成するための措置 (機構共通)

本機構は以下のように、各種ポストドクトラル・フェローシップを整備し、若手研究者の育成と流動化の促進に努める。

大学院修了後やポストドクトラル・フェローシップ任期終了後の活動状況の把握に努め、今後の方策の指針とする。分子科学研究所では、平成17年5月に実施した創設30周年記念事業に併せて調査を行い、また、継続的に12月にも追跡調査した。

本機構で教育指導を受けた大学院生等の博士号取得後の進路について、若手研究者の流動化の一環として国内外の研究機関への異動を推奨する。

各機関では、各機関に対する求人依頼・公募案内を定期的にまとめて掲示することで、大学院生等への就職情報を提供している。分子科学研究所では、指導教員が大学院生をそのまま自分の研究グループのIMSフェロー（ポスドク）や助手に採用することを原則として禁じている。

大学院生・博士号取得者の処遇改善方策について検討する。

分子科学研究所では、大学院生全員（日本学術振興会の研究員を除く）をリサーチアシスタントとして雇用している。博士号取得者に対しては、独自のポスドク制度（IMSフェロー）に加えて、文部科学省の支援プロジェクトや各研究者が獲得した科学研究費補助金、JSTのプロジェクト経費、受託研究費等を使って、博士研究員（ポスドク）として雇用している。その場合、雇用条件が同じ場合はIMSフェローの認定を主幹施設長会議で審議して与えることにしている。

6-1-4 その他の目標を達成するための措置

(1) 社会との連携、国際交流等に関する目標を達成するための措置

（機構共通）

本機構は以下のように、社会との連携や国際協力等に関して具体的な計画を推進する。

自然科学研究における基礎的研究の重要性を広く社会・国民に訴え、得られた研究成果を国民と共有できるように広報・情報発信に努める。

本機構では、機動的、効果的に審議・検討を行うため、広報に関するタスクフォースを組織するとともに、基本計画並びに実施計画を作成し、機構パンフレットの作成、本機構ホームページのリニューアルを行った。分子科学研究所でも広報・情報発信の強化に努めており、新聞報道は12件あった。

高度な技術力を持つ企業と様々な連携を図り、企業や企業内研究者との共同研究を進めるための方策について検討する。

分子科学研究所では、企業との連携を図るための方策を検討しているところである。なお、平成17年度は民間と17件の共同研究を実施した。

研究成果やノウハウの活用のため、各種審議会、地方公共団体の委員会等への積極的な参加を推奨する。一般講演会、ホームページ、資料等を通じて広く一般社会への情報発信に努める。産業界に向けた研究成果や技術成果の発信にも努める。

本機構では、大学共同利用機関法人自然科学研究機構役員等兼職規程及び職員兼職規程に基づき、各種審議会や学会・地方公共団体の委員会等への参加を認めている。また、各機関では、一般講演会を実施し、そのポスター及び実施状況をホームページで公表するなどして、一般社会への情報発信に努めている。分子科学研究所では、一般講演会として豊田理化学研究所との共催で「分子科学フォーラム」を2ヶ月に1回の割合で開催している（平成17年度は6回実施）。これは分子科学や周辺の分野の第一線の研究成果をわかりやすく近隣の多くの市民を含めた参加者に紹介しているものである。

生涯学習・学校教育・専門家教育面で地域からの要請に積極的に対応する。

分子科学研究所では、愛知県立岡崎高校のスーパーサイエンスハイスクール関連事業に協力した。

研究成果を海外や国内の大学・研究機関の研究者へ積極的に公開する。国際会議や学会の企画、および様々な情報発信媒体（ホームページ、パンフレット、解説資料（英語版も整備））を通じて公表する。

（実施済。詳細省略）

国際シンポジウム・国内研究会を積極的に実施して、国内研究者の研究活動を支援する。会議の立案、サポート体制等、具体的な実行案を策定する。

（実施済。詳細省略）

科学技術協力事業、二国間、多国間等政府・機構・研究所レベルの国際共同研究事業を一層推進する。

各機関では、各種研究協力協定等を締結し、研究者の相互受入等、国際共同研究事業を推進し、年次報告等で公表した。分子科学研究所は、東アジア（中国、韓国及び台湾）に重点を置き、連携協力の強化を図った。

海外研究者、留学生、博士号取得者の受入れを推進するための制度の基礎整備を図る。

（実施済。詳細省略）

(2) その他

（機構共通）

図書、雑誌（電子ジャーナルを含む）の充実を図り、各専門分野の情報センターとしての機能を拡充する。

（実施済。詳細省略）

本機構本部、研究所等間のネットワーク等の整備を行い、情報連絡の効率的運用を図る。ネットワークセキュリティにも留意する。

分子科学研究所では情報ネットワークのセキュリティ強化のために認証システムを導入した。

6-2 業務運営の改善及び効率化に関する目標を達成するためにとるべき措置

6-2-1 運営体制の改善に関する目標を達成するための措置

(機構共通)

本機構の運営に際して、研究所等の活動状況を適切に反映させるため、機構に研究所長等を含む機構会議を置く。

本機構においては、広く研究情報の収集に努め、機構としての研究の指針を検討する。また、多様な研究需要への対応や新たな分野の開拓等を可能にする体制の整備を図る。

研究計画その他の重要事項について専門分野ごと及び境界領域・学際領域ごとに外部学識者からの指導・助言に基づき業務運営の改善、効率化を行い、機動的かつ柔軟な研究体制の整備を図る。

研究所長等は、副所長、研究総主幹、研究主幹・施設長等とともに研究体制・共同利用体制の充実を図る。

分子科学研究所では、主幹施設長会議を開催すると共に、独自の運営顧問会議及び研究顧問会議も開催している。

分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所の所長は、運営会議に加えて、機動的・戦略的運営を図るため、定期的に教授会議を開催する。

分子科学研究所では、教授会議を毎月1回(8月を除く)、原則、第3金曜日に開催している。

技術職員、事務職員の専門的能力の向上を目指すため、研修、研究発表会等への積極的な参加を促す。

本機構では、一般職員について、国立大学協会が主催する各種研修会に積極的に参加させた。各機関では、技術職員に対し研修や研究発表等に積極的に参加を促した。分子科学研究所では技術専門職員研修(化学コース)、放射線同位元素等取扱施設安全管理担当職員研修、放送大学利用による職員研修を実施した。

6-2-2 研究組織の見直しに関する目標を達成するための措置

(機構共通)

自己点検や外部評価を踏まえ、機構長及び研究所長等のリーダーシップの下に研究組織の見直しを図る。

(実施済。詳細省略)

研究者の自由な発想に基づく基盤研究を基本的活動とするために、研究体制について見直しを図る。

(実施済。詳細省略)

共同利用を円滑に行うための研究体制やプロジェクト型研究に対する研究体制について客員制度を含めて見直しを図る。

本機構では、教育研究評議会や機構会議において各機関の研究組織見直しについて各所長が説明することになっている。分子科学研究所では、系と施設の在り方等検討委員会において、研究体制や客員制度に関して見直しを行った。

6-2-3 職員の人事の適正化に関する目標を達成するための措置

（機構共通）

公募制を取り入れ、研究教育職員の人事選考の透明性を確保する。

本機構では、研究教育職員の採用については、原則として公募制を採用し、教育研究評議会が定めた選考基準に基づき、外部委員を半数含む運営会議で選考しており、透明性・公平性を確保している。分子科学研究所では、運営会議の下に設置した人事選考部会（所外5名、所内5名）が最終候補を運営会議の結論として選考し、所長はその結果に対し、教授会議にも諮って最終決定する。平成17年度も人事の流動が活発であり、空席となっていた教授1名、助教授2名、助手5名を公募によって採用した。さらに助手1名については公募に依らず採用した。

各専門分野に適した任期制を導入して、研究教育職員の流動化・活性化を図る。また、分子科学研究所においては内部昇格禁止の制度も導入する。

本機構では、各機関に適した任期制の導入を実施し、研究教育職員の流動化・活性化を図った。分子科学研究所では、助教授と助手の内部昇格禁止とする内規的ルールを堅持しており、研究教育職員の流動化・活性化を図っている。また、分子科学研究所で設定している助手の任期は紳士協定的な期限でしかなく法律上は任期と言えるものではないため、法人化後は公募の際には「6年を目途に転出を推奨」という表現を使うことにしている。なお、法人化の前に採用した助手の中には任期が設定されているものが17名いるが、再任手続きのあとは法律上の任期は設定しないように規則を定めている。

外国人研究者の採用を促進して、国際的な研究機関として広い視点を取り込む。

分子科学研究所では、平成17年度に外国国籍の研究教育職員1名を新たに専任の助教授として雇用した。また、2つの外国人客員研究部門に4つのポストを持っており、3ヶ月滞在～12ヶ月滞在の条件で候補者を主幹施設長会議で選考している。平成17年度は15名採用した。

事務職員について、大学、研究機関等との人事交流を推進する。

（実施済。詳細省略）

技術職員及び事務職員について、国家公務員採用試験に代わる適切な採用方法を探る。

本機構では、国立大学等職員採用試験制度に参加し、職員を採用した。分子科学研究所では、技術職員に関して広く人材を集めるために、共通の採用試験には依らない公募による選考を実施しており、平成17年度は3名採用した。

技術職員及び事務職員について、適切な勤務評価制度を導入する。

（実施済。詳細省略）

6-2-4 事務等の効率化・合理化に関する目標を達成するための措置

（機構共通）

本機構、国立天文台、核融合科学研究所及び岡崎3機関（基礎生物学研究所、生理学研究所及び分子科学研究所をいう。）に事務組織を設け、重複事務を避ける等、効率的に業務を遂行するため各々の権限と義務を明確化する。

事務処理 , 技術支援の内容を定期的に見直し , 事務組織に流動性を持たせ , 専門性に応じて外部委託等を検討する。

情報ネットワークを整備し , 事務の情報化 , 会議の合理化等を図り , 事務及び運営の効率化に努める。

6-3 財務内容の改善に関する目標を達成するためにとるべき措置

6-3-1 外部研究資金その他の自己収入の増加に関する目標を達成するための措置

（機構共通）

本機構の研究成果等研究活動の広報普及に努めるとともに、寄付及び受託研究等の受入れ手続きの簡素合理化を図るなど、受入れ体制を整備する。

各機関では、研究者を対象とした講演会を実施した。また、機構本部や文部科学省では、適宜記者発表を行うなど、積極的に研究成果等を公表している。各省庁の補助金事業の情報の収集、民間の研究助成財団の情報の集約を行うとともに、各機関では、科学研究費補助金の説明会を実施した。分子科学研究所では、外部資金公募に関する情報については広報委員会及び事務センター国際協力研究課から研究者全員に電子メールでの周知と勧誘を図っている。

特許等の取得手続きの組織体制を整備するとともに、知的財産に関する講習会の開催などにより、組織全体としての意識向上を図る。

分子科学研究所では、知的財産委員会の下にJSTの協力を得て特許相談室を設け、特許検索による特許性の確認や明細書の書き方などの指導を行っている。

6-3-2 経費の抑制に関する目標を達成するための措置

（機構共通）

必要に応じ定型業務等の外部委託を行う等、管理業務の合理化を図るとともに、効率的な機構運営を行うこと等により、経費の節減に努める。

分子科学研究所では、活発な人事流動による高齢化の抑制などによって人件費抑制を行っている。また、所長は事務センター財務課の協力を得て、研究費の執行状況を定期的に把握し、適切な執行を促すとともに、年度後半には配分予算の見直しを行っている。

事務手続きの簡素化・迅速化、省エネルギー化等を推進することにより、経費の抑制に努める。

分子科学研究所では、各棟の電気、水道の使用量を毎月把握し、教授会議で公開することで、省エネルギー化に毎月留意している。

6-3-3 資産の運用管理の改善に関する目標を達成するための措置

（機構共通）

本機構の機能に資産の運用管理を所掌する部署を設置し、資産の運用及びリスク管理等を外部の専門家の意見も聞きながら実施できる体制の整備を図る。

資産の適正な運用管理を図るため、その管理状況について定期的に点検し、必要に応じて見直しを行う。

6-4 自己点検・評価及び当該状況に係る情報の提供に関する目標を達成するための措置

6-4-1 評価の充実に係る目標を達成するための措置

(機構共通)

自己点検及び外部評価の結果を、機構運営に反映させるシステムを構築する。

自己点検・外部評価の結果を踏まえ、中期目標期間終了時までに、次期中期目標期間以降を念頭において、機構として理念・目標等の見直しを行い、見直した部分を明らかにして公表する。

6-4-2 広報及び情報公開等の推進に関する目標を達成するための措置

(機構共通)

情報公開請求に適切に対応できる組織整備を図る。

報道機関等への研究成果の迅速な公表を図る等、専門分野の情報を適切に提供し、成果の活用に関して対応できる組織を整備する。

研究所等によっては高度な知識や経験を持つアマチュア科学者向けの窓口を設置する。

本機構の業務活動、諸規程、各研究者の研究成果等を広報誌やホームページ等により広く社会に情報発信する。

本機構紹介用リーフレットを和文、英文で作成し関係機関等に配布しているほか、ホームページにより和文、英文で機構の業務概要を公開している。各機関では、各種広報誌（岡崎3機関はOKAZAKI、各研究所要覧）の発行、ホームページの充実を図り、情報の発信に努めている。広報誌「OKAZAKI」は岡崎3研究所の研究活動についてわかりやすく紹介しており、岡崎市役所の他、近隣の中学・高校・大学・地方自治体などに配布しているものである。分子科学研究所のホームページアクセス件数は約280万件である。

職員の倫理、セクシュアルハラスメント、機器調達契約等の守るべきガイドラインを定め、公表する。

本機構では、職員倫理規程、セクシュアルハラスメントの防止に関する規程を制定し、それらに本機構では、職員倫理規程、セクシュアルハラスメントの防止に関する規程を制定し、それらに基づき、苦情相談に対する指針及びセクハラを防止するため職員が注意すべき指針を定めて周知している。また、「国等による環境物品等の調達の推進等に関する法律」に基づき、環境物品等の調達の推進を図るための方針を定め、公表している。

研究成果を年次報告等として公表する。

各機関では、年報（分子研では英文 Annual Review と本分子研レポート）を作成するとともに、ホームページ上でも公表している。

研究所等の一般公開を計画的に行う。

分子科学研究所では、3年に一度、開催しており、平成18年度に実施する。

機構が関わる研究分野・関連分野における国際的に優れた国内外の研究者の一般市民向け公開講演会を積極的に行う。また、地域社会と連携した一般市民向け公開講座等も実施する。

本機構では、合計30回以上の公開講演会を実施した。そのうち、分子科学研究所では6回。今年度より毎年、機構の主催で一般市民向けに機構に所属する研究教育職員が最先端の研究成果について解説するシンポジウムを東京で開催することにした。第1回は3月21日に開催し、600名以上の参加があった。分子科学研究所からは1名が講演し、また、研究所の研究活動を説明するパネル展示も行った。

各専門分野における社会に対する説明責任と研究評価に資するため、研究所アーカイブスの整備を行う。分子科学研究所では、平成17年度に担当者を決定し、作業を開始した。

6-5 その他業務運営に関する重要目標を達成するためにとるべき措置

6-5-1 施設設備の整備等に関する目標を達成するための措置

(機構共通)

定期的に施設の実態や利用状況を自己点検・評価し、教育研究活動や共同利用等の施設の有効活用を図る。

施設の老朽化，狭隘化，耐震対策，既存施設の点検・評価及び共同研究等の研究活動の進展に伴い必要となる施設の整備計画を作成し，計画的な施設整備を行い，研究施設等の適正な確保に努める。

環境を考慮した施設整備に努める。

施設の安全で効率的な管理・運営のため，施設・設備の利用計画，維持管理の計画を作成する。

6-5-2 安全管理に関する目標を達成するための措置

(機構共通)

労働安全衛生法等に係る諸事項の評価と点検を実施するとともに，関連諸規程・規則，作業基準，安全マニュアルを整備し，適切な管理を行う。

分子科学研究所では，各種有資格者，専門知識保有者を効率的に育成，組織化するために安全衛生管理室を設置しており，安全衛生管理担当専任助手1名を配置している。安全衛生管理室は毎月開催される岡崎3機関安全衛生委員会のあと定例会議を開いて，研究所の安全衛生に関する実情調査，作業指導，企画立案を行っている。また，安全衛生講習会の開催，マニュアルの作成，各種資格取得の奨励を行っている。

自然災害等への対応マニュアルを整備するとともに，危機管理体制の構築を図る。

教育研究活動等に起因して職員，共同利用・共同研究者に被害がもたらされた場合の補償等に対応するため，保険等による対策を図る。

職員の過重労働に起因する労働災害を防止するため，勤務時間の適正化に努める。

労働安全衛生法等に関する講習会等に積極的に参加させるなど，職員に対する安全管理・事故防止に関して周知徹底を図るとともに，種々の資格者の育成を図る。

資料1 大学共同利用機関法人自然科学研究機構年度計画（平成18年度）（VI以降を省略）

I 研究機構の教育研究等の質の向上に関する目標を達成するためにとるべき措置

1 研究に関する目標を達成するための措置

(1) 研究水準及び研究の成果等に関する目標を達成するための措置

大学共同利用機関法人自然科学研究機構（以下「本機構」という。）は、天文学、物質科学、エネルギー科学、生命科学等（以下「各分野」という。）、自然科学分野における研究所等（本機構が設置する大学共同利用機関をいう。以下同じ。）の役割と機能を一層充実させる。

また、各分野間の連携を積極的に行い、学際的・国際的研究拠点形成を目指す。

研究所等に置かれた運営会議は、共同研究計画に関する事項、研究者人事等に関する事項、組織の改編に関する事項及びその他研究所等に関する重要事項で研究所長等が必要とする事項について諮問を受け、答申する。

各分野において研究の進展、公表の状況、研究者等の大学や研究機関との交流の状況等をまとめ、外部委員を含む委員会で自己点検を行う。

各分野の特記事項を以下に示す。

(国立天文台)

広範な天文学分野において、大型観測装置や各種観測装置を用いた観測的研究、高速計算機を用いたシミュレーション解析も含んだ理論的研究を推進するとともに、新たな観測装置やソフトウェアの開発研究を推進する。

特記する項目として以下のものがある。

ハワイ観測所においては、重点プログラムとして宇宙論、銀河形成と進化及び太陽系外惑星等の観測的研究を推進すると共に、次世代観測装置の開発研究を検討する。

野辺山宇宙電波観測所においては、45mミリ波望遠鏡に搭載されたマルチビーム受信機等により、銀河、星形成領域、星間物質の観測的研究を推進する。

国際協力事業として、平成16年度に開始したアタカマ大型ミリ波サブミリ波干渉計（以下「アルマ計画」という。）の建設を引き続き推進する。特に、アンテナ、相關器及び受信機の製作等を引き続き行う。

国内外の研究者との連携を進めて、情報処理技術及びデータ利用技術を天文学に融合したバーチャル天文台の開発を推進する。

宇宙航空研究開発機構と協力してSolar-B計画の飛翔実験を行い、SELENE計画を引き続き推進する。将来の超長基線電波干渉計（以下「VLBI」という。）観測衛星、位置天文衛星、太陽系外惑星探査衛星等の実現に向けて検討を進める。

北海道大学、岐阜大学、山口大学、鹿児島大学及び宇宙航空研究開発機構並びに情報通信研究機構等との連携による国内VLBI観測網による観測を推進する。東アジアVLBI観測網（中華人民共和国、大韓民国）構築のため開発研究を国際連携で推進する。また天文広域精測望遠鏡（VERA）による高精度位置天文観測を推進する。

広島大学、東京工業大学等と光赤外線望遠鏡を使用した共同研究を推進すると共に、新観測装置の開発を推進する。京都大学、名古屋大学等と新たな望遠鏡建設に向けた基礎技術開発を行う。また、次世代超大型光赤外線望遠鏡を国際協力で建設する可能性について検討を進める。

暦を決定する業務を実施し、暦象年表を発行するとともに、暦要項を一般公衆に広く公表する。

高精度時刻維持により協定世界時の決定へ寄与する。また、インターネットへの時刻基準提供サービスを行う。

(核融合科学研究所)

制御熱核融合の実現を目指した核融合科学とその基盤となるプラズマ物理学、炉工学などにおいて、学術的体系化を図り、世界に先駆けた成果を上げる。

大型ヘリカル装置（以下「LHD」という。）の性能を最大限に発揮させるため、今年度は特に次の事項を中心に研究を進める。

1. プラズマ加熱機器の整備・増強、改良を進めることにより、入力エネルギーの大きい長時間放電プラズマ、平均電荷数の小さい高イオン温度プラズマ等、LHDプラズマの高性能化を目指し、関連する学術研究を行う。

2. プラズマの詳細な分布が得られる計測機器の整備・増強、改良を進め、プラズマの高性能化に必要な基礎データの取得に努める。

3. プラズマ制御法を工夫し、LHDプラズマの高性能化を目指す。

プラズマの高性能化に必要な物理機構の解明等を、次のように共同研究を強化して進める。

1. 筑波大学プラズマ研究センター、京都大学エネルギー理工学研究所附属エネルギー複合機構研究センター、大阪大学レーザーエネルギー学研究中心及び九州大学応用力学研究所炉心理工学研究中心と、本研究所やこれらの大学・附属研究所・センターの装置・設備を有機的に活用して、双方向型共同研究として進める。

2. 双方向型共同研究の研究推進基盤をさらに強固にするため、必要な装置の整備等の計画立案・調整をコミュニティの意見も反映させて行う。

核融合プラズマ閉じ込めの物理機構解明とその体系化及び複雑性の科学を探究するために、特に次の研究を実施する。

1. 一流体（磁気流体力学）モデルの二流体モデルへの拡張（拡張MHD）を行い、巨視現象に対する微視スケールの影響を検討する。

2. LHDに代表される環状系プラズマにおける高エネルギー粒子励起モードのシミュレーション研究と実験との比較研究を発展させる。

3. 環状系プラズマにおける大域的輸送シミュレーション研究の発展を図る。

4. 開放系における無衝突磁気リコネクションの粒子シミュレーションと外部MHDモデルとの連結を検討する。

炉工学関連グループ間の連携を保ちつつ、ヘリカル炉設計、ブランケット、超伝導、安全技術に関する研究を引き続き進める。

1. 炉工学・炉設計連絡会議を継続し、所内関連グループ間の連携と議論の深化を図りつつ炉工学研究の集約、学術的体系化を進める。

2. 整備された連携研究推進のための組織の活動を一層活発にし、他分野との研究連携や産学連携を視野に入れた幅広い工学研究の進展を推進する。

共同研究の中心機関として、各種コードを活用し、プラズマ中の基礎及び複合過程の研究等を行うとともに、原子分子データ及びプラズマ・材料相互作用データ等の基礎データの収集・評価等を行う。

(基礎生物学研究所)

細胞生物学、発生生物学、進化多様性生物学、神経生物学、環境生物学、理論生物学等の基盤研究をさらに強化発展し、独創的で世界を先導する研究を創成、推進するとともに生物学の新しい展開を目指した基礎生物学研究者コミュニティの形成を促進する。

レーザー光照射システムを最適化し、さらに光生物学研究の推進を図るために、波長可変レーザーの導入を検討する。

引き続き、生物現象を数理的手法で理解することを目的として、実験生物学者、理論生物学者の集う研究会を継続、発展させる。

モデル動植物バイオリソース開発をさらに推進するため、飼育・育成施設などの充実を図る。メダカについては生物学研究に有用な遺伝子導入系統の作出を開始する。

所外委員からなるバイオイメージング研究のアドバイザー委員会を設置し、一層の推進を図る。

(生理学研究所)

分子生物学、細胞生理学、生物物理学、神経解剖学、神経生理学、神経発生学、感覚情報生理学、認知行動学、病態生理学等広範な生理学分野及び関連分野において、ヒト及び動物の生体の機能とメカニズムを解明するため、共同研究を含む世界的に高水準な研究基盤を発展強化する。

機能的磁気共鳴画像診断装置(MRI)や脳磁計等の非侵襲的脳機能計測装置を用いて、ヒト・霊長類の高次脳機能及びその発達や機能代償に関わる研究を進める。

位相差電子顕微鏡等の超分子機能解析技術の向上を図るとともに、応用範囲の拡大を目指す。バイオ分子センサー等の生体機能分子の超分子構造と機能及び活動依存的動態を解析する研究を進める。

生体恒常性維持のメカニズム及びその発達、破綻による病態等の分子・細胞メカニズムに関する基盤的研究を進める。

大脳皮質、大脳基底核等の神経回路の発生学的・形態的・機能的解析を推進する。パーキンソン病等の神経疾患モデル動物の病態解析を進める。

(分子科学研究所)

分子科学分野において、光・X線・電子線・磁場等の外場、極低温等を利用する最先端の物理化学的方法、分子物質の設計・合成手法、超高速計算機による理論シミュレーション等を駆使し、分子及び分子集合体の構造・機能等に関する実験研究並びに理論研究を行う。

理論分子科学研究系を中心に理論分子科学の研究を展開する。特に、機能性分子や分子機能の開発と制御、多電子ダイナミクス、統計力学理論と蛋白質計算、光誘起現象などの研究をさらに展開していく。

分子構造研究系、電子構造研究系を中心に、様々な微粒子や分子系への電場分布計測法の適用、固体系における分子内振動波束の相対位相発展の最高空間・時間分解能での観測等を試みる。また、高強度光を利用した量子状態操作、低侵襲的生体イメージング手法の開発等の研究を行う。

分子制御レーザー開発センター及び極端紫外光研究施設に関連している研究系・研究施設の連携により、エクストリーム・フォトリクス連携事業及び極端紫外光利用研究を推進するとともに、マイクロ固体フォトリクス、近接場時間分解分光法やアト秒コヒーレント制御法の開発、超高分解能光電子分光法や軟X線発光分光法の開発などの研究をさらに進める。

分子集団研究系、相関領域研究系、分子スケールナノサイエンスセンター、錯体化学実験施設を中心に、高誘電性ポーラス有機物質の開発と電荷秩序系分子導体の物性解明、機能性ナノ構造体の構築、高立体選択的触媒や環境調和型触媒と水の光分解や小分子活性化触媒の開発、新規非平面共役分子と新規柔軟ナノ分子の開発等を目標に研究を進める。

計算分子科学研究系、計算科学研究センターを中心に、分子動力学法等に対する巨大計算手法の開発をさらに進め、巨大系や複雑系、複合系に対する分子科学研究を引き続き行う。

(2) 研究実施体制等の整備に関する目標を達成するための措置

本機構の研究連携委員会及び研究連携室において、研究所等間の研究連携並びに研究交流の促進を図る。また、研究連携室の主導で、機構内分野間の連携による新分野形成に向けた活動を実施する。

知的財産委員会を中心に知的財産の創出・取得・管理・活用を積極的に行うためのシステム整備について、検討する。

各研究所等は、引き続き自己点検、外部評価等のあり方について検討を行い、運営会議に諮る。

各研究所は、ポストドクトラル・フェローシップを維持して、若手研究者の育成に更に努める。

他研究機関、大学、企業との研究者交流等の促進のため、研究連携委員会及び研究連携室において、広く開放されたシンポジウム等を企画・実施する。

本機構内の共通施設、センターとの兼担制度をさらに充実させる。

各分野間連携の更なる進展を目指して、岡崎統合バイオサイエンスセンターでは、膜蛋白質・生命環境等を統合的に捉えるバイオサイエンス研究を継続して展開し、研究所等間及び他研究機関との研究連携を更に強化する。

各分野の特記事項を以下に示す。

(国立天文台)

プロジェクト研究の推進に関して適切な責任と計画性を発揮できる体制としての、プロジェクト室の充実を一層図る。このため、各室の成果発表会を開催して、計画の進捗状況を自己点検すると共に、外部委員も含む研究計画委員会により評価を行う。また、財務委員会により、予算配分のための審査等を行う。

天文学データ解析計算センター検討ワーキンググループの検討結果を踏まえ、組織改革等を実施する。また、水沢観測所及びVERA観測所は、より活発な研究推進を目指して、適切な組織変更を実施する。

基盤的研究や個人の自由な発想に基づく研究を推進する体制の充実を引き続き図る。

(核融合科学研究所)

中期計画を確実に遂行するため、これまでに見直しを行った大型ヘリカル研究部などの組織では更なる研究体制の充実を図る。更に、集約的研究成果を生み出すため、柔軟かつ有機的な運営が可能な組織を目指して、理論・シミュレーション研究センターと計算機・情報ネットワークセンターを見直し、新たな組織改編を行う。

大学等との連携協力体制の強化に加え、大学等における研究への支援体制を強化する。また、本機構内の連携研究と産業界との共同研究の促進、研究支援体制の強化を図り、今後の展開に対応できるよう円滑な運用を行う。

慣性核融合研究分野での連携協力を進めるため、以下のとおり実施する。

1. 大阪大学レーザーエネルギー学研究センターと共同で、レーザー核融合の連結階層シミュレーション研究を推進する。

2. 大阪大学レーザーエネルギー学研究センターと共同で高速点火実験用クライオターゲットの研究開発を引き続き行う。

連携研究推進センター学術連携研究室国際連携研究部門を中心に国際共同研究支援を行う。

(基礎生物学研究所)

客員研究部門を流動的に活用し、重点研究を推進する。また、助教授クラスの若手研究者による独立した研究室の運営をさらに支援する。

研究の発展が著しい研究部門に、所長のリーダーシップにより、非常勤研究員等の配置や傾斜的な経費配分を行うなど、特に配慮した支援を継続して行う。

萌芽的な研究テーマについて、基礎生物学研究所研究会などを年に数回開催して、研究者間の情報交換、共同研究を促進する。

「重点共同利用研究」の推進のため公開の研究会を開催する。また、EMBL(欧州分子生物学研究所)との共同研究事業の一環として国際シンポジウムを今年度2回開催する。

(生理学研究所)

新領域開拓を目指す討論の場として生理学研究所研究会等を開催する。予想以上に急速な展開をした若手研究者の研究に対する支援を行う。

発展が期待される研究テーマについて一般共同研究を広く公募によって設定するとともに、特に重要と考えられる研究領域には計画共同研究として設定し共同利用研究を強力に推進する。

新たな研究領域の開拓のために、研究組織体制の整備を行う。行動・代謝分子解析センターの整備、充実を図る。

(分子科学研究所)

専任の客員部門である先導分子科学研究部門において、先導的研究をさらに進展させるための設備を整備する。

計算分子科学と分子理論の融合研究、レーザーあるいはシンクロトロン放射を活用した新しい光分子科学の開拓、分子ナノサイエンス研究の推進などを実施するために、研究系と施設の連携を強化し、関連研究設備の利用促進と整備を引き続き行う。

2 共同利用等に関する目標を達成するための措置

(1) 共同利用等の内容・水準に関する目標を達成するための措置

引き続き、共同利用・共同研究(以下「共同利用等」という。)の内容や水準を向上させるための基本的方策(募集の内容、周知の方法、フィードバックシステムを含む)を策定し、具体的運営に関して、運営会議に諮りつつ推進する。

大型装置や大型施設を活用した共同利用等を推進する公募、審査、報告のスケジュールの決定、並びに募集要項等を引き続き整備する。また、共同研究の相手方機関の設備・研究環境も活用できるよう、必要に応じて本機構研究者を派遣する等、双方向性のある研究体制の整備を更に進め、実施する。

共同利用公募に関して必要分野ごとに審査委員会を設置して、審査によりテーマを採択する。共同利用等の運用全般について外部委員を含む委員会で検証し運用に反映させる。

国際戦略本部における各分野の国際的窓口機能を向上させ、国際共同研究及び国際協定に基づいた様々な研究活動の積極的な展開を図るとともに、成果の分析等によって、更なる活動の強化を図る。

共同利用等の実施、募集、成果等について本機構全体及び各研究所等のホームページをより整備するなど情報公開を積極的に行い、新たな利用者や研究者の発掘に努めるとともに、利用者の便宜を更に図る。

情報ネットワーク等インフラストラクチャーの改善を行い、共同利用等の環境整備を行う。また、分子科学研究所においては化学系汎用機器共同利用ネットワークの各地域拠点・全国拠点の組織化に向けた活動を行う。

各分野の研究者コミュニティの参画を得て、利用者の要望を一層取り入れた共同利用等の計画の具体的検討を行う。

分野間連携における学際的・国際的研究拠点の形成に向けて、国内外との共同利用等を通じて学際的な研究を推進する。

高度な実験装置・観測装置の開発整備、増強、改良を進め、共同利用等に提供する。

各分野の特記事項を以下に示す。

(国立天文台)

ハワイ観測所、野辺山宇宙電波観測所、野辺山太陽電波観測所、VERA観測所、岡山天体物理観測所、水沢観測所、太陽観測所、天文学データ解析計算センター、先端技術センターは、活発で円滑な共同利用等のための体制を整え、運営に当たる。観測計画等は、広く国内外に公募し、運営会議の下に置かれた関連専門委員会において、透明性が高く厳正な審査を実施し、高い科学的成果が期待される観測計画等を採択する。

アルマ計画について、欧米との協力を図り、国内コミュニティの協力を得ながら、引き続き建設を進めていく。また、東アジア地域におけるアルマ計画での協力関係の確立に向けて協議を進める。

「Solar-B科学センター」(仮称)を立ち上げ、衛星により取得された科学データを共同利用に供して、科学的成果の促進を図る。

東アジアVLBI網計画のために設立された国際委員会(日本、中華人民共和国及び大韓民国)などを通じて積極的に国際協力を進める。

系外惑星探査プロジェクトの国際共同研究開発を行う。

(核融合科学研究所)

LHDを用いた共同利用等の実施に際しては、特に次のような点について整備を図る。

1. 共同研究の成果報告会等を行い、研究内容を広く公開し、共同研究に関する委員会での審査に反映させる。これにより、研究水準の向上を図る。

2. 共同研究の採択審査時に、実験実施の可能性も含め、LHD実験の実施責任者の意見を求め、共同研究者が実験に参加し易いようにする。一旦共同研究として受け入れた後は、遠隔実験参加システムを活用する等して、所内と同等に近い研究環境を提供し、共同研究の更なる発展を図る。

大型シミュレーション研究を推進するため、以下の事項を推進する。

1. 連結階層シミュレーションモデルの共同研究を積極的に推進する。このために、Super SINETの増強を行う。

2. シンポジウム・講習会・報告会等の開催による大型シミュレーションの普及及び研究交流を進め、若手研究者の育成に努める。

基礎プラズマ科学研究を推進する体制の充実を図るとともに、共同研究委員会の下に組織された研究会や作業会を計画的に開催し、研究者間の情報交換の迅速化、若手研究者・大学院学生の育成を図る。

引き続き、炉工学関連実験設備充実、大学等の設備の有効活用、人材の相互交流による炉工学分野の共同利用等機能の活性化を図る。

(基礎生物学研究所)

研究の進展により利用者からの要望である波長可変レーザー光による光照射システムの導入に向けて、準備を進める。

生物学の新領域の開拓を目指して、引き続き、OBC(Okazaki Biology Conference)を開催する。重要なテーマについては連続して開催することにより、研究の進展に合わせた議論の継続性を保つ。

共同利用研究の施設として設置した形質転換生物研究施設は、前年度に引き続き、複数の助教授クラスの研究教育職員による運営体制を維持するとともに、予算配分の重点化を行う。また、培養育成施設などの研究支援施設の効率よい運営体制の整備を行う。

(生理学研究所)

共同利用施設である明大寺地区動物飼育施設のSPF(Specific Pathogen Free=特定病原体に感染していない)化等の実験動物飼育環境の整備を行う。

計画共同研究の一環としてトランスジェニックラット、遺伝子ノックアウトマウスを作成する。また、遺伝子欠失ラット作成のための技術開発を進める。

文部科学省ナショナルバイオリソースプロジェクトの支援を得て、研究用ニホンザルの繁殖・供給体制を整備し、供給を開始する。

(分子科学研究所)

先端的光科学研究設備を整備して高度な共同利用等を推進する。

1. 理化学研究所とのエクストリーム・フォトンクス連携事業などの連携研究・共同研究を通じて、分子制御レーザー開発センターや関連研究系が中心となって、先端的なレーザー分子科学研究の強化を図る。
2. 小型の先端的リング型放射光源施設としては世界一の高輝度性を有する極端紫外光研究施設の性能を最大限引き出した高分解能な光電子分光設備や軟X線発光分光設備を整備し、国内外の放射光科学における高度な共同利用等の推進を図る。
超高速コンピュータ網形成プロジェクト(NAREGI)のグリッド実証研究を進めるとともに、平成18年度にスタートする「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」におけるアプリケーションソフトの提案および開発を開始する。また、計算科学研究センターに超高速分子シミュレータを導入して、大規模計算の全国共同利用と共同研究を引き続き推進する。
先端的分光分析・物性評価設備の充実を図るとともに、高度な共同利用等を推進するための支援体制を強化する。
 1. 世界最高レベルの高磁場核磁気共鳴装置の機能拡充を行うなど、磁気共鳴を原理とする先端的分光分析・物性評価設備を整備して共同利用等の強化を図る。
 2. 微細加工など高度な要素技術を活かして、特徴ある分子科学研究の共同利用等を支援する体制を構築する。

(2) 共同利用等の実施体制等に関する目標を達成するための措置

本機構全体として、活発な共同利用等の実施体制に関して以下のような措置をする。

実験・観測のための機器開発を行える環境を引き続き整備する。大学・学会等と広く協力して、共同利用等の計画の採択、実施体制の検討を行うために、外部委員を含んだ委員会を設置して、資源配分の公平性と透明性の向上を図る。

共同利用等の計画の採択の際に萌芽的研究の推進の観点も充分考慮する。

共同利用等の成果は、学術雑誌、出版物、ホームページ等多様なメディアを利用して公表し、年度の成果をまとめた形で広く社会に周知する。

分野間連携に係るシンポジウム等を引き続き企画・実施する。

共同利用等の外部評価の結果について、今後の運用に反映させる。

技術職員の技術力向上のため、研修等の充実を図る。

特別共同利用研究員等若手研究者に対する研究支援を強化する。

共同利用者の宿泊施設について、付帯設備等の充実を検討し利便性の向上を図る。

国内外の共同研究者に対して実験・観測データの公開を進める。

各分野の特記事項を以下に示す。

(国立天文台)

新たな共同利用施設の構築を目指してアルマ計画を継続して推進する。

(核融合科学研究所)

共同利用・共同研究の一般共同研究、LHD計画共同研究、双方向型共同研究の3つのカテゴリーを利用して、共同利用・共同研究をより自由に、推進する。即ち、研究所からの委託研究として大学等を行う双方向型共同研究、大学等からの研究者が研究所の設備を使って行う一般共同研究、LHDを主体としたLHD計画共同研究により、研究所を中心としたあらゆる形態の共同利用・共同研究に対応する。

3 教育に関する目標を達成するための措置

(1) 大学院への教育協力に関する目標を達成するための措置

各研究所等に設置された総合研究大学院大学の各専攻会議において、大学院教育を一層充実させるための検討を継続して行う。全ての専攻で5年一貫制大学院教育を導入し新しい入試制度とカリキュラムを実施する。これによって、自然科学の広い視野と知識を備えた若手研究者の育成を強化する。

8専攻の教員約330名が学生170名に対し、講義、単位認定、学位授与に加えて、各種セミナーによる総合的大学院教育を行う。東京大学大学院理学系研究科、名古屋大学大学院理学研究科、同工学研究科、北海道大学大学院工学研究科等との間で、緊密な連携のもとに大学院教育を行う。

各研究所等の研究教育職員は、要請に応じて特別共同利用研究員として学生を受託し、大学院教育を行う。(平成18年度は、100名程度)

約160名の大学院生をリサーチアシスタントとして採用し、高度な研究能力を備えた研究者育成を行う。

他専攻との単位互換制度を維持する。

カウンセリングを相談窓口で実施する。

(2) 人材養成に関する目標を達成するための措置

本機構は以下のように、各種ポストドクトラル・フェローシップを整備し、若手研究者の育成と流動化の促進に一層努める。

ポストドクトラルフェローの進路先について調査し、各年度に公表する。

ホームページなどで求人(公募)一覧を掲載するなど、広い分野から人材発掘を可能にするように取り組む。

外部資金獲得に努力し、大学院生・博士号取得者支援を充実させる。

各分野の特記事項を以下に示す。

(基礎生物学研究所)

第20回基礎生物学研究所バイオサイエンストレーニングをアジア・オセアニア諸国の受講生も含む約10名を対象とする国際的なコースへと発展させる。

(生理学研究)

生理科学分野の実験技術の向上を目指し、2006年7～8月に第17回生理科学実験技術トレーニングコースを開催する。

(核融合科学研究所・分子科学研究所)

学生の休みを利用した「夏の体験入学」や「アジア冬の学校」を引き続き実施し、国内外の学部学生、大学院生を対象として研究教育体験を通じた人材発掘とそのための広報活動を積極的に行う。

4 その他の目標を達成するための措置

(1) 社会との連携、国際交流等に関する目標を達成するための措置

以下のように、社会との連携や国際協力等に関して具体的な計画を推進する。

本機構及び各研究所等のホームページ、広報誌等を更に充実する。大学共同利用機関の理解を深めるための広報活動を充実する。

知的財産、利益相反等に関する事項を検討する体制を引き続き整備するとともに、職員の知的財産等に関する理解を深めるための活動を行い、産学官連携を促進する。

各種審議会や学会・地方公共団体の委員会等に積極的に参加する。講演会、ホームページ、各種資料等を通じて広く一般社会への情報発信に努める。情報発信の状況及び効果についても調査を行う。

一般向けの講演会を開催するとともに、スーパーサイエンスハイスクール及びサイエンスパートナープロジェクトの取り組み等に協力する。また、教員、各分野の専門家の生涯教育に貢献する。

研究成果は学術雑誌に論文として発表するとともに、様々な情報発信媒体（ホームページ、パンフレット、解説資料等）を通じて積極的に公表する。

研究所等間の連携を考慮しつつ、国際シンポジウム・国内研究会を積極的に実施し、国内研究者の研究活動を更に支援する。

海外の国際的な中核研究機関との連携を強化するとともに、科学技術協力事業、二国間、多国間事業等、いろいろなレベル・規模の国際共同研究事業を更に推進する。その状況を調査し年度報告として公表する。

海外研究者、留学生等の受入れに関する情報の英語化等、広報活動の一層の充実を図るとともに、生活環境の整備を行う。

（２）その他

他の大学共同利用機関法人並びに総合研究大学院大学と連携し、アクセス可能な電子ジャーナル利用の更なる充実を図る。各分野の情報センターとしての機能を拡充する。

本機構、研究所等間のネットワーク等の整備を行い、情報連絡の効率的運用を図る。情報セキュリティを向上させるための体制を引き続き整備する。

II 業務運営の改善及び効率化に関する目標を達成するためにとるべき措置

1 運営体制の改善に関する目標を達成するための措置

本機構に設置された研究所長等を含む機構会議を引き続き、ほぼ毎月開催し、また、外部有識者からの意見も積極的に取り入れ、機構運営の適切化を図る。

教育研究評議会、機構会議及び研究連携委員会において研究需要への対応や新分野開拓について引き続き検討する。

経営協議会等における外部有識者の意見を踏まえ、必要な業務運営の一層の改善、効率化を行う。

機構長のリーダーシップの下に戦略的な運営を図るための経費を引き続き措置する。

研究所長等は、副所長、研究総主幹、研究主幹・施設長等とともに研究体制・共同利用体制の一層の充実を図る。

分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所では教授会議を毎月１回（８月を除く）定例で開催する。

研修機会の更なる充実を図るとともに、技術職員の研究発表会等を企画し、積極的な参加を促す。職員に対し、情報処理に関する研修を実施する。

内部監査計画を策定し、計画的な内部監査を実施するとともに、監事監査及び監査法人監査の結果を踏まえ、必要な改善を引き続き行う。

2 研究組織の見直しに関する目標を達成するための措置

各研究所等に設置された運営会議において、研究組織の自己点検及び外部評価を行い、教育研究評議会で見直しを聴取し、必要な場合は見直しを実施する。

外部委員を含む自己点検・評価の結果を踏まえ、研究体制について見直す。

各分野における基盤研究推進や共同利用推進に適した研究体制及びプロジェクト型研究に適した研究体制の点検をコミュニティの意見を反映させて年度ごとに行う。

3 職員の人事の適正化に関する目標を達成するための措置

研究教育職員の採用は原則として公募制により実施し、その人事選考は外部委員を含む運営会議で行い、透明性・公平性の確保を図る。

各研究所等に適した任期制を継続して、研究教育職員の流動化・活性化を図る。また、分子科学研究所においては内部昇格禁止の制度を継続する。

外国人研究者の採用を促進して、国際的な研究機関として広い視点を取り込む。

事務職員について、大学、研究機関等との人事交流を継続しつつ、本機構職員の能力向上に努める。

技術職員及び事務職員について、地区ごとに実施される国立大学等職員採用試験制度に参加するとともに、専門性の高い職種については、選考採用による人材の確保も検討する。

技術職員及び事務職員に係る勤務評価制度の改善について引き続き検討を行う。

「行政改革の重要方針」（平成17年12月24日閣議決定）において示された総人件費改革の実行計画を踏まえ、概ね1%の人件費の削減を図る。

4 事務等の効率化・合理化に関する目標を達成するための措置

業務の見直しを行い、法人業務に適した事務組織への改組を行うとともに、共通的な事務について、集約化に関する検討を行う。

業務の見直し・再点検を行い、チェック機能の確保に留意しつつ、費用対効果の観点から事務の一層の簡素化・合理化を進める。

経常的業務等について、費用対効果を勘案しつつ、外部委託の推進に努める。

事務情報システムの基盤強化について引き続き検討を行う。

テレビ会議システムをより一層活用し、業務打合せ等の効率化を図るとともに、事務の電子化によりペーパーレス化について検討する。

文書管理月間を設定し、定期的な文書整理を行い、適切な文書管理を推進する。

III 財務内容の改善に関する目標を達成するためにとるべき措置

1 外部研究資金その他の自己収入の増加に関する目標を達成するための措置

講演会の開催等により研究成果等の広報普及に一層努める。外部資金獲得のための情報収集に努めるとともに説明会を実施する。

知的財産に関する組織体制の整備を進めるとともに、各研究所等において、知的財産に関する講習会等を引き続き開催し、知的財産等に関する知識・ルールの徹底を図る。

2 経費の抑制に関する目標を達成するための措置

電子ファイル、電子メール等を活用し、ペーパーレス化を促進するとともに、会議、連絡等に係る管理部門における紙の使用量の削減に一層努める。

引き続き省エネルギーに配慮した設備等の導入を図るとともに、節電、節水や冷暖房の適切な温度管理を行い、一層の省エネルギー化に努める。

- 3 資産の運用管理の改善に関する目標を達成するための措置
 資産の運用管理について外部専門家の意見を聞き、体制の整備を引き続き行う。
 資産の管理状況の点検について、財務会計システムの活用などにより、更なる充実を図る。
- IV 自己点検・評価及び当該状況に係る情報の提供に関する目標を達成するための措置
 - 1 評価の充実に関する目標を達成するための措置
 自己点検及び外部評価の結果に対する経営協議会、教育研究評議会の意見を踏まえて、機構会議及び運営会議において具体的施策を検討する。
 機構会議等において、中期計画等の見直しについて検討する。
 - 2 広報及び情報公開等の推進に関する目標を達成するための措置
 情報公開委員会において、情報公開法に基づく情報公開請求に適切に対応する。
 事務局及び各研究所等の広報担当者により報道機関等への研究成果の公表を積極的に行う。
 国立天文台のアマチュア天文学者、天文愛好家向けの窓口活動を継続する。三鷹ネットワーク大学を活用して、地域社会への情報発信、生涯教育に努める。4次元デジタル宇宙ドームシアターの運用を開始する。
 本機構の諸活動について情報発信するためのホームページや広報誌等を更に充実させる。ホームページのアクセス数は、機構全体で年間2,000万件程度を目安とする。
 本機構の年次報告書及び環境報告書を作成し、本機構の活動実績について、ホームページ等を活用し、公表する。
 職員の倫理、セクシュアルハラスメント、機器調達契約等の守るべきガイドラインを一層周知徹底し、必要に応じて改定する。
 各研究所等は、研究成果について年次報告を作成し、活動実績について、大学を始め関係機関等へ周知する。
 研究所等の一般公開を定期的実施し、参加者やスタッフのアンケート調査等の結果を踏まえて、公開内容や公開方法の改善に引き続き努める。
 一般市民向け公開講演会を年5回程度実施して科学の普及活動に努める。また、地域社会と連携した一般市民向けの公開講座を実施する。更に科学館等における研究活動の紹介や地域の学校との教育連携活動を実施する。
 各研究所等で研究所アーカイブスあるいは研究活動の記録を引き続き整備する。
- V その他業務運営に関する重要目標を達成するためにとるべき措置
 - 1 施設設備の整備等に関する目標を達成するための措置
 施設マネジメント方針に基づき施設実態調査を行い、施設の有効活用を推進する。
 施設設備の定期的な点検により、緊急度の高いものより計画的に施設整備を行う。
 省エネルギー対策及びリサイクル材の使用に努める。構内バリアフリー化をより一層推進する。
 施設の安全で効率的な管理・運営のため、施設・設備の利用計画、維持管理計画の作成・見直しを引き続き行う。
 - 2 安全管理に関する目標を達成するための措置
 安全衛生連絡会議を引き続き開催するとともに、各研究所等においても引き続き安全衛生委員会を開催し、安全管理に必要な健康診断・作業環境測定・定期自主検査・作業場の巡視等を計画的に実施する。
 危機管理体制の充実を図るとともに、各研究所等において安全管理に関する対応マニュアルの見直しを引き続き行う。
 各種保険等の契約内容を引き続き見直し、更なる充実を図る。
 定時退勤日を設けるなど勤務時間の適正化に引き続き努めるとともに、引き続きメンタルヘルスに係る対策等を行う。
 講習会に引き続き積極的に参加させ、種々の資格取得者の育成を図る。

7 . 資料

7-1 評議員 (1976 ~ 1981)

氏名・所属 (当時)	1976.1.10 ~ 1978.1.9	1978.1.10 ~ 1980.1.9	1980.1.10 ~ 1981.4.13
小谷 正雄 東京理科大学長	○	○	○
長倉 三郎 東京大物性研教授	○	○	○
石塚 直隆 名古屋大学長	○	○	○
梅棹 忠夫 国立民族学博物館長	○	○	○
岡村 総吾 東京大工教授	○	○	○ (日本学術振興会理事)
ハインツ・ゲリシャー マックス・プランク財団 フリッツ・ハーバー研究所長	○	○	
柴田 承二 東京大薬教授	○	○ (東京大名誉教授)	○
関 集三 大阪大理教授	○		
田島弥太郎 国立遺伝学研究所長	○	○	○
田中 信行 東北大理教授	○		
福井 謙一 京都大工教授	○	○	○
伏見 康治 名古屋大名誉教授	○	○ (日本学術会議会長)	○
ゲルハルト・ヘルツベルグ カナダ国立研究所 ヘルツベルグ天体物理学研究所長	○		
森野 米三 相模中央化学研究所長	○	○	○ (相模中央化学研究所 最高顧問理事)
山下 次郎 東京大物性研究所長	○		
湯川 泰秀 大阪大産業科学研教授	○	○ (大阪大名誉教授)	○ (大阪女子大学長)
渡辺 格 慶應義塾大医教授	○	○	○
植村 泰忠 東京大理教授		○	○
メルビン・カルビン カリフォルニア大学 ケミカル・ヴィオダイナミックス研究所長		○	○
神田 慶也 九州大理学部長		○	○ (九州大学長)
齋藤 一夫 東北大理教授		○	○
ジョージ・ポーター 英国王立研究所教授化学部長			○

7-2 評議員（1981～2004）

氏名	所 属	第1期 '81.6.1～ '83.5.31	第2期 '83.6.1～ '85.5.31	第3期 '85.6.1～ '87.5.31	第4期 '87.6.1～ '89.5.31	第5期 '89.6.1～ '91.5.31	第6期 '91.6.1～ '93.5.31	第7期 '93.6.1～ '95.5.31	第8期 '95.6.1～ '97.5.31	第9期 '97.6.1～ '99.5.31	第10期 '99.6.1～ '01.5.31	第11期 '01.6.1～ '03.5.31	第12期 '03.6.1～ '04.3.31
赤松 秀雄	東大名誉教授， 分子研名誉教授	○	○	○	○'88.1.8 死亡								
石川 忠雄	慶應大学長	○											
石塚 直隆	名大学長	○'81.7.22											
飯島 宗一	名大学長	○'81.9.1～	○	○	○'87.7.21								
植村 泰忠	東大理教授， 東京理大教授	○	○	○									
神田 慶也	九大学長	○											
小谷 正雄	東京理科大学長	○											
小松 登	豊田中研所長	○	○										
齋藤 一夫	東北大理教授， 国際基督教大教授	○	○'84.5.15			○	○	○					
榊 米一郎	豊橋技科大学長	○	○'84.3.31										
島村 修	相模中央研最高顧問 理事	○	○										
田島弥太郎	遺伝研所長	○											
馬場 宏明	北大応電研所長	○	○	○	○								
福井 謙一	京大工教授， 京都工繊大学長， 基礎化学研究所長	○	○	○	○	○	○						
藤巻 正生	お茶女大家政教授， お茶女大学長	○	○	○									
向坊 隆	東大名誉教授	○											
森 大吉郎	宇宙研所長	○	○'83.11.25 死亡										
亀谷 哲治	星薬科大学長		○	○									
角戸 正夫	姫路工大学長		○	○									
本多 波雄	豊橋技科大学長		○'84.4.16～	○	○	○							

氏 名	所 属	第1期 '81.6.1 ~ '83.5.31	第2期 '83.6.1 ~ '85.5.31	第3期 '85.6.1 ~ '87.5.31	第4期 '87.6.1 ~ '89.5.31	第5期 '89.6.1 ~ '91.5.31	第6期 '91.6.1 ~ '93.5.31	第7期 '93.6.1 ~ '95.5.31	第8期 '95.6.1 ~ '97.5.31	第9期 '97.6.1 ~ '99.5.31	第10期 '99.6.1 ~ '01.5.31	第11期 '01.6.1 ~ '03.5.31	第12期 '03.6.1 ~ '04.3.31
田中 郁三	東工大理教授,理学部長, 学長,学位授与機構長	○	○	○	○	○	○						
中嶋 貞雄	東大物性研所長	○											
小田 稔	宇宙研所長	○	○	○	○								
斎藤 喜彦	慶應大理工教授		○	○	○								
森田 正俊	豊田中研代表取締役		○	○	○	○							
伊東 楸	東北大理教授, 徳島文理大薬教授			○	○	○							
鈴木 進	東北大金材研所長			○									
豊沢 豊	東大物性研所長, 中央大理工教授			○	○	○	○						
平野 龍一	東大名誉教授			○	○								
藤田 栄一	大阪薬科大学長, 京大名譽教授				○	○							
西原 春夫	早稲田大学総長				○	○							
倉田 道夫	三菱瓦斯化学(株)顧問				○	○	○	○					
朽津 耕三	長岡技科大教授, 城西大理教授				○	○	○						
田丸 謙二	東京理科大理教授				○	○	○						
早川 幸男	名大学長				○	○	○	○					
千原 秀昭	阪大理教授,(社)化学 情報協会専務理事				○	○	○	○					
米澤貞次郎	近畿大理工学総合研教 授,近畿大理工教授				○	○	○	○					
赤池 弘次	統計数理研究所長					○	○	○					
三ヶ月 章	日本学術振興会学術相談 役,東大名譽教授					○	○	○					
伊藤 昌壽	東レ(株)相談役最高顧問						○	○	○				
佐々木慎一	サイエンスクリエイト (株)常任顧問						○	○	○				
佐野 博敏	東京都立大学長						○						
櫻井 英樹	東北大理学部長, 東北大理教授						○	○					
松永 義夫	神奈川大理教授						○	○	○				
秋本 俊一	学士院会員							○	○				

氏名	所属	第1期 '81.6.1～ '83.5.31	第2期 '83.6.1～ '85.5.31	第3期 '85.6.1～ '87.5.31	第4期 '87.6.1～ '89.5.31	第5期 '89.6.1～ '91.5.31	第6期 '91.6.1～ '93.5.31	第7期 '93.6.1～ '95.5.31	第8期 '95.6.1～ '97.5.31	第9期 '97.6.1～ '99.5.31	第10期 '99.6.1～ '01.5.31	第11期 '01.6.1～ '03.5.31	第12期 '03.6.1～ '04.3.31
岩村 秀	九大有機化学基礎研究センター教授							○	○				
加藤 延夫	名大総長							○	○	○			
黒田 晴雄	東京理科大総合研究教授							○	○	○			
塩野 宏	成蹊大法教授							○	○	○			
田中 久	前京都薬科大学長							○	○				
堀 幸夫	金沢工業大副学長							○	○				
森本 英武	(株)豊田中央研顧問							○	○				
守谷 亨	東京理科大理工教授							○	○				
大瀧 仁志	立命館大理工教授								○	○			
清水 良一	統数研所長								○	○	○		
田隅 三生	埼玉大理教授，理学部長								○	○			
土屋 莊次	早稲田大理工学総合研究センター客員教授								○	○	○	○	
又賀 司	(財)レーザー技術総合研第5研究部長								○	○			
丸山 和博	京都工繊大学長									○	○	○	
大塚 榮子	(独)産業技術総合研フェロー									○	○	○	
京極 好正	(独)産業技術総合研生物情報解析研究センター長									○	○	○	
後藤 圭司	豊橋技科大学長									○	○	○	○
高橋 理一	(株)豊田中央研代表取締役所長									○	○	○	○
中西 敦男	学術著作権協会常務理事									○	○	○	○
細矢 治夫	お茶水女子大理教授									○	○	○	○

氏名	所属	第1期 '81.6.1 ~ '83.5.31	第2期 '83.6.1 ~ '85.5.31	第3期 '85.6.1 ~ '87.5.31	第4期 '87.6.1 ~ '89.5.31	第5期 '89.6.1 ~ '91.5.31	第6期 '91.6.1 ~ '93.5.31	第7期 '93.6.1 ~ '95.5.31	第8期 '95.6.1 ~ '97.5.31	第9期 '97.6.1 ~ '99.5.31	第10期 '99.6.1 ~ '01.5.31	第11期 '01.6.1 ~ '03.5.31	第12期 '03.6.1 ~ '04.3.31
本多 健一	東京工芸大学長									○			
安岡 弘志	東大物性研所長									○		○	
山崎 敏光	理化学研RIビーム科学 研究室研究協力員									○			
荻野 博	放送大学宮城学習セン ター所長									○		○	
木原 元央	高エネルギー加速器研究 機構加速器研究施設長									○			
近藤 保	豊田工業大客員教授									○		○	
佐原 眞	国立歴史民俗博物館長									○		○	
廣田 襄	京大名誉教授									○		○	
福山 秀敏	東大物性研所長									○		○	
松尾 稔	名大総長									○			
山村 庄亮	慶應大名誉教授									○		○	
蟻川 芳子	日本女子大理教授									○		○	
飯吉 厚夫	中部大学長									○		○	
石谷 炯	(財)神奈川科学技術ア カデミー専務理事									○		○	
海部 宣男	国立天文台長									○		○	
木村 嘉孝	高エネルギー加速器研 究機構物質構造科学研 究所長									○			
北川源四郎	統計数理研究所長											○	
木下 實	東大名誉教授											○	
小間 篤	高エネルギー加速器研 究機構物質構造科学研 究所長											○	

7-3 外国人評議員（1976 ～ 2004）

Heinz Gerischer（マックス・プランク財団フリッツハーバー研究所長）'76.1 ～ '80.1

Gerhart Herzberg（カナダ国立研究所ヘルツベルグ天体物理学研究所長）'76.1 ～ '78.1

George Porter（英国王立研究所教授 化学部長）'80.1 ～ '83.5

Melvin Calvin（カリフォルニア大学ケミカル・ヴィオダイナミックス研究所長）'78.1 ～ '82.1

Per-Olov Löwdin（フロリダ大学教授）'83.6 ～ '86.5

Michael Kasha（フロリダ州立大学教授）'82.1 ～ '85.5

George Clau De Pimentel（カリフォルニア大学教授）'85.6 ～ '86.5

Robert Ghormley Parr（ノースカロライナ大学教授）'86.8 ～ '89.5

Manfred Eigen（マックス・プランク物理化学研究所・ゲッチンゲン工科大学教授）'86.8 ～ '87.12

John Charles Polanyi（トロント大学教授）'89.6 ～ '94.5

Heinz A. Staab（マックス・プランク財団会長）'88.1 ～ '91.5

Peter Day（オックスフォード大学教授・Laue-Paul Langevin 研究所長）'91.6 ～ '95.5

Mostafa Amr El-Sayed（ジョージア工科大学教授）'93.6 ～ '97.5

Edward William Schlag（ミュンヘン工科大学物理化学研究所長）'95.6 ～ '97.5

Raphael D. Levine（ヘブライ大学教授）'97.6 ～ '99.5

Charles S. Parmenter（インディアナ大学教授）'97.6 ～ '99.5

Wolfgang Kiefer（ビュルツブルク大学教授）'99.6 ～ '01.5

Richard N. Zare（スタンフォード大学教授）'99.6 ～ '01.5

Alexander M. Bradshaw（マックスプランク・プラズマ物理学研究所長）'01.6 ～ '03.5

William Carl Lineberger（コロラド大学教授）'01.6 ～ '03.5

Graham R. Fleming（カリフォルニア大学バークレー校教授）'03.6 ～ '04.3

Joshua Jortner（テルアビブ大学教授）'03.6 ～ '04.3

7-4 運営に関する委員会委員（1975～1981）

氏名・所属（当時）	'75.7.15～ '77.3.31	'77.4.1～ '78.3.31	'78.4.1～ '79.3.31	'79.4.1～ '80.3.31	'80.4.1～ '81.3.31
浅原 照三 芝浦工大工教授	○	○			
伊藤 光男 東北大理教授	○				
井口 洋夫 分子研教授	○	○	○	○	○
大野 公男 北大理教授	○	○	○	○	○
角戸 正夫 阪大蛋白研所長	○	○	○		
神田 慶也 九大理教授	○	○ (理学部長)	○ (~'78.11.7)		
朽津 耕三 東大理教授	○			○	
田中 郁三 東工大理学部長	○			○ (教授)	
坪村 宏 阪大基礎工教授	○				
豊沢 豊 東大物性研教授	○	○			
長倉 三郎 東大物性研教授	○	○	○	○	
中島 威 東北大理教授	○	○	○		
細矢 治夫 お茶水大理助教授	○			○	○
又賀 昇 阪大基礎工教授	○				
村田 好正 学習院大理教授	○	○ (東大物性研 助教授)	○	○	
山寺 秀雄 名大理教授	○				
吉田 善一 京大工教授	○				
和田 昭充 東大理教授	○	○			
廣田 榮治 分子研教授		○ (委員長)	○ (委員長)	○ (委員長)	○ (委員長)
伊東 椒 東北大理教授		○	○		
大木 道則 東大理教授		○	○		
大瀧 仁志 東工大総合工研教授		○	○		
馬場 宏明 北大応用電研教授		○	○		
福井 謙一 京大工教授		○	○	○	
齋藤 喜彦 東大理教授		○		○	○
諸熊 奎治 分子研教授		○	○	○	
吉原経太郎 分子研教授		○			
霜田 光一 東大理教授			○	○	
武内 次夫 豊橋技科大教授			○	○	
山本 常信 京大理教授			○	○	
岩村 秀 分子研教授			○		
坂田 忠良 分子研助教授			○		
木下 実 東大物性研助教授				○	
黒田 晴雄 東大理教授				○	○
山下 雄也 名大工教授				○	○
高谷 秀正 分子研助教授				○	
花崎 一郎 分子研教授				○	○
安積 徹 東北大理助教授					○
志田 忠正 京大理助教授					○
鈴木 洋 上智大理工教授					○
伊達 宗行 阪大理教授					○
田仲 二郎 名大理教授					○
千原 秀昭 阪大理教授					○
土屋 莊次 東大教養助教授					○
永沢 満 名大工教授					○
務台 潔 東大教養助教授					○
藤田純之佑 名大理教授					○
塚田 捷 分子研助教授					○

会長（議長） 人・人事選考部に属する運営協議員
（副）副会長（副議長） 共・共同研究専門委員会

[illegible]

氏 名	所 属	第1期 '81.5.1 ~ '83.4.30	第2期 '83.5.1 ~ '85.4.30	第3期 '85.5.1 ~ '87.4.30	第4期 '87.5.1 ~ '89.4.30	第5期 '89.5.1 ~ '91.4.30	第6期 '91.5.1 ~ '93.4.30	第7期 '93.5.1 ~ '95.4.30	第8期 '95.5.1 ~ '97.4.30	第9期 '97.5.1 ~ '99.4.30	第10期 '99.5.1 ~ '01.4.30	第11期 '01.5.1 ~ '03.4.30	第12期 '03.5.1 ~ '04.3.31
山寺 秀雄	分子研教授(客員) (名大理教授)	○	○ 人	○ (副) 人									
田仲 二郎	名大理教授	○ (共~'82.5.1)	○ 人										
伊藤 光男	東北大理教授		○ 人										
木村 雅男	北大大理教授		○ 人										
黒田 晴雄	東大理教授		○ 人										
高柳 和夫	宇宙研教授		○ 人	○									
中島 威	東北大理教授		○ 人	○									
中村 宏樹	分子研教授	○ (共~'82.5.1)	○ 人	○	○ 人	○ 人	○ 共	○ 人	○	○	共	○ 人	○ 人
丸山 有成	分子研教授(客員) (お茶女大理教授)		○	○	○	○ 人	○ 人	○					
山本 明夫	分子研教授(客員) (東工大名誉教授)		○	○	○	○							
茅 幸二	慶應大理工教授			○ 共	○ 共	○ 共							
菅野 暁	東大物性研教授			○	○								
坪村 宏	阪大基礎工教授			○ 人									
細矢 治夫	お茶女子理教授			○ 人	○ 人								
又賀 昌	阪大基礎工教授			○ 共	○ ~'88.3.31								
松永 義夫	北大大理教授			○ 人	○ 人	○ 人・共	○	○ 人	○ 人	○	○ '00.4.1~		
北川 禎三	分子研教授			○ 共	○ 人・共								
齋藤 一夫	分子研教授			○		○							
青野 茂行	金沢大院自然科学研 究科長												
安積 徹	東北大理教授				○ 人	○ 人							
原田 義也	東大教養学教授				○ 人	○ (副) 人							
松尾 拓	九大工教授				○ 共								
丸山 和博	分子研教授(客員) (京大理教授)		○		○ '88.6.1~								
大瀧 仁志	分子研教授				○ '88.4.1~	○	○ 共			○ 共	○ 共	○ 人	○ 人
葉師 久彌	分子研教授				○ '88.9.1~	○ 共	○ 人	○ 人	○ 共				

氏 名	所 属	第1期 '81.5.1 ~ '83.4.30	第2期 '83.5.1 ~ '85.4.30	第3期 '85.5.1 ~ '87.4.30	第4期 '87.5.1 ~ '89.4.30 ○~'88.3.31	第5期 '89.5.1 ~ '91.4.30	第6期 '91.5.1 ~ '93.4.30	第7期 '93.5.1 ~ '95.4.30	第8期 '95.5.1 ~ '97.4.30	第9期 '97.5.1 ~ '99.4.30	第10期 '99.5.1 ~ '01.4.30	第11期 '01.5.1 ~ '03.4.30	第12期 '03.5.1 ~ '04.3.31
木田 茂夫	分子研教授				○人	○人	○人	○'94.4.1~	○人	○人	○~'00.3.31		
岩田 末廣	分子研教授				○人	○人	○人						
志田 忠正	京大理教授				○人	○人	○人						
田隅 三生	東大理教授				○共	○人	○人						
仁科雄一郎	東北大金材研教授												
村田 好正	東大物性研教授				○	○(副)	○人	○人					
中筋 一弘	分子研教授				○	○人	○人	○(副)					
飯島 孝夫	学習院大理教授					○人	○人	○人					
伊藤 公一	大阪市立大理教授					○人	○人	○人					
小川禎一郎	九大総合理工教授					○共	○共	○共					
小尾 欣一	東工大理教授					○共	○共	○					
京極 好正	阪大蛋白研教授					○人	○人	○人	○人	○人	○共	○共	○共
田中 晃二	分子研教授					○	○	○共	○共	○共			
齋藤 修二	分子研教授					○~'92.4.1	○	○共	○人	○共			
川崎 昌博	北大電子科学研教授							○人	○人				
近藤 保	東大理教授							○人	○(副)人				
斎藤 軍治	京大理教授							○	○				
塚田 捷	東大理教授							○共	○共				
山口 兆	阪大理教授							○人	○人	○共			
宇理須恆雄	分子研教授							○	○共	○共	○	○共	○共
中村 晃	分子研教授							○					
小杉 信博	分子研教授								○人	○人	○共	○人	○人
渡辺 芳人	分子研教授								○共	○共	○人	○~'02.3.31	
大澤 映二	豊橋技科大工教授								○	○共			
生越 久靖	福井高専校長								○	○			
小谷 正博	学習院大理教授								○人	○人	○人	○共	○共
西 信之	分子研教授								○人	○人			
三上 直彦	東北大院理教授								○共	○人	○共		
岡田 正	阪大院基礎工教授									○	○共		
加藤 重樹	京大理教授									○人	○人		

氏 名	所 属	第1期 '81.5.1 ~ '83.4.30	第2期 '83.5.1 ~ '85.4.30	第3期 '85.5.1 ~ '87.4.30	第4期 '87.5.1 ~ '89.4.30	第5期 '89.5.1 ~ '91.4.30	第6期 '91.5.1 ~ '93.4.30	第7期 '93.5.1 ~ '95.4.30	第8期 '95.5.1 ~ '97.4.30	第9期 '97.5.1 ~ '99.4.30	第10期 '99.5.1 ~ '01.4.30	第11期 '01.5.1 ~ '03.4.30	第12期 '03.5.1 ~ '04.3.31
小谷野緒之助 関一彦	姫路工業大理教授 名大物質科学国際研 究会教授									共 人	共 人		
田中 武彦	九大院理教授									人	人		
籠野 嘉彦	九大院総合理工教授									人 (副)	人 (副)		
小林 速男	分子研教授									人	人	共 人	共 人
阿知波洋次	東京都立大院理教授											人共 (人'02.4.1~)	人
北原 和夫	国際基督教大教養教授											人	人
山口 宏夫	東大院理教授									人	人	人	人
松本 和子	早稲田大理工教授									人	人	人 (~'02.3.31)	人
平田 文男	分子研教授									人	人	人	人
藤井 正明	分子研教授									人	人	人	人
阿久津秀雄	阪大蛋白研教授											人 (副)人	人 (副)人
宇田川康夫	東北大多元研教授											人	人
太田 信廣	北大電子科学研教授											人	人
川合 眞紀	理化学研主任研究員											人	人
榊 茂好	九大有機化学基礎 教授											人	人
菅原 正	東大院総合文化教授											人	人
魚住 泰広	分子研教授											共 人	共 人
西川 恵子	千葉大院自然科学教授											人 '02.4.1~	人
岡本 裕巳	分子研教授											人	人
加藤 隆子	核融合科学研教授												人

7-6 自然科学研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規則

平成16年4月1日

分研規則第20号

自然科学研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規則

(趣旨)

第1条 この規則は、大学の教員等の任期に関する法律(平成9年法律第82号。以下「法」という。)第5条第2項の規定に基づき、自然科学研究機構分子科学研究所の研究教育職員の任期に関し、必要な事項を定める。

(教育研究組織、職及び任期)

第2条 任期を定めて任用する研究教育職員の教育研究組織、職、任期として定める期間及び再任に関する事項は、別表に定めるとおりとする。

(同意)

第3条 任期を定めて研究教育職員を採用する場合には、文書により、採用される者の同意を得なければならない。

(周知)

第4条 この規則を定め、又は改正したときは、速やかに周知を図るものとする。

附則

この規則は、平成16年4月1日から施行し、岡崎国立共同研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規則(平成10年岡機構規程第8号。以下「分子研規則」という。)により任期を付されて採用された者について適用する。

別表(第2条関係)

法第4条第1項第1号に掲げる 教育研究組織に該当する組織	該当する 職	分子研規則 による種別	任 期	再任に関する事項	
				可 否	任 期
分子科学研究所に置かれる研究 系及び研究施設	助手	5年に満たない 任期を残す者	分子研規則に よる残任期間	可	任期を 定めず に採用
		5年を越える 任期を残す者	5年		

7-7 自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則

平成16年4月1日

分研規則第4号

自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則

(目的)

第1条 この規則は、自然科学研究機構分子科学研究所（以下「研究所」という。）の設置目的及び社会的使命を達成するため、研究活動等の状況について自己点検・評価、及び外部の者による評価（以下「外部評価」という。）を行い、もって研究所の活性化を図ることを目的とする。

(点検評価委員会)

第2条 研究所に、前条の目的を達成するため分子科学研究所点検評価委員会（以下「委員会」という。）を置く。

2 委員会は、次に掲げる者をもって組織する。

- 一 研究所長
- 二 研究総主幹
- 三 研究主幹
- 四 研究施設の長
- 五 本部研究連携室の研究所所属の研究教育職員
- 六 技術課長
- 七 その他研究所長が必要と認めた者

3 前項第7号の委員の任期は、2年とし、再任を妨げない。

(委員長)

第3条 委員会に委員長を置き、研究所長をもって充てる。

2 委員長に事故があるときは、研究総主幹がその職務を代行する。

(招集)

第4条 委員会は、委員長が招集し、その議長となる。

(点検評価委員会の任務)

第5条 委員会は、次に掲げる事項について企画、検討及び実施する。

- 一 自己点検・評価及び外部評価の基本方針に関すること。
- 二 自己点検・評価及び外部評価の実施に関すること。
- 三 自己点検・評価報告書及び外部評価報告書の作成及び公表に関すること。
- 四 独立行政法人大学評価・学位授与機構が行う評価に係る諸事業への対応に関すること。
- 五 その他自己点検・評価及び外部評価に関すること。

（点検評価事項）

第6条 委員会は、次の各号に掲げる事項について点検評価を行うものとする。

- 一 研究所の在り方、目標及び将来計画に関すること。
- 二 研究目標及び研究活動に関すること。
- 三 大学等との共同研究体制及びその活動に関すること。
- 四 大学院教育協力及び研究者の養成に関すること。
- 五 研究教育職員組織に関すること。
- 六 研究支援及び事務処理に関すること。
- 七 国立大学法人総合研究大学院大学との関係及び協力に関すること。
- 八 施設設備等研究環境及び安全に関すること。
- 九 国際共同研究に関すること。
- 十 社会との連携に関すること。
- 十一 学術団体との連携に関すること。
- 十二 管理運営に関すること。
- 十三 学術情報体制に関すること。
- 十四 研究成果等の公開に関すること。
- 十五 財政に関すること。
- 十六 点検評価体制に関すること。
- 十七 その他委員会が必要と認める事項

2 前項各号に掲げる事項に係る具体的な点検評価項目は、委員会が別に定める。

（専門委員会）

第7条 委員会に、専門的事項について調査審議するため、専門委員会を置くことができる。

2 専門委員会に関し必要な事項は、委員会が別に定める。

（点検評価の実施）

第8条 自己点検・評価又は外部評価は、毎年度実施する。

（点検評価結果の公表）

第9条 研究所長は、委員会が取りまとめた点検評価の結果を、原則として公表する。ただし、個人情報に係る事項、その他委員会において公表することが適当でないと認めた事項については、この限りではない。

（点検評価結果への対応）

第10条 研究所長は、委員会が行った点検評価の結果に基づき、改善が必要と認められるものについては、その改善に努めるものとする。

(庶務)

第11条 委員会の庶務は、岡崎統合事務センター総務部総務課において処理する。

(雑則)

第12条 この規則に定めるもののほか、委員会の運営に関し必要な事項は、委員会の議を経て研究所長が定める。

附則

1 この規則は、平成16年4月1日から施行する。

2 この規則施行後、第2条第2項第7号により選出された最初の委員の任期は、同条第3項の規定にかかわらず、平成18年3月31日までとする。

7-8 自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則

平成16年4月1日

分研規則第5号

自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則

(設置)

第1条 自然科学研究機構分子科学研究所(以下「研究所」という。)に、研究所の将来計画について検討するため、将来計画委員会(以下「委員会」という。)を置く。

(組織)

第2条 委員会は、次の各号に掲げる委員をもって組織する。

- 一 研究所長
- 二 研究総主幹
- 三 研究所の教授数名
- 四 研究所の助教授数名
- 五 その他分子科学研究所長(以下「研究所長」という。)が必要と認めた者

2 前項第3号、第4号及び第5号の委員の任期は、1年とし、再任を妨げない。ただし、補欠の委員の任期は、前任者の残任期間とする。

3 前項の委員は、研究所長が委嘱する。

(委員長)

第3条 委員会は、研究所長が招集し、その委員長となる。

(専門委員会)

第4条 委員会に、専門的な事項等を調査検討させるため、専門委員会を置くことができる。

(委員以外の者の出席)

第5条 委員長は、必要に応じて、委員以外の者を委員会に出席させ、意見を聴取することができる。

(庶務)

第6条 委員会の庶務は、岡崎統合事務センター総務部総務課において処理する。

附則

1 この規則は、平成16年4月1日から施行する。

2 この規則施行の後最初の任命に係る委員の任期は、第2条第2項の規定にかかわらず、平成17年3月31日までとする。