

# 「分子研リポート 2006」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 組 織 .....                                                   | 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 研究顧問会議 .....                                              | 8  |
| 2-4-4 人事選考部会 .....                                              | 8  |
| 2-4-5 運営会議共同研究専門委員会 .....                                       | 9  |
| 2-4-6 学会等連絡会議 .....                                             | 9  |
| 2-4-7 教授会議 .....                                                | 10 |
| 2-4-8 主幹・施設長会議 .....                                            | 10 |
| 2-4-9 大学院委員会 .....                                              | 10 |
| 2-4-10 特別共同利用研究員受入審査委員会 .....                                   | 10 |
| 2-4-11 各種委員会等 .....                                             | 11 |
| 2-5 構成員 .....                                                   | 14 |
| 2-5-1 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 .....                                         | 34 |
| 2-8-4 人事 .....                                                  | 34 |
| 2-8-5 受賞 .....                                                  | 35 |
| 2-9 安全衛生管理室 .....                                               | 36 |
| 2-10 広報室 .....                                                  | 37 |
| 2-11 史料編纂室 .....                                                | 38 |
| 2-12 共同利用研究 .....                                               | 39 |
| 2-12-1 共同利用研究の概要 .....                                          | 39 |
| 2-12-2 2006 年度の実施状況 .....                                       | 39 |
| 2-12-3 共同利用研究実施件数一覧 .....                                       | 55 |
| 2-13 ナノサイエンス支援 .....                                            | 56 |
| 2-13-1 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<br>協力研究・施設利用について ..... | 56 |
| 2-13-2 2006 年度の実施状況 .....                                       | 57 |

|        |                                                               |     |
|--------|---------------------------------------------------------------|-----|
| 2-14   | 最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用.....                                   | 60  |
| 2-14-1 | 「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発（ナノ統合）」拠点の概要.....                  | 60  |
| 2-14-2 | 「ナノ統合拠点」の研究体制.....                                            | 61  |
| 2-14-3 | 「ナノ統合拠点」の研究課題（個人）.....                                        | 61  |
| 2-14-4 | 「ナノ統合拠点」の研究・開発スケジュール.....                                     | 64  |
| 2-15   | エクストリームフォトンクス.....                                            | 65  |
| 2-16   | 国際交流と国際共同研究.....                                              | 66  |
| 2-16-1 | 国際交流.....                                                     | 66  |
| 2-16-2 | 国際共同研究.....                                                   | 69  |
| 2-16-3 | 国際シンポジウム.....                                                 | 71  |
| 2-16-4 | アジア研究教育拠点事業.....                                              | 73  |
| 2-17   | 自然科学研究機構連携事業.....                                             | 76  |
| 2-17-1 | イメージング・サイエンス.....                                             | 76  |
| 2-17-2 | 自然科学研究機構 新分野創成型連携プロジェクト自然科学における階層と全体.....                     | 77  |
| 2-17-3 | 分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成<br>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..... | 79  |
| 2-17-4 | 自然科学研究機構シンポジウム.....                                           | 80  |
| 2-18   | 大学院教育.....                                                    | 82  |
| 2-18-1 | 特別共同利用研究員.....                                                | 82  |
| 2-18-2 | 総合研究大学院大学二専攻.....                                             | 83  |
| 2-18-3 | オープンハウス.....                                                  | 86  |
| 2-18-4 | 夏の体験入学.....                                                   | 87  |
| 2-18-5 | 総研大アジア冬の学校.....                                               | 88  |
| 2-19   | 財 政.....                                                      | 90  |
| 2-19-1 | 現員.....                                                       | 90  |
| 2-19-2 | 財政.....                                                       | 90  |
| 2-20   | 岡崎共通施設.....                                                   | 93  |
| 2-20-1 | 岡崎情報図書館.....                                                  | 93  |
| 2-20-2 | 岡崎コンファレンスセンター.....                                            | 93  |
| 2-20-3 | 岡崎共同利用研究者宿泊施設.....                                            | 93  |
| 2-20-4 | 職員会館.....                                                     | 93  |
| 2-21   | 地域社会との交流.....                                                 | 94  |
| 2-21-1 | 国研セミナー.....                                                   | 94  |
| 2-21-2 | 分子科学フォーラム.....                                                | 95  |
| 2-21-3 | 岡崎市民大学講座.....                                                 | 96  |
| 2-21-4 | 安城市民公開講座等.....                                                | 96  |
| 2-21-5 | おかざき寺子屋教室.....                                                | 97  |
| 2-21-6 | 地域の理科教育への協力.....                                              | 97  |
| 2-21-7 | 一般公開.....                                                     | 98  |
| 2-21-8 | 見学受け入れ状況.....                                                 | 100 |
| 2-22   | 知的財産.....                                                     | 102 |

### 3．研究系及び研究施設の現状 .....103

|       |              |     |
|-------|--------------|-----|
| 3-1   | 論文発表状況.....  | 103 |
| 3-1-1 | 論文の発表状況..... | 103 |
| 3-1-2 | 論文の引用状況..... | 104 |

|      |                                              |     |
|------|----------------------------------------------|-----|
| 3-2  | 理論分子科学研究系 .....                              | 105 |
|      | 分子基礎理論第一研究部門 .....                           | 105 |
|      | 分子基礎理論第二研究部門 .....                           | 111 |
|      | 分子基礎理論第三研究部門 .....                           | 116 |
| 3-3  | 分子構造研究系 .....                                | 123 |
|      | 分子構造学第一研究部門 .....                            | 123 |
|      | 分子動力学研究部門 .....                              | 130 |
| 3-4  | 電子構造研究系 .....                                | 136 |
|      | 基礎電子化学研究部門 .....                             | 136 |
|      | 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 .....                            | 153 |
| 3-6  | 相関領域研究系 .....                                | 157 |
|      | 相関分子科学第一研究部門 .....                           | 157 |
| 3-7  | 極端紫外光科学研究系 .....                             | 159 |
|      | 基礎光化学研究部門 .....                              | 159 |
|      | 反応動力学研究部門 .....                              | 166 |
| 3-8  | 計算分子科学研究系 .....                              | 175 |
|      | 計算分子科学第一研究部門 .....                           | 175 |
|      | 計算分子科学第二研究部門 .....                           | 181 |
| 3-9  | 錯体化学実験施設 .....                               | 184 |
|      | 錯体物性研究部門 .....                               | 184 |
| 3-10 | 研究施設 .....                                   | 189 |
|      | 分子スケールナノサイエンスセンター .....                      | 189 |
|      | 極端紫外光研究施設 .....                              | 220 |
|      | 分子制御レーザー開発研究センター .....                       | 230 |
|      | 安全衛生管理室 .....                                | 243 |
| 3-11 | 岡崎共通研究施設（分子科学研究所関連）.....                     | 245 |
|      | 岡崎統合バイオサイエンスセンター .....                       | 245 |
| 4    | 点検評価と課題 .....                                | 261 |
| 4-1  | 外国人運営顧問による点検評価 .....                         | 261 |
|      | 4-1-1 E. Joseph Nordgren 外国人運営顧問.....        | 261 |
|      | 4-1-2 A. Welford Castleman, Jr. 外国人運営顧問..... | 268 |
| 4-2  | 運営顧問による点検評価 .....                            | 273 |
|      | 4-2-1 加藤伸一運営顧問.....                          | 273 |
| 5    | 将来計画及び運営方針 .....                             | 275 |
| 5-1  | 分子スケールナノサイエンスセンター .....                      | 276 |
| 5-2  | 極端紫外光研究施設（UVSOR）.....                        | 277 |
| 5-3  | 分子制御レーザー開発研究センター .....                       | 281 |
| 5-4  | 装置開発室.....                                   | 283 |
| 5-5  | 計算科学研究センター.....                              | 284 |
| 5-6  | 系・施設の在り方等の検討を踏まえての現状報告.....                  | 286 |
| 5-7  | 化学系研究設備有効活用ネットワークの構築.....                    | 289 |

|                                            |     |
|--------------------------------------------|-----|
| 6 . 平成 19 年度計画 .....                       | 291 |
| 6-1 大学共同利用機関法人自然科学研究機構年度計画 (平成 19 年度)..... | 291 |
| (VI 以降を省略)                                 |     |
| 7 . 資料 .....                               | 305 |
| 7-1 評議員 (1976 ~ 1981).....                 | 305 |
| 7-2 評議員 (1981 ~ 2004).....                 | 306 |
| 7-3 運営顧問 (2004 ~ ).....                    | 310 |
| 7-4 外国人評議員 (1976 ~ 2004).....              | 311 |
| 7-5 外国人運営顧問 (2004 ~ ).....                 | 312 |
| 7-6 運営に関する委員会委員 (1975 ~ 1981).....         | 313 |
| 7-7 運営協議員 (1981 ~ 2004).....               | 314 |
| 7-8 運営会議委員 (2004 ~ ).....                  | 318 |
| 7-9 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.....    | 319 |
| 7-10 自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則 .....           | 320 |
| 7-11 自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則 .....        | 323 |

# 1 . 序 言

大学共同利用機関を含む国立大学等の法人化が実施されてから4年目に入ります。予算の使い方に自由度が増えたこと、安全衛生や分野間連携の意識が高まったこと等の良い側面がある一方で、当初から懸念されていた多くの問題点が浮き彫りになってきています。将来、これらの反省の上に立って、国家100年の計にとって最も基本的である「学術と文化の発展」の観点から再検討を行う必要があるでしょう。また、分子科学研究所の様な大学共同利用機関にとっては、分野コミュニティの方々との一体性を高めていくことが益々重要となります。是非とも色々なご意見をお寄せ頂きたいと思います。国の財政状況逼迫と共に経済至上主義と市場原理に流された世の中の風潮の為に、日本の学術政策は深刻な状況にあると言わざるを得ません。これを改良する努力をすると共に、研究者はこの逆境をむしろバネとして独創性ある研究に励まねばなりません。

自然科学研究機構から概算要求しておりました「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」は調査費相当の極わずかな予算しか認められませんでした。平成19年度より新しい事業項目として認められ立ち上がることとなりました。将来の有効なシステム構築を目指した体制作りを進めていく所存です。コミュニティの皆様のご協力を心からお願いする次第です。

次世代スーパーコンピューター開発に関わる事業、ナノ支援事業、エクストリームフォトニクス、分野間連携事業など、分子研が責任を持って進めている特別プログラムは平成18年度も順調に成果を上げてきています。更に、同年度からAsian Core Program in Molecular Scienceがスタートし、中国、韓国、台湾との連携を深め、共同研究の推進と共に若手研究者の育成をも目指した活動が始まっています。また、既に報告致しました通り、運営会議、運営顧問会議、および外国人運営顧問の先生方の賛同をも得て、30年以上続いた分子研の組織を、平成19年4月から4研究領域に再編しました。研究施設と研究系との間の協力体制を一層深めると共に、領域間の連携をも促進していく所存です。

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18年度は、研究施設の運営委員会による評価に加えて、例年通り2名の外国人運営顧問による評価を実施しました。この場を借りまして改めて評価に当たられた先生方にお礼を申し上げます。平成19年度からは、第一期中期計画の平成20年度に行う評価のための作業が始まります。分子研においても、研究所全体の自己点検評価の準備が進められています。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、各方面の皆様方のなお一層のご支援を心よりお願い申し上げます。

平成19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

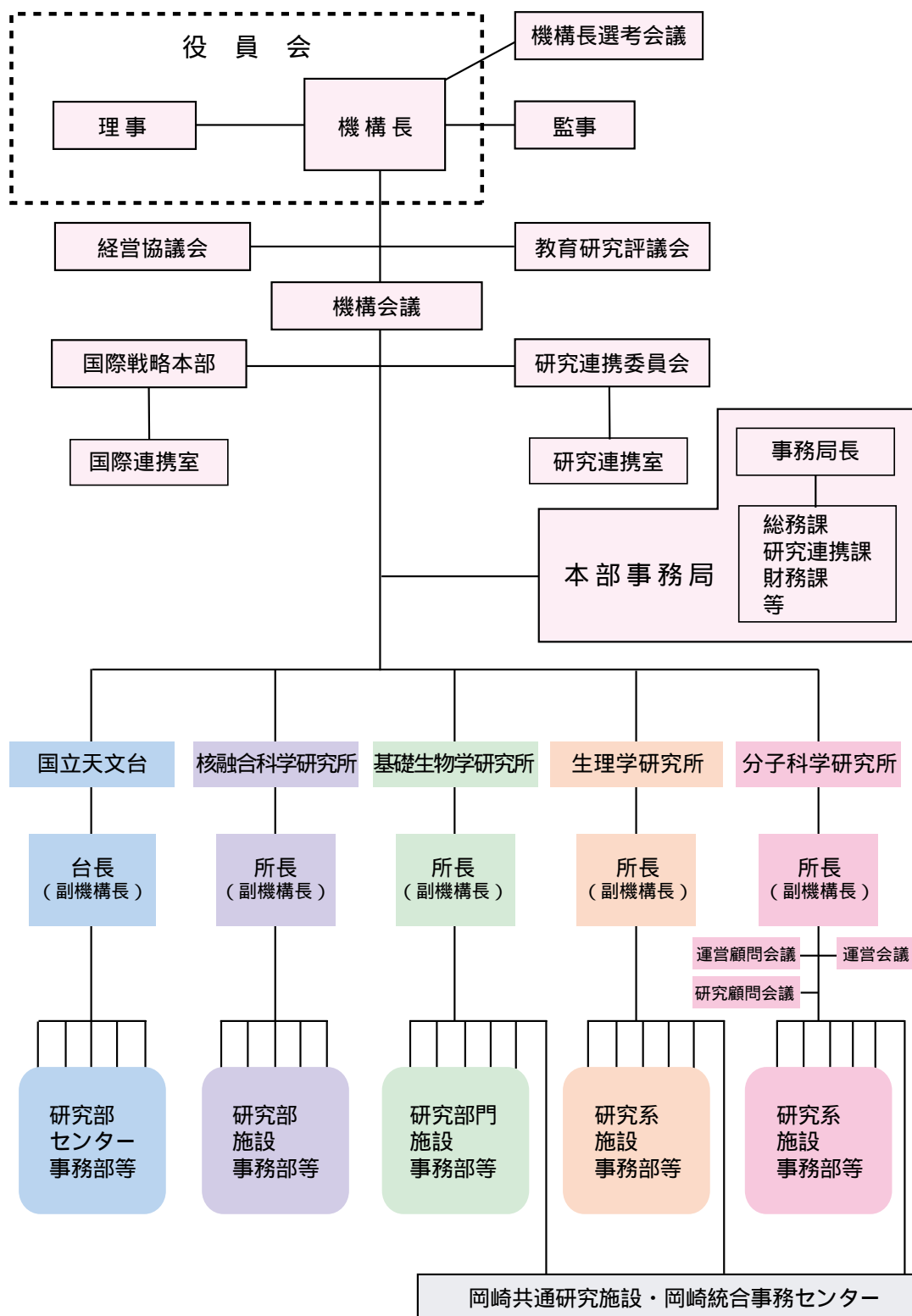
1960 年頃から分子科学研究者の間に研究所設立の要望が高まり、社団法人日本化学会の化学研究将来計画委員会においてその検討が進められた。

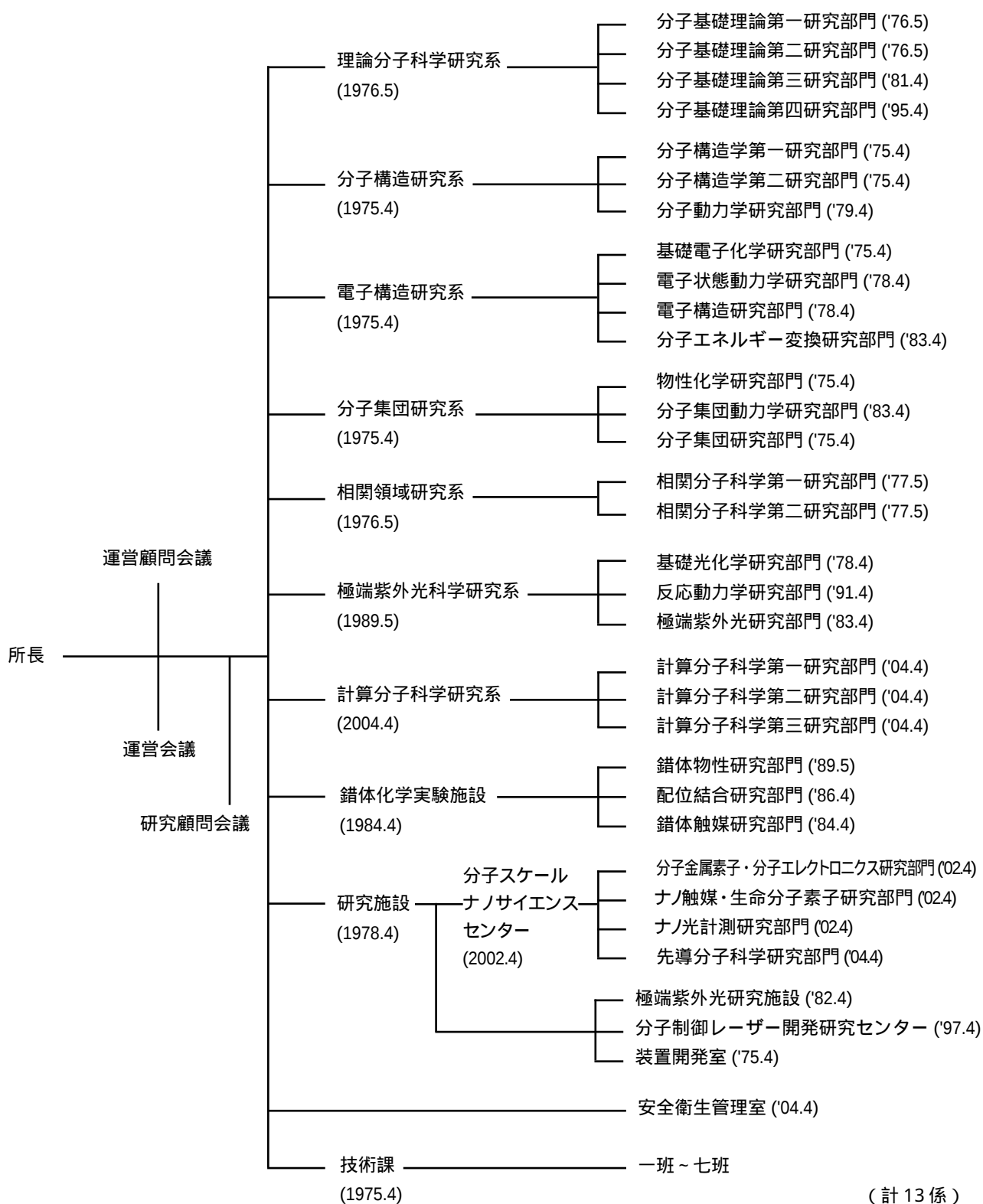
- 1965. 12.13 日本学術会議は、「分子科学研究所」(仮称)の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
- 1973. 10.31 学術審議会は「分子科学研究所」(仮称)を緊急に設立することが適当である旨、文部大臣に報告した。
- 1974. 4.11 文部大臣裁定により、東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室(室長:井口洋夫前東京大学物性研究所教授,定員3名)及び分子科学研究所創設準備会議(座長:山下次郎前東京大学物性研究所長,学識経験者35人により構成)が設置された。
- 1974. 7. 6 分子科学研究所創設準備会議において、研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
- 1975. 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)相関領域研究系(相関分子科学研究部門),化学試料室が設置された。
- 1976. 11.30 実験棟第1期工事(5,115 m<sup>2</sup>)が竣工した。
- 1977. 4.18 相関領域研究系相関分子科学研究部門が廃止され、相関領域研究系(相関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 m<sup>2</sup>)が竣工した。
- 1978. 3.11 装置開発棟(1,260 m<sup>2</sup>),機器センター棟(1,053 m<sup>2</sup>),化学試料棟(1,063 m<sup>2</sup>)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 m<sup>2</sup>)が竣工した。
- 1979. 3.24 実験棟第2期工事(3,742 m<sup>2</sup>),極低温センター棟(1,444 m<sup>2</sup>)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 m<sup>2</sup>）が竣工した。
1983. 3.30 極端紫外光実験棟第2期工事（1,463 m<sup>2</sup>）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 m<sup>2</sup>）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 m<sup>2</sup>）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前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 m<sup>2</sup>）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 m<sup>2</sup>）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 m<sup>2</sup>）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 m<sup>2</sup>）が竣工した。
2004. 3. 1 山手5号館（NMR）（664 m<sup>2</sup>）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 m<sup>2</sup>）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，先端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。

## 2-3 組 織<sup>\*</sup>

大学共同利用機関法人自然科学研究機構





は客員研究部門      は外国人客員研究部門  
( ) 書きは設置年月

\* 分子科学研究所の組織は，2007年3月までの組織  
2007年4月以降の組織については，第5章将来計画及び運営方針を参照のこと

## 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）や運営協議委員会（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當なため、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 2006.4-2008.3）

|         |                   |
|---------|-------------------|
| 加 藤 伸 一 | 豊田中央研究所代表取締役      |
| 土 屋 莊 次 | 城西大学招聘教授，東京大学名誉教授 |
| 江 崎 信 芳 | 京都大学化学研究所長        |
| 野 口 宏   | 中日新聞編集局文化部長       |

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委員会は消滅した。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委員と同じで、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 2006.4-2008.3）

|         |                     |
|---------|---------------------|
| 阿波賀 邦 夫 | 名古屋大学物質科学国際研究センター教授 |
| 榎 敏 明   | 東京工業大学大学院理工学研究科教授   |
| 加 藤 昌 子 | 北海道大学大学院理学研究院教授     |
| 関 谷 博   | 九州大学大学院理学研究院教授      |
| 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      |
| 中 嶋 敦   | 慶應義塾大学理工学部教授        |
| 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       |
| 山 下 晃 一 | 東京大学大学院工学系研究科教授     |
| 宇理須 恒 雄 | 極端紫外光科学研究系教授        |
| 岡 本 裕 巳 | 分子構造研究系教授           |
| 小 川 琢 治 | 分子スケールナノサイエンスセンター教授 |
| 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 研究顧問会議

分子科学研究所では、所長の諮問委員として研究顧問を 3 名ほど依頼している。研究顧問は、所内の各研究グループによる予算申請ヒアリングに参加し、それぞれについて採点し、所長に報告する。所長は採点結果を参照しつつ各研究グループに配分する研究費を決定する。現在の研究顧問は以下の通りである。

#### 研究顧問（任期 2004.4-2008.3）

|         |                  |
|---------|------------------|
| 廣 田 襄   | 京都大学名誉教授         |
| 近 藤 保   | 豊田工業大学招聘教授       |
| 玉 尾 皓 平 | 理化学研究所プロジェクトリーダー |

### 2-4-4 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（2006年度）

|               |                |
|---------------|----------------|
| 阿波賀 邦 夫（名大教授） | 岡 本 裕 巳（分子研教授） |
| 榎 敏 明（東工大教授）  | 田 中 晃 二（分子研教授） |
| 田 中 健一郎（広大教授） | 永 瀬 茂（分子研教授）   |
| 寺 嶋 正 秀（京大教授） | 西 信 之（分子研教授）   |
| 山 下 晃 一（東大教授） | 松 本 吉 泰（分子研教授） |

### 2-4-5 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、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。

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（2006年度）

|                |                 |
|----------------|-----------------|
| 加 藤 晃 一（名市大教授） | 田 中 晃 二（分子研教授）  |
| 加 藤 昌 子（北大教授）  | 西 信 之（分子研教授）    |
| 中 原 勝（京大教授）    | 中 村 敏 和（分子研助教授） |
| 藤 井 正 明（東工大教授） | 信 定 克 幸（分子研助教授） |
| 宇理須 恆 雄（分子研教授） | 見 附 孝一郎（分子研助教授） |
| 小 林 速 男（分子研教授） |                 |

### 2-4-6 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（2006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（高エネ機構物構研所長） | 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）     |                |

#### 2-4-7 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。

#### 2-4-8 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。

#### 2-4-9 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。

#### 2-4-10 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。

## 2-4-11 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<br>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。施設利用の採択に関する調査。           | センター長<br>センターの助教授<br>教授又は助教授 3<br>職員以外の研究者若干                | センター規則<br>委員会規則 | 2007.3.8               |
| 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。施設利用の採択に関する調査。          | センター長<br>センターの教授及び助教授<br>センター以外の分子研の教授又は助教授若干<br>職員以外の研究者若干 |                 | 2006.7.14              |
| 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。施設利用の採択に関する調査。                         | 研究施設長<br>研究施設の教授及び助教授<br>教授又は助教授 4<br>職員以外の研究者 7            | 研究施設規則<br>委員会規則 | 2006.7.25<br>2007.2.14 |
| 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<br>施設の教授及び助教授<br>施設以外の教授又は助教授 2<br>職員以外の研究者 4         | 実験施設規則<br>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)<br>各研究室から各 1<br>当該施設から若干<br>他の施設から若干                   |                 | 2007.1.23              |
| 分子研安全衛生委員会             | 安全衛生管理に関する事項。                                          | (原則)<br>各研究室から各 1<br>施設から必要数                                | 安全衛生委<br>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事。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                                                |                 | なし                     |
| 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)<br>各研究系から各 1<br>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<br>各研究施設教授各 1<br>技術課長<br>分子研広報委員長<br>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管理及び活用に関する事項。 | 研究教育職員（所長指名）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 | 知的財産委員会規則 | 2006.4.27, 6.2, 7.25, 10.30, 12.5, 2007.3.6 |
| 利益相反委員会 | 研究所構成員の利益相反に関する事項。        | 所長，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            | 利益相反委員会規則 | 2007.3.30                                   |

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                                | 2006.4.18, 5.16, 6.20, 7.18, 9.19, 10.17, 11.21, 12.19, 2007.1.16, 2.20 |
| 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<br>技術職員 1                                              | 委員会規則                                   | 2006.5.24, 11.22                                                        |
| 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<br>計算科学研究センター長<br>責任担当所長<br>岡崎情報ネットワーク管理室次長(教授) | 委員会規則                                   | 2007.3.8                                                                |
| 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）<br>教授 1<br>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                | 2006.5.10, 7.5, 9.13, 11.8, 2007.1.10                                   |
| 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<br>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<br>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<br>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<br>教授 1                                                  | 委員会規則                                   | 2007.1.16                                                               |
| 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<br>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<br>助教授 1                                                   | 情報図書館規則第 4 条<br>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<br>防火防災管理者(技術課長)<br>高圧ガス保安員統括者    | 委員会規則                  | 2006.10.17                                                                          |
| 岡崎 3 機関動物実験委員会                    | 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<br>技術課長                     | 動物実験規程<br>委員会規則        | 2007.1.15, 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                 | 2006.5.25<br>2007.1.30                                                              |
| 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                 | 2006.8.28<br>2007.2.23                                                              |
| 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                 | 2006.6.27<br>2006.11.22                                                             |
| 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<br>技術課長                    | センター規則                 | 2006.6.30                                                                           |
| 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。<br>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<br>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懇談会                | 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                             |                        | 2006.6.13                                                                           |
| 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<br>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 | なし                                                                                  |
| 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<br>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  | なし                                                                                  |
| 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。                            | 研究総主幹<br>教授 1<br>計算科学研究センター長<br>技術課長 | 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<br>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                  | なし                                                                                  |

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 構成員<sup>\*</sup>

|         |            |
|---------|------------|
| 中 村 宏 樹 | 所長         |
| 西 信 之   | 研究總主幹( 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 |
| 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       |
| 北 川 禎 三 | 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    |
| 大 塚 勇 起         | 助 手    |
| 河東田 道 夫         | 専門研究職員 |
| SLANINA, 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 |
| GAO, Xingfa     | 専門研究職員 |

#### 分子基礎理論第二研究部門

|         |        |
|---------|--------|
| 信 定 克 幸 | 助教授    |
| 安 池 智 一 | 助 手    |
| 久保田 陽 二 | 専門研究職員 |

#### 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  |
| 生 田 靖 弘           | 専門研究職員  |
| KOBRYN, Oleksandr | 専門研究職員  |
| 米 満 賢 治           | 助教授     |
| 山 下 靖 文           | 助 手     |
| 田 中 康 寛           | 専門研究職員  |
| 前 島 展 也           | 特別訪問研究員 |
| 宮 下 哲             | 特別訪問研究員 |

分子基礎理論第四研究部門（客員研究部門）

|         |                  |
|---------|------------------|
| 木 寺 詔 紀 | 教 授（横浜市大院国際総合科学） |
| 佐 藤 啓 文 | 助教授（京大院工）        |

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 |
| 西 村 勝 之 | 助教授 |

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）         |
| 片 山 睦   | 助教授（理研ゲノム科学総合研究セ） |

分子動力学研究部門

|                 |     |
|-----------------|-----|
| 横 山 利 彦         | 教 授 |
| 中 川 剛 志         | 助 手 |
| 小 澤 岳 昌         | 助教授 |
| 竹 内 雅 宜         | 助 手 |
| 比 田 直 輝         | 研究員 |
| MUHAMMAD, Awais | 研究員 |

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 |

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     |
| 須 磨 航 介 | 学振特別研究員 |
| 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）

|         |              |
|---------|--------------|
| 北 島 正 弘 | 教 授（物材機構材料研） |
| 馬 場 正 昭 | 助教授（京大院理）    |

分子エネルギー変換研究部門（外国人客員研究部門）

ALLAKHVERDIEV, Suleyman I. 外国人研究職員（ロシア科学アカデミー基礎生物学研究所 主席研究員）  
'06.10.2 ~ '07.6.30

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 |

KOWALSKA, Aneta, Aniela 学振外国人特別研究員 '06.10.25 ~ '08.10.24

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

#### 分子集団動力学研究部門

小 林 速 男 教 授

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）

### 相関領域研究系 研究主幹( 併 ) 薬 師 久 彌

#### 相関分子科学第一研究部門

青 野 重 利 教 授（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

石 塚 智 也 助 手

HE, Zheng 研究員

#### 相関分子科学第二研究部門（客員研究部門）

曾 田 一 雄 教 授（名大院工）

前 田 大 光 助教授（立命館大理工）

### 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

KIMBERG, Victor 学振外国人特別研究員 '06.8.7 ~ '08.8.6

菱 川 明 栄 助教授

伏 谷 瑞 穂 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

MAO, Yanli 研究員

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

八 木 創 研究員

黄 超 群 研究員

#### 極端紫外光研究部門（外国人客員研究部門）

王 文 平 外国人研究職員（合肥工業大学 助教授） '06.4.1 ~ '07.3.31

DASCALU, Traian, Eugeniu 外国人研究職員（レーザーとプラズマ物理国立研究所 研究主任）  
'06.10.1 ~ '07.2.28

## 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)    |
| WANG, Jianyi      | 専門研究職員             |
| 千 葉 真 人           | 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             |
| 安 藤 嘉 倫           | 専門研究職員             |
| 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)    |
| SOKOLOV, Vladimir | 研究員                |
| 石 山 達 也           | 専門研究職員             |

### 計算分子科学第二研究部門

|         |                 |
|---------|-----------------|
| 齊 藤 真 司 | 教 授(計算科学研究センター) |
| 金 鋼     | 助 手(計算科学研究センター) |
| 矢ヶ崎 琢 磨 | 研究員             |
| 小 林 千 草 | 専門研究職員          |

### 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   |
| 木 村 将 浩 | 研究員   |
| 丹 内 秀 典 | 研究員   |
| 岡 村 玲   | 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   |
| 赤 木 史 生 | 研究員   |
| 富 川 友 秀 | 研究員   |
| 有 井 秀 和 | 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)

|       |           |
|-------|-----------|
| 北 川 宏 | 教 授(九大院理) |
| 近 藤 満 | 助教授(静大理)  |

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             |
| 日 野 貴 美 | 研究員             |
| 菅 原 由 隆 | 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                      |
| 大 江 洋 平 | 研究員                      |
| 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                    |
| 杉 原 隆 広 | 特別訪問研究員                  |
| 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     |
| 中 井 郁 代               | 専門研究職員  |
| 佃 達 哉                 | 助教授     |
| 根 岸 雄 一               | 助 手     |
| 角 山 寛 規               | 研究員     |
| CHAKI, Nirmalya Kumar | 研究員     |
| 七 分 勇 勝               | 研究員     |
| 中 尾 聡                 | 専門研究職員  |
| 柳 本 泰                 | 特別協力研究員 |

先導分子科学研究部門(客員研究部門)

|         |           |
|---------|-----------|
| 加 藤 晃 一 | 教 授(名市大薬) |
| 笹 川 拓 明 | 助 手       |

極端紫外光研究施設 施設長(併) 小 杉 信 博

|         |     |
|---------|-----|
| 加 藤 政 博 | 教 授 |
| 持 箸 晃   | 助 手 |
| 島 田 美 帆 | 研究員 |
| 木 村 真 一 | 助教授 |

|                  |                                   |
|------------------|-----------------------------------|
| 伊 藤 孝 寛          | 助 手                               |
| 櫻 井 陽 子          | 研究員                               |
| BIELAWSKI, Serge | 学振外国人招へい研究者 '06.11.28 ~ '06.12.23 |
| 隅 井 良 平          | 特別訪問研究員                           |
| IM, Hojun        | 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 教 授(委嘱)(阪大レーザーエネルギー学研究セ)

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  |
| 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 |
| 大 石 裕     | 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(兼)        |
| 澤 井 仁 美 | 研究員           |
| 李 江     | 特別協力研究員       |
| 桑 島 邦 博 | 教 授(委嘱)(東大院理) |
| 藤 井 浩   | 助教授           |

|         |          |
|---------|----------|
| 倉 橋 拓 也 | 助 手( 兼 ) |
| 關 目 理 人 | 研究員      |

生命環境研究領域

|         |               |
|---------|---------------|
| 當 舍 武 彦 | 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 ) 岡 崎 進

|         |          |
|---------|----------|
| 岡 崎 進   | 教 授      |
| 齊 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 ) |
| 金 鋼     | 助 手( 兼 ) |
| 松 田 成 信 | 専門研究職員   |
| 篠 田 恵 子 | 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   |

技術課 課 長 加 藤 清 則

一班 ( 機器開発技術班 ) 班 長 鈴 井 光 一

機器開発技術一係

|      |         |
|------|---------|
| 係 長  | 水 谷 伸 雄 |
| 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 ( 電子機器・ガラス機器開発技術班 ) 班 長 吉 田 久 史

電子機器開発技術係

|      |         |
|------|---------|
| 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

|      |         |
|------|---------|
| 主 任  | 手 島 史 綱 |
| 技術職員 | 澤 昌 孝   |
| 技術職員 | 岩 橋 建 輔 |

計算科学技術二係

|     |         |
|-----|---------|
| 主 任 | 内 藤 茂 樹 |
|-----|---------|

計算科学技術三係

六班（ナノサイエンス技術班） 班 長 高 山 敬 史

ナノサイエンス技術一係

|      |         |
|------|---------|
| 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 |
| 技術職員 | 南 野 智   |

\* 整理日付は2006年12月1日現在。ただし、外国人研究者で2006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（2007年1月1日現在）

#### 専任研究部門等

| 職 名<br>区 分 | 所 長 | 教 授   | 助教授 | 助 手 | 技術職員 | 非常勤研究員<br>(IMSフェロー) |
|------------|-----|-------|-----|-----|------|---------------------|
| 就任者数       | 6   | 43    | 72  | 227 | 149  | 184                 |
| 転出者数       | 5   | 26    | 55  | 188 | 111  | 166                 |
| 現 員        | 1   | 17(2) | 17  | 39  | 38   | 18                  |

( ) は委嘱で外数。

#### 客員研究部門

| 職 名<br>区 分 | 教 授 | 助教授 |
|------------|-----|-----|
| 就任者数       | 117 | 127 |
| 現 員        | 9   | 7   |

#### 外国人客員研究部門

| 職 名<br>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       | 34            | 29  | 34        | 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、更に生体機能との関連等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及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 1 ,分子及び分子集団の時間的・空間的挙動を通じた物理化学的性質の解明  
2 ,固体高分解能 NMR による生体分子の構造・運動性解析
- 研究課題 1 ,極めて高い空間分解能を持つ先端的分光法による、分子集団の励起ダイナミクス、微粒子系における励起状態と増強電場の研究  
2 ,分子配向を決定するための配向試料用新規固体 NMR 測定法の開発  
3 ,生体脂質膜と相互作用するペプチドの脂質二重膜上での構造・運動性の固体 NMR による解析

### 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 ,タンパク質と RNA の相互作用の解析
- 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 ,生体内に多数存在することが明らかになった noncoding RNA の機能解明のため、タンパク質との相互作用に焦点をあて、解析技術の開発を行う

### 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學と動力学

#### 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査と電子構造の研究
  - 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

### 相関分子科学第二研究部門（客員）

- 研究目的 新しい機能をもつ無機・有機物質の開発研究
- 研究課題 1 ,熱電素子や触媒機能をもつ遷移金属の化合物・合金・ナノ構造の電子構造・物性に関する研究  
2 ,生体関連分子の特徴を生かした機能性分子の合成，それらの金属錯化挙動やアニオン認識能，光物性などの検証，さらに，分子間相互作用を利用したナノ・マイクロメータースケール超分子組織体の構築

## 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と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パーの開発
  - 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

#### 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、2006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）、専任助手に加えて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日本で最初である。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<br>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<br>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<br>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<br>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<br>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<br>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<br>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       | 平成 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<br>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                                                  | 技術部長 大竹 勲  |
|       | 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              |            |
|       | 岩手大学          | 平成 17 年 9 月 15-16 日  | 機器・分析                                                  |            |
| 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                                  | 技術課長 加藤 清則 |
| 平成 18 | 広島大学          | 平成 18 年 9 月 14-15 日  | 安全衛生、計測制御、機器・分析など全分野                                   |            |
|       | 名古屋大学         | 平成 19 年 3 月 1-2 日    | 機械・ガラス工作、装置技術、回路・計測・制御、低温、情報ネットワーク、生物、分析・環境、実験・実習      |            |

## 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。法人化後は、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 ( 延 ) |
|----------|---------------|
| 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             |
| 平成 17 年度 | 6             |

表3 技術研修受入状況(2006.1.1～12.31)

| 氏 名   | 所 属            | 受入期間               | 備 考            |
|-------|----------------|--------------------|----------------|
| 熊谷 宜久 | 神戸大学工学部応用化学科   | 平成18年2月6日          | 理化学ガラス機器の製作実習  |
| 福島美津広 | 国立天文台 先端技術センター | 平成18年7月10日-7月14日   | 装置開発室機械工作研修    |
| 福島美津広 | 国立天文台 先端技術センター | 平成18年7月18日-7月21日   | 装置開発室機械工作研修    |
| 福島美津広 | 国立天文台 先端技術センター | 平成18年8月21日-8月25日   | 装置開発室機械工作研修    |
| 熊谷 宜久 | 神戸大学工学部応用化学科   | 平成18年11月20日-11月21日 | 理化学ガラス実験機器製作研修 |

表4 研修受講実績(平成18年度)

| 研 修 名        | 開 催 機 関  | 日 程        | 参 加 者                   |
|--------------|----------|------------|-------------------------|
| 平成18年度前期放送大学 | 愛知学習センター | 4/06～9/06  | 酒井、内山、矢野、澤、上田           |
| 平成18年度後期放送大学 | 愛知学習センター | 10/06～3/07 | 水谷(文)、水谷(伸)、山崎、近藤(直)、岩橋 |

### 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。(詳細は「2-21 地域社会との交流」を参照)

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。

### 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

#### 法人化後の技術課人事

| 年月日              | 事項       | 配属班        | 備考           |
|------------------|----------|------------|--------------|
| 2004 年 4 月 1 日   | 採用       | 機器開発技術班    | 名古屋大学        |
| 2004 年 4 月 1 日   | 採用       | 光計測技術班     | 東北大学         |
| 2004 年 10 月 16 日 | 採用（公募選考） | 研究・広報技術班   | 広報           |
| 2005 年 4 月 1 日   | 採用（公募選考） | ナノサイエンス技術班 |              |
| 2005 年 4 月 1 日   | 採用（公募選考） | ナノサイエンス技術班 |              |
| 2005 年 12 月      | 転出       | 研究・広報技術班   | 極端紫外光科学研究系助手 |
| 2006 年 2 月 1 日   | 採用（公募選考） | 計算科学技術班    |              |

#### 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）<br>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）                              |
| 鈴井光一             | 日本化学会化学技術有功賞（2006）                              |

## 2-9 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。英文の安全衛生講習会テキスト、英語字幕の入った講習会 DVD の作成なども行い、外国人研究者への配慮も行っている。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](mailto: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。

## 2-10 広報室

従来から広報委員会の中の実行部隊として活動していた組織を、今年度から広報室と名称を改め、名実とも広報活動の中心組織とした。したがって、広報室が日常的な広報活動や広報に関する企画を行い、広報委員会を必要に応じてこれらに関する意見を聴取し、また、議論する場とすることとした。今年度の広報室のメンバーは、広報室長、広報室長補佐（両方とも教授の兼任）、技術職員、技術支援員の各1名である。

分子研公式ホームページに関しては、昨年度の全面的改訂に引き続き、より見やすい、また、コンテンツの充実を図るべく逐次見直しを行っている。ホームページのアクセス状況の解析も始めたが、今後これをどこまで行い、改訂に結び付けるかは今後の課題である。

出版物としては、昨年度の「分子科学研究所要覧」に代わるパンフレット「分子科学研究所」を更新し2006 - 2007年版として、また、この英語版も刊行した。分子研の英文の出版物はAnnual Reviewのみであり、分子研の概要を英文で要領よくまとめたものとしてはこれが開所以来初めての出版物となる。この他に、「分子研レターズ」を大幅に改訂した。この出版物は、分子科学のコミュニティー誌として昭和51年に誕生したが、最後のリニューアルから7年近くが経過していた。そこで、分子研と分子研OBを含むコミュニティーの研究者との絆をより強くするコミュニティー誌として内容と装丁を改訂した。コンテンツには「OBの今」、「@総研大」などの新たなコンテンツを導入すると共に、立花隆氏と中村宏樹所長の基礎科学についての意見を組み込んだ。装丁は、従来からの単調なデザインを一新し、2色刷り（部分的には4色刷り）を基本としたデザイン性のある紙面とした。

本年度は分子科学研究所の一般公開があり、広報室は「展示班」と「広報班」における業務を担当し、主にポスターなどの製作を行った。「モノのはじまり～ナノの世界へようこそ」のキャッチコピーのもとにポスター、当日配布の案内図、一般公開公式ホームページなどを統一したデザインで作成した。

3月と9月に東京で行われた一般市民を対象とした自然科学研究機構シンポジウムにおいて、展示ブースにおいて広報室がパネルや映像を使って研究所とその研究内容の概要を紹介した。特に、9月は分子科学研究所が主体となったシンポジウムであったため、展示ブースのみならず、シンポジウムの企画にも深く関わった。

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、広報室はますます重要な役割を担うことになる。広報室が単に様々な行事に受身的な業務執行機関としてではなく、より積極的な広報の企画とその実行をする力をつけなくてはならない。また、自然科学研究機構の広報や機構内の他研究所との広報との連携強化も今後の課題である。また、さらに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も必要である。

分子研レターズ 54  
表紙



一般公開ポスター



## 2-11 史料編纂室

分子科学研究所創設 30 周年記念（平成 17 年 5 月）を受けて、分子研に史料編纂室が平成 18 年 1 月に設置され、いわゆる「アーカイブズ活動」を始めている。昭和 50 年代初め国立共同利用研究所の代表として設立された分子研がどのような経緯で創設に至ったか、また「分子科学」がいかなる経緯で発展してきたかなど、最近のアーカイブズの手法に基づいて、多数の貴重な史料を収集、保存、整理を行うことを目的としている。その一環として、全国の分子科学者が一般に閲覧できるような検索機能をもたせることも計画している。

分子研設立に関する史料は、次の三つの時代に分けられる。日本学術会議による分子研設立の勧告（昭和 40 年）以前の動向、日本学術会議の勧告から準備室に至るまでの期間、分子研創設準備室の時代、分子研創設第一期（十周年に至るまでの期間）などに分類できる。

現在までに本史料編纂室で収集・保存している主な史料は、長倉三郎先生（第 2 代所長）から最近いただいた史料（約 60 件、学術会議勧告以前の昭和 38 年頃から分子研準備室までの期間）、井口洋夫先生（第 3 代所長）からいただいた史料（約 180 件、分子研準備室時代および創設期）、岡崎統合事務センター（旧機構管理局）から史料編纂室に移管された写真アルバム（約 30 冊、分子研件竣工、創設披露宴、十周年記念式典、評議会、一般公開など）、

図書館に保管されていた冊子（5 件、「分子研設立要望書ならびに設立案」、「分子科学特定研究中間報告」、「分子科学特定研究報告」、「分子科学研究所要項」など）、その他の関連の書類（分子研設立に関する日本学術会議の勧告書、十周年記念誌など、多数）。以下、「長倉史料」と「井口史料」の内容について簡単に紹介する。

### (1) 長倉先生の史料

化学研究将来計画委員会の議事録など（昭和 38-40 年）  
化学研究将来計画——シンポジウム報告（昭和 40 年）  
分子研を含む化学系 6 研究所設立案要旨  
分子科学研究所（仮称）設立要望書ならびに設立案（手書き原稿を含む）  
化学研究連絡委員会の「化学研究第一次 5 カ年計画案」  
分子科学研究所小委員会議事録（昭和 40-44 年）  
「分子科学」特定研究課題（昭和 45 年、化学研究連絡委員会の申請書類）  
その他、関連の史料

### (2) 井口先生の史料

分子科学研究所創設準備室時代（昭和 49 年）の人事関係の書類（選考を含む）および土地、施設の部会議事録（岡田修一氏メモ）  
準備室の書類（昭和 50 年、分子研評議会規則など多数）ならびに岡崎への移行および引越の書類（岡田修一氏の記録、主に手書きメモ）  
昭和 51 年度の創設協力者会議の書類（創設協力者会議が教授会議に代わって運営に協力。岡田修一氏ファイル）  
分子研創設期の資料（創設の目的、要望、組織等の記録および発足から 2 年目にかけての報告など）  
大学院問題懇談会報告（昭和 55 年、総合研究大学院大学に発展した大学院構想の恐らく最初の岡崎での懇談会の記録）  
分子研第 1 回外国人招聘研究員（招聘期間は 3 ヶ月以上）の記録および日米協力事業ハワイ会議など。  
その他、関連の史料

## 2-12 共同利用研究

### 2-12-1 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。

### 2-12-2 2006 年度の実施状況

#### (1) 課題研究

| 課 題 名                           | 提案代表者         |
|---------------------------------|---------------|
| 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 | 城西大学理学部 加藤 立久 |

#### (2) 協力研究

| 課 題 名 (前期)                                               | 代 表 者                     |
|----------------------------------------------------------|---------------------------|
| 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                           | 埼玉大学大学院理工学研究科 坂本 章        |
| 表面磁気光学カー効果による表面 3 元規則合金の磁性の研究                            | 九州大学大学院総合理工学研究院 梶原 浩      |
| 遷移金属イオン水和クラスターの光解離分光                                     | 広島大学大学院理学研究科 江幡 孝之        |
| 気相中における貴金属イオンの配位構造                                       | 九州大学大学院理学研究院 大橋 和彦        |
| 金属原子・分子気相クラスターイオンの赤外光解離分光                                | 東北大学大学院理学研究科 美津津文典        |
| 低振動数ラマン分光法による溶液相クラスターに関する研究                              | 福岡教育大学教育学部 小杉健太郎          |
| フェノールおよびその誘導体の高振動状態ダイナミクスの実時間測定                          | 東京工業大学資源化学研究所 酒 井 誠       |
| ベンゼンを含むクラスターのレーザー分光学的研究                                  | 東京大学大学院総合文化研究科 住吉 吉英      |
| スピロピランに対す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        |
| dmit 塩を始めとする分子性伝導体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法の開発 | (独) 理化学研究所中央研究所 山本 貴      |
| 分子性導体の光誘起相転移の研究                                          | 東北大学大学院理学研究科 岩井伸一郎        |
| 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 田中 泰央        |
| 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 兒玉 健         |
| 電界による有機分子薄膜へのキャリア注入と電子状態変化                               | 東京大学大学院新領域創成科学研究科 川合 真紀   |
| 原子間力顕微鏡を用いた脂質二分子膜の構造・物性評価                                | (独) 産業技術総合研究所関西センター 森垣 憲一 |
| 赤外反射吸収分光法による膜タンパク質の極微構造解析                                | 九州大学大学院理学研究院 田中 桂一        |
| 神経細胞シナプス機能センシングのためのマイクロ流路構成法の検討                          | 兵庫県立大学高度産業科学技術研究所 内海 裕一   |
| 単一縦モードマイクロチップ YAG レーザーを用いた小型 is-TPG 光源の開発                | (独) 理化学研究所和光研究所 林 伸一郎     |
| 擬似位相整合素子による中赤外超短光パルスの発生                                  | 東京大学生産技術研究所 志村 努          |
| 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            |
| 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        |
| バイオ共役ナノシステムに利用するナノ粒子の単分散化とその質量測定                         | 東京大学大学院理学系研究科 米澤 徹        |
| 配位交換反応による金属クラスターの選択的大量合成                                 | 筑波大学大学院数理物質科学研究科 寺西 利治    |
| テラヘルツコヒーレント放射光の光伝導アンテナを用いた時間領域分光                         | 大阪大学大学院基礎工学研究科 芦田 昌明      |
| 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                           | 名古屋大学大学院工学研究科 高嶋 圭史       |
| 分子ラジカルの内殻励起分光と崩壊ダイナミクス研究                                 | 広島大学大学院理学研究科 和田 真一        |
| 三元混晶半導体 AlGaIn の紫外発光効率の励起エネルギー依存性                        | 福井大学遠赤外領域開発研究センター 福井 一俊   |
| 軟 X 線照射によるオゾン分子の解離過程の解明                                  | 新潟大学理学部 副島 浩一             |

リチウム含有酸化物の Li-K 吸収端近傍の電子状態に関する研究  
 ピーナッツ型ナノカーボンの in situ 高分解能光電子分光研究  
 テラヘルツ領域におけるスピネル化合物  $\text{NaRh}_2\text{O}_4$  の電子状態の研究  
 計算機実験による液体の相分離ダイナミクス  
 胆汁酸ミセルの MD シミュレーション  
 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  
 ナノ粒子のレーザー励起による局所的超高温高压反応場の化学  
 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  
 酸素活性種を含む金属錯体の電子状態と反応性相関  
 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  
 シトクロム c 翻訳後修飾酵素の構造化学的研究  
 共鳴ラマン分光法を用いたハイパーポルフィリンの電子状態の解析  
 TTP 系分子性導体の合成と構造・物性に関する研究  
 相互作用点モデル/モード結合理論による溶液緩和の研究  
 軟 X 線による無透明物質のアブレーション  
 ヘモシアニン発現系の構築とその分子機構解明  
 ベンゾポルフィリン薄膜の磁気特性の研究

(独)産業技術総合研究所関西センター  
 東京工業大学原子炉工学研究所  
 神戸大学大学院自然科学研究科  
 東北大学大学院理学研究科  
 大分大学教育福祉科学部  
 大阪大学大学院理学研究科  
 東京大学大学院総合文化研究科  
 大阪市立大学大学院理学研究科  
 金沢大学理学部  
 兵庫県立大学大学院生命科学研究科  
 北海道大学大学院理学研究科  
 奈良工業高等専門学校  
 愛媛大学大学院理工学研究科  
 島根大学教育学部  
 筑波大学大学院数理物質科学研究科  
 大阪市立大学大学院理学研究科  
 愛媛大学大学院理工学研究科

小林 弘典  
 尾上 順  
 難波 孝夫  
 福村 裕史  
 中島 俊男  
 青島 貞人  
 真船 文隆  
 杉本 秀樹  
 鈴木 正樹  
 小倉 尚志  
 内田 毅  
 石丸 裕士  
 御崎 洋二  
 西山 桂  
 牧村 哲也  
 伊東 忍  
 山田 容子

#### 課 題 名 (後期)

#### 代 表 者

相互作用点モデル/モード結合理論による溶液緩和の研究  
 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  
 表面磁気光学カー効果及び XMCD による表面 3 元規則合金の磁性の研究  
 金属原子 - 分子気相クラスターイオンの赤外光解離分光  
 気相中における貴金属イオンの配位構造  
 凝縮系物質におけるコヒーレンスの計測と制御  
 テトラセン薄膜の電子スペクトルの圧力及び剪断応力効果  
 量子化学計算に基づく電子構造制御型配位子の開発  
 屈曲型ドナーに基づく磁性伝導体の微少結晶構造解析と物性解明  
 単一分子性金属の合成と物性  
 電界による有機分子薄膜へのキャリア注入と電子状態変化  
 カーボンナノチューブシート上の細胞活性  
 イオンチャンネルバイオセンサー用集積回路の設計

島根大学教育学部  
 埼玉大学大学院理工学研究科  
 九州大学総合理工学研究院  
 東北大学大学院理学研究科  
 九州大学大学院理学研究院  
 東京工業大学応用セラミックス研究所  
 室蘭工業大学工学部  
 立教大学理学部  
 大阪府立大学大学院理学系研究科  
 日本大学文理学部  
 東京大学大学院新領域創成科学研究科  
 横浜国立大学大学院工学研究院  
 徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部

西山 桂  
 坂本 章  
 栃原 浩  
 美齊津文典  
 大橋 和彦  
 中村 一隆  
 城谷 一民  
 山中 正浩  
 藤原 秀紀  
 小林 昭子  
 川合 真紀  
 荻野 俊郎  
 小中 信典

軟 X 線による無機透明物質のアブレーション  
 原子間力顕微鏡を用いたパターン化モデル生体膜の構造・物性評価  
 量子光学的手法を用いた量子情報処理のための光源開発に関する研究  
 擬似位相整合素子による中赤外超短光パルスの発生  
 ナノシステムに利用する金属ナノ粒子の単分散化とその質量測定  
 テラヘルツコヒーレント放射光の光伝導アンテナを用いた時間領域分光  
 UVSOR-FEL を用いたアミノ酸の合成および不斉分解  
 真空紫外発光測定用真空紫外 CCD 分光器の評価  
 リチウム二次電池用電極内の活物質粒子の深さ方向分析  
 軟 X 線照射によるオゾン分子の解離過程の解明  
 ピーナッツ型ナノカーボンの in situ 高分解能光電子分光研究  
 テラヘルツ領域における重い電子系  $\text{CeB}_6$  の電子状態の研究  
 計算機実験による液体の相分離ダイナミクス  
 胆汁酸ミセルの MD シミュレーション  
 スピנקロスオーバー錯体を含有した高分子ミクロスフェアの双安定性スピン転移挙動の解明とその応用  
 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  
 ナノ粒子のレーザー励起による局所的超高温高压反応場の化学  
 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  
 白金 (II) 錯体を用いるプロトンと共役した電子移動反応  
 ヘモシアニン発現系の構築とその分子機構解明  
 シトクロム c 翻訳後修飾酵素の構造化学的研究  
 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

筑波大学大学院数理物質科学研究科  
 (独)産業技術総合研究所関西センター  
 東京大学大学院工学系研究科  
 東京大学生産技術研究所  
 東京大学大学院理学系研究科  
 大阪大学大学院基礎工学研究科  
 横浜国立大学大学院工学研究院  
 福井大学遠赤外領域開発研究センター  
 (独)産業技術総合研究所関西センター  
 新潟大学理学部  
 東京工業大学原子炉工学研究所  
 神戸大学大学院自然科学研究科  
 東北大学大学院理学研究科  
 大分大学教育福祉科学部  
 滋賀県立大学工学部

牧村 哲也  
 森垣 憲一  
 古澤 明  
 志村 努  
 米澤 徹  
 芦田 昌明  
 小林 憲正  
 福井 一俊  
 鹿野 昌弘  
 副島 浩一  
 尾上 順  
 難波 孝夫  
 福村 裕史  
 中島 俊男  
 鈴木 厚志

大阪大学大学院理学研究科  
 東京大学大学院総合文化研究科  
 大阪市立大学大学院理学研究科  
 福島大学共生システム理工学類  
 大阪市立大学大学院理学研究科  
 北海道大学大学院理学研究院  
 兵庫県立大学大学院生命科学研究科

青島 貞人  
 真船 文隆  
 杉本 秀樹  
 大山 大  
 伊東 忍  
 内田 毅  
 小倉 尚志

TTP 系分子性導体の合成と構造・物性に関する研究  
磁性分子導体の構造と磁気的性質  
分子クラスターの光電子分光

愛媛大学大学院理工学研究科  
東京大学物性研究所  
東京大学大学院理学系研究科

御崎 洋二  
高橋 一志  
長坂 将成

### (3) 研究会

分子科学のフロンティア領域へ  
2006 年 6 月 2 日（金）～ 3 日（土） 岡崎コンファレンスセンター

6 月 2 日（金）

10:00-10:10 はじめに  
10:10-12:10 セッション 1：クールな原子・分子の科学  
13:30-15:30 セッション 2：微小重力化学  
16:00-18:00 セッション 3：蛋白質と揺らぎ

6 月 3 日（土）

8:45-10:45 セッション 4：金属ナノ粒子  
11:15-13:15 セッション 5：ディスプレイに役立つ分子たち

若手分子科学研究者のための物理化学  
2006 年 6 月 12 日（月） 分子科学研究所 研究棟 301 号室

13:30-13:40 開会の辞  
13:40-14:15 ミクロからマクロへの展開と緩和現象  
14:25-15:00 ラジカル分子の反応と分光の基礎  
15:00-15:35 原子・分子過程論の基礎  
15:45-16:20 分光学の基礎 a la carte  
16:20-16:30 閉会の辞

金属機能中心をもつ高性能分子システムの創成——その構造と機能——  
2006 年 6 月 15 日（木）～ 16 日（金） 分子科学研究所 山手 3 号館大会議室

6 月 15 日（木）

10:30-10:40 開会の挨拶、趣旨説明 小寺政人（同志社大工）  
10:40-11:40 座長 小寺政人（同志社大工）  
上野隆史（名大物質国際研）蛋白質分子システムによる金属機能の制御  
植村卓史（京大院工） 金属錯体ナノ空間内での高分子合成  
13:00-14:00 座長 大場正昭（京大院工）  
今野 巧（大阪大院工） 単一の含硫アミノ酸から多彩な金属化合物を創る  
秋根茂久（筑波大化学系） オリゴキシル多核錯体によるイオン認識とらせん構造の構築  
14:00-15:00 座長 酒井 健（九大院理）  
森川全章（九大院工） 水溶性金属錯体によるナノ構造形成とレドックス・発光特性  
竹内正之（九大院工） 超分子化学的手法による共役系高分子の配列制御  
15:10-16:10 座長 田中晃二（分子研錯体）  
松本尚英（熊大理） イミダゾール基を含む多座配位子金属錯体の多用な構造と機能  
栗原正人（山形大理） 配位高分子結晶の表面配位不飽和サイトに注目した機能発現と材料応用  
16:10-17:10 座長 増田秀樹（名工大院工）  
田中晃二（分子研錯体） エネルギー変換を目指したアルコール酸化反応の開発  
田所 誠（東京理科大理） 新しい有機アクセプター TANC を用いた配位高分子錯体の構造と性質  
17:20-18:20 座長 松本尚英（熊大理）  
山下正廣（東北大院理） 次世代型高次機能性ナノ金属錯体の科学

6 月 16 日（金）

8:30- 9:30 座長 増田秀樹（名工大院工）  
磯辺 清（金沢大院理工） 結晶相光応答錯体の反応ダイナミクス  
石谷 治（東工大院理工） レニウム錯体を中核とした光機能性分子の構築

|             |                                               |                                                               |
|-------------|-----------------------------------------------|---------------------------------------------------------------|
| 9:30-10:30  | 座長 山下正廣（東北大院理）<br>増田秀樹（名工大院工）<br>古館英樹（金沢大院自然） | $\mu$ -パーオキシニ核鉄錯体における酸素種のトランス-シス配位の自在制御<br>酸素活性種を含む鉄錯体の合成と反応性 |
| 10:40-11:40 | 座長 水田 勉（広大院理）<br>島崎優一（九大先導研）<br>藤井 浩（岡崎統合パイオ） | 高原子価金属錯体の構造と反応性<br>立体障害を導入した新規サレン錯体による単核非ヘム酵素の構造と機能の研究        |
| 11:40-12:40 | 座長 磯辺 清（金沢大院自然）<br>王子田彰夫（京大院工）<br>菊池和也（大阪大院工） | 金属錯体型プローブの生体機能解析への応用<br>金属錯体を応用した生体機能可視化センサー分子                |
| 12:40-12:50 | 閉会の挨拶                                         |                                                               |

New Frontiers of NMR Molecular Science  
2006 年 7 月 31 日（月） 分子科学研究所 山手 3 号館大会議室

オーガナイザー：加藤晃一（分子研 / 名市大） 魚住泰広（分子研）

7 月 31 日（月）

|             |                                                                                             |                                                                                   |
|-------------|---------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------|
| 10:00-10:10 | 中村宏樹（分子研）                                                                                   | Opening remarks                                                                   |
| 10:10-10:50 | 北原 亮（理研・播磨）<br>座長 加藤晃一（分子研・名市大）                                                             | A new paradigm of protein structures by variable pressure NMR                     |
| 10:50-11:30 | 藤田 誠（東京大学）<br>座長 田中晃二（分子研）                                                                  | NMR behavior of organic guests enclathrated in a self-assembled coordination host |
| 11:30-12:10 | Christian Griesinger<br>(Max Planck Institute for<br>Biophysical Chemistry)<br>座長 永山國昭（生理研） | Parkinson's disease and more: and NMR spectroscopic view                          |
| 13:30-14:10 | 竹腰清乃理（京都大学）<br>座長 西村勝之（分子研）                                                                 | Advantages of high magnetic fields in solids NMR                                  |
| 14:10-14:50 | 阿久津秀雄（大阪大学）<br>座長 北川禎三（分子研）                                                                 | Exploring biomolecular science by MAS solid-state NMR                             |
| 15:10-15:50 | Anne S. Ulrich<br>(University of Karlsruhe)<br>座長 村田道雄（大阪大学）                                | Solid state NMR of membrane-active peptides                                       |
| 15:50-16:30 | 甲斐荘正恒（名古屋大学）<br>座長 魚住泰広（分子研）                                                                | Optimal isotope labeling for protein NMR spectroscopy                             |
| 16:30-16:40 | 魚住泰広（分子研）                                                                                   | Closing remarks                                                                   |

物性分子科学の新展開

2007 年 3 月 11 日（日）～ 12 日（月） 岡崎コンファレンスセンター

3 月 11 日（日）（1 日目）

|             |       |                                                                                                                                                                  |
|-------------|-------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 13:00-13:10 | 薬師久彌  | 挨拶                                                                                                                                                               |
| 13:10-13:40 | 加藤礼三  | シリコン基板上における分子性導体の微小単結晶成長                                                                                                                                         |
| 13:40-14:10 | 杉本豊成  | 屈曲型ドナー分子の $\text{FeX}_4^-$ ( $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$ ) 塩における $\pi$ -d 相互作用                                                                             |
| 14:10-14:40 | 山下正廣  | Multi-Functional Molecular Nano-Magnets of Advanced Metal Complexes: Photo-Induced Switching<br>Quantum Molecular Magnets and Conducting Single-Molecule Magnets |
| 14:40-15:10 | 御崎洋二  | セレン原子を含む新規 TTP 系分子の合成と分子性導体への展開                                                                                                                                  |
| 15:30-16:00 | 鹿野田一司 | $\kappa$ 型 ET 塩が挑む物理学の問題                                                                                                                                         |
| 16:00-16:30 | 宇治進也  | BETS 系有機導体研究の進展                                                                                                                                                  |
| 16:30-17:00 | 中村敏和  | 磁気共鳴測定による一次元電子系 $(\text{TMTTF})_2\text{X}$ 系の低温電子状態考察                                                                                                            |
| 17:00-17:30 | 田島裕之  | 有機ナノ電子物性——新たなパラダイムへの挑戦——                                                                                                                                         |
| 17:30-18:00 | 腰原伸也  | 分子物質科学とレーザー・放射光結合計測技術開発                                                                                                                                          |

3 月 12 日（月）（2 日目）

|             |      |                                                                                    |
|-------------|------|------------------------------------------------------------------------------------|
| 9:00-9:30   | 小島憲道 | 光・スピン・電荷の相乗効果による動的スピנקロスオーバー現象                                                     |
| 9:30-10:00  | 中村貴義 | 超分子構造を利用した分子性導体・磁性体の複合化                                                            |
| 10:00-10:30 | 尋田博一 | Magneto-resistance of Metal/Organic/Metal Structures: Toward Molecular Spintronics |
| 10:50-11:10 | 山本 薫 | 光第二高調波観測による $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2\text{I}_3$ の強誘電性                              |

|             |                |                                                                                          |
|-------------|----------------|------------------------------------------------------------------------------------------|
| 11:10-11:40 | 矢持秀起           | エチレンジオキシ TTF 誘導体とその錯体                                                                    |
| 11:40-12:10 | 山田順一           | 分子性導体における化学修飾と相転移の発現                                                                     |
| 特別講演        |                |                                                                                          |
| 13:20-13:55 | Lachene Ouahab | Multifunctional Molecular Materials: From "through space" to "through bond" interactions |
| 13:55-14:30 | James Brooks   | Kobayashi's home run strategy                                                            |

### ヘム代謝に関わる酵素の分子科学

2007 年 3 月 19 日（月）～ 20 日（火） 岡崎コンファレンスセンター

3 月 19 日（月）

|               |                |                                                                          |
|---------------|----------------|--------------------------------------------------------------------------|
| 12:45 ~ 12:50 | 開会の挨拶、趣旨説明     | 藤井 浩（岡崎統合バイオ）                                                            |
|               | 座長 齋藤 正男       |                                                                          |
| 12:50 ~ 13:20 | 杉島 正一（久留米大医）   | ラット由来ヘムオキシゲナーゼ - 1 を用いた構造生物学的研究                                          |
| 13:20 ~ 13:50 | 高橋 聡（大阪大蛋白研）   | レーザーラマン錯乱法と X 線小角錯乱法によるヘムオキシゲナーゼの研究                                      |
| 13:50 ~ 14:20 | 野口 正人（久留米大医）   | ヘムオキシゲナーゼ反応における電子授受機構——表面プラズモン共鳴および FMN 欠失 NADPH- シトクロム P450 還元酵素による検討—— |
|               | 座長 渡辺 芳人       |                                                                          |
| 14:35 ~ 15:05 | 海野 昌喜（東北大多元研）  | 原子レベル分解能でヘム分解反応を“見る”                                                     |
| 15:05 ~ 15:35 | 坂本 寛（九州工大情報工学） | ヘムオキシゲナーゼ反応中間過程の速度論的解析                                                   |
| 15:35 ~ 16:05 | 松井 敏高（東北大多元研）  | ヘムオキシゲナーゼにおけるベルドヘムの反応                                                    |
| 16:05 ~ 16:35 | 右田 たい子（山口大農）   | 高等植物ヘムオキシゲナーゼ - 1：ヘム複合体の特性とヘム分解特性                                        |
|               | 座長 野口 正人       |                                                                          |
| 16:50 ~ 17:20 | 福山 恵一（大阪大理）    | ラン藻のヘムオキシゲナーゼと光合成色素合成酵素の構造生物学研究                                          |
| 17:20 ~ 17:50 | 城 宜嗣（理研播磨）     | 酵素添加酵素による物質変換の分子科学                                                       |
| 17:50 ~ 18:20 | 林 高史（大阪大工）     | ヘムオキシゲナーゼと非天然ヘムとの反応性に関する考察                                               |
| 18:20 ~ 18:50 | 渡辺 芳人（名古屋大理）   | 有機金属酵素の創成                                                                |
| 19:00 ~       | 懇親会            |                                                                          |

3 月 20 日（火）

|               |                         |                                     |
|---------------|-------------------------|-------------------------------------|
|               | 座長 城 宜嗣                 |                                     |
| 8:30 ~ 8:50   | 高橋 昭博、藤井 浩<br>（岡崎統合バイオ） | 高原子価ヘム酵素反応中間体の反応選択性                 |
| 8:50 ~ 9:20   | 青野 重利（岡崎統合バイオ）          | 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       |
| 9:20 ~ 9:50   | 中村 寛夫（理研播磨 / 横市大院）      | ジフテリア菌のヘムセンシングの分子基盤                 |
|               | 座長 北川禎三                 |                                     |
| 10:05 ~ 10:35 | 岩井 一宏（大阪市大医）            | 鉄代謝制タンパク質 IRP2 のヘム依存性分解メカニズム        |
| 10:35 ~ 11:05 | 柴原 茂樹（東北大医）             | 低酸素環境におけるヘムオキシゲナーゼの発現制御             |
| 11:05 ~ 11:35 | 竹谷 茂（京都工繊大応用生）          | ヘム合成と photodynamic therapy          |
| 11:35 ~ 12:05 | 末松 誠（慶応大医）              | 網羅的代謝解析によるガス分子を介した情報伝達機構の系統的探索と医学応用 |
|               | 座長 藤井 浩                 |                                     |
| 12:15 ~ 12:45 | 吉田 匡（山形大医）              | ヘム分解反応を巡る 90 年代前半迄の状況について           |
| 12:45 ~ 12:50 | 開会の挨拶                   | 藤井 浩（岡崎統合バイオ）                       |

### ホモキラリティーの起源に関する星間科学・分子科学

2006 年 11 月 7 日（火）～ 8 日（水） 岡崎コンファレンスセンター

11 月 7 日（火）

|             |            |                                               |
|-------------|------------|-----------------------------------------------|
| 13:00-13:10 | 川口健太郎（岡山大） | 開会挨拶                                          |
|             | （座長：川口健太郎） |                                               |
| 13:10-13:55 | 小林憲正（横国大）  | 星間の複雑高分子状有機物とホモキラリティーの起源                      |
| 13:55-14:40 | 香内 晃（北大）   | 分子雲での表面原子反応および光化学反応による有機物の生成                  |
|             | （座長：唐 健）   |                                               |
| 15:00-15:45 | 中川和道（神戸大）  | 円偏向アンジュレータを用いたアミノ酸固体の真空紫外・軟 X 線円二色性測定と不斉反応の実験 |
| 15:45-16:30 | 濱田嘉昭（放送大）  | 光活性分子の VCD および ROA 測定と解釈                      |

|             |              |                           |
|-------------|--------------|---------------------------|
|             | (座長：福島 勝)    |                           |
| 16:50-17:25 | 江幡孝之 ( 広大 )  | アミノ酸のコンフォーマー安定性と水和構造      |
| 17:25-18:00 | 藤竹正晴 ( 金沢大 ) | キラル分子 - 水錯体のフーリエ変換マイクロ波分光 |

11月8日 (水)

|             |               |                                                   |
|-------------|---------------|---------------------------------------------------|
|             | (座長：平原靖大)     |                                                   |
| 9:00- 9:45  | 佐藤修二 ( 名大 )   | 星間および星周放射場における散乱と偏光                               |
| 9:45-10:30  | 奈良岡浩 ( 岡山大 )  | 隕石有機物の光学活性と同位体                                    |
|             | (座長：川嶋良章)     |                                                   |
| 10:50-11:25 | 遠藤泰樹 ( 東大 )   | キラルな不安定分子種のマイクロ波分光                                |
| 11:25-12:00 | 廣田栄治 ( 総研大 )  | 高分解能分光法による分子キラリティの研究 2 つの例題：イソプロピルアルコールとプロピレンオキシド |
|             | (座長：金森英人)     |                                                   |
| 13:00-13:45 | 宇理須恒雄 ( 分子研 ) | 膜タンパク構造解析と赤外反射吸収分光                                |
| 13:45-14:00 | 田中桂一 ( 九大 )   | 光解離反応による L 体 - D 体の変換                             |
| 14:00-14:30 | 山田耕一 ( 産総研 )  | 量子トンネル効果とキラリティ                                    |
| 14:30-14:35 | 大島康裕 ( 分子研 )  | 閉会挨拶                                              |

### 高分解能分子分光で見る大振幅振動

2006 年 11 月 29 日 (水) ~ 30 日 (木) 岡崎コンファレンスセンター

11月29日 (水)

|             |                                     |                                                                                                                 |
|-------------|-------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 13:00-13:10 | 馬場正昭 ( 京大 ) Baba, Masaaki           | Opening remark                                                                                                  |
|             | (座長：馬場正昭 Baba, Masaaki)             |                                                                                                                 |
| 13:10-13:50 | Anthony Merer (IAMS & UBC)          | Large amplitude bending motion in the $A^1\text{Au}$ state of acetylene                                         |
| 13:50-14:15 | 福島 勝 ( 広島市大 ) Fukushima, Masaru     | The $\nu_2$ bending vibrational structure of the $X^2\Sigma^+$ state of MgNC                                    |
|             | (座長：笠原俊二 Kasahara, shunji)          |                                                                                                                 |
| 14:15-14:40 | 徳江郁雄 ( 新潟大 ) Tokue, Ikuo            | Theoretical calculations on vibrational structures of MCN/MNC, (M=Al, Si) and isomerization reactions           |
| 14:40-15:05 | 石川春樹 ( 神戸大 ) Ishikawa, Haruki       | Large amplitude bending motion of highly vibrationally excited HCP: HCP/CPH isomerization                       |
|             | (座長：大島康裕 Ohshima, Yasuhiro)         |                                                                                                                 |
| 15:35-16:15 | Yen-Chu Hsu (IAMS)                  | Laser spectroscopy of $\text{C}_3$ and its application to the study of $\text{C}_3$ -rare gas complexes         |
| 16:15-16:40 | 遠藤泰樹 ( 東大 ) Endo, Yasuki            | Large amplitude motions of free radicals complexes                                                              |
|             | (座長：須磨航介 Suma, Kohsuke)             |                                                                                                                 |
| 16:40-17:05 | 原田賢介 ( 九大 ) Harada, Kensuke         | Millimeter-wave Spectroscopy of the Intermolecular Stretching and Internal Rotation Bands of the He-HCN Complex |
| 17:05-17:30 | 川嶋良章 ( 神奈川工大 ) Kawashima, Yoshiyuki | Fourier transform microwave spectra of $\text{N}_2$ -dimethyl ether                                             |
| 17:30-17:55 | 廣田栄治 ( 総研大 ) Hirota, Eizi           | Rotational spectra of molecular complexes: their significance in clarifying intermolecular potential            |

11月30日 (木)

|             |                                 |                                                                                                                           |
|-------------|---------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|             | (座長：遠藤泰樹 Endo, Yasuki)          |                                                                                                                           |
| 9:00- 9:40  | Jon T. Hougen (NIST)            | Some ab initio questions and answers concerning methanol vibrations during the internal rotation motion                   |
| 9:40-10:05  | 田中桂一 ( 九大 ) Tanaka, Keiichi     | Proton tunneling of the vinyl radical observed by millimeter-wave spectroscopy                                            |
|             | (座長：長谷川宗良 Hasegawa, Hirokazu)   |                                                                                                                           |
| 10:35-11:00 | 市村禎二郎 ( 東工大 ) Ichimura, Teijiro | Large amplitude vibrational motions of some benzene derivatives                                                           |
| 11:00-11:25 | 関谷 博 ( 九大 ) Sekiya, Hiroshi     | Spectroscopic studies on internal rotation of the methyl group and proton transfer in aromatic molecules in the gas phase |
| 11:25-11:50 | 奥山克彦 ( 日大 ) Okuyama, Katsuhiko  | Two-dimensional Franck-Condon analysis of the large-amplitude motions of bicyclic compounds                               |

|             |                                                                                                                                                            |
|-------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|             | (座長: 大島康裕 Ohshima, Yasuhiro)                                                                                                                               |
| 13:10-13:35 | 大橋信喜美 (金沢大) Ohashi, Nobukimi<br>FTMW spectroscopy of N,N-dimethylacetamide and its internal rotation problem                                               |
| 13:35-14:00 | 大島康裕 (分子研) Ohshima, Yasuhiro<br>Methyl internal-rotation wavepackets probed by femtosecond time-resolved spectroscopy                                      |
| 14:00-14:25 | 馬場正昭 (京大) Baba, Masaaki<br>CH <sub>3</sub> internal rotation levels in methylantracene                                                                     |
| 14:25-14:40 | 伏谷瑞穂 (分子研) Fushitani, Mizuho<br>Reaction Imaging with 9 fs Intense Laser Pulses: Direct Observation of Ultrafast Hydrogen Migration in Acetylene Di-Cation |
| 14:40-14:45 | 大島康裕 (分子研) Ohshima, Yasuhiro<br>Closing remark                                                                                                             |

無機 - 有機複合体のナノ構造制御による機能・物性発現  
2007 年 3 月 14 日 (水) ~ 15 日 (木) 分子科学研究所 山手 3 号館大会議室

3 月 14 日 (水) (1 日目)

|             |                          |
|-------------|--------------------------|
| 12:30-12:40 | 開会の挨拶、趣旨説明 大場 正昭 (京都大院工) |
| 12:40-13:10 | 講演 1 竹延大志 (東北大金材研)       |
| 13:10-13:40 | 講演 2 川俣 純 (山口大理)         |
| 13:40-14:10 | 講演 3 崔 亨波 (分子研)          |
| 14:30-15:00 | 講演 4 速水真也 (広島大院理)        |
| 15:00-15:30 | 講演 5 中 健介 (京都大院工)        |
| 15:30-16:20 | 講演特 1 山元公寿 (慶應大理工)       |
| 16:40-17:10 | 講演 6 酒井 健 (九州大院理)        |
| 17:10-18:00 | 講演特 2 田中 晃二 (分子研錯体)      |

3 月 15 日 (木) (2 日目)

|             |                       |
|-------------|-----------------------|
| 9:00- 9:30  | 講演 7 大場正昭 (京都大院工)     |
| 9:30-10:00  | 講演 8 満身 稔 (兵庫県大理)     |
| 10:00-10:30 | 講演 9 久米晶子 (東京大院理)     |
| 10:30-11:00 | 講演 10 長谷川美貴 (青山学院大理工) |
| 11:20-11:50 | 講演 11 鳶越 恒 (九州大院工)    |
| 11:50-12:40 | 講演特 3 南部宏暢 (太陽化学 (株)) |
| 12:40-12:50 | 閉会の挨拶                 |

和周波分光で拓く分子科学の新展開  
2006 年 12 月 5 日 (火) ~ 6 日 (水) 岡崎コンファレンスセンター

12 月 5 日 (火)

チュートリアル

|             |               |                                                                                                                                                |
|-------------|---------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 10:30-11:30 | 森田明弘 (分子研)    | 「界面 SFG の理論」<br>界面での和周波発生 (SFG) の理論的背景を、大学院生レベルを対象に解説する。特に分子レベルの界面構造情報と和周波シグナルの関係についての基礎的な理解を与える。                                              |
| 11:30-12:30 | 大江昌人 (JST、日立) | 「SFG スペクトロスコピーの基礎」<br>Sum-frequency generation (SFG) spectroscopy の実験、解釈、解析について、その実際を大学院生レベルを対象に解説する。スペクトルの解釈や解析に必要な基礎を解説し、いくつかの研究例を通して理解を深める。 |

## 研究会

- 14:00-14:45 M. Himmelhaus (Univ. Heidelberg)  
An Approach to Real-Time Time-Resolved Sum Frequency Generation Using Broadband Femtosecond Laser Source
- 14:45-15:15 H. Onishi (Kobe Univ.)  
Fourth-order Raman spectroscopy in a time domain
- 15:30-16:00 S. Ye (Hokkaido Univ.)  
Molecular Structures on the Organic Thin Film Interfaces Studied by SFG Vibrational Spectroscopy
- 16:00-16:30 T. Miyamae (AIST)  
Sum frequency generation vibrational spectroscopy studies of water-soluble polymers and related interfaces
- 16:30-16:50 H. Sano (JAIST)  
SFG study of effect of polymer adsorption on water structure at the quartz/water interface
- 17:00-17:30 J. Kubota (Tokyo Inst. Tech.)  
Dynamics of surface molecules under the irradiation with NIR pulses probed by time-resolved SFG spectroscopy
- 17:30-18:00 Y. Matsumoto (IMS)  
Ultrafast vibrational relaxation and energy transfer at ice/CO/metal interfaces

## 12月6日(水)

- 9:00-11:00 Y. R. Shen (UC Berkeley)  
TBA
- 11:15-11:45 M. Hayashi (National Taiwan Univ.)  
Quantum chemistry study of SFG chiral responses
- 11:45-12:15 A. Morita (IMS)  
Computational SFG analysis of aqueous interfaces
- 13:45-14:30 T. Tahara (Riken)  
Electronic Spectroscopy at Liquid Interfaces
- 14:30-15:00 T. Ishibashi (Hiroshima Univ.)  
Doubly resonant SFG spectroscopy of organic monolayers on metal substrates
- 15:15-15:45 H. Noguchi (Hokkaido Univ.)  
Electrochemical interfaces investigated by sum frequency generation spectroscopy
- 15:45-16:15 K. Ito (Waseda Univ.)  
Sum Frequency Generation Spectroscopic Study on Photo-induced Transition of a Poly(vinyl alcohol) Containing Azobenzene Side Chains at the Air-water Interface
- 16:15-16:45 Y. Ouchi (Nagoya Univ.)  
MAES and IV-SFG studies on the air/ionic-liquid interface

## ナノクラスター・ナノ粒子科学の深化——物性、反応性、構造とダイナミクス 2007年3月19日(月)～20日(火) 分子科学研究所 研究棟201号室

### 3月19日(月)

#### 座長 根岸雄一

- 13:10-13:50 配位・吸着を利用した金属ナノ粒子の構造および配列制御  
(北陸先端大) 三宅幹夫
- 13:50-14:30 ゼオライト中の配列アルカリ金属クラスターと種々の磁気相転移  
(大阪大院理) 野末泰夫
- 14:30-15:10 カーボンナノチューブ内の水：アイスナノチューブと交換転移  
(首都大学東京) 真庭 豊

#### 座長 十代健

- 15:30-16:10 金ナノ粒子の単一電子計測とエレクトロンシャトル素子  
(東工大院理工) 真島 豊
- 16:10-16:50 金属クラスターの溶媒和構造と溶解過程  
(神戸大理) 富宅喜代一
- 16:50-17:30 アルゴンクラスターの蒸発ダイナミクスと統計論  
(東大院総合文化) 藤井幹也

### 3月20日(火)

#### 座長 宮島 謙

- 9:00-9:40 巨大分子クラスターの光電子分光：協同効果による電子・幾何構造転移  
(慶応大理工) 三井正明
- 9:40-10:20 カーボンナノ構造の成長機構と選択的作成  
(首都大学東京) 阿知波洋次

- 10:40-11:20 移動度分析法によって異性体分離されたクラスターイオンの分光と動力学  
(東北大院理) 美斎津文典
- 11:20-12:00 シリコン表面に担持された単一サイズ白金クラスターの幾何構造と電子構造  
(豊田工業大クラスター研究室) 安松久登

座長 三井正明

- 13:00-13:40 ポリマー保護金クラスターの空気酸化触媒作用：サイズ効果と反応機構  
(分子研) 角山寛規
- 13:40-14:20 貴金属クラスターの電子状態とその特性に関する理論的研究  
(大阪大院理) 奥村光隆
- 14:40-15:20 金属ナノ粒子の気相熱処理による構造形態制御  
(産総研ナノテクノロジー研究部門) 古賀健司
- 15:20-16:00 有機ナノ結晶の分光特性：大きな粒子のサイズ効果  
(大阪大院工) 朝日 剛

生体機能理解の基礎としての複雑分子系の階層構造的分子間相互作用  
2006年12月21日(木)～22日(金) 岡崎コンファレンスセンター

12月21日(木)(1日目)

13:20-13:30 Opening Remarks (理研) 田原太平

分子高次系セッション

- 13:30-14:00 (九大院理) ○関谷 博・迫田憲治・河本裕介・石川 渉・井上尚子  
孤立気相中の水素結合クラスター内多重プロトン/水素原子移動  
～気相と凝縮相の反応メカニズムの違いの解明を目指して～
- 14:00-14:30 (神戸大) ○富宅喜代一・石川春樹  
気相クラスターイオンの温度可変分光解析装置の開発と生体分子への応用
- 14:30-15:00 (阪大院工) ○鈴木幸子・粟津邦男・佐藤出  
赤外レーザーによるタンパク質イオン化と波長依存性
- 15:00-15:30 (東工大資源研/統合院) 藤井正明  
励起状態水素原子移動反応と生体機能ビルディングブロックの光化学安定性

複合高次系セッション

- 15:50-16:20 (理研) 田原太平  
界面研究のための新しい非線形分光
- 16:20-16:50 (広大院理) ○石橋孝章・前田俊樹・永原哲彦・相田美砂子  
有機単分子膜の電子振動二重共鳴和周波分光
- 16:50-17:20 (首都大東京) 藤野竜也  
ポリアクリルアミド系高分子ナノ微粒子の溶媒和ダイナミクス測定
- 17:20-17:50 (分子研) ○森田明弘・石山達也  
溶液界面解析のための和周波分光の理論

12月22日(金)(2日目)

9:00-9:30 (神戸大) 大西 洋  
走査プローブ顕微鏡による界面物性計測

9:30-10:00 (東大院) 岩田耕一  
複雑系部分秩序の動力学

生体高次系セッション

- 10:00-10:30 (阪大院理) 水谷泰久  
機能を生み出すタンパク質の構造変化
- 10:30-11:00 (京大院理) ○熊崎茂一・長谷川慎・Mohammad Ghoneim・西山雅祥・寺嶋正秀・岡本憲二・大岡宏造・椎名隆  
3次元顕微分光画像で理解する葉緑体とシアノバクテリアの光合成膜の環境応答
- 11:15-11:45 (東工大院理工) ○松下道雄・藤芳 暁  
液体ヘリウム温度における光合成アンテナ複合体の単一分子分光
- 11:45-12:15 (東大院理) ○加納英明・浜口宏夫  
スーパーコンティニューム光による分子バイオイメーjing
- 12:15-12:45 (名大院工) ○神取秀樹・古谷祐詞  
1個の水分子が光駆動プロトンポンプ機能を決める？
- 12:45-12:50 Closing Remarks (東工大) 藤井正明

## 真空紫外域発光の探索

2006 年 11 月 17 日（金）～ 18 日（土） 岡崎コンファレンスセンター

11 月 17 日（金） 座長：吉川 彰

- 13:30-13:45 開会の挨拶（真空紫外発光の探索）  
伊藤 稔（信州大学工学部）
- 13:45-14:25 UVSOR での UV / VUV 発光測定  
福井一俊（福井大学遠赤外領域開発研究センター）
- 14:25-15:05 高平均出力レーザー励起 EUV 光源の動向  
小森 浩（EUVA）
- 15:20-16:00 沃素イオンをドーピングしたアルカリ塩化物における深紫外発光  
秋元郁子（和歌山大学システム工学部）
- 16:00-16:40 Ti 酸化物の（軟）X 線発光  
手塚泰久（弘前大学理工学部）
- 16:40-17:20 内殻励起が引起す凝縮相中の超高速緩和ダイナミクス：局在化と非局在化の相克  
田中 智（大阪府立大学理学部）

11 月 18 日（土）

- 9:30-10:10 アモルファス UVU 透明材料  
梶原浩一（科学技術振興機構 ERATO - SORST 細野プロジェクト）
- 10:10-10:50 VUV 発光材料としてのフッ化物単結晶の作製  
吉川 彰（東北大学多元物質科学研究所）
- 10:50-11:30 ナノストリップガスカウンタの開発と VUV 領域への応用について  
高橋浩之（東京大学大学院工学系研究科）
- 13:00-13:40 極端真空紫外光励起による電子遷移現象を利用した物性評価  
太田雅壽（新潟大学工学部）
- 13:40-14:20 軸方向放電励起紫外・真空紫外レーザーと希ガスダイマーレーザーの可能性  
實野孝久（大阪大学レーザーエネルギー学研究センター）
- 14:20-15:00 VUV 発光材料の可能性  
猿倉信彦（大阪大学レーザーエネルギー学研究センター）
- 15:00-15:10 研究会総括  
伊藤 稔（信州大学工学部）

## (4) UVSOR 施設利用

(前期)

|                                                                                       |                     |       |
|---------------------------------------------------------------------------------------|---------------------|-------|
| X 線照射誘起発行及び XAFS を利用したセラミックス欠陥種の状態解析                                                  | 名古屋大学大学院工学研究科       | 吉田 朋子 |
| XANES による水熱合成ゼオライト修飾触媒の活性点構造解析                                                        | 埼玉工業大学工学部           | 有谷 博文 |
| 高出力型リチウム二次電池の正極表面近傍の電子状態の検討                                                           | (独) 産業技術総合研究所関西センター | 小林 弘典 |
| 窒化物半導体の Al-K 内殻励起による可視・紫外発光 4                                                         | 金沢大学大学院自然科学研究科      | 直江 俊一 |
| 改良型タルサイト粘土の Si と Al 局所構造解明                                                            | 大阪府立大学大学院工学研究科      | 中平 敦  |
| モリブデン酸塩結晶における自己束縛励起子発光の時間分解測定                                                         | 信州大学工学部             | 伊藤 稔  |
| 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・発光および寿命測定                                                  | 早稲田大学理工学術院          | 大木 義路 |
| 極端紫外光照射による無機蛍光体の励起現象 (3)                                                              | 新潟大学工学部             | 太田 雅壽 |
| 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 |
| 青色蛍光体 BAM: Eu の極低温下での励起発光特性                                                           | 関西学院大学理工学部          | 小笠原一禎 |
| 真空紫外光励起フッ化物蛍光体の発光・励起スペクトル                                                             | 大阪電気通信大学工学部         | 大野 宣人 |
| 誘電体結晶中の TI+ 型不純物センターの真空紫外領域の光学特性の研究                                                   | 大阪府立大学大学院理学系研究科     | 河相 武利 |
| アモルファス半導体の光誘起現象に関する研究                                                                 | 岐阜大学工学部             | 林 浩司  |
| 水星探査衛星搭載用検出器の開発                                                                       | 東京大学大学院理学系研究科       | 吉川 一朗 |
| アミノ酸の光学吸収における振動子強度総和則の検証                                                              | 神戸大学発達科学部           | 中川 和道 |
| 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 |
| Fe 基ホイスラー型合金およびバルク金属ガラスの価電子帯電子構造                                                      | 名古屋大学大学院工学研究科       | 曾田 一雄 |
| 強相関電子系の 3 次元角度分解光電子分光：相転移に伴う電子状態変化の直接観測                                               | 分子科学研究所             | 伊藤 孝寛 |
| BL5U 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 |
| 定在波電子分光を用いた磁性多層膜界面の電子状態                                                               | 東北大学多元物質科学研究所       | 江島 丈雄 |
| Angle-resolved photoemission on CeCoGe <sub>3-x</sub> Si <sub>x</sub> (x = 1, 1.2, 3) | 分子科学研究所             | 木村 真一 |
| 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 II                                                      | 神戸大学工学部             | 田中 章順 |
| 強相関半導体のエネルギーギャップの圧力依存性                                                                | 分子科学研究所             | 木村 真一 |

|                                                                                       |                                  |       |
|---------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------|-------|
| BL6B の整備                                                                              | 分子科学研究所                          | 木村 真一 |
| 超イオン導電体におけるコヒーレントイオン伝導の研究                                                             | 東北学院大学工学部                        | 淡野 照義 |
| 赤外反射吸収分光法による有機 / 金属界面の研究                                                              | 分子科学研究所                          | 櫻井 陽子 |
| テルルクラスターの相転移                                                                          | 富山大学理学部                          | 池本 弘之 |
| 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  |
| YPO <sub>4</sub> 系新規蛍光体の真空紫外分光                                                        | 福井工業高等専門学校                       | 北浦 守  |
| 反応性スパッタリング法により作製した酸化物薄膜の VUV 吸収スペクトルの測定                                               | 明治大学理工学部                         | 松本 節子 |
| 複合フッ化物結晶の真空紫外発光・吸収測定                                                                  | 分子科学研究所                          | 小野 晋吾 |
| 窒化物半導体系紫外線受光素子の受光特性研究                                                                 | 三重大学大学院工学研究科                     | 元垣内敦司 |
| AlN 及び AlGa <sub>N</sub> の発光励起と時間分解測定 (III)                                           | 福井大学遠赤外領域開発研究センター                | 福井 一俊 |
| アミノ酸蒸着膜の真空紫外吸収スペクトル (5)                                                               | 神戸大学発達科学部                        | 中川 和道 |
| NaRh <sub>2</sub> O <sub>4</sub> および CaRh <sub>2</sub> O <sub>4</sub> 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 |
| 炭素系薄膜の局所構造解析                                                                          | 兵庫県立大学高度産業科学技術研究所                | 神田 一浩 |
| 高出力型リチウム二次電池の正極表面近傍の電子状態の検討                                                           | (独)産業技術総合研究所関西センター               | 小林 弘典 |
| フラーレン類の光電子分光                                                                          | 愛媛大学大学院理工学研究科                    | 日野 照純 |
| 有機分子ドーピングによる導電性高分子の電子状態変化の観測                                                          | 島根大学総合科学研究支援センター                 | 田中 仙君 |
| 紫外光電子分光によるイオン液体の電子構造                                                                  | (財)佐賀県地域産業支援センター九州シンクロトロン光研究センター | 吉村 大介 |
| シリコン - 炭素共有結合性有機単分子膜の膜構造、および電子構造の研究                                                   | 名古屋大学大学院理学研究科                    | 金井 要  |
| 角度分解紫外光電子分光法による F4-TCNQ 分子超薄膜の分子配向評価                                                  | 千葉大学工学部                          | 奥平 幸司 |
| 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 |
| 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 (2)                                                   | 千葉大学工学部                          | 上野 信雄 |
| 高配向有機薄膜からの光電子放出強度角度依存性とその散乱因子                                                         | 千葉大学大学院自然科学研究科                   | 解良 聡  |
| 電子・イオン多重同時計測装置の開発と同時計測実験 (1)                                                          | 分子科学研究所                          | 彦坂 泰正 |
| 電子・イオン多重同時計測装置の開発と同時計測実験 (2)                                                          | 分子科学研究所                          | 繁政 英治 |
| 電子・イオン多重同時計測装置の開発と同時計測実験 (3)                                                          | 分子科学研究所                          | 金安 達夫 |
| XAFS 測定によるアルミニウム錯体の局所構造解析                                                             | 福岡大学理学部                          | 栗原 敏  |
| 極紫外用分光器の光学素子および蛍光体の校正実験                                                               | 大阪大学大学院工学研究科                     | 田中 和夫 |
| TiO <sub>2</sub> 中に注入された窒素種の局所構造解析                                                    | 名古屋大学大学院工学研究科                    | 吉田 朋子 |
| (後期)                                                                                  |                                  |       |
| X線照射誘起発光及び XAFS を利用したセラミックス欠陥種の状態解析                                                   | 名古屋大学大学院工学研究科                    | 吉田 朋子 |
| XANES による水熱合成ゼオライト修飾触媒の活性点構造解析                                                        | 埼玉工業大学工学部                        | 有谷 博文 |
| 高出力型リチウム二次電池の正極表面近傍の電子状態の検討                                                           | (独)産業技術総合研究所関西センター               | 小林 弘典 |
| 窒化物半導体の Al-K 内殻励起による可視・紫外発光 4                                                         | 金沢大学大学院自然科学研究科                   | 直江 俊一 |
| 改良型タルサイト粘土の Si と Al 局所構造解明                                                            | 大阪府立大学大学院工学研究科                   | 中平 敦  |
| モリブデン酸塩結晶における自己束縛励起子発光の時間分解測定                                                         | 信州大学工学部                          | 伊藤 稔  |
| 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・発光および寿命測定                                                  | 早稲田大学理工学術院                       | 大木 義路 |
| 極端紫外光照射による無機蛍光体の励起現象 (3)                                                              | 新潟大学工学部                          | 太田 雅壽 |
| 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 |
| 真空紫外光励起フッ化物蛍光体の発光・励起スペクトル                                                             | 大阪電気通信大学工学部                      | 大野 宣人 |
| 誘電体結晶中の TI+ 型不純物センターの真空紫外領域の光学特性の研究                                                   | 大阪府立大学大学院理学系研究科                  | 河相 武利 |
| アモルファス半導体の光誘起現象に関する研究                                                                 | 岐阜大学工学部                          | 林 浩司  |
| 水星探査衛星搭載用 検出器の開発                                                                      | 東京大学大学院理学系研究科                    | 吉川 一朗 |
| アミノ酸の光学吸収における振動子強度総和則の検証                                                              | 神戸大学発達科学部                        | 中川 和道 |
| 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 |
| Fe 基ホイスラー型合金およびバルク金属ガラスの価電子帯電子構造                                                      | 名古屋大学大学院工学研究科                    | 曾田 一雄 |
| 強相関電子系の 3 次元角度分解光電子分光: 相転移に伴う電子状態変化の直接観測                                              | 分子科学研究所                          | 伊藤 孝寛 |
| BL5U 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 |
| 定在波電子分光を用いた磁性多層膜界面の電子状態                                                               | 東北大学多元物質科学研究所                    | 江島 丈雄 |
| Angle-resolved photoemission on CeCoGe <sub>3-x</sub> Si <sub>x</sub> (x = 1,1.2,3)   | 分子科学研究所                          | 木村 真一 |
| 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 II                                                      | 神戸大学工学部                          | 田中 章順 |
| 強相関半導体のエネルギーギャップの圧力依存性                                                                | 分子科学研究所                          | 木村 真一 |
| BL6B の整備                                                                              | 分子科学研究所                          | 木村 真一 |
| 超イオン導電体におけるコヒーレントイオン伝導の研究                                                             | 東北学院大学工学部                        | 淡野 照義 |

|                                                                                       |                                       |        |
|---------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------|--------|
| テルルクラスターの相転移                                                                          | 富山大学理学部                               | 池本 弘之  |
| 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   |
| 複合フッ化物結晶の真空紫外発光・吸収測定                                                                  | 分子科学研究所                               | 小野 晋吾  |
| 窒化物半導体系紫外線受光素子の受光特性研究                                                                 | 三重大学大学院工学研究科                          | 元垣内 敦司 |
| AlN 及び AlGaIn の発光励起と時間分解測定 (III)                                                      | 福井大学遠赤外領域開発研究センター                     | 福井 一俊  |
| アミノ酸蒸着膜の真空紫外吸収スペクトル (5)                                                               | 神戸大学発達科学部                             | 中川 和道  |
| NaRh <sub>2</sub> O <sub>4</sub> および CaRh <sub>2</sub> O <sub>4</sub> 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  |
| 炭素系薄膜の局所構造解析                                                                          | 兵庫県立大学高度産業科学技術研究所                     | 神田 一浩  |
| 高出力型リチウム二次電池の正極表面近傍の電子状態の検討                                                           | (独) 産業技術総合研究所関西センター                   | 小林 弘典  |
| フラーレン類の光電子分光                                                                          | 愛媛大学大学院理工学研究科                         | 日野 照純  |
| 有機分子ドーピングによる導電性高分子の電子状態変化の観測                                                          | 島根大学総合科学研究支援センター                      | 田中 仙君  |
| 紫外光電子分光によるイオン液体の電子構造                                                                  | (財) 佐賀県地域産業支援センター九州<br>シンクロトロン光研究センター | 吉村 大介  |
| シリコン・炭素共有結合性有機単分子膜の膜構造、および電子構造の研究                                                     | 名古屋大学大学院理学研究科                         | 金井 要   |
| 角度分解紫外光電子分光法による F4-TCNQ 分子超薄膜の分子配向評価                                                  | 千葉大学工学部                               | 奥平 幸司  |
| 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  |
| 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 (2)                                                   | 千葉大学工学部                               | 上野 信雄  |
| 高配向有機薄膜からの光電子放出強度角度依存性とその散乱因子                                                         | 千葉大学大学院自然科学研究科                        | 解良 聡   |
| XAFS 法による金属ナフタロシアニン錯体の状態分析                                                            | 福岡大学理学部                               | 栗崎 敏   |
| 水熱固化されたメソポーラスシリカバルク体の局所構造解析                                                           | 大阪府立大学大学院工学研究科                        | 中平 敦   |
| LiYF <sub>4</sub> 単結晶中の希土類イオンの吸収スペクトル                                                 | 関西学院大学理工学部                            | 小笠原一 禎 |
| 軌道秩序を示すペロブスカイト型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  |
| 水溶液表面での光イオン化                                                                          | 九州大学大学院総合理工学府                         | 原田 明   |
| 真空紫外励起による YPO <sub>4</sub> および置換型化合物の発光分光                                             | 福井工業高等専門学校                            | 北浦 守   |
| 2次元電気伝導性材料における巨大熱電能発現機構の解明                                                            | 名古屋大学エコトピア科学研究所                       | 竹内 恒博  |
| 金属・有機分子界面の光電子分光測定                                                                     | 名古屋大学大学院工学研究科                         | 柚原 淳司  |
| 蛋白質のテラヘルツ領域での吸収スペクトル測定                                                                | 関西医科大学                                | 木原 裕   |
| 赤外反射吸収分光法による有機/金属界面の研究                                                                | 分子科学研究所                               | 櫻井 陽子  |
| 反応性スパッタリング法により作製した酸化物薄膜の VUV スペクトルの測定                                                 | 明治大学理工学部                              | 松本 節子  |
| FEL と放射光による 2 光子イオン化実験のための予備実験                                                        | 分子科学研究所                               | 彦坂 泰正  |
| 強相関物質の VUV 反射スペクトル                                                                    | 神戸大学大学院自然科学研究科                        | 岡村 英一  |
| XAFS 法を用いたリチウム錯体およびリチウム化合物の状態分析                                                       | 福岡大学理学部                               | 栗崎 敏   |
| 電子ビームによる OPERA film の性能評価                                                             | 名古屋大学大学院理学研究科                         | 星野 香   |
| UVSOR BL8B2 ビームライン及び末端装置の調整                                                           | 分子科学研究所                               | 木村 真一  |
| TiO <sub>2</sub> 中に注入された窒素種の局所構造解析                                                    | 名古屋大学大学院工学研究科                         | 吉田 朋子  |
| 層状構造を有する Li 二次電池用正極材料の表面化学状態観察                                                        | 関西大学工学部                               | 荒地 良典  |
| AlN 及び AlGaIn の時間分解測定                                                                 | 福井大学遠赤外領域研究センター                       | 福井 一俊  |

## (5) 施設利用

### 分子制御レーザー開発研究センター

#### (前期)

|                                                               |                          |                    |
|---------------------------------------------------------------|--------------------------|--------------------|
| Attachment of heavy metal to DNA molecules for rapid analysis | 豊橋技術科学大学                 | ラーマン モハ<br>ド マスウデル |
| 磁気円二色性スペクトルによる共役系ポリマーの構造解析                                    | 北海道大学大学院工学研究科            | 馬渡 康輝              |
| 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                             | 神戸大学分子フォトサイエンス研究セン<br>ター | 笠原 俊二              |

#### (後期)

|                            |             |       |
|----------------------------|-------------|-------|
| 可逆的共有結合で塩基対を形成する DNA の構造評価 | 静岡理工科大学理工学部 | 幡野 明彦 |
|----------------------------|-------------|-------|

### 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         | 愛媛大学総合科学研究支援センター | 宇野 英満 |
| 有機化合物の構造決定                | 愛知教育大学教育学部       | 日野 和之 |
| 弱偏析力ジブロック共重合体の相挙動解析       | 名古屋工業大学大学院工学研究科  | 山本 勝宏 |
| 新規複合型ナノマテリアルの構造および電子状態の解析 | 法政大学工学部          | 緒方 啓典 |

|                                                                |                         |       |
|----------------------------------------------------------------|-------------------------|-------|
| 錯体および有機化合物の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 |
| 生体クラスター触媒部位の磁気的性質                                              | 金沢大学大学院自然科学研究科          | 櫻井 武  |
| 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  |
| 高分子固体表面における“孤立”高分子鎖末端の分子運動性                                    | 静岡県立大学環境科学研究所           | 坂口 真人 |
| 熱処理結晶化による希土類永久磁石薄膜の磁気特性                                        | 名古屋工業大学セラミックス基盤工学研究センター | 安達 信泰 |
| 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 |
| 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 |
| Tsai 型正二十面体準結晶 Zn-Fe-Sc-L (L = lanthanoids) の磁気特性              | 北海道大学大学院工学研究科           | 柏本 史郎 |
| 金属錯体の自己集積化を利用した分子性材料の開発                                        | 名古屋工業大学大学院工学研究科         | 奥村 建志 |
| 長鎖を有するコバルト(II)錯体逆スピン転移挙動に関する件研究                                | 九州大学大学院理学研究院            | 速水 真也 |
| 電気伝導性有機金属化合物の磁気特性の研究                                           | 広島大学大学院理学研究科            | 谷本 能文 |
| 周期構造を有するナノ磁性体の磁気特性に関する研究                                       | 茨城県立医療大学保健医療学部          | 丸山 耕一 |
| (後期)                                                           |                         |       |
| 弱偏析カジブロック共重合体の相分離構造と界面構造の解析                                    | 名古屋工業大学大学院工学研究科         | 山本 勝宏 |
| 硫酸転移酵素の生物学的機能解明を目的とした糖鎖合成                                      | 愛知教育大学                  | 中野 博文 |
| 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 |
| 1次元系コバルト酸化物 $A_{n+2}Co_{n+1}O_{3n+3}$ (A = Ca, Sr, Ba) の高温磁化測定 | 名古屋大学大学院工学研究科           | 高見 剛  |
| 磁性ガーネット薄膜の磁気異方性                                                | 名古屋工業大学セラミックス基盤工学研究センター | 安達 信泰 |
| 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 |
| 周期構造を有するナノ磁性体の磁気特性に関する研究                                       | 茨城県立医療大学保健医療学部          | 丸山 耕一 |
| 有機分子および錯体の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 |
| 金属イオン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  |
| 高分子固体表面に存在する分子鎖の運動性                                            | 静岡県立大学環境科学研究所           | 坂口 真人 |
| ポルフィリンやフタロシアニン類縁体鉄錯体の磁気物性                                      | 島根大学総合理工学部              | 池上 崇久 |
| 新規ナノカーボン物質の構造評価                                                | 法政大学工学部                 | 緒方 啓典 |
| Zn-Sc 基正二十面体準結晶中の低温磁気特性異常の解明                                   | 北海道大学大学院工学研究科           | 柏本 史郎 |
| 遷移元素をドーブしたナノワイヤーの磁気特性の研究                                       | 広島大学大学院理学研究科            | 谷本 能文 |
| 装置開発室                                                          |                         |       |
| (前期)                                                           |                         |       |
| 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 |
| (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 |
| 非磁性高圧力セルの開発                                                    | 大阪府立大学大学院理学系研究科         | 細越 裕子 |
| 位相差電子顕微鏡の位相板開発における微細工作法の検討                                     | 生理学研究所                  | 大河原 浩 |
| 超高真空中で試料交換可能な極低温用保持機構の開発                                       | 愛媛大学大学院理工学研究科           | 日野 照純 |
| X線反射鏡用レプリカマンドレルの研磨加工                                           | 名古屋大学エコトピア科学研究所         | 田原 譲  |
| 計算機利用                                                          |                         |       |
| 第一原理分子動力学計算による液体及びアモルファスのポリモルフィズムの研究                           | (独)産業技術総合研究所計算科学研究部門    | 森下 徹也 |
| 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 |
| 凝縮系ダイナミクスの多次元測定的解析と生体高分子の構造変化ダイナミクスに関する理論研究                    | 分子科学研究所                 | 斉藤 真司 |
| 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                              | 慶應義塾大学理工学部              | 山内 淳  |
| QM/MM 法による量子化学計算から生体分子の動的構造を解明する                               | 佐賀大学理工学部                | 海野 雅司 |
| 分子内および分子間電荷移動の分子軌道法による研究                                       | 神奈川大学理学部                | 田仲 二郎 |
| 生体分子の機能発現反応に関する理論的研究                                           | 千葉大学大学院薬学研究科            | 星野 忠次 |
| 分子、生物、表面の量子化学：励起状態と化学反応                                        | 京都大学大学院工学研究科            | 中辻 博  |
| 生体分子を含むナノ物質の構造と機能に関する第一原理計算                                    | 金沢大学大学院自然科学研究科          | 斎藤 峯雄 |
| 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 |
| 複合電子系の構造、電子状態、反応過程、溶媒と構造に関する理論的研究                              | 京都大学大学院工学研究科            | 榊 茂好  |

|                                                    |                      |       |
|----------------------------------------------------|----------------------|-------|
| 化学反応の分類および分子設計に関する理論的研究                            | 岐阜大学工学部              | 酒井 章吾 |
| 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 |
| 生体分子の構造と機能に関する理論的研究                                | 広島大学大学院理学研究科         | 相田美砂子 |
| 遷移金属化合物および合金の電子構造                                  | 名古屋大学大学院工学研究科        | 森永 正彦 |
| ナノバイオ物質の電子状態・構造・機能の相関                              | 筑波大学物理学系             | 押山 淳  |
| 分子の励起状態とその動的挙動の研究                                  | 広島大学大学院理学研究科         | 岩田 未廣 |
| 鎖状化合物の安定化効果に関する理論研究                                | 東京大学大学院総合文化研究科       | 友田 修司 |
| 励起状態を生成するペニングイオン化の生成過程                             | 新潟大学理学部              | 徳江 郁雄 |
| 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                       | 千葉大学理学部              | 太田 幸則 |
| 大規模第一原理計算のための KKR グリーン関数法の開発                       | 奈良県立医科大学医学部          | 平井 國友 |
| 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                         | 東京大学大学院理学系研究科        | 中村 栄一 |
| 熱化学反応及び光化学反応に関する理論的研究                              | 広島大学大学院理学研究科         | 田林 清彦 |
| 化合反応の量子ダイナミクスに関する理論的研究                             | 東京大学大学院工学系研究科        | 山下 晃一 |
| 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                 | 東京大学大学院薬学系研究科        | 大和田智彦 |
| 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                         | 名古屋大学大学院情報学研究科       | 古賀 伸明 |
| ナノチューブ・フラーレン・ナノカーボン系の分子物性と固体物性の総合研究                | 東京工業大学理工学研究科         | 斎藤 晋  |
| 励起状態とその緩和過程に関する理論的研究                               | 慶応義塾大学理工学部           | 藪下 聡  |
| 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 |
| 金属錯体の構造・反応・電子遷移に関する理論的研究                           | お茶の水女子大学理学部          | 鷹野 景子 |
| $\pi$ - d 相互作用によるペプチドナノチューブの金属イオン捕捉過程              | 早稲田大学理工学部            | 武田京三郎 |
| 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          | 静岡大学教育学部             | 鳥居 肇  |
| 量子化学計算によるナノ科学へのアプローチ                               | 九州大学先端物質化学研究所        | 吉澤 一成 |
| 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           | 早稲田大学理工学部            | 中井 浩巳 |
| 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                  | 筑波大学物理学系             | 岡田 晋  |
| 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 | 弘前大学理工学部             | 斎藤 稔  |
| 環境中および生体内の有機化学反応機構の解明                              | 茨城大学理学部              | 森 聖治  |
| 機能性有機材料の電子物性解析に関する理論的研究                            | 京都大学大学院工学研究科         | 田中 一義 |
| 高分子濃厚系における 1 本の高分子鎖の動的性質                           | 防衛大学理工学専攻            | 萩田 克美 |
| 蛋白質の動的構造と機能の解析                                     | 横浜市立大学大学院国際総合科学研究科   | 木寺 詔紀 |
| 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 |
| 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 |
| 光酸化還元反応によるプロトン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 |
| シリコンナノ構造およびその酸化反応に関する理論的研究                         | 三重大学工学部              | 秋山 亨  |
| 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計算科学研究部門 | 石田 豊和 |
| 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 |
| 生体分子の光化学反応と希土類錯体の化学反応に関する量子化学計算とシミュレーション           | 東京大学大学院工学系研究科        | 常田 貴夫 |
| 金属含有タンパク質の反応制御機構に包接特性に関する理論的研究                     | 大阪大学蛋白質研究所           | 鷹野 優  |
| 胆汁酸塩の分子動力学シミュレーション                                 | 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 |
| 金属原子・分子気相クラスターイオンの赤外光解離分光                          | 東北大学大学院理学研究科         | 美齊津文典 |
| 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 |
| 分子の動的諸過程の理論的研究                                     | 分子科学研究所              | 中村 宏樹 |
| 金属アセチリドクラスターの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  |
| 量子および古典凝集系に対する計算機シミュレーション                          | 計算科学研究センター           | 岡崎 進  |
| 内部官能基を持つ合成ナノサイズ分子動力学                               | 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                                         | 計算科学研究センター           | 森田 明弘 |
| 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 |

|                                                  |                          |                  |
|--------------------------------------------------|--------------------------|------------------|
| フッ素を含むフェロモン活性物質の分子配座と EAG 活性との関係                 | 鳥取大学工学部                  | 早瀬 修一            |
| イオンの選択と透過におけるイオンの水和・脱水和の理論的研究                    | 関東学院大学工学部                | 杉本 徹             |
| 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            |
| 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                | 橘高 茂治            |
| 梯子形ハロゲン架橋白金錯体の光学伝導度および電荷秩序パタンの第 1 原理計算           | 高工エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所  | 岩野 薫             |
| 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            |
| 蛋白質・酵素の計算機シミュレーション                               | 東京工業大学大学院生命理工学研究科        | 櫻井 実             |
| 有機ラジカルの電子状態の ab initio MO 計算                     | 奈良女子大学理学部                | 竹内 孝江            |
| 活性アルキル基の反応性の分子軌道法による検討                           | 福岡大学薬学部                  | 新矢 時寛            |
| 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            |
| 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            |
| DNA 素子自己組織化の第一原理計算                               | 鳥取大学工学部                  | 石井 晃             |
| 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            |
| 微小半導体における量子干渉効果及び電子相関                            | 山形大学教育学部                 | 野々山信二            |
| 有機分子の構造と大振幅振動ポテンシャルの分子軌道計算と密度汎関数計算               | 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             |
| 第一原理電子構造理論の拡張と物質設計                               | 東京大学工学系研究科               | 藤原 毅夫            |
| 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             |
| 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                        | 秋田大学工学資源学部               | 天辰 禎晃            |
| タンパク質中のエネルギー流の解析                                 | 名古屋大学大学院理学研究科            | 倭 剛久             |
| 溶液内化学反応の理論研究                                     | 名古屋大学大学院理学研究科            | 大峰 巖             |
| 金属クラスターの反応性解明へ向けての幾何・電子構造計算                      | 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            |
| キラルリン酸触媒を用いた Mannich 反応の立体選択性制御因子の解明             | 琉球大学教育学部                 | 安藤 香織            |
| 不安定な原子価負イオンのミクロ溶媒和による安定化メカニズム                    | 東京大学大学院総合文化研究科           | 永田 敬             |
| 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                  | 名古屋大学大学院環境学研究科           | 岩松 将一            |
| 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                       | 慶応義塾大学理工学部               | 光武亜代理            |
| 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                        | 東京工業大学大学院理工学研究科          | 三上 幸一            |
| ab initio MO 法による芳香族クラスターの研究                     | 日本原子力研究機構量子ビーム応用研究部      | 佐伯 盛久            |
| 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           | 湘北短期大学情報メディア学科           | 小田 井圭            |
| 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            |
| 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                     | 慶応義塾大学理工学部               | ファジャール<br>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            |
| アントシアニン色素に関する量子化学的研究                             | 星薬科大学薬学部                 | 坂田 健             |
| ポリマーとゲルのシミュレーション                                 | 金沢大学理学部                  | 高須 昌子            |
| 過渡赤外分光法を用いたシアノフェニルジシランの溶媒和型クラスターにおける分子内電荷移動反応の研究 | 神戸大学大学院自然科学研究科           | 石川 春樹            |
| レプリカ交換 MD によるペプチドフラグメントのシミュレーション                 | (独)物質・材料研究機構計算材料科学研究センター | 西野 正理            |
| ポリ塩化ビフェニルの励起状態のエネルギーおよび構造最適化                     | 金沢大学大学院自然科学研究科           | 徳村 邦弘            |
| 多成分分子理論の開発および水素結合系への応用                           | 横浜市立大学大学院国際総合科学研究科       | 立川 仁典            |
| コヒーレントフォノン分光による破壊の数値的研究                          | 京都大学大学院理学研究科             | 國仲 寛人            |
| タンパク質中の補酵素の 1 電子還元に伴う自由エネルギー変化の量子化学計算            | 大阪大学大学院基礎工学研究科           | 高橋 英明            |
| 高分子コロイド系における分子シミュレーション                           | 岐阜大学工学部                  | 寺尾 貴道            |
| ホタル生物発光における酵素ルシフェラーゼの触媒作用についての理論的研究              | 東洋大学大学院生命科学研究科           | 酒井 博則            |
| 分子の電子状態とスペクトルおよびフラビン酵素の反応機構についての ab initio 計算    | 大阪市立大学理学部                | 西本 吉助            |
| 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            |
| SiO <sub>2</sub> /Si 表面上の水分子を介した生体分子相互作用の解明      | 分子科学研究所                  | 宇理須恒雄            |
| 光応答性有機材料の理論設計                                    | (独)産業技術総合研究所関西センター       | 太田 浩二            |
| ジクロロキナクリドンの結晶構造と電子構造                             | 横浜国立大学大学院工学研究院           | 千住 孝俊            |
| 生命現象の時空間ダイナミクス                                   | 基礎生物学研究所                 | 望月 敦史            |

|                                                                          |                           |       |
|--------------------------------------------------------------------------|---------------------------|-------|
| ニトロソ化合物を利用した有機化学反応に関する理論化学的研究                                            | 愛知教育大学教育学部                | 赤倉松次郎 |
| 界面および凝縮相における分子ダイナミクスの理論的解析                                               | (独) 理化学研究所中央研究所           | 田原 太平 |
| 非経験的分子軌道法によるクラスターの構造について                                                 | 岡山理科大学大学院理学研究科            | 中川 幸子 |
| たんぱく質のフォールディングにおける溶媒効果の研究                                                | 福岡大学理学部                   | 山口 敏男 |
| MD 法による $\text{LiPF}_6$ と $\text{LiBF}_4$ 塩の PC 溶液のイオン間相互作用の研究           | 名古屋大学環境学研究科               | 佐野 充  |
| 臨界水中のイオンの分子動力学シミュレーション                                                   | 上智大学理工学部                  | 由井 和子 |
| 化学修飾されたカーボンナノチューブとフラレンの量子化学計算                                            | 分子科学研究所                   | 呂 金   |
| 新規ホウ素求核種ポリリチウムの性質の解明                                                     | 東京大学大学院工学系研究科             | 山下 誠  |
| 実空間差分法に基づくナノ構造の第一原理電子状態・電気伝導特性計算手法の開発                                    | 大阪大学大学院工学研究科              | 小野 倫也 |
| 複雑分子系の複合分子理論シミュレーション                                                     | 京都大学福井謙一記念研究センター          | 諸熊 奎治 |
| 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 |
| 金属原子・分子気相クラスターイオンの赤外光解離分光                                                | 東北大学大学院理学研究科              | 美齊津文典 |
| ピロール環を基盤とした超分子集合体の構築                                                     | 分子科学研究所                   | 前田 大光 |
| Rigged QED 理論に基づく非平衡過程の電子構造                                              | 京都大学大学院工学研究科              | 立花 明知 |
| 節自由度を緩和させる第一原理量子モンテカルロ計算                                                 | (独) 物質・材料研究機構計算材料科学研究センター | 前園 涼  |
| 計算科学による加水分解経路の追跡                                                         | 奈良教育大学教育学部                | 山邊 信一 |
| 固体表面吸着分子と入射イオンとの相互作用による吸着分子解離・脱離過程                                       | 九州大学大学院理学研究院              | 季村 峯生 |
| マルチドメインタンパク質のダイナミクス解析                                                    | 分子科学研究所                   | 笹川 弘明 |
| 凝縮系における分子ダイナミクス                                                          | 神戸大学分子フォトサイエンス研究センター      | 富永 圭介 |
| 密度汎関数法及びモンテカルロ法を用いた $\text{Ag}(110)$ 表面上の $\text{AgO}$ 一次元鎖の構造、反応性に関する研究 | 分子科学研究所                   | 中井 郁代 |
| 低次元シリコンナノ材料の電子状態解析                                                       | 立命館大学理工リサーチオフィス           | 中村 康一 |
| フォトクロミック、エレクトロクロミック分子の構造変化及び電子状態の解明                                      | 信州大学工学部                   | 田中 伸明 |
| 界面活性粒子混合系のメゾスケールシミュレーション                                                 | 京都大学大学院工学研究科              | 新戸 浩幸 |
| フェノール・希ガスクラスターにおけるイオン化誘起異性化反応                                            | 東京工業大学資源化学研究所             | 藤井 正明 |

## 2-12-3 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<br>項目                   | '76 ~ '99 |        | '00    |       | '01    |       | '02    |       | '03    |       | '04 |       | '05 |       | '06 |      | 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                       | 79        | 622    | 2      | 12    | 7      | 41    | 5      | 36    | 5      | 70    | 3   | 26    | 1   | 13    | 1   | 8    | 人数：<br>登録人数                |
| 協力研究                       | 2,919     | 3,353  | 119    | 249   | 100    | 223   | 125    | 253   | 101    | 246   | 100 | 263   | 96  | 232   | 84  | 208  | "                          |
| 招へい<br>協力研究                | 186       | 186    | 2      | 3     | 5      | 6     | 1      | 1     | 1      | 1     | -   | -     | -   | -     | -   | -    | "                          |
| 所長<br>招へい                  | 2,171     | 2,171  | 264    | 264   | 385    | 385   | 313    | 313   | 308    | 308   | 160 | 160   | 100 | 100   | 140 | 140  | 人数：<br>旅費支給者               |
| 研究会                        | 236       | 3,345  | 13     | 276   | 6      | 129   | 11     | 332   | 8      | 229   | 13  | 304   | 11  | 206   | 13  | 310  | "                          |
| 施設利用<br>I                  | 1,421     | 3,088  | 54     | 142   | 49     | 139   | 63     | 188   | 54     | 150   | 55  | 154   | 53  | 106   | 45  | 87   | 件数：<br>許可件数<br>人数：<br>許可人数 |
| 電子計算機<br>施設利用<br>(施設利用 II) | 3,462     | 10,605 | 156    | 631   | 144    | 584   | 134    | 558   | 120    | 525   | 154 | 587   | 132 | 510   | 137 | 547  | "                          |
| 合計                         | 10,474    | 23,370 | 610    | 1,577 | 696    | 1,507 | 652    | 1,681 | 597    | 1,529 | 485 | 1,494 | 393 | 1,167 | 420 | 1300 |                            |
| 経費                         | 413,340   |        | 32,080 |       | 30,994 |       | 37,986 |       | 30,794 |       | -   |       | -   |       | -   |      | 千円                         |

\* 施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用

分子科学研究所 UVSOR 共同利用研究実施一覧

| 年度<br>項目    | '85 ~ '99 |       | '00    |     | '01    |     | '02    |     | '03    |     | '04 |     | '05 |     | '06 |     | 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        | 38        | 423   | -      | -   | -      | -   | -      | -   | -      | -   | -   | -   | -   | -   | -   | -   | 人数：<br>登録人数                |
| 協力研究        | 312       | 1,109 | -      | -   | -      | -   | -      | -   | -      | -   | -   | -   | -   | -   | -   | -   | "                          |
| 招へい<br>協力研究 | 72        | 72    | 0      | 0   | 0      | 0   | 0      | 0   | 0      | 0   | -   | -   | -   | -   | -   | -   | "                          |
| 研究会         | 29        | 435   | 1      | 29  | 1      | 13  | 0      | 0   | 1      | 51  | 1   | 16  | 1   | 59  | 1   | 37  | 人数：<br>旅費支給者               |
| 施設利用        | 1,557     | 7,665 | 160    | 820 | 157    | 707 | 160    | 805 | 129    | 715 | 128 | 582 | 126 | 643 | 113 | 494 | 件数：<br>許可件数<br>人数：<br>許可人数 |
| 合計          | 2,008     | 9,704 | 161    | 849 | 158    | 720 | 160    | 805 | 130    | 766 | 129 | 598 | 127 | 702 | 114 | 531 |                            |
| 経費          | 167,860   |       | 16,441 |     | 16,512 |     | 15,780 |     | 13,884 |     | -   |     | -   |     | -   |     | 千円                         |

## 2-13 ナノサイエンス支援

### 2-13-1 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10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。18年度から時空間分解近接場光学顕微鏡が共同利用に供され、ナノ構造観察・分光特性評価の他、動的性質の測定が可能になった。

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、極低温真空ブローパー、微少電流計測システム、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<br>永田 央助教授 |                   |
| 時空間分解近接場光学顕微鏡              | 開口型近接場光学顕微鏡に超短パルスレーザーによる時間分解。分光測定系等を組み合わせ、光学測定によるナノ構造観察・分光特性評価の他、動的性質の測定を行う。                                                                | 岡本裕巳教授            | 分子構造研究系           |
| 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 <sup>1</sup> H核， <sup>13</sup> C核の溶液試料測定に対応。平成17年後期より固体試料（ <sup>13</sup> 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weep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<br>佃 達哉助教授 | 電子構造研究系<br>分子スケールナノサイエンスセンター |

## 2-13-2 2006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                               |
|-------------------------------------------------|-------------------------------------|
| 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              |
| 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 大須賀篤弘                  |
| 混乱型拡張ポルフィリンの合成                                  | 九州大学工学研究院応用化学部門 古田 弘幸               |
| 有機酸とアミノ酸からなる集合体のキャラクタリゼーションと応用                  | 愛媛大学工学部応用化学科 渡辺 裕                   |
| ナノギャップ電極を用いたナノ構造物の電気伝導測定                        | （独）物質・材料研究機構 長谷川 剛                  |
| 導電性潤滑剤の電気物性の研究                                  | 住鋁潤滑剤（株）開発センター調査・解析グループ 児玉 竜二       |
| 制御された金属ナノ構造におけるプラズモンの空間特性                       | 北海道大学電子科学研究所 三澤 弘明                  |
| 金ナノ微粒子膜の近接場光学顕微鏡による光学的測定                        | （独）物質・材料研究機構，筑波大学大学院数理物質科学研究科 北島 正弘 |
| シゾフィランによるナノ組織体の近接場分光                            | 科学技術振興機構 沼田 宗典                      |
| 分子素子としての光合成系膜タンパク質／色素複合体の基板上へのパターニングによる組織化とその評価 | 名古屋工業大学 南後 守                        |
| 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                 |
| ロジウム表面上の亜酸化窒素分子の吸着配向と共存する一酸化炭素の影響のSTM観測         | 北海道大学触媒化学研究センター 松島 龍夫               |
| 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 関谷 博                   |
| 有機金属ナノクラスターの創製：構造と機能制御                          | 愛知教育大学教育学部 日野 和之                    |
| 導電性基板上へ固定化したナノ粒子・ナノ薄膜の高分解観察                     | 東京大学大学院理学系研究科 米澤 徹                  |
| デンドリマー分子カプセル内包単分散金属ナノクラスターの合成と質量分析              | 神戸大学工学部機械工学科 田中 章順                  |
| 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                      |
| 磁性遷移金属錯体の構造物性                                   | 慶應義塾大学理工学部 秋津 貴城                    |
| 高周期元素の特性を活かした新規ナノスケール分子の開発                      | 京都大学化学研究所 時任 宣博                     |
| 金属ナノクラスターの分子設計および機能発現                           | 近畿大学理工学部 藤原 尚                       |

|                                                       |                   |        |
|-------------------------------------------------------|-------------------|--------|
| 金属内包フラーレンの Prato 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  |
| Ce@C <sub>82</sub> の高選択的修飾                            | 筑波大学大学院数理物質科学研究科  | 土屋 敬広  |
| 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系研究科     | 後 藤 敬  |
| 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 |
| 開口フラーレン誘導体（穴のあいたフラーレン）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 |
| ナノサイズの分子の大規模計算                                        | 大阪府立大学理学部         | 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                    | 大阪大学大学院理学研究科      | 村 田 道雄 |
| 海洋生物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     | 小 林 淳一 |
| 超高磁場 NMR を用いたポリアセチレン誘導体の動的構造の研究                       | 北海道大学大学院工学研究科     | 平 沖 敏文 |
| 超高磁場固体 <sup>17</sup> O NMR 法のポリペプチドおよびオリゴペプチド構造解析への展開 | 東京工業大学大学院理工学部     | 黒 木 重樹 |
| 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   | 山 口 芳樹 |
| 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      | 吉 田 司  |
| 新規な有機 FET の開発                                         | 東京工業大学大学院総合理工学研究科 | 西 田 純一 |
| DBC（ジベンゾクリセン）および周辺物質のトランジスタ特性計測                       | 名古屋大学工学研究科        | 木 村 真  |

課 題 名（後期）

代 表 者

|                                                |                  |                |
|------------------------------------------------|------------------|----------------|
| 導電性潤滑剤の電気物性の研究                                 | 北海道大学触媒化学研究センター  | 中 越 修          |
| 高共役 π 分子修飾電極                                   | 九州大学大学院理学研究院     | 迫 田 憲治         |
| ナノギャップ電極を用いたナノ構造物の電気伝導測定                       | 大阪大学大学院理学研究科     | 安 達 清治         |
| ベンゾボルフィリン類を用いた有機薄膜太陽電池の構築                      | 北海道大学大学院薬学研究科    | 久 保 田 高明       |
| 三次元マイクロ流体回路のナノ構造評価                             | 名城大学理工学部         | 丸 山 隆浩         |
| 分子素子としての光合成系膜タンパク質 / 色素複合体の基板上への組織化            | 名古屋市立大学大学院薬学研究科  | 坂 田 絵里         |
| カーボンナノチューブシートを用いた細胞工学                          | 名城大学理工学部         | 丸 山 隆浩         |
| 結晶成長により作製した量子構造上への脂質膜の形成                       | 科学技術振興機構         | 沼 田 宗典         |
| 微細電極基板上におけるパターン化モデル生体膜作製                       | 岐阜大学大学院工学研究科     | 市 瀬 圭吾         |
| 極端紫外光エッチングしたシリカガラスの形状評価                        | 岐阜大学大学院工学研究科     | B. R. Sankapal |
| 制御された金属ナノ構造におけるプラズモンの空間特性                      | 埼玉大学理学部          | 坂 本 章          |
| 金属ナノ配列構造における局在プラズモン励起と表面増強ラマンの研究               | 埼玉大学理学部          | 森 和彦           |
| シソフィランによるナノ組織体の近接場分光                           | 名古屋大学大学院工学研究科    | 宇 治 原 徹        |
| ロジウム結晶表面上の亜酸化窒素分子の配向の STM による観測                | 名古屋市立大学大学院薬学研究科  | 栗 本 英治         |
| 光異性反応を用いたナノ素子開発のための基礎研究                        | 筑波大学大学院数理物質科学研究科 | 佐 藤 久美子        |
| 有機金属ナノクラスターの創製：構造と機能制御                         | 筑波大学大学院数理物質科学研究科 | 河 野 孝佳         |
| 金属及びシリコンクラスターのサイズ評価                            | 筑波大学大学院数理物質科学研究科 | 栗 原 広樹         |
| 精密調製したデンドリマー内包単分散金属ナノクラスターの質量分析と物性評価           | 筑波大学大学院数理物質科学研究科 | 高 野 勇太         |
| 積層分子膜およびその材料の電子顕微鏡観察                           | 筑波大学大学院数理物質科学研究科 | 二 川 秀史         |
| SiC 表面からのカーボンナノチューブ生成過程の研究                     | 筑波大学大学院数理物質科学研究科 | 菊 池 隆          |
| 液体金属、強磁性体、半導体の電流磁気効果に関する厚さとナノ磁性体構造の研究          | 埼玉大学理学部          | 斎 藤 雅一         |
| 多核クラスター金属錯体の構造 - 磁性相関                          | 愛媛大学総合科学研究支援センター | 宇 野 英満         |
| ナノサイズの分子の大規模計算                                 | 愛媛大学総合科学研究支援センター | 田 中 洋輔         |
| 高周期元素の特性を活かした新規ナノスケール分子の開発                     | 京都大学化学研究所        | 時 任 宣博         |
| 金属ナノクラスターの分子設計および機能発現                          | 近畿大学理工学部応用化学科    | 藤 原 尚          |
| La@C <sub>82</sub> の Bingel の反応による化学修飾         | 筑波大学先端学際領域研究センター | 赤 阪 健          |
| 金属内包フラーレンに基づくスピンサイト交換システムの構築                   | 筑波大学先端学際領域研究センター | 土屋 敬広          |
| 開口フラーレン誘導体（穴のあいたフラーレン）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         |
| 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 | 埼玉大学大学院理工学研究科    | 斎 藤 雅一         |
| 単層カーボンナノチューブの π 共役系溶媒への分散                      | 東京学芸大学教育学部       | 前 田 優          |
| 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        | 東京工業大学大学院理工学研究科  | 後 藤 敬          |
| 海洋生物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    | 小 林 淳一         |
| 強磁場 NMR による分子複合体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         |
| 超高磁場 NMR を用いた新規ラセン高分子の動的構造の研究                  | 北海道大学大学院工学研究科    | 平 沖 敏文         |

|                                                       |                   |       |
|-------------------------------------------------------|-------------------|-------|
| 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   | 山口 芳樹 |
| 超高磁場固体 $^{17}\text{O}$ NMR 法のポリペプチドおよびオリゴペプチド構造解析への展開 | 東京工業大学大学院理工学研究科   | 黒木 重樹 |
| 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      | 吉田 司  |
| 新規な有機 FET の開発                                         | 東京工業大学大学院総合理工学研究科 | 西田 純一 |
| DBC (ジベンゾクリセン) および周辺物質のトランジスタ特性計測                     | 名古屋大学工学研究科        | 木村 真  |

## (2) 施設利用

### (前期)

|                                                          |                      |       |
|----------------------------------------------------------|----------------------|-------|
| 新規ナノマテリアルの合成と局所構造解析                                      | 法政大学工学部              | 緒方 啓典 |
| 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                        | 東海興業株式会社研究開発部        | 前川美穂子 |
| 有機・無機ハイブリッドデバイスの特性評価                                     | ユーテック株式会社            | 遠藤 弘章 |
| 次元規制型自己組織化能を持つ新規導電性分子モジュールの合成及び機能評価                      | (独)物質・材料研究機構ナノ有機センター | 中西 尚志 |
| 水素終端シリコン表面の調整と原子間力顕微鏡による表面構造評価                           | 名古屋大学大学院理学研究科        | 関 一彦  |
| 亜硝酸・一酸化窒素より生ずる DNA 塩基損傷の構造・活性相関。カイク由来プロテアーゼインヒビターの溶液構造解析 | 京都工芸繊維大学繊維学部         | 金折 賢二 |
| 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次世代位相板開発                        | 岡崎統合バイオサイエンスセンター     | 永山 國昭 |
| 有機カルコゲン化合物・単層カーボンナノチューブ複合化と物性評価                          | 東京学芸大学               | 前田 優  |
| 分子結合状態解析システムを用いたシリサイド表面層の分析                              | 石川工業高等専門学校           | 山田 健二 |
| 超音波応答性メタル化ペプチドゲル化剤の構造解析およびゲル化機構の解明                       | 大阪大学大学院基礎工学研究科       | 高谷 光  |
| 9-アルキルアミノアクリジンのシトシン塩基選択的な相互作用の解析                         | 名古屋市立大学大学院薬学研究科      | 白井 直洋 |
| 点接触電流イメージング原子間力顕微鏡をもちいた直鎖ポルフィリン多量体の電気伝導度測定               | 大阪大学産業科学研究所          | 松本 卓也 |
| $\pi$ 拡張化合物の溶液プロセスによる薄膜作成と薄膜構造及び導電特性の検討                  | 愛媛大学大学院理工学研究科        | 山田 容子 |
| 周期構造を有するナノ磁性体の電気化学的な作製に関する研究                             | 茨城県立医療大学保健医療学部       | 丸山 耕一 |

### (後期)

|                                                                                                                   |                         |       |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------|-------|
| 有機・無機ハイブリッドデバイスの特性評価                                                                                              | ユーテック株式会社               | 遠藤 弘章 |
| 次元規制型自己組織化能を持つ新規導電性分子モジュールの合成及び機能評価                                                                               | (独)物質・材料研究機構ナノ有機センター    | 中西 尚志 |
| 両親媒性ポルフィリン誘導体の合成と自己集合挙動制御                                                                                         | 東京農工大学工学部               | 道信 剛志 |
| 炭素被覆磁性ナノ粒子の研究                                                                                                     | 戸田工業株式会社 創造本部           | 柿原 康男 |
| 有期系ナノ構造体の局所構造解析                                                                                                   | 法政大学工学部                 | 緒方 啓典 |
| 水素終端シリコン表面の調製と原子間力顕微鏡による表面構造評価                                                                                    | 名古屋大学大学院理学研究科           | 関 一彦  |
| 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次世代位相板開発の基礎的検討                                                                           | 岡崎統合バイオサイエンスセンター        | 永山 國昭 |
| 半導体あるいは金属ナノ粒子の溶液合成における初期構造の解析                                                                                     | (独)産業技術総合研究所            | 上原 雅人 |
| 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         | 市川 洋  |
| メタル化ペプチド分子による金属集積化機構の解明                                                                                           | 大阪大学大学院基礎工学研究科          | 高谷 光  |
| 周期構造を有するナノ磁性体の電気化学的な作製に関する研究                                                                                      | 茨城県立医療大学保険医療学部          | 丸山 耕一 |
| 輪が一方向に並進するロタキサンの合成                                                                                                | 大阪大学大学院理学研究科            | 原田 明  |
| 分子定規法を利用したナノ電極形成、およびナノ電極による分子 (DNA) の電気特性評価                                                                       | 名古屋大学大学院工学研究科電子情報システム専攻 | 中里 和郎 |
| ステンレス表面への Ti 粉末ショットピーニングによる表面 $\text{TiO}_2$ 生成の調査 ステンレス表面に $\text{TiO}_2$ 層が生成できるが、活性力のあるアナターゼ型カルテル型かを格子状態から調査する | フタバ産業株式会社技術部            | 小林 新  |
| 920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いた高分解能 NOESY によるタンパク質の構造解析                                                                    | 奈良先端科学技術大学院大学           | 児嶋長次郎 |
| Co とキラルなラジカルから成る、有機無機ハイブリッド磁性体の交流磁場中における磁性のダイナミクスに関する研究                                                           | 広島大学大学院理学研究科            | 井上 克也 |
| ナノカーボン物質中の $\text{Mn}_{12}$ クラスターの電子状態解析                                                                          | 名古屋大学大学院理学研究            | 吉川 浩史 |
| 刺激応答性星型ポリマーを用いた金ナノ微粒子の作製                                                                                          | 大阪大学大学院理学研究科            | 青島 貞人 |
| 一次元ロジウム (1) ——セスキノート錯体の磁気特性の解明ロジウム - ジオキソレン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  |
| 金属ナノクラスターの分子設計および機能発現                                                                                             | 近畿大学                    | 仲程 司  |

## 2-14 最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用

### 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

分子科学研究所は昨年度まで「超高速コンピュータ網形成（NAREGI）プロジェクト」のナノ分野におけるグリッド実証拠点として、過去3年間、研究活動を行ってきたが、昨年4月より表記の「最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトにおける「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」拠点としてナノ分野の「グランドチャレンジアプリケーション研究」を担当することになった。同時に、NAREGI プロジェクトは2007年度を最終年度としており、2006年度は引き続き「グリッド実証研究」を行ってきた。本項では「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」拠点の概要、研究体制、研究開発スケジュールについて以下に述べる。

#### 2-14-1 「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発（ナノ統合）」拠点の概要

次世代スパコンプロジェクトは我が国がIT分野における国際的なリーダーシップを確保ために「旗艦」的コンピュータを構築し、それを下方展開することによって我が国に強固なITインフラを整備することを目指す国家プロジェクトである。また、このプロジェクトの目的は単に「巨大なマシン」を構築することにとどまらず、同時に、我が国の計算科学における新しいパラダイムの創出を目指すものである。

計算科学はこれまで物質設計や地球環境などの分野で重要な役割を果たし、社会の技術基盤のひとつとして確固たる基盤を築きつつある。とりわけ、物質や生体分子の様々な機能が発現するナノスケールの現象をターゲットとする計算科学は21世紀における産業を担うべき「知的ものづくり」や個人の遺伝情報に基づく「テーラーメイド医療」にとっての技術基盤としておきな期待を集めている。他方、ナノスケールの現象は伝統的な理論化学物理の視点からも極めて挑戦的な課題である。特に、量子力学、統計力学、分子シミュレーションなどの理論・計算科学的方法論にとって、これまでの枠組みを大幅に越えること無くして決して達成しえない研究課題である。

以上の観点から我々は本プロジェクトのナノ分野におけるグランドチャレンジ研究課題として、下記の3つの課題を設定した。

##### (1) 次世代ナノ情報・機能材料

超高密度実装、高速応答、省エネルギーなどを目指す電子デバイス設計の計算科学的方法論を構築。

##### (2) 次世代ナノ生体物質

生命体を構成するナノ物質のシミュレーションを可能とする方法論を確立することにより、テーラーメイド医療を目指した次世代生命体シミュレーションのナノ基盤を構築。

##### (3) 次世代エネルギー

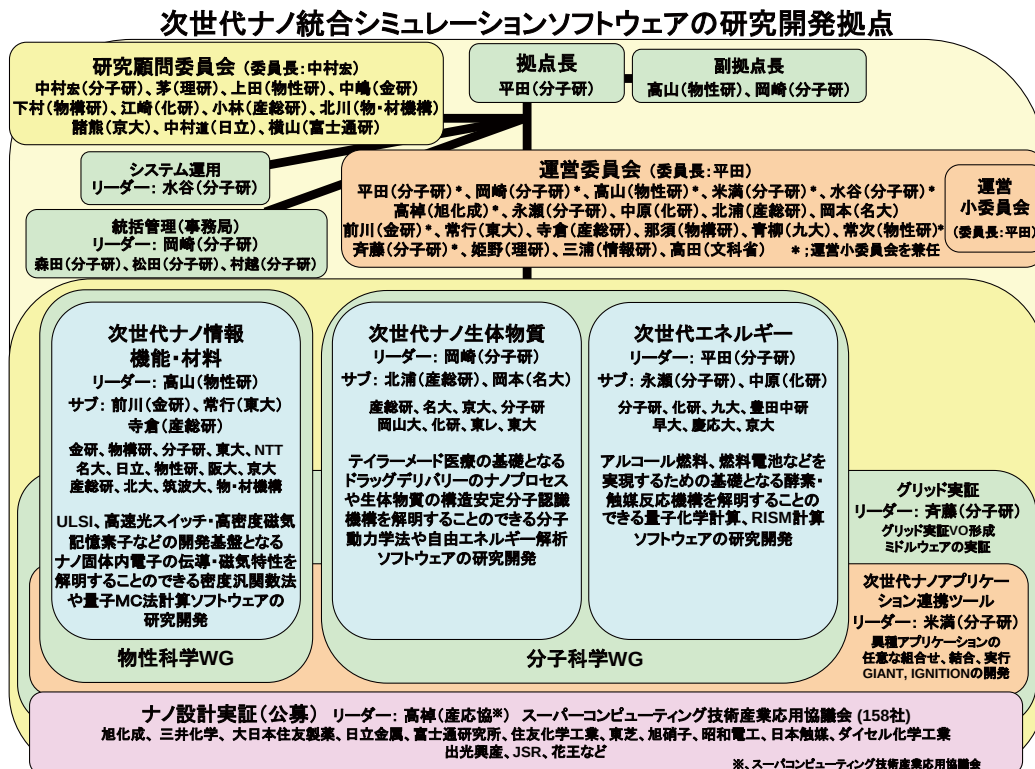
化石燃料に代わる恒久的エネルギー源として太陽エネルギーの固定、利用、貯蔵技術、特に、セルロースから酵素反応によりエタノールを生成する技術における計算科学的方法論の確立に貢献。

これらの研究課題は国の「重点推進4分野」の中において重要な技術・課題として位置付けられていることから明らかなように、21世紀の「知的ものづくり」や個人の遺伝情報に基づく「テーラーメイド医療」、化石燃料に代わる恒久的エネルギー源の確立、など産業・医療の技術基盤を確立する上で本質的であるばかりでなく、人類の存立基盤そのものにも関わる重要課題であり、「グランドチャレンジ課題」と呼ぶにふさわしいターゲットであると考えている。

我々は本プロジェクトにおいてこれらの課題に挑戦する上で必要な新しい理論や計算科学的方法論あるいは計算プログラムを構築し、そのことを通じて次世代スパコンプロジェクトの成功に貢献したいと考えている。

## 2-14-2 「ナノ統合拠点」の研究体制

ナノ統合拠点の研究体制を下図に示す。



## 2-14-3 「ナノ統合拠点」の研究課題（個人）

ナノ統合拠点の研究課題を下表に示す。

最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発  
——グランドチャレンジ課題・課題小項目・各研究課題——

### （１）次世代ナノ情報機能・材料

#### １ 次世代ナノ複合材料

##### １ - １ ナノ複合電子・強度材料の構造と特性制御

|       |           |          |       |                               |
|-------|-----------|----------|-------|-------------------------------|
| 石橋 章司 | 産業技術総合研究所 | 計算科学研究部門 | グループ長 | 材料における界面とナノスケール格子欠陥の構造と特性     |
| 毛利 哲夫 | 北海道大学     | 大学院工学研究科 | 教授    | 合金材料の内部組織形成と材料特性に関するマルチスケール解析 |

##### １ - ２ ナノ構造構成要素とその複合系による次世代電子デバイス設計

|       |      |           |     |                 |
|-------|------|-----------|-----|-----------------|
| 押山 淳  | 筑波大学 | 数理物質科学研究科 | 教授  | ナノ構造構成要素と複合系の機能 |
| 常行 真司 | 東京大学 | 大学院理学系研究科 | 助教授 | 第一原理ナノ構造探査      |

1 - 3 電子励起によるナノ複合電子材料の機能制御

|       |                   |           |     |                                   |
|-------|-------------------|-----------|-----|-----------------------------------|
| 那須奎一郎 | 高エネルギー加速器<br>研究機構 | 物質構造科学研究所 | 教授  | 可視光で誘起されるグラファイト・ダイヤモンド非平衡相転移      |
| 杉野 修  | 東京大学              | 物性研究所     | 助教授 | ナノ物質および固体表面での光励起キャリアダイナミクスと高速化学反応 |

1 - 4 大規模電子状態計算と精密計算によるナノ複合材料設計

|       |           |          |      |                           |
|-------|-----------|----------|------|---------------------------|
| 寺倉 清之 | 産業技術総合研究所 | 計算科学研究部門 | 研究顧問 | 高効率大規模電子状態計算手法の開発         |
| 川添 良幸 | 東北大学      | 金属材料研究所  | 教授   | 拡散量子モンテカルロ法による分子の安定性の厳密計算 |

(1) 次世代ナノ情報機能・材料

1 次世代ナノ電子材料

1 - 1 次世代ナノ非線形光学素子開発

|       |                   |           |     |                                        |
|-------|-------------------|-----------|-----|----------------------------------------|
| 遠山 貴己 | 京都大学              | 基礎物理学研究所  | 教授  | 強相関電子系におけるナノ非線形光学デバイスの理論               |
| 那須奎一郎 | 高エネルギー加速器<br>研究機構 | 物質構造科学研究所 | 教授  | 非マルコフ・非負経路積分法によるナノ・サイズ多電子系の光励起シミュレーション |
| 米満 賢治 | 自然科学研究機構          | 分子科学研究所   | 助教授 | 光誘起集団電荷移動と伝導の制御                        |

1 - 2 新機能ナノ量子デバイス開発

|       |      |           |       |                                  |
|-------|------|-----------|-------|----------------------------------|
| 永長 直人 | 東京大学 | 大学院工学系研究科 | 教授    | ナノスケール電子状態を用いた新規機能設計             |
| 小形 正男 | 東京大学 | 大学院理学系研究科 | 助教授   | 低次元強相関電子系における超伝導および磁性、電荷秩序の理論的研究 |
| 田村 浩之 | NTT  | 物性科学基礎研究所 | 主任研究員 | 量子ドット列デバイスにおける電子相関効果の制御          |

1 - 3 スピン注入ナノスピンエレクトロニクス素子開発

|       |       |          |       |                               |
|-------|-------|----------|-------|-------------------------------|
| 前川 禎通 | 東北大学  | 金属材料研究所  | 教授    | ナノスピンエレクトロニクス理論の構築            |
| 井上順一郎 | 名古屋大学 | 大学院工学研究科 | 教授    | 接合系の量子伝導シミュレーションとナノスケールデバイス設計 |
| 市村 雅彦 | 日立製作所 | 基礎研究所    | 主任研究員 | スピン注入型ナノ電子デバイス                |

(1) 次世代ナノ情報機能・材料

1 次世代ナノ磁性材料

1 - 1 超高記録密度磁気デバイス材料の構造制御

|       |      |           |     |                 |
|-------|------|-----------|-----|-----------------|
| 常行 真司 | 東京大学 | 大学院理学系研究科 | 助教授 | 自己組織化を用いたナノ磁性材料 |
|-------|------|-----------|-----|-----------------|

1 - 2 新しい磁性発現機構をもつナノ磁気素子の開発

|       |      |           |    |               |
|-------|------|-----------|----|---------------|
| 宮下 精二 | 東京大学 | 大学院理学系研究科 | 教授 | 分子磁性体での局所磁気構造 |
| 赤井 久純 | 大阪大学 | 大学院理学研究科  | 教授 | ナノ磁性の第一原理計算   |

1 - 3 新しい動作原理による超高記録密度磁気デバイスの開発

|       |      |           |     |                                          |
|-------|------|-----------|-----|------------------------------------------|
| 高山 一  | 東京大学 | 物性研究所     | 教授  | ナノ磁性粒子配列の静的・動的性質                         |
| 藤堂 眞治 | 東京大学 | 大学院工学系研究科 | 講師  | 格子変形の自由度のもとでの磁気相転移                       |
| 常次 宏一 | 東京大学 | 物性研究所     | 教授  | 強相関電子系における新奇量子相                          |
| 川島 直輝 | 東京大学 | 物性研究所     | 助教授 | 量子磁性体における自発的空間対称性のやぶれ——ダイマー・ストライプ・量子液体—— |

(2) 次世代ナノ生体物質

2-1 タンパク質高度シミュレーション新規方法論の開発

|       |           |             |       |                                                       |
|-------|-----------|-------------|-------|-------------------------------------------------------|
| 北浦 和夫 | 産業技術総合研究所 | 計算科学研究部門    | 総括研究員 | 量子化学計算によるタンパク質・リガンド相互作用の解析と結合エネルギーの高精度予測——高精度 FMO 法—— |
| 岡本 祐幸 | 名古屋大学     | 大学院理学研究科    | 教授    | 拡張アンサンブルシミュレーションによる創薬設計——拡張アンサンブル法——                  |
| 木下 正弘 | 京都大学      | エネルギー理工学研究所 | 助教授   | タンパク質フォールディングおよび高次構造形成のメカニズムの分子論的解明——RISM 法——         |

2-2 イオンチャネルの分子過程

|       |          |         |    |             |
|-------|----------|---------|----|-------------|
| 平田 文男 | 自然科学研究機構 | 分子科学研究所 | 教授 | チャネルのイオン選択性 |
|-------|----------|---------|----|-------------|

2-3 ウイルスの分子科学

|       |          |            |    |                         |
|-------|----------|------------|----|-------------------------|
| 岡崎 進  | 自然科学研究機構 | 分子科学研究所    | 教授 | ウイルスの全原子シミュレーション        |
| 田中 秀樹 | 岡山大学     | 大学院自然科学研究科 | 教授 | ナノスケールの空間中での水和構造とダイナミクス |

2-4 がん細胞膜の分子科学と膜融合

|       |          |         |    |                                    |
|-------|----------|---------|----|------------------------------------|
| 平田 文男 | 自然科学研究機構 | 分子科学研究所 | 教授 | がん細胞膜の構造ゆらぎと膜融合——RISM 法からのアプローチ——  |
| 岡崎 進  | 自然科学研究機構 | 分子科学研究所 | 教授 | 細胞膜の構造ゆらぎと膜間相互作用——分子動力学法からのアプローチ—— |
| 斉藤 真司 | 自然科学研究機構 | 分子科学研究所 | 教授 | がん発現にかかわる分子スイッチの分子動力学計算            |

2-5 ナノ生体物質輸送

|       |           |          |      |                                    |
|-------|-----------|----------|------|------------------------------------|
| 中原 勝  | 京都大学      | 化学研究所    | 教授   | 生体モデル膜への物質結合——結合量と結合位置の自由エネルギー解析—— |
| 岡崎 進  | 自然科学研究機構  | 分子科学研究所  | 教授   | ミセル生成とミセルによる物質の取り込み、輸送             |
| 三上 益弘 | 産業技術総合研究所 | 計算科学研究部門 | 副部門長 | 細胞膜（脂質二重膜）における有機分子の透過機構の研究         |
| 茂本 勇  | 東レ（株）     | 機能材料研究所  | 研究員  | 高分子ゲルのダイナミクスと物質輸送                  |

2-6 新規ナノ生体物質の創生と利用

|       |      |            |     |                    |
|-------|------|------------|-----|--------------------|
| 北尾 彰朗 | 東京大学 | 分子細胞生物学研究所 | 助教授 | 既知ナノ生体物質の機能メカニズム解明 |
|-------|------|------------|-----|--------------------|

(3) 次世代エネルギー

3-1 光触媒による太陽エネルギーの固定

|       |       |       |    |                                   |
|-------|-------|-------|----|-----------------------------------|
| 中井 浩巳 | 早稲田大学 | 理工学術院 | 教授 | 固体触媒の励起過程を取り扱う理論的手法の開発と酸化チタン系への応用 |
|-------|-------|-------|----|-----------------------------------|

3-2 光合成による太陽エネルギーの固定

|       |          |         |     |                                   |
|-------|----------|---------|-----|-----------------------------------|
| 藪下 聡  | 慶應義塾大学   | 理工学部    | 教授  | 励起エネルギーおよび電子移動速度の定量的予測のための理論手法の開発 |
| 信定 克幸 | 自然科学研究機構 | 分子科学研究所 | 助教授 | ナノスケール分子における光誘起量子多体系ダイナミクスの理論的解明  |

### 3 - 3 化石燃料からの脱却を目指すアルコール燃料サイクルの確立

|       |          |         |    |                             |
|-------|----------|---------|----|-----------------------------|
| 平田 文男 | 自然科学研究機構 | 分子科学研究所 | 教授 | 酵素反応によるセルロース分解とアルコール生成の計算科学 |
| 中原 勝  | 京都大学     | 化学研究所   | 教授 | 超臨界を用いた新規無触媒化学サイクルの創成       |

### 3 - 4 燃料電池の作動原理における分子過程の解明

|       |            |          |          |                                       |
|-------|------------|----------|----------|---------------------------------------|
| 永瀬 茂  | 自然科学研究機構   | 分子科学研究所  | 教授       | ナノ分子系の精度高い大規模量子化学計算の開発と応用             |
| 森田 明弘 | 自然科学研究機構   | 分子科学研究所  | 助教授      | 界面和周波発生分光の計算科学と液体・高分子界面の微視的構造解析への応用   |
| 南部 伸孝 | 九州大学       | 情報基盤センター | 助教授      | 非断熱現象を利用した分子設計                        |
| 兵頭 志明 | (株)豊田中央研究所 | 計算物理研究室  | 室長・首席研究員 | ナノスケール構造に基づくマクロ特性解析のための階層シミュレーション法の実現 |

### 3 - 5 エネルギー保存技術

|       |          |         |    |              |
|-------|----------|---------|----|--------------|
| 平田 文男 | 自然科学研究機構 | 分子科学研究所 | 教授 | スーパーキャパシタの開発 |
|-------|----------|---------|----|--------------|

### 3 - 6 高効率物質変換

|       |      |          |    |                                       |
|-------|------|----------|----|---------------------------------------|
| 榊 茂好  | 京都大学 | 大学院工学研究科 | 教授 | ナノスケール複合遷移金属錯体による省エネルギー高効率物質変換反応の理論開発 |
| 加藤 重樹 | 京都大学 | 大学院理学研究科 | 教授 | 溶液内およびタンパク質場における励起分子のエネルギー移動と緩和過程     |

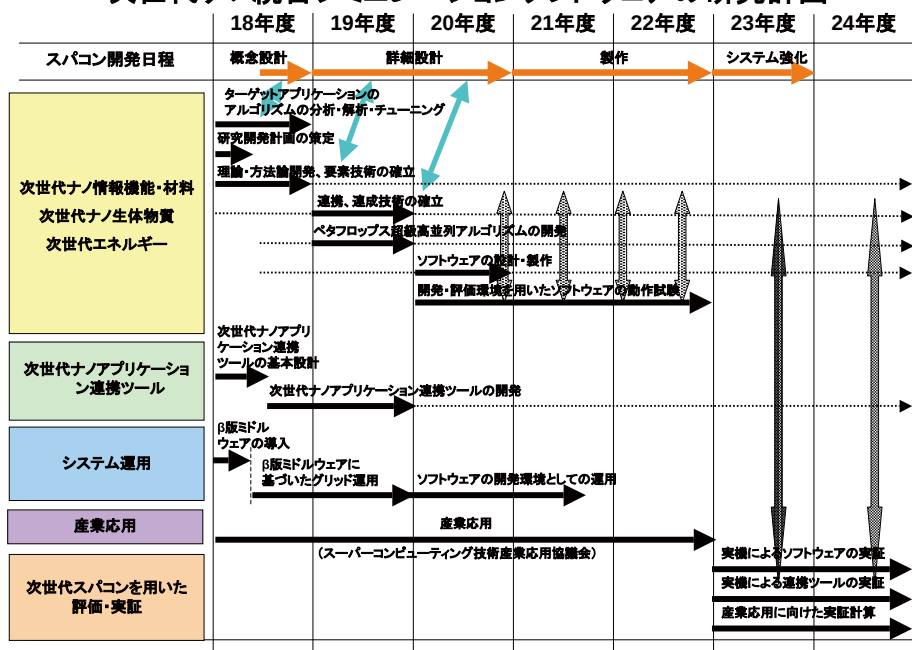
### 3 - 7 電極反応の解明

|      |      |          |    |                                  |
|------|------|----------|----|----------------------------------|
| 青柳 睦 | 九州大学 | 情報基盤センター | 教授 | 高度連成シミュレーションによる凝縮系界面の電子構造とダイナミクス |
|------|------|----------|----|----------------------------------|

## 2-14-4 「ナノ統合拠点」の研究・開発スケジュール

ナノ統合拠点の研究・開発スケジュールを下图に示す。

### 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究計画



## 2-15 エクストリームフォトニクス

平成 17 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・フォトニクス」を行っている。「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。

両研究所の研究打合せや成果報告のため, 本年度は, 4 月に理化学研究所にて第 3 回理研・分子研合同シンポジウムを開催した。このシンポジウムでは特に「エクストリーム波長の発生と応用」をテーマとし, テラヘルツ光やフェムト秒 X 線の発生と利用について議論した。さらに, 11 月には「コヒーレント光科学」を主題とした第 4 回の研究会を行い, この方面における所外の研究者にも講演を依頼し, 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っている。

## 2-16 国際交流と国際共同研究

### 2-16-1 国際交流

分子科学研究所では世界各国から第一線の研究者を招き共同研究を実施したり、若手外国人研究者の育成のため、当研究所の研究活動に参画させ活発に研究交流を実施している。これらの外国人研究者は、外国人研究職員（旧文部科学省外国人研究員）として雇用する者や、日本学術振興会等の各種事業により受け入れている。

また、多くの海外研究者や行政機関関係者が当研究所の研究現場や研究施設を視察に訪れている。

これらの海外からの来訪者は年間 100 名を越えており、事業別等の内訳は以下のとおりである（年度をまたがるものは再掲）。

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 |     |       |
|----|----------|------------------|----------|-------|-----|-------|
|    | 外国人研究職員* | 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 | 合 計   |
| 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   |
| 05 | 9        | 2                | 46       | 0     | 76  | 133   |
| 合計 | 151      | 124              | 259      | 603   | 602 | 1,739 |

\* 03 以前は文部科学省外国人研究員

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    |
|----|------|------|-----|------|-----|-----|-----|-----|-------|
| 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   |
| 05 | 17   | 9    | 21  | 26   | 18  | 17  | 5   | 20  | 133   |
| 合計 | 327  | 106  | 141 | 114  | 224 | 190 | 101 | 536 | 1,739 |

表3 海外からの研究者（2006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               |          |                                                      |                   |
| LONG, La-Sheng             | 中国       | 廈門大学助教授                                              | 17. 5. 1-18. 4.30 |
| SWIETLIK, Roman            | ポーランド    | 分子物理学研究所教授                                           | 18. 3. 1-18. 8.31 |
| ALLAKHVERDIEV, I. Suleyman | アゼルバイジャン | ロシア科学アカデミー基礎生物学研究所主席研究員                              | 18. 4. 1-18. 6.30 |
|                            |          |                                                      | 18.10. 1-19. 2.28 |
| WANG, Wenping              | 中国       | 合肥工業大学助教授                                            | 18. 4. 1-19. 3.31 |
| PAL, Nil Tarasankar        | インド      | インド科学技術研究所教授                                         | 18. 5.29-18. 8.29 |
| GAO, Yongli                | アメリカ     | ロチェスター大学教授                                           | 18. 6.15-18. 9.15 |
| LU, Xin                    | 中国       | 廈門大学教授                                               | 18. 6.15-18. 9.20 |
| DASCALU, Traian Eugeniu    | ルーマニア    | レーザーとプラズマ物理国立研究所研究主任                                 | 18.10. 1-19. 2.28 |
| KIM, Bongsoo               | 韓国       | チャンウォン国立大学                                           | 19. 3. 1-20. 1.31 |
| 3. 分子科学研究所外国人研究職員          |          |                                                      |                   |
| CHOI, Cheol Ho             | 韓国       | 慶北大学助教授                                              | 19. 3. 1-20. 1.31 |
| 4. 日本学術振興会招へい外国人研究者        |          |                                                      |                   |
| CHAN, Michael              | アメリカ     | オハイオ州立大学教授                                           | 18.11.12-18.11.28 |
| BIELAWSKI, Serge           | フランス     | リール工科大学講師                                            | 18.11.28-18.12.23 |
| 5. 国際共同研究                  |          |                                                      |                   |
| KURMOO, Mohamedally        | ドイツ      | University of Strasbourg Senior Researcher           | 18. 4. 6-18. 4.25 |
|                            |          |                                                      | 18.10.23-18.11. 5 |
| PETEK, Hrvoje              | アメリカ     | ピッツバーグ大学教授                                           | 18. 5.13-18. 5.24 |
| ROBERT, J. Levis           | アメリカ     | Temple University Professor                          | 18. 5.18-18. 5.21 |
| AGREN, Hans                | スウェーデン   | スウェーデン王立工科大学教授                                       | 18. 5.25-18. 5.27 |
| LABAT, Marie               | フランス     | CEA（フランス原子力委員会）大学院生                                  | 18. 5.27-18. 6. 4 |
| LAMBERT, Guillaume         | フランス     | CEA（フランス原子力委員会）大学院生                                  | 18. 5.28-18. 6. 4 |
| GIRARD, Bertrand           | フランス     | ポールサバティエ大学教授                                         | 18. 6. 4-18. 6.10 |
| KWON, Yong Seung           | 韓国       | 成均館大学 Professor                                      | 18. 7.10-18. 7.30 |
| LEE, Kyeng Eun             | 韓国       | 成均館大学大学院生                                            | 18. 7.10-18. 7.30 |
| YOON, Hee                  | 韓国       | 成均館大学大学院生                                            | 18. 7.10-18. 7.30 |
| FEIFEL, Raimund            | スウェーデン   | Uppsala University 大学院生                              | 18. 7.21-18. 7.22 |
| JEONG, Dae Hong            | 韓国       | ソウル国際大学 Assistant Professor                          | 18. 8. 6-18. 8.19 |
| KIM, Youngchae             | 韓国       | ソウル国際大学 Reseach Assistant                            | 18. 8. 7-18. 8.25 |
| CARNIATO, Stephane         | フランス     | Universite Pierre et Marie Curie Assistant Professor | 18. 8.13-18. 8.20 |
| PETTERSSON, Lars G. M.     | スウェーデン   | Stockholm University Professor                       | 18. 8.15-18. 8.22 |
| NORDGREN, Joseph           | スウェーデン   | Uppsala University Professor                         | 18. 8.16-18. 8.20 |
| YANG, Dong                 | 中国       | 復旦大学大学院生                                             | 18.10.31-19. 1.31 |
| RUEHL, Ruehlekart Gunthe   | ドイツ      | Free University of Berlin Professor                  | 18.11.10-18.11.12 |
| 藤田恵津子                      | アメリカ     | Brookhaven National Laboratory Senior Chemist        | 18.11.18-18.11.26 |
| SZWAJ, Christophe          | フランス     | Universite des Sciences et Technologies de Lill 講師   | 18.11.28-18.12.23 |
| EVAIN, Clement             | フランス     | Universite des Sciences et Technologies de Lill 大学院生 | 18.11.28-18.12.23 |
| SEGONDS, Patricia          | フランス     | ジョセフ・フーリエ大学助教授                                       | 19. 2. 7-19. 3. 1 |
| 6. 科学研究費補助金                |          |                                                      |                   |
| RAMAN, Coinbatore          | アメリカ     | The University of Texas Assistant Professor          | 18.11.11-18.11.19 |
| 7. 所長招へい協力研究員              |          |                                                      |                   |
| YAKOVELEV, Vladislav       | アメリカ     | ウィスコンシン大学                                            | 18. 6. 1-18. 6. 2 |
| 池津庸哉                       | アメリカ     | ネブラスカ州立大学准教授                                         | 18.10.17-18.10.17 |
| HOUGEN, Jon                | アメリカ     | National Institute of Standards 名誉研究員                | 18.11.28-18.12. 1 |
| MERER, Anthony             | アメリカ     | The Institute of Atomic and Molecular Sciences       | 18.11.28-18.12. 1 |

| 8 . 招へい研究員                |         |                                                               |                   |
|---------------------------|---------|---------------------------------------------------------------|-------------------|
| GORDON, Mark S.           | アメリカ    | Ames Laboratory and Iowa State University 教授                  | 18. 5.15-18. 5.20 |
| SHAIK, Sason              | イスラエル   | Hebrew University 教授                                          | 18. 5.16-18. 5.20 |
| MASERAS, Feilu            | スペイン    | Institute of Chemical Research of Catalonia Senior Researcher | 18. 5.16-18. 5.20 |
| BORDEN, Weston Thatcher   | アメリカ    | University of Washington 教授                                   | 18. 5.16-18. 5.20 |
| MUSAEV, Djamaladdin G.    | アメリカ    | Emory University Principal Sci. Manager                       | 18. 5.16-18. 5.20 |
| THIEL, Walter             | ドイツ     | Max-Planck-Institut für Kohlenforschung Director              | 18. 5.17-18. 5.20 |
| FRENKING, Gernot          | ドイツ     | Fachbereich Chemie Philipps-University 教授                     | 18. 5.17-18. 5.20 |
| HALL, Michael B.          | アメリカ    | Texas A&M University 教授                                       | 18. 5.17-18. 5.20 |
| SIEGBAHN, Per E. M.       | スウェーデン  | Stockholm University 教授                                       | 18. 5.17-18. 5.20 |
| DEDIEU, Alain             | フランス    | Universite Louis Pasteur 教授                                   | 18. 5.17-18. 5.20 |
| RADOM, Leo                | オーストラリア | University of Sydney 教授                                       | 18. 5.17-18. 5.20 |
| GADRE, Shridhar R.        | インド     | University of Pune 教授                                         | 18. 5.17-18. 5.20 |
| POESCH, Notker            | ドイツ     | Technischen Universität München 教授                            | 18. 5.17-18. 5.20 |
| SAUER, Joachim            | ドイツ     | Humboldt Universität zu Berlin 教授                             | 18. 5.18-18. 5.20 |
| BRUCE, C. Garrett         | アメリカ    | Pacific Northwest National Laboratory Director                | 18. 5.18-18. 5.20 |
| HERTEL, Ingolf            | ドイツ     | Max Born Institut 所長                                          | 18. 5.21-18. 5.24 |
| SUBRAMANIAM, Chandramouli | インド     | Indian Institute of Technology 大学院生                           | 18. 5.30-18. 7.18 |
| ZHAO, Yi                  | 中国      | University of Science and Technology of China Professor       | 18. 6. 1-18. 7. 8 |
| MADDEN, Paul              | イギリス    | エジンバラ大学教授                                                     | 18. 6.21-18. 6.24 |
| WENNEMERS, Helma          | スイス     | University of Basel Professor                                 | 18. 7. 2-18. 7.11 |
| CHIN, See Leang           | カナダ     | Laval University Professor                                    | 18. 7. 5-18. 7. 5 |
| ZHAO, Xiang               | 中国      | Xi'an Jiaotong University Professor                           | 18. 7.16-18. 8.27 |
| ANNE, S Ulrich            | ドイツ     | University of Karlsruhe Director                              | 18. 7.29-18. 8. 1 |
| GRIESINGER, Christian     | ドイツ     | Max-Planck-Institute for Biophysical Chemistry Director       | 18. 7.29-18. 8. 1 |
| FOEHLISCH, Alexander      | ドイツ     | Hamburg University 助手                                         | 18. 8.14-18. 8.21 |
| SIMON, Marc               | フランス    | Universite Pierre et Marie Curie Professor                    | 18. 8.15-18. 8.22 |
| GUO, Jinghua              | アメリカ    | University of California 主幹研究員                                | 18. 8.15-18. 8.25 |
| HAGUE, Coryn              | フランス    | Universite Pierre et Marie Curie Professor                    | 18. 8.15-18. 8.25 |
| BERGMANN, Uwe             | アメリカ    | Stanford University Assistant Professor                       | 18. 8.15-18. 8.25 |
| MUKAMEL, Shaul            | アメリカ    | University of California Professor                            | 18. 8.17-18. 8.20 |
| ALTHORPE, Stuart C        | イギリス    | University of Cambridge 講師                                    | 18. 8.27-18. 8.28 |
| WANG, Baolin              | 中国      | Huayin Institute of Technology Professor                      | 18. 9.22-18.10. 1 |
| UTSCHIG, Thomas           | インド     | Indian Institute of Technology 大学院生                           | 18. 9.25-18.10.27 |
| VIJAYARAGHABAVA, N. Dolly | インド     | Indian Institute of Chemical Technology 大学院生                  | 18.10.10-18.12.22 |
| WUTHRICH, Kurt            | スイス     | Institute of Molecular Biology & Biophysics Professor         | 18.10.23-18.11. 1 |
| MORTIER, Michel           | フランス    | パリ国立高等化学学院 フランス国立科学センター上級研究員                                  | 18.11.14-18.11.15 |
| SUBRAMANIAM, Chandramouli | インド     | Indian Institute of Technology 大学院生                           | 18.11.21-18.12.10 |
| 林 倫年                      | 台湾      | 国立台湾大学凝態科学研究中心副研究員                                            | 18.12. 4-18.12. 7 |
| PETRE, Cristian           | ルーマニア   | ルーマニア国立レーザー・プラズマ・放射物理研究所副主任研究員                                | 18.12. 8-18.12.18 |

## 2-16-2 国際共同研究

2006 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、科学研究のグローバル化が進み、また、東アジア地区における科学研究の急速な活性化の流れの中で、21 世紀にふさわしい国際共同研究拠点としての体制を構築することが急務となっている。

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。この新しい国際共同研究のプログラムでは、研究所内の教員による国際共同研究の提案を受け、所内委員による審査を経て、海外の教授、助教授クラスの研究者の 10 日間程度の招聘、分子研側からの共同研究に関わる教員の海外出張、アジアを中心とする若手外国人研究者の 6 ヶ月以内の滞在、などを伴う国際共同研究が推進されている。本プログラムによる国際共同研究の採択件数は初年度（平成 16 年度）7 件、平成 17 年度 10 件、本年度は 12 件と年々増加し、分子科学研究所の国際的な研究活動の活性化に大きく寄与している。本年度は、アジアの若手研究者の長期滞在、フランス、韓国、中国、スウェーデン、カナダ、米国、ドイツ等の研究者の招聘および分子科学研究所の研究者の海外訪問などを通して共同研究が推進された。本年度開始されたアジア研究教育拠点事業とともに、明年度以降も国際共同研究の拠点としての分子科学研究所の活動に寄与することが期待される。

### 2006 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              |
| 繁政 英治 | 分子の深い内核電子の光励起と解離ダイナミクス           |
| 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           |
| 平等 拓範 | 複屈折性による疑似位相整合非線形波長変換の多機能化        |
| 加藤 政博 | 自由電子レーザー発振のビーム力学的研究              |
| 小杉 信博 | 軟 X 線共鳴分光に関する国際共同研究（UVSOR BL3U）  |
| 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         |
| 岡本 裕巳 | 金属微粒子凝集体におけるプラズモン誘起電場増強の近接場分光    |
| 田中 晃二 | 水の光化学的酸化反応と二酸化炭素の多電子還元反応         |
| 江 東林  | 光捕集アンテナの分子設計および自己組織化に関する研究       |
| 小林 速男 | 多重機能性分子物質の開発とその構造および物性研究         |

## (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。第9回は2007年10月27日 - 29日に北京で開催される予定である。

## (4) 日中拠点大学交流事業（加速器科学）

本国際共同研究はアジア地域の加速器分野における交流事業であり、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年度に、日本・中国間の交流事業としてスタートしたが、現在では韓国・インドがこれに加わり多国間事業として継続している。日本の拠点機関は高エネルギー加速器研究機構であり、中国は高能物理研究所、韓国は浦項工科大学附属加速器研究所、インドはラジャ・ラマンナ先端技術センターがそれぞれ拠点機関となっている。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) 電子加速器に関する研究、(B) 素粒子物理学に関する研究、(C) 放射光科学に関する研究の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（UVSOR）が、上記(C)の放射光科学分野での共同研究に参加している。特に、UVSORと電子エネルギーや規模の似ている中国科学技術大学の放射光施設 NSRL との間で、相互訪問を通じた人的交流を行っている。

### 2-16-3 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ところとなり、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、全国の分子科学研究者からの申請に基づく「岡崎コンファレンス」を引き継ぐような小規模国際研究集会の枠組みをこれまで探索してきたが、継続的に開催していくためには分子研独自の事業として運営費交付金を使うしか方策がないことがわかった。その検討結果を受けて、平成18年度から再開することを決断し、6年半ぶりに以下のような第66回岡崎コンファレンスを開催した。今後、当分の間、申請の中から毎年1件のみ採択して開催し、その実績を踏まえて件数を増やすかどうか再検討する予定である。

会 議 名：第66回岡崎コンファレンス

“International Workshop on Soft X-ray Raman Spectroscopy and Related Phenomena (IWSXR)”

期 間：2006年8月17日～19日

場 所：岡崎コンファレンスセンター

組織委員：分子科学研究所 小杉信博(代表) 岡本裕巳(副) 繁政英治、初井宇記

諮問委員：中村宏樹(所長) Joseph Nordgren(外国人運営顧問) Marc Simon(国際共同研究者)

内 容：

軟X線は窒素や酸素に吸収されるため、地上の自然界では存在していない光であり、放射光源で作り出した軟X線を真空のまま取扱う必要がある。しかし、軟X線を透過する適当な薄膜を使うことで真空と切り離すことができる。薄膜を使うことで薄膜を透過しない電子やイオンなどの観測は不可能となるが、価電子により非弾性散乱した軟X線を観測するラマン分光は可能である。軟X線ラマン分光によってこれまでの軟X線分光では扱えなかった液体や溶液などの研究が可能になった。ただし、ラマン過程の遷移確率は非常に小さいため、最近の強力な放射光源を使うこと

で初めて本格的な研究が可能になる。本岡崎コンファレンスでは以下のように 18 人の招待講演者の講演を中心に軟 X 線ラマン分光と関連現象の実験及び理論について議論した。

#### **Thursday Afternoon, August 17**

Opening Remarks by Nobuhiro Kosugi

*Session 1. Fundamental Aspects (chair: Nobuhiro Kosugi)*

Joseph Nordgren, Uppsala Univ., Sweden

Resonant Soft X-ray Emission for Materials Science and Chemical Physics

Shik Shin, Univ. Tokyo/RIKEN/SPRING-8, Japan

High resolution soft X-ray emission spectroscopy of transition metal compounds and heme proteins

Uwe Bergmann, Stanford Univ., U.S.A.

Advances in X-ray Raman Spectroscopy in both Resonant and Non-Resonant Applications

Kenji Ohmori, IMS, Japan

Visualizing and controlling picometric quantum ripples in molecules

Get-Together Party

#### **Friday Morning, August 18**

Welcome Address by Hiroki Nakamura (Prof., Director-General of IMS)

*Session 2. Molecules & Raman effects (chair: Takaki Hatsui)*

Marc Simon, LCP-MR, France

Resonant inelastic X-Ray scattering around the chlorine K shell of the HCl molecule: role played by the nuclear dynamics in the tender X-Ray region

Stephane Carniato, LCP-MR, France

Theoretical Simulations of Resonant Inelastic X-Ray Scattering Spectra in K-shell Cl Core-Excited Chlorinated Molecules

Victor Kimberg, IMS, Japan

Resonant X-ray Raman scattering: Doppler effect versus scattering, role of the detuning and the shape of the spectral function

Alexander Föhlisch, Hamburg Univ., Germany

Vibrational and thermal effects in resonant inelastic X-ray scattering

#### **Friday Afternoon, August 18**

*Session 3. Poster Session*

*Session 4. Materials Science and Experimental Techniques (chair: Eiji Shigemasa)*

Jinghua Guo, ALS, LBNL, U.S.A.

Resonant inelastic soft-x-ray scattering studies of nanostructured strong correlated materials

Munetaka Taguchi, RIKEN/SPRING-8, Japan

Theory of Resonant Inelastic X-ray Scattering at Transition Metal L<sub>2,3</sub> edge: dd Excitation, Charge-Transfer Effects and Their Interplay

Hisashi Hayashi, Japan Women's Univ., Japan

Resonant inelastic x-ray scattering spectroscopy for advanced XAFS studies

Takashi Tokushima, RIKEN/SPRING-8, Japan

Development of a high performance slit-less spectrometer and a liquid flow cell for soft X-ray emission spectroscopy

Takaki Hatsui, IMS, Japan

Development and performance of a transmission-grating spectrometer for soft X-ray emission studies

Coryn Hague, LCP-MR, France

Preparing for resonant soft x-ray Raman spectroscopy at SOLEIL

Conference Dinner

#### **Saturday Morning, August 19**

*Session 5. Water and Solutions (chair: Hiromi Okamoto)*

Lars G.M. Pettersson, Stockholm Univ., Sweden

Theoretical and experimental x-ray investigations of liquid water structure

Shinji Saito, IMS, Japan

Theoretical study of two-dimensional Raman spectroscopy: Anharmonic dynamics and local hydrogen bond network structure in liquid and solid water

Susumu Okazaki, IMS, Japan

A molecular dynamics study of vibrational relaxation of solute molecule in solution

Shaul Mukamel, Univ. California, Irvine, U.S.A.

Non-linear ultrafast X-ray spectroscopy; Theoretical challenges

Closing Remarks by Nobuhiro Kosugi

## 2-16-4 アジア研究教育拠点事業

日本学術振興会は、平成 17 年度より新たな多国間交流事業として、アジア研究教育拠点事業（以下アジアコア事業）を開始した。本事業は、我が国において先端的又は国際的に重要と認められる研究課題について、我が国とアジア諸国の研究教育拠点機関をつなぐ持続的な協力関係を確立することにより、当該分野における世界的水準の研究拠点の構築とともに次世代の中核を担う若手研究者の養成を目的として実施されるものである。

分子科学研究所は、「物質・光・理論分子科学のフロンティア」と題して、この日本学術振興会アジアコア事業に提案し、18 年度開始事業（23 年度 3 月まで）として採択された。具体的な拠点機関は以下の通り東アジア主要 3 カ国 1 地域である。

- ・ 分子科学研究所
- ・ 中国科学院化学研究所
- ・ 韓国科学技術院自然科学部
- ・ 台湾科学院原子分子科学研究所

これら 4 拠点研究機関以外の大学や研究機関も研究交流に参加することができる。21 世紀はアジアの時代と言われており、本事業を契機に分子科学においても欧米主導の時代を離れ、新たな研究拠点をアジア地域に構築し、さらにはアジア拠点と欧米ネットワークを有機的に接続することによって、世界的な研究の活性化と新しいサイエンスの出現をねらう。

平成 18 年度に実施した内容は以下の通り。

- (1) H18 年 11 月 29 日 中国・日本グリーン化学合成シンポジウム（北京、中国科学院化学研究所）

参加者国別内訳は以下のとおり。

日本 8 人、中国 80 人

- (2) H18 年 12 月 5 日～9 日 第 1 回冬の学校（北京、中国科学院化学研究所）

参加者国別内訳は以下のとおり。

日本 30 人、中国 42 人、韓国 12 人、台湾 9 人

- (3) H19 年 3 月 2 日～3 日 第 1 回全体会議（分子科学研究所）

参加者国別内訳は以下のとおり。

日本 91 人、中国 7 人、韓国 6 人、台湾 4 人、米国 2 人

- (4) 一対一共同研究

これまで積み重ねてきた研究拠点機関間の研究者の交流を再構築し、物質・光・理論分子科学の各分野において活発な共同研究、研究交流を開始した。

物質分子科学

分子科学研究所の江東林助教授と中国科学院化学研究所の Deqing Zhang 教授は、浙江大学（中国）の Zhiqian Shen 教授と共に「 $\pi$  電子系有機分子を基盤とする機能性ナノ構造体の構築と機能開拓」に関する共同研究を開始した。本共同研究は従来の炭素ナノ素材では実現できない光機能性に着目し、光機能性  $\pi$  電子系有機分子を設計し、様々な光

機能性ナノ構造体を合成することを目的としている。江東林助教授グループの物質合成と化学研究所の Deqing Zhang 教授グループの自己組織化、また、浙江大学 Zhiquan Shen 教授グループの物質変換科学との異分野のシームレスな融合により新しい物質科学の創出および世界をリードするアジア若手の育成を目指している。平成 18 年度では、上述の戦略目標を達成するため、様々な新しい機能性  $\pi$  電子系有機分子や  $\pi$  電子系有機配位子の設計および合成を行い、自己組織化のための分子プログラミングプロトコルを確立するとともに、ナノ構造体の分子設計の基礎を築いた。得られたナノ構造体の情報を分子設計にフィードバックし、分子構造の最適化を進めている。

分子科学研究所の宇理須恒雄教授と中国科学院化学研究所の Li-Jun Wan 教授は、河南大学（中国）の Yu-Jun Mo 教授、上海交通大学（中国）の Changsun Wang 教授と共に、細胞等の生体材料の水中での原子間力顕微鏡による高分解イメージングについての共同研究を開始した。平成 18 年度は、生体細胞膜の AFM その場観察、脂質二重膜の AFM および光学的評価、Si 基板の微細加工および、バイオセンサー応用についての研究を進めた。

分子科学研究所の加藤晃一教授と韓国科学技術院（KAIST）自然科学部の Byong-Seok Choi 教授は、光州科学技術院（Kwangju Institute of Science & Technology, 韓国）の Jae Il Kim 教授と共に「超高磁場 NMR を用いた蛋白質 - ペプチド相互作用の精密解析」に関する共同研究を開始した。分子科学研究所に設置された 920MHz 超高磁場 NMR 装置はペプチドと蛋白質の相互作用を高精度で解析するための強力なツールとなることが期待される。本共同研究は、ペプチド合成と分子生物学的手法を駆使することによって、安定同位体標識を施したペプチドおよび糖ペプチドを効率的に生産し、超高磁場 NMR をはじめとする分光学的計測手法を徹底活用して標的蛋白質との結合様式の詳細を原子レベルの分解能で解明することを目的としている。さらには、本共同研究を基盤として、超高磁場 NMR 装置の活用を軸とした、日韓の分子科学の学術交流ひいてはアジアの研究教育の振興に資することを目標としている。

#### 光分子科学

分子科学研究所の岡本裕巳教授と中国科学院化学研究所の Minghua Liu 教授は、「特異なナノ分子システムのナノ光学」に関する共同研究を開始した。本研究では、独自の高度な技術を持つ物質開発グループ（Liu 教授グループ）と光計測グループ（岡本教授グループ）が国際的に協力することで、ナノ構造物質の新たな光学的・物理化学的性質を見だし解明し、新たな機能を開発することを目標としている。18 年度はそのための準備段階として、互いの研究グループのポテンシャルをよく理解し、最も効率的で学術的に有意義な共同研究がどのような形であるかを、研究者の相互訪問によって議論し、同時に互いの信頼関係の確立を進めた。

分子科学研究所の大島康裕教授と台湾科学院原子分子科学研究所（IAMS）の Yen-Chu Hsu 上級研究員は、同じく IAMS の Chi-Kung Ni 研究員、国立清華大学（台湾）の I-Chia Chen 教授、国立中央大学（台湾）の Bor-Chen Chang 教授と共に「コヒーレントレーザ分光による反応ダイナミックスの解明」に関する共同研究を開始した。本研究計画は、通常のパルスレーザに比較して格段に高いコヒーレンスを有するレーザを開発して高分解能コヒーレント分光に活用することにより、光励起した分子が引き起こす多様な化学反応や緩和過程の詳細を解明し、さらに、そのような励起分子のダイナミックスが周辺環境との相互作用によってどのように影響されるかを明らかにすることを目的としている。18 年度は、日本より研究者 4 名が台湾 IAMS を訪問、また、台湾より研究者 3 名が分子研を訪問し、ナノ秒コヒーレントパルス光源の性能評価ならびに利用法について意見交換を行なった。

## 理論分子科学

分子科学研究所の岡崎進教授と台湾科学院原子分子科学研究所 (IAMS) の Dah-Yen Yang 上級研究員は、分子研の森田明弘助教授、IAMS の S. H. Lin 上級研究員、国立陽明大学 (台湾) の Sheh-Yi Sheu 教授と共に「生体分子中における量子過程の計算機シミュレーション」についての具体的な課題設定等、検討を開始した。本研究では、タンパク質や生体膜など生体分子の機能発現に本質的な役割を果たしているプロトン移動や電子移動、さらにこれらの過程に密接に関連している振動励起や緩和などの量子過程に対する計算科学的研究手法の確立を目的とし、主として量子統計力学や量子古典混合系近似等を用いたシミュレーション手法の開発を行う。18年度は、台湾側参加者が得意とするタンパク質のダイナミックスに関わる手法と、日本側参加者が得意とする原子核の量子動力学に関わる手法とを比較検討し、両者の方法論を共有・融合することからはじめて、具体的な研究内容についての検討を開始した。

## 2-17 自然科学研究機構連携事業

### 2-17-1 イメージング・サイエンス

#### (1) 経緯と現状

研究所の法人化に伴い5研究所を擁する自然科学研究機構が発足し、5研究所をまたぐ新研究領域創成の一つのプロジェクトとして「イメージング・サイエンス」が取り上げられることとなった。以下に、その経緯と現状について述べる。

平成16年度に機構が発足した後、研究連携室で議論がなされ、機構内連携の一つのテーマとして「イメージング・サイエンス」を立ち上げることが決定された。連携室員の中から数名の他に、各研究所からイメージングに関連する研究を行っている教授・助教授1～2名が招集され、「イメージング・サイエンス」小委員会として、公開シンポジウムその他プロジェクトの推進を担当することとなった。

平成17年8月の公開シンポジウム（後述）の後、小委員会において、本プロジェクトの具体的な推進について議論を行った。この機会に、各研究所が持つ独自のバックグラウンドを元に、それらを結集して、広い分野にわたる波及効果をもたらすような、新しいイメージング計測・解析法の萌芽を見いだすことが理想、という議論がなされた。それに向けた方策として、機構内の複数の研究所にまたがる、イメージングに関連する具体的な連携研究テーマをいくつか立てる案を連携室に提案したが、予算の問題等もあってこれは実現しなかった。

現状では、機構の特別教育研究経費「分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成」の新分野創成型連携プロジェクトの項目として、イメージングに関連した研究所をまたがる提案が数件採択されている（「イメージング・サイエンス——超高圧位相差電子顕微鏡をベースとした光顕・電顕相関3次元イメージング——」など）。これが上述の提案に代わるものとして、「イメージング・サイエンス」に係る具体的な機構内連携研究を推進している。

#### (2) 実施された行事

このプロジェクトの具体的な最初の行事として、各研究所のイメージングに関わる興味の対象と研究ポテンシャルを、5研究所が互いに知ることを目的として、「イメージング・サイエンス」に関する公開シンポジウムを開催することとなった。

平成17年8月8日・9日に、「連携研究プロジェクト Imaging Science 第1回シンポジウム」として、公開シンポジウムが岡崎コンファレンスセンターで開催された。このシンポジウムでは、天文学、核融合科学、基礎生物学、生理学、分子科学におけるイメージング関連研究に関する、機構内外の講師による16件の講演、及び今後の分野間連携研究に関する全体討論が行われた。参加者は機構外36名、機構内148名、大学院生80名、合計264名を数えた。また、講演と全体討論の内容は、175ページのプロシーディングス（日本語）としてまとめられ、同年12月に発行された。この機会によって機構内のイメージング・サイエンス関連研究に関する研究所間の相互理解が進み、その後の機構内連携研究の推進に相当に寄与したと考えられる。

平成18年3月21日には、立花隆氏のコーディネート、自然科学研究機構主催で「自然科学の挑戦シンポジウム」が東京・大手町で開催された。これは、一般の観客を対象に、機構の研究アクティビティーをアピールすることを目的として、立花氏が企画して実現したもので、当日は約600名収容の会場がほぼ満席となる一般参加者があった。このシンポジウムの中で、「21世紀はイメージング・サイエンスの時代」と称して、イメージングを主題とするパネルディスカッションが組まれた。ここにはパネラーとして「イメージング・サイエンス」小委員会委員を中心とする講師によって、5研究所全てから、各研究所で行われているイメージング関連の研究の例が紹介され、最後に講師が集

まりパネルディスカッションが開かれた。

平成 18 年 12 月 5 日 - 8 日には、第 16 回国際土岐コンファレンス（核融合科学を中心とする国際研究集会）が核融合研究所主催で土岐市において開催された。この会議ではサブテーマが “ Advanced Imaging and Plasma Diagnostics ” とされ、プラズマ科学に限らず、天文学、生物学、原子・分子科学を含む広い分野におけるイメージング一般に関するシンポジウムとポスターセッションが企画された。分子科学研究所からも、数名が参加し、講演及びポスター発表を行った。

## 2-17-2 自然科学研究機構 新分野創成型連携プロジェクト 自然科学における階層と全体

自然科学研究機構の新分野創成型連携プロジェクトとして実施されている「自然科学における階層と全体」は、分子科学研究所、生理学研究所、基礎生物学研究所により実施されている「プロジェクト 1：生物系における情報統合と階層連結」と核融合科学研究所、国立天文台を中心として実施されている「プロジェクト 2：重力多体系・プラズマ系における連結階層シミュレーション研究拠点形成——長距離相互作用が支配する多体複雑系での連結階層シミュレーション研究拠点形成——」の二つのプロジェクトを中心にしている。全体会議、シンポジウム等は、2つのテーマを合同で扱い、自然科学に於ける階層と全体という新しい視点で自然科学の理解を深め、新分野創成に繋げて行くことを目指している。

分子科学研究所が主に関与しているプロジェクト 1 の概要は、以下の通りである。生物系における研究においては、遺伝子や蛋白質に関する分子レベルでの膨大な情報が得られている一方で、これら分子レベルの情報から、生理機能の発現や形態形成などの「生物らしい」振る舞いが生じるプロセスについては、未解明な点が多く残されている。これは、生体が、分子、細胞、器官、個体といった異なる階層により構成されていることにも起因している。生体機能の成り立ちを知るためには、各階層において「階層を構成する素子（エレメント）についての理解」から始まり、「階層内でのエレメントの複合体化と情報のやりとりによる機能創出機構」の解明、さらには「上位階層への連結機構」を明らかにすることが必要である。分子・細胞の階層を例にあげると、各分子の機能を明らかにするだけではなく、分子複合体形成による新規機能の創出、分子間の情報伝達による機能統合を知ることにより、はじめて、細胞機能の成り立ちの仕組みが理解できると考えられる。すなわち、遺伝子や蛋白質など分子レベルの情報が、細胞機能のようなマクロなレベルへ伝達される過程を理解すること、分子が担う情報がよりマクロな階層で統合され、細胞や組織さらには個体の振る舞いが創発される過程を理解することが、我々が取り組むべき課題であるとも言える。

本プロジェクトにおいては、異なる研究バックグラウンドを有する研究者が、上記のような意識を共有した上で、有機的な連携を計りつつ、「生物系における情報統合と階層連結」に関する包括的理解に向けて、具体的には以下に述べるような研究を行う。分子科学研究所からは、小澤岳昌助教授がテーマ(1)、青野重利教授がテーマ(2)に関する研究を進める。

テーマ(1): 生体内における情報統合および機能統合を解析するための新規な研究ツールの開発を目的として研究を行う。本研究では、タンパク質再構成系 (protein reconstitution system) という新たな概念に基づくレポータータンパク質を創案・開発し、生きた動植物個体内で機能する生体分子を可視化するための、新たな原理に基づくプローブ分子を開発する。具体的には、RNA、タンパク質間相互作用、タンパク質リン酸化、酵素活性、セカンドメッセンジャー、ステロイドホルモン等を標的とし、蛍光あるいは発光に情報変換するプローブ分子を開発する。また、他の研究グループの研究に対し、このようにして開発したプローブ分子の積極的な適用を計る。

テーマ(2): 分子間情報伝達による情報統合および機能統合の分子機構解明を目的として研究を行う。本研究では、外部情報による遺伝子発現ネットワークの制御に関与するセンサー型転写調節因子、外部情報(外部環境シグナル)による細胞運動制御系である走化性制御系を対象として研究を行う。特に、センサー型転写調節因子による外部情報センシング機構および遺伝子発現調節機構の解明、走化性制御系における情報統合機構の解明、ならびに統合された情報が如何にして細胞の運動制御というマクロな性質に反映されるのか、その分子機構の解明を中心に研究を進める。

テーマ(3): 分子階層における情報の統合により細胞階層での機能を理解することを目的として研究を行う。本研究では、イオンチャネル・受容体等の神経細胞の機能素子の、分子間相互作用や分子複合体形成による機能修飾に関する研究を行う。具体的には、代謝型グルタミン酸受容体の分子複合体形成によるG蛋白質応答の種類の切り換え、ATP受容体チャネルの発現状況依存的な構造と機能の変化、細胞長伸縮に寄与する陰イオントランスポーターファミリーに属するプレスチンの分子複合体の同定とその機能的意義の解析に焦点をあてて研究を進める。

テーマ(4): 生体情報の統合による個体階層での行動の規定について理解することを目的として研究を行う。本研究では、空腹等の生体情報や、脂肪細胞由来の液性調節因子レプチン等による情報が視床下部で統合されて、摂食行動やエネルギー消費行動に結びつく機構を明らかにする。なかでも、視床下部における生体情報の統合に重要な役割を果たしている酵素AMPキナーゼの働きに着目して、この遺伝子を改変した実験動物等を用いて行動レベルでの研究を進める。

テーマ(5): 情報が統合され機能が創出される過程を、数理的手法を用いて研究する。本研究では、シグナル分子の個別的な相互作用から、分子の時空間分布の非一様性が作り出され、生体機能が生まれる過程を、ダイナミクスとして捉え、微分方程式系などを用いて解析する。具体的には連携内の他のグループの実験データを対象とした共同研究を目指す。生体機能創出に必要な、分子間相互作用の条件を、力学系理論を元に定める。これにより、分子階層における情報を統合し、機能階層の視点から意義付けを行うと同時に、それぞれの階層における振る舞いを予測する。

テーマ(6): 分子キラリティのような分子レベルでの情報が、細胞や個体といった上位階層の情報に展開されていく過程の解明を目的として研究を行う。本研究では、発生における生物の左右性決定において、マウス初期胚の繊毛が作る左向き水流(ノード流)の役割を解明する。ケモルミネッセンスや二光子顕微鏡といったイメージング技術を用い、*in vivo*でノード流がどのような水流のパターンを作るか調べる。また水流が体の右側と左側の細胞に何らかの差を生み出す機構として、シグナル分子の不均一な拡散、あるいは分子ではなく物理的な刺激が働いている可能性を想定し、シミュレーションによる検討を行うと共に、カルシウム濃度や膜電位の測定、分子プローブによってその実体を探索する。

今年度は、7月19日、20日の二日間、箱根において「自然科学における階層と全体」第3回シンポジウムを開催した。本シンポジウムには、外部からの講演者とプロジェクト1ならびにプロジェクト2に参加している研究者からの講演の他、全体討論を行い今後のプロジェクトの進め方についても議論した。12月25日には、岡崎において「プロジェクト1: 生物系における情報統合と階層連結」に参加しているメンバーによる今年度の成果報告会を行い、成果の総括と今後の方針が話し合われた。

## 2-17-3 分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成 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

方法論の開発からそれに基づいた巨大計算にいたるまで、分子・物質の第一原理から出発した計算科学研究の中核拠点を形成し、物質科学および分子・物質を核とするナノサイエンス、バイオサイエンス等の自然科学の諸分野における世界の主導権を獲得することを目的として、分野間連携に基づいて、分子科学、核融合科学、生命科学、天文学といった異なる自然科学階層に属する各分野での異なる物質観、異なる方法論をお互いに共有しまた融合することにより、特に大規模複雑系を構成する分子・物質に対する計算科学研究にブレークスルーを実現するとともに、それぞれの分野においても方法論に新機軸をもたらし、学際的新分野を形成することを目指している。

更に、機構内外におけるこのような活動を通して、分子・物質シミュレーションナショナルセンター形成へ向けての基盤形成を行っている。

このため、2006年度は、連携研究、ワークショップ、人材育成等について以下に示すような活動を行った。

### (1) 連携研究

連携推進課題（3課題）（\*責任者）

- ・巨大計算に向けた粒子シミュレーション手法の開発（分子研・岡崎\*、平田、永瀬、斉藤、核融合研・堀内、天文台・富阪、東大・北尾、産総研・森下）
- ・分子多量体形成と生理機能（基生研・望月\*、生理研・永山、分子研・斉藤、岡崎、東大・北尾）
- ・物質・電磁場相互作用系のシミュレーション（分子研・信定\*、米満、森田、核融合研・中島）

連携課題（13課題）

- ・プラズマ大規模シミュレーションのための効率的並列計算手法開発（核融合研・堀内、中島）
- ・輻射輸送計算を用いた星間化学進化の研究（天文台・富阪）
- ・ミトコンドリアの energetics simulation（生理研・永山）
- ・概日リズム振動の生体分子反応シミュレーション（基生研・望月）
- ・両親媒性分子水溶液の大規模分子動力学計算（岡崎）
- ・量子古典結合多粒子系の非平衡集団運動制御の理論（米満）
- ・界面和周波発生分光の理論計算手法の開発（森田）
- ・ナノ分子の量子化学計算（永瀬）
- ・電磁場と露わに相互作用した多電子ダイナミックスの解析（信定）
- ・3次元 RISM による分子認識（平田）
- ・分子動力学計算に基づく凝縮系ダイナミックス（斉藤）
- ・第一原理分子動力学計算による液体及びアモルファスのポリモルフィズム（産総研・森下）
- ・生体超分子の立体構造変化と機能（東大・北尾）

### (2) ライブラリの整備

### (3) ワークショップ

- |                        |             |
|------------------------|-------------|
| ・第3回連携シンポジウム           | 3月15日       |
| ・第2回国際シンポジウム           | 5月17日 - 19日 |
| ・分子・物質シミュレーション中核拠点セミナー | 第11回～第20回   |
| ・討論会、学会の共催             |             |

#### (4) 人材育成

##### 第2回集中セミナー

「QM/MM法の基礎と応用 - 大規模分子計算へのアプローチ」12月25日 - 27日

#### (5) 実施体制

機構内12グループ      計算分子科学、理論分子科学、天文台、核融合研、生理研、基生研

機構外2グループ      東大、産総研

## 2-17-4 自然科学研究機構シンポジウム

### 「爆発する光科学の世界——量子から生命体まで——」

分子科学研究所が中心となって、平成18年9月24日(日)に東京国際フォーラム(東京都千代田区)にて自然科学研究機構シンポジウムを開催した。前回の平成18年3月22日第1回に続き、2度目の開催であった。当日は、台風が心配されたが秋晴れとなり、関係者を除き525人の参加者で会場が埋め尽くされた。

今回のシンポジウムでは「光科学」をキーワードに、分子科学研究所が中心となり、光科学に関する最先端の研究を紹介した。講演会は「新しい光源」、「光と分子」、「光と生命体」の3部構成で行われた。まず、志村機構長の開会の辞に続いて、立花隆氏が聞きどころを紹介された。つづいて、松本吉泰教授がイントロダクションとして「新しい光源、光と分子」の概説と光の性質についての基礎的な話をした。その後、分子研が頻繁に利用する2種類の光源の紹介として、平等拓範助教授が手のひらサイズの高輝度レーザーの最先端について、加藤政博教授からシンクロトン放射の原理や分子研放射光施設 UVSOR-II の紹介および今後の展望について講演した。平等助教授が光源の小型化と単色性の重要性を強調し、加藤教授が大型加速器を用いた白色性を重視したのは対照的であった。

午後は、大森賢治教授が、量子力学の不思議として光の二重性(粒子性と波動性)、自身のアト秒精度での原子波の干渉実験、分子を使った量子メモリーなどに関して紹介した。次に化学の話に移り、江東林助教授は、デンドリマー分子を利用し、枝の部分で吸収した光エネルギーを分子中心に集めることが出来る分子設計、水の光還元、さらに医療への応用やその将来性について講演した。続いて、藤嶋昭先生(神奈川科学技術アカデミー理事長)はご自身の本多・藤嶋効果の発見から現在に至る一貫したTiO<sub>2</sub>光触媒の基礎的、応用的研究に関して熱弁下さった。

続いて、光と生命体へと話が移り、三室守先生(京都大学)の概説に引き続き、基礎生物学研究所の和田正三先生が葉緑体の光感知と細胞内移動について、総合研究大学院大学・基礎生物学研究所の渡辺正勝先生がミトコンドリアの光センサーについて、生理学研究所の鍋倉淳一先生が二光子顕微鏡による脳の神経ネットワーク観察について講演された。

すべての講演の後には立花隆氏が質問やコメントをする時間を設けた。同氏の時には刺激的な質問やコメントは聴衆が違った角度から講演内容を捉えるのに役立ったと考えられる。また、最後の総括では、立花隆氏が、光科学は幅広く生活に関係し、今後日本の技術発展にどれほど必要で重要であるかを述べられた。閉会の辞として、分子研の中村宏樹所長が今後の光科学の展望と多くの方の静聴に対する謝辞を述べ、会は終了した。

前回に引き続き今回もほとんど途中で席を立つ参加者もなく、朝10時から夕方5時30分まで終始大盛況であった。話題が豊富すぎ、プログラムがタイトすぎだったかもしれない、お昼の休憩や講演の合間に展示の説明をする時間がほとんどとれなかった。それでもわずかな時間に多くの方が展示にも足を運んでくださった。参加された方の長時間にわたる熱心なご静聴と自然科学への熱い想いに感謝したい。

## プログラム

|               |                                                  |
|---------------|--------------------------------------------------|
| 10:00 ~ 10:05 | 機構長挨拶 志村令郎（自然科学研究機構）                             |
| 10:05 ~ 10:10 | 趣旨説明 プログラムコーディネーター 立花 隆                          |
| 【新しい光源】       |                                                  |
| 10:10 ~ 10:25 | Overview 松本吉泰（分子科学研究所）                           |
| 10:25 ~ 11:05 | 光シンセサイザーを手のひらに——マイクロ固体フォトニクスの新展開—— 平等拓範（分子科学研究所） |
| 11:05 ~ 11:45 | 宇宙の光を地上でつくる——シンクロトロン光源—— 加藤政博（分子科学研究所）           |
| 11:45 ~ 12:50 | 休憩                                               |
| 【光と分子】        |                                                  |
| 12:50 ~ 13:30 | 量子のさざ波を光で制御する 大森賢治（分子科学研究所）                      |
| 13:30 ~ 14:10 | 光を吸う分子の木 江 東林（分子科学研究所）                           |
| 14:10 ~ 14:50 | 光触媒がもたらす安全・安心な社会 藤嶋 昭（神奈川科学技術アカデミー）              |
| 14:50 ~ 15:05 | 休憩                                               |
| 【光と生命体】       |                                                  |
| 15:05 ~ 15:20 | Overview 三室 守（京都大学）                              |
| 15:20 ~ 16:00 | 葉緑体の光による細胞内移動 和田正三（基礎生物学研究所）                     |
| 16:00 ~ 16:40 | 光を見る微生物のしくみ 渡邊正勝（総合研究大学院大学・基礎生物学研究所）             |
| 16:40 ~ 17:20 | 発達する脳を光で見よう 鍋倉淳一（生理学研究所）                         |
| 17:20 ~ 17:25 | 総括 プログラムコーディネーター 立花 隆                            |
| 17:25 ~ 17:30 | 閉会挨拶 中村宏樹（分子科学研究所長）                              |

各講演内容の詳細は立花ゼミ公式サイト「サイ」<http://www.kuba.co.jp/nins/index.html> に紹介されている。

## 2-18 大学院教育

### 2-18-1 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<br>～ 96 | 97 | 98 | 99 | 00 | 01 | 02 | 03 | 04 | 05 | 06 |
|----------|--------------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| 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     | 29           | 1  | 1  |    |    |    |    |    |    |    |    |
| 東京工業大学   | 24           |    |    |    |    | 4  | 6  | 6  | 2  |    |    |
| お茶の水女子大学 | 6            |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
| 横浜国立大学   | 1            |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
| 金沢大学     | 6            | 3  |    |    | 1  | 1  |    |    |    |    |    |
| 新潟大学     | 4            |    |    |    |    |    |    |    |    |    | 1  |
| 福井大学     | 4            |    | 1  | 3  | 2  |    |    |    |    |    |    |
| 信州大学     | 2            | 1  |    |    |    | 1  |    |    |    |    |    |
| 岐阜大学     | 2            |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
| 名古屋大学    | 61           | 3  | 3  | 1  | 2  | 6  | 2  | 2  |    |    | 3  |
| 愛知教育大学   |              |    |    |    |    |    |    |    |    |    | 1  |
| 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     | 30           | 2  | 2  | 1  | 3  | 1  | 1  |    |    | 2  | 1  |
| 京都工芸繊維大学 | 6            |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
| 大阪大学     | 24           |    |    |    | 1  | 1  |    |    |    |    |    |
| 神戸大学     |              | 1  | 1  | 1  | 1  |    | 1  |    |    |    |    |
| 奈良教育大学   | 1            |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
| 奈良女子大学   | 4            |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
| 島根大学     |              |    |    |    |    |    | 1  |    |    |    |    |
| 岡山大学     | 10           | 1  |    |    |    | 2  | 2  |    |    | 1  |    |
| 広島大学     | 32           |    |    | 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     | 34           | 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<br>大学院大学 |     |    |    |    |    |    | 4  |    | 2  |    |    |
| 首都大学東京            | 17  |    |    |    |    |    |    |    | 2  |    | 1  |
| 名古屋市立大学           |     |    |    |    | 4  |    |    |    |    | 9  | 8  |
| 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             | 2   | 5  | 2  |    |    | 1  | 1  | 1  | 1  |    |    |
| 明治大学              |     |    |    |    |    |    |    |    |    |    | 1  |
| 名城大学              |     | 2  | 2  |    |    |    |    |    |    |    |    |
| 岡山理科大学            |     |    |    |    |    |    |    |    |    | 1  |    |
| 計                 | 400 | 27 | 28 | 19 | 27 | 31 | 28 | 26 | 17 | 14 | 16 |

## 2-18-2 総合研究大学院大学二専攻

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（2006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   | 22 |
| 機能分子科学専攻 | 10 | 9   | 15 |
| 計        | 20 | 18  | 37 |

在籍学生数（2006年12月現在）単位：人

| 入学年度専攻   |      | 2003年度 | 2004年度 | 2005年度 | 2006年度 | 計  | 定員 |
|----------|------|--------|--------|--------|--------|----|----|
| 構造分子科学専攻 | 5年一貫 | 0      | 0      | 0      | 1      | 1  | 2  |
|          | 博士後期 | 2      | 6      | 8      | 9      | 25 | 3  |
| 機能分子科学専攻 | 5年一貫 | 0      | 0      | 0      | 0      | 0  | 2  |
|          | 博士後期 | 3      | 5      | 4      | 4      | 16 | 3  |

2006年度から5年一貫を導入 定員は2005年度まで博士後期6人

学位取得状況 単位：人

（年度別）

| 専攻       | 1991～96 | 97   | 98   | 99   | 2000 | 2001 | 2002 | 2003 | 2004 | 2005 | 2006<br>(9月修了者まで) | 計      |
|----------|---------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|-------------------|--------|
| 構造分子科学専攻 | 36(3)   | 1(3) | 8(2) | 7(2) | 8(1) | 3    | 11   | 6    | 3    | 7    | 1                 | 91(11) |
| 機能分子科学専攻 | 33(3)   | 3(2) | 6    | 6(1) | 6    | 5    | 5(4) | 1    | 5(4) | 4    | 0                 | 74(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       | 1989～96 | 97 | 98 | 99 | 2000 | 2001 | 2002 | 2003 | 2004 | 2005 | 2006  |
|----------|---------|----|----|----|------|------|------|------|------|------|-------|
| 構造分子科学専攻 | 55      | 10 | 12 | 5  | 8    | 5    | 3    | 7    | 7    | 8    | 11(1) |
| 機能分子科学専攻 | 54      | 9  | 7  | 6  | 0    | 7    | 6    | 6    | 6    | 7    | 4     |

（ ）は5年一貫制で内数

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    |        |        |
|-----------|-------------|--------|--------|-------------|--------|--------|
|           | 1989-2004年度 | 2005年度 | 2006年度 | 1989-2004年度 | 2005年度 | 2006年度 |
| 中国        | 10          |        | 5      | 4           |        |        |
| フランス      |             |        |        | 1           |        |        |
| ロシア       |             |        |        | 1           |        |        |
| バングラディッシュ | 4           | 2      |        | 1           |        | 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 |   |
| タイ    |  |  |  |  |   | 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 ~ '04 | '05 年度 | '06 年度 | '89 ~ '04 | '05 年度 | '06 年度 |    |
| 北海道大学         |           | 1      | 1      | 2         |        |        | 4  |
| 室蘭工業大学        |           |        | 1      | 1         |        |        | 2  |
| 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         |        | 1      | 8  |
| 東京大学          | 6         |        | 1      | 8         |        |        | 15 |
| 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          | 2         |        |        | 1         |        |        | 3  |
| 名古屋大学         | 2         |        |        | 4         |        |        | 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         |        |        | 4         |        |        | 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 | 4         |        |        | 2         | 1      |        | 7  |
| 東京都立大学        |           |        |        | 1         |        | 1      | 2  |
| 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  |
| 兵庫県立大学        |           |        | 1      |           |        |        | 1  |
| 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    |    |   | 1(1) | 2  |   | 3(1) |
| 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  |   | 2    |
| * その他   | 19 | 2 | 5    | 10 | 3 | 41   |

\* 外国の大学等

( ) は 5 年一貫制で内数

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        |

### 2-18-3 オープンハウス

2006 年 6 月 3 日（土），第 16 回分子科学研究所オープンハウスを開催した。本行事は，全国の大学院生，学部学生および社会人を対象に，分子研で行なわれている研究内容を分かり易く解説するとともに，総合研究大学院大学の基盤機関としての教育活動について，外部の方々に広く知って頂くことを目的としている。3 月末からホームページで告知をはじめ，広報を通してポスターを大学関係者および生協に掲示を依頼した。総参加人数は 50 名，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        | 0    | 0    | 0    | 0   |
| 関東（東京，神奈川，千葉） | 3    | 10   | 3    | 0   |
| 信越・北陸（富山）     | 0    | 1    | 0    | 0   |
| 東海（愛知，静岡，岐阜）  | 4    | 7    | 0    | 1   |
| 関西（京都，大阪，兵庫）  | 10   | 6    | 0    | 0   |
| 中国（岡山，広島）     | 1    | 1    | 0    | 0   |
| 四国            | 0    | 0    | 0    | 0   |
| 九州・沖縄（福岡，宮崎）  | 1    | 1    | 1    | 0   |
| 合計 50 名       | 19   | 26   | 4    | 1   |

（都道府県名は参加者がいるところのみ記載）

## 2-18-4 夏の体験入学

2006 年 8 月 7 日から 10 日にわたって、「分子科学研究所夏の体験入学」を行った。全国の大学生・大学院修士課程学生を対象に、分子研での研究活動の体験を通して研究所を基盤とする大学院の特色を知ってもらうことを目的としている。総研大の新入生確保のための広報的事業として総研大本部から特定教育研究経費の予算援助を受け、総研大物理科学研究科の主催行事として 2004 年から開始し、今回で 3 回目の開催となった。広報活動等を国立天文台・核融合科学研究所・宇宙航空研究開発機構とともに共同で行い、実際の研究体験は各研究所独自に行った。

分子研での体験入学は、下記のスケジュールに従って進めた。前回の参加者のアンケート結果をもとに、今回からは体験内容をあらかじめ公表して参加申し込みを募った。

8 月 7 日：体験内容紹介，放射光実験施設・計算科学研究センターの見学，集合写真撮影，歓迎会

8 月 8 ,9 日：二つのキャンパス（明大寺・山手）に分かれて，研究体験

8 月 10 日：全ての参加者による体験内容の報告・発表

参加者の内訳，体験内容，対応教員は以下の通りである。

|   | 所属     | 学年       | 体験内容                            | 対応教員  |
|---|--------|----------|---------------------------------|-------|
| 1 | 大阪府立大学 | 学部 3 年   | ナノの金属ロッドを作って波動関数を見る             | 岡本教授  |
| 2 | 京都大学   | 学部 2 年   | 新しい電子物性を目指した分子物質開発              | 鈴木助教授 |
| 3 | 名古屋大学  | 学部 3 年   | 金属錯体の合成実験——フェロセンの合成             | 川口助教授 |
| 4 | 東海大学   | 学部 3 年   | スピン転移物質の合成                      | 江助教授  |
| 5 | 慶應義塾大学 | 学部 3 年   | 極短パルス光による反応イメージングと制御            | 菱川助教授 |
| 6 | 北里大学   | 学部 1 年   | レーザー光イオン化質量分析法による共鳴イオン化スペクトルの測定 | 大島教授  |
| 7 | 名古屋大学  | 修士課程 2 年 | 分子の配列を観察しよう                     | 小川教授  |
| 8 | 日本大学   | 学部 2 年   | 金クラスターの精密合成                     | 佃助教授  |

|    |        |          |                                                                |       |
|----|--------|----------|----------------------------------------------------------------|-------|
| 9  | 日本大学   | 学部 2 年   | クラスター触媒を用いた反応の一例を体験                                            | 櫻井助教授 |
| 10 | 静岡大学   | 修士課程 1 年 | 固体広幅 NMR 装置を体験するとともに、最先端の ESR 装置を使って分子性固体の電子状態（磁性・伝導性）を実測してみよう | 中村助教授 |
| 11 | 東京理科大学 | 学部 4 年   | 同上                                                             | 中村助教授 |
| 12 | 首都大学東京 | 修士課程 1 年 | 二酸化炭素の還元反応に関する研究を体験                                            | 田中教授  |
| 13 | 首都大学東京 | 学部 2 年   | 量子化学の基礎にふれ、実際にプログラムを使ってみよう                                     | 永瀬教授  |
| 14 | 京都大学   | 学部 2 年   | 生体分子の細胞内動態を解析する                                                | 小澤助教授 |
| 15 | 学習院大学  | 学部 4 年   | 光合成モデル化合物の合成                                                   | 永田助教授 |
| 16 | 鹿児島大学  | 学部 2 年   | 量子論におけるダイナミクスとは何であるかを数値実験を通して体感しよう！                            | 信定助教授 |

## 2-18-5 総研大アジア冬の学校

総合研究大学院大学の 2006 年度特定研究教育経費を得て、「アジア冬の学校 2006」を 2006 年 11 月 20 日（月）～ 22 日（水）の日程で岡崎コンファレンスセンターにて開催した。これは 2002 年に開催された「岡崎レクチャー（アジア冬の学校）」の流れを汲む企画で、総合研究大学院大学物理科学研究科 5 専攻の連携事業として行われるようになって 2 度目の開催となる。本年度は、国内およびアジア諸国からの学生・若手研究者を対象に、“Frontiers in Molecular Science: Electronic and Structural Properties of Molecules and Nano Materials”をテーマとして、集中講義 1 件、セミナー 6 件の講義（すべて英語）が行われた。

参加者は合計 45 名で、アジア諸国（韓国、中国、インド、バングラディッシュ、台湾、タイ、フィリピン）からの参加者は 26 名、国内からは 19 名の参加があり、そのうち総研大生は 3 名であった。プログラムは下記の通りである。

### I. Lectures (6 hours)

小杉信博，“Molecular Spectroscopy and Electronic Structure Theory”

### II. Topical Reviews (1.5 hours for each lecturer)

大島康裕，“Fundamentals of Molecular Spectroscopy as Micro- and Macroscopic Probes in Labo and Field”

岡本裕巳，“Near-field Imaging/Spectroscopy of Nanomaterials”

小川琢治，“Preparation of Organic Molecules and Inorganic Nano-Structures toward Molecular Scale Nano Devices”

佃 達哉，“Structure and Properties of Gold Clusters Stabilized by Organic Molecules”

菱川明栄，“Molecules in Few-Cycle Intense Laser Fields”

廣田朋也（国立天文台），“Astrochemistry—Molecules in space”

### III. Time Table

#### *November 20th, 2006*

|             |                    |
|-------------|--------------------|
| 8:50- 9:00  | Opening            |
| 9:00-10:30  | Nobuhiro Kosugi I  |
| 10:40-12:00 | Hiromi Okamoto     |
| 12:00-14:00 | Lunch              |
| 14:00-15:30 | Tatsuya Tsukuda    |
| 15:40-17:10 | Takuji Ogawa (IMS) |
| 18:00-20:00 | Poster Session     |

#### *November 21st, 2006*

|             |                    |
|-------------|--------------------|
| 9:00-10:30  | Nobuhiro Kosugi II |
| 10:40-12:00 | Yasuhiro Ohshima   |
| 12:00-14:00 | Lunch              |
| 14:00-15:30 | Tomoya Hirota      |
| 15:40-17:10 | Akiyoshi Hishikawa |
| 18:00-20:00 | Poster Session     |

#### *November 22nd, 2006*

|             |                     |
|-------------|---------------------|
| 9:00-10:30  | Nobuhiro Kosugi III |
| 10:40-12:00 | Nobuhiro Kosugi IV  |
| 12:00       | Closing             |

## 2-19 財政

### 2-19-1 現員

2006.12.1

| 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(1)   | 2(1)  | 3   | 7(2)   |      | 7(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)  | 2   | 5(2)   |      | 5(2)    |
| 相關領域研究系              |     | 0(1)   | 1(1)  | 2   | 3(2)   |      | 3(2)    |
| 極端紫外光科学研究系           |     | 2(0)   | 2(0)  | 4   | 8(0)   |      | 8(0)    |
| 計算分子科学研究系            |     | 2(0)   | 1(0)  | 3   | 6(0)   |      | 6(0)    |
| 研究施設                 |     | 5(6)   | 8(2)  | 18  | 31(8)  |      | 31(8)   |
| 技術課                  |     |        |       |     |        | 35   | 35      |
| 計                    | 1   | 18(11) | 17(7) | 40  | 76(18) | 35   | 111(18) |
| 岡崎統合バイオサイエ<br>ンスセンター |     | 1(2)   | 1(0)  | 0   | 2(2)   |      | 2(2)    |
| 合計                   | 1   | 19(13) | 18(7) | 40  | 78(20) | 35   | 113(20) |

( ) 内は客員及び兼任者数で外数である。

### 2-19-2 財政

( 単位 : 千円 )

| 科目等 \ 年度 | 2002 年度   | 2003 年度    | 2004 年度   | 2005 年度   | 2006 年度   |
|----------|-----------|------------|-----------|-----------|-----------|
| 人件費      | 1,247,966 | 1,274,750  | 1,264,647 | 1,298,382 | 1,295,705 |
| 運営費, 設備費 | 3,958,941 | 2,654,747  | 2,374,388 | 2,011,607 | 1,859,207 |
| 施設整備費    | 1,378,504 | 8,027,621  | 5,577     | 1,618,332 | 0         |
| 合計       | 6,585,411 | 11,957,118 | 3,644,612 | 4,928,321 | 3,154,912 |

\* 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

2006 年 12 月 31 日現在

| 区 分    | 2000 年度 | 2001 年度 | 2002 年度 | 2003 年度 | 2004 年度 | 2005 年度 | 2006 年度 |
|--------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
| 件数（件）  | 14      | 16      | 15      | 17      | 14      | 24      | 10      |
| 金額（千円） | 18,350  | 14,950  | 18,350  | 15,300  | 9,257   | 35,622  | 13,225  |

共通研究施設を除く

科学研究費補助金

| 区 分    | 2000 年度 | 2001 年度 | 2002 年度 | 2003 年度 | 2004 年度 | 2005 年度 | 2006 年度 |
|--------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
| 件数（件）  | 82      | 82      | 59      | 62      | 59      | 59      | 70      |
| 金額（千円） | 384,803 | 506,564 | 434,556 | 728,415 | 249,900 | 240,200 | 342,560 |

\* 2006 年度は 2006 年 12 月 31 日 現在  
岡崎共通研究施設を除く

2006 年度科学研究費補助金

2006 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 |
|---------------|-------|---------|----------|----|
| 学術創成研究費       |       | 2       | 0        | 2  |
| 特別推進研究        |       | 1       | 0        | 1  |
| 特定領域研究        |       | 24      | 1        | 25 |
| 萌芽研究          |       | 2       | 0        | 2  |
| 若手研究          | （ A ） | 1       | 0        | 1  |
| 若手研究          | （ B ） | 19      | 0        | 19 |
| 基盤研究          | （ S ） | 1       | 0        | 1  |
| 基盤研究          | （ A ） | 5       | 0        | 5  |
| 基盤研究          | （ B ） | 9       | 2        | 11 |
| 基盤研究          | （ C ） | 2       | 0        | 2  |
| 特別研究員奨励費      |       | 1       | 1        | 2  |
| 特別研究員奨励費      | 外国人   | 1       | 0        | 1  |
| 若手研究（スタートアップ） |       | 2       | 0        | 2  |
| 合計            |       | 70      | 4        | 74 |

## 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      |
|------------------|-------|---------|----------|---------|
| 学術創成研究費          |       | 12,000  | 0        | 12,000  |
| 特別推進研究           |       | 46,000  | 0        | 46,000  |
| 特定領域研究           |       | 104,100 | 1,900    | 106,000 |
| 萌芽研究             |       | 1,900   | 0        | 1,900   |
| 若手研究             | ( A ) | 6,200   | 0        | 6,200   |
| 若手研究             | ( B ) | 25,900  | 0        | 25,900  |
| 基盤研究             | ( S ) | 23,600  | 0        | 23,600  |
| 基盤研究             | ( A ) | 60,500  | 0        | 60,500  |
| 基盤研究             | ( B ) | 56,100  | 8,600    | 64,700  |
| 基盤研究             | ( C ) | 1,700   | 0        | 1,700   |
| 特別研究員奨励費         |       | 1,200   | 1,100    | 2,300   |
| 特別研究員奨励費         | 外国人   | 700     | 0        | 700     |
| 若手研究 ( スタートアップ ) |       | 2,660   | 0        | 2,660   |
| 合計               |       | 342,560 | 11,600   | 354,160 |

## 共同研究

(単位：千円)

| 区 分       | 2000 年度 | 2001 年度 | 2002 年度 | 2003 年度 | 2004 年度 | 2005 年度 | 2006 年度 |
|-----------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
| 件数 ( 件 )  | 5       | 6       | 7       | 8       | 13      | 17      | 13      |
| 金額 ( 千円 ) | 14,240  | 11,980  | 17,120  | 10,590  | 14,740  | 39,334  | 38,812  |

## 受託研究

( 上段：件数、下段：金額 ( 単位：千円 ) )

| 区 分                    | 2000 年度 | 2001 年度 | 2002 年度 | 2003 年度 | 2004 年度   | 2005 年度 | 2006 年度 |
|------------------------|---------|---------|---------|---------|-----------|---------|---------|
| 戦略的創造研究推進事業 ( JST )    | 1       | 1       | 5       | 7       | 7         | 10      | 12      |
|                        | 1,100   | 7,700   | 13,000  | 19,206  | 21,827    | 24,115  | 32,500  |
| 主要5分野の研究開発委託事業 ( 文科省 ) | 0       | 0       | 1       | 2       | 2         | 3       | 3       |
|                        | 0       | 0       | 263,000 | 540,574 | 916,847   | 584,312 | 497,850 |
| その他                    | 12      | 5       | 3       | 1       | 6         | 6       | 3       |
|                        | 199,491 | 232,625 | 6,800   | 4,200   | 163,792   | 64,907  | 32,657  |
| 合計                     | 13      | 6       | 9       | 10      | 15        | 19      | 18      |
|                        | 200,591 | 240,325 | 282,800 | 563,980 | 1,102,466 | 673,334 | 563,007 |

( 岡崎共通研究施設を含む )

## 2-20 岡崎共通施設

### 2-20-1 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1,470種（和283、洋1,187）、単行本92,132冊（和13,457、洋78,675）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。

### 2-20-2 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 m<sup>2</sup>、鉄筋コンクリート造2階建てで、大型スクリーン及び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。

### 2-20-3 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

\* 山手ロッジは2006年度をもって使用中止

### 2-20-4 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。

## 2-21 地域社会との交流

### 2-21-1 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<br>（加速器・分光器・測定器の見学）                       | 渡邊 誠 助教授<br>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<br>——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<br>——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<br>——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                                       | 多田 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             |
| 87 | 2006. 6.20 | 電気を流す分子性結晶の話                                          | 小林 速男 教 授             |

## 2-21-2 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、2006年12月で792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回開催している。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、現在までに65回開催されている。今年行われた講演の中では、理化学研究所森田浩介先生による第113番元素のお話（第61回）やサントリー先端応用技術研究所田中良和先生による青いバラのお話（第64回）に、岡崎近郊の中高校生、市民の方々がたくさん参加され、会場が満席になった。講演内容では、第37回の東京大学助教授高野陽太郎先生、第43回の立花隆さんの講演の他は、自然科学の先生によるお話であった。

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、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                                    |
|----|-----------|---------------|----------------------------------------|
| 61 | 2006.1.11 | 新発見の113番元素    | 森田 浩介（理化学研究所前任研究員）                     |
| 62 | 2006.2.15 | グリーンケミストリーの課題 | 御園生 誠（東京大学名誉教授・前日本化学会会長）               |
| 63 | 2006.5.17 | X線自由電子レーザー計画  | 石川哲也（理化学研究所播磨研究所 放射光科学総合研究センター 副センター長） |
| 64 | 2006.6.14 | 青いバラの物語       | 田中 良和<br>（サントリー先進技術応用研究所シニアスペシャリスト）    |
| 65 | 2006.9.27 | 光量子科学の黎明期     | 霜田 光一<br>（東京大学名誉教授・日本物理教育学会会長）         |

### 2-21-3 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     |
| 2006 年度 | 中村 宏樹 | 分子の科学、独創性、そして東洋哲学 |

### 2-21-4 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                 | 畠田 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 |

## 2-21-5 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)<br>13:00-16:00 | 岡崎地域職業訓練センター             | 井口 洋夫 名誉教授<br>加藤 立久 助教授 | めざそう理科博士               |
| 2  | 1996.10.26 (土)<br>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)<br>13:30-16:00 | 岡崎コンファレンスセンター<br>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)<br>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)<br>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<br>—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

\* 岡崎青年会議所の都合で、2006 年度をもって終了

## 2-21-6 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 (SSH) として指定し、高等学校及び中高一環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、将来有為な科学技術系人材の育成に資する」事を趣旨に平成 14 年度から始めた活動が最終年度を迎え、そのまとめの作業が岡崎高校を中心に行われた。同時に、岡崎高校は継続事業として平成 19 年度より始まる SSH 事業についても引き続き実施したい旨の希望調書を取りまとめ、現在、文部科学省に申請中であり、分子科学研究所も引き続きこの事業を支援していくことに合意をしている。

### (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 |
| 美川中      | 2007. 2. 26 | 生物から学ぶ光と色     | 小澤 岳昌 助教授 |

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 |

(3) 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

## 2-21-7 一般公開

平成 18 年度は，3 年ごとに行われる分子研一般公開の年で，10 月 21 日（土曜日）に行われた。準備は 6 月から始まり，一般公開実行委員会が編成され，委員長，副委員長が指名され，公開展示班，講演会班，資料作成班，設営班，記録班，広報班，総務班が組織された。テーマの選定，講演会講演者の決定，公開展示場所の確定等が 7 月 6 日になされた。9 月上旬には広報班によって，分子研のシンボルカラーである鮮やかな青を基調にしたポスターが作成され，配布が行われた。また，市政便りの原稿作成，展示案内パンフレット及び研究所概要紹介パンフレットの作成などの活動がなされた。今回は，中学生を対象にサイエンスレンジャーを企画し，見附助教授を中心に周到な準備がなされた。また，中日新聞に折り込みチラシを 45,800 戸に配布した。テーマは，「モノの始まり：ナノの世界へようこそ」というもので，今回は，全研究室を公開するのではなく，研究室やセンターなどの希望を取って明大寺地区 12 ヲ所，山手地区 13 ヲ所を公開することとなった。更に，山手地区で 3 回の講演会，またそれぞれ 3 テーマずつの「おもしろ体験イベント」が企画された。

公開日当日は幸い晴天に恵まれた。それぞれの展示会場では担当者があらかじめ準備した説明用パネルも利用して展示内容の説明にあたった。また「おもしろ体験イベント」は、一般公開参加者自身が積極的に参加できるもので、明大寺地区において「電波のチカラ」、「メタルクラフト」、「作ってみよう！ 光を虹に分ける道具」の3テーマ、山手地区において「分子を測る」、「低温の世界」、「分子を創る、見る、触る」の3テーマで実施した。これら体験型イベントも、終日多くの参加者で賑わっていた。一般公開参加者のアンケート結果をみても、体験型イベントに対する評価は高いものであった。

公開講演会は山手3号館2階の大会議室で午後3回開催された。まず岡崎進教授が「ナノの世界をスーパーコンピュータで探る」という題名で、分子研のスーパーコンピュータの性能とそれを用いた計算機シミュレーションを紹介し、水中の生体膜の構造や動力学などの研究例を平易に解説した。次に永田央助教授が「光合成のひみつ・命を支える分子と光」という題名で、分子レベルから見た光合成の仕組みを詳説し、光励起電子移動を利用した金属錯体人工光合成システムの将来展望を示した。最後に小澤岳昌助教授が「光で探る生体分子のはたらき」という題名で、発光生物から取り出した発光タンパク質を生きた動物に注入して、細胞内部のタンパク質の変動を画像観測法で研究するという最新の成果を紹介した。100人近い聴衆が集まり、会場は大変盛況であった。また講演後も多くの質問があった。中には研究者顔負けの専門的な発言もあり、予定されていた15分の質疑応答時間では不足気味であった。アンケートの結果では、どの講演も面白く有益だったという回答が95%に達した。

岡崎市内中学生の見学体験会（サイエンスレンジャー）は、午前中に南実験棟1階で実施された。この会は市教育委員会理科部会との共催で、一般公開する研究所が毎年開催するものである。今年は学生に実験装置を操作してもらい、話題の科学技術を実体験させる事を目標とし以下のテーマを選んだ。酸化チタン  $\text{TiO}_2$  の多色塗装に電気を使う：チタンに電流を流し陽極酸化させ、 $\text{TiO}_2$  の厚みを50 nm以下で制御し表面を様々に着色する。 $\text{TiO}_2$  を色素塗装して電気を起こす： $\text{TiO}_2$  ナノ粒子に花の色素を塗って、可視光を高効率で吸収する色素増感太陽電池を製作する。どちらもナノの科学現象を含み、基本原理が容易で、操作は簡単かつ安全である。また、生活に直結し話題性に富む割に学生実験の題材としては斬新である。開会式で山本教育監の挨拶と講師の紹介があり、その後、219名の中学生が3つのグループに分かれて約50分間ずつ実験を行った。中学生4人に1人の割合で研究所スタッフが補佐に付いたため、トラブルは無く、誰もが楽しそうに作業に取り組んでいた。カラフルに着色されたチタン板の出来映えも良く、中学生にも引率教諭にも大変好評であったと聞いている。

参加者数が少ないのではないかと心配されたが、予想を遙かに上回る総数2058名の見学者が訪れている。この中には、東京や山口からの来訪者があった。地元の皆さんの理解を深めることは研究所にとっても大変重要なことであり、多くの皆さんが興味を持って頂いたことは嬉しい限りである。職員・研究員・学生が総出でこのイベントを支えることができ、大変有意義な1日であった。



| 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) | 10 周年記念一般公開 |
| 第 5 回  | 1988.11. 5 (Sat) | 入場者 1700 人  |
| 第 6 回  | 1991.10.26 (Sat) | 入場者 1974 人  |
| 第 7 回  | 1994.11.12 (Sat) | 入場者 2700 人  |
| 第 8 回  | 1997.11.15 (Sat) | 入場者 2400 人  |
| 第 9 回  | 2000.10.21 (Sat) | 入場者 1183 人  |
| 第 10 回 | 2003.10.25 (Sat) | 入場者 1600 人  |
| 第 11 回 | 2006.10.21 (Sat) | 入場者 2058 人  |

## 2-21-8 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<br>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<br>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<br>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<br>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<br>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<br>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<br>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<br>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<br>開成高等学校 ほか                |
| 1999 | 8    | 206  | 愛知県商工部<br>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<br>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<br>愛知県立豊田西高等学校 ほか         |
| 2002 | 5    | 118  | 関西工業教育協会<br>静岡県立浜松西高等学校 ほか               |

|      |    |     |                                                                                    |
|------|----|-----|------------------------------------------------------------------------------------|
| 2003 | 8  | 146 | 中部経済連合会<br>一宮高等学校 ほか                                                               |
| 2004 | 11 | 198 | 中部電力（株）<br>立命館高等学校 ほか                                                              |
| 2005 | 10 | 317 | 自動車技術会中部支部<br>慶熙大学（Kyung hee University） ほか                                        |
| 2006 | 8  | 144 | 豊田西高等学校、山梨県立都留高等学校、六ツ美中学校、<br>甲山中学校、日本自動車部品総合研究所、岐阜工業高<br>等学校、西三河地区理科教育研究会、千葉地方裁判所 |

## 2-22 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は増加している。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 17 年度の特許申請件数は、個人有としたもの 2 件、機構有としたもの 15 件（出願 13 件）であったが、18 年度は、個人有 1 件、機構有 6 件（実出願 5 件）であった。審査は、年 4 回行われている。

### 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 |
|-------------------|---------------|--------|-------|
| 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          | 435    | 40    |
| 2004.9. ~ 2005.8. | 2005          | 402    | 44    |
| 2005.9. ~ 2006.8. | 2006          | 340    | 21    |

### 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（今回は案分論文数基準に変更）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。なお、最新版ではこれまでのように単純な引用度指数<sup>1)</sup>ではなく、著者の所属数で案分することで一つの論文を二重、三重に数えないように操作した引用度数（ここでは案分引用度数と呼んで以前のものと区別する）が報告されている。分子科学研究所のような大学共同利用機関では大学の研究者との共同研究が多く、著者所属数で案分されると論文数などの数値が低めに出る傾向があると思われる。なお、今回から岡崎国立共同研究機構単位ではなく分子科学研究所単位で集計されるようになった。<sup>2)</sup>

#### 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 2007」,朝日新聞社, pp. 222-229 (2006).

表1 日本の大学等の分野別論文案分引用度指数  
分野：化学（2000—2004）<sup>2)</sup>

| 順位 | 大学等     | 案分論文数  | 案分引用度指数 |
|----|---------|--------|---------|
| 1  | 東京大学    | 2553.0 | 126.0   |
| 2  | 首都大学東京  | 360.9  | 124.9   |
| 3  | 京都大学    | 3047.8 | 122.6   |
|    | 名古屋大学   | 1249.1 | 122.6   |
| 5  | 分子科学研究所 | 437.3  | 120.8   |
| 6  | 千葉大学    | 673.8  | 120.6   |
| 7  | 東北大学    | 2163.7 | 118.1   |
| 8  | 大阪市立大学  | 472.9  | 116.9   |
| 9  | 北海道大学   | 1458.0 | 116.6   |
| 10 | 大阪大学    | 2465.4 | 115.5   |
| 11 | 九州大学    | 1574.8 | 112.9   |
| 12 | 東京理科大学  | 774.9  | 112.5   |
| 13 | 東京工業大学  | 2494.6 | 107.1   |
| 14 | 慶應義塾大学  | 628.0  | 106.5   |
| 15 | 筑波大学    | 610.1  | 106.4   |

## 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) 分子のサイズと形状を利用した分子設計と反応
- b) 元素の特性を利用した分子設計と反応
- c) ナノサイズ分子の分子理論と量子化学計算

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 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として有用である。このために、フラレーンの内部空間に捕獲された金属原子やクラスターの位置と回転運動の制御と機能化、外部修飾による金属内包フラレーンの反応性、フラレーン骨格に空孔を作ることによる分子の貯蔵、IPR 則 (Isolated pentagon rule) を満足しない新しい金属内包フラレーン、金属内包フラレーンとクラウンエーテル類とのホスト-ゲスト錯体と応用、金属内包フラレーンと電子供与体の相互作用によるスピン位置交換システム、外部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、有機芳香族化合物とカーボンナノチューブの選択的相互作用に及ぼす分子サイズと配向、化学修飾の度合いによるカーボンナノチューブの電子制御、有機ケイ素化合物とのハイブリッドによるカーボンナノチューブの発光、カーボンナノチューブの内径とサイズ変化による電子特性、ボロンと窒素を骨格にもつナノチューブのフッ素ドーピング、等を理論と計算で明らかにして実験と共同して解明した。
- b) 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の宝庫である。このために、リンやゲルマニウムの超原子価化合物、高高い置換基に保護されたゲルマニウム-ゲルマニウム三重結合化合物のユニークな構造と反応、スズを骨格に含む新しい化合物の芳香族性等を明らかにして、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。
- c) ナノサイズの分子の精度の高い量子化学計算の高速化と汎用化には大きな進展が望まれている。現在、密度汎関数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、非共有結合相互作用を簡便に取り込める分子軌道法の代表である MP2 (second-order Møller Plesset perturbation) 法のエネルギー計算の高速並列アルゴリズムを昨年度開発したが、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の新しいアルゴリズムの開発とプログラムの作成を行った。また、大きい分子のエネルギー計算に有用なラプラス変換 MP2 法の並列プログラムの作成および極めて高精度なエネルギー計算を可能にする新しい量子モンテカルロ法の開発を開始している。

B-1) 学術論文

- K. ISHIMURA, P. PULAY and S. NAGASE**, “A New Parallel Algorithm of MP2 Energy Calculations,” *J. Comput. Chem.* **27**, 407–413 (2006).
- Y. SUGIYAMA, T. SASAMORI, Y. HOSOI, Y. FURUKAWA, N. TAKAGI, S. NAGASE and N. TOKITOH**, “Synthesis and Properties of a New Kinetically Stabilized Digermine: New Insights for a Germanium Analogue of an Alkyne,” *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 1023–1031 (2006).
- Z. SLANINA, F. UHLIK, S. -L. LEE and S. NAGASE**, “Computational Modelling for the Clustering Degree in the Saturated Steam and the Water-Containing Complexes in the Atmosphere,” *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **97**, 415–423 (2006).
- 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 (2006).
- M. YAMADA, T. WAKAHARA, Y. LIAN, T. TSUCHIYA, T. AKASAKA, M. WAELECHLI, N. MIZOROGI, S. NAGASE and K. M. KADISH**, “Analysis of Lanthanide-Induced NMR Chemical Shifts of the Ce@C<sub>82</sub> Anion,” *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 1400–1401 (2006).
- M. YAMADA, T. WAKAHARA, T. NAKAHODO, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, T. AKASAKA, K. YOZA, E. HORN, N. MIZOROGI and S. NAGASE**, “Synthesis and Structural Characterization of Endohedral Pyrrolidinodimetallofullene: La<sub>2</sub>@C<sub>80</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>NTrt,” *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 1402–1403 (2006).
- Z. SLANINA, Z. CHEN, P. V. R. SCHLEYER, F. UHLIK, X. LU and S. NAGASE**, “La<sub>2</sub>@C<sub>72</sub> and Sc<sub>2</sub>@C<sub>72</sub>: Computational Characterizations,” *J. Phys. Chem. A* **110**, 2231–2234 (2006).
- J. KOBAYASHI, K. GOTO, T. KAWASHIMA, M. W. SCHMIDT and S. NAGASE**, “Reactivity of 1-Hydro-5-Carbaphosphatane Based on Tautomerization between Pentavalent Phosphorane and Trivalent Cyclic Phosphonite,” *Chem. Eur. J.* **12**, 3811–3820 (2006).
- J. LU, D. WANG, S. NAGASE, M. NI, X. ZHANG, Y. MAEDA, T. WAKAHARA, T. NAKAHODO, T. TSUCHIYA, T. AKASAKA, Z. GAO, D. YU, H. YE, Y. ZHOU and W. N. MEI**, “Evolution of the Electronic Properties of Metallic Single-Walled Nanotubes with the Degree of CCl<sub>2</sub> Covalent Functionalization,” *J. Phys. Chem. B* **110**, 5655–5658 (2006).
- Z. SLANINA and S. NAGASE**, “Stability Computations for Ba@C<sub>74</sub> Isomers,” *Chem. Phys. Lett.* **422**, 133–136 (2006).
- Z. SLANINA, F. UHLIK, K. ISHIMURA and S. NAGASE**, “Computations of the Energetics of C<sub>60</sub>F<sub>36</sub> Isomers,” *Fullerenes, Nanotubes, Carbon Nanostruct.* **14**, 57–65 (2006).
- G. FRENKING, A. KRAPP, S. NAGASE, N. TAKAGI and A. SEKIGUCHI**, “Comment on Disproving a Silicon Analog of an Alkyne with the Aid of Topological Analyses of the Electronic Structure and Ab Initio Molecular Dynamics Calculations,” *ChemPhysChem* **7**, 799–800 (2006).
- J. LU, S. NAGASE, X. ZHANG, D. WANG, M. NI, Y. MAEDA, T. WAKAHARA, T. NAKAHODO, T. TSUCHIYA, T. AKASAKA, Z. GAO, D. YU, H. YE, W. N. MEI and Y. ZHOU**, “Selective Interaction of Larger or Charge-Transfer Aromatic Molecules with Metallic Single-Wall Carbon Nanotubes: Critical Role of the Molecular Size and Orientation,” *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 5114–5118 (2006).
- Z. SLANINA, S. -L. LEE, F. UHLIK, L. ADAMOWICZ and S. NAGASE**, “Excited Electronic States and Relative Stabilities of C<sub>80</sub> Isomers,” *Int. J. Quantum Chem.* **106**, 2222–2228 (2006).

Y. MATSUNAGA, Y. MAEDA, T. WAKAHARA, T. TSUCHIYA, M. O. ISHITSUKA, T. AKASAKA, N. MIZOROGI, K. KOBAYASHI, S. NAGASE and K. M. KADISH, "NMR Study of  $\text{La}@\text{C}_{82}$  (Ad) Anion," *ITE Lett. Batt. New Tech. Med.* **7**, 43–49 (2006).

L. FENG, T. TSUCHIYA, T. WAKAHARA, T. NAKAHODO, Q. PIAO, Y. MAEDA, T. AKASAKA, T. KATO, K. YOZA, E. HORN, N. MIZOROGI and S. NAGASE, "Synthesis and Characterization of a Bisadduct of  $\text{La}@\text{C}_{82}$ ," *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 5990–5991 (2006).

Y. IIDUKA, T. WAKAHARA, K. NAKAJIMA, T. TSUCHIYA, T. NAKAHODO, Y. MAEDA, T. AKASAKA, N. MIZOROGI and S. NAGASE, " $^{13}\text{C}$  NMR Spectroscopic Study of Scandium Dimetallofullerene,  $\text{Sc}_2@\text{C}_{84}$  vs.  $\text{Sc}_2\text{C}_2@\text{C}_{82}$ ," *Chem. Commun.* 2057–2059 (2006).

Z. SLANINA, P. PULAY and S. NAGASE, " $\text{H}_2$ , Ne, and  $\text{N}_2$  Energies of Encapsulation into  $\text{C}_{60}$  Evaluated with the MPWB1K Functional," *J. Chem. Theory Comput.* **2**, 782–785 (2006).

T. TSUCHIYA, K. SATO, H. KURIHARA, T. WAKAHARA, T. NAKAHODO, Y. MAEDA, T. AKASAKA, K. OHKUBO, S. FUKUZUMI, T. KATO, N. MIZOROGI, K. KOBAYASHI and S. NAGASE, "Host-Guest Complexation of Endohedral Metallofullerene with Azacrown Ether and Its Application," *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 6699–6703 (2006).

M. SAITO, M. SHIMOSAWA, M. YOSHIOKA, K. ISHIMURA and S. NAGASE, "Synthesis of Stannaindenyl Anions and a Dianion," *Organometallics* **25**, 2967–2971 (2006).

L. FENG, T. WAKAHARA, T. NAKAHODO, T. TSUCHIYA, Q. PIAO, Y. MAEDA, Y. LIAN, T. AKASAKA, E. HORN, K. YOZA, T. KATO, N. MIZOROGI and S. NAGASE, "The Bingel Monoadducts of  $\text{La}@\text{C}_{82}$ : Synthesis, Characterization, and Electrochemistry," *Chem. Eur. J.* **12**, 5578–5586 (2006).

K. IWANAGA, J. KOBAYASHI, T. KAWASHIMA, N. TAKAGI and S. NAGASE, "Syntheses, Structures, and Reactions of Heptacoordinate Trihalogermanes Bearing a Triarylmethyl-Type Tetradentate Ligand," *Organometallics* **25**, 3388–3393 (2006).

L. LAI, W. SONG, J. LU, Z. GAO, S. NAGASE, M. NI, W. N. MEI, J. LIU, D. YU and H. YE, "Structural and Electronic Properties of Fluorinated Boron Nitride Nanotubes," *J. Phys. Chem. B* **110**, 14092–14097 (2006).

T. WAKAHARA, Y. IIDUKA, O. IKENAGA, T. NAKAHODO, A. SAKURABA, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, M. KAKO, T. AKASAKA, K. YOZA, E. HORN, N. MIZOROGI and S. NAGASE, "Characterization of the Bis-Silylated Endofullerene  $\text{Sc}_3\text{N}@\text{C}_{80}$ ," *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 9919–9925 (2006).

M. SAITO, M. SHIMOSAWA, M. YOSHIOKA, K. ISHIMURA and S. NAGASE, "Synthesis and Characterization of Dimetallostannafluorenes," *Chem. Lett.* 940–941 (2006).

S. -I. IWAMATSU, C. M. STANISKY, R. J. CROSS, M. SAUNDERS, N. MIZOROGI, S. NAGASE and S. MURATA, "Carbon Monoxide inside an Open-Cage Fullerene," *Angew. Chem., Int. Ed.* **45**, 5337–5340 (2006).

T. TSUCHIYA, H. KURIHARA, K. SATO, T. WAKAHARA, T. AKASAKA, T. SHIMIZU, N. KAMIGATA, N. MIZOROGI and S. NAGASE, "Supramolecular Complexes of  $\text{La}@\text{C}_{82}$  with Unsaturated Thiocrown Ethers," *Chem. Commun.* 3585–3587 (2006).

T. ADACHI, S. MATSUKAWA, M. NAKAMOTO, K. KAJIYAMA, S. KOJIMA, Y. YAMAMOTO, K. -Y. AKIBA, S. RE and S. NAGASE, "Experimental Determination of the  $n_{\text{N}} \rightarrow \sigma^*_{\text{P-O}}$  Interaction Energy of O-Equatorial C-Apical Phosphoranes Bearing a Primary Amino Group," *Inorg. Chem.* **45**, 7269–7277 (2006).

- Y. MAEDA, Y. SATO, M. KAKO, T. WAKAHARA, T. AKASAKA, J. LU, S. NAGASE, Y. KOBORI, T. HASEGAWA, K. MOTOMIYA, K. TOHJI, A. KASUYA, D. WANG, D. YU, Z. GAO, R. HAN and H. YE, "Preparation of Single-Walled Carbon Nanotubes—Organosilicon Hybrids and Their Enhanced Field Emission Properties," *Chem. Mater.* **18**, 4205–4208 (2006).
- Y. MAEDA, M. KANDA, M. HASHIMOTO, T. HASEGAWA, S. KIMURA, Y. LIAN, T. WAKAHARA, T. AKASAKA, S. KAZAOUI, N. MINAMI, T. OKAZAKI, Y. HAYAMIZU, K. HATA, J. LU and S. NAGASE, "Dispersion and Separation of Small-Diameter Single-Walled Carbon Nanotubes," *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 12239–12242 (2006).
- T. SASAMORI, E. MIEDA, N. NAGAHORA, K. SATO, D. SHIOMI, T. TAKUI, Y. HOSOI, Y. FURUKAWA, N. TAKAGI, S. NAGASE and N. TOKITOH, "One-Electron Reduction of Kinetically Stabilized Dipnictenes: Synthesis of Dipnictene Anion Radicals," *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 12582–12588 (2006).
- N. MIZOROGI and S. NAGASE, "Do  $\text{Eu}@C_{82}$  and  $\text{Gd}@C_{82}$  Have an Anomalous Endohedral Structure?" *Chem. Phys. Lett.* **431**, 110–112 (2006).
- T. WAKAHARA, H. NIKAWA, T. KIKUCHI, T. NAKAHODO, G. M. A. RAHMAN, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA T. AKASAKA, K. YOZA, E. HORN, K. YAMAMOTO, N. MIZOROGI, Z. SLANINA and S. NAGASE, " $\text{La}@C_{72}$  Having a Non-IPR Carbon Cage," *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 14228–14229 (2006).
- T. TSUCHIYA, K. SATO, H. KURIHARA, T. WAKAHARA, Y. MAEDA, T. AKASAKA, K. OHKUBO, S. FUKUZUMI, T. KATO and S. NAGASE, "Spin-Site Exchange System Constructed from Endohedral Metallofullerenes and Organic Donors," *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 14418–14419 (2006).
- T. TSUCHIYA, T. WAKAHARA, Y. LIAN, Y. MAEDA, T. AKASAKA, T. KATO, N. MIZOROGI and S. NAGASE, "Selective Extraction and Purification of Endohedral Metallofullerene from Carbon Soot," *J. Phys. Chem. B* **110**, 22517–22520 (2006).
- Z. SLANINA, F. UHLIK and S. NAGASE, "Computed Structures of Two Known  $\text{Yb}@C_{74}$  Isomers," *J. Phys. Chem. A* **110**, 12860–12863 (2006).

## B-2) 国際会議のプロシーディングス

- Z. SLANINA, F. UHLIK and S. NAGASE, "Computations on  $\text{Ba}@_{74}$  and  $\text{Yb}@C_{74}$ ," *NANOTECH 2006—Technical Proceedings of the 2006 NSTI Nanotechnology Conference and Trade Show, Nano Science and Technology Institute, Cambridge, MA*, pp. 657–660 (2006).
- Z. SLANINA, F. UHLIK, S. -L. LEE, L. ADAMOWICZ and S. NAGASE, "Fullerenic Systems for Nanoscience: Computational Screening Illustrated on  $\text{X}@C_{74}$  Metallofullerenes," *EUROPEAN NANO SYSTEMS 2006—Proceedings of the ENS 2006 Conference, Paris*, pp. 450–455 (2006).

## B-3) 総説、著書

- 若原考次、赤坂 健、永瀬 茂,「金属内包フラーレンの化学修飾」*現代化学* **5**, 51–56 (2006).
- 赤坂 健、永瀬 茂,「金属内包フラーレンの構造」*日本結晶学会誌* **48**, 230–235 (2006).

#### B-4) 招待講演

S. NAGASE, “Interesting Bonding and Structures in Large Molecules,” XII<sup>th</sup> International Congress of Quantum Chemistry (ICQC), Kyoto (Japan), May 2006.

S. NAGASE and N. TAKAGI, “Effects of Bulky Groups on the Triple Bonding in RE≡ER (E = Si, Ge, Sn) and the Short Ga–Ga Distance in Na<sub>2</sub>[RGaGaR],” Core-to-Core Symposium on Main Group Element Chemistry, Tokyo (Japan), August 2006.

永瀬 茂, 「分子理論と計算化学の展開」次世代スーパーコンピューティングシンポジウム2006, 東京, 2006年9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.

フラレン・ナ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.

The First Asian Pacific Conference on Theoretical & Computational Chemistry 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.

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.

*Theochem*, Editorial Board.

#### B-8) 他大学での講義、客員

大阪大学大学院, 講義「ナノ分子系の量子化学計算」2006年6月16日.

城西大学大学院理学研究科, 集中講義「有機物質設計特論」2006年7月18-20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

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).

特定領域研究(A),「ナノサイズ分子がもたらす複合的電子系の構造と機能」永瀬 茂 (2006年-2009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、変化のパ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。

## 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 ~ 2006 年 3 月 31 日 )<sup>\*</sup>

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：非断熱遷移状態理論を構築し，Zhu-Nakamura ( ZN ) 公式を組み込んだ。これを電子移動に応用し，Marcus の公式を改良する新公式を作ることに成功した。また，ZN 公式を活用して，古典的に許されない遷移をも取り扱え，しかも，現実の大次元系に適用出来るように古典軌道ホップ法を一般化した。
- b) 化学動力学のレーザー制御：半古典的最適制御理論を構築し，多次元系の制御を可能ならしめた。また，フォトリミズム系の解析を行い，2 次チャープによる励起過程の高効率化と円錐交差での遷移の高効率化を行うレーザー制御法を提唱した。
- c) 多次元トンネルの理論の構築と応用：我々が構築した理論をピニルラディカルに適用し，実験との良い一致を得て，理論の正しさを確認した。
- d) 分子機能の開発を目指して：上述のフォトリミズム機能の制御に加えて，非断熱トンネル現象を利用して，炭素 5 員環に水素を透過させる可能性を解明した。

B-1) 学術論文

**H. YAMADA, K. YOKOYAMA, Y. TERANISHI, A. SUGITA, T. SHIRAI, M. AOYAMA, Y. AKAHANE, N. INOUE, H. UEDA, K. YAMAKAWA, A. YOKOYAMA, M. KAWASAKI and H. NAKAMURA**, "Selective Transition to the Closely-Lying States Cs ( $7D_{3/2}$ ) and Cs ( $7D_{5/2}$ ) by Femtosecond Laser Pulses," *Phys.Rev. A* **72**, 063404 (5 pages) (2005).

**H. TAMURA, S. NANBU, T. ISHIDA and H. NAKAMURA**, "Ab Initio Nonadiabatic Quantum Dynamics of Cyclohexadiene/Hexatriene Ultrafast Photoisomerization," *J. Chem. Phys.* **124**, 084313 (13 pages) (2006).

**P. OLOYEDE, G. V. MIL'NIKOV and H. NAKAMURA**, "Generalized Trajectory Surface Hopping (TSH) Method Based on the Zhu-Nakamura Theory," *J. Chem. Phys.* **124**, 144110 (2006).

**G. V. MIL'NIKOV, T. ISHIDA and H. NAKAMURA**, "Tunneling Splitting of Energy Level and Rotational Constants in the Vinyl Radical  $C_2H_3$ ," *J. Phys. Chem. A* **110**, 5430–5435 (2006).

**S. NANBU, T. ISHIDA and H. NAKAMURA**, "Atomic Hydrogen Transmission through Five-Membered Carbon Ring by the Mechanism of Nonadiabatic Tunneling," *Chem. Phys.* **324**, 721–732 (2006).

**H. TAMURA, S. NANBU, T. ISHIDA and H. NAKAMURA**, "Laser Control of Reactions of Photo-Switching Functional Molecules," *J. Chem. Phys.* **125**, 034307 (10 pages) (2006).

**Y. ZHAO, W. LIANG and H. NAKAMURA**, “Semiclassical Treatment of Thermally Activated Electron Transfer in the Intermediate to Strong Electronic Coupling Regime Under the Fast Dielectric Relaxation,” *J. Phys. Chem. A* **110**, 8204–8212 (2006).

**Y. ZHAO and H. NAKAMURA**, “Electron Transfer Rate Uniformly Valid from Nonadiabatic to Adiabatic Regime Based on the Zhu-Nakamura Theory,” *J. Theor. Comput. Chem.* **5**, 1 (2006).

**H. ZHANG, S. C. SMITH, S. NANBU and H. NAKAMURA**, “HOCl Ro-Vibrational Bound-State Calculations for Nonzero Total Angular Momentum,” *J. Phys. Chem. A* **110**, 5468–5474 (2006).

**A. ISHKHANYAN and H. NAKAMURA**, “Strong-Coupling Limit in Cold-Molecule Formation *via* Photoassociation or Feshbach Resonance through Nikitin Exponential Resonance Crossing,” *Phys. Rev. A* **74**, 063414 (9 pages) (2006).

**A. ISHKHANYAN, J. JAVANAINEN and H. NAKAMURA**, “Landau-Zener Transition in Photoassociation of Cold Atoms: Strong Interaction Limit,” *J. Phys. A* **39**, 14887 (2006).

**H. NAKAMURA**, “Dynamics of Nonadiabatic Chemical Reactions,” *J. Phys. Chem. A* **110**, 10929–10946 (2006).

#### B-4) 招待講演

**H. NAKAMURA**, “Nonadiabatic Molecular Dynamics and Molecular Functions,” 2<sup>nd</sup> Int. Conf. on Current Developments in Atomic, Molecular and Optical Physics with Applications, Delhi (India), March 2006.

**H. NAKAMURA**, 「非断熱遷移とトンネルの理論——古典的分子動力学の改善へ」NAREGI ナノサイエンス実証研究 第4回公開シンポジウム(基調講演)岡崎, 2006年4月.

**H. NAKAMURA**, 「化学動力学の理論的研究——反応の制御と機能の開発」原子衝突研究協会 第31回研究会(特別講演)岡崎, 2006年8月.

**H. NAKAMURA**, “Comprehension and Control of Chemical Dynamics,” Inter. Conf. Quantum Chemistry, Kyoto, May 2006.

**H. NAKAMURA**, “WKB Theory of Tunneling Splitting in Polyatomic Molecules,” Int. Conf. Low Temp. Chem., Chernogolovka, August-September 2006.

#### 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

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

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

ICPEAC (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).

Pacificchem 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).

Organizing Committee Member of 12-th ICPEAC (2006).

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 (1986.10- ).

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

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

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

*Journal of Physical Chemistry*, Member of Advisory Board (2007- ).

*Chemical Physics Letters*, Member of Advisory Editorial Board (2007- ).

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 分子研総括責任者 (2002-2003).

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-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).

\* ) 2004 年 4 月 1 日分子科学研究所長

## 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、反応動力学

### A-2) 研究課題：

- a) 非平衡・非定常状態下における分子の量子多体系ダイナミクス
- 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) 実在する分子系は通常、有限温度において周りの環境と相互作用していることが多く、必然的に分子系と周りの環境の間では熱的エネルギーの出入り（熱的揺らぎ）や電子のやり取り（電子数の揺らぎ）が起こり得る。我々のグループでは特に電子数の揺らぎを持つ分子、すなわち電子溜めと相互作用している分子系において引き起こされる量子多体系ダイナミクスの理論的解明を目標として研究を進めている。振動エネルギーや回転エネルギーの緩和過程に関しては多くの優れた研究例があるが、電子エネルギーの散逸に関する研究は、理論的にも実験的にもあまり行われていないのが現状である。例えば多電子系の場合、電子相関や可干渉性等の量子多体系特有の問題が露骨に現れること、また一般的に電子が関わる現象は非常に短い時間スケールで起こることが、散逸を含む多電子系ダイナミクスの研究を難しくしている大きな要因である。この研究課題には電子的揺らぎを取り込む問題と量子多体系ダイナミクスを記述する問題の2つが存在する。そこで我々は、各々の問題点に焦点を絞った課題を設定し研究を進めている。電子的揺らぎの研究においては、表面吸着分子系や電極反応を電子レベルで記述するための非平衡定常状態理論の開発とその方法論の適用を行っている。最近、表面吸着原子系を記述するための新しい方法論を開発した。この方法論では表面吸着原子系を有限サイズのクラスターで近似しているが、クラスターの端において適切な境界条件を課すことで半無限系であるはずの表面を正しく記述することに成功した。一方、量子多体系ダイナミクスの研究においては、レーザーパルス光により引き起こされる電子ダイナミクスの詳細な解明を時間依存密度汎関数理論に基づいて行った。最近の成果としては、リング状分子に円偏光レーザーパルスを照射することにより、効率的にリング内に電流を誘起し、同時に磁気モーメントを発生できることを示した。
- 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、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、磁性、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様々な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。特筆すべき成果としては、従来チオラート分子は金クラスターの表面を覆うような形で結合すると思われてきたが、我々の研究によると金原子と硫黄原子が1対1で結合した強固な Au-S ネットワークを形成し、このネットワーク構造が金チオラートクラスターの安定化の大きな要因であることを明らかにしたことである。

### B-4) 招待講演

信定克幸,「分子科学における量子多体系ダイナミクス」第13回理論化学シンポジウム, 神奈川, 2006年9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 (2005-2006).

### 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 (2005-2006).

## 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-2005年3月.

筑波大学計算科学研究センター共同研究員, 2004年8月-2006年3月.

筑波大学計算科学研究センター共同研究員, 2006年6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-).

特定領域研究,「エネルギー散逸を伴う電子ダイナミクスの理論と材料物性」信定克幸 (2006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について明確な答えを出すことは現状では難しい。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、理論解析・数値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、最近、周りの環境と相互作用している分子系、特に電子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にも着手した。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) 蛋白質が選択的に結合したイオンを 3 次元 RISM 理論で検出：蛋白質によるリガンドの認識はその機能発現機構の中で極めて本質的のプロセスである。本研究では人リゾチームの野生型と各種変異型による  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{++}$  の選択的結合を 3 次元 RISM 理論によって「検出」した結果を報告した。

人リゾチームの野生型および Q86D 置換体はどのような正イオンも結合しないことが Kuroki-Yutani の X 線回折実験からすでに知られている。彼らは、同時に、A92D 置換体は  $\text{Na}^+$  を結合するが  $\text{Ca}^{++}$  は結合せず、Q86D/A92D 置換体は  $\text{Ca}^{++}$  を結合するという報告を行っている。本研究では 3 次元 RISM 理論により電解質中の人リゾチームの野生型及び数種類の置換体の水和構造、イオン分布を計算した。その結果、野生型及び Q86D 置換体はイオンを結合せず、A92D と Q86D/A92D はイオンを結合することを再現した。これらイオン結合性のある置換体のもつ  $\text{Na}^+$  及び  $\text{Ca}^{++}$  の選択性についても定性的に実験結果を再現した。

本研究で報告した方法は水溶液中の溶質の分子種を変えるだけで、イオンチャネル、酵素反応、ドラッグデザインなど、分子認識に関わる多くの生理過程に容易に拡張することができる。本研究はその突破口を切開くものである。

[ *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 12042 (2006) に既報 ]

- b) 不均一分子性液体の統計力学における新理論の提案：液体統計力学の確立された理論は密度相関関数に関する Ornstein-Zernike (OZ) 積分方程式の形式で与えられる。1960 年代初頭に一応の完成を見たこの理論は液体の物理的側面に主眼を置いたものであり、分子の個性やその変化を問題とする「化学現象」に対してはほとんど無力と言っても過言ではない。OZ 方程式を化学現象をも含む形式に定式化するにはふたつの拡張が必要であった。ひとつは分子の構造や電荷分布をあらわに取り入れること、他は液液や固液さらには蛋白質表面などの界面を考慮することである。この前者に関しては、1972 年に D. Chandler と H. Andersen が提案した RISM 理論によって、分子の幾何形状が考慮できるようになり、さらに 1981 年に F. Hirata と P. Rossky によって分子内の電荷分布が取り入れられたことによりほとんどすべての溶液内化学過程に適用できるようになった。しかしながら、この理論は本質的には液体の密度や濃度が均一であることを前提としており、例えば、液液界面のように密度や濃度の勾配があるような不均一系に適用することはできない。

本研究の目的は分子性液体の統計力学理論である RISM 理論を不均一系に一般化し、様々な界面での分子性液体に適用できる理論を構築することである。本研究では、まず、不均一系に一般化した RISM 方程式 (不均一 RISM 方程式) の定式化を行った。次に「イオンの水和」を例にとり、不均一 RISM 理論の有効性を検証した。イオンの

水和に関しては、1957年にロシアのSamoilovが「正・負水和」モデルを、同時に米国のFrankおよびWenが「構造形成・破壊」モデルを提案しているが、これらは物理的にはほぼ同一のモデルである。本研究ではその構造的実態について検討を行った。

#### B-1) 学術論文

**R. ISHIZUKA and F. HIRATA**, “Conformational Equilibria in Liquids Consisting of Small Chain Molecules,” *Chem. Phys. Lett.* **420**, 135–139 (2006).

**N. YOSHIDA and F. HIRATA**, “A New Method to Determine Electrostatic Potential Around a Macromolecule in Solution from Molecular Wave Function,” *J. Comput. Chem.* **27**, 453–462 (2006).

**N. YOSHIDA, R. ISHIZUKA, H. SATO and F. HIRATA**, “Ab Initio Theoretical Study of Temperature and Density Dependence of Molecular and Thermodynamic Properties of Water in the Entire Fluid Region: Autoionization Processes,” *J. Phys. Chem.* **110**, 8451–8458 (2006).

**A. E. KOBRYN, T. YAMAGUCHI and F. HIRATA**, “Study of Anomalous Mobility of Polar Molecular Solutions by Means of the Site-Site Memory Equation Formalism,” *J. Mol. Liq.* **125**, 14–21 (2006).

**T. IMAI, A. KOVALENKO and F. HIRATA**, “Hydration Structure and Thermodynamics of Protein Studied by the 3D-RISM Theory,” *J. Mol. Simulation* **32**, 817–824 (2006).

**T. IMAI, H. ISOGAI, T. SETO, A. KOVALENKO and F. HIRATA**, “Theoretical Study of Volume Changes Accompanying Xenon-Lysozyme Binding: Implication for Molecular Mechanism of Pressure Reversal of Anesthesia,” *J. Phys. Chem. B* **110**, 12149–12154 (2006).

**T. IMAI, Y. HARANO, M. KINOSHITA, A. KOVALENKO and F. HIRATA**, “A Theoretical Analysis on Hydration Thermodynamics of Proteins,” *J. Chem. Phys.* **125**, 024911 (7 pages) (2006).

**J. Y. LEE, N. YOSHIDA and F. HIRATA**, “Conformational Equilibrium of 1,2-Dichloroethane in Water: Comparison of PCM and RISM-MP2 Methods,” *J. Phys. Chem.* **110**, 16018–16025 (2006).

**N. YOSHIDA, S. PHONGPHANPHANEE, Y. MARUYAMA, T. IMAI and F. HIRATA**, “Selective Ion-Binding by Protein Probed with the 3D-RISM Theory,” *J. Am. Chem. Soc. (communication)* **128**, 12042–12043 (2006).

#### B-4) 招待講演

**F. HIRATA**, “Water Molecules Confined in a Cavity of Protein Detected by the 3D-RISM Theory,” JSPS Core-to-Core Program Seminar, “Pressure, hydration, and dynamics toward a new dynamic view of protein,” Okinawa, January 2006.

**F. HIRATA**, “Relaxation and Dynamics in Liquids,” Sokendai Asian Winter School, Okazaki, February 2006.

平田文男, 「生体内化学過程を追求するための新しい理論的方法論の構築」 「巨大計算手法の開発と分子・物質シミュレーション中核拠点の形成」第2回連携研究会, 岡崎, 2006年3月.

平田文男, 「分子性液体の統計力学が切り拓く『水と生体分子が織りなす生命現象の化学』」生物物理若手の会近畿支部セミナー「水と生命」姫路, 2006年3月.

平田文男, 「3D-RISM理論が蛋白質研究にもたらした最近のブレークスルー」第4回ナノ学会シンポジウム「液体研究はナノテクノロジーのbreakthroughになり得るか」京都, 2006年5月.

**F. HIRATA**, “Recognition of Substrates by Protein in Solution: The First Step toward Enzymatic Reactions,” ICQC2006 Satellite Symposium “Reactions in Solution and Biological Systems,” Kyoto, May 2006.

平田文男, 『『生命』と『物質』の謎を解く鍵、『分子認識』』自然科学研究機構連携プロジェクト「自然科学における階層と全体」第3回シンポジウム, 箱根, 2006年7月.

平田文男, 「理論とシミュレーションで探る複雑・多体クーロン系」未来エネルギー研究会主催「若手のためのサマースクール」琵琶湖, 2006年8月.

平田文男, 「水溶液中のダイナミクス理論」日本物理学会シンポジウム「THz 関連領域のダイナミクスと光散乱」千葉大学, 2006年9月.

**N. YOSHIDA, S. PHONPHANPNANEE and F. HIRATA**, “Selective ion binding by human lysozyme studied by the statistical mechanical integral equation theory,” International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE) 2006, Chania (Greece), October-November 2006.

#### 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ら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) 1 次元  $1/4$  フィルド有機塩の光誘起電荷秩序融解ダイナミクス
- b) 二量化した 1 次元モット絶縁体の光誘起逆スピン・パイエルス転移過程
- c) 2 次元  $1/4$  フィルド  $\alpha$  型および  $\theta$  型有機塩の電荷秩序に対する格子効果の違い
- d) 中性イオン性転移近傍の量子フォノンと結合した 1 次元電子状態

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 1 次元  $1/4$  フィリング系の有機塩 (EDO-TTF) $_2$ PF $_6$  は低温で (0110) 型の電荷秩序をもつことが知られ、サイト・エネルギー変調型とトランスファー変調型の電子フォノン相互作用が効いている。光学伝導度の主な 2 つのピークは (0200) および (1010) への電荷移動励起によるもので、対応する励起状態の断熱ポテンシャルの形状は大きく異なり、光誘起融解ダイナミクスも異なる。古典的なフォノンと結合した厳密な多電子波動関数の発展を、時間依存シュレディンガー方程式を解くことで求めた。(0200) 励起ではトランスファーを変調する変位をまず小さくし、融解効率は 2 種類のフォノンの周波数比に大きく依存する。一方、(1010) 励起では両変位を同時に小さくし、融解効率はむしろ励起エネルギーに依存する。電荷秩序の光誘起融解にどちらの励起が効率的かはこれらの条件による。
- b) 1 次元  $1/2$  フィリング系の有機錯体 K-TCNQ は室温でスピン・パイエルス相にあって、非磁性で二量化している。ダイマー内とダイマー間の電荷移動励起について、二量化ハバード模型を使って厳密対角化による数値計算と二量化の強い極限からの摂動計算を行った。ダイマー間励起で電子と正孔が離れるときにスピン交替が著しく減少し、断熱ポテンシャルは二量化を解くほうに下がり、光誘起融解を引き起こす。光照射でダイマー間電荷移動励起をした直後の光学伝導度に、荷電ダイマー内の励起によるギャップ内準位が存在する。これは格子緩和を必要としないので光照射後瞬時に現れ、実験結果と矛盾しない。
- c) 2 次元  $1/4$  フィリング系の  $\alpha$  型および  $\theta$  型の BEDT-TTF 塩は低温で水平ストライプ型の電荷秩序をもつことが知られ、長距離クーロン斥力が主な起源とされている。しかしクーロン斥力だけでは異なる型の電荷秩序をもつこと、実際には電荷秩序転移に結晶構造の変化が伴うことなどから、電子格子相互作用の重要性を指摘してきた。しかし  $\alpha$  型と  $\theta$  型では格子との結合が同程度でも格子変位は大きく異なり、後者のほうがずっと大きい。異方的三角格子上の拡張ハバード模型にトランスファー変調型の相互作用を取り入れ、厳密対角化による少数系の数値計算、強結合極限からの摂動計算、無限系の有限温度を含めた平均場計算でこれを説明した。 $\alpha$  型の結晶構造は高温でも対称性が低いために既に電荷不均化があるので、低温の電荷秩序に対する格子変位の寄与は小さい。
- d) 中性イオン性転移を示す交互積層型電荷移動錯体の中で、化学圧力効果などで相転移を零度付近に抑えたものでは、量子相転移が起こることと近傍で量子常誘電相が現れることを、量子スピン 1 の模型で説明してきた。しかし電子系としての誘電応答を議論するため、量子スピンで表現した量子フォノンと結合した 1 次元イオン性拡張ハバード模型の多体波動関数を数値的に厳密に求めた。フォノンの量子性を大きくすると、相転移が不連続から連続に変わり、イオン性相が抑制されることがわかった。

#### B-1) 学術論文

**K. YONEMITSU and K. NASU**, “Theory of Photoinduced Phase Transitions,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 011008 (8 pages) (2006).

**K. YONEMITSU**, “Interchain Coupling Effects on Photoinduced Phase Transitions between Neutral and Ionic Phases in an Extended Hubbard Model with Alternating Potentials and an Electron-Lattice Coupling,” *Phys. Rev. B* **73**, 155120 (7 pages) (2006).

**N. MAESHIMA, K. OKUNISHI, K. OKAMOTO, T. SAKAI and K. YONEMITSU**, “Possibility of Field-Induced Incommensurate Order in a Quasi-One-Dimensional Frustrated Spin System,” *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 4819–4826 (2006).

**N. MAESHIMA and K. YONEMITSU**, “Dynamics of Photoexcited States in One-Dimensional Dimerized Mott Insulators,” *Phys. Rev. B* **74**, 155105 (11 pages) (2006).

#### B-2) 国際会議のプロシーディングス

**B. HÜLSEN, F. X. BRONOLD, H. FEHSKE and K. YONEMITSU**, “Phase Diagram of the Excitonic Insulator,” *Physica B* **378-380**, 267–268 (2006).

**K. YONEMITSU**, “Interchain-Coupling Effects on Photoinduced Neutral-Ionic Transition Dynamics in Mixed-Stack Charge-Transfer Complexes,” *J. Low Temp. Phys.* **142**, 499–502 (2006).

#### B-4) 招待講演

米満賢治, 「分子性半導体 / 金属界面のキャリア輸送(理論)」日本物理学会第61回年次大会領域7シンポジウム「分子性半導体素子の新展開」松山大学, 2006年3月.

**K. YONEMITSU and N. MAESHIMA**, “Correlated Charge Transport through Mott-Insulator-Metal Interfaces,” International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals (ICSM2006), Dublin (Ireland), July 2006.

米満賢治, 「有機半導体における電子相関に依存した光誘起相転移ダイナミクス」日本物理学会2006年秋季大会領域5領域7合同シンポジウム「強相関電子系における光誘起相転移の超高速ダイナミクス」千葉大学, 2006年9月.

**K. YONEMITSU**, “Photoinduced Phase Transition Dynamics Depending on Correlations in Quasi-One-Dimensional Organic Systems,” Universite de Rennes 1, Rennes (France), October 2006.

**Y. YAMASHITA and K. YONEMITSU**, “Quantum Paraelectricity near the Neutral-Ionic Critical Point,” Universite de Rennes 1, Rennes (France), October 2006.

**S. MIYASHITA and K. YONEMITSU**, “Cooperative Effects of Electron Correlations and Lattice Distortions on Charge Ordering in 1/4-Filled-Band Organic Salt,  $\theta$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>RbZn(SCN)<sub>4</sub>,” Universite de Rennes 1, Rennes (France), October 2006.

米満賢治, 「光による秩序融解の理論: 電荷移動 / 振動過程に依存するダイナミクス」ナノ光制御による巨視的秩序形成と物性発現に関する研究会, 名古屋大学, 2006年12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7 (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).

*Journal of the Physical Society of Japan*, 編集委員 (2006- ).

## B-10) 外部獲得資金

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-2005年).

産学連携等研究費(ナノ統合拠点ナノ電子系)「光誘起集団電荷移動と伝導の制御」米満賢治 (2006年-2007年).

## C) 研究活動の課題と展望

分子性物質を意図的に非平衡の環境下においたときの電子物性の変化や機能を理論的に研究している。そのなかで光誘起相転移とダイナミクスについて調べてきたが, 光励起のしかたによって異なるダイナミクスがかなり明らかになってきた。特に, 励起された荷電体の振舞いや, 関わっている振動モードの周波数比に依存して, 光誘起状態変化が巨視的なものになるかどうか, 最終状態が大きく異なってくることが計算でみえてきた。また, 電子間相互作用が優勢であっても格子との弱い結合が状況によっては電子状態に大きな影響を及ぼすこと, それは非平衡ダイナミクスで顕著になることもわかってきた。これはかつて平衡状態の電子物性で理解が進んできた, 競合する相互作用のもたらす現象の非平衡への展開のなかで初めてみえてきたことである。相互作用の直接的な帰結である多電子と互いに結合したフォノンの協働性が量子統計力学の中でどう発現するかが問題となる。この協調的な運動が顕著になるコヒーレンスが量子の世界でどう振舞うかを追求する。

### 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) 先端的な近接場分光法の開発
- 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
- 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・分子集合体におけるナノ構造の観察と、特徴的な光学的性質、励起状態の(超)高速ダイナミクス等を探るための、近接場時間分解分光装置の開発を行い、並行して試料の測定を行っている。基本的な測定システムは既に3年程度前に完成し、光学像の横方向分解能は50 nm程度、時間分解能は100 fs以上を同時に実現している。現在は、更に短いレーザーパルスと空間位相変調による分散補償を導入した装置を開発中で、これにより金微粒子のプラズモンの緩和を、近接場領域で実時間で観測すること等が可能になると予測している。
- b) 所内外との共同研究として、鎖状ポルフィリン化合物や、LB膜を生成するポリジアセチレン系化合物、糖鎖とカーボンナノチューブの複合体等に関して、近接場分光法に基づいた研究を進行中である。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。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や近接場光照射による構造変化を分光学的に検討中である。糖鎖とカーボンナノチューブの複合体では、ナノチューブ単体では見られない特徴的な光学的性質を解析中である。
- 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。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見いだしていたが、これを更に確立し、またその理論的解釈について、所外との共同研究を行っている。金ナノロッドの超高速測定では特徴的な過渡吸収イメージが見られたが、これは励起光による電子温度の上昇によるものとして理論的に解釈することができた。
- 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。微粒子凝集体では、微粒子間の空隙に強い光電場増強があり、それが単分子レベルの表面増強ラマン散乱にかかわると言われていた。我々は近接場イメージングによって、初めて実験的にこれを実証することに成功した。また微粒子の形状・サイズと凝集状態による電場増強の違い、周囲のクロモフォア分子との相互作用に関しても研究している。近接場イメージングにより、微粒子の形状を一つ一つ特定した上で光電場の増強とその周囲の分子への効果を検討し、形状と電場増強の間の相関を見いだした。

#### B-1) 学術論文

**K. IMURA, H. OKAMOTO, M. K. HOSSAIN and M. KITAJIMA**, “Near-Field Imaging of Surface Enhanced Raman Active Sites in Aggregated Gold Nanoparticles,” *Chem. Lett.* **35**, 78–79 (2006).

**K. IMURA, T. NAGAHARA and H. OKAMOTO**, “Photoluminescence from Gold Nanoparticles Induced by Near-Field Two-Photon Absorption,” *Appl. Phys. Lett.* **88**, 023104 (3 pages) (2006).

**K. IMURA and H. OKAMOTO**, “Reciprocity in Scanning Near-Field Optical Microscopy: Illumination and Collection Modes of Transmission Measurements,” *Opt. Lett.* **31**, 1474–1476 (2006).

**K. IMURA, H. OKAMOTO, M. K. HOSSAIN and M. KITAJIMA**, “Visualization of Localized Intense Optical Fields in Single Gold-Nanoparticle Assemblies and Ultrasensitive Raman Active Sites,” *Nano Lett.* **6**, 2173–2176 (2006).

#### B-3) 総説、著書

岡本裕巳、井村考平, 「動的近接場分光法による金ナノ微粒子のプラズモンのイメージング」*レーザー研究* **34**, 224–229 (2006).

井村考平、岡本裕巳, 「貴金属微粒子の波動関数イメージングと動的近接場分光」*分光研究* **55**, 161–172 (2006).

**H. OKAMOTO and K. IMURA**, “Near-field imaging of optical field and plasmon wavefunctions in metal nanoparticles,” *J. Mater. Chem.* **16**, 3920–3928 (2006).

岡本裕巳, 「金属ナノ構造におけるプラズモン波動関数の近接場イメージング」*プラズモンナノ材料の設計と応用技術*, 山田 淳 監修, シーエムシー出版, pp. 128–140 (2006).

#### B-4) 招待講演

**K. IMURA and H. OKAMOTO**, “Ultrafast space-time resolved near-field microscopy of single gold nanorods,” The 4th Asian Conference on Ultrafast Phenomena, Hong-Kong (China), January 2006.

井村考平、岡本裕巳, 「金ナノロッド・ナノプレートのプラズモンモードイメージング」*レーザー学会学術講演会第26回年次大会*, 大宮, 2006年2月.

岡本裕巳, 「プラズモンモードの光学的可視化とコヒーレンス」*分子研研究会「凝縮系のコヒーレンス制御と超高速ダイナミクス」* 岡崎, 2006年3月.

岡本裕巳, 「ナノの世界まで光で見えてしまう近接場光学」*自然科学研究機構+立花隆シンポジウム「見えてきた! 宇宙の謎。生命の謎。能の謎。科学者が語る科学最前線」* 東京, 2006年3月.

**H. OKAMOTO and K. IMURA**, “Ultrafast Near-Field Spectroscopy on Spatiotemporal Coherence of Elementary Excitations in Nanostructures,” KAKENHI International Symposium on “Molecular Nano Dynamics,” Osaka (Japan), June 2006.

岡本裕巳、井村考平, 「金属ナノ微粒子系のプラズモン波動関数と局在光電場のイメージング」*ナノオプティクス研究グループ第15回研究討論会*, 浜松, 2006年7月.

**H. OKAMOTO, K. IMURA, M. K. HOSSAIN and M. KITAJIMA**, “Near-Field Imaging of SERS-Active Hot Spots on Metal-Nanoparticle Aggregates,” 20th International Conference on Raman Spectroscopy, Yokohama (Japan), August 2006.

**K. IMURA and H. OKAMOTO**, “Near-field two-photon-induced photoluminescence and Raman scattering from single gold nanoparticles assemblies,” SERS-2006 (The 1st International Symposium on Surface-enhanced Raman scattering), Nishinomiya (Japan), August 2006.

岡本裕巳,「動的近接場分光法と波動関数イメージング」21COE 研究集会「各種顕微鏡と極微細加工、操作で拓く新しい化学、工学、生物学」京都, 2006年9月.

岡本裕巳、井村考平,「金属微粒子系の光励起と近接場イメージング」光化学討論会, 仙台, 2006年9月.

井村考平,「静的および動的近接場分光法による貴金属微粒子の波動関数イメージング」分子構造総合討論会, 静岡, 2006年9月.

**H. OKAMOTO and K. IMURA**, “Dynamic near-field spectroscopy and imaging of plasmon-mode wavefunctions,” Indo-Japan Joint Workshop on New Frontiers of Molecular Spectroscopy, Kobe (Japan), September 2006.

**H. OKAMOTO and K. IMURA**, “Imaging of plasmon-mode wavefunctions and electric field distribution by near-field microscopy,” Annual Meeting of Korean Chemical Society, Kwangju (Korea), October 2006.

#### 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, ナノオプティクス賞 (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 (2004-2006).

分子科学会 運営委員 (2006- ).

##### 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).

The Twentieth International Conference on Raman Spectroscopy (Yokohama), Local Organizing Committee (2006).

International Workshop on Soft X-ray Raman Spectroscopy and Related Phenomena (Okazaki), Local Organizing Committee (2006).

##### 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-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-2005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-2005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-).

基盤研究(A),「ナノ微粒子系の波動関数と励起状態の動的挙動」岡本裕巳(2006年-).

若手研究(A),「励起と検出の時空間を制御した時間分解近接場分光手法の構築」井村考平(2006年-).

#### C) 研究活動の課題と展望

研究室の立ち上げがある程度の段階に達した2~3年前から,静的・動的近接場分光装置を用いた,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ている。有機分子系では所内外との共同研究も数件行い,他の方法では得難い情報が引き出せており,今後もこのような方向を一つの軸として行く。また金属微粒子に関しては波動関数や光電場の空間分布をイメージし,時間変化を追跡するという独自の研究領域を拓く事ができ,現在これを次のフェーズに発展させる段階に入っている。これが今後の研究の今一つの軸と考えている。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への展開を検討する。また時間分解近接場分光の時間分解能を格段に向上させ,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。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(特に光電場増強に基づく特性)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積極的に進める。近接場下での熱的分光法についても実験方法の開発を進める必要があると考えている。それらを実現するための,マンパワーの不足を解決する事も継続して努力しなければならない。

## 西 村 勝 之 ( 助教授 ) ( 2006 年 4 月 1 日着任 )

A-1) 専門領域：固体核磁気共鳴、構造生物学

A-2) 研究課題：

- a) 分子配向を決定する新規固体 NMR 測定法の開発
- b) 固体高分解能 NMR 装置周辺機器の開発
- c) 生体脂質膜と相互作用するペプチドの構造物性解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 配向試料で試料発熱に敏感な試料に適切な  $^1\text{H}$  核、観測核の双方に低出力ラジオ波を用いた新規感度増強法、および分子配向決定法の開発を行った。本研究はこれまでに開発した原理を拡張、発展させたもので、観測核および試料発熱に敏感な  $^1\text{H}$  核でのラジオ波強度を有効に減少させながらも、必要性能を維持するものである。開発した感度増強法は既存の測定法と比較して必要なラジオ波出力を任意に減少させながらも最高で 1.6 倍の感度増強に成功した（学術論文投稿中）。分子配向決定法は  $^1\text{H}$ -観測核間の磁気双極子相互作用と化学シフト異方性を軸とした 2 次元双極子磁場分離法として分類される方法であり、同様に低出力ラジオ波で十分な性能を達成した（*Chem. Phys. Lett.* **419**, 120–124 (2006) に既報）。本年度はこれらの量子力学的な考察を重点的に行い、平均ハミルトニアン理論に基づいて得た磁気双極子相互作用の解析解と数値解析シミュレーション結果の比較を行い、通常使用の実験変数内では完全な一致を示し、平均ハミルトニアン項から簡便にスケール因子を求められることを確認した（学術論文投稿準備中）。
- b) 当研究グループでの研究手段の中心的機器である固体 NMR 分光器は一般に極めて高価である。当研究グループではバリアン社製中古溶液 NMR 装置（9.4 T）を購入し、純正品とは全く異なる形での独自周辺機器を実装し固体高分解能 NMR 測定を可能にした。また上述の溶液 NMR 用のナローボアマグネットで使用可能な完全独自設計の固体 NMR 静止試料用 H-X 二重共鳴プローブ試作品を製作した。今後用途別の複数プローブ作成を考慮し製作単価抑制のため、高価な NMR メーカー製専用補修部品等を一切用いず、市販の規格品の非磁性金属材料を用いた製作を前提にプローブシェルの最適化設計した。温度調節用の圧縮空気をプローブ内に導入するガラスデュアーから完全に独自設計し、ヒーターの駆動電圧、抵抗値、熱電対の抵抗値の変更で日本電子社製、バリアン社製温度調節器の双方で使用可能な仕様とした。JMT 社製ワイドボア、Oxford 社製ナローボアマグネットで設置が可能なガイドも設計した。現在これらの設計を終了し、仮組みを行っている。また製作したプローブは市販の約 1/10 の製作単価で製造が可能であり、かつ実験目的に応じて検出コイル形状、内径、観測核側の共鳴周波数を任意に変更可能である。
- c) 脂質二重膜表面への結合したホルモンペプチド副腎皮質刺激ホルモン（ACTH）は脂質二重膜中の中性、酸性脂質のモル比に依存して、その立体構造および脂質膜への結合定数を変化させ、生体の中性、酸性脂質組成に近い組成比で結合定数の極大値を生じ、最も安定した単一構造をとることが、固体 NMR による二次構造解析、QCM 測定から判明した（学術論文投稿準備中）。上述のように中性、酸性脂質の混合比に応じてホルモンペプチドはその二次構造を変化させ、脂質への結合親和性の変化が生じると考えられる。全く異なる活性を持つ複数のペプチドホルモン、ACTH、色素胞刺激ホルモン（MSH）、 $\beta$ -エンドルフィン、成長ホルモン抑制因子（ソマトスタチン 14）を

QCM 法を用いて系統的に変化させた中性 / 酸性脂質組成に対する結合定数を測定した。その結果、環状ペプチドホルモンのソマトスタチンを除き、各々のペプチドは、二次構造、および正味の側鎖電荷とは関係なく、結合定数の絶対値は異なるがどれもほぼ同様な中性 / 酸性脂質組成依存性を示し、特に中性、酸性脂質モル比 3:1 付近で結合定数が極大値を示すことが判明した（学術論文投稿準備中）。

#### B-1) 学術論文

**K. NISHIMURA and A. NAITO**, “Remarkable Reduction of RF Power by ATANSEMA and DATANSEMA Separated Local Field in Solid-State NMR Spectroscopy,” *Chem. Phys. Lett.* **419**, 120–124 (2006).

**J. HU, R. FU, K. NISHIMURA, L. ZHANG, H. ZHOU, D. D. BUSATH, V. VIJAYYERGIYA and T. A. CROSS**, “Histidines, Heart of the Hydrogen Ion Channel from Influenza A Virus: Toward an Understanding of Conductance and Proton Selectivity,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **103**, 6865–6870 (2006).

**M. UMEYAMA, A. KIRA, K. NISHIMURA and A. NAITO**, “Interactions of Bovine Lactoferricin with Acidic Phospholipid Bilayers and Its Antimicrobial Activity as Studied by Solid-State NMR,” *Biochim. Biophys. Acta* **1758**, 1523–1528 (2006).

#### B-3) 総説、著書

**K. NISHIMURA and A. NAITO**, “REDOR in Multiple SpinSystem,” in *Handbook of Modern Magnetic Resonance*, Kluwer Academic (2006).

**A. NAITO, S. TORAYA and K. NISHIMURA**, “Nuclear Magnetic Resonance of Oriented Bilayer Systems,” in *Handbook of Modern Magnetic Resonance*, Kluwer Academic (2006).

#### B-5) 特許出願

特願 2006-294368, 「膜タンパク質レセプタ、リガンド相互作用の解析方法およびその検出素子」 吉良 敦史、西村 勝之((株) アルバック) 2006 年。

#### B-6) 受賞、表彰

西村勝之, 日本核磁気共鳴学会 若手ポスター賞 (2002).

#### B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本生物物理学会 分野別専門委員 (2004- ).

日本核磁気共鳴学会 選挙管理委員 (2005).

学会誌編集委員

日本生物物理学会欧文誌 *Biophysics*, Advisory board (2005- ).

#### B-10) 外部獲得資金

若手研究 (B), 「固体高分解能 NMR 新規手法の開発と生理活性ペプチドの膜結合構造の決定への適用」 西村勝之 (2002 年 -2003 年).

若手研究(B),「脂質膜結合生理活性ペプチド立体構造解析のための低発熱型固体NMR 測定法開発と適用」西村勝之 (2004年-2005年).

財団法人新世代研究所 研究助成,「生体含水試料のための低発熱型新規固体NMR ナノ構造解析法開発」西村勝之 (2005年).

C) 研究活動の課題と展望

2006年4月に着任し,ようやく1人での研究室立ち上げを終了した。生体分子や機能性材料を対象とした新規固体高分解能NMR 測定法を開発し,それらを用いた分子の構造,運動性の解析を行うことを研究グループの主テーマとしている。

2007年1月からの助手の着任,来年度のIMS フェロー着任で研究体制を確立し,研究が加速されることを期待している。

生体分子では特に膜タンパク質を対象とした構造解析手法の開発を中心に行う。本グループで開発する測定法は既存の固体NMR による解析と異なり,膜タンパク質がその機能を発現する生理条件に近い完全水和条件下の脂質二重膜に結合,または貫通状態での動的立体構造の解析を目標としている。今後,特定の膜タンパク質の構造解析を通して,必要な測定法を随時開発し,固体NMR を用いた新しい生体分子の動的立体構造解析手法を開拓したい。

またさらに固体NMR の新しいアプリケーションを創出するための新規プローブの開発を含めて,周辺機器の開発を伴う固体NMR 測定法の開発も行っていく。今年度行った溶液NMR から固体NMR 分光器への高機能化,および静止試料用プローブの開発はその礎となる。

## 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：表面磁性、X線分光学、磁気光学

A-2) 研究課題：

- a) X線磁気円二色性・磁気光学 Kerr 効果などの分光学的手法を用いた磁性薄膜・ナノロッドの表面磁性
- b) 超高速時間分解を視野に入れた紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の開発

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）、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）などの分光学的手法を用いて、様々な磁性薄膜の磁気特性検討を行ってきた。また、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。今年度のハイライトは、Cu(110)-(2×3)N 表面に自己組織的に成長する数原子厚の Co ナノロッドの磁気特性評価である。これまで 1 原子ロッドや数 10nm 厚のロッドは研究されているが、1 nm 程度の太さのロッドは研究例がなかった。本研究により、Cu(110)-(2×3)N 上の 1.5 nm 厚の Co ロッドの磁気異方性は形状異方に反してロッドに垂直で、この理由は異方的なスピン軌道相互作用であることがわかった。また、磁化の温度変化測定により臨界挙動が緩慢で、低次元特性を示さず、この理由はロッドの長さが有限であることを突き止めた。
- b) 紫外光による磁気円二色性は X 線に比べ感度が桁違いに悪く、磁気ナノ構造を観測するための光電子顕微鏡には応用できないとされてきたが、本研究において、光エネルギーを仕事関数しきい値付近に合わせると、紫外磁気円二色性が X 線と同程度に高感度となり、しきい値から外れると急激に減衰する現象を発見した。この発見に基づき、HeCd レーザーを用いた紫外磁気円二色性光電子顕微鏡像を世界で初めて観測することに成功した。

B-1) 学術論文

**D. MAMTUMURA, K. AMEMIYA, S. KITAGAWA, T. SHIMADA, H. ABE, T. OHTA, H. WATANABE and T. YOKOYAMA**, “Chemisorption-Driven Spin Reorientation Transition of Co/Pd(111): The Effect of the CO Adsorption Site,” *Phys. Rev. B* **73**, 174423 (9 pages) (2006).

**H. ABE, K. AMEMIYA, D. MATSUMURA, S. KITAGAWA, H. WATANABE, T. YOKOYAMA and T. OHTA**, “Spin Reorientation Transitions of Fe/Ni/Cu(001) Studied by Using the Depth-Resolved X-Ray Magnetic Circular Dichroism Technique,” *J. Magn. Magn. Mater.* **302**, 86–95 (2006).

**T. NAKAGAWA and T. YOKOYAMA**, “Magnetic Circular Dichroism near the Fermi Level,” *Phys. Rev. Lett.* **96**, 237402 (4 pages) (2006).

**Y. NEGISHI, H. TSUNOYAMA, M. SUZUKI, N. KAWAMURA, M. M. MATSUSHITA, K. MARUYAMA, T. SUGAWARA, T. YOKOYAMA and T. TSUKUDA**, “X-Ray Magnetic Circular Dichroism of Size-Selected, Thiolated Gold Clusters,” *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 12034 (2006).

**X. -D. MA, T. NAKAGAWA and T. YOKOYAMA**, “Effect of Surface Chemisorption on the Spin Reorientation Transition in Magnetic Ultrathin Fe Film on Ag(001),” *Surf. Sci.* **600**, 4605–4612 (2006).

**T. NAKAGAWA, H. WATANABE and T. YOKOYAMA**, “Adatom-Induced Spin Reorientation Transitions and Spin Canting in Co Films on a Stepped Cu(001) Surface,” *Phys. Rev. B* **74**, 134422 (6 pages) (2006).

**T. NAKAGAWA, H. W. YEOM, E. ROTENBERG, B. KRENZER, S. D. KEVAN, H. OKUYAMA, M. NISHIJIMA and T. ARUGA**, “A Long-Period Surface Structure Stabilized by Fermi Surface Nesting: Cu(001)-( $\sqrt{20} \times \sqrt{20}$ ) R26.6°-In,” *Phys. Rev. B* **73**, 075407 (5 pages) (2006).

#### B-3) 総説、著書

中川剛志、横山利彦, 「X線磁気円二色性、磁気光学 Kerr 効果による磁性超薄膜のスピン再配列相転移」*表面科学* **27**, 272–277 (2006).

#### B-4) 招待講演

**T. NAKAGAWA and T. YOKOYAMA**, “Magnetic circular dichroism for ferromagnetic ultra thin films using laser photoemission,” The University of Tokyo International Symposium and The 10th ISSP International Symposium (ISSP-10) on Nanoscience at Surfaces, Kashiwa, October 2006.

**T. YOKOYAMA**, “Possibility of Magnetic Imaging Using Photoelectron Emission Microscopy with Ultraviolet Lights,” 6th Symposium on Molecular Spins (International), Nagoya, March 2006.

#### B-7) 学会および社会的活動

##### 学協会役員、委員

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

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2004.1-2005.12).

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- ), 同化学材料分科会委員長 (2005.1- ).

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).

日本放射光学会編集幹事 (2005.1-2006.12).

##### 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, 2006).

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, 2004.1-2006.12).

日本放射光学会誌編集委員長 (2005.1-2006.12).

#### 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

(財)高輝度光科学研究センター (JASRI/Spring-8) 外来研究員, 2006年4月-.

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.

大阪市立大学大学院理学研究科, 「分子化学物理特別講義2」2006年4月-2006年9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).

科学研究費補助金若手研究(B), 「レーザー誘起磁気円二色性光電子放出を利用した磁気走査トンネル顕微鏡の開発」中川剛志 (2003年-2006年).

住友財団基礎科学研究費, 「レーザー誘起磁気円二色性光電子放出を利用した磁気走査トンネル顕微鏡」中川剛志 (2005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・ナノワイヤ・ナノドットの磁気的性質, および分子吸着などの表面化学的な処理による新しい現象の発見とその起源の解明などを目指している。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利用し, また X線磁気円二色性法システムの電磁石を現在の常伝導から超伝導に大改造中である。さらに, 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, 紫外磁気円二色性光電子顕微鏡を世界に先駆けて開発した。現在放射光を利用した X線磁気円二色性光電子顕微鏡の時間分解能は 70 ps が世界最高であるが, このたび開発した装置を用いて紫外パルスレーザー利用フェムト秒超高速時間分解紫外光電子顕微鏡測定に成功することがさしあたっての目標である。これにより, 磁区毎の超高速スピンドYNAMICS 追跡が可能となる。

一方, 新規磁性薄膜の創成に関しては, 化学修飾した基板表面上に特徴的な自己組織化的ナノ磁性体を構築すること, 無機・有機ハイブリッドスピン素子開発などを視野に入れて検討を行う計画である。

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) タンパク質オルガネラ移行の低侵襲的動態解析法の開発
- b) 細胞内小分子の可視化検出法に関する研究
- c) ミトコンドリア mRNA の可視化検出法に関する研究

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、細胞や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、ミトコンドリアから Smac タンパク質が放出される時、発光タンパク質の一つ renilla luciferase (Rluc) が再構成される機能的発光タンパク質プローブを開発した。開発したプローブを用いて、細胞死に伴う Smac タンパク質のミトコンドリアからの放出が、生きたマウス個体で低侵襲的に時空間解析できることを実証した。開発したプローブは、タンパク質の細胞内動態を生きた動物個体内で検出できる一般性を有する。
- b) 生体内で機能する cyclic adenosine monophosphate (cAMP) と cyclic guanosine monophosphate (cGMP) は、細胞内情報伝達過程に重要な細胞内小分子である。cAMP と cGMP の時間的、空間的な情報伝達過程を、生きた生物個体内で可視化することはこれまで困難であった。我々は、生きた動物と植物個体内で機能する cAMP と cGMP の検出を目的として、cAMP および cGMP に選択的な発光タンパク質プローブを開発した。細胞外刺激に伴う生きた細胞内の cAMP および cGMP の濃度上昇を、高感度かつ高選択的に時空間解析できることを実証した。
- c) 塩基配列特異的に mRNA を認識検出する蛍光タンパク質プローブを分子設計し、生きた細胞内 mRNA の動態をイメージングする方法を開発した。標的とする mRNA は、ミトコンドリアゲノムから合成される NADH dehydrogenase subunit 6 (ND6) mRNA とした。RNA 結合タンパク質の核酸認識アミノ酸を置換し、ND6 mRNA を特異的に認識する RNA 結合タンパク質を作製した。このタンパク質を用いて、生きた細胞内におけるミトコンドリア内 ND6 mRNA の局在とその動態を明らかにした。細胞内在性の mRNA を可視化できる新たな原理に基づくプローブであり、細胞内 RNA の機能解析の進展が期待できる。

B-1) 学術論文

- A. KANNO, T. OZAWA and Y. UMEZAWA, “Genetically Encoded Optical Probe for Detecting Release of Proteins from Mitochondria toward Cytosol in Living Cells and Mammals,” *Anal. Chem.* **78**, 8076–8081 (2006).
- S. B. KIM, Y. NATORI, T. OZAWA, Y. UMEZAWA and H. TAO, “A Method for Determining the Activities of Cytokines Based on the Nuclear Transport of Nuclear Factor- $\kappa$ B,” *Anal. Biochem.* **359**, 147–149 (2006).

A. KANNO, T. OZAWA and Y. UMEZAWA, “Intein-Mediated Reporter Gene Assay for Detecting Protein-Protein Interactions in Living Mammalian Cells,” *Anal. Chem.* **78**, 556–560 (2006).

T. OZAWA, “Designing Split Reporter Proteins for Analytical Tools,” *Anal. Chim. Acta* **556**, 58–68 (2006).

#### B-3) 総説、著書

M. TAKEUCHI and T. OZAWA, “Frontiers in Bioimaging,” *ACS Chem. Biol.* **1**, 333–334 (2006).

小澤岳昌, 「マウス個体におけるタンパク質動態イメージング」*細胞工学* **25**, 1019–1022 (2006).

小澤岳昌, 「細胞内情報を視覚化するタンパク質試薬」*高分子* **55**, 343 (2006).

小澤岳昌、梅澤喜夫, 「新しい蛍光タンパク質とその応用」*ゲノム医学* **6**, 277–280 (2006).

小澤岳昌, 「タンパク質の局在を知る——プロテインスプライシングを利用したイメージング技術の開発」*バイオニクス* **3**, 52–57 (2006).

小澤岳昌, 「スプリットルシフェラーゼを用いた細胞内シグナル解析法」*バイオテクノロジージャーナル* **6**, 225–228 (2006).

小澤岳昌, 「バイオテクノロジーにおける生物発光」*バイオ・ケミルミネセンスハンドブック*, 今井一洋、近江谷克裕編, 丸善株式会社, 44–58 (2006).

小澤岳昌, 「フローサイトメーター、基本原理と装置開発の方向性について」*ぶんせき* **384**, 640–641 (2006).

#### B-4) 招待講演

T. OZAWA, “Methods for identifying organelle-targeting proteins,” The second NIBB-EMBL Symposium, Aichi, 2006年3月.

小澤岳昌, 「発光プローブが拓くタンパク質の局在解析法」特定領域研究2領域合同公開シンポジウム, 大阪, 2006年6月.

小澤岳昌, 「光タンパク質の新たなデザインと生体機能の可視化」生物発光化学発光研究会第24回学術講演会, 東京, 2006年7月.

小澤岳昌, 「生体分子イメージングが拓く新たな化学物質スクリーニング法」東京コンファレンス2006, 千葉, 2006年9月.

小澤岳昌, 「光タンパク質を用いた生体分子の局在解析法」第12回生化学会テクニカルセミナー, 大阪, 2006年9月.

T. OZAWA, “Design of split reporter proteins for biomolecular imaging,” Korean Society of Medical Biochemistry and Molecular Biology, Seoul, Korea, 2006年10月.

小澤岳昌, 「光プローブ分子による生体分子機能解析」第33回日本低温医学会総会, 東京, 2006年11月.

小澤岳昌, 「光プローブの新たなデザインと生体機能の可視化」JAXA 第2回学際領域における分子イメージングフォーラム, 東京, 2006年11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-7) 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 (2004-2005).

基礎生物学研究所バイオイメージングアドバイザー委員 (2006- ).

#### 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).

基盤研究(B),「生体内情報伝達分子の可視化検出法に関する研究」小澤岳昌 (2006年-2008年).

特定領域研究,「タンパク質立体構造情報に基づく生物発光プローブの開発」小澤岳昌 (2006-2007年).

新エネルギー・産業技術総合開発機構・産業技術研究助成事業,「低侵襲的生体分子イメージングに向けた生物発光プローブの開発」小澤岳昌 (2006年-2008年).

山田科学振興財団,「動物個体内の生体分子を可視化する機能性発光タンパク質の開発」小澤岳昌 (2006年-2007年).

上原記念生命科学財団,「ミトコンドリアRNAの可視化解析」小澤岳昌 (2006年-2007年).

#### C) 研究活動の課題と展望

蛍光タンパク質(GFP)や発光タンパク質(luciferase)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、我々が世界に先駆けて創出した方法であり、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。本年度までに開発した、細胞内小分子検出プローブおよびタンパク質間相互作用検出プローブを用いて、今後は動植物個体で機能する生体分子を低侵襲的にイメージングできることを実証する。また多種多様な生体分子を可視化するためには、新たな独創的原理に基づくプローブ開発が必要不可欠である。これまで可視化することが困難であった動物個体内のRNA動態など、標的分子を可視化するための要素技術を創案し、新たな顕微鏡システム開発を含めた生物個体内の分子イメージングを可能にする基盤技術の展開を目指す。

### 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とその機能発現 (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, 金属ナノシートを作り機能を発現)
- b) 炭素 - 金属結合を持つ有機エチニル金属クラスター巨大分子の結晶ナノワイヤー・ナノリボン
- 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

- a) 昨年までに, 三重結合を持つ炭素分子陰イオン ( $C_2^{2-}$ ) の両端に  $Cu^+$  イオンを 1 個ずつ入れた銅アセチリドが径が 5 ~ 8 nm 程度のナノワイヤー結晶となり, このワイヤーを弱く 100°C 程度で加熱すると中心に銅が 8 個程度並んだワイヤーとその周りを被覆する炭素チューブ ( $Cu@C$ ) の形成が観測された。今年は, AFM を使って, 1 本のナノワイヤーの径方向の伝導度を測定した。得られた I-V 曲線は,  $Cu_2C_2$  については,  $n$  型半導体としての性質を示し, バンドギャップは 0.5-1.5 eV で, 理論計算の結果とほぼ一致した。また, これは, 薄膜状に作成した  $Cu_2C_2$  の結果と一致するものであった。このワイヤーやケーブルのバンドルとなった固体試料をタブレット状にして電気伝導度を測定したところ, アセチリドのディスクは水に対して,  $Cu@C$  では酸素分子の物理吸着が起こると大きな伝導度の増加が見られた。この過程は可逆過程であり 酸素分子の接触電荷移動によるホールの注入が起こるものと考えられる。このような常温で酸素に可逆的に電気伝導度応答する物質は, 知られていない。現在, 詳細にこの過程を調べている。
- b) 金属陽イオンにアセチレンのエチニル基の一方にベンゼン環などを入れて, 例えば,  $(Ag-C\equiv C-C_6H_5)_n$  とすると, 4 個のユニットが四角いブロックとなり, 銀の四角形が折りたたみかかったアコーディオン状につらなった四角い柱状の巨大分子となる。2 個の銀イオンの間にフェニルエチニル基が配置し, 外に角を突き出している。この時, ベンゼン環がスタックした 4 本のカラムが出来る。我々は, この分子を幅が 20-100 nm, 長さが 1- 数 10  $\mu m$  のワイヤー状単結晶として取り出すことに成功した。幅は, 合成に用いるアルコールの炭化水素鎖の長さによって制御できた。これらの単結晶を構成するのは, 結晶の端から端までの長さを持つ 1 次元超長ファイバー状分子である。 $(Cu-C\equiv C-C_6H_5)_n$  は, 光を照射すると電気伝導度が 3 桁近く上昇した。
- c) のテーマでは, 昨年に引き続き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。
- 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, 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, 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

近は金属イオンの水和構造の決定を行っている。

- 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

J. NISHIJO, C. OKABE, O. OISHI and N. NISHI, “Synthesis, Structures and Magnetic Properties of Carbon-Encapsulated Nanoparticles via Thermal Decomposition of Metal Acetylide,” *Carbon* **44**, 2943–2949 (2006).

K. JUDAI, J. NISHIJO and N. NISHI, “Self-Assembly of Copper Acetylide Molecules into Extremely Thin Nanowires and Nanocables,” *Adv. Mater.* **18**, 2842–2846 (2006).

J. NISHIJO and N. NISHI, “Synthesis, Structure and Magnetic Properties of a New Low-Spin Iron(III) Complex  $[\text{FeL}_3]$   $\{\text{L} = [\text{HNC}(\text{CH}_3)]_2\text{C}(\text{CN})\}$ ,” *Eur. J. Inorg. Chem.* 3022–3027 (2006).

K. WATANABE, A. KOKALI, H. HORINO, I. I. RZEZNICKA, K. TAKAHASHI, N. NISHI and T. MATSUSHIMA, “Scanning-Tunneling Microscopy, Near-Edge X-Ray-Absorption Fine Structure, and Density-Functional Theory Studies of  $\text{N}_2\text{O}$  Orientation on Pd(110),” *Jpn. J. Appl. Phys.* **45**, 2290–2294 (2006).

T. IINO, K. OHASHI, Y. MUNE, Y. INOKUCHI, K. JUDAI, N. NISHI and H. SEKIYA, “Infrared Photodissociation Spectra and Solvation Structures of  $\text{Cu}^+(\text{H}_2\text{O})_n$  ( $n = 1-4$ ),” *Chem. Phys. Lett.* **427**, 24–28 (2006).

Y. MUNE, K. OHASHI, T. IINO, Y. INOKUCHI, K. JUDAI, N. NISHI and H. SEKIYA, “Infrared Photodissociation Spectroscopy of  $[\text{Al}(\text{NH}_3)_n]^+$  ( $n = 1-5$ ): Solvation Structures and Insertion Reactions of  $\text{Al}^+$  into  $\text{NH}_3$ ,” *Chem. Phys. Lett.* **419**, 201–206 (2006).

K. HINO, H. NAKANO, N. ITO, M. MATSUSHITA, H. TAKAGI and N. NISHI, “Preparation and Characterization of Gold Nanoparticles with Reactive Thiocarbonyls: A Proposal for Active Size Control of Nanoparticles,” *Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.* **31**, 525–528 (2006).

#### B-4) 招待講演

西 信之, 「クラスターから炭素 / 金属ハイブリッドナノ構造体の構築へ」九州大学先導化学研究所・分光学会九州支部講演会, 福岡, 2006年8月.

西 信之, 「物質の混合と分離の特性を利用したナノサイエンス・ナノ物質創成」核融合科学研究所連携研究推進センター講演会・研究活動成果報告会冒頭招待講演, 土岐, 2006年9月.

西 信之, 「光で原子を集合させ、金属ナノシートを描画する——金属と炭素や有機物のナノ構造が生み出す新現象・新機能」文部科学省科学研究費補助金研究成果公開発表「物理と化学が生み出す未来物質」講演会, 東京朝日ホール, 2006年11月.

#### B-5) 特許出願

特願 2006-041173, 「金属含有構造体の形成方法、及び金属含有積層体の形成方法」西 信之、西條純一、大石修, 2006年.(米国出願手続き中)

#### B-6) 受賞、表彰

西 信之, 井上學術賞 (1991).

西 信之, 日本化学会学術賞 (1997).

#### 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

九州大学理学部運営諮問委員 (2005.7-2007.3).

核融合科学研究所連携推進センター評価専門委員.

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (2004-2005).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2006).

学会誌編集委員

*Chemical Physics Letters*, member of Advisory Board (2005-2009).

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

九州大学総合理工学部, 客員教授, 2006年 7月1日-9月30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

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。昨年は,長年培ってきた励起3重項の長寿命性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。銅原子24個を含むクラスター分子の薄膜を用いると電子顕微鏡の中に,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。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。このような炭素-金属新物質が,まずは酸素センサーとして機能することを今年は見出したが,この機構の解明が重要な課題である。有機金属クラスター超長分子のモルフォロジー制御と機能発現の研究は,これまでには無かった新しい物質系を提供できると期待される。未知の所が多く,地道な作業が要求されているが,多くの可能性を秘めており今後の発展に挑みたい。

## 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：超高速コヒーレント光科学

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。コヒーレント制御を実現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、「振動波束」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。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を構成する各々の振動固有状態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アト秒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、ピコメートルレベルの空間分解能とフェムト秒レベル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自在に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、熱的な分子集団や固体中の電子的なデコヒーレンスを検出する事に成功した。
- c) 光子場の振幅情報を分子の振動固有状態の量子振幅として転写する量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アト秒精度で操作し、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、光子場の振幅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、c) 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、c) 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非線形電離過程に応用した。
- f) アト秒精度のコヒーレント制御法を開発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。今後，多原子分子の光解離過程への応用を計画している。

#### B-1) 学術論文

**H. KATSUKI, H. CHIBA, B. GIRARD, C. MEIER and K. OHMORI**, “Visualizing Picometric Quantum Ripples of Ultrafast Wave-Packet Interference,” *Science* **311**, 1589–1592 (2006).

**K. OHMORI, H. KATSUKI, H. CHIBA, M. HONDA, Y. HAGIHARA, K. FUJIWARA, Y. SATO and K. UEDA**, “Real-Time Observation of Phase-Controlled Molecular Wave-Packet Interference,” *Phys. Rev. Lett.* **96**, 093002 (4 pages) (2006).

**Y. TERANISHI, Y. OHTSUKI, K. HOSAKA, H. CHIBA, H. KATSUKI and K. OHMORI**, “Implementation of Quantum Gate Operations in Molecules with Weak Laser Fields,” *J. Chem. Phys.* **124**, 114110 (9 pages) (2006).

#### B-4) 招待講演

大森賢治, 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御」分子研研究会「凝縮系のコヒーレンス制御と超高速ダイナミクス」岡崎, 2006年3月.

大森賢治, 「アト秒コヒーレント制御法の開発と応用」第13回原子衝突セミナー, 東京, 2006年4月.

**K. OHMORI**, “Observation and Control of Picometric Quantum Ripples in a Molecule,” 5th International Symposium for Ultrafast Surface Dynamics, Abashiri (Japan), May 2006.

**K. OHMORI**, “Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules,” The 1st Canada-Japan SRO-COAST Symposium on Ultrafast Intense Laser Science, Tokyo (Japan), July 2006.

大森賢治, 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御」分子分光学夏期セミナー, 九重, 2006年7月.

**K. OHMORI**, “Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules,” 66th Okazaki Conference “Soft X-Ray Raman Spectroscopy and Related Phenomena,” Okazaki (Japan), August 2006.

大森賢治, 「量子のさざ波を光で制御する」立花隆+自然科学研究機構シンポジウム 爆発する光科学の世界——量子から生命体まで——, 東京, 2006年9月.

大森賢治, 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御」ATI 生命機構プレ研究会, 東京, 2006年11月.

大森賢治, 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御」第17回光物性研究会, 大阪, 2006年12月.

大森賢治, 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御」原子衝突研究協会設立30周年記念式典, 東京, 2006年12月.

#### 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).

大森賢治, 日本学術振興会賞 (2006).

#### 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 (2002-2006).

分子科学会設立検討委員 (2005-2006).

分子科学会運営委員 (2006- ).

原子衝突研究協会運営委員 (2006- ).

##### 学会の組織委員

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

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

The 5<sup>th</sup> 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- ).

APS March meeting; Focus Topic Synposium “Ultrafast and ultrahighfield chemistry” 組織委員 (2006).

APS March meeting satellite “Ultrafast chemistry and physics 2006” 組織委員 (2006).

第22回化学反応討論会実行委員 (2006).

##### 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-8) 他大学での講義、客員

東京工業大学応用セラミックス研究所, 「分子の量子コヒーレンス制御」 2006年 2月16日.

東京大学大学院工学系研究科, 「超高速量子動力学～量子光学の基礎からアト秒コヒーレント制御まで～」 2006年 7月3日-4日.

#### B-10) 外部獲得資金

基盤研究(B), 「遺伝アルゴリズムを用いたデコヒーレンスの検証と制御法の開発」 大森賢治 (2006年-2007年).

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原子分子集団や凝縮相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進めている。

デコヒーレンスの検証と抑制：デコヒーレンスは、物質の波としての性質が失われて行く過程である。量子論における観測問題と関連し得る基礎的に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。

量子散逸系でのコヒーレント制御の実現：得られる知見をもとにデコヒーレンスの激しい凝縮系でのコヒーレント制御法を探索する。

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振動固有状態を用いるユニタリ変換とそれに基づく量子情報処理の実現を目指す。

レーザー冷却された原子集団のコヒーレント制御：レーザー冷却された原子集団への振幅位相情報の書き込みと空間的に隔たった別の原子集団への転送法の実現を目指す。

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発展を促すだろう。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) 非調和性の高い大振幅な振動のうち、単結合軸周りのねじれ運動はコンフォーマー間の異性化や電荷移動反応と緊密に関連している。この数年、ねじれ運動のプロトタイプとしてメチル基の内部回転を取り上げ、振動量子波束の実時間観測に取り組んでいる。本年度は、2次の非線形光学過程を利用する TRFD (Time-Resolved Fluorescence Depletion) 法によって、各種のトルエン置換体における内部回転波束の観測を行った。この一連の系統的な研究から、電子励起状態・基底状態における波束生成の効率が、励起波長によって大きく変化すること、そのため、電子基底状態のみに選択的に波束を生成させることが可能なこと、また、特定の波長では、両状態ともに波束の生成が抑制されること、が明らかになった。さらに、内部回転の波動関数の対称性によって、波束の緩和時間が顕著に異なることも明らかとなった。この結果は、内部回転と分子全体の回転とのカップリングに起因すると考えられ、波束ダイナミックスに対する振動・回転相互作用の重要性を示したものである。
- b) 昨年度より、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。既に、最も基本的な系である2原子分子のNOを対象として、非断熱回転励起の観測に成功している。本年度は極短パルス光強度に対する回転状態分布の依存性を詳しく検討した。最低準位 ( $J = 0.5$ ) のみに制限された初期回転分布から、現時点で、最高で  $J = 8.5$  まで分布を移動することが可能になっている。非断熱励起後の分布は非 Boltzman 的であり、特に、 $J = 2.5, 4.5, 6.5$  が相対的に大きい。この傾向性は、NO のように縮重した電子基底状態を有する分子に特有のものであることを、時間依存 Schrödinger 方程式の数値解法によるモデル計算によって確認した。さらに詳細な検証を行うために、適当な遅延時間をつけた2つの極短パルスを用いた実験も行った。各回転状態の分布は遅延時間に対して特徴的なビートを示し、そのビート強度の解析から、初期状態から高励起回転状態への分布移動の経路を実験的に特定できることを明らかにした。
- 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。特に、電子基底状態における分子間振動準位構造について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の適用を計画している。本年度は、そのために不可欠なフーリエ限界ナノ秒パルス光源の開発を進めた。1 MHz 程度の分解能を持つ連続発振のリングチタンサファイアレーザーをシード光源として、その光をパルス的に増幅するシステムを導入した。この装置により、発振波長は 800 nm、 $\sim 5$  ns の時間幅、 $\sim 200$  MHz の周波数幅のパルス出力が得られ、必要とされるコヒーレンスは十分実現されている。現在、ベンゼンの電子遷移に適合するための3倍波発生用セットアップを完了したところである。

#### B-1) 学術論文

**Y. SUMIYOSHI, I. FUNAHARA, K. SATO, Y. OHSHIMA and Y. ENDO**, “Three-Dimensional Potential Energy Surface of the Ar–OH( $^2\Pi_i$ ) Complex,” *J. Chem. Phys.* **125**, 124307 (13 pages) (2006).

**H. HASEGAWA and Y. OHSHIMA**, “Decoding the State Distribution in a Nonadiabatic Rotational Excitation by a Nonresonant Intense Laser Field,” *Phys. Rev. A* **74**, 061401 (4 pages) (Rapid Communication) (2006).

**K. FURUSAWA, T. OKINO, T. SHIMIZU, H. HASEGAWA, Y. NABEKAWA, K. YAMANOUCHI and K. MIDORIKAWA**, “Photoelectron Spectroscopy of Two-Photon Ionization of Rare-Gas Atoms by Multiple High Order Harmonics,” *Appl. Phys. B* **83**, 203 (9 pages) (2006).

**Y. NABEKAWA, T. SHIMIZU, T. OKINO, K. FURUSAWA, H. HASEGAWA, K. YAMANOUCHI and K. MIDORIKAWA**, “Conclusive Evidence of an Attosecond Pulse Train Observed with the Mode-Resolved Autocorrelation Technique,” *Phys. Rev. Lett.* **96**, 083901 (4 pages) (2006).

**Y. NABEKAWA, T. SHIMIZU, T. OKINO, K. FURUSAWA, H. HASEGAWA, K. YAMANOUCHI and K. MIDORIKAWA**, “Interferometric Autocorrelation of an Attosecond Pulse Train in the Single-Cycle Regime,” *Phys. Rev. Lett.* **97**, 153904 (4 pages) (2006).

#### B-4) 招待講演

**Y. OHSHIMA**, “Quantum-state manipulation of molecular motions,” Symposium on Recent Topics in Molecular Spectroscopy and Dynamics, Kyoto (Japan), March 2006.

**Y. OHSHIMA**, “Nonadiabatic rotational excitation by intense fs laser pulses,” Photo Molecular Science Forum, Okazaki (Japan), May 2006.

**Y. OHSHIMA**, “Quantum-state manipulation of molecular motions,” Sendai International Symposium on Molecular Cluster Spectroscopy, Sendai (Japan), May 2006.

大島康裕, 「クールな原子・分子の科学(ディスカッションリーダー)」分子科学研究会シンポジウム, 岡崎, 2006年6月.

大島康裕, 「高強度コヒーレント光による分子運動の量子制御」エクストリームフォトニクス研究会(第4回) 蒲郡, 2006年11月.

長谷川宗良, 「短パルスレーザーによる非断熱回転分布移動: 励起過程の解明および状態分布制御」先端的レーザー分光の若手シンポジウム, 横浜, 2006年12月.

#### 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 (2004-2006).

分子構造総合討論会運営委員 (2004-2006).

分子科学会運営委員 (2006- ).

日本分光学会先端レーザー分光部会幹事 (2006- ).

#### 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).

#### その他

総研大アジア冬の学校実行委員 (2006- ).

### B-10)外部獲得資金

一般研究(B), 「溶媒と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ー化」, 大島康裕 (2003年-2005年).

基盤研究(A), 「高輝度コヒーレント光によるコンフォメーションダイナミクスの観測と制御」, 大島康裕 (2006年-2009年).

三菱財団自然科学研究助成, 「量子準位分布制御を利用した分子間相互作用の精密決定」, 大島康裕 (2006年-2007年).

若手研究(B), 「気相分子の回転固有状態の波動関数イメージング」, 長谷川宗良 (2006年-2007年).

### C) 研究活動の課題と展望

極短パルス光を用いるa), b)の研究については, 方法論の開発や原理検証はほぼ終了したと考えている。今後は, ターゲットとする運動状態のさらなる効率的な生成を目指して, 利用する光パルスの最適化を行う。そのために, フェムト秒レーザーシステムのより高出力・短パルス化, さらに, 波形整形技術の導入を進める予定である。その上での展開として, a)では, より多様な大振幅振動への適応を図り, 振動波束の制御から分子内異性化反応の誘起へと繋げる方向を模索したい。b)では, 様々な分子への非断熱回転分布移動の適用により, 回転量子数・方位量子数が特定の値に制限された(非等方な)分子集団を用いた, 光解離などの化学反応ダイナミクス研究を行う。c)に関しては, 利用するレーザー光源の開発が終了したので, 至急にクラスターの分光学的研究に着手する。それと平行して, 実験データを再現するモデルポテンシャルの構築を目指して, 国内外の理論研究者との共同研究の道を探る。

### 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。電荷秩序相をもつ物質の中には強誘電性の物質があり、電荷秩序相と隣接する超伝導性は電荷ゆらぎを媒介とする超伝導機構が提案されている。

我々はこのような電荷秩序状態の配列様式と不均化率を振動分光法を用いて研究してきた。本年度は $\theta$ 型 BEDT-TTF 塩の相転移温度以上の高温相を電荷に敏感な振動モードを用いて研究した。この高温相は便宜的に金属相とよばれているが、金属とは大きく異なる電子状態であり、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。つまり、金属と電荷秩序相の中間に位置する状態である。平行して、 $\beta''$ 型 BEDT-TTF 塩の電子状態の研究を行った。 $\beta''$ -(BEDT-TTF)<sub>3</sub>(HSO<sub>4</sub>) と  $\beta''$ -(BEDT-TTF)<sub>3</sub>(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> は同型の物質で金属絶縁体転移を示す。低温相は電荷秩序状態で、電荷配列は最も近い位置にある BEDT-TTF 分子同士に電荷が集まることを避けるように配列するという単純な考え方で説明できる。この物質の高温相も $\theta$ 型 BEDT-TTF 塩程ではないが、局在状態に近い電子状態をとっている。最後に、 $\beta''$ -(BEDT-TTF)(TCNQ) においてこれまでと異なる電荷秩序相転移を発見した。この物質は高温相が電荷秩序状態で、170 K 付近で相転移して、 $\theta$ 型 BEDT-TTF 塩の高温相に相当する電子状態へ移行する。この相転移は秩序化した電荷の格子が温度を下げることによって融解する量子力学的現象である。さらに温度を降下させると金属性が強くなり、約 20 K 以下でフェルミ液体として振舞うようになる。

- b) イオン結晶であるピフェロセン-(F<sub>1</sub>TCNQ)<sub>3</sub> 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。昨年度は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。今年度は何故相分離状態が発生するのかについて考察し、低温相が熱励起状態であるとの模型を提唱した。低温相が容易に熱励起されるのは高温相とのエネルギー障壁が低いからで、この低い障壁は分子間距離に鈍感なクーロン力がこの相転移を支配しているからである。

#### B-1) 学術論文

- T. KUBO, A. SHIMIZU, M. SAKAMOTO, M. URUICHI, K. YAKUSHI, M. NAKANO, D. HIOMI, K. SATO, TAKUI, Y. MORITA and K. NAKASUJI**, “Synthesis, Intermolecular Interaction, and Semiconductive Behavior of a Delocalized Singlet Biradical Hydrocarbon,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **44**, 6564–6568 (2005).
- A. KOWALSKA, R. WOJCIECHOWSKI, J. ULANSKI, M. MAS-TORRENT, E. LAUKHINA, C. ROVIRA and K. YAKUSHI**, “Evaluation of Charge Transfer Degree in the Bis(ethylenethio) Tetrathiafulvalene Salts by Raman Spectroscopy,” *Synth. Met.* **156**, 75–80 (2006).
- T. YAMAMOTO, M. URUICHI and K. YAKUSHI**, “Charge Ordering State of  $\beta$ ”-(ET)<sub>3</sub>(HSO<sub>4</sub>) and  $\beta$ ”-(ET)<sub>3</sub>(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> by Temperature-Dependent Infrared and Raman Spectroscopy,” *Phys. Rev. B* **73**, 125116 (12 pages) (2006).
- T. TAKAHASHI, K. YAKUSHI and Y. NOGAMI**, “Charge Ordering in Organic Conductors,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 051008 (17 pages) (2006).
- M. URUICHI, K. YAKUSHI, H. M. YAMAMOTO and R. KATO**, “Infrared and Raman Study of the Charge-Ordering Phase Transition at ~170 K in a Quarter-Filled Narrow-Band System,  $\beta$ ”-(ET)(TCNQ),” *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 074720 (10 pages) (2006).

#### B-2) 国際会議のプロシーディングス

- T. YAMAMOTO, M. URUICHI, K. YAMAMOTO, K. YAKUSHI and A. KAWAMOTO**, “Vibrational Spectra of  $\beta$ ”-(ET)<sub>3</sub>X<sub>2</sub> (X = HSO<sub>4</sub>, ClO<sub>4</sub>) Salts,” *Synth. Met.* **155**, 628–630 (2005).
- I. SHIROTANI, J. HAYASHI, K. TAKEDA, H. KAWAMURA, M. INOKUCHI and K. YAKUSHI**, “Shear Stress Effect on the Absorption Spectra of Organic Thin Films under High Pressure,” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **455**, 73–77 (2006).
- K. YABUUCHI, D. KAWAMURA, M. INOKUCHI, I. SHIROTANI, J. HAYASHI, K. YAKUSHI, H. KAWAMURA and H. INOKUCHI**, “Raman Spectroscopic Study of Bis(diphenylglyoximate)metal Complexes under High Pressure,” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **455**, 81–85 (2006).
- M. INOKUCHI, Y. SAKKA, K. YABUUCHI, I. SHIROTANI, J. HAYASHI, K. YAKUSHI, H. KAWAMURA and H. INOKUCHI**, “Shear Stress Effect on Thin Films of Molecular Crystals,” *J. Low Temp. Phys.* **143**, 211–214 (2006).
- A. KAWAMOTO, Y. HONMA, K. KUMAGAI, K. YAMAMOTO and K. YAKUSHI**, “Incoherent-Coherent Crossover Behavior of Electron on  $\kappa$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>X System, Probed by <sup>13</sup>C-NMR and Optical Studies,” *J. Low Temp. Phys.* **143**, 519–522 (2006).
- M. URUICHI, K. YAKUSHI and T. MOCHIDA**, “Phase Separation in the Monovalent-to-Divalent Phase Transition of Biferrocenium-(F<sub>1</sub>TCNQ)<sub>3</sub>,” *J. Low Temp. Phys.* **143**, 655–658 (2006).
- K. YAKUSHI, K. SUZUKI, K. YAMAMOTO, T. YAMAMOTO and A. KAWAMOTO**, “Unusual Electronic State of Layered  $\theta$ -(ET)<sub>2</sub>X Studied by Raman Spectroscopy,” *J. Low Temp. Phys.* **143**, 659–662 (2006).

#### B-4) 招待講演

- K. YAKUSHI**, “Infrared and Raman studies of charge ordering in organic conductors,” The 20<sup>th</sup> international conference on Raman spectroscopy, Yokohama (Japan), August 2006.

## B-7) 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 (2002-2006).

### 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」 葉師久弥 (1994年-1996年).

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

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

特定領域研究(B), 「 $\pi$ -d および $\pi$  電子系分子導体の磁性・電気伝導性の研究」 葉師久弥 (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」 葉師久弥 (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」 葉師久弥 (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」 葉師久弥 (2003年-2007年).

特別研究員奨励費, 「電荷秩序する分子導体における光非線形現象の研究」 葉師久弥 (2006年-2008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

$\theta$ -型 BEDT-TTF 塩の金属相と電荷秩序相の中間的な状態で、電荷のゆらぎが観測されているが、この電荷は短距離秩序をもつクラスターあるいは分域を形成している可能性がある。このゆらぎのサイズや時間スケールは高温相の電子状態を理解する上で重要な情報である。電荷ゆらぎは可視領域の屈折率のゆらぎも引き起こすと考えられるので、光散乱の実験を開始し、最適の条件を探している。

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。今年度は大きな不均化率をもつ  $\beta$ -(DMBEDT-TTF) $_2$ PF $_6$  の研究に着手し、高圧下超伝導転移前後の状態をラマン分光法で研究しつつあるので、来年度はこの研究を完結させ、電荷秩序と超伝導が隣接している電子系の電子相図を完成させる。

電荷秩序系における強誘電的性質についての研究はまだ始まったばかりである。(TMTTF) $_2$ X における誘電率の発散が電荷秩序系における強誘電性の有名な例であるが、この実験では電荷秩序相において巨視的な分極が形成されているという直接的な証拠は得られていない。昨年度、 $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$  の電荷秩序相において、14  $\mu$ m を基本波とする強い第二高調波の発生を観測した。本年度は吸収スペクトルを測定して二次非線形感受率  $\chi^{(2)}$  を決定したところ、 $\beta$ -BaB $_2$ O $_4$  (BBO) の40倍に相当する高い値が得られた。このような大きな  $\chi^{(2)}$  はこの物質の電荷秩序相で巨視的な分極が発生していることを強く示唆する。来年度はこの巨視的な分極の分域構造の観測を計画している。巨視的なサイズに分域構造が観測されれば、巨視的な分極が発生していることを証明できる。さらに、 $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$  の結晶を高分子膜中で成長させる方法が報告されているので、この高分子膜を用いた第二高調波発生の実験を計画している。室温で電荷秩序相をとる物質も知られているので、室温で第二高調波を発生する高分子膜の作成を目指す。

これまでに報告されている電荷秩序系物質の中で、 $\beta$ -(BEDT-TTF)(TCNQ) は冷却によって電荷秩序相が融解する唯一の物質である。融解温度付近の詳細な赤外・ラマン分光の実験と融解後温度の降下と共に金属へ近づいて過程の赤外・遠赤外分光の実験はバンド充填率 1/4 の金属的電子状態を理解する上で極めて重要であると考えており、より詳細な実験を進めている。

## 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 による TMTTF 系競合電子相の電子状態理解
- b) パルス ESR による  $(\text{TMTTF})_2\text{X}$  の相転移近傍スピンダイナミックス
- c) ESR および NMR 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
- d)  $(\text{TMTTF})_2\text{X}$  の局所電荷密度：放射光 X 線 MEM 解析
- e) 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) 1/4-filled 一次元電子系 TMTTF 塩は、同一の結晶構造を持ちながら近接した温度・圧力領域に種々の電子相が競合しており、非常に興味が持たれている。我々はこの系の電荷秩序転移が、カウンターイオンのサイズや対称性によらず、普遍で固有な性質であることを見いだした。一方で、中間常磁性相における電荷秩序相の安定性と低温基底状態との関連が新たな問題点として浮かび、一次元電子系一般化相図の再考察・修正が余儀なくされている。我々はこれらの問題を解決すべく、反強磁性揺らぎの次元性ならびに電荷分離秩序パラメータの定量的理解を行うために、 $^{13}\text{C}$  NMR 吸収線の温度依存性・異方性ならびにスピン格子緩和率  $T_1^{-1}$  を測定すると共に、スピン - スピン緩和機構の詳細な解析を行っている。
- b) 上記の問題に関連し、基底状態相転移点近傍での電荷・スピン再配列問題に関する知見を得るため、パルス ESR 法によるスピン - 格子緩和時間測定を行っている。PF<sub>6</sub> 塩に対する温度依存性測定から、スピンパイエルス相転移直下では通常のスピンギャップ生成では説明できない異常なスピン格子緩和が観測され、十分低温においてスピンギャップ状態へと系が移行していることがわかった。中間常磁性相における電荷秩序配列そのままではスピンギャップ生成は不安定と考えられるので、スピンパイエルス相転移近傍で電荷秩序再配列が起こり、低温で通常のスピン一重項に転移しているものと考えている。
- c) 東大工・ERATO-SORST の相田グループからヨウ素酸化により電気伝導性を示すヘキサベンゾコロネン (HBC) ナノチューブが開発された。我々は、HBC ナノチューブの電子状態を磁気共鳴測定法を用いて調べている。ヨウ素をドーピングすると大きな ESR 信号が観測され、スピンを持ったキャリアが生成していることが分かる。ESR 線幅から室温近傍で HBC ナノチューブが高い伝導性を持っていることが分かる。 $^1\text{H}$  NMR スピン格子緩和率  $T_1^{-1}$  は、150 K 以下の広い温度範囲では  $T^{0.5}$  に従う特徴的な振る舞いを示す。これは一次元系のスピン拡散に特有な緩和と考えられ、スピン系がヘリカルなチューブを一次的に伝搬していることを示唆している。
- d) TMTTF 塩の電荷秩序問題は磁気共鳴測定等により理解が進んでいる、その一方で直接的観測は為されていない。そこで、 $(\text{TMTTF})_2\text{X}$  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 線測定を行い構造解析を行い、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た。その結果、 $(\text{TMTTF})_2\text{PF}_6$  塩の電荷秩序相において電荷分離状態の直接観測し、それまで ESR の結果から提案された電荷配列モデルが適当であることを見いだした。
- e) 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。今後さらに，当該グループだけでなく所外の ESR コミュニティーと連携を取り，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

- F. NAD, P. MONCEAU, M. NAGASAWA and T. NAKAMURA**, “ $4K_F$  CDW Induced by Long Range Coulomb Interactions,” *J. Phys. IV France* **131**, 15–19 (2005).
- S. FUJIYAMA and T. NAKAMURA**, “ $^{13}C$  NMR Spectral Study of Q1D Organic Conductor  $(TMTTF)_2AsF_6$ ,” *J. Phys. IV France* **131**, 33–37 (2005).
- Y. NOGAMI, T. ITO, K. YAMAMOTO, N. IRIE, S. HORITA, T. KAMBE, N. NAGAO, K. OSHIMA, N. IKEDA and T. NAKAMURA**, “X-Ray Structural Study of Charge and Anion Orderings of TMTTF Salts,” *J. Phys. IV France* **131**, 39–42 (2005).
- K. NOMURA, K. ISHIMURA, K. FUJIMOTO, N. MATSUNAGA, T. NAKAMURA, T. TAKAHASHI and G. SAITO**, “Depinning of the Spin-Density Wave in  $(TMTTF)_2Br$  under Pressure,” *J. Phys. IV France* **131**, 111–114 (2005).
- T. NAKAMURA, K. FURUKAWA and T. HARA**, “ $^{13}C$  NMR Analyses of Successive Charge-Ordering in  $(TMTTF)_2ReO_4$ ,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 013707 (4 pages) (2006).
- S. FUJIYAMA and T. NAKAMURA**, “Redistribution of Electronic Charges in the Spin-Peierls State in  $(TMTTF)_2AsF_6$  Observed by  $^{13}C$  NMR,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 014705 (7 pages) (2006).
- P. MONCEAU, F. NAD, J. M. FABRE and T. NAKAMURA**, “Charge and Anion Ordering in  $(TMTTF)_2X$  Quasi-One-Dimensional Conductors,” *J. Low Temp. Phys.* **142**, 367–372 (2006).
- M. HIRAOKA, H. SAKAMOTO, K. MIZOGUCHI, R. KATO, T. KATO, T. NAKAMURA, K. FURUKAWA, K. HIRAKI, T. TAKAHASHI, T. YAMAMOTO and H. TAJIMA**, “Electron Spin Dynamics in  $(DMe-DCNQI)_2M$  ( $M = Li_{1-x}Cu_x$  ( $x < 0.14$ ), Ag),” *J. Low Temp. Phys.* **142**, 617–620 (2006).
- S. KONNO, S. KAZAMA, M. HIRAOKA, H. SAKAMOTO, K. MIZOGUCHI, H. TANIGUCHI, T. NAKAMURA and K. FURUKAWA**, “EPR Study of the Electronic States of  $\beta'$ -(BEDT-TTF)(TCNQ),” *J. Low Temp. Phys.* **142**, 621–624 (2006).
- T. NAKAMURA, T. HARA and K. FURUKAWA**, “Redistribution of Electronic Charge in  $(TMTTF)_2ReO_4$ :  $^{13}C$  NMR Investigation,” *J. Low Temp. Phys.* **142**, 629–632 (2006).

#### B-4) 招待講演

**T. NAKAMURA, K. FURUKAWA, T. HARA, Y. YAMAMOTO, W. JIN, T. FUKUSHIMA and T. AIDA**, “Pulsed and Multi-frequency Magnetic Resonance Investigation for Organic Conductors and Conducting HBC Nanotube,” ASIA-PACIFIC EPR/ESR SYMPOSIUM 2006 (APES '06), Novosibirsk (Russia), August 2006.

#### 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 (2004-2006).

電子スピンサイエンス学会 運営理事 (2006- ).

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

学会誌編集委員

電子スピンサイエンス学会編集委員 (2003).

電子スピン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。有機導体に対して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, 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うと同時に, 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。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) 新規な分子伝導体の開発と物性
- b) ポーラス分子空間を利用した誘電体の開発
- c) 超高圧下の有機分子性結晶の電気抵抗

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。20 世紀半ばの有機結晶の半導体性の発見以来半世紀余の間に、一次元有機分子性金属、有機超伝導体、磁性有機超伝導体、単一分子性金属等が次々に開発され、分子や分子性結晶のイメージは大きく変革された。本年度もこれまで同様、磁性有機超伝導体の新しい物性の発見、単一分子性金属の研究の推進、ポーラス分子性結晶と有極性ゲスト分子による強誘電体の開発などに務めたが、特に本年は、有機分子性結晶の高压下での金属化の条件を突き止める事を目標に、超高圧下の有機単結晶の電気抵抗測定の試みを行った。

- 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。私達は過去十余年磁性アニオンを含む BETS 伝導体の研究を通して、初めての磁場誘起超伝導体  $\lambda$ -BETS<sub>2</sub>FeCl<sub>4</sub> や、初めての反強磁性有機超伝導体  $\kappa$ -BETS<sub>2</sub>FeBr<sub>4</sub> を報告してきた。本年度は共同研究者により  $\lambda$ -BETS<sub>2</sub>FeCl<sub>4</sub> で、超伝導のオーダーパラメーターが空間依する FFLO 超伝導状態の発見が報告された。また同様に、反強磁性有機超伝導体  $\kappa$ -BETS<sub>2</sub>FeBr<sub>4</sub> では磁場誘起超伝導に伴う比熱の異常を初めて観測した。磁場が伝導面に垂直な時には比熱の磁気量子振動が観測された。また昨年見出した、有機超伝導体 ( $\lambda$ -BETS<sub>2</sub>GaCl<sub>4</sub>) と磁場誘起超伝導体 ( $\lambda$ -BETS<sub>2</sub>FeCl<sub>4</sub>) の合金、 $\lambda$ -BETS<sub>2</sub>Fe<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>Cl<sub>4</sub> での磁場と温度に依存しない「抵抗一定現象」を報告した。本実験は海外の研究者によって追試が開始されており、今後磁性イオンを含む二次元超伝導体の新たな磁束の状態が明らかにされることを期待している。
- b) 昨年、初めての単一分子性金属結晶、Ni(tmdt)<sub>2</sub> と同型構造を持つ Au(tmdt)<sub>2</sub> が、分子性伝導体としては桁違いに高い磁気転移温度を持ち、110 K で常磁性金属から反強磁性金属に転移する事が見出された。従来の分子性伝導体と比べ異常に高い転移温度の起源には興味を持たれる。また、Ni(tmdt)<sub>2</sub> と Au(tmdt)<sub>2</sub> の合金系の結晶成長と物性測定を行った。ごく僅かな超伝導領域を含むと思われる合金の存在も示唆されたが、残念ながら超伝導部分の比率を制御することは殆ど不可能であると思われる。また、共同研究者と共に Au(tmdt)<sub>2</sub> について 10 万気圧までの構造解析を行った。
- c) ポーラスフェリ磁性体 Mn<sub>3</sub>(HCOO)<sub>6</sub> と C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH ゲスト分子を用いて初めてのポーラス強誘電体を見出した。低温ではフェリ磁性と強誘電秩序が共存しているとおもわれ、所謂マルチフェロイック結晶を開発する新しい方法を示している。更に、最近極めて大きな誘電率を持つポーラス分子性結晶を見いだした。
- d) 我々は分子が集合して金属となる条件を追求し、最近、極めて小さな HOMO-LUMO gap をもち通常の分子性伝導体と同様な大きさの分子間相互作用を持ちうる平面分子を設計・開発することにより、単一種の分子だけで構成された金属結晶を初めて実現した。しかし、一般には絶縁体の有機分子の結晶を金属化させる最も単純な方法は超高

圧による加圧であると考えられているものと思われる。しかし充満した HOMO band と空の LUMO band をバンド幅を加圧によって増大させ、金属化させるためには、恐らく一般的には分子間の原子間相互作用を分子内の原子間相互作用に匹敵できる程度にまで大きくせねばならず、従ってこのような状態の下では、分子の最大の特徴である「分子の独立性」が失われているものと予想している。分子性を保ったままで金属状態が実現している「単一分子性金属」と「超高压による金属化」には、大きな差があるのではないかと予想している。本年度私達は有機単結晶の電気抵抗を 30 万気圧まで測定する事によって、この点を明らかにすることに務めた。

#### B-1) 学術論文

**A. KOBAYASHI, B. ZHOU and H. KOBAYASHI**, “Development of Metallic Crystals Composed of Single-Component Molecules,” *J. Mater. Chem.* **15**, 3449–3451 (2005).

**T. KONOIKE, S. UJI, T. TERASHIMA, M. NISHIMURA, S. YASUZUKA, K. ENOMOTO, H. FUJIWARA, E. FUJIWARA, B. ZHANG and H. KOBAYASHI**, “Fermi Surface Reconstruction in the Magnetic-Field-Induced Superconductor  $\kappa$ -(BETS)<sub>2</sub>FeBr<sub>4</sub>,” *Phys. Rev. B* **72**, 184505 (5 pages) (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).

**S. UJI, S. YASUZUKA, M. TOKUMOTO, H. TANAKA, A. KOBAYASHI, B. ZHANG, H. KOBAYASHI, E. S. CHOI, D. GRAF and J. S. BROOKS**, “Magnetic-Field-Induced Superconductivity and Phase Diagrams of  $\lambda$ -(BETS)<sub>2</sub>FeCl<sub>4-x</sub>Br<sub>x</sub>,” *Phys. Rev. B* **72**, 184505 (5 pages) (2005).

**S. FUJIYAMA, M. TAKIGAWA, J. KIKUCHI, H. B. CUI, H. FUJIWARA and H. KOBAYASHI**, “Compensation of Effective Field in the Field-Induced Superconductor  $\kappa$ -(BETS)<sub>2</sub>FeBr<sub>4</sub> Observed by <sup>77</sup>Se NMR,” *Phys. Rev. Lett.* **96**, 217001 (4 pages) (2006).

**Y. J. JO, H. KANG, W. KANG, S. UJI, T. TERASHIMA, T. TANAKA, M. TOKUMOTO, A. KOBAYASHI and H. KOBAYASHI**, “Field- and Angular-Dependent Resistance of  $\lambda$ -(BETS)<sub>2</sub>FeCl<sub>4</sub> under Pressure,” *Phys. Rev. B* **73**, 214532 (2006).

**A. KOBAYASHI, Y. OKANO and H. KOBAYASHI**, “Molecular Design and Physical Properties of Single-Component Molecular Metals,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 051002 (12 pages) (2006).

**T. KUSAMOTO, E. FUJIWARA, A. KOBAYASHI, H. CUI, T. OTSUKA, Y. OKANO, H. FUJIWARA and H. KOBAYASHI**, “BDT-TTP-Based  $\pi$  Conductors Containing Divalent Magnetic and Non-Magnetic Inorganic Anions, [M<sup>II</sup>Cl<sub>4</sub>]<sup>2-</sup> (M = Co, Mn, Zn),” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **79**, 527–536 (2006).

**K. TAKAHASHI, H. B. CUI, Y. OKANO, H. KOBAYASHI, Y. EINAGA and O. SATO**, “Electrical Conductivity Modulation Coupled to a High-Spin-Low-Spin Conversion in the Molecular System [Fe<sup>III</sup>(qsal)<sub>2</sub>][Ni(dmit)<sub>2</sub>]<sub>3</sub>·CH<sub>3</sub>CN·H<sub>2</sub>O,” *Inorg. Chem.* **45**, 5739–5741 (2006).

**B. ZHANG, Z. M. WANG, Y. ZHANG, K. TAKAHASHI, Y. OKANO, H. B. CUI, H. KOBAYASHI, K. INOUE, M. KURMOO, F. L. PRATT and D. B. ZHU**, “Hybrid Organic-Inorganic Conductor with a Magnetic Chain Anion:  $\kappa$ -BETS<sub>2</sub>[Fe<sup>III</sup>(C<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)C<sub>12</sub>] [BETS = bis(ethylenedithio)tetraselenafulvalene],” *Inorg. Chem.* **45**, 3275–3280 (2006).

**B. ZHOU, M. SHIMAMURA, E. FUJIWARA, A. KOBAYASHI, T. HIGASHI, E. NISHIBORI, M. SAKATA, H. B. CUI, K. TAKAHASHI and H. KOBAYASHI**, “Magnetic Transitions of Single-Component Molecular Metal [Au(tmdt)<sub>2</sub>] and Its Alloy Systems,” *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 3872–3873 (2006).

S. UJI, T. TERASHIMA, M. NISHIMURA, Y. TAKAHIDE, K. ENOMOTO, T. KONOIKE, M. NISHIMURA, H. CUI, H. KOBAYASHI, A. KOBAYASHI, H. TANAKA, M. TOKUMOTO, D. GRAF and J. S. BROOKS, “Vortex Dynamics and Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov State in a Magnetic-Field-Induced Organic Superconductor,” *Phys. Rev. Lett.* **97**, 157001 (2006).

H. CUI, Z. WANG, K. TAKAHASHI, Y. OKANO, H. KOBAYASHI and A. KOBAYASHI, “Ferroelectric Porous Molecular Crystal,  $[\text{Mn}_3(\text{HCOO})_6](\text{C}_2\text{H}_5\text{OH})$ , Exhibiting Ferrimagnetic Transition,” *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 15074–15075 (2006).

#### B-2) 国際会議のプロシーディングス

S. FUJIYAMA, M. TAKIGAWA, J. KIKUCHI, K. KODAMA, T. NAKAMURA, E. FUJIWARA, H. FUJIWARA, H. B. CUI and H. KOBAYASHI, “Nuclear Spin-Lattice Relaxation in  $\kappa\text{-(BETS)}_2\text{FeBr}_4$ ,” *Synth. Met.* **154**, 253–256 (2005).

Y. OSHIMA, E. JOBILONG, J. S. BROOKS, S. A. ZVYAGIN, J. KRZYSZEK, H. TANAKA, A. KOBAYASHI, H. CUI and H. KOBAYASHI, “EMR Measurements of Field-Induced Superconductor  $\lambda\text{-(BETS)}_2\text{Fe}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Cl}_4$ ,” *Synth. Met.* **153**, 365–368 (2005).

#### B-4) 招待講演

H. KOBAYASHI, “Development and Characterization of Magnetic Molecular Conductors,” Yamada Conference LX on Research in High Magnetic Fields (RHMF2006), Sendai (Japan), August 2006.

小林速男, 「電子物性に注目した分子物質の設計と開発」理研シンポジウム, 「局所電子構造の理解に基づく物質科学の新展開」理化学研究所, 2006年11月.

K. TAKAHASHI, “The Coupling between Magnetic Transition and Conducting Properties in a Spin-Crossover Molecular Conductor,” International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals, Dublin (Ireland), July 2006.

#### B-6) 受賞、表彰

日本化学会学術賞 (1997).

日本化学会賞 (2006).

#### 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(B)(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は過去半世紀を超える研究によって大きな発展を遂げて来た。特に長期にわたり分子性金属の開発を研究してきた立場から言えば、単一種の分子が自己集積するだけで金属結晶を実現出来る事を示し得たことは、「分子性」を深く考える上で大きな前進となったのではないかとと思われる。言うまでもなく、単一分子で出来た絶縁性分子性結晶も超高压で圧縮することにより金属化すると考えられている。本年度、私達は分子性結晶が高圧下で金属化する状況を明らかにする事を目標に、有機分子性結晶の超高压下の電気抵抗測定を試みた。今後一層の分析が必要であるが、多くの場合、超高压により分子性結晶が金属化する条件は分子が「分子性を失う条件」にほぼ一致するのではないかと考えられ、分子性を保ったまま金属化する事を実現させた単一分子性金属の場合とは大きな違いがあるものと予想している。

我が国は分子性伝導体の研究の長い歴史を持ち、分子物質の導電性は分子科学における重要な研究課題であった。最近の我が国の分子性伝導体の物性科学の成果は欧米諸国の成果を大きく超えているように思われる。逆にそのために、現在では世界的な規模で分野の活性を維持するためには、流行に左右されない我が国独自の真に優れた研究が継続的に生み出されていく事が必要となっている。このためには物性物理や物理有機化学との一層緊密な連携が不可欠である。

過去10年、分子機能の可能性への期待が大きな高まりを見せた。しかし、基礎的な量子科学・構造化学に立脚する分子科学から見れば、分子機能に関する多くの流行的な話題は、絵と現実の狭間が明確になっていないものが極めて多い様にも感ぜられる。このような状況は短期的な「成果」を追求することに急で長期的な展望が失われているように見える事と同根である様に思われる。今後、分子の特性を十分極める事により、分子ナノサイエンスを含む新しい分子機能の物理科学が展開されていくことが期待される。

## 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、空間形態が明確な樹木状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、ならびにこのような手法でスピン活性ナノ物質群を創出し、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している。本年度では、次元・サイズ・形態の異なるナノ金属集積体の構築、具体的に、単一ナノ分子であるデンドリマーを用いた三次元金属集積体の構築、拡張 $\pi$ 共役系を用いた二次元金属集積体の構築、および、新規配位高分子を用いた一次元金属集積体の構築を中心に検討した。その結果、様々なデンドリマーのコア、ビルディング・ブロック、表面組織、およびデンドロンの合成に成功した。また、自己組織化可能な拡張型 $\pi$ 共役系金属集積体を構築した。さらに、一次元ロッド状金属集積体を合成し、室温付近において急峻なスピン転移を有することを見いだした。従来のスピン転移物質は溶けないばかりか分解してしまう。これに対して、水溶性樹状組織で包み込むことにより水溶性を持たせるだけでなく、温度変化によりスピンを制御できることを見いだした。さらに、これを鋳型として用いることで一次元チャンネルに内包した金属集積体を構築し、ナノ空間に孤立化された一本鎖のスピン挙動について検討を行っている。
- 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、 $\pi$ - $\pi$ 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。本年度では拡張型 $\pi$ 電子系を有する新規金属錯体の合成を行い、複数機能を有するモジュールの高度集積化により、外部刺激に応答可能な多重機能性ナノ構造体の構築を行っている。

B-1) 学術論文

W. -S. LI, K. S. KIM, D. -L. JIANG, H. TANAKA, T. KAWAI, J. H. KWON, D. KIM and T. AIDA, "Construction of Segregated Arrays of Multiple Donor and Acceptor Units Using a Dendritic Scaffold: Remarkable Dendrimer Effects on Photoinduced Charge Separation," *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 10527–10532 (2006).

S. CHO, W. -S. LI, M. -C. YOON, T. K. AHN, D. -L. JIANG, J. KIM, T. AIDA and D. KIM, "Relationship between Incoherent Excitation Energy Migration Processes and Molecular Structures in Zinc(II) Porphyrin Dendrimers," *Chem. Eur. J.* **12**, 7576–7584 (2006).

B-3) 総説、著書

江 東林,「デンドリマーを用いたドラッグデリバリーキャリアの構築」バイオニクス 8, 50-55 (2006).

B-4) 招待講演

江 東林,「樹状形態を有する高分子の合成と機能」第55高分子学会年次大会(Wily 賞受賞講演)富山, 2006年9月.

D. -L. JIANG, “Bioinspired Design of Dendritic Macromolecules for Functional Nanomaterials,” The 14th POLYCHAR World Forum on Advanced Materials, Nara (Japan), April 2006.

D. -L. JIANG, “Macromolecular and Supramolecular Approaches to Functional Nanomaterials,” The 4th East Asia Polymer Conference, Tianjin (China), May 2006.

D. -L. JIANG, “Dendritic Approaches to Photo- and Spin-Functional Nanomaterials,” International Symposium on Polymer Physics (PP2006), Suzhou (China), June 2006.

D. -L. JIANG, “Molecular Design of Dendritic Macromolecules for Functional Nanomaterials,” International Symposium on Polymer Chemistry (PC2006), Dalian (China), June 2006.

B-6) 受賞、表彰

平成18年度科学技術分野文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2006).

平成18年度高分子学会 Wiley 賞 (2006).

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

日本学術振興会特別研究員奨励費,「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).

奨励研究(A),「デンドリマーの光捕集アンテナ機能: 赤外線をエネルギー源とする人工光合成系の開拓」江 東林 (1999年-2000年).

特定領域研究(A),「光捕集デンドリマーで被覆した共役ポリマーの合成と機能」江 東林 (1999-2000年).

科学技術振興機構戦略的基礎推進事業(さきがけタイプ)・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

昨年ひとりだった研究室はスタッフや学生が増え、やっと研究体制が整えつつあると実感している。合成を基本とする我々の研究室は新しい物質の誕生を目指して、物質科学の未踏領域の開拓を狙っている。

## 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 線内殻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。内殻分光では内殻励起した原子のサイトで局所的に射影した電子構造（電子構造そのものが局在しているわけではない）がわかる。最近の分光技術では 100 eV を越える軟 X 線領域でも 1 meV 精度の高分解能実験が可能になり，注目した原子サイトに影響を及ぼしている弱い相互作用を抜き出して明らかにできる。例えば，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。分子イオンの電荷分布が電子状態により違うこともわかる。さらに，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）から分子間の配向までわかる。
- 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。これら全く新しいスピン禁制光電子放出，スピン禁制価電子励起は軟 X 線を利用することで初めて可能となる 2 次光学過程に基づく。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，分子振動が分離できるレベルであるエネルギー分解能 5000 を越え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）の利用者によって簡単な分子から高分子などの大きな分子まで 10 年以上前から活用されてきた。ところが，ここ 10 年ほどの間に放射光源の性能向上によって内殻励起の実験研究が大きく進み，多電子励起，スピン軌道相互作用，円偏光度などの新たな観測データに対して理論支援が要求されるようになった。そのため，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 を開発・整備している。

#### B-1) 学術論文

**M. HIYAMA and N. KOSUGI**, “Application of R Matrix/MQDT Method to Valence and Core Excitations in NO,” *J. Phys. B* **39**, 1797–1811 (2006).

**I. L. BRADEANU, R. FLESC, N. KOSUGI and E. RÜHL**, “C 1s- $\pi^*$  Excitation in Variable Size Benzene Clusters,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8**, 1906–1913 (2006).

**N. KOSUGI**, “Orbital Picture in Molecular Inner-Shell Excited States of Rydberg-Valence Mixed Character,” *Brazilian J. Phys.* **35**, 957–960 (2005).

#### B-3) 総説、著書

加藤浩之、古川雅士、初井宇記、谷口正輝、川合知二、小杉信博、川合真紀, 「電子構造計測から探るDNA 分子内の電荷移動機構」*表面科学* **27**, 469–474 (2006).

#### B-4) 招待講演

**N. KOSUGI**, “Soft X-ray spectroscopy for molecular systems,” Taiwan-Japan Workshop on Scientific Opportunities with Taiwan Photon Source (NSRRC), Hsinchu (Taiwan), April 2006.

**T. HATSUI, T. HORIGOME and N. KOSUGI**, “Development and Performance of a Transmission-Grating Spectrometer for Soft X-ray Emission Studies,” The 9th International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation SRI2006, Daegu (Korea), May-June 2006.

**N. KOSUGI**, “Molecular Spectroscopy and Electronic Structure Theory,” Sokendai Asian Winter School on Frontiers in Molecular Science: Electronic and Structural Properties of Molecules and Nano Materials, Okazaki (Japan), November 2006.

#### 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).

初井宇記, 日本放射光学会奨励賞 (2006).

#### 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の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

VUV 真空紫外光物理国際会議国際諮問委員 (2004-2012).

ICESS 電子分光及び電子構造国際会議国際諮問委員 (2006- ).

X線及び内殻過程の国際会議国際諮問委員 (2006- ).

SRI シンクロトロン放射装置技術国際会議国際諮問委員 (1994, 1997, 2000, 2003, 2006).

VUV-12, VUV-14 真空紫外光物理国際会議プログラム委員 (1998, 2004).

ICISS-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, 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 (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 (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).

SRSM-2 シンクロトロ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, 2000-2006).

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 )(2005-2007).

文部科学省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).

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戦略WG委員 (2006-).

#### 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).

科学技術振興機構戦略創造事業さきがけ,「価電子をその場観測する顕微軟X線発光分光法の開発」初井宇記 (2006年-2009年).

#### C) 研究活動の課題と展望

今年度は方法論の開発に集中したため成果発表の機会があまりなかったが,その一方で,多くの国際会議の運営に関わり研究分野の国際交流に貢献した。我々はこれまで孤立分子系や弱い相互作用系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の研究で貢献してきた。特に最近では脱励起過程の研究に重点をシフトし,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すべく実験装置と理論計算コードの開発に着手した。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。そこで,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の開発に取り組んだ。今後,これらの装置を利用して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) 極短パルス光による強レーザー場中分子ダイナミクスの解明
- b) クーロン爆発イメージングによる超高速反応追跡
- c) 高次高調波による極短パルス軟 X 線の発生と応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 分子内のクーロン場に匹敵するほどの極めて強いレーザー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。強レーザー場における分子ダイナミクスが分子座標系におけるレーザー偏光方向に対してどのように依存するかを明らかにするために、10 フェムト秒領域の極めて短いパルス幅をもつ高強度レーザー光源を構築し、これを集光して得られた極短パルス強レーザー場 ( $0.2 \times 10^{15} \text{ W/cm}^2$ , 12 fs) と  $\text{H}_2\text{S}$  との相互作用によって生成した解離イオンをコインシデンス運動量画像法を用いて検出した。分子座標系は 3 体クーロン爆発過程,  $\text{H}_2\text{S}^{3+} \rightarrow \text{H}^+ + \text{S}^+ + \text{H}^+$ , によって生成した  $\text{H}^+$  の運動量を用いて定義した。その結果、レーザー偏光方向が分子平面に対して平行な場合、 $\text{H}_2\text{S}$  は偏光方向に対して伸張した構造をとることが見いだされた。一方、偏光方向が分子平面に対して垂直である場合は、顕著な構造変形が起こらないことが明らかとなった。すなわち、分子座標系において「電子をどの方向に揺さぶるか」によって分子ダイナミクスのコントロールが可能であることが初めて示された。
- b) 反応過程における分子構造の変化を実時間で可視化するために、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を行った。AOPDF 波形成型器をレーザーシステム増幅段に前置することによって、出力パルス波形の最適化を行い、サブ 10 フェムト秒領域の高強度レーザーパルスを得た。強レーザー場 ( $5 \text{ PW/cm}^2$ , 8 fs) における  $\text{CS}_2$  のクーロン爆発過程には 6 種類の対称クーロン爆発過程  $\text{CS}_2^{z+} \rightarrow \text{S}^{p+} + \text{C}^{q+} + \text{S}^{r+}$ ;  $(p,q,r) = (1,1,1), (1,2,1), (2,1,2), (2,2,2), (3,2,3), (4,2,4)$  がコインシデンス計測によって観測され、特にポテンシャル曲面の形状がクーロンポテンシャルで十分に記述できる高イオン化状態から生成した解離イオンの運動量分布に基づいて分子構造の決定ができることが示された。
- c) 超高速分子ダイナミクス追跡に必要な超短パルス軟 X 線の発生を行うために、レーザー高次高調波発生用チャンパーおよび軟 X 線分光器を設計・製作した。希ガス非線形媒質 (He, Ne, Ar) を用いて発生させた高調波のスペクトル測定を行い、希ガス圧、セル長、集光強度を制御変数として最適化を行った結果、59 次高調波 (波長: 13.5 nm) において、ビーム広がり 1.5 mrad の高強度短パルス軟 X 線を得ることに成功した。

B-1) 学術論文

- A. HISHIKAWA, E. J. TAKAHASHI and A. MATSUDA, "Electronic and Nuclear Responses of Fixed-in-Space  $\text{H}_2\text{S}$  to Ultrashort Intense Laser Fields," *Phys. Rev. Lett.* **97**, 243002 (4 pages) (2006).
- K. HOSHINA, A. HISHIKAWA, K. KATO, T. SAKO, K. YAMANOCHI, E.J. TAKAHASHI, Y. NABEKAWA and K. MIDORIKAWA, "Dissociative ATI of  $\text{H}_2$  and  $\text{D}_2$  in Intense Soft X-Ray Laser Fields," *J. Phys. B* **39**, 813–829 (2006).

**M. FUSHITANI, N. SCHWENTNER, M. SCHRÖER and O. KÜHN**, “Cage Motions Induced by Electronic and Vibrational Excitations: Cl<sub>2</sub> in Ar,” *J. Chem. Phys.* **124**, 024505 (7 pages) (2006).

**Y. MORISAWA, M. FUSHITANI, Y. KATO, H. HOSHINA, Z. SIMIZU, S. WATANABE, Y. MIYAMOTO, Y. KASAI, K. KAWAGUCHI and T. MOMOSE**, “Correlation between Nuclear Spin Ratio of Cyclic C<sub>3</sub>H<sub>2</sub> and Chemical Evolution in TMC-1 Cores,” *Astrophys. J.* **642**, 954–965 (2006).

**S. OGUCHI, A. MATSUDA, K. KONDO and K. G. NAKAMURA**, “Time-Resolved Coherent Anti-Stokes Raman Scattering of Cyclohexane under Shock Compression,” *Jpn. J. Appl. Phys., Part 1* **45**, 5817–5820 (2006).

**A. MATSUDA, K. KONDO and K. G. NAKAMURA**, “Nanosecond Rapid Freezing of Liquid Benzene under Shock Compression Studied by Time-Resolved Coherent Anti-Stokes Raman Spectroscopy,” *J. Chem. Phys.* **124**, 054501 (4 pages) (2006).

#### B-3) 総説、著書

菱川明栄, 「サブ 10 フェムト秒強レーザー場における分子過程」 *しょうとつ* **3**, 7–14 (2006).

#### B-4) 招待講演

**A. HISHIKAWA**, “Steering Electrons in Molecular Frame to Control Coulomb Explosion in Intense Laser Fields,” 5th Photo-Molecular Science Forum, “Frontiers in Photo-Molecular Science 1,” Okazaki (Japan), May 2006.

**A. HISHIKAWA**, “Coincidence Momentum Imaging of Molecules in Sub-10fs Intense Laser Fields,” Molecular Physics Seminar, Stockholm (Sweden), October 2006.

**A. HISHIKAWA**, “Molecules in Few-Cycle Intense Laser Fields,” SOKENDAI Asian Winter School 2006, Okazaki (Japan), November 2006.

**A. HISHIKAWA**, “Molecules in sub-10fs Intense Laser Fields,” International Symposium on Ultrafast Intense Laser Science 5, Lijiang (China), November 2006.

**A. HISHIKAWA**, “Molecules in Few-Cycle Intense Laser Fields,” The 1st Winter School of JSPS ASIA CORE Program in Beijing, Beijing (China), December 2006.

菱川明栄, 「極短パルス強光子場による反応イメージング」 分子研研究会「凝縮系のコヒーレンス制御と超高速ダイナミクス」 分子科学研究所, 岡崎, 2006年 3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, 2006- ).

分子科学研究会委員 (2002-2006).

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).

第22回化学反応討論会実行委員 (2005-2006).

原子衝突研究協会第31回研究会実行委員 (2005-2006).

#### B-8) 他大学での講義、客員

京都大学大学院理学研究科化学専攻, 連携併任助教授, 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がし, 「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

- a) 強レーザー場中における基礎的な過程のうちイオン化を取り上げ, 特にトンネルイオン化領域における電子励起状態の寄与について研究を進める。
- b) 得られたサブ10フェムト秒強レーザーパルスを探プローブとして, クーロン爆発イメージングを利用した化学反応実時間追跡を行う。特に高速で運動することが知られている水素原子のふるまいに着目して研究を進める。
- c) 高次高調波発生による超短パルス軟X線をコインシデンス運動量画像計測チャンバーに導入するためのビームラインの構築を進めており, これを用いたポンプ-プローブ計測に早期に着手したい。

## 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。2006 年度も分子研装置開発の多大な協力を得て、プレーナー型イオンチャンネルバイオセンサーの雑音特性を明らかにし、従来雑音が大きいとされていた Si 基板について、SOI 構造を採用することによりテフロン基板並の雑音特性が得られることを実証した。イオンチャンネルの一種である TRPV1 を発現した HEK293 細胞を、Si 基板の微細貫通孔に設置し、これにカプサイシンをリガンドとして作用させて、リガンド刺激型のイオンチャンネル電流を観測することに成功した。このセルメンブレ型センサーは、任意のイオンチャンネルについてセンサー化が容易であるので、上記 c) の神経細胞ネットワーク診断素子開発に展望が開けたと言える。
- 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。2006 年度は  $\text{TiO}_2$  単結晶基板表面でのベシクルフュージョンを行い、脂質二重膜のドメイン構造が、一定の条件下で結晶の単一ステップに追従することを示し、ドメイン構造制御の新しい方法を提案した。 $\text{A}\beta 40$  の凝集がアルツハイマー病発症の原因とする機構が提案されている。スフィンゴミエリン（SM）、コレステロール（Co）およびガングリオシド（GM1）からなる平面脂質二重膜をマイカおよび  $\text{SiO}_2$  表面に形成した。GM1 濃度を増加するとともにユニークなドメイン構造が観察され、これに  $\text{A}\beta 40$  を添加すると GM1 リッチと考えられるドメイン内に選択的に  $\text{A}\beta 40$  の凝集が見出された。GM1 を含む脂質二重膜の極微構造が  $\text{A}\beta 40$  の凝集を左右していると考えられる。水中で脂質二重膜構造や膜タンパクの構造を評価するための、水中その場観察用赤外反射吸収スペクトル装置の立ち上げを進めた。
- c) 神経細胞ネットワーク診断素子開発の第一歩として、神経細胞に変化することが知られている PC12 細胞について、マイクロ流路内での培養技術を開発するための実験設備を整備した。

B-1) 学術論文

C. WANG, X. PAN, C. SUN and T. URISU, “Area-Selective Deposition of Self-Assembled Monolayers on  $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$  Patterns,” *Appl. Phys. Lett.* **89**, 233105 (2006).

H. UNO, Z. -L. ZHANG, K. SUZUI, R. TERO, Y. NONOGAKI, S. NAKAO, S. SEKI, S. TAGAWA, S. OIKI and T. URISU, "Noise Analysis of Si-Based Planar-Type Ion-channel Biosensors," *Jpn. J. Appl. Phys.* **45**, L1334–L1336 (2006).

R. TERO, H. WATANABE and T. URISU, "Supported Phospholipid Bilayer Formation on Hydrophilicity-Controlled Silicon Dioxide Surfaces," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8**, 3885–3894 (2006).

S. -B. LEI, R. TERO, N. MISAWA, S. YAMAMURA, L. -J. WAN and T. URISU, "Aggregation and Microdomains in Gramicidin A—Reconstructed Tethered Lipid Membrane on Oxidized Silicon Surface," *Chem. Phys. Lett.* **429**, 244–249 (2006).

N. MISAWA, S. YAMAMURA, R. TERO, Y. NONOGAKI and T. URISU, "Orientation of Avidin Molecules Immobilized on COOH-Modified SiO<sub>2</sub>/Si(100) Surfaces," *Chem. Phys. Lett.* **419**, 86–90 (2006).

Y. -H. KIM, Md. M. RAHMAN, Z. -L. ZHANG, R. TERO and T. URISU, "Supported Lipid Bilayer Formation by the Giant Vesicle Fusion Induced by Vesicle-Surface Electrostatic Attractive Interaction," *Chem. Phys. Lett.* **420**, 569–573 (2006).

#### B-4) 招待講演

H. UNO, Z. -L. ZHANG, C. T. -Y., K. SUZUI, R. TERO, S. NAKAO and T. URISU, "Si- Based Planar Type Ionchannel Biosensor," The 1<sup>st</sup> International Workshop on Approaches to Single-Cell Analysis, Uppsala (Sweden), June 2006.

T. URISU, "Development of Miniaturized Biomolecular Sensor for Detection of Neurotransmitter Molecules," The forth International Forum on Post-Genome Technologies (4'IFPT), Hangzhou (China), September 2006.

T. URISU, "Fabrication of Ion-channel Biosensor and Interface Control," Fifth East Asian Biophysics Symposium, & Forty-Forth Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Okinawa, November 2006.

宇理須恒雄,「イオンチャンネルバイオセンサー製作と界面制御」表面科学講習会, 市ヶ谷, 2006年10月.

宇理須恒雄,「小型高性能イオンチャンネルバイオセンサーの開発」表面科学講演大会ソフトナノバイオロジー部会, 大阪大学コンベンションセンター, 2006年11月.

#### B-5) 特許出願

特願 2006-105188,「イオンチャンネルタンパク質バイオセンサー」宇理須恒雄(自然科学研究機構) 2006年.

#### 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 / ハードフォトン技術研究部会委員 (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・自由電子レーザー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).

佐賀県シンクロトン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・バイオプロセス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).

財団法人放射線利用振興協会, 放射線利用技術指導研究員 (2006.3.28-29).

#### 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 23<sup>rd</sup> Annual International Symposium on Microlithography, 論文委員 (1997).

SPIE's 24<sup>th</sup> Annual International Symposium on Microlithography, 論文委員 (1998).

SPIE's 25<sup>th</sup> Annual International Symposium on Microlithography, 論文委員 (1999).

レーザー学会第19回年次大会プログラム委員 (1998-1999).

レーザー学会第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 (2005.6-2007.5).

B-8) 他大学での講義、客員

岡山大学, 非常勤講師, 2006年 月 21日-22日.

B-9) 学位授与

三澤宣雄, 「シリコン基板表面へのタンパク質の固定化とその配向に関する研究」2006年 3月, 博士(理学)

B-10) 外部獲得資金

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の構築——」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).  
特定領域研究(公募研究)「イオンチャンネルレコーディング固体素子の開発とペインプロテオーム時空間解析応用」宇理須恒雄 (2006年)  
財団法人コスモロジー研究振興財団第16回研究助成, 「二酸化チタン上に形成した脂質二重膜への表面特性の影響およびUV照射効果」手老龍吾 (2005年-2006年).  
財団法人花王芸術・科学財団平成18年度研究助成, 「固体表面機能を利用した平面脂質二重膜の物性制御とその評価」手老龍吾 (2006年-2007年).  
若手研究(B), 「固体表面機能を活用した脂質二重膜の構造・物性・非対称性制御とその評価」手老龍吾 (2006年-2008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ファラ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ずに, 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ることで伝達し, 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考え。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) 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
- b) 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
- 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) 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。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を測定した。続いて、「フラーレンの極端紫外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。そしてフラーレン類の質量分析と光電子分光を遂行している（装置に関し特許出願中）。最近では  $C_{60}$  や  $C_{70}$  の巨大共鳴ピーク（ $\sim 20$  eV）に付随する形状共鳴遷移を初めて観測した。また、遷移金属原子の 4d 電子励起軟巨大共鳴が、金属内包フラーレンの炭素ケージの中でどのような影響を受けるかを検討した。さらに、多価イオンやフラグメントの収量曲線を精密に測定し、求めたしきい値や極大値を検討した結果、通常の分子では前例のない特異な単分子解離現象を見出した。解離遷移状態のポテンシャルエネルギー曲面の情報を得るための画像観測装置を製作した。
- b) 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して、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。最近では、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指している。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開始した。
- 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リウドベリ状態へ共鳴遷移させ、偏光方向に偏極した特定量子状態の励起原子を生成させる。この偏極原子を、直線偏光した高出力レーザーでイオン化する。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

- K. MITSUKE, H. KATAYANAGI, J. KOU, T. MORI and Y. KUBOZONO, "Fragmentation Mechanism of Highly Excited  $C_{70}$  Cations in the Extreme Ultraviolet," *AIP Conf. Proc.* **811**, 161–166 (2006).
- B. P. KAFLE, I. RUBINSTEIN and E. A. KATZ, "Analytical Model of Electrodifffusion of Metals in Fullerene Thin Films," *Jpn. J. Appl. Phys.* **44**, 2803–2805 (2005).
- T. YOSHIDA, K. TANAKA, H. YAGI, A. INO, H. EISAKI, A. FUJIMORI and Z. -X. SHEN, "Direct Observation of the Mass Renormalization in  $SrVO_3$  by Angle Resolved Photoemission Spectroscopy," *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146404 (4 pages) (2005).
- H. YAGI, T. YOSHIDA, A. FUJIMORI, Y. KOHSAKA, M. MISAWA, T. SASAGAWA, H. TAKAGI, M. AZUMA and M. TAKANO, "Chemical Potential Shift in Lightly Doped to Optimally Doped  $Ca_{2-x}Na_xCuO_2Cl_2$ ," *Phys. Rev. B* **73**, 172503 (4 pages) (2006).

#### B-4) 招待講演

見附孝一郎, 「気相分子やフラーレンの放射光イオン化と解離の実験的研究」岡山大学理学部セミナー, 岡山, 2006年10月.

片柳英樹・見附孝一郎, 「難揮発性物質の気相分光装置の開発とイオン液体への応用」特定領域研究「イオン液体の科学」第1班 班会議, 淡路市, 2006年10月.

#### 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).
- 原子分子データベース協会, 設立準備委員.

##### 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).

SuperSOR 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-10)外部獲得資金

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).

基盤研究(B), 「炭素ナノケージに貯蔵された物質の放射光共鳴制御」見附孝一郎 (2006年-2007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，ポンプ・プローブ分光などを用い，気相分子やクラスターの光イオン化過程を詳細に研究する。また，真空紫外領域の中性超励起状態の構造や電子状態に関する情報を集積しその動的挙動を明らかにする。将来の目標は次の通りである： 振動励起分子の放射光解離による反応分岐比制御， フラレーンの波長掃引光電子分光と高励起フラレーンイオンの解離ダイナミクスの解明， 励起分子や解離フラグメントの内部状態観測と，発光・解離・異性化・振動緩和などの過渡現象の追跡。

## 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の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。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い、数値計算を実施した。
- 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。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シミュレーションに用いられる運動方程式に関して、前年の透熱表示に引き続き、今年度は断熱表示による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動力学法などを用いて解析を進め、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、両親媒性分子が水溶液中に生成す

る球状ミセル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構造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実行も開始した。

#### B-1) 学術論文

**T. NAKASHIMA, K. IWAHASHI and S. OKAZAKI**, “A Molecular Dynamics Study of Sodium Chenodeoxycholate in an Aqueous Solution,” *Chem. Phys. Lett.* **420**, 489–492 (2006).

**A. YAMADA and S. OKAZAKI**, “A Surface Hopping Method for Chemical Reaction Dynamics in Solution Described by Diabatic Representation: An Analysis of Tunneling and Thermal Activation,” *J. Chem. Phys.* **124**, 094110 (11 pages) (2006).

**N. YOSHII, K. IWAHASHI and S. OKAZAKI**, “A Molecular Dynamics Study of Free Energy of Micelle Formation for SDS in Water and Its Size Distribution,” *J. Chem. Phys.* **124**, 184901 (6 pages) (2006).

**N. YOSHII and S. OKAZAKI**, “A Molecular Dynamics Study of Structural Stability of Spherical SDS Micelle as a Function of Its Size,” *Chem. Phys. Lett.* **425**, 58–61 (2006).

**N. YOSHII and S. OKAZAKI**, “A Molecular Dynamics Study of Surface Structure of Spherical SDS Micelles,” *Chem. Phys. Lett.* **426**, 66–70 (2006).

#### B-4) 招待講演

岡崎 進, 「熱力学的積分法によるミセル生成の自由エネルギー計算とサイズ分布」日本物理学会61回年次大会, シンポジウム「分子シミュレーションと熱力学量」松山, 2006年3月.

岡崎 進, 「溶液中の分子振動量子力学の計算機シミュレーション」分子構造総合討論会, 静岡, 2006年9月.

**N. YOSHII and S. OKAZAKI**, “Molecular dynamics study of free energy of micelle formation in water,” 4<sup>th</sup> International Symposium of Molecular Thermodynamics and Molecular Simulation, Chiba, May 2006.

**S. OKAZAKI**, “A quantum molecular dynamics study of energy relaxation and decoherence of solute vibration in solution,” 20<sup>th</sup> International Conference on Raman Spectroscopy, Yokohama, August 2006.

#### 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

FOMMS2006, organizing committee, Blaine (2006).

THERMO INTERNATIONAL 2006, organizing committee, Boulder (2006).

##### 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- ).

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

国立情報学研究所, 客員教授.

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、界面構造を分子レベルでプローブする実験手法として、固体表面科学はもとより、触媒化学、高分子化学、電気化学、大気化学など多くの関連分野への展開が図られている。実験データから分子レベルの界面構造を同定するためには、スペクトルの解釈が必要であるが、定性的・経験的な解釈にはしばしば限界が明らかで、信頼できる理論計算によるサポートが求められている。そこで本グループでは分子軌道計算に基づく分子モデリングと分子動力学計算に基づいて和周波発生スペクトルを非経験的に計算し、理論的に解析する手法を開発してきた。本年の成果として、近年注目されている電解質水溶液界面の構造解析を行った。電解質水溶液界面において、表面張力の濃度依存性の実験事実や誘電体モデルによる鏡像電荷の理論によって、イオンは水溶液界面から遠ざかる傾向があると長年信じられてきた。しかし近年の分子動力学シミュレーションでは、Br<sup>-</sup> や I<sup>-</sup> などのように大きくて分極率の大きいアニオンは界面から露出する状態が安定であると予想されており、大きな議論を呼んでいる。実験的に液体表面を観測する手段が乏しいことが検証を困難にしているが、その問題を解決する上で界面和周波発生分光は非常に有力な手段である。近年その実験結果が報告されたが、同様の実験結果に対して相異なる解釈と結論が両立しており、十分な解決に至っていない。そこで理論計算との比較に基づいて曖昧さのない解釈を与えることを試みた。その結果、分子シミュレーションと界面和周波分光実験との間に矛盾のない解決を得ることができた。
- 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。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。本年はそのモデルを上記 (a) の課題に応用し、任意の分子系の分極および分極率を時々刻々に計算するための分子モデルを開発した。これは、上の和周波分光の理論を一般的な界面系に拡張するために必要とされる成果である。
- 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で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。そのため不均質取り込みの実験から分子レベルの速度論を導出する際に非常に大きな曖昧さが残されていた。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。

B-1) 学術論文

A. MORITA, "Improved Computation of Sum Frequency Generation Spectrum of Water Surface," *J. Phys. Chem. B* **110**, 3158–3163 (2006).

**B. C. GARRETT, G. K. SCHENTER and A. MORITA**, “Molecular Simulation of the Transport of Molecules across the Liquid/Vapor Interface of Water,” *Chem. Rev.* **106**, 1355–1374 (2006).

**T. ISHIDA and A. MORITA**, “Extended Treatment of Charge Response Kernel Comprising the Density Functional Theory and Charge Regulation Procedures,” *J. Chem. Phys.* **125**, 074112 (2006).

**T. ISHIYAMA and A. MORITA**, “Intermolecular Correlation Effect in Sum Frequency Generation Spectroscopy of Electrolyte Aqueous Solution,” *Chem. Phys. Lett.* **431**, 78–82 (2006).

#### B-4) 招待講演

森田明弘, 「和周波発生分光の理論計算による水溶液界面の解析」平成17年度新プログラム全体会議, 犬山, 2006年1月.

森田明弘, 「界面の構造解析手法としての可視-赤外和周波分光法」第2回分子・物質シミュレーション中核拠点連携研究会, 岡崎, 2006年3月.

**A. MORITA**, “Recent Progress in Molecular Dynamics Simulation of Vibrational Sum Frequency Generation Spectroscopy,” APS March Meeting, Symposium “Chemical and Spectroscopic Applications of Nonlinear Optics,” Baltimore (U.S.A.), March 2006.

**A. MORITA**, “Molecular Dynamics Analysis of Vibrational Sum Frequency Generation Spectroscopy,” Institute of Atomic and Molecular Sciences, Taipei (Taiwan), September 2006.

森田明弘, 「Charge Response Kernel モデルの密度汎関数への展開と和周波分光計算への応用」学術創成研究「量子的化学原理」総括シンポジウム, 京都, 2006年11月.

**A. MORITA**, “Computational SFG analysis of aqueous interfaces,” 分子研研究会「和周波分光で拓く分子科学の新展開」岡崎, 2006年12月.

森田明弘, 「溶液界面解析のための和周波分光の理論」分子研研究会「生体機能理解の基礎としての複雑分子系の階層構造的分子間相互作用」岡崎, 2006年12月.

#### B-6) 受賞、表彰

森田明弘, 平成18年度分子科学奨励森野基金 (2006).

#### 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).

第22回化学反応討論会実行委員 (2006).

第13回理論化学シンポジウム代表世話人 (2006).

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-8) 他大学での講義、客員

京都大学化学研究所,「界面和周波発生分光の理論」2006年1月26日-27日.

京都大学化学研究所,客員助教授,2005年4月-2006年3月.

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3年目となり,分子研での研究の進展を成果として発表できるようになってきた。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貢献したい。計算で予想した非線形感受率が実験で確認された事例や,従来の実験の解釈を理論計算で精密化して塗り替える成果も得られるようになって,実験との連携もこれまで以上に密になってきたことは,理論化学者としても喜ばしいことと思っている。これからも,理論自体の深化および大規模計算を活用した幅広い応用の両面において,研究を進展させていきたい。

## 計算分子科学第二研究部門

齊 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) 過冷却液体のダイナミクス、相転移ダイナミクスの理論研究
- b) 生体高分子の構造変化ダイナミクスの理論研究
- c) 多次元分光法による凝縮系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) 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、通常の液体状態に比べ揺らぎの影響が顕著となる。また、水においては、一般的な液体とは異なり、2種類以上のアモルファス状態が存在し、その密度揺らぎは非常に興味深く、過冷却水の運動、揺らぎの分子動力学計算による解析を行った。ラマン分光や周波数依存熱容量を解析し、過冷却水における運動のスローイングダウンと水素結合ネットワークの組み替え運動との関連を明らかにした。また、等積・等圧熱容量の温度依存性および複素熱容量の解析から、過冷却水における密度揺らぎが非常に大きく、局所的密度揺らぎのダイナミクスへの影響を明らかにした。
- b) GTP 結合タンパク質 Ras は癌原遺伝子産物として知られたシグナル伝達タンパク質である。GTP と結合した活性型の Ras は Raf などの標的タンパク質に結合し、シグナルを下流に送ることにより細胞増殖が進み、GTP が加水分解され GDP となると Ras は不活性型となる。GTP の加水分解が抑制されると、Ras が活性型に固定され細胞増殖が続き、癌の原因の一つとなる。これまでの実験研究から加水分解の前後で、Ras が構造変化することが知られている。我々は、分子動力学計算を用いて、Ras の各状態における Mg イオン近傍の水素結合ネットワーク構造と揺らぎ、周囲のアミノ酸との相互作用を明らかにした。
- c) 液体や生体系の複雑な凝縮系のダイナミクスを解析する1つの方法として、多次元計測の理論解析を進めている。多次元計測とは、2つ以上の異なる時刻で系に摂動を与え、その後の系の応答の測定であり、多時間相関関数で表され系の詳細なダイナミクスを得ることが可能となる。我々は、2次元ラマン分光法が、系の局所構造やダイナミクスに非常に敏感で、和周波、差周波スペクトルから運動のカップリングの様相を解析できることを示した。現在、2次元ラマン分光法、3次元赤外分光法、多次元散乱を液体や過冷却液体などに適用し、遅い揺らぎの起源、分子間運動カップリングの時間変化、詳細な構造変化ダイナミクスの解析を進めている。

### B-1) 学術論文

S. SAITO and I. OHMINE, "Fifth-Order Two-Dimensional Raman Spectroscopy of Liquid Water, Crystalline Ice Ih and Amorphous Ices: Sensitivity to Anharmonic Dynamics and Local Hydrogen Bond Network Structure," *J. Chem. Phys.* **125**, 084506 (12pages) (2006).

T. SUMIKAMA, S. SAITO and I. OHMINE, "Mechanism of Ion Permeation in Model Channel; Free Energy Surface and Dynamics of K<sup>+</sup> Ion Transport in Anion-Doped Carbon Nanotube," *J. Phys. Chem. B* **110**, 20671–20677 (2006).

A. SHUDO, K. ICHIKI and S. SAITO, "Origin of Slow Relaxation in Liquid Water Dynamics: A Possible Scenario for the Presence of Bottleneck in Phase Space," *Europhys. Lett.* **73**, 826–832 (2006).

#### B-4) 招待講演

S. SAITO, "Dynamics and Hydrogen Bond Structure in Water Analyzed by Using Two-Dimensional Raman Spectroscopy and Ion Permeation Dynamics in Model Channel," Indo-Japan Joint Workshop on "New Frontiers of Molecular Spectroscopy," Kobe (Japan), September 2006.

S. SAITO, "Theoretical Study of Two-Dimensional Raman Spectroscopy of Liquid and Solid water," 20th International Conference on Raman Spectroscopy, Yokohama (Japan), August 2006.

S. SAITO, "Theoretical Study of Two-Dimensional Raman Spectroscopy: Anharmonic Dynamics and Local Hydrogen Bond Network Structure in Liquid and Solid Water," 66th Okazaki Conference "Soft X-ray Raman Spectroscopy and Related Phenomena," Okazaki (Japan), August 2006.

S. SAITO, "Theoretical Studies of Two-Dimensional Raman Spectroscopy and Ion Permeation Dynamics," Mini Workshop on Computational Aspects of Material Science, Ishikawa (Japan), June 2006.

#### 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

名古屋大学理学部, 「物理化学基礎」 2006年 4月-9月.

神戸大学大学院自然科学研究科, 特別講義「液体動力学」 2006年 11月 15日-11月 17日.

東京大学大学院総合文化研究科, 相関基礎科学特別講義I「溶液の分子論的ダイナミクスと分光解析」 2006年 11月 27日-11月 29日.

東京大学大学院総合文化研究科, 客員教授, 2005年 4月- .

#### B-10) 外部獲得資金

特定領域研究(計画研究)「空間・時間不均一ダイナミクス理論の構築」 斉藤真司 (2006年度-2009年度).

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、液体や過冷却液体、相転移過程のダイナミクス、生体高分子系の構造変化、多次元計測に基づく揺らぎの理論解析を進めている。

液体や過冷却液体のダイナミクスの解析として、過冷却水の解析を行っている。低密度、高密度領域の揺らぎ、ポテンシャルエネルギーの変化、密度揺らぎによるエネルギー地形の変化を明らかにし、この結果をもとに、室温状態の水において  $1/f$  スペクトルとして見られる遅い揺らぎの解析へと展開させていきたい。

生体高分子の解析として、細胞増殖に関わる Ras の加水分解反応の解析を行っている。GTP の加水分解における Mg イオンや GTP, GDP 近傍の水素結合ネットワーク構造の揺らぎや変化、反応中間状態、GAP の影響の解析、リン酸がどのように抜けていくのかなど分子動力学計算と電子状態計算を併用し反応機構の解明を進める。

以上の凝縮系ダイナミクスの詳細を解析する一つの方法として、多次元分光などの解析を行っている。多次元分光法の展開として、運動間のカップリングの時間変化の解析、振動分光法以外への展開、遅いダイナミクスに対する解析手法の確立を目指す。

### 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せることにより、オキシル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ルラジカル Ru 錯体の単離と構造解析に成功した。またオキシルラジカル 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対スピンを有し、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の安定化ならびに、アミノラジカル錯体活性種とするアルコール酸化反応を見出した。

- d) 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

- R. OKAMURA, T. WADA and K. TANAKA**, “Novel Platinum-Ruthenium Dinuclear Complex Bridged by 2-Aminoethanethiol,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **79**, 1535–1540 (2006).
- T. WADA, Y. MIYAZATO and K. TANAKA**, “Experimental and Theoretical Evaluation of the Charge Distribution over the Ruthenium and Dioxolene Framework of [Ru(OAc)(dioxolene)(terpy)] (terpy = 2,2':6',2''-terpyridine) Depending on the Substituents,” *Inorg. Chem.* **45**, 8887–8894 (2006).
- Y. MIYAZATO, T. WADA and K. TANAKA**, “Redox Behavior and Catalytic Oxidation Reactions of Alcohols by a New Ruthenium(III)-Dioxolene-Amine Complex of Bis(2-pyridylmethyl)-2-Aminoethylamine,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **79**, 745–747 (2006).
- J. CHO, H. FURUTACHI, S. FUJINAMI, T. TOSHA, H. OHTSU, K. TANAKA, T. KITAGAWA and M. SUZUKI**, “Sequential Reaction Intermediates in Aliphatic C–H Bond Functionalization Initiated by a Bis( $\mu$ -oxo)dinickel(III) Complex,” *Inorg. Chem.* **45**, 2873–2885 (2006).
- R. OKAMURA, T. FUJIHARA, T. WADA and K. TANAKA**, “Comparison of Basicity of the Diimine and Quinoid Group of 1,10-Phenanthroline-5,6-Dione Ligated on Pt(II),” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **79**, 106–112 (2006).

#### 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).

日本学術会議連携会員 (2006- ).

日本化学会錯体・有機金属ディビジョン主査 (2006- ).

B-8) 他大学での講義、客員

熊本大学大学院理学研究科, 2006 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 -  $\eta^1$  -  $\text{CO}_2$  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, 二酸化炭素を有機合成のC1源とするためには $\text{CO}_2$ 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 $\text{CO}_2$ 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 $\text{CO}_2$ 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。

アコおよびアミノ金属錯体からのプロトン解離で生じる負電荷を用いて配位子の還元反応を引き起こさせると, オキシルおよびアミルラジカルを有する金属錯体の生成が可能となる。それらの金属錯体を触媒とする有機化合物の酸化反応を行うことで, 化学エネルギーから電気エネルギーへのエネルギー変換を目指している。

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) 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錯体のカチオン種を触媒前駆体として用いることにより、ヒドロシランを用いた二酸化炭素のメタンへの還元反応が均一系、常温常圧で進行することを見出した。二酸化炭素の酸素はシロキサンへと変換されており、新しいシリコン合成法としても注目に値する。
- b) 2 座フェノキシド配位子のメチレン架橋部位における C-H 結合活性化反応を利用することにより、カルベン - フェノキシド混合型配位子を合成した。タンタル - アルキル錯体に導入にした 2 座フェノキシド配位子のメチレン架橋部位からプロトンおよびヒドリドを順次引き抜くことにより、カルベン架橋配位子へと変換した。得られた錯体はカチオン性の一重項カルベン配位子をもつ  $d^0$  金属錯体としても極めて興味深い。

B-1) 学術論文

**T. WATANABE, T. MATSUO and H. KAWAGUCHI**, "A Tantalum(V) Carbene Complex: Formation of a Carbene-Bis(phenoxide) Ligand by Sequential Proton and Hydride Abstraction," *Inorg. Chem.* **45**, 6580–6582 (2006).

**T. MATSUO and H. KAWAGUCHI**, "From Carbon Dioxide to Methane: Homogeneous Reduction of Carbon Dioxide with Hydrosilanes Catalyzed by Zirconium-Borane Complexes," *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 12362–12363 (2006).

**S. SENDA, Y. OHKI, T. HIRAYAMA, D. TODA, J. -L. CHEN, T. MATSUMOTO, H. KAWAGUCHI and K. TATSUMI**, "Mono{hydrotris(mercaptoimidazolyl)borato} Complexes of Manganese(II), Iron(II), Cobalt(II), and Nickel(II) Halides," *Inorg. Chem.* **45**, 9914–9925 (2006).

**W. -L. MENG, Z. -H. ZHANG, Y. LV, H. KAWAGUCHI and W. -Y. SUN**, "Synthesis, Crystal Structure and Magnetic Property of a Two-Dimensional Herringbone-Like Network with Praseodymium(III) Nitrate and 1-Bromo-3,5-bis(imidazol-1-ylmethyl)benzene(bib)," *Appl. Organomet. Chem.* **20**, 399–403 (2006).

B-4) 招待講演

川口博之, 「多座フェノキシド配位子をもつ前周期遷移金属錯体の化学: 合成と反応性」第39回有機金属若手の回夏の学校, 京都, 2006年7月.

川口博之, 「4および5族遷移金属フェノキシド錯体による小分子活性化」第98回触媒討論会, 富山, 2006年9月.

**H. KAWAGUCHI**, "Early Transition Metal Complexes Supported by Multidentate Phenoxide Ligands," The Sixth China-Japan Joint Symposium on Metal Cluster Compounds (CJSMCC-2006), Huangshan (China), October 2006.

**H. KAWAGUCHI**, "Early Transition Metal Complexes Bearing Phenoxide Multidentate Ligands," 2006 Workshop on Organometallic Chemistry, Uji (Japan), November 2006.

#### B-10)外部獲得資金

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,「キューバン型金属 - 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).

基盤研究(B),「電子欠損型ヒドリド錯体の合成と機能」川口博之 (2006年-2008年).

特定領域研究,「前周期遷移金属相乗系錯体の創製と小分子活性化」川口博之 (2006年-2009年).

#### C) 研究活動の課題と展望

これまでに,フェノキシド部位を骨格に組み込んだ多座配位子を補助配位子としてもつ金属錯体の配位化学を中心に研究を進めてきており,特異な構造や反応性の開拓に焦点を当て研究を展開している。特に,窒素分子,一酸化炭素,二酸化炭素等の反応性の乏しい無機小分子の新しい変換反応を見出すことができた。今後,配位子の設計を通して,金属錯体の特性に及ぼすその効果に関して理解を深めていきたい。

## 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) サブマイクロメートル長  $\pi$  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) 点接触電流像原子間力顕微鏡 (PCI-AFM) によるナノレベル電流像計測
- g) 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) PCI-AFM の測定条件の最適化を行い, その結果原子間力顕微鏡の空間分解能 (20 ~ 30 nm) をはるかに上回る空間分解能 (2 ~ 3 nm) の電流像を得ることに成功した。この条件で有機分子 / カーボンナノチューブ複合系を計測することで, 有機分子が存在することで整流性が出る場合があることや, 金属的なカーボンナノチューブが半導体的になる場合があることを分子のトポグラフィー像と電流像の同時計測により明らかにした。
- b) 分子定規法を用いて非常に緻密な精度でナノギャップ電極が作成可能になり, これを用いて作成した単電子トランジスター素子がギャップ幅に応じた特性を表すことを初めて実証できた。
- c) オリゴチオフェン分子をナノギャップ電極にブリッジして作成したデバイスが光応答性を示すことを見出した。
- d) ポルフィリンワイヤーをナノギャップ電極にブリッジして作成したデバイスは, そのままでは光応答性を示さないが, 金ナノ粒子をポルフィリン上に結合することで光応答性を示すことを見出した。

B-1) 学術論文

**H. TANAKA, M. W. HORN and P. S. WEISS**, "A Method for the Fabrication of Sculptured Thin Films of Periodic Arrays of Standing Nanorods," *J. Nanosci. Nanotechnol.* **6**, 3799–3802 (2006).

**M. KAWAO, H. OZAWA, H. TANAKA and T. OGAWA**, "Synthesis and Self-Assembly of Novel Porphyrin Molecular Wires," *Thin Solid Films* **499**, 23–28 (2006).

**O. TSUTSUMI, H. SATO, K. TAKEDA and T. OGAWA**, "Synthesis and Photochemical Behavior of Metalloporphyrin Complexes Containing a Photochromic Axial Ligand," *Thin Solid Films* **499**, 219–223 (2006).

**W. HUANG, G. MASUDA, S. MAEDA and T. OGAWA**, "Molecular Junctions Composed of Oligothiophene Dithiols Bridged Gold Nanoparticles Exhibiting Photo Response Properties," *Chem. Eur. J.* **12**, 607–619 (2006).

- H. SATO, O. TSUTSUMI, K. TAKEDA, H. TANAKA and T. OGAWA**, “Simple Preparation Method for Supramolecular Porphyrin Arrays on Mica Using Air–Water Interface,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **45**, 2324–2327 (2006).
- H. TANAKA, T. YAJIMA, T. MATSUMOTO, Y. OTSUKA and T. OGAWA**, “Porphyrin Molecules Working as Nanodevice on Single-Walled Carbon Nanotube Wiring,” *Adv. Mater.* **18**, 1411–1415 (2006).
- W. HUANG and T. OGAWA**, “Spontaneous Resolution of Delta and Gamma Enantiomeric Pair of [Ru(phen)(bpy)<sub>2</sub>](PF<sub>6</sub>)<sub>2</sub> (phen = 1,10-phenanthroline, bpy = 2,2'-bipyridine) by Racemic Conglomerate Crystallization,” *Polyhedron* **25**, 1379–1385 (2006).
- W. HUANG and T. OGAWA**, “Structural and Spectroscopic Characterizations of Low-Spin [Fe(4,4-dimethyl-2,2'-bipyridine)<sub>3</sub>](NCS)<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O Prepared from High-Spin Iron(II) Dithiocyanate Tetrapyridine,” *J. Mol. Struct.* **785**, 21–26 (2006).
- K. ARAKI, E. MIZUGUCHI, H. TANAKA and T. OGAWA**, “Preparation of Very Reactive Thiol-Protected Gold Nanoparticles: Revisiting the Brust-Schiffrin Method,” *J. Nanosci. Nanotechnol.* **6**, 708–712 (2006).
- T. OGAWA, W. HUANG and H. TANAKA**, “Morphology and Electric Properties of Nonathiophene/Au Nano-Composite Thin Films Formed between 1 μm Gapped Electrodes,” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **455**, 299–303 (2006).
- H. TANAKA, T. YAJIMA, M. KAWAO and T. OGAWA**, “Electronic Properties of Single-Walled Carbon Nanotube/100mer Porphyrin System Measured by Point-Contact Current Imaging Atomic Force Microscopy,” *J. Nanosci. Nanotechnol.* **6**, 1644–1648 (2006).
- H. OZAWA, M. KAWAO, H. TANAKA and T. OGAWA**, “Synthesis of End-Functionalized π-Conjugated Porphyrin Oligomers,” *Tetrahedron* **62**, 4749–4755 (2006).
- R. NEGISHI, T. HASEGAWA, K. TERABE, M. AONO, T. EBIHARA, H. TANAKA and T. OGAWA**, “Fabrication of Nanoscale Gaps Using a Combination of Self-Assembled Monomolecular and Electron Beam Lithographic Techniques,” *Appl. Phys. Lett.* **88**, 223111 (2006).
- H. TANAKA, P. S. WEISS and M. W. HORN**, “Fabrication of Periodic Standing Rod Arrays by the Shadow Cone Method,” *Int. J. Nanosci.* **5**, 815 (2006).
- M. E. ANDERSON, L. P. TAN, M. MIHOK, H. TANAKA, M. W. HORN, G. S. MCCARTY and P. S. WEISS**, “Photolithographic Structures with Precise Controllable Nanometer-Scale Spacings Created by Molecular Rulers,” *Adv. Mater.* **18**, 1020 (2006).
- H. TANAKA, M. W. HORN and P. S. WEISS**, “A Method for the Fabrication of Sculptured Thin Films of Periodic Arrays of Standing Nanorods,” *J. Nanosci. Nanotechnol.* **6**, 3799 (2006).

#### B-3) 総説、著書

- 小川琢治, 「4. 電気物性の測定」 ナノテクノロジー入門シリーズ, 「ナノテクのための工学入門」 Ⅱ. ナノ構造体の応用測定工学 (2006).
- 小川琢治, 「分子配向技術の将来に向けて」 機能材料(シーエムシー) 「分子配向技術の基礎と応用の可能性」 2月号, 28–34 (2006).

#### B-4) 招待講演

- 小川琢治, “Construction of Organic Nano-Structures and Studies on Their Electronic Properties,” International Conference on Nanoscience and Nanotechnology (ICNSNT2006), Chennai (India), August 2006.

小川琢治, “Construction of Organic Nano-Structures and Studies on Their Electronic Properties,” 台湾 - 日本二国間シンポジウム, Fukuoka, March 2006.

小川琢治, “Construction of Organic Nano-Structures and Studies on Their Electronic Properties,” The Sixth France-Japan Workshop on Nanomaterials, Sapporo, March 2006.

小川琢治, “Construction of Organic Nano-structures and Studies on Their Electric Properties,” 3rd Japan-India Workshop on Molecular and Supramolecular Materials, Tokyo, February 2006.

小川琢治, 「有機物質のナノ電子物性」東大物性研短期研究会, 2006年4月.

小川琢治, 「単一分子素子を目指したナノ構造体の生成とナノ計測」生産開発科学研究会, 2006年10月.

田中啓文, 「有機分子でナノ構造やナノデバイスを作る」結晶化学セミナー, 京都大学化学研究所, 2006年7月.

#### B-6) 受賞

田中啓文, 平成18年ナノ学会第4回大会, Best Young Presenter Award (2006).

#### 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).

Asia Nano 2006, 組織委員 (2006).

##### 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 (2001-2006).

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 (2000-2006).

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 (2002-2006).

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-10)外部獲得資金

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).

若手研究(B),「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の電気特性評価」田中啓文 (2006年-2007年)

#### C) 研究活動の課題と展望

新たな測定法がかなり完成に近づきつつある。PCI-AFM はかなりの進展があり、ノイズがかなり減ったことにより空間分解能が大幅に上がった。これにより、これまでになく詳細な議論が可能になった。ただ、まだ nA レベルの電流像しか信頼性高く計測できないので、pA レベルの計測が可能になるように更にノイズの低減法を考えなくてはならない。これができると、より広い範囲の有機単一分子の電流特性の空間分布計測が可能になり、ナノサイエンスの新たな次元に入ることが可能になる。また、二探針原子間力顕微鏡のシステムで同様のことが可能になると、更に測定可能な対象を増やすことができ、研究の進

展が加速できるようになる。分子定規法によるナノギャップ電極の作成も進展があったが、1～3 nm レベルのギャップが再現性良く作成できるようになると更に研究の対象が増えるようになる。次年度からは、有機合成と分子の自己組織化に重心を移して、こうした新しい分子系をこれまでに蓄積したナノ技術を利用して計測することで新たな科学を見出したい。

全く新しい展開として、こうしたナノテクノロジーとテラヘルツ科学あるいは強光子場科学との融合を考えている。これにより新たな科学の新分野を創設することが可能になるかもしれないと期待している。

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) 有機 EL 素子のため有機半導体の開発
- b) 電界効果トランジスタのための有機半導体の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) パーフフルオロフルオレンオリゴマーは、優れた電子注入性、電子輸送性、およびホールブロック性が期待され、高性能な電子輸送材料として興味深い。今年度 3 量体および 4 量体 ( PF-*n*T; *n* = 3, 4 ) の合成とキャラクタリゼーションを行った。これらの化合物は無色の固体であり、結晶性であるパーフルオロフェニレンオリゴマーとは異なり、150-170 度にガラス転移を示すアモルファス材料である。また、有機溶媒にもよく溶けるため、真空蒸着だけでなくスピンコートによるウェットプロセスも可能である。サイクリックボルタンメトリー ( CV ) の測定によると、2 電子還元まで可逆であり、還元電位もパーフルオロフェニレンオリゴマーに比べかなりプラス側にシフトしている。蛍光あるいは燐光発光材料を用いた有機 EL 素子を試作したところ、電子注入性、電子輸送性ともに非常に高いことがわかった。

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. SAKAMOTO, T. SUZUKI, M. KOBAYASHI, Y. GAO, Y. INOUE and S. TOKITO, "Perfluoropentacene and Perfluorotetracene: Syntheses, Crystal Structures, and FET Characteristics," *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **444**, 225-232 (2006).

B-3) 総説、著書

阪元洋一、鈴木敏泰, 「 $\pi$  共役系有機半導体 ~ n 型半導体を中心に ~ 』進化する有機半導体, エヌ・ディー・エス, 140-147 (2006).

阪元洋一、鈴木敏泰, 「フッ素化ペンタセンの有機薄膜トランジスタへの応用」フッ素系材料の応用技術, シーエムシー出版, 137-147 (2006).

B-8) 他大学での講義、客員

名古屋大学大学院環境学研究科, 「物質環境学特別講義」2006 年 10 月 5 日, 12 月 14 日.

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 (B) ( 展開 ) 「フッ素化フェニレン化合物の有機 EL ディスプレーへの実用化研究」鈴木敏泰 (2000 年 -2001 年).

基盤研究 (B) ( 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

有機薄膜太陽電池は、有機EL素子および有機トランジスタに続く第三の有機半導体の応用分野として注目されている。有機太陽電池においてシリコンあるいは色素増感太陽電池にない特徴として、極端に薄く、軽くできる、フレキシブルであり、どのような形状にも対応できる、ウェットで作成できればコストがかなり抑えられる等が挙げられる。では、実用化の目途である効率10%を超える有機太陽電池を開発することは可能だろうか？私は素子構造と材料の両面からアプローチし、これを実現していきたいと考えている。

## 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) 非周期型・定序配列性高分子アーキテクチャの分子スケールエレクトロニクスへの展開として、当研究室では「単一巨大分子内単電子 / 正孔素子回路」の逐次精密構築について検討を進めている。「位置選択的カップリング用の置換基」と「HUB 機能ユニット (これを基点として数ステップ以内に 20 種以上の機能ユニットに変換可能)」を付与した 1-10 nm 長級の汎用構築ブロックのグラムスケールの合成法を確立した。これにより分子鎖長を 1-30 nm の範囲で 1 nm 刻みで指定することが可能となり、かつ様々なサイズとタイプのポテンシャル井戸やポテンシャルバリアを任意の位置に導入することについても実験的に目処をつけた。結果、理論や単分子計測グループにとっても新鮮で魅力ある分子群の提供を行えるようになったと考えている。また、計測結果からのフィードバックにも従来よりも迅速に対応可能となっている。
- 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アルキル基を合せ持つチオフェンオリゴマー分子は、基板上での分子鎖内配座異性体や鏡像異性体の STM による識別が容易なことが判明したのを契機に、「分子構造」と「基板上での分子鎖配座や分子集合形態」との相関について詳細かつ系統的に検討を進めることにした。現在までに、主鎖長やアルキル側鎖長を系統的に変化させた 10 種以上のチオフェンオリゴマーを作製し、Au(111), Ag(110), Cu(100) 表面上における存在形態を高分解 STM で観測した。従来、オリゴチオフェンの基板上での集合様式は単結晶中のそれと類似する……との一見当然そうな知見が報告されていたが、低被覆率条件下に特殊な形状の置換基を有する系では多様な分子配向が認められた。その支配因子を明らかにすることから、懸案の「基板上での大型分子の合目的・精密配置」の方法論にアプローチしている。

B-1) 学術論文

T. YOKOYAMA, S. KURATA and S. TANAKA, "Direct Identification of Conformational Isomers of Adsorbed Oligothiophene on Cu(100)," *J. Phys. Chem. B* **110**, 18130-18133 (2006).

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

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 $\pi$ 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

この一年で、これまで開発してきた単電子 / 正孔素子用の分子モジュールの組み立てが進み、いかにもそれらしい雰囲気の大分子ができてきた。結果、理論や分子計測の共同研究者の方々に、遠慮なくプレッシャーをかけることができる。但し、測定結果から手厳しいカウンターが返ってくる確率は多大であるが、それこそが学際的研究の醍醐味であろう。また、「何が可能になったか」を理解した人からは、必要な分子について具体的かつ理想的（＝無理難題と同義）な仕様の指定がくるようになるが、それには体力勝負で期待に応えなければならないと考えている。それにより、いにしえの「定番分子」が威張っている世界にいる方々を、豊潤で未開の非周期型・定序配列性 $\pi$ 共役巨大分子の世界に誘うためである。キャッチコピーは「分子科学の出エジプト」であるが、出エジプトした人々は40年間荒野を放浪後、殆どが約束の地にたどり着けなかったことは内緒にしておくべきであろう。

## 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

**Y. UOZUMI and M. KIMURA**, "Asymmetric  $\pi$ -Allylic Etherification of Cycloalkenyl Esters with Phenols in Water Using a Resin-Supported Chiral Palladium Complex," *Tetrahedron: Asymmetry* **17**, 161–166 (2006).

**Y. M. A. YAMADA and Y. UOZUMI**, "A Solid-Phase Self-Organized Catalyst of Nanopalladium with Main-Chain Viologen Polymers:  $\alpha$ -Alkylation of Ketones with Primary Alcohols," *Org. Lett.* **8**, 1375–1378 (2006).

**T. KUBOTA, Y. SAKUMA, K. SHIMBO, M. TSUDA, M. NAKANO, Y. UOZUMI and J. KOBAYASHI**, "Amphezanol A, a Novel Polyhydroxyl Metabolite from Marine Dinoflagellate *Amphidinium* sp.," *Tetrahedron Lett.* **47**, 4369–4371 (2006).

**T. KIMURA and Y. UOZUMI**, "PCP Pincer Palladium Complexes and Their Catalytic Properties: Synthesis via the Electrophilic Ligand Introduction Route," *Organometallics* **25**, 4883–4887 (2006).

**Y. UOZUMI, T. SUZUKA, R. KAWADE and H. TAKENAKA**, " $\pi$ -Allylic Azidation in Water with an Amphiphilic Resin-Supported Palladium-Phosphine Complex," *Synlett* 2109–2113 (2006).

**Y. KOBAYASHI, D. TANAKA, H. DANJO and Y. UOZUMI**, "A Combinatorial Approach to Heterogeneous Asymmetric Aquacatalysis with Amphiphilic Polymer-Supported Chiral Phosphine-Palladium Complexes," *Adv. Synth. Catal.* **348**, 1561–1566 (2006).

**Y. M. A. YAMADA, Y. MAEDA and Y. UOZUMI**, "Novel 3D Coordination Palladium-Network Complex: A Recyclable Catalyst for Suzuki-Miyaura Reaction," *Org. Lett.* **8**, 4259–4262 (2006).

**Y. YOZUMI and T. SUZUKA**, “ $\pi$ -Allylic C1-Substitution in Water with Nitromethane Using Amphiphilic Resin-Supported Palladium Complexes,” *J. Org. Chem.* **71**, 8644–8646 (2006).

B-3) 総説、著書

魚住泰広、山田陽一, 「次世代型錯体触媒による水系有機分子変換：固体化と高機能化」科学フロンティア (16) (2006).

B-4) 招待講演

魚住泰広, “Heterogeneous Aquacatalysis with Polymeric Palladium Complexes toward Ideal Organic Synthesis,” Catalysis Society of Japan-Junior Association, Hakone (Japan), August 2006.

魚住泰広, 「『水と油』が助け合う化学」文部科学省科学研究費補助金「研究成果公開発表(A)」ものづくり 化学の不思議と夢, 東京, 2006年10月.

**Y. UOZUMI**, “Asymmetric Heterogeneous Aquacatalysis Toward Ideal Organic Synthesis,” Gratama Workshop 2006, Awajishima (Japan), October 2006.

**Y. UOZUMI**, “Asymmetric Heterogeneous Aquacatalysis with Amphiphilic Polymeric Palladium,” Sino-Japanese Symposium on Green Chemical Synthesis, Beijing (China), October 2006.

**Y. M. A. YAMADA**, “Preparation of Self-Organized Catalysts and Their Application to Organic Transformations,” Sino-Japanese Symposium on Green Chemical Synthesis, Beijing (China), October 2006.

**Y. UOZUMI**, “Heterogeneous Aquacatalytic Organic Reactions with Amphiphilic Polymer-Supported Palladium Complexes and Nanoparticles,” SIOC Seminar, Shanghai (China), December 2006.

山田陽一, 「自己組織化による不溶性超分子金属触媒創製」Organometallic Seminar XXXIV「錯体触媒のニューフェーズ」, 東京, 2006年12月.

B-5) 特許出願

特願 2006-056193, 「マイクロリアクターでの触媒調整と反応」魚住泰広、山田陽一、福山尚志、別府朋彦、北森武彦、上野雅晴, 2006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).

OMCOS 14 組織委員 (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-).

Tetrahedron Asymmetry 誌アドバイザリ - ボード (2002-).

SYNFACTS 誌寄稿委員 (2005- ) (山田陽一)

#### 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

京都大学大学院工学研究科, 非常勤講師, 2006 年 4 月 1 日-9 月 30 日.

名古屋大学工学部工学研究科, 非常勤講師, 2006 年 4 月 10 日-2007 年 3 月 31 日.

鳥取大学工学部物質工学科, 非常勤講師, 2006 年 10 月 1 日-2007 年 3 月 31 日.

#### B-9) 学位授与

皆川真規, “Preparation of NCN imino pincer palladium complexes and their properties,” 2006 年 3 月, 博士(理学)

木村将浩, “Transition Metal-Catalyzed Asymmetric Allylic Etherifications,” 2006 年 3 月, 博士(理学)

#### 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).

特定領域研究(計画:研究項目番号 A03)「理想化学変換プロセスを実現する新しい水中機能性個体触媒の開発」魚住泰広 (2006年-2009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-2006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り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2007年にCREST 研究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こそが重要である。

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) 金属錯体と有機色素を用いた光励起電子移動系の開発と触媒反応への展開
- c) 金属錯体を用いた光合成酸素発生複合体のモデル研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ポルフィリン・酸化還元活性デンドリマーの結合化合物の電気化学を拡散方程式を用いて解析し、多段階レドックス分子の電気化学的過程の新しい解析方法を提案し発表した。
- b) シクロペンタジエニルコバルトを構成要素とする新しいポルフィリン・コバルト錯体結合化合物を合成した。2,2'-ビピリジンを用いて結合した化合物の場合、ポルフィリンの蛍光が強く消光される。電気化学的データより、ポルフィリンからコバルト錯体への光励起電子移動が起きると考えられるが、一方溶媒の極性に対する消光効率の依存性は電子移動機構で予想される傾向とは異なっていた。コバルト錯体のスピン状態が溶媒に依存して変化している可能性が示唆される。
- c) エンドウマメの光化学系 II タンパク質複合体と合成マンガン錯体を用いて、光合成酸素発生中心の再構成実験を行った。ある種のマンガン錯体を用いて再構成した場合、反応中心の光励起電子移動機能は回復するが、酸素発生機能は回復せず、代わりに過酸化水素が生成することが見出された。酸素発生機構との関連が注目される。

B-1) 学術論文

**Y. KIKUZAWA, T. NAGATA, T. TAHARA and K. ISHII**, "Photo- and Redox-Active Dendritic Molecules with Soft, Layered Nanostructures," *Chem. Asian J.* **1**, 516–528 (2006).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

**T. NAGATA, T. NAGASAWA, S. K. ZHARMUKHAMEDOV and S. I. ALLAKHVERDIEV**, "Reconstitution of the Water-Oxidizing Complex in Manganese-Depleted Photosystem II Preparations Using Binuclear Mn(II) and Mn(IV) Complexes," *PHOTOSYNTHESIS in the POST-GENOMIC ERA: Structure and Function of Photosystems*, Pushchino (Russia), Aug. 2006 (2006).

**T. NAGASAWA and T. NAGATA**, "Synthesis and Electrochemistry of Cobalt Complexes Having Cyclopentadienyl Derivatives," *PHOTOSYNTHESIS in the POST-GENOMIC ERA: Structure and Function of Photosystems*, Pushchino (Russia), Aug. 2006 (2006).

B-4) 招待講演

**T. NAGATA, Y. KIKUZAWA, T. NAGASAWA, H. ITO, T. HINO, T. TAHARA and K. ISHII**, "Electron Transfer Involving Redox-Pool Compounds: An Approach Towards Artificial Quinone Pool," *PHOTOSYNTHESIS in the POST-GENOMIC ERA: Structure and Function of Photosystems*, Pushchino (Russia), August 2006.

永田 央,「キノンプールをつくる：合成化学から生体エネルギー変換への(ささやかな)アプローチ」分子研研究会「金属反応活性点の機能と構造——その分子レベルデザイン——」分子科学研究所, 2006年 3月.

永田 央,「人工分子でキノンプールをつくる」2006年度大阪大学蛋白質研究所セミナー・日本光合成研究会第6回ワークショップ「光合成研究の新たな潮流」大阪大学蛋白質研究所, 吹田, 2006年 10月.

#### 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).

学会の組織委員

International Meeting “Photosynthesis in the Post-Genomic Era: Structure and Function of Photosystems” 組織委員 (2006).

学会誌編集委員

*Biochimica and Biophysica* (“Photosynthesis” Special Issue), Guest Editor (2006).

#### 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」永田 央 (2004年-2005年).

#### C) 研究活動の課題と展望

現在,酸素発生中心のモデル化合物の新展開を目指して,マンガン多核錯体の配位子開発を進めている。マンガン多核錯体は合成の制御が非常に難しく,単純な配位子を用いた自己集積的な方法以外ではほとんど成功例がない。しかし,天然の光化学系IIではタンパク質配位子を用いて多核錯体を作っており,配位子設計を正しく行えばマンガン多核錯体の合理的な合成は原理的に可能でなければならない。また,正しく分子設計を行うことで,天然のタンパク質複合体に見られるような特異的な分子間相互作用に基づく機能発現も期待できる。このような方向を目指して,ナノサイズ有機分子の分子設計と合成に今後も努力していく。

## 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) お椀型共役化合物「バッキーボウル」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、ボウルキラリティを有する  $C_3$  対称バッキーボウルのエナンチオマー合成に関する研究を主に行った。その結果、パラジウムナノクラスター触媒を用いたハロアルケン類の位置・立体選択的環化三量化反応の開発に成功し、共通中間体となる化合物の一般的合成手法を確立することが出来た。
- 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を用いると、ギ酸アンモニウム存在下、酸素の過酸化水素への変換反応が効率よく進行することを見出した。また、1.3 ~ 9.5 nm までの様々な平均粒径を有するクラスターの選択的調製方法を確立し、これらのクラスターを用いて、昨年報告したアルコール酸素酸化反応に関して極めて顕著なサイズ依存性を見出した。

### B-1) 学術論文

**M. T. S. RITONGA, H. SHIBATANI, H. SAKURAI, T. MORIUCHI and T. HIRAO**, "Crystal Structure and Complexation Behavior of Quinonediimine Bearing Thiadiazole Unit," *Heterocycles* **68**, 829–836 (2006).

**H. SAKURAI, H. TSUNOYAMA and T. TSUKUDA**, "Aerobic Oxidation Catalyzed by Gold Nanoclusters as *quasi*-Homogeneous Catalysts: Generation of Hydrogen Peroxide Using Ammonium Formate," *Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.* **31**, 521–524 (2006).

**H. TSUNOYAMA, H. SAKURAI and T. TSUKUDA**, "Size Effect on Catalysis of Gold Clusters Dispersed in Water for Aerobic Oxidation of Alcohol," *Chem. Phys. Lett.* **429**, 528–532 (2006).

**H. MIZUNO, H. SAKURAI, T. AMAYA and T. HIRAO**, "Oxovanadium(V)-Catalyzed Oxidative Biaryl Synthesis from Organoborate under  $O_2$ ," *Chem. Commun.* 5042–5044 (2006).

### B-4) 招待講演

櫻井英博,「金ナノクラスターを擬均一系触媒として用いる空気酸化反応」第4回化学・材料研究セミナー, 福岡, 2006年1月.

櫻井英博,「お椀型共役化合物——バッキーボウルの化学」分子研コロキウム, 岡崎, 2006年2月.

H. SAKURAI, “Synthesis and Properties of Sumanene and Related Buckybowls,” Department Seminar, M. S. University of Baroda, Vadodara (India), February 2006.

H. SAKURAI, “Two Topics of Nanoscience for Organic Chemistry ‘Buckybowls and Au Nanocluster,” Department Seminar, National Chemical Laboratory, Pune (India), February 2006.

H. SAKURAI, “Synthesis and Properties of Sumanene and Related Buckybowls,” Department Seminar, Indian Institute of Science, Bangalore (India), March 2006.

H. SAKURAI, “Two Topics of Nanoscience for Organic Chemistry ‘Buckybowls and Au Nanocluster,” Department Seminar, Indian Institute of Chemical Technology, Hyderabad (India), March 2006.

櫻井英博,「お椀型共役化合物「バッキーボウル」の合成戦略」特定領域研究「動的錯体の自在制御化学」終了年度公開シンポジウム, 東京, 2006年6月.

H. SAKURAI, “Synthetic Strategy of Buckybowls,” International COE Symposium for Young Scientists on Frontiers of Molecular Science, Tokyo, August 2006.

櫻井英博,「お椀型共役化合物「バッキーボウル」の合成戦略」第22回 若手化学者のための化学道場, 総社, 2006年9月.

H. SAKURAI, “Application of Metal Nanocluster Catalysts to Ring Construction Reactions,” 2006 Sino-Japanese Symposium on Green Chemical Synthesis, Beijing (China), October 2006.

#### B-5) 特許出願

特願 2006-305048,「触媒作用を有する金担持微粒子、その製造方法及びそれを用いた酸化方法」青島貞人、金岡鍾局、矢木直人、福山由希子、櫻井英博、佃達哉、角山寛規(国立大学法人大阪大学、大学共同利用機関法人自然科学研究機構、丸善石油(株)) 2006年.

国際出願 PCT/JP2006/323287,「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) 2006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),「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)<sub>6</sub>/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),「金属カルペノイドの実用的発生活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).

特定領域研究(公募研究)「3次元リンク実現のためのお椀型化合物の合成」櫻井英博(2006年-2007年).

特定領域研究(公募研究)「金ナノクラスターの触媒活性を実現するためのマトリクス開発」櫻井英博(2006年-2007年).

特定領域研究(公募研究)「バッキーボウルの自在構築」櫻井英博(2006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ーラーメイド合成」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3年目に入り,バッキーボウルの化学に関しては,一連の当初ターゲットの合成がそれぞれ最終段階に入りつつある。化合物あつての物質科学研究なので,なるべく早い段階で分子研究の(本当の意味での)新物質を世に送り出したいと考えている。どのターゲットもまだまだ困難な段階を残しているが,各メンバーの実力を発揮して乗り越えていってもらえるものと確信している。

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,現在印刷中の論文を含めて,一通りのまとめが出来たのではないかと考えている。ただし,最近になって金クラスターの新たな触媒機能を見出しており,また他大学との協力研究による応用研究も順調に進行しており,今後も双方の得意分野で十分な進展が期待できる。

今年度は最低限の測定機器もそろい,一通りの実験を自前で出来る環境を整えることが出来た。またインド国立化学技術研究所(IICT)とのバッキーボウルの理論計算に関する共同研究も開始した。今後は人材の確保が重要課題になると考えている。

## 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
- c) 和周波顕微分光装置の試作
- d) チタニア表面での金ナノクラスターの構造と反応

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 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 K におけるコヒーレント振動（K-Pt 伸縮振動モード）の減衰挙動に関する被覆率依存性を詳細に調べた。その結果 K がとる超構造に応じて K-Pt 伸縮振動の周波数が異なること、コヒーレント振動の位相緩和には K 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。
- b) 時間分解和周波分光法により Pt(111) 表面と氷の超薄膜との界面に吸着した CO 単分子層の振動励起・失活ダイナミックスについて研究を行った。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・脱励起のダイナミッ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。水分子と相互作用することにより、CO はより金属のホット電子との相互作用が強くなることを見出した。
- c) 可視・赤外和周波は、中心対称性が崩れた場所で発生するため、これを利用した分光法は表面や界面に鋭敏な振動分光として、また、不整炭素を持つキラルな分子への応用など幅広い応用が考えられる。そこで、より局所的なプローブとしてこの分光法を用いるために和周波顕微分光装置を開発、試作した。これを用いて、金基板上的チオール自己組織化膜のパターンの観測に成功した。
- d) チタニア表面上の金ナノクラスターは CO の酸化反応などにおいて触媒能を示すことで注目されている。表面科学的な研究では通常チタニア単結晶上に金を真空蒸着させることにより金ナノクラスターを生成しているが、ここでは佃グループとの共同研究により湿式で調整し、サイズ選択されたアルカンチオールを保護基とした金ナノクラスターをチタニア単結晶表面にコートし、これを真空中で酸素、および、水素プラズマエッチングにより保護膜を除去する方式をとった。走査型トンネル顕微鏡により、チオール保護基を持った金ナノクラスターはチタニア表面とは弱い相互作用をするが、保護基を除去すると表面と強く相互作用することが観察された。また、酸素エッチング時に金ナノクラスター間の部分的な融合が起きることも明らかになった。

B-1) 学術論文

D. YAMAGUCHI, K. WATANABE, N. TAKAGI and Y. MATSUMOTO, "Photochemistry of Cyclohexane on Cu(111)," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8**, 179–185 (2006).

**M. FUYUKI, K. WATANABE and Y. MATSUMOTO**, “Coherent Surface Phonon Dynamics at K-Covered Pt(111) Surfaces Investigated by Time-Resolved Second Harmonic Generation,” *Phys. Rev. B* **74**, 195412 (6 pages) (2006).

B-3) 総説、著書

**Y. MATSUMOTO and K. WATANABE**, “Coherent Vibrations of Adsorbates Induced by Femtosecond Laser Excitation,” *Chem. Rev.* **106**, 4234–4260 (2006).

B-4) 招待講演

**Y. MATSUMOTO**, “Coherent excitation and control of surface phonons,” American Physical Society March Meeting, Baltimore (U.S.A.), March 2006.

松本吉泰, 「表面光化学における超高速ダイナミクス」日本化学会春季年会, 船橋, 2006年3月.

**K. WATANABE and Y. MATSUMOTO**, “Coherent nuclear motions at alkali covered metal surfaces,” 46th IUVSTA Workshop & 5th International Symposium on Ultrafast Surface Dynamics, Abashiri (Japan), May 2006.

**K. WATANABE, M. FUYUKI and Y. MATSUMOTO**, “Ultrafast vibrational dynamics of adsorbates on metal surfaces,” Into-Japan Joint Workshop on New Frontiers of Molecular Spectroscopy, Kobe (Japan), September 2006.

**Y. MATSUMOTO**, “Thermal and Photochemical Reactivity of Oxygen Atoms on Gold Nanocluster Surfaces,” The University of Tokyo International Symposium and The tenth ISSP International Symposium (ISSP-10) on Nanoscience at Surfaces, Kashiwa (Japan), October 2006.

松本吉泰, 「フェムト秒非線形分光による表面ダイナミクスの観測」NIMSナノ計測センター研究成果発表会, つくば, 2006年10月.

松本吉泰, 「時間分解非線形分光による表面超高速ダイナミクスの観測」理研シンポジウム, 和光, 2006年11月.

渡邊一也, 「表面吸着種の振動コヒーレンス」第25回吸着分子の分光学的研究セミナー, 2006年12月.

B-6) 受賞、表彰

Hanse Wissenschaftskolleg (Fellow of Hanse Institute for Advanced Studies), Germany (2002).

日本化学会学術賞 (2006).

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 Interanational 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 (2004-2006).

5th Symposium on Ultrafast Surface Dynamics 組織委員長 (2004-2006).

The tenth ISSP International Symposium (ISSP-10) on Nanoscience at Surfaces 組織委員 (2005-2006).

分子科学研究会 幹事 (2005-2006).

第22回化学反応討論会実行委員長 (2005-2006).

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).

日本学術振興会科学研究費専門委員 (2006).

科学技術振興機構「戦略的創造研究推進事業」領域アドバイザー (2006- ).

日本学術会議連携会員 (2006- ).

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-8) 他大学での講義、客員

名古屋大学大学院理学研究科,「表面における光化学と超高速過程(物理化学特別講義4)」2006年7月13日-14日.

#### B-9) 学位授与

山口 大,「金属表面におけるシクロヘキサンの光化学および光励起メカニズムに関する研究」2006年3月,博士(理学)

#### 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。さらに、和周波発生分光などを用いた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ピーやマイクロスコピー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) 有機保護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) 金 (I) チオール錯体の化学還元によって得られる金クラスターのサイズ系列が、チオールの分子骨格に応じて変化することを見出した。この結果は、金クラスターの成長過程とチオール保護による成長停止過程が競合し、速度論的な要因によってコアサイズが決定されることを表している。
- a2) ポリマー保護金クラスターを前駆体としてアルカンチオール保護金クラスターを調製した。サイズ排除クロマトグラフィーで分画した後質量分析を行ったところ、55 量体など従来の金 (I) チオール錯体の化学還元では得られない魔法数クラスターが単離された。この結果は、ポリマー存在下とチオール存在下での金コアの成長過程の違いによるものと考えられる。
- a3) チオール保護金クラスターを大過剰のチオール分子と反応させると、一般にはコアのエッチングが観測されるが、魔法数クラスター  $\text{Au}_{25}(\text{SR})_{18}$  のみはコアがエッチングされることなくチオール交換反応が起こることが明らかになった。
- a4) 組成が規定されたグルタチオン保護金クラスターの磁気円二色性測定を行い、金がスピン偏極していることを見出した。 $\text{Au-S}$  結合あたりの磁気モーメントがサイズに依存せずほぼ一定であることから、界面での電子移動によって生成した  $\text{Au}5d$  軌道のホールが磁性の起源であると結論した。
- a5) 代表的な軸不斉配位子である BINAP で保護された  $\text{Au}_{11}$  量体の合成に成功した。金コアの光学遷移に付随した円二色性が観測されたことから、ホスフィン 2 座配位によってコアが変形しているものと推定される。
- a6) ホスフィン保護  $\text{Au}_{11}$  量体とアルカンチオールの反応によって、 $\text{Au}_{25}$  量体の合成に成功した。単結晶 X 線構造解析の結果、二つの正二十面体  $\text{Au}_{13}$  量体がチオールによって架橋・安定化された cluster-of-cluster 構造を持つことが明らかになった。
- a7) アルカンチオール保護金クラスターを電気化学的な方法で酸化あるいは還元し、エレクトロスプレーイオン化質量分析法によって非破壊的に同定することが可能となった。
- 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) ポリマー保護金クラスター ( 平均サイズ 1.3 nm ) が、アルコール酸化やホモカップリング反応に対して広い適用性を持つことを明らかにした。

b2)金クラスターに銀を少量(10%以下)ドーブするとアルコール酸化反応の活性が増大した。XPSの結果から、金クラスター内の電子移動によって金が負電荷を帯びることが活性増大の直接的な要因であることを明らかにした。

b3)第0～第3世代のホスフィンデンドロンで保護された金クラスターを合成し、触媒活性を検討した。

#### B-1) 学術論文

T. MAEYAMA, Y. NEGISHI, T. TSUKUDA, I. YAGI and N. MIKAMI, "Electron Localization in Negatively Charged Formamide Clusters Studied by Photodetachment Spectroscopy," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8**, 827–833 (2006).

H. SAKURAI, H. TSUNOYAMA and T. TSUKUDA, "Aerobic Oxidation Catalyzed by Gold Nanocluster as a Quasi-Homogeneous Catalyst: Generation of Hydrogen Peroxide Using Ammonium Formate," *Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.* **31**, 521–524 (2006).

M. IMAMURA, T. MIYASHITA, A. TANAKA, H. YASUDA, Y. YANAGIMOTO, Y. NEGISHI and T. TSUKUDA, "Spectroscopic Investigation of Dendrimer-Encapsulated Gold Nanoclusters," *Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.* **31**, 517–520 (2006).

H. TSUNOYAMA, Y. NEGISHI and T. TSUKUDA, "Chromatographic Isolation of "Missing" Au<sub>55</sub> Clusters Protected by Alkanethiolates," *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 6036–6037 (2006).

Y. YANAGIMOTO, Y. NEGISHI, H. FUJIHARA and T. TSUKUDA, "Chiroptical Activity of BINAP-Stabilized Undecagold Clusters," *J. Phys. Chem. B* **110**, 11611–11614 (2006).

Y. NEGISHI, Y. TAKASUGI, S. SATO, H. YAO, K. KIMURA and T. TSUKUDA, "Kinetic Stabilization of Growing Gold Clusters by Passivation with Thiolates," *J. Phys. Chem. B* **110**, 12218–12221 (2006).

Y. NEGISHI, H. TSUNOYAMA, M. SUZUKI, N. KAWAMURA, M. M. MATSUSHITA, K. MARUYAMA, T. SUGAWARA, T. YOKOYAMA and T. TSUKUDA, "X-Ray Magnetic Circular Dichroism of Size-Selected, Thiolated Gold Clusters," *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 12034–12035 (2006).

H. TSUNOYAMA, H. SAKURAI and T. TSUKUDA, "Size Effect in Aerobic Alcohol Oxidation Catalyzed by Gold Clusters Dispersed in Water," *Chem. Phys. Lett.* **429**, 528–532 (2006).

#### B-3) 総説、著書

佃 達哉、角山寛規、柳本泰、根岸雄一、「チオール保護金クラスターの精密合成：サイズ特異的な構造・物性の解明に向けて」*ナノ学会会報* **4**, 53–58 (2006).

佃 達哉、「有機保護金ナノクラスターのサイズ特異的な物性と機能」*Electrochemistry (Tokyo, Jpn.)* **74**, 346–350 (2006).

#### B-4) 招待講演

根岸雄一、「チオール単分子で保護された金クラスターの化学組成と安定性・構造」材料・界面部会共通基盤技術シンポジウム, 京都, 2006年1月.

佃 達哉、「金属クラスターの科学」, 核融合科学研究会第17回講演会, 土岐, 2006年2月.

佃 達哉、「有機保護金クラスターの精密合成とサイズ特異的な機能」1ナノメートル構造研究会, 東京, 2006年3月.

T. TSUKUDA, "Precision Synthesis of Thiolated Gold Clusters," 6th Symposium on Application of Molecular Spins: From Nanomagnets to Biological Spin Systems, Nagoya, March 2006.

佃 達哉,「有機保護金属クラスターの精密系統合成法の開発とサイズ特異的機能の探索」分子科学研究会, 岡崎, 2006年6月.

佃 達哉,「水中に分散した金クラスターの空気酸化触媒作用」第22回化学反応討論会, 岡崎, 2006年6月.

佃 達哉,「チオール保護金クラスターの精密合成——サイズ特異的な構造・物性の解明に向けて——」第39回有機金属若手の会夏の学校, 京都, 2006年7月.

T. TSUKUDA, "Size-Specific Properties of Monolayer-Protected Gold Clusters," International COE Symposium for Young Scientists on Frontiers of Molecular Science, Tokyo, August 2006.

佃 達哉,「有機保護金クラスター」1 ナノメートル構造研究会, 仙台, 2006年9月.

T. TSUKUDA, "Aerobic Oxidations Catalyzed by Polymer-Supported Gold Clusters," CREST 環境ナノ触媒領域ワークショップ「グリーン有機合成の最前線」Kyoto, October 2006.

T. TSUKUDA, "Aerobic Oxidations Catalyzed by Polymer-Supported Gold Clusters," Symposium on Green Chemical Synthesis, Beijing (China), October 2006.

T. TSUKUDA, "Structure and Properties of Gold Clusters Stabilized by Organic Molecules," Sokendai Asian Winter School, Okazaki, November 2006.

#### B-6) 受賞、表彰

佃 達哉, 第11回井上研究奨励賞 (1995).

根岸雄一, ナノ学会第4回大会若手講演賞 (2006).

角山寛規, ナノ学会第4回大会若手講演賞 (2006).

佃 達哉, GOLD2006 ベストプレゼンテーション賞 (2006).

#### 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 (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-8) 他大学での講義、客員

筑波大学,「物理化学特論」2006年1月12日-13日.

東北大学学際科学国際高等研究センター, 客員助教授, 2006年10月-.

#### B-10)外部獲得資金

特定領域研究「元素相乗系化合物の化学(領域代表:宮浦憲夫)」,「配位子保護金属クラスターの組成制御と機能探索」 佃 達哉 (2006年-2009年).

若手研究(B),「金属サブナノクラスターにおける触媒機能のサイズ依存性と機能発現機構の解明」 根岸雄一 (2006年-2008年).

第7回貴金属に関わる研究助成金制度 MMS 賞,「金サブナノクラスターの湿式調製法の開発および水中触媒への応用」 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

チオール保護金属クラスターの電子構造・安定性・物性と化学組成の相関については,着実に基礎情報が収集されつつある。しかし,これらの相関を統一的に理解するためには幾何構造の解明は不可欠である。チオール保護金クラスターの単結晶X線構造解析という未踏の課題に取り組みたい。一方,金クラスターの触媒機能に関しては,2 nm 以下で空気酸化反応に対して高い活性を示すことがわかったので,クラスターサイズを厳密に制御することに注力したい。

## 先導分子科学研究部門（客員・流動研究部門）

加 藤 晃 一（客員教授）（2004 年 10 月 16 日着任）<sup>\*</sup>）

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) 安定同位体標識法と超高磁場 NMR 計測を組み合わせることにより糖タンパク質の NMR 解析を行った。糖タンパク質としては免疫グロブリン G (IgG) の Fc 領域を計測・解析の対象とし、帰属の確定した糖鎖・ポリペプチド主鎖由来のシグナルをプローブとして用いて、糖鎖のトリミングに伴う Fc 領域の構造変化を追跡した。その結果、糖鎖を 2 糖にまで短鎖化すると Fc レセプターの結合部位であるヒンジ領域下流に構造変化が誘起され、レセプター結合能が消失することが明らかとなった。一方、生来的に特定の高次構造を形成していないタンパク質は一般に NMR シグナルの重なりが激しく解析が困難であるが、超高磁場 NMR 装置を積極的に活用することにより、そうした “intrinsically disordered protein” の分光学的研究の可能性は大きく広がる。本年度は、典型的な intrinsically disordered protein である  $\alpha$ -synuclein の抗体エпитープ部位を決定するとともに部位特異的なリン酸基修飾に伴う分子内相互作用を探索した。
- b) 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) の基質結合部位にあたる  $b'$   $a'$  ドメインを対象として、ドメイン間の相互作用の解析を試みた。そのため、920MHz の NMR 装置を用いて得られた残余双極子カップリング値と X 線小角散乱のデータを利用して、還元状態の  $b'$   $a'$  ドメインの立体構造計算を行った。得られた立体構造より、 $a'$  ドメインの活性部位近傍と  $b'$  ドメインの疎水性領域 ( $\beta$ 3 ストランド,  $\alpha$ 3 ヘリックス) が還元条件下において近接していることが判明した。また、最近同定されたユビキチン様修飾分子である Ufm1 の水溶液中における立体構造とダイナミクスを 920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いて解析した。Ufm1 の立体構造は、ユビキチンや NEDD8 と類似していたが、 $^{15}\text{N}$  の緩和解析により、C 末端とその近傍が揺らいでいることが明らかとなった。これらの部位はユビキチンや他のユビキチン様修飾分子において様々なリガンド結合部位に対応することから、この揺らぎはこれらのタンパク質の幅広いリガンド特異性との関係が示唆された。
- c) 固体 NMR は、水に不溶性の生体高分子の構造解析に対して威力を発揮する。多糖をモデル化合物として CP-MAS スペクトルを測定した。コンタクトタイムに依存した CP-MAS スペクトル変化に基づいて多糖の運動性に関する情報を得ることができた。

B-1) 学術論文

M. NAKANO, C. MURAKAMI, Y. YAMAGUCHI, H. SASAKAWA, T. HARADA, E. KURIMOTO, O. ASAMI, T. KAJINO and K. KATO, “NMR Assignments of the  $b'$  and  $a'$  Domains of Thermophilic Fungal Protein Disulfide Isomerase,” *J. Biomol. NMR* **36**, 44 (2006).

- R. KITAHARA, Y. YAMAGUCHI, E. SAKATA, T. KASUYA, K. TANAKA, K. KATO, S. YOKOYAMA and K. AKASAKA**, “Evolutionally Conserved Intermediates between Ubiquitin and NEDD8,” *J. Mol. Biol.* **363**, 395–404 (2006).
- Y. YAMAGUCHI, M. NISHIMURA, M. NAGANO, H. YAGI, H. SASAKAWA, K. UCHIDA, K. SHITARA and K. KATO**, “Glycoform-Dependent Conformational Alteration of the Fc Region of Human Immunoglobulin G1 as Revealed by NMR Spectroscopy,” *Biochim. Biophys. Acta* **1760**, 693–700 (2006).
- H. SASAKAWA, E. SAKATA, Y. YAMAGUCHI, M. KOMATSU, K. TATSUMI, E. KOMINAMI, K. TANAKA and K. KATO**, “Solution Structure and Dynamics of Ufm1, a Ubiquitin-fold Modifier 1,” *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **343**, 21–26 (2006).
- S. TASHIRO, M. TOMINAGA, Y. YAMAGUCHI, K. KATO and M. FUJITA**, “Peptide Recognition. Encapsulation and  $\alpha$ -Helix Folding of 9-residue Peptide within a Hydrophobic Dimeric Capsule of a Bowl-shaped Host,” *Chem. Eur. J.* **12**, 3211–3217 (2006).
- C. A. SANDOVAL, Y. YAMAGUCHI, T. OHKUMA, K. KATO and R. NOYORI**, “Solution Structures and Behavior of Trans-RuH( $\eta^1$ -BH<sub>4</sub>)(binap)(1,2-diamine) Complexes,” *Magn. Reson. Chem.* **44**, 66–75 (2006).
- S. TASHIRO, M. TOMINAGA, Y. YAMAGUCHI, K. KATO and M. FUJITA**, “Folding a De Novo Designed Peptide into an  $\alpha$ -Helix through Hydrophobic Binding by a Bowl-Shaped Host,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **45**, 241–244 (2006).

#### B-4) 招待講演

- K. KATO**, “NMR Structural Biology of Molecular Recognition by Ubiquitin Ligases,” An AACR Special Conference in Cancer Research, Florida (U.S.A.), January 2006.
- 加藤晃一, 「構造グライコミクスのアプローチ」お茶の水女子大学「魅力ある大学院教育」イニシアティブ「生命情報学を使いこなす女性人材の育成」プログラムお茶の水女子大学総合生命科学, 東京, 2006年1月.
- 加藤晃一, 「超高磁場NMRを用いたタンパク質・複合糖質の高次構造解析」蛋白質水溶液構造研究会, つくば, 2006年3月.
- 加藤晃一, 「糖鎖構造生物学: ポスト構造ゲノミクスの課題」お茶の水女子大学糖鎖科学研究教育センター 公開講演会, 東京, 2006年4月.
- 加藤晃一, 「構造グライコプロテオミクスへのNMRアプローチ」第6回日本蛋白質科学会, 京都, 2006年4月.
- K. KATO, H. SASAKAWA and Y. YAMAGUCHI**, “920 MHz Ultra-High Field NMR Analysis of Proteins and Glycoconjugates,” ICOB-5 & ISCNP-25 IUPAC International Conference on Biodiversity and Natural Products, Kyoto (Japan), July 2006.
- 加藤晃一, 山口芳樹, 笹川拓明, 神谷由紀子, 矢木宏和, 塚越晴子, 堀川有希, 「超高磁場NMRを利用した糖鎖構造生物学」第4回グライコミクス夏季シンポジウム, 浜松, 2006年8月.
- 加藤晃一, 笹川拓明, 中野路子, 杉原隆広, 山口芳樹, 「920MHz NMR 装置を用いた生体高分子の構造解析」第55回高分子討論会, 富山, 2006年9月.
- 加藤晃一, 「タンパク質の細胞内品質管理システムのNMR 構造生物学」分子科学研究所コロキウム(第790回) 岡崎, 2006年10月.
- 加藤晃一, 「タンパク質社会における糖鎖の役割」お茶の水女子大学糖鎖科学研究教育セミナー特別シンポジウム「分子と認識の生命ドグマ」, 東京, 2006年10月.
- 加藤晃一, 「細胞内のタンパク質社会の理解を目指したNMR 構造生物学」第14回日本バイオイメーjing学会学術集会, 盛岡, 2006年11月.

K. KATO, "NMR Views of Protein Conjugation with Ubiquitin and Sugar," The Fourth NIBB-EMBL Symposium. Biology of Protein Conjugation: Structure and Function, Okazaki (Japan), December 2006.

B-5) 特許出願

特願 2006-104554, 「肝細胞癌マーカー及び肝細胞癌の検査法」, 溝上雅史、加藤晃一、高橋禮子、小林淑子(名古屋市立大学、(株)グライエンス) 2006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

日本バイオイメーシング学会 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

お茶の水女子大学大学院人間文化研究科, 「生物物理化学特論」 2006年 4月10日-11日.

名古屋大学大学院工学研究科, 「糖鎖科学講義」 2006年 9月13日-14日.

お茶の水女子大学, 客員教授, 2006年 6月-.

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・カルレティ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)水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-2006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).

ノバルティス研究奨励金,「NMR 構造生物学によるパーキンソン病発症メカニズムの解明」加藤晃一 (2006年).

基盤研究(B),「タンパク質分解における糖鎖修飾系とユビキチン修飾系のクロストークの構造的基盤」,加藤晃一 (2006年  
-2007年).

#### C) 研究活動の課題と展望

生体高分子溶液を対象に超高磁場NMR 分光研究のための基盤は整備されたことを受けて,より精密な構造解析を指向した  
応用研究を展開する。例えば,磁場配向性や常磁性効果を利用した糖鎖の系統的なコンフォメーション解析,微細な同位体  
シフトを利用した生体高分子の構造情報の抽出,ペプチド・糖鎖・脂質からなる超分子系を対象とする計測・解析技術の開  
発などを試みる。

\* ) 本務は名古屋市立大学大学院薬学研究科教授

## 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 年度の大幅な改造により世界最高レベルの高性能光源へと生まれ変わった光源加速器 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。この問題に対する究極的な解決策となるトップアップ入射の導入に向けて準備を進めている。今年度は入射器のフルエネルギー化と放射線遮蔽の増強を実現した。現在、入射路のエネルギー増強に向けて準備を進めている。光源リングでは4台目となるアンジュレータとして可変偏光アンジュレータ建設し設置した。真空紫外領域で水平・垂直・左右円偏光を発生できる。早期の利用実験開始を目指して、現在立上調整中である。
- 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。最短波長は 215 nm に達し、平均出力も深紫外領域で 1 W を超えるまでになった。既に所内外の複数のユーザーグループが利用実験を開始しており、成果も挙がり始めている。一方、将来の高品質電子ビームを使った短波長コヒーレント光生成の基礎研究として、電子ビームを用いたコヒーレント高調波発生の研究をフランスのグループと共同で進めている。これまでに TiSa の三倍波が確認され、より高次光の観測に向けて準備を進めている。
- 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、更に研究を進めている。ある種のビーム不安定性によると思われるパースト的な放射についてはビーム力学的な観点から、また、外部から導入した極短パルスレーザーによる手法については、実用化を目指して研究を進めている。

B-1) 学術論文

M. LABAT, M. E. COUPRIE, M. HOSAKA, A. MOCHIIHASHI, M. KATOH and Y. TAKASHIMA, "Longitudinal and Transverse Heating of a Electron Bunch Induced by a Storage Ring Free Electron Laser," *Phys. Rev. ST AB* **9**, 100701 (14 pages) (2006).

S. KIMURA, E. NAKAMURA, T. NISHI, Y. SAKURAI, K. HAYASHI, J. YAMAZAKI and M. KATOH, "Infrared and Terahertz Spectromicroscopy Beam Line BL6B(IR) at UVSOR-II," *Infrared Phys. Tech.* **49**, 147–151 (2006).

#### B-2) 国際会議のプロシーディングス

**S. BIELAWSKI, C. SZWAJ, C. BRUNI, D. GARZELLA, G. -L. ORLANDI, M. E. COUPRIE, M. HOSAKA, A. MOCHIHASHI, Y. TAKASHIMA, M. KATOH, G. De NINNO, M. TROVO and B. DIVIACCO**, “Feedback Control of Dynamical Instabilities in Classical Lasers and FELs,” *Proceedings of the 27<sup>th</sup> Int. Free Electron Laser Conference*, 391–397 (2006).

**M. HOSAKA, A. MOCHIHASHI, M. KATOH, Y. TAKASHIMA, M. LABAT and M. E. COUPRIE**, “Storage Ring Free Electron Laser Saturation for Chromatic Optics,” *Proceedings of the 27<sup>th</sup> Int. Free Electron Laser Conference*, 399–405 (2006).

**M. LABAT, M. E. COUPRIE, M. HOSAKA, A. MOCHIHASHI, M. KATOH and Y. TAKASHIMA**, “Detuning Curve Analysis on the UVSOR2 Free Electron Laser,” *Proceedings of the 27<sup>th</sup> Int. Free Electron Laser Conference*, 451–454 (2006).

#### B-4) 招待講演

**M. KATOH**, “Upgrade of UVSOR,” The first Workshop of the Asia/Oceania Forum for Synchrotron Radiation Research, Tsukuba (Japan), November 2006.

#### 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- ).

日本放射光学会評議員 (2006- ).

##### 学会誌編集委員

放射光学会誌編集委員 (2000-2002).

##### 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 (2000-2005).

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-.

名古屋大学大学院工学研究科, 客員教授, 2006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 は2003年の大幅な改造を中心とする一連の高度化により、低エネルギーのシンクロトロン光源としては世界的にも最高レベルの性能を有するに至った。現在、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。ビーム寿命の問題を究極的に解決するためのトップアップ運転の実現に向けて、シンクロトロンのフルエネルギー化を実施し、放射線遮蔽増強も概ね完了した。今後、入射効率の向上、放射線の低減に関する研究開発に取り組み、早期のトップアップ運転実現を目指す。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順調に進んでおり、4台目となる可変偏光型のアンジュレータの立上調整中である。更に、2本のアンジュレータが設置可能であるが、予算的な問題で建設の目処は立っていない。施設の性能を100%引き出すために、早期の実現が望まれる。

自由電子レーザーに関しては、深紫外での高出力発振に成功し、利用実験が始まっている。安定性、実験ステーションへのレーザー光の輸送など、現実的な改善点が見え始めており、今後、精力的に取り組んで行きたい。利用実験の拡大と並行して、より短波長の真空紫外域での発振実現を目指して研究を進めていく。

極短パルスレーザーと蓄積リングの電子ビームを併用した、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が、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。大強度化、安定化が今後の課題である。自由電子レーザー光、シンクロトロン光、コヒーレントテラヘルツ光の同期性を活用した利用法の開拓も課題である。

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
- c) 電子多重同時計測法による原子分子の多重光電離過程の研究

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、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や、電子 - イオン多重同時計測装置の開発研究を行っている。このピ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を行う方針で研究を進めている。
- b) これまで行ってきた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する研究を発展させるため、多電子励起状態の電子構造とその崩壊過程を詳細に調べる実験研究を行っている。具体的には、準安定解離種生成曲線の高分解能測定、光電子分光法による部分断面積測定、共鳴オージェ電子スペクトルの光エネルギー依存性の観測である。これらを通じて、分子の多電子励起状態の崩壊過程では、自動イオン化とオージェ電子放出、更には解離過程の全てが競合しており、非常に複雑な脱励起過程を経ることが明らかになってきた。
- c) 原子分子の多重光電離過程の解明を目指して開発された磁気ボトル型電子エネルギー分析器を利用した共同研究を、KEK-PF 及びフランス LCPMR の研究グループと一緒にやっている。一つの光子の吸収により内殻電子と価電子が同時に放出される過程、或いは光二重電離過程における段階的過程の検出に成功した。更に、内殻電子が二つ放出される過程や三重光電離過程の観測にも成功し、データ解析作業を進めている。

B-1) 学術論文

Y. HIKOSAKA, T. AOTO, P. LABLANQUIE, F. PENENT, E. SHIGEMASA and K. ITO, "Experimental Investigation of Core-Valence Double Photoionization," *Phys. Rev. Lett.* **97**, 053003 (4 pages) (2006).

Y. HIKOSAKA, T. AOTO, P. LABLANQUIE, F. PENENT, E. SHIGEMASA and K. ITO, "Auger Decay of Ne 1s Photoionization Satellites Studied by a Multi-Electron Coincidence Method," *J. Phys. B* **39**, 3457-3464 (2006).

Y. HIKOSAKA and E. SHIGEMASA, "Anisotropic Fragment Emission on Valence Photoionization of CF<sub>4</sub>," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **152**, 29-32 (2006).

T. AOTO, K. ITO, Y. HIKOSAKA, A. SHIBASAKI, R. HIRAYAMA, N. YAMAMONO and E. MIYOSHI, "Inner-Valence States of N<sub>2</sub><sup>+</sup> and the Dissociation Dynamics Studied by Threshold Photoelectron Spectroscopy and Configuration Interaction Calculation," *J. Chem. Phys.* **124**, 234306 (6 pages) (2006).

S. SHEINERMAN, P. LABLANQUIE, F. PENENT, J. PALAUDOUX, J. H. D. ELAND, T. AOTO, Y. HIKOSAKA and K. ITO, “Electron Correlation in Xe 4d Auger Decay Studied by Slow Photoelectron-Auger Electron Coincidence Spectroscopy,” *J. Phys. B* **39**, 1017–1034 (2006).

T. KANEYASU, T. AOTO, Y. HIKOSAKA, E. SHIGEMASA and K. ITO, “Coster-Kronig Decay of the 2s Hole State in HCl Observed by Sub-Natural Linewidth Auger Electron Spectroscopy,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **153**, 88–91 (2006).

T. GEJO, E. NAKAMURA and E. SHIGEMASA, “Development of Symmetry-Resolved Zero-Kinetic-Energy Photoelectron Spectroscopy for Probing Multielectron Processes,” *Rev. Sci. Instrum.* **77**, 036112 (3 pages) (2006).

D. CÉOLIN, C. MIRON, K. LE GUEN, R. GUILLEMIN, P. MORIN, E. SHIGEMASA, P. MILLÉ, M. AHMAD, P. LABLANQUIE, F. PENENT and M. SIMON, “Photofragmentation Study of Hexamethyldisiloxane Following Core Ionization and Direct Double Ionization,” *J. Chem. Phys.* **123**, 234303 (8 pages) (2005).

#### B-4) 招待講演

繁政英治, 「中性準安定解離種で見る多電子励起状態とイオン化ダイナミクス」原子衝突研究協会第31回研究会, 岡崎, 2006年8月.

#### 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 (2005-2006).

日本放射光学会評議員 (2006- ).

##### 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13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副委員長 (1999).

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).

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).

第22回化学反応討論会実行委員 (2006).

第20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 (2006).

##### 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 (2005-2006).

##### 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

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、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、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で検出できる可能性がある。近年、我々は、負イオンフラグメントの検出に着目し、高効率な検出を目指した画像観測を建設した。しかし、我々の専用ラインであるBL4Bでは、光強度を優先すると分解能が不足して観測が困難であるため、この装置をSPring-8に持ち込んだ実験研究も開始し、漸く成果が出始めてきたところである。以前より、予備的な実験はBL4Bで集中的に実施し、分解能や光強度が必要な実験はアンジュレータービームラインで行うように棲み分けを行っているが、現状ではビームタイムの確保や効率的な装置の運用が難しい。そこで、2008年度からの利用開始を目指して、我々が主として利用する新しいアンジュレーターライン、BL6Uの建設計画を立案した。現在、KEK-PFの研究者の協力を得ながら分光器の設計を進めている。

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固体および薄膜の電子状態の研究
- 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固体および薄膜の電子状態の研究：  
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。本年度実施した研究内容は、以下の通りである。

高圧下テラヘルツ分光による SmS の圧力による絶縁体・金属転移の電荷不安定性

量子臨界点近傍の物質 YbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>, YbIr<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>, CeCu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> の赤外・テラヘルツ反射分光による電荷ダイナミクス

重い電子系 CeIn<sub>3-x</sub>Sn<sub>x</sub> の電子状態の cf 混成効果

強相関層状物質 CeTe<sub>2</sub> の CDW の三次元効果

強磁性半導体 EuO 単結晶薄膜の磁気転移に伴う電子状態変化の直接観測

- b) 放射光を使った新しい分光法の開発：これまでに開発してきた UVSOR-II における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 における多重極限環境下赤外分光法は順調に結果を出している。今年度は, UVSOR-II BL7U に直入射領域 ( $h\nu = 7\sim 40$  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を建設・評価を行った。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設計し, 実際にエネルギー分解能 ( $E/\Delta E$ ) が  $10^4$  以上でかつ光子密度が  $10^{11}$  個 / 秒以上を達成した。今後は, 三次元角度分解光電子分光装置の設置および光源のアンジュレータで偏光を変えることなどの課題が残っており, これらを順次解決していく予定である。

B-1) 学術論文

J. SICHELSCHMIDT, V. VOEVODIN, H. J. IM, S. KIMURA, H. ROSNER, A. LEITHE-JASPER, W. SCHNELLE, U. BURKHARDT, J. A. MYDOSHI, YU. GRIN and F. STEGLICH, "Optical Pseudogap from Iron States in Filled Skutterudites AFe<sub>4</sub>Sb<sub>12</sub> (A = Yb and Ca, Ba)," *Phys. Rev. Lett.* **96**, 037406 (2006).

S. KIMURA, J. SICHELSCHMIDT, J. FERSTL, C. KRELLNER, C. GEIBEL and F. STEGLICH, "Optical Observation of Non-Fermi-Liquid Behavior in the Heavy Fermion State of YbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>," *Phys. Rev. B* **74**, 132408 (4 pages) (2006).

S. KIMURA, T. MIZUNO, H. J. IM, K. HAYASHI, E. MATSUOKA and T. TAKABATAKE, "Iron-Based Heavy Quasiparticles in SrFe<sub>4</sub>Sb<sub>12</sub>: An Infrared Spectroscopic Study," *Phys. Rev. B* **73**, 214416 (5 pages) (2006).

## B-2) 国際会議のプロシーディングス

- S. KIMURA, E. NAKAMURA, T. NISHI, Y. SAKURAI, K. HAYASHI, J. YAMAZAKI and M. KATOH, "Infrared and Terahertz Spectromicroscopy Beam Line BL6B(IR) at UVSOR-II," *Infrared Phys. Tech.* **49**, 147–151 (2006).
- Y. SAKURAI, T. NISHI, S. KIMURA, Y. S. KWON, M. A. AVILA and T. TAKABATAKE, "Optical Study on Clathrates  $\text{Sr}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$  and  $\beta\text{-Eu}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$ ," *Physica B* **383**, 122–123 (2006).
- S. KIMURA, H. J. IM, Y. SAKURAI, T. MIZUNO, K. TAKEGAHARA, H. HARIMA, K. HAYASHI, E. MATSUOKA and T. TAKABATAKE, "Infrared Study on Electronic Structure of  $\text{SrT}_4\text{Sb}_{12}$  ( $T = \text{Fe, Ru}$ )," *Physica B* **383**, 137–139 (2006).
- T. ITO, H. J. IM, S. KIMURA and Y. S. KWON, "Angle-Resolved Photoemission Study on  $\text{CeTe}_2$ ," *Physica B* **378-380**, 767–768 (2006).
- H. J. IM, T. ITO, S. KIMURA, J. B. HONG and Y. S. KWON, "High-Resolution Photoemission Spectroscopy of  $\text{CeNiGe}_2$  and  $\text{CeCoGe}_2$ ," *Physica B* **378-380**, 825–826 (2006).
- Y. S. KWON, J. B. HONG, H. J. IM, T. NISHI and S. KIMURA, "Infrared Absorption in Heavy Fermion System  $\text{CeNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ge}_2$ ," *Physica B* **378-380**, 823–824 (2006).
- M. KATOH, M. HOSAKA, A. MOCHIIHASHI, M. SHIMADA, S. KIMURA, T. HARA, Y. TAKASHIMA and T. TAKAHASHI, "Observation of Intense Terahertz Synchrotron Radiation Produced by Laser Bunch Slicing at UVSOR-II," *Proc. EPAC06*, 3377–3379 (2006).
- A. MOCHIIHASHI, M. HOSAKA, M. KATOH, M. SHIMADA, S. KIMURA, Y. TAKASHIMA and T. TAKAHASHI, "Observation of THz Synchrotron Radiation Burst in UVSOR-II Electron Storage Ring," *Proc. EPAC06*, 3380–3382 (2006).

## B-3) 総説、著書

- S. KIMURA, "Infrared spectroscopy under multi-extreme conditions: Direct observation of pseudo gap formation and collapse in  $\text{CeSb}$ ," *Spring-8 Research Frontiers 2005*, pp. 96–97 (2006).
- 雨宮健太、木村真一, 「BL 光学技術シリーズ 第6回 光のエネルギーを切り出す(真空紫外・軟X線編)」, *放射光* **19**, 186–193 (2006).
- 木村真一、櫻井陽子, 「赤外放射光の利用研究と表面科学への展開」, *表面科学* **27**, 285–290 (2006).

## B-4) 招待講演

- S. KIMURA, "Application of infrared microspectroscopy and imaging using SR," 日本物理学会 2006年秋季大会シンポジウム, 千葉, 2006年9月.
- 木村真一, 「SmS および  $\text{CeX}$  ( $X = \text{Sb, Bi}$ ) の光学的性質」 価数揺動系 SmS の圧力有機相転移に関するミニワークショップ, 名古屋, 2006年6月.
- 木村真一, 「多重極限環境での赤外分光」 Spring-8利用者懇談会「固体分光研究会」主催研究会「Spring-8 BL43IR の現状と今後の利用研究」兵庫県佐用郡, 2006年12月.
- 木村真一, 「UVSOR 赤外 BL の現状と将来展望」 Spring-8利用者懇談会「固体分光研究会」主催研究会「Spring-8 BL43IR の現状と今後の利用研究」兵庫県佐用郡, 2006年12月.
- T. ITO, "Present status and activities at UVSOR-II BL5U," PAL seminar, Pohang (Korea), March 2006.
- 伊藤孝寛, 「SmS の光電子分光」 価数揺動系 SmS の圧力有機相転移に関するミニワークショップ, 名古屋, 2006年6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

日本放射光学会評議員 (2006-2007).

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).

VUV・SX 高輝度光源利用者懇談会幹事 (2006-2007).

UVSOR 利用者懇談会世話人 (2000-2001).

##### 学会の組織委員等

4<sup>th</sup> International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources, Co-chair, International Advisory Board (Awaji Island, Japan, September 2007).

第20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 (2006).

第3回次世代光源計画ワークショップ——先端のリング型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, 2006年8月)

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)

International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources 2005, International Advisory Board (Rathen, Germany, June 2005).

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

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-9) 学位授与

西 龍彦,「多重極限下赤外反射分光法の開発と擬二次元有機超伝導体の電子状態」2006年3月,博士(理学)

IM, Hojun, “Electronic Structure of Heavy Fermion Ce compounds Studied by Photoemission Spectroscopy,” 2006年9月, 博士(理学)

## B-10)外部獲得資金

基盤研究(B),「強相関4f電子系の量子臨界点における電子状態の光学的・光電的研究」木村真一(2006年-2008年).

(財)光科学技術研究振興財団・助成金,「リング型電子加速器からの大強度テラヘルツ光の発生と制御」木村真一(2006年-2007年).

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,「 $\text{CeSbNi}_x$  ( $x > 0.08$ ) 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・さきがけ研究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)鳥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

これまでにUVSOR-IIで立ち上げてきた高分解能三次元角度分解光電子分光ビームライン(BL5U)と赤外・テラヘルツ分光ビームライン(BL6B)は、順調に稼働しており、世界的なレベルでの研究が遂行できている。BL5Uでのアクティビティの一部は、今年度新たに建設した真空紫外角度分解光電子分光ビームライン(BL7U)に発展的に移行する。BL7Uでは、UVSOR-IIの特長を生かして真空紫外領域に特化し、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を展開していく計画である。建設・調整は順調に進んでおり、今年度内には最初の結果が得られるものと期待している。今後、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。また、高圧下でのテラヘルツ分光も可能になり、今後の展開が楽しみである。一方で、1 K以下の極低温下のテラヘルツ分光も可能になり、量子臨界点近傍での電荷ダイナミクスの研究もターゲットに入ってきた。これまで行ってきた磁場下の分光も含めて、低温・高圧・高磁場の多重極限環境下による電子状態の変化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。これら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 )<sup>\*</sup>

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  $\mu\text{m}$  ) 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

- G. DE LOS RAYES, A. QUEMA, C. PONSECA JR., R. POBRE, R. QUIROGA, S. ONO, H. MURAKAMI, E. ESTACIO, N. SARUKURA, K. AOSAKI, Y. SAKANE and H. SATO, “Low-Loss Single-Mode THz Waveguiding Using Cytop,” *Appl. Phys. Lett.* **89**, 211119 (2006).
- E. ESTACIO, A. QUEMA, R. POBRE, G. DIWA, C. PONSECA JR., S. ONO, H. MURAKAMI, A. SOMINTAC, J. SY, V. MAG-USARA, A. SALVADOR and N. SARUKURA, “Below-Bandgap Excited, Terahertz Emission of Optically Pumped GaAs/AlGaAs Multiple Quantum Wells,” *J. Photochem. Photobiol.* **183**, 334–337 (2006).
- M. YAMAGA, E. HAYASHI, N. KODAMA, K. ITOH, S. YABASHI, Y. MASUI, S. ONO, N. SARUKURA, T. P. J. HAN and H. G. GALLAGHER, “Vacuum Ultraviolet Spectroscopy of Ce<sup>3+</sup>-Doped SrMgF<sub>4</sub> with Superlattice Structure,” *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 6033–6044 (2006).
- E. HAYASHI, K. ITO, S. YABASHI, M. YAMAGA, N. KODAMA, S. ONO and N. SARUKURA, “Vacuum Ultraviolet and Ultraviolet Spectroscopy of BaMgF<sub>4</sub> Codoped with Ce<sup>3+</sup> and Na<sup>+</sup>,” *J. Lumin.* **119**, 69–74 (2006).
- E. HAYASHI, K. ITO, S. YABASHI, M. YAMAGA, N. KODAMA, S. ONO and N. SARUKURA, “Ultraviolet Irradiation Effect of Ce<sup>3+</sup>-Doped BaMgF<sub>4</sub> Crystals,” *J. Alloys Compd.* **408**, 883–885 (2006).

## B-2) 国際会議のプロシーディングス

- G. DE LOS REYES, A. QUEMA, E. ESTACIO, C. PONSECA JR., R. POBRE, R. QUIROGA, H. MURAKAMI, S. ONO, N. SARUKURA, K. AOSAKI, Y. SAKANE and H. SATO, “Low-Loss Single-Mode THz Waveguiding Using CYTOP, a Highly Transparent Plastic with Potential as Hybrid Optics,” *Conference on Lasers and Electro-Optics and the Quantum Electronics and Laser Science Conference (CLEO/QELS 2006)* (2006).
- E. ESTACIO, C. PONSECA JR., A. QUEMA, G. DIWA, H. MURAKAMI, S. ONO, A. SOMINTAC, M. BAILON, A. SALVADOR and N. SARUKURA, “Magnetic Field Orientation Dependence of the Terahertz Radiation from GaAs/AlGaAs Modulation-Doped Structures with Varying AlGaAs Spacer-Layer Thickness,” *Conference on Lasers and Electro-Optics and the Quantum Electronics and Laser Science Conference (CLEO/QELS 2006)* (2006).
- E. ESTACIO, C. PONSECA, A. QUEMA, H. MURAKAMI, S. ONO, R. POBRE, R. QUIROGA, N. SARUKURA, M. TANI and M. HANGYO, “Terahertz Radiation from (100) p-InAs under 1 Tesla Magnetic Field Due to Surge Current,” *Conference on Lasers and Electro-Optics and the Quantum Electronics and Laser Science Conference (CLEO/QELS 2006)* (2006).
- E. ESTACIO, C. PONSECA, A. QUEMA, S. ONO, R. POBRE, R. QUIROGA, H. MURAKAMI, H. SUMIKURA, M. TANI, N. SARUKURA and M. HANGYO, “Observation of Four-Fold Azimuthal Angle Dependence in the Terahertz Radiation Power of (100) p-InAs,” *Conference Digest of the 2006 Joint 31st International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 14th International Conference on Terahertz Electronics (IRMMW-THz 2006)*, 18 (2006).
- C. S. PONSECA JR., A. V. QUEMA, E. ESTACIO, M. M. CADATAL, M. MURAKAMI, S. ONO, N. SARUKURA, A. ARGYROS, M. C. J. LARGE and M. A. VAN EIJKELBORG, “Terahertz-Time Domain Spectroscopy Microstructured Poly(methylmetacrylate) Polymer Fiber,” *Conference Digest of the 2006 Joint 31st International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 14th International Conference on Terahertz Electronics (IRMMW-THz 2006)*, 244 (2006).

C. S. PONSECA JR., A. V. QUEMA, G. DE LOS REYES, E. ESTACIO, M. M. CADATAL, R. POBRE, R. QUIROGA, H. MURAKAMI, S. ONO, N. SARUKURA, T. TANNO, T. SASAKI, K. SUTO, J. NISHIZAWA and K. TOMINAGA, “Terahertz Transmission Spectroscopic Analysis of Mono- and Di-Substituted Hydroxynaphthalenes in the 0.5- to 6-THz Region Using GaP THz Wave Generator,” *Conference Digest of the 2006 Joint 31st International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 14th International Conference on Terahertz Electronics (IRMMW-THz 2006)*, 540 (2006).

E. ESTACIO, C. PONSECA, S. ONO, A. QUEMA, R. POBRE, R. QUIROGA, H. MURAKAMI, H. SUMIKURA, M. TANI, N. SARUKURA and M. HANGYO, “Fourfold Azimuthal Angle Dependence of the Terahertz Radiation Power in (100) pInAs under 1T Transverse Magnetic Field,” *Proceedings of the Samahang Pisika ng Pilipinas (The 24th SPP National Physics Congress)* (2006).

C. PONSECA, A. QUEMA, E. ESTACIO, M. CADATAL, H. MURAKAMI, N. SARUKURA, S. ONO, R. POBRE, R. QUIROGA, A. ARGYROS, M. LARGE and M. VAN EIJKELBORG, “Transmission Spectra of Microstructured Polymer Fiber Using Terahertz Time Domain Spectroscopy (THZTDS),” *Proceedings of the Samahang Pisika ng Pilipinas (The 24th SPP National Physics Congress)* (2006).

R. F. POBRE, G. A. DIWA, E. S. ESTACIO, S. ONO, H. MURAKAMI and N. SARUKURA, “Modal Analysis of Teflon Photonic Crystal Fiber Waveguide in Terahertz Frequency Region,” *Proceedings of the Samahang Pisika ng Pilipinas (The 24th SPP National Physics Congress)* (2006).

C. S. PONSECA JR., A. V. QUEMA, G. DE LOS REYES, E. ESTACIO, H. MURAKAMI, M. M. CADATAL, S. ONO, N. SARUKURA, R. POBRE, R. QUIROGA, T. TANNO, T. SASAKI, K. SUTO, J. NISHIZAWA and K. TOMINAGA, “Spectroscopic Analysis of 1,4-Dihydroxynaphthalene in the 0.5 to 6THz Region Using GaP THz Wave Generator,” *Proceedings of the Samahang Pisika ng Pilipinas (The 24th SPP National Physics Congress)* (2006).

M. H. PHAM, C. PONSECA JR., E. ESTACIO, S. ONO, N. SARUKURA, H. MURAKAMI, Y. FUJIMOTO, Y. SEO, T. TATSUMI, M. NAKATSUKA, M. M. CADATAL, K. FUKUDA, A. YOSHIKAWA and T. FUKUDA, “Investigation of the Optical Properties of Nd<sup>3+</sup>-Doped LaF<sub>3</sub> and YLiF<sub>4</sub> in the Deep Ultraviolet (DUV) and Vacuum Ultraviolet (VUV) Region,” *Proceedings of the Samahang Pisika ng Pilipinas (The 24th SPP National Physics Congress)* (2006).

#### B-3) 総説、著書

村上英利、小野晋吾、猿倉信彦,「超短パルスレーザーによる高出力テラヘルツ波の発生と応用」*応用物理* 75, 202–206 (2006).

村上英利、猿倉信彦,「超短パルスレーザーの画像技術への応用」*フェムト秒テクノロジー [基礎と応用]* 平尾一之、邱建栄編, 292–298 (2006).

村上英利、小野晋吾、猿倉信彦,「紫外光学結晶の新展開」*バルク単結晶の最新技術と応用開発*, 福田承生監修, (株)シーエムシー出版 (2006).

#### B-4) 招待講演

N. SARUKURA, “Band-structure design of wide-gap fluoride hetero-structures for deep-ultraviolet light-emitting diodes,” 4th International Symposium on Laser, Scintillator and Non Linear Optical Materials (ISL NOM4 2006), Prague (Czech), June 2006.

#### 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-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のス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。

\* ) 2006 年 1 月 1 日大阪大学レーザーエネルギー学研究中心教授、分子科学研究所教授兼任

## 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リニクスの研究

- a) フォトリニクデバイスに関する研究
- 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

- a) 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:YVO<sub>4</sub>の優位性を見出しマイクロチップ構造とする事を提案した。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:YVO<sub>4</sub>、Nd:GdVO<sub>4</sub>などを用いて成功した。さらに高出力化の際に重要な光学材料の熱伝導率の高精度測定法も開発し、YVO<sub>4</sub>の熱伝導率がYAGを上回る事を発見した。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LiNbO<sub>3</sub>(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。
- b) 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、直径3mm、200μm厚のYb:YAGから準CWで約520Wの出力をスロープ効率56%で、CWでは最大414Wと加工機並の大出力をスロープ効率52%で得る事に成功した。出力密度にして0.19MW/cm<sup>2</sup>にも至り角砂糖サイズから約200kWの高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280fs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10mm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1.7MW、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16mW/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。例えば、太陽表面輝度温度も6000K程度に留まるもので、比較するなら如何に高輝度な光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。さらに、マイクロ固体レーザーのエネルギー応用として光波反応制御内燃機関の検討も始めた。

c) 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  $\mu\text{m}$ ）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，その出力も 20 倍以上に改善できた。また，QPM 構造を MgLN に施した周期分極反転 LN（PPMgLN）を用いて数 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 107 mJ の高エネルギーパルスを 70% の効率で発生させる事に成功した。さらには，分子分光用に波長 5  $\mu\text{m}$  以上の中赤外光発生，スペクトル狭窄化も行っている。また，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も 2002 年には提案，実証し，現在その展開を図っている。

#### B-1) 学術論文

**T. DASCALU and T. TAIRA**, “Highly Efficient Pumping Configuration for Microchip Solid-State Laser,” *Opt. Express* **14**, 670–677 (2006).

**N. PAVEL, V. LUPEI, J. SAIKAWA, T. TAIRA and H. KAN**, “Neodymium Concentration Dependence of 0.94-, 1.06- and 1.34- $\mu\text{m}$  Laser Emission and of Heating Effects under 809- and 885-nm Diode Laser Pumping of Nd:YAG,” *Appl. Phys. B* **82**, 599–605 (2006).

**J. YI, H. ISHIZUKI, I. SHOJI, T. TAIRA and S. KURIMURA**, “Generation of 6 $\mu\text{m}$  Radiation by Optical Parametric Oscillator and Difference Frequency Generation in Periodically Poled LiNbO<sub>3</sub>,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **45**, 111–115 (2006).

**N. PAVEL and T. TAIRA**, “Continuous-Wave High-Power Multi-Pass Pumped Thin-Disc Nd:GdVO<sub>4</sub> Laser,” *Opt. Commun.* **260**, 271–276 (2006).

**M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “Efficient, Water-Cooled Heat-Sink for High-Power Edge-Pumped Microchip Lasers,” *Rev. Laser Eng.* **34**, 181–187 (2006). (in Japanese)

**M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “300 W Continuous-Wave Operation of a Diode Edge-Pumped, Hybrid Composite Yb:YAG Microchip Laser,” *Opt. Lett.* **31**, 2003–2005 (2006).

**L. GHEORGHE, V. LUPEI, P. LOISEAU, G. AKA and T. TAIRA**, “Second-Harmonic Generations of Blue Light in Nonlinear Optical Crystals of Gd<sub>1-x</sub>Lu<sub>x</sub>Ca<sub>4</sub>O(BO<sub>3</sub>)<sub>3</sub> and Gd<sub>1-x</sub>Sc<sub>x</sub>Ca<sub>4</sub>O(BO<sub>3</sub>)<sub>3</sub> through Noncritical Phase Matching,” *J. Opt. Soc. Am. B* **23**, 1630–1634 (2006).

**A. IKESUE, Y. L. AUNG, T. TAIRA, T. KAMIMURA, K. YOSHIDA and G. MESSING**, “Progress in Ceramic Lasers,” *Annu. Rev. Mater. Res.* **36**, 397–429 (2006).

**J. SAIKAWA, M. FUJII, H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “52mJ Narrow-Bandwidth Degenerated Optical Parametric System with a Large-Aperture Periodically Poled MgO:LiNbO<sub>3</sub>,” *Opt. Lett.* **31**, 3149–3151 (2006).

**Y. SATO and T. TAIRA**, “The Studies of Thermal Conductivity in GdVO<sub>4</sub>, YVO<sub>4</sub>, and Y<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub> Measured by Quasi-One-Dimensional Flash Method,” *Opt. Express* **14**, 10528–10536 (2006).

## B-2) 国際会議のプロシーディングス

- H. SAKAI, A. SONE, H. KAN and T. TAIRA**, “Polarization Stabilizing for Diode-Pumped Passively Q-Switched Nd:YAG Microchip Lasers,” *OSA Topical meeting on Advanced Solid-State Photonics*, MD2 (2006).
- Y. SATO, T. TAIRA and A. IKESUE**, “Spectroscopic Properties and Laser Emission in Layer-by-Layer Type Nd:Y<sub>3</sub>ScAl<sub>4</sub>O<sub>12</sub>/Nd:Y<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub> Composite Ceramics,” *OSA Topical meeting on Advanced Solid-State Photonics*, TuB3 (2006).
- H. ISHIZUKI, J. SAIKAWA and T. TAIRA**, “100mJ Output Optical Parametric Oscillation Using Periodically Poled MgO:LiNbO<sub>3</sub>,” *OSA Topical meeting on Advanced Solid-State Photonics*, TuC3 (2006).
- L. GHEORGHE, V. LUPEI, P. LOISEAU, G. AKA and T. TAIRA**, “Crystal Growth of Gd<sub>1-x</sub>R<sub>x</sub>Ca<sub>4</sub>O(BO<sub>3</sub>)<sub>3</sub> (R = Sc or Lu) for Non Critical Phase Matched (NCPM) Second Harmonic Generation (SHG) at 800 nm,” *OSA Topical meeting on Advanced Solid-State Photonics*, WB2 (2006).
- R. BHANDARI, T. KAMIYA and T. TAIRA**, “Long-Pulse Q-Switched Operation of Tunable Micro-Rod Yb:YAG Laser,” *OSA Topical meeting on Advanced Solid-State Photonics*, WB7 (2006).
- M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “300 W CW Operation of Diode Edge-Pumped, Composite Single Crystal Yb:YAG/Ceramic YAG Microchip Laser,” *OSA Topical meeting on Advanced Solid-State Photonics*, WE4 (2006).
- T. TAIRA and M. TSUNEKANE**, “High-Power Edge-Pumped Yb:YAG Single Crystal/YAG Ceramics Hybrid Microchip Laser,” *Defense & Security Symposium 2006*, 6216-08 (2006).
- T. TAIRA, Y. SATO, J. SAIKAWA and A. IKESUE**, “Spectroscopic Properties and Laser Operation of RE<sup>3+</sup>-Ion Doped Garnet Materials,” *Defense & Security Symposium 2006*, 6216-21 (2006).
- S. HAYASHI, H. MINAMIDE, T. IKARI, Y. OGAWA, T. SHIBUYA, K. SHINDO, H. SAKAI, H. KAN, T. TAIRA, H. ITO, C. OTANI and K. KAWASE**, “Compact Terahertz-Wave Parametric Generators,” *Conference on Lasers and Electro-Optics CLEO 2006*, CTuGG2 (2006).
- T. TAIRA, Y. MATSUOKA, H. SAKAI, A. SONE and H. KAN**, “Passively Q-Switched Nd:YAG Microchip Laser over 1-MW Peak Output Power for Micro Drilling,” *Conference on Lasers and Electro-Optics CLEO 2006*, CWF6 (2006).
- J. SAIKAWA, M. FUJII, H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “High-Energy, Narrow-Bandwidth 2-μm Optical Parametric Oscillator/Power Amplifier Based on Periodically Poled MgO:LiNbO<sub>3</sub>,” *Conference on Lasers and Electro-Optics CLEO 2006*, CThG3 (2006).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Thermal Properties of Y<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub>, GdVO<sub>4</sub>, and YVO<sub>4</sub>,” *Conference on Lasers and Electro-Optics CLEO 2006*, JThC30 (2006).
- T. DASCALU and T. TAIRA**, “Highly Efficient Pumping Configuration for Microchip Solid-State Laser,” *Conference on Lasers and Electro-Optics CLEO 2006*, JThC31 (2006).
- H. ISHIZUKI, J. SAIKAWA and T. TAIRA**, “High-Energy Optical Parametric Oscillator by Using 5mm-Thick Periodically Poled MgO:LiNbO<sub>3</sub>,” *23<sup>rd</sup> International Laser Radar Conference*, 2P-20 (2006).
- T. TAIRA**, “High Brightness-Temperature Micro-Lasers,” *ROMOPTO 2006*, I.I.3 (2006).
- T. DASCALU and T. TAIRA**, “Non Linear Mirror Mode Locking Operation of Edge Pumped Yb:YAG/YAG Laser,” *ROMOPTO 2006*, I.O.3 (2006).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Comparison of Thermal Conductivity in YAG between Polycrystalline Ceramics and Single Crystals,” *Frontiers in Optics 2006, The 90<sup>th</sup> OSA Annual Meeting*, FMK2 (2006).

**T. TAIRA, Y. SATO, J. SAIKAWA and A. IKESUE**, “Characteristics of RE<sup>3+</sup>-Ion Doped Garnet Ceramics,” *2<sup>nd</sup> International Laser Ceramic Symposium*, 10aAS5 (2006).

#### B-3) 総説、著書

平等拓範, 「2005年光学界の進展『レーザー』」 光学 35, 185-187 (2006).

平等拓範, 「単一周波数マイクロ固体レーザー」 ホログラフィックメモリーのシステムと材料, シーエムシー出版, 第6.2章, 228-247 (2006).

**T. TAIRA and M. TSUNEKANE**, “High-power edge-pumped Yb:YAG single crystal/YAG ceramics hybrid microchip laser,” *Proc. of SPIE* **6216**, 621607 (8 pages) (2006). (Invited Paper).

**T. TAIRA, Y. SATO, J. SAIKAWA and A. IKESUE**, “Spectroscopic properties and laser operation of RE<sup>3+</sup>-ion doped garnet materials,” *Proc. of SPIE* **6216**, 62160J (12 pages) (2006).

#### B-4) 招待講演

**T. TAIRA, Y. MATSUOKA, H. SAKAI and H. KAN**, “Promise of micro solid-state lasers for micro-machine,” 65<sup>th</sup> Laser Materials Processing Conference, Sophia University, Tokyo (Japan), December 2005.

**T. TAIRA**, “Micro solid-state photonics for chromatic lasers,” Photon science and applications program science and technology seminar, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore (U.S.A.), February 2006.

**M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “High-power, diode edge-pumped microchip lasers,” 26<sup>th</sup> Annual meeting of The Laser Society of Japan, Omiya Sonic City, Saitama (Japan), February 2006.

**J. SAIKAWA, Y. SATO, T. TAIRA and A. IKESUE**, “Short pulse generation in Yb:Y<sub>3</sub>ScAl<sub>4</sub>O<sub>12</sub> disordered ceramic laser,” 26<sup>th</sup> Annual meeting of The Laser Society of Japan, Omiya Sonic City, Saitama (Japan), February 2006.

**H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “High energy Mid-IR pulse generation by using a periodically domain-inverted optical device,” Extended Abstracts, 53rd Spring Meeting for Jpn. Society of Appl. Phys., Musashi Institute of Technology, Tokyo (Japan), March 2006.

常包正樹、平等拓範, 「マイクロ固体フォトニクス」 Laser Expo 2006, パシフィコ横浜, 2006年4月.

**T. TAIRA and M. TSUNEKANE**, “High-power edge-pumped Yb:YAG single crystal/YAG ceramics hybrid microchip laser,” Defense & Security Symposium 2006, Orland, Florida (U.S.A.), April 2006.

**T. TAIRA**, “High brightness-temperature Nd:YAG micro-lasers,” Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris (ENSCP), Pierre & Marie Curie University (Paris VI University), Paris, (France), June 2006.

**T. TAIRA**, “Widely tunable compact lasers by micro solid-state photonics,” Cristal Laser S.A., Messein (France), June 2006.

**T. TAIRA**, “Chromatic micro solid-state photonics: Approach with the thick periodically poled MgO:LiNbO<sub>3</sub>,” Laboratoire Charles Fabry de l’Institut d’Optique, Paris-Sud University (Paris XI University), Orsay (France), June 2006.

**T. TAIRA**, “The state of the art of ceramics micro-lasers,” Centre Interdisciplinaire de Recherche Ions Laser, L’Ecole Nationale Supérieure d’Ingenieurs de Caen, University of Caen, Caen (France), July 2006.

**T. TAIRA**, “High brightness-temperature micro-lasers,” ROMOPTO 2006, Sibiu (Romania) August 2006.

平等拓範, 「光シンセサイザーを手のひらに——マイクロ固体フォトニクスの新展開——」 自然科学研究機構シンポジウム, 東京, 2006年9月.

T. TAIRA, Y. SATO, J. SAIKAWA and A. IKESUE, “Characteristics of RE<sup>3+</sup>-ion doped garnet ceramics,” 2<sup>nd</sup> International Laser Ceramic Symposium 2006, Tokyo (Japan), November 2006.

#### B-5) 特許出願

特願 2006-172173, 「非線形光学結晶を備えた超短パルスレーザー装置」 平等拓範、常包正樹( JST、自然科学研究機構 ) 2006年.

特願 2006-178884, 「半導体レーザ励起固体レーザ装置、光走査装置、画像形成装置及び表示装置」 鈴木 剛、平等拓範、佐藤庸一、古川保典、松村禎夫、松倉 誠、中村 修、渡辺信也、宮本晃男( 株 )ソニー、自然科学研究機構、( 株 )オキサイド ) 2006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

( 社 )レーザー学会, レーザ素子機能性向上に関する専門委員会幹事 (1997-1999).

( 社 )レーザー学会, 研究会委員 (1999- ).

( 社 )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).

( 社 )レーザー学会, レーザ用先端光学材料に関する専門委員会委員 (2000-2002).

LASERS 2001, 国際会議プログラム委員 (2001).

( 社 )レーザー学会, 学術講演会プログラム委員 (2001, 2004).

( 財 )光産業技術振興協会, 光材料・応用技術研究会幹事 (2004- ).

CLEO/PacificRim 2005, 国際会議プログラム委員 (2005).

Advanced Solid-State Photonics, 国際会議プログラム委員 (2005- ).

NEDO 評価委員 (2005- ).

( 社 )レーザー学会, 評議員 (2005- ).

23<sup>rd</sup> International Laser Radar Conference, 国際会議実行委員 (2005- ).

Int. Conf. “Micro- to Nano-Photonics—ROMOPT 2006,” プログラム委員 (2005- ).

( 社 )レーザー学会, 「マイクロ固体フォトンクス」専門委員会主査 (2006-2009).

CLEO, Application of Nonlinear Optics, プログラム委員 (2006- ).

Nonlinear Optics, プログラム委員 (2006- ).

3<sup>rd</sup> International Laser Ceramics Symposium, プログラム委員 (2006- ).

愛知県産業労働部, 愛知県若手奨励賞審査員 (2006).

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 (2006- ).

#### B-8) 他大学での講義、客員

福井大学, 非常勤講師, 1999年4月- .

理化学研究所, 客員研究員, 1999年4月- .

物質・材料研究機構, 客員研究員, 2001年4月-2006年3月.

仏国 ピエール・マリキュリー大学(パリ第六大学) 客員教授, 2005年9月-2006年8月(滞在 2006年6月-7月)

豊橋技術科学大学, 客員助教授, 2006年12月-2007年3月.

#### B-10) 外部獲得資金

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」 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」 平等拓範 (2002年-2004年).

地域新生コンソーシアム, 「ヒートシンクー体型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).

(独) 科学技術振興機構研究成果活用プラザ東海 実用化のための育成研究, 「光波反応制御内燃機関をめざしたマイクロレーザの研究開発」 平等拓範 (2006年-2008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, 「半導体レーザ励起固体レーザに関する研究補助」 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).

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ーの実用化検討のため」平等拓範(2004年).

東芝セラミックス(株)「固体レーザーの研究開発支援」平等拓範(2006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/青色レーザ光源の研究」平等拓範(2005年).

澁谷工業(株),「高出力100W級Yb:YAG マイクロチップレーザの開発」平等拓範(2006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(2006年).

#### C) 研究活動の課題と展望

先端的レーザ光源の中で,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ンクス」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。以上のようなコンセプトに基づき、拡張 $\pi$ 電子系内に、水素結合・ヘテロ原子間相互作用・C-H $\cdots\pi$ 相互作用・立体障害などの分子間の弱い相互作用を導入し、一次元テープ構造をベースとしつつ、最終的には格子状有機超分子構造体を設計・構築することを検討している。
- b) 1,2,5-チアジアゾール、1,3-ジチオール、チオフエン、ピリジン、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つた。さらに、有機分子デバイスへの応用を目的として、チアゾールやオキサジアゾールをもつ分子に関してはそのFET特性、ピリジンをもつイリジウム錯体に関してはそのEL特性について検討し、いずれも興味ある知見を得た。

B-1) 学術論文

K. ONO, M. JOHO, K. SAITO, M. TOMURA, Y. MATSUSHITA, S. NAKA, H. OKADA and H. ONNAGAWA, "Synthesis and Electroluminescence Properties of *fac*-Tris(2-phenylpyridine)iridium Derivatives Containing Hole-Accepting Moieties," *Eur. J. Inorg. Chem.* 3676–3683 (2006).

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 $\pi$ 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，水素結合だけではなく，ヘテロ原子間相互作用・C-H $\cdots$  $\pi$ 相互作用・立体障害といった比較的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) 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) CooA は一酸化炭素（CO）を生理的なエフェクターとする、これまでに例の無い新規な転写調節因子であり、その分子中に CO をセンシングするための活性中心としてヘム（鉄ポルフィリン錯体）を有している。CooA の転写調節機能は CO の有無により制御されており、CooA 分子中のヘムに CO が結合した場合にのみ、標的 DNA に特異的に結合し、支配下遺伝子の転写を活性化することを以前の研究で明らかにした。このように CO が生理的に積極的な意義を有していることを明らかにしたのは、CooA が世界で最初の例である。本研究では CooA の構造機能相関の全貌を明らかにするため、まず CooA の立体構造解明を目的として X 線結晶構造解析を行った。その結果、分子中のヘムにイミダゾールが配位した CooA の構造決定に成功した。本構造は標的 DNA には結合できない不活性型の構造であった。現在、活性型である CO 結合型の構造決定を試みている。
- b) HemAT は、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。本研究では、HemAT による選択的な酸素センシング機構、ならびに酸素センシングに引き続いておこるシグナル伝達機構の解明を目的として研究を行った。HemAT による選択的な酸素センシング機構を明らかにするため、野生型ならびにヘム周辺のアミノ酸残基に系統的な変異を導入した各種変異体を調製し、共鳴ラマンスペクトルを中心に各種分光学的な測定を行うことで、それらの性質について詳細な検討を行った。また、DNA データベース解析により HemAT ホモログの検索を行い、何種類かの HemAT ホモログを取得することに成功した。得られた HemAT ホモログの性質を比較検討することにより、HemAT の機能発現に必須の要因を明らかにすることを試み、いくつかの必須要因を見いだすことに成功した。
- c) 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。本研究ではアルドキシム脱水酵素の触媒反応機構の解明を目的とし、*Bacillus* sp. OxB-1 株および *Rhodococcus* sp. N-771 株由来のアセトアルドキシム脱水酵素を対象として研究をおこなった。共鳴ラマンスペクトル、EPR スペクトル、電子吸収スペクトルにより、活性中心であるヘムの性質、局所構造を明らかにするとともに、各種条件下における酵素反応を詳細に解析することにより、本酵素反応の反応機構を明らかにすることに成功した。

#### B-1) 学術論文

**E. PINAKOULAKI, H. YOSHIMURA, V. DASKALAKIS, S. YOSHIOKA, S. AONO and C. VAROTSIS**, “Two Ligand Binding Sites in the O<sub>2</sub>-Sensing Signal Transducer HemAT: Implication for Ligand Recognition/Discrimination and Signaling,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **103**, 14796–14801 (2006).

**K. KOBAYASHI, M. KUBO, S. YOSHIOKA, T. KITAGAWA, Y. KATO, Y. ASANO and S. AONO**, “Systematic Regulation of the Enzymatic Activity of Phenylacetaldoxime Dehydratase by Exogenous Ligand,” *ChemBioChem* **7**, 2004–2009 (2006).

**H. KOMORI, K. SATOMOTO, Y. UEDA, N. SHIBATA, S. INAGAKI, S. YOSHIOKA, S. AONO and Y. HIGUCHI**, “Crystallization and Preliminary X-Ray Analysis of CoxA from *Carboxydotherrmus hydrogenoformans*,” *Acta Crystallogr., Sect. F: Struct. Biol. Cryst. Commun.* **62**, 471–473 (2006).

**T. ZHANG, I. RUBTSOV, H. NAKAJIMA, S. AONO and K. YOSHIHARA**, “Effect of Mutation on the Dissociation and Recombination Dynamics of CO in Transcriptional Regulator CoxA: A Picosecond Infrared Transient Absorption Study,” *Biochemistry* **45**, 9246–9253 (2006).

**H. YOSHIMURA, S. YOSHIOKA, K. KOBAYASHI, T. OHTA, T. UCHIDA, M. KUBO, T. KITAGAWA and S. AONO**, “Specific Hydrogen Bonding Networks Responsible for Selective O<sub>2</sub> Sensing for the Oxygen Sensor Protein HemAT from *Bacillus subtilis*,” *Biochemistry* **45**, 8301–8307 (2006).

**E. PINAKOULAKI, H. YOSHIMURA, S. YOSHIOKA, S. AONO and C. VAROTISIS**, “Recognition and Discrimination of Gases by the Oxygen-Sensing Signal Transducer Protein HemAT as Revealed by FTIR Spectroscopy,” *Biochemistry* **45**, 7763–7766 (2006).

**M. KUBO, S. INAGAKI, S. YOSHIOKA, T. UCHIDA, Y. MIZUTANI, S. AONO and T. KITAGAWA**, “Evidence for Displacements of the C-Helix by CO Ligation and DNA Binding to CoxA Revealed by UV Resonance Raman Spectroscopy,” *J. Biol. Chem.* **281**, 11271–11278 (2006).

**K. KOBAYASHI, B. PAL, S. YOSHIOKA, Y. KATO, Y. ASANO, T. KITAGAWA and S. AONO**, “Spectroscopic and Substrate Binding Properties of Heme-Containing Aldoxime Dehydratases, OxdB and OxdRE,” *J. Inorg. Biochem.* **100**, 1069–1074 (2006).

#### B-4) 招待講演

**S. AONO**, “Activation mechanism of CO-sensing transcriptional activator CoxA,” Biochemistry and Molecular Biology of Sensor Enzymes and Proteins, Satellite Meeting of 20<sup>th</sup> IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11<sup>th</sup> FAOBMB Congress, Sendai (Japan), June 2006.

**S. AONO, S. INAGAKI, S. YOSHIOKA, H. KOMORI and Y. HIGUCHI**, “Activation mechanism of the heme-based CO sensor protein CoxA revealed by the crystal structure,” 4<sup>th</sup> International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP4), Rome (Italy), July 2006.

#### 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

東京工業大学大学院理工学研究科, 非常勤講師, 2006年12月 - 2007年3月.

#### B-9) 学位授与

稲垣さや香, 「Structure and Function of the CO-Sensing Transcriptional Activator CooA from *Carboxydotherrhus hydrogeniformans*」 2006年3月, 博士(理学)

#### B-10) 外部獲得資金

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).

東レ科学技術研究助成金, 「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 (2005年-2007年).

内藤記念科学奨励金(研究助成) 「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 (2006年).

#### C) 研究活動の課題と展望

これまでは, 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ータンパク質を主な研究対象として研究を進めてきた。センサータンパク質の機能は, 基本的にはエフェクター分子の有無によるセンサータンパク質の分子構造変化により制御されている。したがってこれらセンサータンパク質の構造機能相関を解明するためには, エフェクター分子存在下および非存在下におけるセンサータンパク質の分子構造を解明することが必須である。CooA に関しては, 不

活性型の構造決定には成功しているが、活性型の構造決定には至っていない。今後は、活性型 CooA ならびに HemAT の構造決定を目指して研究を行う予定である。また、ヘム以外の金属含有補欠分子族を活性中心とする新規なセンサータンパク質に関する研究にも取り組んで行きたい。

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、磁気共鳴

A-2) 研究課題：

- a) 酸化反応に関与する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、高酸化反応中間体のモデル錯体の合成を行った。非ヘム酵素モデルとして立体障害を導入した新規サレン鉄錯体を合成した。構造解析や電子構造を研究した結果、カテコールジオキシゲナーゼの特異な活性中心の構造が、電子的要因によることを明らかにした。
- 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。酵素がもつ反応場が酵素機能に果たす役割を解明するため、種々の配位環境をもつモデル錯体を合成した。モデル錯体の合成と構造解析に成功した。モデル錯体は、配位環境によらず窒素原子で配位した構造をとることが明らかになった。
- c) 金属酵素と強く結合する小分子をプローブとした構造・機能測定法の開発を行った。金属酵素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、構造によりその電子状態を大きく変化させる。この電子状態の変化を磁気共鳴法により検出し構造や機能との相関を示すことができれば、新規構造・機能測定法になると考える。ヘムに配位したオキシ原子の  $^{17}\text{O}$  NMR の測定を行い、酸化活性との相関を研究した。またヘムに配位したシアニドイオンの  $^{13}\text{C}$  NMR や  $^{15}\text{N}$  NMR が、ヘム近位側、遠位側の水素結合の特性を知るよい手法であることを示した。さらに、銅タンパク質と強く結合する一酸化炭素 (CO) が  $^{63}\text{Cu}$  NMR による構造・機能解析のよいプローブになることを見出した。
- 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。この手法に基づき、反応選択性をもたない特異な酵素を選択性をもつ酵素に変換することに成功した。

B-1) 学術論文

**M. KUJIME and H. FUJII**, "Spectroscopic Characterization of Reaction Intermediates in Nitrite Reduction of Copper(I) Nitrite Complex as a Reaction Model for Copper Nitrite Reductase," *Angew. Chem., Int. Ed.* **45**, 1089–1092 (2006).

**A. TANAKA, H. NAKAMURA, Y. SHIRO and H. FUJII**, "Roles of the Heme Distal Residues of FixL in  $\text{O}_2$  Sensing: A Single Convergent Structure of the Heme Moiety Is Relevant to the Down-Regulation of Kinase Activity," *Biochemistry* **45**, 2515–2523 (2006).

H. FUJII, T. KURAHASHI, T. TOSHA, T. YOSHIMURA and T. KITAGAWA, “<sup>17</sup>O NMR Study of Oxo Metalloporphyrin Complexes: Correlation with Electronic Structure of M=O Moiety,” *J. Inorg. Biochem.* **100**, 533–541 (2006).

H. FUJII and T. YOSHIDA, “<sup>13</sup>C and <sup>15</sup>N NMR Studies of Iron-Bound Cyanides of Heme Proteins and Related Model Complexes: Sensitive Probe for Detecting Hydrogen Bonding Interactions at the Proximal and Distal Sides,” *Inorg. Chem.* **45**, 6816–6827 (2006).

T. KURAHASHI, K. ODA, M. SUGIMOTO, T. OGURA and H. FUJII, “A Trigonal-Bipyramidal Geometry Induced by an External Water Ligand in a Sterically Hindered Iron Salen Complex, Related to the Active Site of Protocatechuate 3,4-Dioxygenase,” *Inorg. Chem.* **45**, 7709–7721 (2006).

#### B-4) 招待講演

藤井 浩, 「金属酵素の機能発現メカニズムの解明とそれに基づく人工酵素の開発」化学と生物の新融合領域のフロンティア, 札幌, 2006年2月.

H. FUJII, “Spectroscopic Characterization of Reaction Intermediates in a Model for Copper Nitrite Reductase,” Post Hyaishi Symposium “Chemical Biology of Redoxmetalloenzymes,” Hrima (Japan), April 2006.

藤井 浩, 「立体障害を導入した新規サレン錯体による単核非ヘム酵素の構造と機能の研究」分子研研究会「金属機能中心を持つ高性能分子システムの創成——その構造と機能」岡崎, 2006年6月.

H. FUJII, “Control of Regioselectivity of Heme Oxygenase by Reconstruction of Hydrogen-Bonding Interactions between Substrate and Enzyme,” 5<sup>th</sup> East Asia Biophysics Symposium, Okinawa (Japan), November 2006.

#### 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」 「<sup>17</sup>O-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的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

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いる。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さらに発展させて、酵素、タンパクのつくる反応場の特徴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基に、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 ~ 2006 年 3 月 31 日 ) \* )

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)  $\beta_2$  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。サブナノ秒時間分解紫外共鳴ラマンも同時に調べている。1997 年には、水谷助手（現大阪大教授）のミオグロビンのヘム冷却過程の研究成果が雑誌 *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井上研究奨励賞と森野研究奨励賞を受賞。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応用。
- 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帰属した。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) ヘム酵素による酸素活性化機構の解明。その反応中間体である高酸化ヘムの  $\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}$  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  $\text{O}_2$  還元機構の研究は 1993 年の化学会進歩賞受賞の栄誉に輝いた。また総研大生でこの仕事をしていた廣田俊君（2007 年 4 月より奈良先端大教授）はその学位論文に対し井上研究奨励賞を受賞した。
- 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。数ピコ秒で起こる振動エネルギー再分配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。これらに参加した総研大生の高橋聡君(現阪大助教授)は, 最近森野研究奨励賞を受賞。
- 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。
- 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。この研究を行った院生の富田君(東北大助手を経て, 現在 NIH 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 種類になって, 活性は 200 倍近くなる。CO と YC-1 に協同効果がある。
- 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。
- i) 環境因子として CO, NO, O<sub>2</sub> 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ヘム蛋白質の共鳴ラマン分光。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生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<sub>2</sub> 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。
- j) DNA の損傷を受けた部分を光の作用で修復する酵素の共鳴ラマン分光。その酵素を大腸菌で大量発現し, それに FAD や MTHF を結合させた時, 或は青色光照射による修復中間体の蛋白の構造変化を紫外共鳴ラマン法で検出する。
- k) 免疫蛋白の抗原結合部位に相当する  $\beta_2$  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濃縮され, 突然アミロイド線維を形成して痛みを与える。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。この蛋白の # 11-21 残基で作った線維の IR を JACS に報告した。

#### B-1) 学術論文

**T. OHTA, B. PAL and T. KITAGAWA**, "Excited State Property of Hardly Photodissociable Heme-CO Adduct Studied by Time-Dependent Density Functional Theory," *J. Phys. Chem. B* **109**, 21110–21117 (2005).

**T. OSAKO, S. NAGATOMO, T. KITAGAWA, C. J. CRAMER and S. ITOH**, "Kinetics and DFT Studies on the Reaction of Copper(II) Complexes and H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>," *J. Biol. Inorg. Chem.* **10**, 581–590 (2005).

**E. PINAKOULAKI, T. OHTA, T. SOULIMANE, T. KITAGAWA and C. VAROTSIS**, "Detection of the His-Heme Fe<sup>2+</sup>-NO Species in the Reduction of NO to N<sub>2</sub>O by ba<sub>3</sub>-Oxidase from *Thermus thermophilus*," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 15161–15167 (2005).

**C. V. SASTRI, M. J. PARK, T. OHTA, T. A. JACKSON, A. STUBNA, M. S. SEO, J. LEE, J. KIM, T. KITAGAWA, E. MUNCK, L. QUE, Jr. and W. NAM**, "Axial Ligand Substituted Nonheme Fe<sup>IV</sup>=O Complexes: Observation of New near UV LMCT Bands and Fe=O Raman Vibrations," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 12494–12495 (2005).

- J. KARDOS, D. OKUNO, T. KAWAI, Y. HAGIHAWA, N. YUMOTO, T. KITAGAWA, P. ZAVODSZKY, H. NAIKI and Y. GOTO**, “Structural Studies Reveal that the Diverse Morphology of  $\beta_2$ -Microglobulin Aggregates is a Reflection of Different Molecular Architectures,” *Biochim. Biophys. Acta* **1753**, 108–120 (2005).
- T. OSAKO, S. TERADA, T. TOSHA, S. NAGATOMO, H. FURUTACHI, S. FUJINAMI, T. KITAGAWA, M. SUZUKI and S. ITOH**, “Structure and Dioxygen-Reactivity of Copper(I) Complexes Supported by Bis(6-methylpyridin-2-yl-methyl)amine Tridentate Ligands,” *Dalton Trans.* 3514–3521 (2005).
- T. KURAHASHI, Y. KOBAYASHI, S. NAGATOMO, T. TOSHA, T. KITAGAWA and H. FUJII**, “Oxidizing Intermediates from the Sterically Hindered Iron Salen Complexes Related to the Oxygen Activation by Nonheme Iron Enzymes,” *Inorg. Chem.* **44**, 8156–8166 (2005).
- H. SAWAI, M. MAKINO, Y. MIZUTANI, T. OHTA, H. SUGIMOTO, T. UNO, N. KAWADA, K. YOSHIZATO, T. KITAGAWA and Y. SHIRO**, “Structural Characterization of the Proximal and Distal Histidine Environment of Cytochrome c and Neuroglobin,” *Biochemistry* **44**, 13257–13265 (2005).
- 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. KONISHI, T. OHTA, K. OINUMA, Y. HASHIMOTO, T. KITAGAWA and M. KOBAYASHI**, “Discovery of a Reaction Intermediate of Aliphatic Aldoxime Dehydratase Involving Heme as an Active Center,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **103**, 564–568 (2006).
- T. MATSUMOTO, H. FURUTACHI, M. KOBINO, M. TOMII, S. NAGATOMO, T. TOSHA, T. OSAKO, S. FUJINAMI, S. ITOH, T. KITAGAWA and M. SUZUKI**, “Intramolecular Arene Hydroxylation versus Intermolecular Olefin Epoxidation by  $(\mu\text{-}\eta^2\text{:}\eta^2\text{-Peroxo})\text{dicopper(II)}$  Complex Supported by Dinucleating Ligand,” *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 3874–3875 (2006).
- J. M. STEVENS, T. UCHIDA, O. DALTRUP, T. KITAGAWA and S. J. FERGUSON**, “Dynamic Ligation Properties of the *Escherichia coli* Heme Chaperone CcmE to Non-Covalently Bound Heme,” *J. Biol. Chem.* **281**, 6144–6151 (2006).
- S. NEYA, K. IMAI, Y. HIRAMATSU, T. KITAGAWA, T. HOSHINO, M. HATA and N. FUNASAKI**, “Significance of the Molecular Shape of Iron Corrole in a Protein Pocket,” *Inorg. Chem.* **45**, 4238–4242 (2006).
- J. CHO, H. FURUTACHI, S. FUJINAMI, T. TOSHA, H. OHTSU, O. IKEDA, A. SUZUKI, M. NOMURA, T. URUGA, H. TANIDA, T. KAWAI, K. TANAKA, T. KITAGAWA and M. SUZUKI**, “Sequential Reaction Intermediates in Aliphatic C–H Bond Functionalization Initiated by a Bis( $\mu\text{-oxo}$ )dinickel(III) Complex,” *Inorg. Chem.* **45**, 2873–2885 (2006).
- H. FUJII, T. KURAHASHI, T. TOSHA, T. YOSHIMURA and T. KITAGAWA**, “ $^{17}\text{O}$  NMR Study of Oxo Metalloporphyrin Complexes: Correlation with Electronic Structure of  $\text{M=O}$  Moiety,” *J. Inorg. Biochem.* **100**, 533–541 (2006).
- Y. SUH, M. S. SEO, K. M. KIM, Y. S. KIM, H. G. JANG, T. TOSHA, T. KITAGAWA, J. KIM and W. NAM**, “Nonheme Iron(II) Complexes of Macrocyclic Ligands in the Generation of Oxoiron(IV) Complexes and the Catalytic Epoxidation of Olefins,” *J. Inorg. Biochem.* **100**, 627–633 (2006).
- P. M. KOZLOWSKI, J. KUTTA, T. OHTA and T. KITAGAWA**, “Resonance Raman Enhancement of  $\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}$  Stretch in High-Valent Iron Porphyrins: An Insight from TD-DFT Calculations,” *J. Inorg. Biochem.* **100**, 744–750 (2006).
- K. KOBAYASHI, B. PAL, S. YOSHIOKA, Y. KATO, Y. ASANO, T. KITAGAWA and S. AONO**, “Spectroscopic and Substrate Binding Properties of Heme-Containing Aldoxime Dehydratases, OxdB and OxdRe,” *J. Inorg. Biochem.* **100**, 1069–1074 (2006).

- Y. MUKAIYAMA, T. UCHIDA, E. SATO, A. SASAKI, Y. SATO, J. IGARASHI, H. KUROKAWA, I. SAGAMI, T. KITAGAWA and T. SHIMIZU**, “Spectroscopic and DNA-Binding Characterization of the Isolated Heme-Bound Basic Helix-Loop-Helix-PAS-A Domain of Neuronal PAS Protein 2 (NPAS2), a Transcription Activator Protein Associated with Circadian Rhythms,” *FEBS J.* **273**, 2528–2539 (2006).
- H. YOSHIMURA, S. YOSHIOKA, K. KOBAYASHI, T. OHTA, T. UCHIDA, M. KUBO, T. KITAGAWA and S. AONO**, “Specific Hydrogen-Bonding Networks Responsible for Selective O<sub>2</sub> Sensing of the Oxygen Sensor Protein HemAT from *Bacillus Subtilis*,” *Biochemistry* **45**, 8301–8307 (2006).
- T. TOSHA, N. KAGAWA, T. OHTA, S. YOSHIOKA, M. R. WATERMAN and T. KITAGAWA**, “Raman Evidence for Specific Substrate-Induced Structural Changes in the Heme Pocket of Human Cytochrome P450 Aromatase during the Three Consecutive Oxygen Activation Steps,” *Biochemistry* **45**, 5631–5640 (2006).
- M. KUBO, S. INAGAKI, S. YOSHIOKA, T. UCHIDA, Y. MIZUTANI, S. AONO and T. KITAGAWA**, “Evidence for Displacement of the C-Helix by CO Ligation and DNA Binding to CooA Revealed by UV Resonance Raman Spectroscopy,” *J. Biol. Chem.* **281**, 11271–11278 (2006).
- T. TOSHA, T. UCHIDA, A. R. BRASH and T. KITAGAWA**, “On the Relationship of Coral Allene Oxide Synthase to Catalase: A Single Active Site Mutation That Induces Catalase Activity in Coral Allene Oxide Synthase,” *J. Biol. Chem.* **281**, 12610–12617 (2006).
- J. LI, T. UCHIDA, T. TODO and T. KITAGAWA**, “Similarities and Differences between Cyclobutane Pyrimidine Dimer (CPD) Photolyase and (6-4) Photolyase as Revealed by Resonance Raman Spectroscopy: Electron Transfer from the FAD Cofactor to UV-Damaged DNA,” *J. Biol. Chem.* **281**, 25551–25559 (2006).
- M. LU, H. HIRAMATSU, Y. GOTO and T. KITAGAWA**, “Structure of Interacting Segments in the Growing Amyloid Fibril of  $\beta_2$ -Microglobulin Probed with IR Spectroscopy,” *J. Mol. Biol.* **362**, 355–364 (2006).
- Y. GAO, S. F. EL-MASHTOLY, B. PAL, T. HAYASHI, K. HARADA and T. KITAGAWA**, “Pathway of Information Transmission from Heme to Protein Upon Ligand Binding/Dissociation in Myoglobin Revealed by UV Resonance Raman Spectroscopy,” *J. Biol. Chem.* **281**, 24637–24646 (2006).
- J. LI, T. UCHIDA, T. OHTA, T. TODO and T. KITAGAWA**, “Characteristic Structure and Environment in FAD Cofactor of (6-4) Photolyase along Function Revealed by Resonance Raman Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. B* **110**, 16724–16732 (2006).
- Y. GAO, M. KOYAMA, S. F. EL-MASHTOLY, T. HAYASHI, K. HARADA, Y. MIZUTANI and T. KITAGAWA**, “Time-Resolved Raman Evidence for Energy Funneling through Propionate Side Chains in Heme Cooling Upon Photolysis of Carbonmonoxy Myoglobin,” *Chem. Phys. Lett.* **429**, 239–243 (2006).
- Y. NAGANO, J. -G. LIU, Y. NARUTA, T. IKOMA, S. TERO-KUBOTA and T. KITAGAWA**, “Characterization of the Phenoxyl Radical in Model Complexes for the Cu<sub>B</sub> Site of Cytochrome c Oxidase: Steady-State and Transient Absorption Measurements, UV Resonance Raman Spectroscopy, ESR Spectroscopy, and DFT Calculations for MII-BIAIP,” *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 14560–14570 (2006).

#### B-4) 招待講演

北川禎三,「ヘム蛋白質における情報伝達と動的構造」金沢大学理学研究科特別講演会, 2006年2月.

北川禎三,「ミオグロビンの超高速構造変化、ヘム - 蛋白質情報伝達の道筋、及びガスセンサーヘムタンパクの作用機作」山手イブニングセミナー, 岡崎統合バイオサイエンスセンター, 2006年3月.

**T. KITAGAWA**, “Structure of the  $\text{Fe}_{a3}\text{-Cu}_B$  Binuclear Center of the High Oxidation State ( $\text{Fe}^{\text{V}}$  Level) Intermediate of Cytochrome *c* Oxidase Revealed by Time-resolved Resonance Raman Spectroscopy,” Satellite Symp. of XIIth Intl. Congr. Quan. Chem., “Material Oriented Quantum Chemistry,” Senri Life Science Center, Osaka (Japan), May 2006.

北川禎三, 「NO センサー蛋白、グアニレートシクラーゼがCO に鋭敏になるときの構造化学」第22回化学反応討論会, 岡崎コンファレンスセンター, 2006年6月.

**T. KITAGAWA**, “Information Transduction Mechanisms from Heme to Protein in Myoglobin and Gas Sensor Proteins,” Intl. Symp. on “Biochemistry and Molecular Biology of Sensor Enzymes and Proteins,” Inst. Multidisciplinary Res. for Advanced Materials, Sendai (Japan), June 2006.

**Y. GAO, S. F. EL-MASHTOLY, B. PAL, T. HAYASHI, K. HARADA and T. KITAGAWA**, “Signal Transfer Mechanisms from Heme to Protein in Myoglobin,” Intl. Conf. Porphyrin and Phtalocyanine, Rome (Italy), July 2006.

**T. KITAGAWA, S. F. EL-MASHTOLY, Y. GAO, M. KUBO, T. UCHIDA and S. AONO**, “Reaction Mechanism of Gas Sensor Heme Proteins Revealed by UV and Visible Resonance Raman Spectroscopy,” IUPAC Conference, Kyoto (Japan), July 2006.

**T. KITAGAWA**, “Resonance Raman Investigation of Intramolecular Sinaling Mechanism of Gas Sensor Proteins,” Intl. Conf. Raman Sectrosc., Yokohama (Japan), August 2006.

北川禎三, 「蛋白質の速い構造変化と情報伝達におけるその役割: 時間分解及び紫外共鳴ラマン分光法による研究」さきがけ研究(光と制御)特別講演, 支笏湖, 2006年9月.

**T. KITAGAWA**, “Structure of Heme in High Activity CO Adduct of Soluble Guanylate Cyclase Revealed by Resonance Raman Spectroscopy,” 3<sup>rd</sup> AsBIC, Nanjin (China), October 2006.

**T. KITAGAWA**, “Resonance Raman Study on Structural Mechanism of the Conversion from an NO Sensor to CO Sensor in Soluble Guanylate Cyclase,” East Asian Biophyscis Congress, Naha Conv. Center (Japan), November 2006.

#### 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

Internatinal Conference on Raman Spectroscopy, International Steering Commitee (1988-1994).  
 International Conference on Time Resolved Vibrational Spectroscopy, International Organizing Commitees (1989- ).  
 11th International Conferens on Photobiology, Symposium organizer (1992).  
 Vth Intr1. Conf. on Time-resolved Vibrational Spectroscopy(Tokyo), Loca1 Organizing Committee (1991).  
 Symposium on Recent Developments in Vibrational Spectroscopy, International Chemical Congress of Pacific Basin Societes (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- ).

*J. Polymer Science, 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).

#### B-9) 学位授与

GAO, Ying, 「Resonance Raman Investigation of Protein Dynamics Studies on Myoglobin: Information Transmission and Energy Funneling Mechanisms」 2006年9月, 博士(理学)

LI, Jiang, 「Resonance Raman Studies on Reaction Mechanism of Photolyases: Structural Characteristics of the Active Site and Photo-repair Mechanism of UV-damaged DNA」 2006年9月, 博士(理学)

LU, Ming, 「Structural Studies of Amyloid Fibril of  $\beta_2$ -Microglobulin: Application of IR Micro-spectroscopy」 2006年9月, 博士(理学)

#### B-10) 外部獲得資金

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:  $\beta_2$  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。

\* ) 2006 年 4 月 1 日豊田理化学研究所フェロー



## 4 . 点検評価と課題

### 4-1 外国人運営顧問による点検評価

#### 4-1-1 E. Joseph Nordgren 外国人運営顧問

原文

Report following a visit at IMS, Okazaki on August 16–19 2006

E. Joseph Nordgren

#### Comments on organization and special matters

During a visit at the Institute of Molecular Science on August 16–19 2006 I had a chance to meet several scientists at IMS and discuss their scientific programmes, as well as making a lab visit. Interaction with IMS scientists was also facilitated during the 66<sup>th</sup> Okazaki Conference IWSXR “International Workshop on Soft X-ray Raman Spectroscopy and Related Phenomena.” Among other matters discussions during the visit also addressed issues regarding the IMS promotion system, interaction with universities, working conditions of senior scientists, *etc.*

Let me briefly address some of the matters discussed during the visit, starting with the promotion system and the interaction with universities. The applied strategy of giving a young researcher with ambitions and a good forecast the possibility to focus on the development of his/her ideas in a resourceful environment as an associate professor is a good one. This is often a quality driving factor for which research institutes historically may have had an advantage compared to universities, at least in some parts of the world. The Max Planck institutes in Germany are good examples of this. However, there are also other examples, where research activities at institutes have run the risk of stagnating due to lack of dynamics. In Sweden, for instance, this notion led to the discontinuing of the operation of some research institutes pursuing basic science (which, according to my own view, may not have been the optimum solution).

It is important to have in place mechanisms that maintain dynamics in terms of inflow of ideas and incentives for renewal. This is preferably accomplished through a balanced interaction with universities, as applied at IMS, where exchanging young scientists offers opportunities for renewal. Scientific exchange through various guest researcher programs is efficient in this respect, and they should preferably go in both directions, and include universities worldwide. The rule that an associate professor can not be promoted at IMS is probably generally a good one. However, there may be very special cases where the institute makes a severe loss of competence when an associate professor has made particularly excellent work and build up of ground-breaking new science. If one can not allow for exceptions one could think of forming a special link to the person in question and to the university where he or she is moving, in order to retain this very special resource in terms of a joint effort.

Regarding the question of a strict retirement age of 65 I would like to make the comment that lack of strict retirement may be a hindrance for renewal. However, as many scientists still have much to offer at the age of 65 one would like to find a way to implement retirement in a way that allows this resource to be utilized. The implementation of such a system could be a question of changing the role from one who leads to one who counsels and guides. The American “retirement-free” system is often attracting prominent European retired scientists who can continue their career in a successful way.

Independence of the full professors at the institute is an important principle. In my view one should put all the effort into the candidate seeking process to assure that one gets the absolutely best people. After being installed as full professor independence with respect to science is crucial, although everyone would of course have to be evaluated at times to assure that high international standing is maintained. These evaluations would also guide funding allocation. Regarding associate professors one should also try to allow maximum independence as this is important for the training, although the integration in a particular project defined in a wider context may put some limitations.

The research groups are generally not very big at IMS, which to some extent is at variance with respect to some other institutes in the world, where one tries to establish over-critical excellent research environments. Although the limited size may give opportunities for a larger number of different activities, under-critical size may limit rapid development of new ideas. One may therefore want to add another research associate to the groups in some cases and to allow for flexibility in hiring postdocs if good candidates are at hand, and one may also want to stimulate collaboration. With intensified collaboration between groups at IMS and project cooperation and integration with university researchers one is likely to maintain efficient research structures with dynamical properties based on group sizes not much bigger than presently found at IMS.

The trend in the world that research is increasingly more difficult to fund unless it has a well defined technical or societal application poses problems to science as well as applied science. Molecular science is subject to rapid development and increased significance in many areas of science and technology. In order to be successful in funding basic molecular science one has to be able to make clear the importance of understanding the connection between the fundamental properties of molecular materials and their applications. Science history is a good companion in this endeavor as it offers ample examples of how basic knowledge emerging from fundamental studies has been crucial for technical applications. This is to some extent a pedagogical problem, and by joining efforts among groups in formulating proposals for future research, painting the picture with the brushes of different groups, one may be able to master this pedagogical problem. This process may also lead to a natural restructuring that, in turn, leads to even more efficient and creative research environments.

Photon science is of utmost importance for the advancement of molecular science. This has been the case and this seems to become even more evident in the future. There is no accident that a few of the largest research facilities in the world, like DESY in Germany and SLAC in USA are shortly redirecting their efforts entirely into photon science, with new projects in synchrotron radiation and free electron laser activities. Lasers and synchrotron radiation facilities will play a very important role for molecular science. Molecular science based on lasers, synchrotron radiation and free electron lasers are likely to be an expanding area with many applications. Ultra-fast processes become accessible for study with these techniques, and very dilute systems, like mass selected clusters, will lend themselves to studies owing to increased brightness of photon sources. Coherence properties also for VUV radiation will allow new classes of experiments. Advancement of the photon facilities and work to co-operate them in highly synchronized modes will form interesting new means of study of molecular materials.

There are good examples of advanced instrument development at IMS. Again, science history clearly shows that significant leaps in science are often associated with new instruments or experiment techniques. By efficient integration of researchers and facility staff this is an area that could be successfully pursued also in the future.

As mentioned above exchange programs should include universities overseas, and one should try to adjust the terms in a way that optimizes the probability for success in engaging scientists as guest researchers. There could be different categories of guest scientists, from postdoctoral level to more prominent senior scientists. It may be valuable to think about a two-way exchange with

the same institution, so that deeper contacts are established between several persons (on various levels) at both IMS and the overseas institution. This may also help to overcome any cultural barriers that might exist, and aid in the planning of visits.

It is very stimulating to note that the Okazaki Conference Program restarted with the 66<sup>th</sup> Conference in August of 2006. This conference presented a highly appreciated program and was a well-organized meeting. The continuation of this series is likely to have a very positive effect on the rate of exchange with overseas institutions.

The system of engaging foreign councilors for a two-year period to advise on the research at IMS is worth pursuing, possibly with coinciding visits of the councilors. It might be valuable to use a format where an evaluation is carried out based on a written report and future plan account communicated in advance in addition to the visit interviews. It could also be considered whether the councilors should take part as adjunct members at a council meeting when applicable.

### Comments on research programmes

Professor Takuji Ogawa is conducting a research programme in the field of molecular electronics. Of great importance is the study of topological and electronic properties of nanostructures, and as a major tool he is using AFM instruments in the point contact current imaging (PCI) mode. This offers information on the topography and electrical conductivity simultaneously avoiding structural damages due to the loading force of the tip. Professor Ogawa is presently also developing a two-probe AFM.

The research is stimulated by the foreseen fundamental limitations of the current use of semiconductor devices and magnetic/optical discs in information technology. Professor Ogawa and his group are studying the prospects and problems of single molecule devices for future information technologies and other advanced applications. The operation principles of these devices are based on single molecule phenomena, such as electron transfer and direct electron-hole recombination. Metallo-porphyrin complexes are examples of systems that have been studied in this context. One finding is that the structure of the axially coordinated complexes depends on the center metal, such that when magnesium was employed as the center metal, a 1:1 coordinated complex was obtained, whereas for zinc or rhodium porphyrins sandwich-bonded complexes form. The single wall nano-tube (SWNT) wiring method and PCI-AFM can be very effectively combined to measure transport across single or several molecules. This combination allows the simultaneous observation of the topography of the molecules on the electrode during measurement, and using this technique, a nano-rectification device has been controllably wired onto an SWNT by chemical synthesis.

Professor Ogawa is conducting a successful programme in molecular scale electronics, showing an intense recent publication rate (12 papers so far in 2006). His main project, combining SWNT for wiring and organic molecules for function, applying advanced measurement techniques, is likely to show continued progress and to deliver interesting results.

Professor Hiromi Okamoto is conducting research in the field of collective excitations of electrons on metal surfaces, surface plasmons. This is an area of considerable interest for many different science fields. Surface plasmons are extensively studied not only for their fundamental interest, but also for applications to sensor technology to characterize molecules on the interface between metals and dielectric media. Extremely sensitive surface enhanced Raman scattering (SERS) has found wide-spread applications, e.g. in sub-diffraction limited microscopy, and plasmonic devices are subject to intense interest for its properties in laterally confined metal structures. Dispersion relations of surface plasmons are of fundamental interest and subject to studies by professor Okamoto and his group. They have, for instance, in a scanning near-field optical two-photon-induced photoluminescence microscopy study of gold nanorods demonstrated that the rods show spatially oscillating patterns along the rod axis, which could be associated with the plasmon-mode wave functions, as the images reveal characteristic features reflecting the eigenfunction of a specific plasmon

mode as well as electric field distributions around the nanorod. The scientific activity of professor Okamoto and his group reflects high quality and well-chosen directions of study.

It is important that the Laser Research Center for Molecular Science can keep a critical mass and replace the associate professors that have moved on to other laboratories. The high-power CW green laser achievement of professor Taira is one of many good examples of the work.

Professor Ohmori is conducting studies of quantum mechanical interference in molecular systems due to the relative motion of the nuclei. Interference results from natural spreading of the wave packets during their propagation. For co-propagating wave packets the interference pattern, which involves components from the different partial waves having the same momentum, is very time-stable, whereas for counter-propagating wave packets the interference pattern is localized in space only during the crossing time. In order to be able to observe the quantum interference professor Ohmori and his group have developed a system with extremely high temporal and spatial resolutions and robustness. This is a highly impressive achievement. Professor Ohmori has proposed a way to perform quantum computations by combining an ensemble of molecular states and weak laser pulses. His work is very advanced and at the very fore-front in the field.

During the 66<sup>th</sup> Okazaki Conference professor Okazaki presented a molecular dynamics study on vibrational relaxation in solution. It involved *e.g.* investigation of the influence of single- and multiphonon processes, quantum effect influence on relaxation time, as well as coordination depth dependence of the energy flow. The presentation was well made and received, and it reflected significance and validity of the study.

Professor Saito presented a molecular dynamics study of two-dimensional Raman spectroscopy, showing that mode-couplings can be clearly observed as peaks corresponding to frequency sums and differences. In particular, the icosahedric ice anisotropy and amorphous ice local hydrogen bond network structures were shown to be sensitive to 2D Raman spectroscopy, and that this method can probe these properties in water. Professor Saito gave evidence of his significant standing in the field of molecular dynamics and study of water systems in particular.

---

訳文

2006 年 8 月 16–19 日分子研訪問に関するレポート

ジョセフ・ノルドグレン

#### 組織に対するコメントと特記事項

2006 年 8 月 16 - 19 日の分子科学研究所訪問の際に、私は分子研のいろんな研究者に会って、研究室を訪問すると同時に、彼らの研究計画について議論する機会を得た。また、第 66 回岡崎コンファレンス「軟 X 線ラマン分光法と関連現象に関する国際ワークショップ ( IWSXR )」の際には容易に分子研の研究者と交流ができた。訪問中の他の議題として、分子研の人事政策、大学との交流、シニアな研究者の研究環境などについても議論した。

訪問中の議題のいくつかについて簡単に述べておきたい。まずは、人事政策と大学との交流の問題から始める。意欲があり、見通しの良い若手研究者を助教授に採用して、優れた研究環境の中で自分のアイデアの展開に専念させるような戦略は優れたものである。このような戦略はしばしば、研究機関というものが世界の各大学（少なくとも部分的に）と比較して歴史的に優位に立っているところの推進力になっている。その良い例としてドイツのマックスブラ

ンク研究所群がある。しかし、他の例として、研究機関の研究活動がダイナミズムの欠如によって停滞する危険性もある。例えば、スウェーデンでは、このような意見によって基礎学術研究を行っているいくつかの研究機関の運営を中止することとなった（私はこのような中止は最適解ではないであろうと考えているが）。

再生に関する考えや動機付けの観点からダイナミズムを維持するための仕組みを持つことは重要である。このことは、分子研で行われているように、大学とバランスをとった交流を通して達成することが好ましい。分子研では若手研究者の交換によって再生の機会を作り出している。客員研究者を通じての研究交換プログラムも効果的である。客員研究者は大学と分子研の双方向であることが好ましく、また、世界の各大学も交換相手として含むべきである。分子研では助教授が内部昇格できないという規則は恐らく一般的な意味では優れたものであると言える。しかし、特殊なケースかも知れないが、ある助教授が著しく優秀な研究や最先端の新しい科学の構築に成果を挙げたときに分子研は大きな損失を被ることになる。内部昇格という例外を認めることができないのであれば、この特別な財産を共同成果として維持するために当該研究者や異動先の大学と特別な関係を築くことを考えてみたらどうか。

65歳という厳密な定年制度に関して言えることは、その厳密さをなくすことは再生を妨げることになるかも知れないということである。しかし、多くの研究者は65歳でも働けるので、その資産を利用する方向で定年制度を組み込む方法を見つける方がよい。そのような制度では、その人の役目は研究推進者から研究顧問的なものになることになる。アメリカの“定年なし”という制度はうまく研究が続けられるヨーロッパで定年を迎えた研究者を魅了している。

分子研の教授の独立性は重要な原則である。私の考えでは、絶対評価でベストな人材を確実に得られるような候補者選考過程にすべての努力を振り向けるべきである。一旦、教授として採用したなら研究面での独立性は極めて重要である。もちろんすべての研究者は時々、国際的に高い位置にいることを確認するために評価を受けるべきではある。これらの評価結果は研究費配分にも役立てることができよう。助教授に対しては、訓練的な意味でも重要なので、最大限の独立性を許すようにすべきである。かなり広い内容を持つ特定のプロジェクトに統合することもできるが、このことは独立性を制限することになるかも知れない。

分子研では各研究グループは一般的に言ってそれほど大きくない。このことは、際だって優れた研究環境を与えようとしている世界の他の研究機関と比較すると正反対である。研究単位を小さくすることで研究所としているんな分野で研究活動できるが、小さすぎると却って新しいアイデアを早く実現していく際にその勢いを失わせてしまうことにもなる。そのため場合によっては、研究グループにもうひとり助手を加えたり、もしよい候補がいるのであればポストを自分の判断で雇用できるように自由度を認めたり、共同研究を強化したりすることが考えられよう。分子研の各グループ間の共同研究を強化したり、大学の研究者とのプロジェクト的共同研究をまとめたりしながら、分子研の現在あるグループサイズをそれほど越えないようにしてダイナミズムを有する効果的な構造を維持することが好ましい。

世界的傾向として、技術的あるいは社会的な応用がないと研究費を獲得することは益々困難になってきているが、そのことは応用科学に加えて科学そのものにも問題を引き起こしている。分子科学は科学と技術のいろんな側面で急速に発展しており、重要度を増している。基礎分子科学で研究費を首尾よく獲得するためには、分子材料の基本的性質とその応用の間の関係を理解することの重要性をはっきりさせるようにしなければならない。科学の歴史をたどればよくわかるように、基盤研究から生み出される基礎的な知識が技術応用のためには極めて重要であることを、十分な形で例示すべきであろう。これはある種、教育問題である。異なったグループがそれぞれの筆を使って一枚の絵を描きあげるように、異なったグループがそれぞれ努力して将来計画を立案するようにすれば、この教育問題を解決で

きるかもしれない。この過程を経て、より効果的で創造的な研究環境に導くための再構築が自然な形で順序よく行われる。

光科学は分子科学の発展において究極的に重要である。すでに現状としてそうになっているし、将来的にはさらにはつきりするものと思われる。ドイツの DESY やアメリカの SLAC のように、世界的に最大級の研究施設が放射光と自由電子レーザーの新しい研究プロジェクトを携えて光科学に全勢力を傾けるのは偶然ではない。レーザー、放射光、自由電子レーザーを基盤とする分子科学は広い応用が可能な領域に拡大しようとしている。これらの手段を用いれば超高速過程の研究が可能になり、質量を分けたクラスターのような希薄な系も光源の輝度が向上するにつれ可能になる。VUV 光における干渉性は新しい実験を可能とする。光源施設を発展させ、光源同士を同期させることで分子物質の研究に新たな興味深い研究手段を提供する。

分子研では先端的な装置開発において優れた成果が挙がっている。再度言うが、歴史がはっきり語っているように、新しい装置や実験手法によって科学が大きく飛躍することが多い。研究者と施設スタッフの効果的な統合を図れば将来にわたってうまく推進できる分野となる。

上述のように交換プログラムには海外の大学を含むべきである。また、客員研究員を雇って成果を上げやすくするために客員期間をうまく調整するようにすべきである。ポスドクから業績顕著な研究者までいろんな種類の客員研究員がありえる。つまり、分子研と海外の研究機関の複数の研究者間で（いろんなレベルで）より深く接点を持てるように、同じ研究機関と双方向の交換プログラムを考えてみる価値があるであろう。これはまた文化的障壁を克服するためにも役立つと思われるし、訪問を計画する場合の助けにもなる。

2006 年 8 月に第 66 回目として岡崎コンファレンスが再開したことを知り、非常に感銘を受けた。このコンファレンスは高い研究レベルのプログラムから成り、よく組織された会合だった。このコンファレンスを継続することは海外の研究機関との交流を増やす意味でも非常に効果的と思われる。

分子研での研究に関してアドバイスを与えるために 2 年間、外国人運営顧問を雇うシステムは外国人運営顧問の訪問時期に合わせることができれば価値がある。面接に基づき評価することに加えて、事前に書いてもらった報告書と将来計画書に基づき評価する方式を採用することは意味があるかもしれない。可能なら、外国人運営顧問は運営顧問会議の補佐役として参加することも考えてみたらどうだろうか。

## 研究プログラムに対するコメント

小川琢治教授は、分子エレクトロニクス分野での研究プログラムを推進している。最も重要なポイントは、ナノ構造体のトポグラフィー像と電子特性の同時計測を行うことである。そのための主要な手法として彼は点接触電流像原子間力顕微鏡を用いている。この方法により、チップの荷重により構造体に損傷を与えることなくトポグラフィー像と電気伝導度の計測が可能になる。小川教授は、現在、二探針原子間力顕微鏡も開発している。

この研究は現在の情報技術における半導体デバイスや磁気・光学ディスクのやがて来る原理的限界を契機としている。小川教授と彼のグループは将来の情報技術やその他の先端技術のために、単分子素子の可能性と問題点を研究している。これらの素子の動作原理は、電子輸送や直接電子・ホール結合などの単分子現象に基づいている。この流れの中で、例えば金属ポルフィリン錯体の研究が行われてきた。一つの発見は、中心金属への軸配位型錯体の構造に関するものである。例えば、中心金属としてマグネシウムを用いると 1:1 錯体を得られるが、亜鉛やロジウムポルフィリンではサンドイッチ型錯体が形成する。単層カーボンナノチューブによる配線法と PCI-AFM を用いる方法は、単一ないしは数個の分子の電子輸送現象を計測する、非常に効果的な方法である。この組み合わせにより、計測中に電

極上の分子のトポグラフィ像を得ることに成功している。また、これによりナノ整流素子を化学的合成手法で単層カーボンナノチューブ上に配線することに成功した。

小川教授は、分子スケールエレクトロニクスにおいて研究プログラムをうまく推進している。また、速いスピードで論文を発表している（2006年に関しては12報）。彼の主なプロジェクトであるSWNTを配線に分子を機能部分に用いる手法と進んだ計測技術は、さらなる発展を続け、興味深い結果を発信し続けるであろう。

岡本裕巳教授は、金属表面における電子の集団励起、即ち表面プラズモンに関わる研究を行っている。この研究領域は、多くの異なる研究分野の興味を引いている。表面プラズモンはその基礎的興味のみならず、金属と誘電媒質の界面にある分子をキャラクタライズするためのセンサー技術への応用に関しても、広く研究されている。超高感度の表面増強ラマン散乱（SERS）には多くの応用、例えば回折限界を超える顕微観測手法などが考えられ、またプラズモニック素子の、水平方向に小さい領域に閉じ込めた金属構造体の（光学的）性質に関して、大きな興味が持たれている。表面プラズモンの分散関係は基礎としての興味があり、岡本教授のグループではそれを研究している。彼らは例えば、近接場2光子誘起発光顕微鏡を用いた研究で、像が特定のプラズモンモードの固有関数の特徴やナノロッドの周辺の光電場の分布を反映すること、そして実際に金ナノロッドが、プラズモンモードの波動関数に起因すると考えられる、ロッドの軸に沿って空間的に振動するパターンを与えることを示した。岡本教授のグループの科学研究の活性は、質の高い、方向性を旨く選択した研究を反映したものと言える。

分子制御レーザー開発研究センターに関しては、必要人員を確保し、転出した助教授の後任を埋めることが重要である。センターの高い業績の一例として、平等助教授による高出力CWグリーンレーザーの性能の高さが上げられる。

大森教授は、分子内の核運動に伴う量子力学的干渉を研究している。干渉によって、波束は伝播しながら徐々に広がる。二つの波束が同方向に伝播する場合、干渉パターンは等しい運動量を持つ異なった部分波による成分を含んでおり、時間的にたいへん安定している。しかし、互いに対向する二つの波束の場合、干渉パターンは、波束が交差する間だけ空間的に局在して現れる。このような量子干渉を観測するために、大森教授と彼のグループは、時間的にも空間的にも極めて高分解能かつ安定性の高いシステムを開発した。これは実に目覚ましい成果である。大森教授は、分子状態のアンサンブルと弱いレーザーパルスを組み合わせて量子コンピューティングを行なう方法を提案した。彼の仕事は非常に先進的であり、まさにこの分野の最先端にある。

岡崎教授は、第66回岡崎コンファレンスで、溶液中における振動緩和の分子動力学法による研究を報告した。ここでは、たとえば1フォノン過程と多フォノン過程による緩和、緩和時間に対する量子効果、そしてまたエネルギー移動に対する溶媒の配位の位置依存性などが議論された。講演は優れたものであり、聴衆の反応も良く、研究の重要性和妥当性を反映している。

斉藤教授は、分子動力学計算に基づく2次元ラマン分光について講演を行った。その中で、系の運動モード間のカップリングが和周波や差周波に対応するピークとして見られることを示した。さらに、2次元ラマン分光が氷構造の非等方性やアモルファス氷の局所的な水素結合ネットワーク構造の違いにも感度の良いことを示し、また、この分光法により水の中のこれらの特徴が調べられることを示した。斉藤教授は、分子動力学計算の分野、特に水のダイナミクスの研究における特筆すべき水準にある。

Report to Director-General Hiroki NAKAMURA

To: Hiroki NAKAMURA, Director-General of IMS

From: A. Welford Castleman, Jr., *Eberly Distinguished Chair in Science, Evan Pugh Professor*

Subject: Report of my visit, November 11–16, 2006

Pursuant to your request I visited the IMS during the afore listed dates and reviewed the program accomplishments and activities of number of members of your institute. The following summarizes my findings and brief recommendations.

It is often said that chemistry is the “central science,” and the synergistic activities underway at Institute for Molecular Science represent premier examples of this fact, with programs spanning fundamental activities in areas from biology to materials science. Clearly science in Japan derives a great deal of its recognized prowess from the research activities of the IMS and also the facilities it provides researchers to undertake work at cutting edge of science in a number of areas. Despite the many advances which I witness during my various visits to the IMS, one disturbing trend is the progressively diminishing financial resources provided by government funding, a fact which slowly erodes the breadth of the scientific activities which can be pursued. This is detrimental to the IMS, but on a bigger scales, to science in Japan, in general. An especially shortsighted change made throughout Japan by the government was “privatization,” which requires scientists to seek individual funding of projects and most disturbingly decouples the government from direct funding of institutes as well as university faculty positions. Another financial situation which adversely impacts student choice of science as a career, is the comparatively low stipends available for those pursuing a PhD degree, about half of the financial amount provided to students in the US. In view of the large number of institutions impacted by the above mentioned matters, one can hope that the government will take appropriate action to rectify these very serious problems.

One recent development that I became aware of during my visit is the very promising proposal of “networking” which is under consideration. The idea of country wide sharing of research instrumentation, if implemented, will have a major impact on the ability of universities at all levels to have access to advanced instrumentation and to be able to pursue research activities that they would otherwise not be able to undertake. This unique idea should find support by both university researches as well as government funding decision makers as it will enhance the research capabilities in chemistry, and at the same time reduce the financial pressure on available resources. It should also have the added benefit of furthering interaction and possible collaboration among researchers throughout the country.

The IMS continues its major impact in the area of chemistry and related areas of science. I found its two main activities, namely providing a breadth of fundamental scientific research in key areas and offering advanced research facilities to its Institute members as well as the broader research community to be healthy despite the adverse funding situation. The Director-General and his key scientific staff deserve special commendation.

The state of science at IMS is very healthy. Numerous individuals with whom I met described activities at the cutting edge of their individual research fields. Importantly, it was easy for me to understand and appreciate the synergistic effects arising from cross fertilization of ideas which are emerging among various individuals who are interacting at the IMS.

One area of current world wide interest is nanoscience. Several of the scientists with whom I met are directly involved in the

Nanoscale Science Center, and form a key nucleus of activities. Others were expecting to move to the center in the coming year and in my opinion most everyone with whom I interacted had research activities that would easily fit within the nanoscience umbrella and could actually broaden the intellectual pursuits and scientific directions. At the moment there is clearly a kernel on which to further build. The area of bionanoscience is a very promising future direction and the center is well positioned to make advances in this area.

Professor Kobayashi is undertaking some impressive and important work in the area of novel electronic and magnetic functions, particular photocontrollable molecular conductors and colossal magnetoresistance. I understand that he is expected to retire soon; it would be both to his as well as IMS's benefit if a mechanism could be found whereby he could continue to be active in this field, one in which he continues to make especially valuable contributions. His work relates to superconductivity, an especially interesting area both intellectually as well as in terms of potential applications.

Professor Tsukuda is conducting work at the forefront of nanoscale science, developing in collaboration with Professor Sakurai, methods to synthesize and explore the reactivity of ligated gold nanoparticles. Their findings with test reactions of an aerobic nature show dramatic size dependences. This is significant, and may shed light on the fundamentals of further understanding catalytic behavior, in view of his findings of a relationship with plasmon intensities of the particles. In particular they observe catalytic activity and the plasmon intensity to vary inversely with size. Sakurai's work on carbon systems also provides insight into synthesis of materials including ones of interest for electronic devices.

A valuable interrelationship pertains to the work of others in the center. For example is the interesting work of Professor Ogawa who is also working on gold particles, carbon nanotubes, and especially general issues in molecular electronics. He seems poised to make an important new development of a two probe AFM device that will enable what were heretofore impossible measurements on molecular systems to be accomplished. Professor Jiang has set the course to pursue the topic of dendramers which enable selective encapsulation of molecular species, leading to many new materials with unique properties. The research has the potential for developing materials with broad applications, from biology to new soft magnets. One major goal which will be an important accomplishment will be the use of light to attain spin transitions and charge separation.

Professor Nagata has an intriguing research activity with the goal of devising artificial molecules to accomplish photosynthesis. The work has the potential for important basic findings leading to new understandings how nature undertakes photosynthesis, as well potential applications of light harvesting and eventually solar energy conversion. Another activity which was described to me that involves potential biological applications, was the research program of Professor Urisu. I was particularly intrigued to learn about the research that involves an understanding of ion channels and cell membrane sensors, and potential to understanding of neuro-diseases such as Alzheimer's. Professor Urisu's pathway to this line of research was particularly surprising, but demonstrated how scientific progress depends on past experiences.

One of the major functions of IMS is to make available advanced instrumentation to enable the study of research issues at the cutting edge of modern chemistry. Professor Kosugi directs the UVSOR. Its upgrading several years ago continue to make it a facility of major importance. He has organized its use in a manner which functions well as a valuable user facility for other scientists in Japan, of some 600 in number who use it each year. Appropriately, in addition there are beam lines that are also dedicated for the use by members of the IMS. Historically it was the first advanced light source in Japan built solely for chemistry research, and has been a prime example of the value that derives from the access to such machines. In coming years the IMS should consider proposing

to the government other such major instrumentation beyond the 920 MHz NMR and advanced electron microscope which are other good examples of the benefit of an organization like the IMS.

As I have pointed out above, in my opinion, the IMS has considerable strength in a number of areas that may be administratively separate from nanoscale science, but which would easily fit in and broaden the scope of the center. Three scientists who come to mind include Professors Yokoyama, Suzuki and Yakushi. I understand that Yokoyama is expected to transfer the Nanoscale center in the spring. His discovery of magnetic circular dichroism in the vuv and related work near work function thresholds is particular interesting and the application to ultrathin films provides a direct connection to interests of others in the center, as does his work on Co nanorods. His research is an example of an area that depends heavily on the (Free electron characteristics of) UVSOR facility. The work of Suzuki and Yakushi demonstrate the prowess of the Institute in the area of organic materials and their potential to electronics. Suzuki has a well defined plan to pursue fundamental work on issues in the area of photovoltaics. Yakushi's work on charge ordering in organic conductors is another example of the strengths of IMS in organic electronics. Promising new basic understandings can be expected to arise from work on pressure effects influencing the phase transitions of charge ordering, as well as the onset of superconductivity.

The IMS continues to be a lead organization in chemistry research, known and respected throughout the world scientific community. The Institute has obvious strengths in conducting fundamental research as well providing a focal point for offering advanced instrumentation to the chemistry community throughout Japan. Interest in the fundamentals of nanoscale science are actively being pursued at IMS, and members of the organization have a particular advantage in having strengths in areas such as soft/organic materials. This can be expected to be a field of growing interest and importance, and IMS should capitalize on their strengths in this area. Finally, I wish to thank all of the scientific staff members for taking time to describe their work in detail, and in such a friendly and enthusiastic manner.. I greatly enjoyed my visit to the IMS.

---

訳文

## 中村宏樹所長への報告

分子科学研究所 中村宏樹所長へ

A. ウェルフォード キャスルマン、ジュニア

(エバーリー科学特別職、エバン ピュー教授)より

事項：2006年11月11日 - 16日の(評価)訪問の報告

貴殿のご要求に従って前記の日程で分子研を訪れ、研究所のメンバーの計画遂行状況と業績の評価を行いました。以下に、私が気付いた点と短い助言を記します。

Chemistryは、しばしば、“中心たる科学”と言われ、分子科学研究所で行われてきた生物学から物質科学にわたる領域で展開されてきた共働的活動は、この事実の重要な例として象徴的でしょう。明らかに、日本の科学は、分子研の研究活動と分子研が様々な分野に於ける最先端の仕事を行うために研究者に提供してきた設備群によって高く認識されているように、研究所の優れた力量から多くを学んでいると思われます。私がこれまで訪問する度に見てきた様々な進展に関わらず、現在起こっている一つの気になる傾向は、政府によって与えられる財政的な支援が徐々に減少しているように見えることです。これは、分子研にとっても困ったことですが、もっと大きな規模で、つまり日本の

科学全体にも言えることです。とりわけ政府によってなされた近視眼的な変化は、“独法化”でしょう。これは、政府が研究所や大学の教授陣に直接支援を行う制度を切り離し、研究者に対してプロジェクトを通して個々に支援を受ける道を捜させることに繋がっています。学生にキャリアとしての科学の選択に逆の影響を与えるもう一つの財政状況は、合衆国ではその半分が支給されている学生の給金に対する比較的低い支援であります。上に述べた事柄に影響を受ける多くの研究機関のことを考えて、政府はこれらの深刻な問題を克服する適切なアクションを取ることが望まれます。

今回の訪問で知ることになった最近の進歩は、現在進行中の（化学設備の）ネットワーク構想です。もし、実行されるとすると、先端の研究設備を国中で共有するという考えは、全ての大学人がこの先端の設備にアクセスできると、あるいは、今のままでは不可能であった進んだ研究を実行できうという大きなインパクトを有しています。このユニークな考え方は、化学の研究能力を増大すると同時に資源配分に対する財政当局が感じる圧力を弱めると言う意味で、大学の研究者ばかりでなく政府の大学支援に関する予算配分担当者からも支持されるでしょう。この制度は、国内の研究者間の相互の刺激を増すという利点があると同時に共同研究をも促進する可能性があります。

分子研は、化学の分野ばかりでなく関連の科学分野にも影響を与えています。私は、2つの主要な働きを見出しました。即ち、重要な分野としての基礎科学に息吹を与えると同時に、財政的には逆境にあるにも関わらず、広い分野の研究者を健全にするために先端の設備を提供しています。所長とその重要なスタッフは、特別の功労があるでしょう。

分子研の科学研究の状態は大変健全です。私が会った多くの研究者は、それぞれの研究領域で最先端の活躍をしています。私にも良く理解できる重要なことは、分子研でお互いに切磋琢磨し合う様々な研究者の中に、そのお互いのアイデアの深まりの中から出てくる共働効果が見られるということでしょう。

最近の世界的な広がりを持つ分野はナノサイエンスです。私が会った何人かの研究者は、ナノスケールサイエンスセンターに直接所属する方々です。他の人々も、近いうちにそこに移るのではと予想されたり、私の印象では、殆どの方がナノサイエンスという傘の下に容易に適合するような研究活動をしています。確実に知的な追求を深め科学の方向を広げておられるでしょう。現在の段階でも、確かに建設的な方向へ向かう核が出来ています。ナノバイオサイエンスの分野は、これから大いに飛躍するでしょうし、このセンターはこの方向へ向かう良い位置を占めていると思われれます。

小林教授は、新しい電氣的磁氣的機能、特に光制御可能な分子伝導体、巨大磁気抵抗の観点から非常に印象的且つ重要な仕事をしています。彼は、まもなく退職すると理解していますが、特に有効な貢献が期待されるこの分野で引き続き研究を続けて行くメカニズムが機能するなら、彼にとっても分子研にとっても益するところが多いでしょう。彼の仕事は、超伝導にも関連しており、知的な興味ばかりでなく応用への可能性も持つという大変興味深い分野です。

佃助教授はナノスケールサイエンスの最先端で指導的な仕事を行っています。これは、また合成法や配位した金ナノ粒子の反応性を高めるという櫻井助教授との共同研究をも発展させています。彼らの有酸素下のテスト反応においては、劇的なサイズ効果が見出されています。この事は大変重要ですが、粒子のプラズモン強度との関係で、触媒反応の挙動を理解する基本的な理解に光を当てるものになるかもしれません。特に、彼らは、サイズが減少すると共に反応活性とプラズモン強度が増加することを見出しています。櫻井助教授の炭素系に関する仕事は、電子デバイスへの興味からも物質合成への識見を与えるでしょう。

センターに於けるメンバー相互間の良い関係が見られます。例えば、小川教授の興味深い仕事には、金のナノ粒子やカーボンナノチューブや、特に一般的な対象となっている分子エレクトロニクスがあります。分子系ではこれまで

不可能とされていた 2 端子 AFM デバイスによる計測を可能にする直前にあるように思えます。江助教授は、分子種を選択的に閉じこめ、ユニークな性質を持つデンドリマーの研究を行おうとしています。この研究は、生物学からソフト磁石に至る広い応用に繋がる多くの新物質をもたらすでしょう。重要な成果に繋がる一つの大きなゴールは、光を用いてスピン転換を実現し電荷分離を起こすことでしょう。

永田助教授は、光合成を実現する人工的な分子系デバイスの構築というゴールを持つ、大変興味深い研究活動を行っています。この仕事は、自然がどの様に光合成を行っているのかを新しい観点で理解するための重要な基本的発見に繋がるでしょうし、光を捕集し太陽エネルギー変換を行う応用への展開も期待されます。私に示されたもう一つの研究活動は、生物学的な応用への可能性を持つものですが、宇理須教授の研究プログラムです。私は、イオンチャンネルや細胞膜センサーの理解、特にアルツハイマーのような神経の病気の理解の可能性を持つ研究に特別の興味を覚えました。宇理須教授のこの線での研究の過程は特に驚くべきものですが、この科学的な進歩が如何に過去の経験に依っているのかを示していました。

分子研の重要な機能の一つは、現代化学の先端的研究課題の遂行を可能にする最先端の装置を提供することでしょう。小杉教授は、UVSOR を主導しています。数年前のアップグレードによって更に重要な施設となっています。彼は、年間 600 人に上る国内の研究者を対象としてこの施設がより有効に働くように運営してきました。また、分子研のメンバーに対してもビームラインが適切に提供されてきました。歴史的には、この施設は化学研究に特化された最初の先端光源を持ち、そのような機器の利用によってもたらされる価値を示す最も重要な例でありました。近いうちに、分子研のような組織の立場で、920MHz NMR や先端の電子顕微鏡を越えた重要な大型装置の導入を政府に提案することを検討する必要があるでしょう。

既に指摘しましたように、分子研はナノスケールサイエンスとは形式上は別の広い多くの分野にも力点を置いておられるのですが、これは、センターの広い視野の中に適合するでしょう。次年度から、横山、薬師教授も重要なメンバーとなられることを聞いています。横山教授は、真空紫外領域での磁気 2 色性を見出しましたし、仕事関数近傍の領域に於ける振る舞いも特に面白いと思いました。また、コバルトナノロッドの仕事と同じように超薄膜への応用も、センターの他の人々の関心と呼ぶでしょう。彼の研究は、UVSOR 施設に依存した研究の重要な例でしょう。鈴木、薬師教授は、有機物質の領域で研究所の有能さと、そのエレクトロニクスへの潜在力を示すものでしょう。鈴木（助教授）は、光起電力の研究領域の問題に寄与をなす基本的な仕事を強調しています。薬師教授の有機伝導体に於ける電荷整列の仕事は、有機エレクトロニクス分野に於ける分子研の強さを示すもう一つの例でしょう。これには、超伝導転移領域と同様に、電荷整列の相転移に影響を与える圧力効果の仕事が新しい基本的な理解をもたらすであろうと期待されます。

分子研は化学研究の分野で指導力ある機関で在り続けるでしょうし、世界の科学のコミュニティーでよく知られ、高い評判を得ています。研究所は、日本の化学のコミュニティーに最先端の設備を提供する拠点となっていると同時に、基礎研究に明確な重点を置いています。ナノサイエンスの基礎的研究が分子研では活発に展開されており、特に、ソフト/有機マテリアルにおいては有力な組織となっています。この領域は、今後も益々興味深く重要なものとなるでしょうし、分子研はこの領域の重要性を広く知らしめるべきでしょう。最後に、皆さんそれぞれが時間を裂いて丁寧に、又、熱心に説明して頂いたことに感謝します。今回の分子研訪問を、大いに楽しみました。

## 4-2 運営顧問による点検評価

### 4-2-1 加藤伸一運営顧問

分子科学研究所と産業界との連携について

分子科学研究所 運営顧問

株式会社豊田中央研究所 加藤伸一

#### (1) はじめに

2004年度から分子科学研究所（以下分子研）は、大学共同利用機関法人自然科学研究機構に所属し、法人化された。これを機に、産学連携について考えていく気運となっている。当然のことであるが比較的应用に近い技術を研究している工学系の研究機関と比較して、分子研のような基礎科学研究を行う研究機関は産業界とはかなり距離がある。私はこのような時期に分子研の運営顧問を拝命した。この機会に分子研と産業界との連携についての見解を述べさせていただく。

#### (2) 工学系での産学連携

日本の工業は古くから大学の先生方の指導により発達してきた。自動車工業も生産技術、機械、材料、電気等の多分野の専門の先生方の指導のもと、企業の技術者が努力を重ね、今日まで発展してきた。産学連携はすでに長い間行われてきたといえる。現在は更に活発に行われているし、今後もっと進展するものと思われる。

製造業は将来ビジョンを掲げ、製品ニーズに向けて研究開発を行う。そのステップとして研究、先行開発、製品開発という三つのフェーズで進めていくのが通常である。特に研究および先行開発フェーズにおいて多くの技術の壁に当たり、どうしても前に進めないことがしばしば起こる。このような時、新しい技術のシーズ（知見、理論）や新しい解析技術が必要になる。学界に求められるシーズは、高度な先端技術であり、企業の持たない、知らない異分野のものであることが多い。

このような場合も、産業界が求めるものが学界のシーズと直接一致することは、極めて稀なことである。研究にはある目的を持って行われるだろうが、その成果は予想外のところに役立ったり、ある大きな示唆を与えたりして展開していくのが多いのではないと思われる。弊社でも、わずかであるが自由発想的研究を進めている。たとえば、新しい機能材料が開発されてもなかなか自動車に適用できず、予期せぬ異分野の産業界に应用できることがよくある。

このようにして、数多くの高度な技術シーズが研究開発途上の産学の交流を通じて生まれるなど、新しい技術を創成したり重要な問題を解決しながら研究開発は進められている。そのやり方としては、大学、研究機関と企業との共同研究が有効である。もしお互いに触発され、新しい技術を創出できれば最高の成果であろう。更に、共同研究には複数のテーマを一括して行う包括共同研究、また、国が主導するある大きなプロジェクトが設定され、複数の大学や企業が行う産学官連携コンソーシアムを組む研究がある。

その他にも産学ではなく産々連携がある。世には、極めて高度なコアコンピタンスを持っている優れた製造会社が沢山ある。そういう異分野の特殊技術を持つ会社と連携し、新しい価値のある製品を共同開発することは誠に有効であることを申し添えておく。

#### (3) 分子研での産学連携について

分子研は、前述したように研究者の自由発想による真理の発見、新しい理論を求める基礎科学、学術研究を行って

おり、社会のため、人類のために大きな重要な役割を担っている。従って直接出口を求めたり応用を考えたりすることは控えるべきと認識している。

しかしながら、派生的であっても研究の道中に何か産業界に役立つことがあるはずである。私は独立した企業の研究所に勤務しているので、普通の製造業の技術者より少しは分子研に近い存在であると認識している。そういった立場から、分子研との連携について以下のように考えてみた。

最先端の計測装置を借用し、画期的実験技法の指導を受ける。そして物質の真実の解明、新機能材料の探索および開発を行う。

民間レベルでは規模においてとても手の届かない最先端、超高速計算機を借用し、計算科学の画期的シミュレーション技法について指導を受ける。

最先端また異分野の知見を仰ぐ。直接的に役に立たなくても分子研の研究者が予想しなかった分野に、思いもよらなかったヒントを与え、進展していくことが期待される。これは前述したように工学系の研究機関でも同様である。分子研内でも、工学系に近い研究が行われており、企業との連携ができそうなものがある。

#### (4) おわりに

以上、思いつくままに産学連携を述べたが、進めるにあたり心がけておくことがある。

第一に、企業側の研究者のレベルが高いことが必須である。そのためには、その研究の専門分野で最適な能力の高い人材を育てておかねばならない。

第二は、産学のコミュニケーションが重要である。ニーズ、シーズの相互理解がなければ、出発点に立てない。お互いに研究現場を見学する交流会が時々でも行われていると成果がでてくる。

分子研の研究者が企業のために貴重な時間を費やすことは本来の任務をディスタートするようで心苦しいが、可能な範囲で指導いただきたいと思う。分子研と企業との交流により共同研究まで発展し、お互いが触発されて、新しいことが見えてくる可能性が期待される。

最後に、人類の未来の幸せのために、分子研の研究者の皆様の一層のご活躍を心から祈念する。

## 5．将来計画及び運営方針

いろいろと厳しい客観情勢の中にあって、分子研のあり方、施設・センターの将来計画や運営方針等々の検討が平成 18 年度においても活発に行われた。創設以来 30 年を越えた分子研にとって最も大きな変化は、昨年度のレポートでも触れたが、平成 19 年 4 月から実施された組織の大幅な再編である。1 年以上に亘る議論を経て研究系と研究施設・センターを大きく四つの領域に再編した。理論・計算分子科学、光分子科学、物質分子科学、生命・錯体分子科学の 4 領域である。それぞれの領域に関連研究施設・センターを配置し、研究系と施設の連携を深め学問的深化をも目指すものである。一方、施設・センターは、共同利用機関として極めて重要な存在であるので、組織図としては別途独立にも記載する。汎用機器の共同利用体制をよりスムーズにすること、及び、平成 19 年度概算要求で調査費程度の予算が認められてスタートすることとなった「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」を受けて、新たに機器センターを新設することとなった。これに伴い、分子スケールナノサイエンスセンターと分子制御レーザー開発研究センターの一部機器をこの新機器センターに移管することとした。

各施設・センターの将来計画等は以下の各節で説明されているが、その主要なものは以下の通りである。「ナノ支援」として行われてきた事業が、平成 19 年 4 月から「ナノテクノロジーネットワーク」と言う新しい企画となり、分子研は引き続きその一部を担うこととなった。理研との連携研究を行っている「エクストリーム フォトニクス」は着々と成果を挙げつつある。UVSOR は小型としては世界最高の性能を出しており、トップアップ運転への移行やレーザーとの合体による新しい光の発信などでも大きな成果を挙げつつある。国家基幹技術としての次世代スパコン開発事業のうち分子研が責任の中心を担っているナノ分野グランドチャレンジアプリケーションも順調に進行している。また、自然科学研究機構内の大きな連携事業の一つである「分子・物質シミュレーション中核拠点形成」も機構内外の研究者との連携研究が進められている。国際共同については、従来からの分子研独自の共同研究に加えて学術振興会の Asian Core Program が認められ、アジアにおける分子科学の振興と若手研究者の育成を目指した具体的活動が始められている。

最後に、上述した「設備有効活用ネットワークの構築」は、全国の化学系組織を持つ大学の協力を得て、将来の有効な体制構築を目指した活動を始めている。平成 19 年度には、この新しいシステムが働くことを実証し、平成 20 年度概算要求で実質的予算が獲得できるようにしたいと思っている。国及び各大学の更なるご支援を御願ひする次第である。また、もう一つの平成 20 年度概算要求として、「大学間連携による最先端固体 NMR の開発と有機分子材料・生体超分子構造解明の新機軸創成」(大学間連携)を計画している。

## 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、ナノセンターは「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。

平成19年度からは、分子研の組織改編に伴いこれまでのナノセンターの機能が（新）分子スケールナノサイエンスセンターと（新）機器センターに分かれることになった。ヘリウムや窒素の液化機・供給装置を含め汎用的な装置類およびそれらの装置の責任者であった技術職員は（新）機器センターに所属替えとなった。ナノセンター所属の教員も配置換えとなり、小川、加藤、鈴木、永田、桜井がナノセンターの専属教員となり、他の教員は研究領域を本務とすることとなった。ナノセンターの重要な業務であるナノ支援を効率的に行うために、研究領域所属の教員でナノ支援にかかわる者は、ナノセンターの併任教員とすることとなった。この組織改編により、ナノセンターがより先鋭的にナノサイエンスの研究を行う組織になったといえる。ナノセンターの管理として残る装置には、920MHz NMR、TEM、SEM、FIBなどのナノ支援により導入された装置とクリーンルームがある。

本ナノセンターは、全国から注目を受けている組織であり、今後より積極的な人事およびナノサイエンスのための先端的大型装置導入を図り、日本のナノサイエンスの中心と目されるように努力する必要がある。

## 5-2 極端紫外光研究施設 ( UVSOR )

UVSOR は、1983 年完成後、エネルギー 750 MeV、エミッタンス 160 nm-rad の電子蓄積リングにアンジュレータ 2 台と超電導ウィグラを設置した典型的な第 2 世代の低エネルギーシンクロトロン光源であったが、2000 年以降、特に 2003 年の大改造を中心とする一連の改造により低エネルギーリングとして極端紫外光領域に最適化された第 3 世代光源 UVSOR-II へと生まれ変わった。エミッタンスは 27 nm-rad で定常的に運転されており、これは 1 GeV 以下の光源（計画・建設中のものも含む）では MAX-III（スウェーデン）に次ぐものである。また、挿入光源の増強も進み、現在は 4 台のアンジュレータが設置され稼動している。そのうち 2 台は真空封止型であり、比較的短波長領域を、また、残り 2 台は可変偏光型であり、比較的長波長側をカバーする。これらのビームラインはすべて世界トップクラスであり、国際的な利用が始まっている。さらに挿入光源設置可能な空間としては 1m 強の直線部 2 箇所が残されており、今後の検討を行う。

以下では、光源開発の現状と展望について、平成 19 年 2 月 14 日開催の第 49 回 UVSOR 施設運営委員会で議論したものをまとめておく。

### 5-2-1 UVSOR-II 光源加速器の高度化の現状と展望

今後 2 ～ 3 年の UVSOR-II 光源加速器の高度化としては、当面、トッパアップ運転の導入、軌道安定化、挿入光源の更なる増設の 3 つが柱になる。また、多様な利用モードを可能にする運転時間の見直しも必要である。将来的には、MAX-III の性能を超える UVSOR-III のための改造も視野に入れる必要がある。以下に、それぞれについて簡単に説明する。

(1) トッパアップ運転の実現に向けては、既に、ブースターシンクロトロンのフルエネルギー化（従来は最大エネルギーが 600 MeV であったが、電磁石電源の増強により 750 MeV まで向上）、放射線遮蔽壁の増強が完了し、入射路のフルエネルギー化を 2007 年春に実施する予定である。この後、フルエネルギー入射調整、輸送効率の向上、インタロックシステムの整備などを行い、できるだけ早期のトッパアップ運転の実現を目指す。

(2) UVSOR-II では数時間で 100 ミクロンを超えるような軌道変動が観測されており、光源本来の高輝度特性を活かす妨げとなっている。現在、軌道変動の原因究明と軌道安定化システムの開発を急いでいるところである。水平方向の軌道安定化については既に部分的にフィードバックシステムを導入しており、今後 1 年以内に水平垂直両方向の安定化システムを導入することを目指している。

(3) UVSOR-II 光源加速器の設計はアンジュレータ利用に最適化されたものとなっており、光源本来の特徴を活かすためにも、アンジュレータ及びビームラインの早期の整備が望まれる。どのようなアンジュレータを整備するか、利用側と協議しながら検討を進めていく。

(4) 光源性能そのものではないが、運転時間についても、拡大の余地が出てきている。UVSOR-II の運転時間は建設時の放射線申請により 1 日 12 時間に制限されてきたが、2006 年夏に変更申請を行い、一日 24 時間の運転が可能となった。マンパワーの問題でユーザー運転の延長を直ちに行える状況にはないが、シングルバンチ運転、自由電子レーザー利用など、ユーザーの限られる特殊な運転モードを夜間を実施することを試験的に開始している。柔軟な運転モードの切り替えは小型施設の特徴を活かせるものであり、従来にないシンクロトロン光の新しい利用形態が開拓できないか、模索しているところである。

(5) 更に長期的な展望としては、UVSOR-III 計画と名付けることのできる光源リングの更なる高度化改造の可能性がある。予備的な検討により偏向電磁石を複合機能型とすることで、現在のエミッタンス 27 nm-rad を更に 15 nm-rad 程

度まで改善できることがわかっている。四極電磁石の削減に加え、入射点の移動など機器の再配置を行うことで、現在入射に使用している 4 m の長直線部を挿入光源用に転用できる可能性が出てくる。

### 5-2-2 UVSOR 自由電子レーザーの現状と展望

UVSOR における自由電子レーザー開発は、加速器の設計段階から光共振器の建設を想定しているなど、施設の看板ともいえるものである。実際 90 年代には、円偏光型光クライストロンの導入により当時の発振短波長世界記録を樹立するなど、FEL 研究で華々しい成果を挙げた。しかし、その後は、Duke 大学や産総研などにおける FEL 専用リングの稼動、第 3 世代リング Elettra における FEL 実験の開始などにより、開発研究面での競争力が低下し、一方、発振波長域は紫外から可視光に限られていることから、通常レーザーとの競合もあり、利用研究はほとんど進まなかった。

しかし 2000 年代になり光源加速器が UVSOR-II へと改造されたことで、再び世界的な競争力を取り戻した。低エミッタンス化と高周波加速系の増強によるピーク電流値の向上で、波長 200–250 nm の深紫外の領域で大強度の発振が可能となった。また、従来 FEL 実験は電子エネルギー 600 MeV で行っていたが、750 MeV でも発振できるようになり、その結果、ビーム寿命が長くなり発振継続時間が長くなると同時に平均出力も向上、波長によっては 1 W を超えるまでになり、蓄積リング FEL としては出力で世界最強となった。深紫外領域で波長連続可変、高出力という特徴は、通常レーザーと比べても一定の競争力があり、利用の申し込みも徐々に増えてきている。今後は、利用に向けた研究開発・装置の整備が重要となってくる。

利用の拡大に向けて当面課題となるのは、出力の安定化、実験装置へのレーザー光の安定な輸送法の確立、ミラー交換の高速化、などである。出力の安定化にはフィードバックシステムの導入を検討中である。レーザー光の輸送は、放射光ビームラインに既設の装置に FEL 光を導入したいという希望が多く、場合によってはリングの反対側まで輸送する必要がある。従来のミラーを使った輸送法の改良に加えて光ファイバーを使った輸送の検討を開始している。光共振器には多層膜ミラーを使用しており、波長を大幅に変えるには超高真空中に設置されたミラーを交換する必要がある。交換すると真空立ち上げなどに数日間かかってしまう。超高真空中で複数枚の多層膜ミラーを設置し、随時交換できるようなシステムの検討を始めたところである。

FEL 性能そのものに関する今後の展望としては、光クライストロンの更新による更なる短波長化、大強度化が考えられる。UVSOR-II となって長くなった直線部に 3 m 強の光クライストロンを導入することで、Elettra や Duke 大学と同等の波長 180 nm 付近での発振も可能となるものと思われる。更なる短波長化には、ミラーそのものの開発研究が必要となってくる。

### 5-2-3 UVSOR-II における外部レーザーを利用した新しい光発生法の開発

2005 年に UVSOR-II の高周波加速と同期の取れるフェムト秒レーザー装置が導入された。これを利用した複数の新しい光発生法に関する研究がスタートしている。

#### (1) レーザーバンチスライスによるフェムト秒パルス生成及びコヒーレント光発生

レーザーバンチスライスは 90 年代の後半に米国の研究チームにより提唱されたビーム技術であり、極短レーザーパルスと電子バンチをアンジュレータ中で相互作用させることで、電子バンチの一部に強いエネルギー変調が生成され、このバンチが蓄積リングを進行する際に変調を受けた部分が切り出される、というものである。切り出されたバ

ンチの一部はレーザーパルス長と同程度の長さとなるために、その部分からの放射光を取り出すことでフェムト秒の放射光パルスを生成する、というのが当初のアイデアであった。しかし同時に、残りのパンチ上に形成されたディップ構造からテラヘルツ領域のコヒーレントシンクロトロン放射が生成されるため、現在はこれら2つの目的で研究が進められている。これまで、ALS、BESSY-IIが先行しており、UVSOR-IIでの実験は世界的には3例目ということになる。最近ではSLSでも開始されたとの情報があり、Soleilなどでも導入が検討されているようである。

他の施設ではパンチスライス実験のために加速器の一部を改造するなど大掛かりな準備が必要であったが、UVSOR-IIでは既存の自由電子レーザー用の装置群を流用することで加速器本体には全く手を加えることなく実験を開始することが出来た。また、電子エネルギーが低いために、必要なエネルギー変調を生成するためのレーザーパワーが比較的低くてよい。最初の実験で直ちに、大強度のコヒーレントテラヘルツ光の発生を確認でき、その後、分子研の国際共同研究を利用したリール工科大学(仏)との共同実験で入射レーザーパルス形状の制御により、波長可変準単色のテラヘルツ光の生成に成功するなど、世界的にもトップレベルの成果が挙がるようになってきた。テラヘルツ光の観測は既存の赤外ビームライン BL6B を用いて行っている。今後は利用法の開拓とそれに向けた光源開発を更に進めていきたいと考えている。

テラヘルツ光の観測によりパンチスライスが起きていることは実証できているものの、フェムト秒放射光の直接観測はまだ行っていない。こちらについても今後観測装置を整備し実施したいと考えている。

パンチスライスは既存の放射光リングで、従来の放射光とは異なる時間構造、あるいは、ピーク強度の桁違いに強い光を比較的簡便に生成できる。これら各種の光の単独での利用に加えて、通常の放射光も含めた、複数の性質の異なる光を同時に利用するタイプの利用方法を開発していくことが重要であると認識している。このことは先に述べた FEL についても同様である。

## (2) コヒーレント高調波発生

レーザーパンチスライスに用いているレーザー装置を用いて、Soleil(仏)のグループと共同でコヒーレント高調波発生(Coherent Harmonic Generation; CHG)の研究を開始している。CHGは、レーザーパルスと電子パンチをアンジュレータ中で相互作用させることで生じるエネルギー変調を利用することはパンチスライスと同じである。従って、レーザーパンチスライスとほぼ同じセットアップで実験できる。電子パンチがアンジュレータを進行する際にパンチ中にレーザー波長と同じ周期での密度変調が生じ、コヒーレントなシンクロトロン放射(アンジュレータ放射)をするが、密度変調には一般に高調波成分も含まれるために、コヒーレント放射も基本波だけでなく高調波も放出される。

CHGは、X線自由電子レーザーなどいわゆるSASEを基本原理とするコヒーレント光生成における原理的な不安定性を取り除く手段として期待されている。本研究では、直線加速器よりも安定性に優れる電子蓄積リングの電子ビームを利用し、効率的に技術・知見の蓄積を行おうとしている。

## 5-2-4 新しい光源建設の可能性

新しい加速器の建設を伴う将来計画の検討では、これまで様々な可能性を幅広く検討してきた。現在、世界に於ける先端的な光源加速器施設は全く異なる性質を持つリング型と直線型を併設するのが標準になりつつある。通常のレーザー光源を組み合わせることで、さらなる発展も期待されている。UVSORはこれまでリング型を中心に新たな光源開発を組み込んで共同利用に供してきたが、今後はUVSORで培ってきた光源開発技術を直線型にも応用することで、世界に先駆けて新たな特性をもつ光源が分子科学に於いて最初に手にはいるようにしていく必要がある。なお、

その先の光源加速器はリング型の特性と直線型の特性を併せ持つ ERL と呼ばれる光源になるのではないかとされており、プロトタイプの開発も一部では始まっているが、現在のリング型と直線型の性能を越えるものにするには、まだまだ解決しなければならない多くの困難があり、今後、最低でも 10 年くらいの開発期間が必要とされる。

以下、現在考えられる将来計画の様々な可能性についてまとめておく。

#### (1) リング型光源

UVSOR の次期計画として、UVSOR-II から UVSOR-III への改造ではなくて、全く新しいリング型光源を建設する場合、考えられる方向性は以下の 3 つであると思われる。

- (a) 1GeV 級小型 X 線リング
- (b) 2–3GeV 級中規模第 3 世代リング
- (c) 1GeV 級超高輝度リング

このうち (a) は 1GeV 級の小型リングに超電導偏向電磁石を導入することで硬 X 線の発生可能な小型施設を建設するというものであるが、これについては名古屋大学と愛知県が協力して実現を目指しているところである。高輝度ではないものの UVSOR-II では出せない硬 X 線領域をカバーする施設が近隣にできることになり、UVSOR-II とは相補的な役割を果たすものと期待される。そういう意味では現 UVSOR の後継機として岡崎の地で考える必要はないであろう。(b) の 2–3GeV 級中規模第 3 世代リングは、東大・東北大がかつて建設を目指していたような規模・性能の光源である。東大や東北大が断念したことを考えると予算規模や敷地の問題など実現は容易ではないが、現 UVSOR の後継機の可能性のひとつとして想定しておくべきである。(c) は 1GeV 級でエミッタンス 1 nm-rad もしくはそれ以下の超低エミッタンスリングを想定している。VUV 領域での回折限界光源の実現を目指す。以下で述べる ERL などと比べて安定性に勝る光源が既存の加速器技術を用いて実現できる可能性がある。また、共振器型自由電子レーザーや CHG など外部レーザーと組み合わせたコヒーレント光発生装置も併設できる可能性がある。

#### (2) 直線加速器を用いた自由電子レーザーの可能性

現在、世界に於ける先端的な光源加速器施設は全く異なる性質を持つリング型と直線型を併設するのが標準になりつつある。X 線自由電子レーザーのテスト機程度もしくはもう少しエネルギーの高いライナックを利用して、シード光を用いたシングルパス型自由電子レーザーを原理とする光源を UVSOR に併設する。X 線自由電子レーザーやリニアコライダーなどの建設を通じて確立される加速器技術と、現在 UVSOR-II で行っている CHG に関する基礎研究で得られた知見などをベースに実現する。VUV・軟 X 線領域でのコヒーレント光、極短パルス光の発生を目指す。併設が不可能な場合には他機関の加速器装置を利用した光源開発や利用研究も想定しておくべきであろう。

#### (3) エネルギー回収型ライナックを用いた新しい光源の可能性

エネルギー回収型ライナック (ERL) は現在 KEK-PF と原子力機構が中心となって X 線の発生に重点を置いた大型施設の建設を検討しているが、そこで確立された技術を元に、VUV・軟 X 線領域に最適化された比較的小型の施設を建設する。VUV・軟 X 線領域での回折限界光の発生、極短パルス光の発生に加えて、シングルパス自由電子レーザー、共振器型自由電子レーザーを組み合わせることが出来る可能性もある。ただし ERL 光源が実用になるのは 10 年を超える先の長い話なので現時点では他の検討のほうが重要である。

## 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

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たが、平成18年1月に大阪大学レーザー・エネルギー学研究センターの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の可変な特殊波長(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。

### 5-3-2 分子制御レーザー開発センターの今後

今年度は本研究所の研究系・施設の見直しが行われ、この議論を通して以下のように本センターを位置づけることとした。分子研開設以来のこの大幅な組織再編成の中で、本センターのあり方に強く関連する事柄は以下の2点である。

第一に、レーザーや放射光を重要な研究手段とし、光と物質との相互作用に基づく分子科学を展開する研究領域として新たに光分子科学研究領域が設けられることが挙げられる。従来はこの研究領域の研究が、主に分子構造、電子構造、極端紫外光科学の各研究系と、極端紫外光研究施設と本センターとに別々に所属する研究グループによって行われてきた。しかし、この組織形態は多くの共通した概念、方法論を基本とする研究グループを縦割りに分断し、研究者間の情報の共有や研究活動における日常の議論をややもすると阻害する要因となっている。レーザーを用いた研究グループはすでに「エクストリーム・フォトリクス」のプログラムにより、組織横断的に各グループ間のつながりを持つ機会が増えている。そこで、この新研究領域を創設することにより、放射光関連の研究グループとの間の壁も取り払い、本研究所における光分子科学研究をさらに活性化することを目指している。

第二の点は、機器センターの設置である。本研究所には以前同センターが設置されていたが、前節で述べたように極低温センターと化学試料室と共に廃止され、本センターと分子物質開発研究センターが設置された。しかし、共通機器を一括して管理運営し、所内外の研究者の共同利用を促進する必要が改めて認識され機器センターが再度設置されることとなった。このため、本センターが管理運営していた共通機器の大部分が機器センターに移管される。この措置により、本センターは従来の共同利用に関する業務を相当圧縮することができ、その業務のほとんどを開発研究に移すことが可能となった。

上記の2点はどちらも本センターを分子研における光分子科学研究における開発研究の文字通りの中心として活動するための環境を整えるものといえる。またこれは、昨年度に構想した「光分子科学研究センター」の精神に沿ったものである。

したがって、本センターは今後、光分子科学研究領域の研究グループと密接な連携をとりながら開発研究センターとしての機能を果たさねばならない。ただし、当該研究領域の研究グループと本センターの役割の違いははっきりと

認識すべきである。すなわち、当該研究領域における個々の研究グループがそれぞれの興味のもとで光分子科学における研究分野を開拓しようとするのに対して、本センターの業務は光源開発を含む光分子科学における新分野を切り拓くための装置、方法論の開発研究に重点がおかれるべきである。本センターが開発研究を本務とし、そこで得られた知識、技術、方法論を蓄積し、共同利用研のセンターとして開発された部品や装置および手法を所内外に提供・共同利用に供する点にこそ、当該研究領域における通常の研究活動と一線を画する違いが存在する。

ただし、これらの研究と開発研究の間を明瞭に区別することは困難な場合があり、これが渾然一体として研究がなされることもあり得る。このような状況を鑑みると、本センターと当該領域間の研究グループの相互乗り入れは不可欠である。したがって、新組織のもとでは開発要素のある研究を遂行する当該研究領域のグループが本センターに併任し、本センターのリソースをも使いながら開発研究をするなどの措置をとる必要がある。また、共同利用研のセンターとしては、所外の光分子科学研究者との共同開発も推奨されるべきである。

本センターの開発研究の主な分野としては以下のものが挙げられる。

テラヘルツから軟X線にいたる新たなコヒーレント光源開発（光を創る）

光イメージングとナノ領域顕微分光法の開発（光で観る）

光位相の精密制御による物質波のマニピュレーション（光で制御する）

これらの研究課題は、レーザー光源の開発から新たなスペクトロスコーピー、および、マイクロスコーピー、制御法に至る統合的な研究手法を開発するものである。これに加えて、放射光を用いた研究との連携をさらに検討すべきであろう。これらの分野での開発研究から他に類を見ない装置や方法論を開発し、本センターが分子科学研究所の一つの重要な柱として分子科学分野へ大きく寄与し、新たな共同利用の機会を創出していかなばならない。

## 5-4 装置開発室

装置開発室は分子科学の新展開に必要な新しい装置および技術を開発することと日常の実験研究に必要な部品および機器の製作を迅速に製作するという2つの役割を行ってきた。前者の新しい装置の開発には、実験研究者との密接な協力体制で取り組んでおり、所内研究者のみならず所外の実験研究者とも平成17年度に整備した施設利用を通じて行っている。また、後者の迅速な部品製作等は加工技能を持つ短時間契約職員の協力により対応している。この様に、新しい装置・技術の開発と日常の実験研究に対する技術支援の両輪を今後も発展させることは、運営委員会においても必要であると認識された。これらをふまえた今後の方針について以下に記す。

### 5-4-1 独自技術の開拓

研究者との協力で新装置を開発する際に、装置開発室の持つ従来技術のみでの対応はやや不足感があり、時代の流れに即した研究の要請に応えられるよう特化した技術を装置開発室の独自技術として確立することが重要である。これまでに「現有設備によるマイクロ加工」としてマイクロ流路、マイクロ構造の機械加工について取り組んできた。このマイクロ加工技術を基盤として、現在、所内および所外からも比較的ニーズの高いユニークなマイクロ流体回路技術および周辺のマイクロ機器製作技術についてさらに取り組んでいくこととする。将来はそこで獲得した独自技術を核として、今後の施設利用をはじめ、さらには他機関との共同技術開発へと発展させることによって装置開発室が分子研の共同利用により一層貢献できるものと考えている。

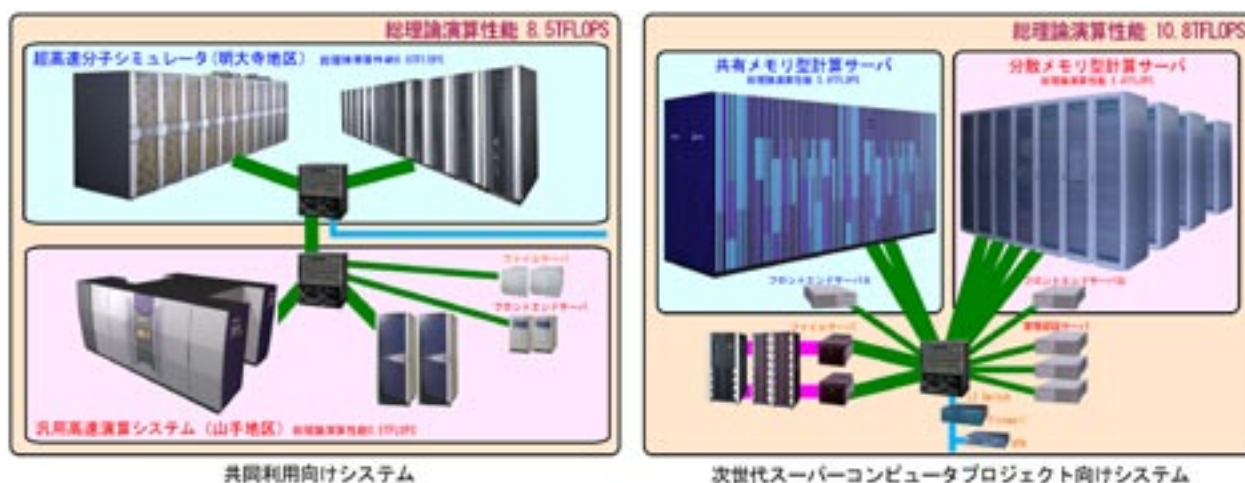
### 5-4-2 装置開発室の機械設備

分子研創設当初に設置された工作機械は30年近くを経過し、まだ現役で使用されている。また数値制御機械も順次整備されてから20年以上経過した。その多くは老朽化で精度等が低下していることと、機械の維持においても整備にかかる時間と経費の負担が増加している状況がある。さらに、近年の工作機械の性能が大きく向上し、現設備と能力に大きな開きがあり、この種の最先端の加工用機械は非常に高価なため、高度な加工技術を必要とする製作は装置開発室ではなく外部にまかせるといった現象が生じている。これらは分子研の新しい展開の研究支援にも大きく影響し、支援する技術者の技術力向上にもよい方向とは言えない。そこで、今後の支援業務の方針に合わせた設備計画(更新、廃棄、拡充など)を立て、運営委員会などで設備整備の検討を進めていくこととする。

## 5-5 計算科学研究センター

計算科学研究センターにおいては、2000 年度における計算科学研究センター化にともない、従来の共同利用に加えて、理論、方法論の開発等の研究以外にも、研究の場の提供、ネットワーク業務の支援、人材育成等の新たな業務に取り組んできているところであるが、2006 年度においても、次世代スーパーコンピュータプロジェクト支援、分子・物質シミュレーション中核拠点形成、ネットワーク管理室支援等をはじめとした様々な活動を展開してきている。上記プロジェクトについてはそれぞれの項に詳しく、ここでは共同利用に関する活動を中心に、特に設備の運用について述べる。

2007 年 1 月現在の計算機システムの概要を下図に示す。システムは大きく分けて 2 系統からなる。最初のものは共同利用に供している超高速分子シミュレータと汎用高速演算システムからなり、前者は今年度、2006 年 7 月に新たに導入され、後者は 2003 年 3 月に更新されて山手地区に設置されている。もうひとつは、次世代スーパーコンピュータプロジェクトにおけるアプリケーションの開発環境であるが、これらはいずれも分子科学やナノサイエンスの計算科学分野における高性能システムである。



システム構成図

まず、2006 年 7 月より運用を開始した新システム「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 Altix4700 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（Linux2.6）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、64 CPU 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。Altix4700 サブシステムは 2 ノード構成からなり、それぞれ 512 CPU コア / 6 TB および 128 CPU コア / 2 TB 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 6 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。

共同利用における新システムの導入にあたり、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 を設定した。これに従い、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している。

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 1 CPU 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 32 CPU 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 64 CPU、256 GB、256 Gflops の総合性能を有する分散メモリ型スカラ計算機である。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。

共同利用に関しては、2006 年度も 141 の研究グループの総数 555 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。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さらに充実するために、汎用高速演算システムを 2008 年 2 月に更新する。

一方、次世代スーパーコンピュータプロジェクト・ナノ分野グランドチャレンジ研究におけるアプリケーション開発環境として、Hitachi SR11000 と HA8000 を運用している。このうち、SR11000 は、総合理論演算性能 5.44 Tflops、総メモリ容量 3.072 TB の共有メモリ型スカラ並列コンピュータであり、システムは 16way（CPU）を持つ演算ノード 50 台で構成され、ノード間は 8 GByte/s のクロスバーで相互接続されており、周辺装置として 6.8 TB の RAID ディスク装置装備している。HA8000 は、総合理論演算性能 5.495 GFlops、総メモリ容量 1.796 TB の分散型スカラ並列コンピュータで、演算ノードとして 2 CPU を持つ PC サーバ 449 台から構成され、128 ノードごとに 2 Gbps で相互接続してクラスタを形成している。各クラスタは、周辺装置として 1.1 TB の RAID ディスク装置を備えている。

計算科学研究センターは、国家基幹技術の一つとして位置づけられている次世代スーパーコンピュータプロジェクトの中で、ナノサイエンスに関わるアプリケーション開発という重要な役割の一端を担っており、分子科学に関わる計算科学研究のナショナルセンターとでもいふべき分野拠点として、多様な活動の展開がさらに求められている。

## 5-6 系・施設の在り方等の検討を踏まえての現状報告

平成 17 年度前期に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、各事項について現状、基本提案、参考意見をまとめた。その後、  
主幹施設長会議、教授会議等で議論を進め、平成 18 年より順次、実行に移している。ここではその現状を報告する。

### 5-6-1 研究系の在り方

(1) 平成 19 年度より現在の研究系は廃止し、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）4 つにまとめることにした。具体的には理論・計算分子科学研究領域、  
光分子科学研究領域、物質分子科学研究領域、生命・錯体分子科学研究領域である。関連施設センターを含めるとそ  
れぞれ約 10 研究グループから構成される。288 ページの組織図を参照のこと。

(2) 研究主幹（研究領域主幹）は 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執行部的な組織と  
しては適正規模となる。各研究領域の代表である研究主幹の意識次第ではあるが、このような組織作りによって法人  
化によるトップダウン傾向の弊害をさけるボトムアップ的要素を盛り込むことが出来る。新体制で研究主幹に加え  
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。

(3) 研究領域を構成する研究部門については、3 グループ程度で 1 研究部門を構成するようにした。

(4) 岡崎共通研究施設である岡崎統合バイオサイエンスセンターと計算科学研究センターに属する分子研関連の研究  
グループはそれぞれ分子研の各研究領域内に併任できるように平成 19 年度より適切な研究部門を設置することにな  
った。

### 5-6-2 施設の在り方

(1) 平成 19 年度に再編される各研究領域は、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  
究部門が積極的に施設の活動に連携協力する。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が中心になってその組織を早急に立て直す必要がある。例えば、光分子科学研究領域に属する  
レーザーセンターは UVSOR と共同して光分子科学における高度な共同利用を目指す。各施設に所属させる専任研究  
職員については、原則的に同じ研究領域の中での配置換えでの対応で考える。専任以外に所内併任も考える。

(2) 平成 19 年度より、機器センターを改めて設置する。研究所創設来、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、旧機器センター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、旧機器センターの機能を改めて機器センターで強化発展させる。当面、  
機器センターは装置開発室と同様に研究職員を置かず、技術職員だけで構成されるため、研究領域に関連づけるこ  
とはしない。

### 5-6-3 IMS フェロー制度

(1) IMS フェローの質を上げるための待遇改善（他のポストドク卒との競争）の必要性は認識しているものの、具  
体化については検討が進んでいない。

(2) 所長から配分される研究費（ポストクの人件費・研究費に対する支援がある程度含まれているとする）によって、各リーダーの自律的判断で、随時、雇用（自然科学研究機構の雇用条件に従う）してよいものとする提案については、IMS フェローの配分保証のない助教授層からは強い支持があったが、人件費削減や予算確保の難しさ等の理由で実現には至っていない。

#### 5-6-4 助手制度

(1) 教授に助手 2 名を配分（60 歳越えの教授は従来通り 1 名だけ配分）することについては助教授層からも理解を得ていたが、人件費運用の観点で所長の決定にまではなかなか至らなかった。しかし、運営費交付金の年 1% 削減方針についてこれまでは物件費と人件費の区別がなかったのが、区別することになったため、人件費枠内での運用を考えなければならなくなった。そのため、平成 18 年度から教授に助手 2 名を配分することになった。2 人目の助手の配分の順番については所長が決める。

(2) 現在、教授数と助教授数は同数であり、この数を保ったまま教授のすべてに助手 2 名を配分することは長期的には不可能である。分子研は流動性が高く、研究者の平均年齢は年に依らずほぼ一定になっているが、人件費の年平均 1% 削減が続く限り、実質的に研究グループ数を減らす必要がある。分子研の使命の一つである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、助教授（教授よりも流動に貢献している）の割合を相対的に増やす、つまり、3 研究グループ構成が基本となる研究領域を構成する研究部門で順次、助教授グループの割合を増やす必要があるかも知れない。

#### 5-6-5 併任制度と客員制度

(1) 各研究領域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になった。

(2) 外国人客員教授・助教授については資格審査を主幹施設長会議で行い、各グループの研究員的な外国人研究者については客員教授・助教授としては取り扱わないことになった。

#### 5-6-6 分子研 OB とコミュニティ

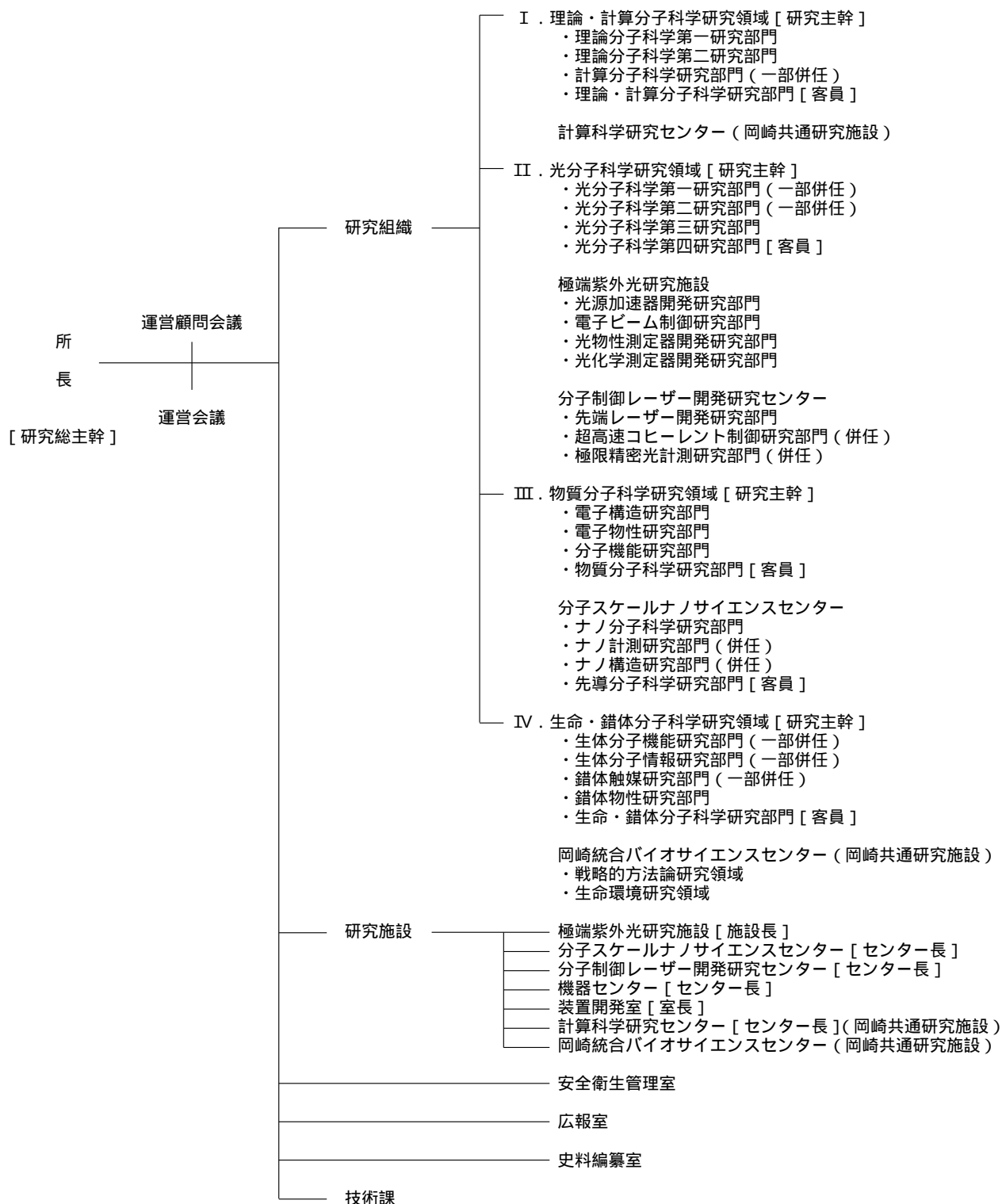
(1) 組織として“卒業生”に対して何ができるかを考えた場合、そのひとつの案として分子研レターズという場を活用することになった。若い世代に分子研に対する愛着を持ってもらうには、分子研の研究活動や今後の進んでいく道を“在校生”と“卒業生”が協力して伝えることが重要である。

(2) 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。予算が削減されたため中断していた岡崎コンファレンスはその重要性を勘案し、平成 19 年度より再開することとした。

(3) 総研大の宣伝が主目的の分子研オープンハウス（5 月～6 月のいずれかの土曜日の午後）に連動させる形で、前日金曜日の午後から土曜日の午前に分子研 OB や総研大卒業生の講演会（分子研シンポジウム）を開催することにした。また、オープンハウスのガイダンスでは総研大の紹介に加え、分子研の共同研究体制等についても紹介することになった。院生ばかりでなく助手など若手研究者の参加も募る。

(4) 平成 20 年度より大学院生自身が申請代表者として提案できる研究会等の企画を支援する共同研究の枠組みを作るべく、検討が始まっている。分子科学関連の各分野の若手の会や夏の学校の支援も含む。

## 組織再編



[ 註 ] 外国人客員と研究施設客員はそれぞれの研究領域の客員部門で対応する。ただし、分子スケールナノサイエンスセンター客員は先導分子科学研究部門で対応する。また、研究部門間の併任は、研究領域を跨ぐことも可能であり、適宜、人事流動等に応じて見直す。

## 5-7 化学系研究設備有効活用ネットワークの構築

法人化以降の国立大学等に対する予算の仕組みの変更と近年の国の財政状況の悪化の為に、全国の大学や研究所の老朽化しつつある機器に対する適切な予算措置がなされておらず、教育研究活動に大きな支障が出てきている。この緊急事態を受けて、化学系研究所長・センター長懇談会、国立大学法人機器・分析センター会議等で議論を重ね、機器の復活再生と新規機器の導入を行い、全国規模でこれらの機器を相互利用して有効活用を行う組織を構築することを目指して、分子科学研究所から「化学系汎用機器共同利用ネットワークの構築」の概算要求を行うこととなった。この結果、全国 75 の機関が参加し、平成 18 年 2 月 25 日に「化学系汎用機器共同利用ネットワーク協議会準備会」を岡崎コンファレンスセンターで開催し、ネットワークの目的や地域のネットワークの在り方等に関し意見を交換、平成 19 年度の概算要求を行うことを決定した。また、平成 18 年 4 月 15 日に 12 地域の委員長と分子研の担当者が集まり作業部会を開催、同年 4 月 27 日の「第 1 回化学系汎用機器共同利用ネットワーク協議会」において概算要求の内容が決定された。更に、科学技術・学術審議会学術分科会におけるヒアリングを受け、「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」事業として初年度 28 億円の要求が文部科学省から財務省に提出された。しかしながら、年末に財務省がまとめた政府案には、19 年度は調査費相当の 950 万円が計上されたに止まり、幾つかの要望事項が付けられた。一方、この事業が正式に認められ、「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」(平成 19 ~ 23 年度)の目的が、「国立大学における研究設備の老朽化等による危機的な状況を改善し、我が国の研究教育の基盤崩壊を防ぐとともに、先導的研究を推進するため、化学系の教育研究組織を持つ全国の機関が結集し、全国的な連携調整の下に「老朽化した研究設備の復活再生」及び「最先端研究設備の重点的整備」を行い、これらにより整備された設備及び既存の研究設備で外部に公開可能な設備を対象として、全国・地域有効活用ネットワークを構築し、大学間の研究設備の有効活用を図ること」が確定した。この結果を受けて、平成 19 年 1 月 26 日「第 1 回化学系研究設備有効活用ネットワーク作業部会」が分子科学研究所で開催され、19 年度には既存設備を用いて相互利用を全国レベルで試行することに決定し、その試行設備の選考と 20 年度概算要求の方針、並びに各大学での手続き等について協議された。作業部会では、有効利用を実証する為に 120 台の相互利用設備を選定し、ネットワークの利用申込みシステム及び利用料徴収システムを 4 月より稼働させることを決定した。これに伴い、ネットワークの全国的な周知を図るためのホームページ (<http://chem-eqnet.ims.ac.jp/>) が開設された。大学共同利用機関としての分子科学研究所の本活動が、我が国の化学の教育研究活動の基盤の構築に寄与することは、化学系の唯一の共同利用機関としての重要な役割となるであろう。



## 6．平成 19 年度計画

### 6-1 大学共同利用機関法人自然科学研究機構年度計画（平成 19 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。

研究所等で得られた研究成果を、国内外の学会等において積極的に公表をする。

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、研究水準・成果の検証を行うため、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推進する。

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、相関器及び受信機の製作等を引き続き行うとともに、ここまで製造を完了した装置を使用して部分運用を開始する。

情報処理技術と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機能及び天文データセンターの内容を充実し、国内外の研究者との連携を推進する。

宇宙航空研究開発機構と協力して太陽観測衛星「ひので」の運用及び月探査衛星 SELENE の飛翔実験・運用を行うとともに、超長基線電波干渉計（以下「VLBI」という。）観測衛星 ASTRO-G の設計検討を進める。将来の位置天文衛星、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及び次世代宇宙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。

会津大学、岩手大学、宇宙航空研究開発機構と共同して、次期月探査、惑星探査計画の立案、基礎開発を行う。

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、環状プラズマの総合的理解と核融合炉心プラズマの実現に向けた学術研究を行うため、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、プラズマと磁場の圧力の比の大きいプラズマ、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、研究所や大学・附置研究所・センターの装置・設備を有機的に活用し、双方向型共同研究として進める。具体的には、次のように行う。

- 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センター及び九州大学応用力学研究所炉心理工学研究センターと本研究所の間で双方向型共同研究を推進する。また、双方向型共同研究の一環としてセンターが持った全国共同利用の機能により、センターと全国の大学等との共同研究のさらなる活性化を図る。
- 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を研究者コミュニティの意見も反映させて進める。
- 3．さらに、閉じ込め改善を実現するための先進的な磁場配位を持つ新規実験装置の検討を、研究者コミュニティの共通の課題として進める。

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、プロジェクト研究体制を組織し、特に次の研究を実施する。

- 1．LHD 等の環状系プラズマにおける、コアプラズマの一流体 MHD モデルから二流体モデルへの拡張研究、周辺プラズマ領域の微視的・巨視的シミュレーション研究、高エネルギー粒子 - MHD 間相互作用、ペレット - MHD 間相互作用、微視的乱流輸送のシミュレーション研究、階層統合シミュレーションコードの基礎開発を行う。
- 2．コーン付ターゲットを用いた高速点火レーザー核融合における加熱用レーザー・コーン間相互作用の粒子シミュレーションの大規模・多次元化を進める。
- 3．マルチスケールシミュレーションのための新しい数値アルゴリズムの開発を行う。

4. グラファイトへ水素を照射した際の過程を解析するためのシミュレーションモデルを構築する。

引き続きヘリカル炉設計、ブランケット、超伝導、安全技術に関する研究を進め、所内の連携を深めるとともにネットワークを通じて所外研究者との連携を強化する。

1. 炉工学・炉設計連絡会議及びネットワーク等における所外研究者との討論を通じ、研究成果の集約を図るとともに、学術的体系化を進める。

2. 連携研究推進のための組織の活動を一層活発化し、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、イメージング・サイエンス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。

光生物学研究の推進を図るために、波長可変レーザー等の導入に向けて機種選定を行う。メダカのバイオリソースの中核機関として活動できるように専任教育研究職員の配置とともに、体制の構築と整備を行う。

実験生物学者、理論生物学者の集う研究会の開催により共同研究を推進する。

モデル動植物バイオリソース開発を引き続き推進するため、飼育・育成施設などを近代化し、系統維持の効率化を図る。メダカについて引き続き遺伝子導入系統の作出を行う。

バイオイメージング研究のアドバイザー委員会の答申に基づいて、新規の顕微鏡開発に向けた体制作りを行う。

#### （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（fMRI）や脳磁計等の脳イメージング技術を用いて、ヒト・霊長類の高次脳機能の解明に取り組む。障害時の代償機構や社会能力の発達に関する研究を進める。

位相差電子顕微鏡、質量顕微鏡等の超分子機能解析技術の向上を図る。バイオ分子センサーの超分子的メカニズムの研究を推進する。

恒常性維持あるいは病態の基礎・原因となる分子・細胞メカニズムの基盤的研究を進め、発達、病態におけるこれら分子群の生理学的意義に関する研究を進める。

大脳皮質、大脳基底核、視床等における神経回路の機能、グリアの働き等を、多面的に解析する。脱髄、てんかん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、X線から電波に及ぶ広い波長範囲の電磁波、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実験法、分子物質の設計・合成手法、理論的手法や超高速計算機による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・機能とダイナミクス、生体機能の解明等に関する実験研究並びに理論研究を行う。

理論・計算分子科学研究領域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、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。

光分子科学研究領域、物質分子科学研究領域、生命・錯体分子科学研究領域の連携によって、表面やナノ物質の光学的性質と励起ダイナミクスを解明する新しい実験手法の発展とその利用を進める。また、低侵襲的イメージング手法の更なる発展、分光法や NMR を用いた蛋白質機能の解明等の生体分子分光学的研究とそのための新しい実験手法の開発を行う。

光分子科学研究領域を中心として、分子制御レーザー開発研究センター、極端紫外光研究施設と連携し、特徴ある光源を開発して、分子のコヒーレンス観測制御法の様々な分子システムへの適用、種々の高分解能極紫外・軟 X 線分光法のその場化学状態分析への応用などの研究を進める。

物質分子科学研究領域を中心に、有機太陽電池の開発、新規非平面共役分子の開発、分子性伝導体の競合基底状態の解明、配向試料用新規固体 NMR 測定法の開発、超高速ナノ磁性ダイナミクス、新規金クラスター触媒の開発、低次元機能性ナノ構造体の開発及び擬似 1 次元巨大分子の開発等を目標に研究を進める。

理論・計算分子科学研究領域、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のための超並列計算アルゴリズムや計算プログラム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とともに、これまでの進展状況の検証を行い、さらなる活動の強化を図る。

知的財産委員会及び利益相反委員会において、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の整備を行う。

各研究所等は、自己点検、外部評価を実施し、研究の質の向上に努める。

各研究所等は、ポストドクトラル・フェローシップを維持して、引き続き若手研究者の育成に努める。

他研究機関、大学、企業との研究者交流等の促進のため、分野間連携に係るシンポジウム等、引き続き広く開放された研究会等を企画・実施する。

各分野間連携の進展を目指して、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発展させ、研究所等間及び他研究機関との研究連携を引き続き強化する。

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、プロジェクト室等の充実を図る。

プロジェクト室等の外部評価を開始する。プロジェクト室等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、プロジェクトの研究計画の妥当性、進捗状況等を審査して予算配分を行う。

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改組統合し、シミュレーション科学研究部を創設する。

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）

連携・広報企画運営戦略室を中心として、所内の研究グループ間の共同研究を促進するための仕組みを検討する。

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。顕著な成果をあげた若手研究者に、研究推進のための支援を行う。

発展が期待される研究テーマを、広く公募して一般共同研究として設定するとともに、重要と考えられる領域には計画共同研究を設定する。「バイオ分子センサー」事業を強力に推進し、その成果を発信する。

新たな研究領域の開拓を検討するために、企画立案委員会（仮称）を設置する。行動・代謝分子解析センターの充実のため、新たに行動様式解析室を設置する。

#### （分子科学研究所）

専任的客員部門である先導分子科学研究部門は、これまで担当してきたNMR利用研究を生命・錯体分子科学研究領域の専任教授部門（岡崎統合バイオサイエンスセンター兼務）に移行することとし、新たに物質分子科学研究領域での研究を担当することとする。

研究系及び施設を4大研究領域にまとめ、各研究領域内での協力体制と領域間の連携体制の確立を図る。特に計算分子科学と分子理論の融合研究、レーザー及び放射光を活用した新しい光分子科学の開拓を強化する。また、大学共同利用機関として様々な形態での大学との相互の協力関係を強化する。

## 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。

大型の装置や施設を活用した共同利用等を推進する。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、必要分野ごとの審査委員会の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。

国際戦略本部及び各研究所等において、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、国際協力活動を強化する。

共同利用等の実施、募集、成果等について、ホームページ等を通じ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、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、引き続き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、化学系研究設備有効活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、引き続き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な検討を行う。

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た共同利用等を、引き続き実施するとともに、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。

引き続き、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、水沢 VERA 観測所、岡山天体物理観測所、太陽観測所、天文データセンター、天文シミュレーションプロジェクト、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）において、「ひので」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推進する。

（核融合科学研究所）

LHD などの実験装置を用いた共同利用・共同研究を推進するために、環境を整備する。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やメールの活用により、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．大型シミュレーション研究を一つの学際分野として確立することを目指し、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統合し、新しく、シミュレーション科学研究部を発足し、共同利用・共同研究を推進する。
- 2．階層繰り込みシミュレーション等に基づくシミュレーション科学を国内外の共同研究を基本として幅広く推進する端緒として、シンポジウムを開催する。
- 3．核融合分野のシミュレーション環境を向上させるため、全国の核融合シミュレーションに標準的なコードを基に、総合的に計算機の性能を評価できるベンチマーク手法を整備する。

実験・理論双方で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、核融合に関するデータの収集、研究者間の情報交換の迅速化、若手研究者・大学院学生の育成等を図る。

炉工学研究棟（仮称）の整備を進め、共同研究に利用しやすい環境を整えとともに、流動ループ等ブランケット研究を進めるための新規設備導入を図る。また、大学等の研究設備の拡充と有効活用、人材の相互交流を推進し、炉工学実験設備の共同利用機能の活性化を図る。

（基礎生物学研究所）

波長可変レーザー照射システムの導入を進める。

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。

培養育成施設などの研究支援施設の組織体制の見直しを行う。

（生理学研究所）

明大寺地区の地下動物飼養保管施設の SPF 化（Specific Pathogen Free；特定病原体不在）を完了する。

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製する。新しいノックアウトラットの作製法等の技術開発を行う。

ナショナルバイオリソースプロジェクト（NBR）「ニホンザル」を強力に推進するために、新たに NBR 推進室（仮称）を設置する。また、実務体制を強化し、ニホンザルの供給事業を本格化させる。

(分子科学研究所)

分子制御レーザー開発センターと極端紫外光研究施設において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. レーザー分子科学において、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や国内外の共同研究の強化を図る。
2. 放射光分子科学において、小型放射光施設として世界最高輝度光源の開発研究を進め、分光装置の高分解能化を図る。

「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——」の研究開発を推進する。また、計算科学研究センターに導入した超高速分子シミュレータを中心に大規模分子科学計算の全国共同利用と共同研究を強化する。

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. 装置の有効利用を図るために機器センターを設置し、所内の中型共用機器の集中管理と全国共同利用の円滑化を図る。また、「化学系研究設備有効活用ネットワーク」の発足に当たり、機器センターにその本部を設置し、全国的な研究設備相互利用システムの管理を行う。
2. 微細加工などの要素技術の更なる高度化に加え、エレクトロニクスの回路設計評価技術など、多様化する先端的な分子科学研究共同利用を技術支援する体制を整備する。

(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。

共同利用等に供するための機器開発を行える環境を引き続き整備し、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において、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、ホームページ等の多様なメディアを活用して公表する。

引き続き共同利用等の外部評価を行うとともに、その結果について、今後の運用に反映させる。

技術職員の技術力向上のため、引き続き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。

共同利用者用の宿泊施設について、引き続き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・共同研究の双方向型共同研究、LHD 計画共同研究、一般共同研究の3つのカテゴリーを利用して、共同利用・共同研究をより活発に推進する。具体的には、本研究所と大学等の間で共同研究契約を結んで行う双方向型共

同研究，大学等で育まれている各種の研究，技術等を LHD 実験に適用・集約するため，大学等で先ず行う LHD 計画共同研究，大学等からの研究者が本研究所の設備を使って行う一般共同研究により，本研究所を中心とした種々の形態の共同利用・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

総合研究大学院大学の教育に積極的に参加するなど，大学院教育を実施する。総合研究大学院大学の 5 年一貫制大学院教育等によって，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推進する。また，大学院教育を検討する組織を機構に設置する。

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 19 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の育成を行う。

大学及び総合研究大学院大学の他専攻との単位互換制度を継続する。

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。

引き続き，外部資金獲得に努めるとともに，大学院生・博士号取得者の支援を充実させる。

各分野の特記事項を以下に示す。

##### （基礎生物学研究所）

引き続き国際トレーニングコースを実施する。

##### （生理学研究所）

生理科学分野の実験技術の向上を目指し，第 18 回生理科学実験技術トレーニングコースを開催する。

「夏の体験入学」や「アジア冬の学校」を引き続き実施し，研究教育体験を通じて，国内外の学部学生，大学院生の人材育成や人材発掘を図る。継続的に実施することで研究所の研究活動を広く周知する。

#### 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とともに、一般市民向けのシンポジウムを開催して、本機構の活動内容や研究成果等を広く社会に発信する。

知的財産委員会及び利益相反委員会において、職員の知的財産・利益相反等に関する理解を深めるための活動を行い、産学官連携を推進する。

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。

一般市民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シップ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引き続き推進する。その状況を調査し年度報告として公表する。

海外研究者や留学生等の受入れに関する情報の英語化等、広報活動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及び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を推進させ、各分野の情報センターとしての機能を拡充する。

情報セキュリティに考慮しつつ、本機構、研究所等間のネットワーク等の効率的運用を推進する。

## 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、研究連携委員会及び各研究所等の運営会議において、研究需要への対応や新分野形成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、業務運営の改善、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・施設長等とともに運営体制、研究体制及び共同利用体制の充実を図る。

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。

技術職員、事務職員の専門的能力の向上を図るため、研修年度計画を策定し、研修機会の拡充を図る。

内部監査計画を策定し、計画的な内部監査を実施するほか、監査方法等の見直しを行い、内部監査機能の充実に図るとともに、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、教育研究評議会で意見を聴取し、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しを行う。

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について、研究者コミュニティの意見を踏まえた点検を毎年行う。

## 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する。

技術職員及び事務職員の採用については、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、選考採用を実施する。

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、引き続き概ね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

引き続き業務の見直しを行い、共通的な事務について集約化に関する検討を行うとともに、費用対効果の観点から事務の簡素化・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。

機構独自の人事・給与システムの導入により、事務の効率化及び情報化をより一層推進するとともに、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、引き続き検討する。

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

引き続き、講演会の開催等により研究成果等の広報普及に努める。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。

知的財産委員会及び利益相反委員会を中心に、各研究所等において、知的財産及び利益相反に関する知識・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

引き続き電子ファイル、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努める。

引き続き適切な室温管理等により、省エネルギー化を推進する。

## 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

資産の運用管理を図るため、外部専門家の意見を聞き、積極的な資産活用を図る。

資産の有効活用・管理を図るため全資産の現物実査を行う。その際、資産の有効活用等の有無についても確認する。

# 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 評価の充実に係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。

本機構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し、広報室を中心として情報の提供方法をより工夫する。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公開を支援する。

生理学研究所に広報展開推進室（仮称）を設置し、「人体のしくみ」等に関する学術情報発信活動と理科教員や国民への窓口活動を行う。

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2000万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、引き続き公表する。

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積極的に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

引き続き施設マネジメント・ポリシー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整備を行う。

引き続き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、メンタルヘルスに係る対策等を行う。

講習会等に積極的に参加させ、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 ~<br>1978.1.9 | 1978.1.10 ~<br>1980.1.9 | 1980.1.10 ~<br>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                               | ○                       | ○                       | ○<br>（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<br>フリッツ・ハーバー研究所長    | ○                       | ○                       |                            |
| 柴田 承二 東京大薬教授                               | ○                       | ○<br>（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                             | ○                       | ○<br>（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<br>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                           | ○                       | ○                       | ○<br>（相模中央化学研究所<br>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                           | ○                       | ○<br>（大阪大名誉教授）          | ○<br>（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・<br>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                              |                         | ○                       | ○<br>（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<br>'81.6.1 ~<br>'83.5.31 | 第 2 期<br>'83.6.1 ~<br>'85.5.31 | 第 3 期<br>'85.6.1 ~<br>'87.5.31 | 第 4 期<br>'87.6.1 ~<br>'89.5.31 | 第 5 期<br>'89.6.1 ~<br>'91.5.31 | 第 6 期<br>'91.6.1 ~<br>'93.5.31 | 第 7 期<br>'93.6.1 ~<br>'95.5.31 | 第 8 期<br>'95.6.1 ~<br>'97.5.31 | 第 9 期<br>'97.6.1 ~<br>'99.5.31 | 第 10 期<br>'99.6.1 ~<br>'01.5.31 | 第 11 期<br>'01.6.1 ~<br>'03.5.31 | 第 12 期<br>'03.6.1 ~<br>'04.3.31 |
|-------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|
| 赤松 秀雄 | 東大名誉教授，<br>分子研名誉教授             | ○                              | ○                              | ○                              | ○ '88.1.8<br>死亡                |                                |                                |                                |                                |                                |                                 |                                 |                                 |
| 石川 忠雄 | 慶應大学長                          | ○                              |                                |                                |                                |                                |                                |                                |                                |                                |                                 |                                 |                                 |
| 石塚 直隆 | 名古屋大学長                         | ○ ~'81.7.22                    |                                |                                |                                |                                |                                |                                |                                |                                |                                 |                                 |                                 |
| 飯島 宗一 | 名古屋大学長                         | ○ '81.9.1~                     | ○                              | ○                              | ○ ~'87.7.21                    |                                |                                |                                |                                |                                |                                 |                                 |                                 |
| 植村 泰忠 | 東大理教授，<br>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，<br>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<br>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，<br>京都工繊大学長，<br>基礎化学研究所長 | ○                              | ○                              | ○                              | ○                              | ○                              | ○                              |                                |                                |                                |                                 |                                 |                                 |
| 藤巻 正生 | お茶女大家政教授，<br>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<br>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<br>'81.6.1 ~<br>'83.5.31 | 第2期<br>'83.6.1 ~<br>'85.5.31 | 第3期<br>'85.6.1 ~<br>'87.5.31 | 第4期<br>'87.6.1 ~<br>'89.5.31 | 第5期<br>'89.6.1 ~<br>'91.5.31 | 第6期<br>'91.6.1 ~<br>'93.5.31 | 第7期<br>'93.6.1 ~<br>'95.5.31 | 第8期<br>'95.6.1 ~<br>'97.5.31 | 第9期<br>'97.6.1 ~<br>'99.5.31 | 第10期<br>'99.6.1 ~<br>'01.5.31 | 第11期<br>'01.6.1 ~<br>'03.5.31 | 第12期<br>'03.6.1 ~<br>'04.3.31 |
|--------|---------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| 田中 郁三  | 東工大理工学部学部長，<br>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                     | ○                            | '84.2.16~                    | ○                            | ○                            |                              |                              |                              |                              |                              |                               |                               |                               |
| 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 椒   | 東北大理教授，<br>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，<br>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，<br>京大名誉教授        |                              |                              |                              | ○                            | ○                            | ○                            |                              |                              |                              |                               |                               |                               |
| 西原 春夫  | 早稲田大学総長                   |                              |                              |                              | ○                            | ○                            |                              |                              |                              |                              |                               |                               |                               |
| 倉田 道夫  | 三菱瓦斯化学(株)<br>顧問           |                              |                              |                              | ○                            | ○                            |                              |                              |                              |                              |                               |                               |                               |
| 朽津 耕三  | 長岡技科大教授，<br>城西大理教授        |                              |                              |                              | ○                            | ○                            | ○                            | ○                            |                              |                              |                               |                               |                               |
| 田丸 謙二  | 東京理科大理工教授                 |                              |                              |                              | ○                            | ○                            | ○                            | ○                            |                              |                              |                               |                               |                               |
| 早川 幸男  | 名大学長                      |                              |                              |                              | ○                            | '87.7.22~                    | ○                            | '92.2.5<br>死亡                |                              |                              |                               |                               |                               |
| 千原 秀昭  | 阪大理教授，(社)化学<br>情報協会専務理事   |                              |                              |                              | ○                            | ○                            | ○                            | ○                            |                              |                              |                               |                               |                               |
| 米澤貞次郎  | 近畿大理工学総合研教<br>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<br>談役，東大名誉教授   |                              |                              |                              |                              | ○                            | ○                            | ○                            |                              |                              |                               |                               |                               |
| 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<br>(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，<br>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<br>'81.6.1 ~<br>'83.5.31 | 第2期<br>'83.6.1 ~<br>'85.5.31 | 第3期<br>'85.6.1 ~<br>'87.5.31 | 第4期<br>'87.6.1 ~<br>'89.5.31 | 第5期<br>'89.6.1 ~<br>'91.5.31 | 第6期<br>'91.6.1 ~<br>'93.5.31 | 第7期<br>'93.6.1 ~<br>'95.5.31 | 第8期<br>'95.6.1 ~<br>'97.5.31 | 第9期<br>'97.6.1 ~<br>'99.5.31 | 第10期<br>'99.6.1 ~<br>'01.5.31 | 第11期<br>'01.6.1 ~<br>'03.5.31 | 第12期<br>'03.6.1 ~<br>'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センター客員教授      |                              |                              |                              |                              |                              |                              | ○                            | ○                            | ○                            | ○                             |                               |                               |
| 又賀 昌司 | (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<br>'81.6.1 ~<br>'83.5.31 | 第2期<br>'83.6.1 ~<br>'85.5.31 | 第3期<br>'85.6.1 ~<br>'87.5.31 | 第4期<br>'87.6.1 ~<br>'89.5.31 | 第5期<br>'89.6.1 ~<br>'91.5.31 | 第6期<br>'91.6.1 ~<br>'93.5.31 | 第7期<br>'93.6.1 ~<br>'95.5.31 | 第8期<br>'95.6.1 ~<br>'97.5.31 | 第9期<br>'97.6.1 ~<br>'99.5.31 | 第10期<br>'99.6.1 ~<br>'01.5.31 | 第11期<br>'01.6.1 ~<br>'03.5.31 | 第12期<br>'03.6.1 ~<br>'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 運営顧問（2004 ～ ）

| 氏名・所属（当時）                          | 2004. 5.19 ～<br>2006.3.31 |
|------------------------------------|---------------------------|
| 加藤 伸一 豊田中央研究所代表取締役                 | ○                         |
| 小間 篤 高エネルギー加速器研究機構理事<br>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                      | ○                         |

## 7-4 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

# 7-5 外国人運営顧問（2004 ～）

| 氏名・所属（当時）                                 | 2004. 5.19 ～<br>2006.3.31 |
|-------------------------------------------|---------------------------|
| FLEMING, Graham R.<br>米国カリフォルニア大学バークレー校教授 | ○                         |
| JORTNER, Joshua<br>イスラエルテルアビブ大学教授         | ○                         |

## 7-6 運営に関する委員会委員（1975～1981）

| 氏 名・所 属（当 時）    | '75.7.15 ~<br>'77.3.31 | '77.4.1 ~<br>'78.3.31 | '78.4.1 ~<br>'79.3.31 | '79.4.1 ~<br>'80.3.31 | '80.4.1 ~<br>'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     | ○                      | ○<br>（理学部長）           | ○<br>（～'78.11.7）      |                       |                       |
| 朽津 耕三 東大理教授     | ○                      |                       |                       | ○                     |                       |
| 田中 郁三 東工大理学部長   | ○                      |                       |                       | ○<br>（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   | ○                      | ○<br>（東大物性研<br>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     |                        | ○<br>（委員長）            | ○<br>（委員長）            | ○<br>（委員長）            | ○<br>（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     |                        | ○                     | ○                     | ○                     |                       |
| 吉原經太郎 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     |                        |                       |                       |                       | ○                     |

7-7 運営協議員(1981～2004)

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<br>'81.5.1 ~<br>'83.4.30 | 第2期<br>'83.5.1 ~<br>'85.4.30 | 第3期<br>'85.5.1 ~<br>'87.4.30 | 第4期<br>'87.5.1 ~<br>'89.4.30 | 第5期<br>'89.5.1 ~<br>'91.4.30 | 第6期<br>'91.5.1 ~<br>'93.4.30 | 第7期<br>'93.5.1 ~<br>'95.4.30 | 第8期<br>'95.5.1 ~<br>'97.4.30 | 第9期<br>'97.5.1 ~<br>'99.4.30 | 第10期<br>'99.5.1 ~<br>'01.4.30 | 第11期<br>'01.5.1 ~<br>'03.4.30 | 第12期<br>'03.5.1 ~<br>'04.3.31 |
|-------|------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| 山寺 秀雄 | 分子研教授(客員)<br>(名大理教授)   | ○                            |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                               |                               |                               |
| 田仲 二郎 | 名大理教授                  | ○<br>(共~'82.5.1)             | ○人                           | ○(副)人                        |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                               |                               |                               |
| 伊藤 光男 | 東北大理教授                 |                              | ○                            |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                               |                               |                               |
| 木村 雅男 | 北大理教授                  |                              | ○                            |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                               |                               |                               |
| 黒田 晴雄 | 東大理教授                  |                              | ○共                           |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                               |                               |                               |
| 高柳 和夫 | 宇宙研教授                  |                              | ○                            | ○                            |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                               |                               |                               |
| 中島 威  | 東北大理教授                 |                              | ○人                           |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                               |                               |                               |
| 中村 宏樹 | 分子研教授                  |                              | ○共                           | ○                            | ○人                           | ○人                           | ○共                           | ○人                           | ○                            | ○                            | 共                             | ○人                            | ○人                            |
| 丸山 有成 | 分子研教授(客員)<br>(お茶女大理教授) | ○<br>(共~'82.5.1)             | ○                            | ○                            | ○                            | ○人                           | ○人                           | ○人                           |                              |                              |                               |                               |                               |
| 山本 明夫 | 分子研教授(客員)<br>(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<br>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)<br>(京大理教授)   |                              |                              | ○                            | ○'88.6.1~                    |                              |                              |                              |                              |                              |                               |                               |                               |
| 大瀧 仁志 | 分子研教授                  |                              |                              |                              | ○'88.4.1~                    | ○                            | ○共                           | ○人                           | ○共                           | ○共                           | ○共                            | ○人                            | ○人                            |
| 薬師 久彌 | 分子研教授                  |                              |                              |                              | ○'88.9.1~                    | ○共                           | ○人                           | ○人                           | ○共                           | ○共                           | ○共                            | ○人                            | ○人                            |

| 氏 名   | 所 属       | 第1期<br>'83.5.1 ~<br>'83.4.30 | 第2期<br>'83.5.1 ~<br>'85.4.30 | 第3期<br>'85.5.1 ~<br>'87.4.30 | 第4期<br>'87.5.1 ~<br>'89.4.30 | 第5期<br>'89.5.1 ~<br>'91.4.30 | 第6期<br>'91.5.1 ~<br>'93.4.30 | 第7期<br>'93.5.1 ~<br>'95.4.30          | 第8期<br>'95.5.1 ~<br>'97.4.30 | 第9期<br>'97.5.1 ~<br>'99.4.30 | 第10期<br>'99.5.1 ~<br>'01.4.30 | 第11期<br>'01.5.1 ~<br>'03.4.30 | 第12期<br>'03.5.1 ~<br>'04.3.31 |
|-------|-----------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|---------------------------------------|------------------------------|------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| 木田 茂夫 | 分子研教授     |                              |                              |                              | ○ ~'88.3.31                  | ○<br>○                       | ○人<br>○人<br>○<br>○           | ○ '94.4.1~                            | ○人                           | ○人                           | ○ ~'00.3.31                   |                               |                               |
| 岩田 末廣 | 分子研教授     |                              |                              |                              |                              | ○人<br>○人<br>○人<br>○共         | ○人<br>○人<br>○<br>○           |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 志田 忠正 | 京大理教授     |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 田隅 三生 | 東大理教授     |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 仁科雄一郎 | 東北大金材研教授  |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 村田 好正 | 東大物性研教授   |                              |                              |                              |                              | ○<br>○                       | ○(副)<br>○人<br>○人<br>○人<br>○共 | ○人<br>(~'94.3.31)<br>○(副)<br>○人<br>○共 |                              |                              |                               |                               |                               |
| 中筋 一弘 | 分子研教授     |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 飯島 孝夫 | 学習院大理教授   |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 伊藤 公一 | 大阪市立大理教授  |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 小川禎一郎 | 九大総合理工教授  |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 小尾 欣一 | 東工大理教授    |                              |                              |                              |                              |                              | ○共<br>○人<br>○<br>○ ~'92.4.1  | ○<br>○人<br>○共<br>○共<br>○人             |                              | ○人<br>共                      | ○共                            | ○共                            |                               |
| 京極 好正 | 阪大蛋白研教授   |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 田中 晃二 | 分子研教授     |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 齋藤 修二 | 分子研教授     |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 川崎 昌博 | 北大電子科学研教授 |                              |                              |                              |                              |                              |                              | ○人<br>○人<br>○共<br>○人<br>○共<br>○人      | ○(副)人<br>○<br>○共<br>○人<br>○共 |                              |                               |                               |                               |
| 近藤 保  | 東大理教授     |                              |                              |                              |                              |                              |                              | ○人<br>○<br>○共<br>○人<br>○<br>○         |                              |                              |                               |                               |                               |
| 斎藤 軍治 | 京大理教授     |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 塚田 捷  | 東大理教授     |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 山口 兆  | 阪大理教授     |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 宇理須恆雄 | 分子研教授     |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              | ○共                           | ○                             | ○共                            | ○共                            |
| 中村 晃  | 分子研教授     |                              |                              |                              |                              |                              |                              | ○                                     |                              | ○人<br>○共<br>○共<br>○          | ○共<br>○人                      | ○人<br>○ ~'02.3.31             | ○人                            |
| 小杉 信博 | 分子研教授     |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 渡辺 芳人 | 分子研教授     |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 大澤 映二 | 豊橋技科大工教授  |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 生越 久靖 | 福井高専校長    |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 小谷 正博 | 学習院大理教授   |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       | ○人<br>○人<br>○共               | ○人<br>○人<br>○人<br>○          | ○人<br>○共<br>○人                | ○共                            | ○共                            |
| 西 信之  | 分子研教授     |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 三上 直彦 | 東北大院理教授   |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 阿田 正  | 阪大院基礎工教授  |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |
| 加藤 重樹 | 京大院理教授    |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                                       |                              |                              |                               |                               |                               |

| 氏 名            | 所 属                           | 第1期<br>'81.5.1 ~<br>'83.4.30 | 第2期<br>'83.5.1 ~<br>'85.4.30 | 第3期<br>'85.5.1 ~<br>'87.4.30 | 第4期<br>'87.5.1 ~<br>'89.4.30 | 第5期<br>'89.5.1 ~<br>'91.4.30 | 第6期<br>'91.5.1 ~<br>'93.4.30 | 第7期<br>'93.5.1 ~<br>'95.4.30 | 第8期<br>'95.5.1 ~<br>'97.4.30 | 第9期<br>'97.5.1 ~<br>'99.4.30 | 第10期<br>'99.5.1 ~<br>'01.4.30 | 第11期<br>'01.5.1 ~<br>'03.4.30 | 第12期<br>'03.5.1 ~<br>'04.3.31 |
|----------------|-------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| 小谷野猪之助<br>関 一彦 | 姫路工業大理教授<br>名大物質科学国際研<br>究会教授 |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              | ○ 共<br>○ 人                   | ○ 共<br>○ 人                    |                               |                               |
| 田中 武彦          | 九大院理教授                        |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              | ○ 人                          | ○ 人                           |                               |                               |
| 篠野 嘉彦          | 九大院総合理工教授                     |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              | ○ 人                          | ○ (副)                         |                               |                               |
| 小林 速男          | 分子研教授                         |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              | ○ 人                          | ○ 人                           | ○ 共                           | ○ 共                           |
| 阿知波洋次          | 東京都立大院理教授                     |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              | ○                             | ○ 人<br>(人'02.4.1~)            | ○ 人                           |
| 北原 和夫          | 国際基督教大教養教授                    |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              | ○                             | ○                             | ○                             |
| 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<br>(~'02.3.31)            |                               |                               |
| 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                           | ○                             |
| 阿久津秀雄          | 阪大蛋白研教授                       |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              | ○ (副) 人                       | ○ (副) 人                       | ○ (副) 人                       |
| 宇田川康夫          | 東北大多元研教授                      |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              | ○ 人                           | ○ 人                           | ○ 人                           |
| 太田 信廣          | 北大電子科学研教授                     |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              | ○                             | ○                             |                               |
| 川合 眞紀          | 理化学研主任研究員                     |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                               |                               |                               |
| 榊 茂好           | 九大有機化学基礎<br>教授                |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              | ○ 人                           | ○ 人                           | ○ 人                           |
| 菅原 正           | 東大院総合文化教授                     |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              | ○ 共                           | ○ 共                           | ○ 共                           |
| 魚住 泰広          | 分子研教授                         |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              | ○ '02.4.1~                    | ○                             | ○                             |
| 西川 恵子          | 千葉大院自然科学教授                    |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                               | ○                             | ○                             |
| 岡本 裕巳          | 分子研教授                         |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                               |                               | ○ 人                           |
| 加藤 隆子          | 核融合科学研教授                      |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                              |                               |                               | ○                             |

## 7-8 運営会議委員（2004～）

議長 人 - 人事選考部会に属する委員  
 （副）副議長 共 - 共同研究専門委員会に属する委員

| 氏名・所属（当時）          | 第1期<br>2004. 4. 1 ~<br>2006. 3. 31 |
|--------------------|------------------------------------|
| 阿久津秀雄 阪大たんぱく質研所長   | ○ 共                                |
| 阿波賀邦夫 名大院理教授       | ○ 人                                |
| 太田 信廣 北大電子科研教授     | ○ 人                                |
| 加藤 隆子 核研研究・企画情報セ教授 | ○                                  |
| 榊 茂好 京大院工教授        | ○ 人                                |
| 田中健一郎 広大院理教授       | ○ 人                                |
| 寺嶋 正秀 京大院理教授       | ○ 人                                |
| 西川 恵子 千葉大院自然教授     | ○（副）                               |
| 藤田 誠 東大院工教授        | ○                                  |
| 前川 禎通 東北大金材研教授     | ○                                  |
| 宇理須恆雄 分子研教授        | ○ 共                                |
| 岡本 裕巳 分子研教授        | ○ '05.4.1~                         |
| 小川 琢治 分子研教授        | ○                                  |
| 北川 禎三 分子研教授（統合バイオ） | ○ ~'05.3.31                        |
| 小杉 信博 分子研教授        | ○ 人                                |
| 小林 速男 分子研教授        | 共                                  |
| 田中 晃二 分子研教授        | ○ 人・共                              |
| 永瀬 茂 分子研教授         | ○ 人                                |
| 西 信之 分子研教授         | ○ 共                                |
| 平田 文男 分子研教授        | ○                                  |
| 松本 吉泰 分子研教授        | ○ 人                                |
| 薬師 久彌 分子研教授        | ○ 人                                |

7-9 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<br>教育研究組織に該当する組織 | 該当する職 | 分子研規則<br>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<br>系及び研究施設             | 助手    | 5 年に満たない<br>任期を残す者 | 分子研規則に<br>よる残任期間 | 可        | 任期を<br>定めず<br>に採用 |
|                                       |       | 5 年を越える<br>任期を残す者  | 5 年              |          |                   |

## 7-10 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。

## 7-11 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。

