

「分子研リポート 2007」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	6
2-4 運 営	8
2-4-1 運営顧問会議	8
2-4-2 運営会議	8
2-4-3 研究顧問会議	9
2-4-4 人事選考部会	9
2-4-5 運営会議共同研究専門委員会	10
2-4-6 学会等連絡会議	10
2-4-7 教授会議	11
2-4-8 主幹・施設長会議	11
2-4-9 大学院委員会	11
2-4-10 特別共同利用研究員受入審査委員会	11
2-4-11 各種委員会等	12
2-5 構成員	15
2-5-1 構成員	15
2-5-2 人事異動状況	23
2-6 財 政	24
2-6-1 現員	24
2-6-2 財政	24
2-7 知的財産	27
2-8 岡崎共通施設	28
2-8-1 岡崎情報図書館	28
2-8-2 岡崎コンファレンスセンター	28
2-8-3 岡崎共同利用研究者宿泊施設	28
2-8-4 職員会館	28
3 . 共同研究と大学院教育	29
3-1 研究領域	30
3-2 研究施設	36
3-3 共同利用研究	38
3-3-1 共同利用研究の概要	38
3-3-2 2007 年度の実施状況	38
3-3-3 共同利用研究実施件数一覧	57

3-4	国際交流と国際共同研究	58
3-4-1	外国人客員部門等及び国際交流.....	58
3-4-2	岡崎コンファレンス.....	61
3-4-3	分子科学研究所国際共同研究.....	64
3-4-4	日韓共同研究.....	64
3-4-5	日中共同研究.....	65
3-4-6	東アジア多国間共同研究.....	65
3-4-7	その他.....	66
3-5	大学院教育.....	67
3-5-1	特別共同利用研究員.....	67
3-5-2	総合研究大学院大学二専攻.....	68
3-5-3	オープンハウス・分子研シンポジウム.....	72
3-5-4	夏の体験入学.....	72
3-5-5	総研大 / アジアコア共催「冬の学校」.....	74
4	研究支援等	77
4-1	技術課.....	78
4-1-1	技術研究会.....	78
4-1-2	技術研修.....	80
4-1-3	人事.....	81
4-1-4	受賞.....	82
4-2	安全衛生管理室	83
4-3	広報室.....	84
4-3-1	分子研ホームページ.....	84
4-3-2	Annual Review 誌.....	84
4-3-3	プレスリリース.....	84
4-4	史料編纂室.....	86
4-4-1	はじめに.....	86
4-4-2	昨年までの状況.....	86
4-4-3	今年度の活動状況.....	86
4-5	社会との交流	87
4-5-1	自然科学研究機構シンポジウム.....	87
4-5-2	分子科学フォーラム.....	87
4-5-3	岡崎市民大学講座.....	88
4-5-4	その他.....	89
4-6	理科教育への協力.....	91
4-6-1	スーパーサイエンスハイスクール.....	91
4-6-2	国研セミナー.....	91
4-6-3	小中学校での出前教室.....	92
4-6-4	職場体験学習.....	93
4-6-5	その他.....	93
4-7	一般公開	95
4-8	見学者受け入れ	96

5 . 各種事業	97
5-1 化学系研究設備有効活用ネットワークの構築 (文部科学省)	98
5-2 連携融合事業「エクストリームフォトンクス」(文部科学省)	99
5-3 分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成事業 (自然科学研究機構)	100
5-3-1 概要	100
5-3-2 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	100
5-3-3 イメージング・サイエンス	101
5-3-4 自然科学における階層と全体	102
5-4 アジア研究教育拠点事業「物質・光・理論分子科学のフロンティア」(日本学術振興会)	105
5-5 ナノテクノロジーネットワーク事業「中部地区ナノテク総合支援」(文部科学省)	106
5-5-1 概要	106
5-5-2 2007 年度採択課題一覧 (分子科学研究所担当分)	108
5-6 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 (文部科学省)	110
5-6-1 概要	110
5-6-2 研究体制	111
5-6-3 研究課題 (個人)	111
5-6-4 研究・開発スケジュール	114
5-6-5 研究の進捗状況と課題	114
6 . 研究領域の現状	125
6-1 論文発表状況	125
6-2 理論・計算分子科学研究領域	126
理論分子科学第一研究部門	126
理論分子科学第二研究部門	136
計算分子科学研究部門	143
6-3 光分子科学研究領域	150
光分子科学第一研究部門	150
光分子科学第二研究部門	157
光分子科学第三研究部門	161
光源加速器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)	172
光物性測定器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)	176
光化学測定器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)	181
先端レーザー開発研究部門 (分子制御レーザー開発研究センター)	185
極限精密光計測研究部門 (分子制御レーザー開発研究センター)	191
6-4 物質分子科学研究領域	195
電子構造研究部門	195
電子物性研究部門	207
分子機能研究部門	215
ナノ分子科学研究部門 (分子スケールナノサイエンスセンター)	220
先端分子科学研究部門 (客員研究部門) (分子スケールナノサイエンスセンター)	234
安全衛生管理室	238
6-5 生命・錯体分子科学研究領域	240
生体分子機能研究部門	240
生体分子情報研究部門	249
錯体触媒研究部門	257
錯体物性研究部門	262

7 . 点検評価と課題	267
7-1 理論・計算分子科学研究領域	268
7-2 光分子科学研究領域	278
7-3 物質分子科学研究領域	292
7-4 生命・錯体分子科学研究領域	299
7-5 大学共同利用機関としての在り方	321
7-5-1 はじめに	321
7-5-2 系と施設の在り方等の検討（特に大学共同利用機関として）	322
8 . 研究施設の現状と将来計画	325
8-1 極端紫外光研究施設（UVSOR）	326
8-2 分子スケールナノサイエンスセンター	330
8-3 分子制御レーザー開発研究センター	332
8-4 機器センター	334
8-5 装置開発室	336
8-6 計算科学研究センター	341
9 . 平成 20 年度計画	345
9-1 大学共同利用機関法人自然科学研究機構年度計画（平成 20 年度）	345
10 . 資料	359
10-1 評議員（1976 ～ 1981）	359
10-2 評議員（1981 ～ 2004）	360
10-3 運営顧問（2004 ～）	364
10-4 外国人評議員（1976 ～ 2004）	365
10-5 外国人運営顧問（2004 ～）	366
10-6 運営に関する委員会委員（1975 ～ 1981）	367
10-7 運営協議員（1981 ～ 2004）	368
10-8 運営会議委員（2004 ～）	372
10-9 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	373
10-10 自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則	374
10-11 自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則	377

1 . 序 言

第一期中期計画の終了を近い将来に控え、現在、様々な評価資料の作成が進められていますが、分子研においては平成 19 年度に、研究所全体に亘る研究と運営に関する評価を実施しました。その結果が本リポートに纏められています。評価を行って下さいました外国人運営顧問の先生方を始め多くの国内外の各専門分野の先生方に、改めてここでお礼を申し上げます。

法人化されてから 5 年目に入りますが、毎年言っています通り、当初から懸念されていた多くの問題が浮き彫りになってきています。国家 100 年の計にとって根幹となる「学術と文化の発展」の視点が軽視され、国の財政状況逼迫と相俟って経済至上主義と市場原理に流された「技術的イノベーション重視」の政策の為に、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。これに加えて評価作業が必要以上に拡大化しており、研究者の間に評価疲れを引き起こすと言う些か本末転倒な状況にあります。学問の本質を見据え、「学術」の真の発展を目指した品格ある施策が切に望まれます。

分子研が責任を持って進めています各種事業はほぼ順調に進行しています。その中でも、次世代スパコンに係わるナノ統合グランドチャレンジシミュレーション開発事業は本格的な活動に入りましたし、ナノ支援事業は新たに「ナノテクノロジーネットワーク支援事業」として新しいスタートを切りました。ただ、「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」は、国の厳しい財政状況の為に 2 年目の平成 20 年度においても僅かな予算しか付きませんでした。この事業は、分子研が世話役となって、全国 72 の国立大学における老朽化した設備の復活再生を実施し、最先端機器の重点配備を行い、ネットワークによる相互有効活用によって経済性を高めると共に新しい共同研究を鼓舞しようとする事業です。この事業の意義が認められ、本格的な活動が始められるようになることを願っています。

本分子研リポートは、研究所の現状と評価、そして将来計画の議論をまとめ毎年発行しているものです。分子研の全貌が把握できるように企画されています。研究所所員一同、厳しい学術行政の中においても新しい科学の流れを創成できるように、「真・善・美」と更にはその上にあると言う「妙」の意識を目指して、独自の哲学を持って臥薪嘗胆、研鑽に励む積りであります。各方面の皆様方のなご一層のご支援を心よりお願い申し上げます。

平成 20 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、その正しい利用を図るのみでなく、さらに進んで物質循環の原理を取り入れなければならない。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。

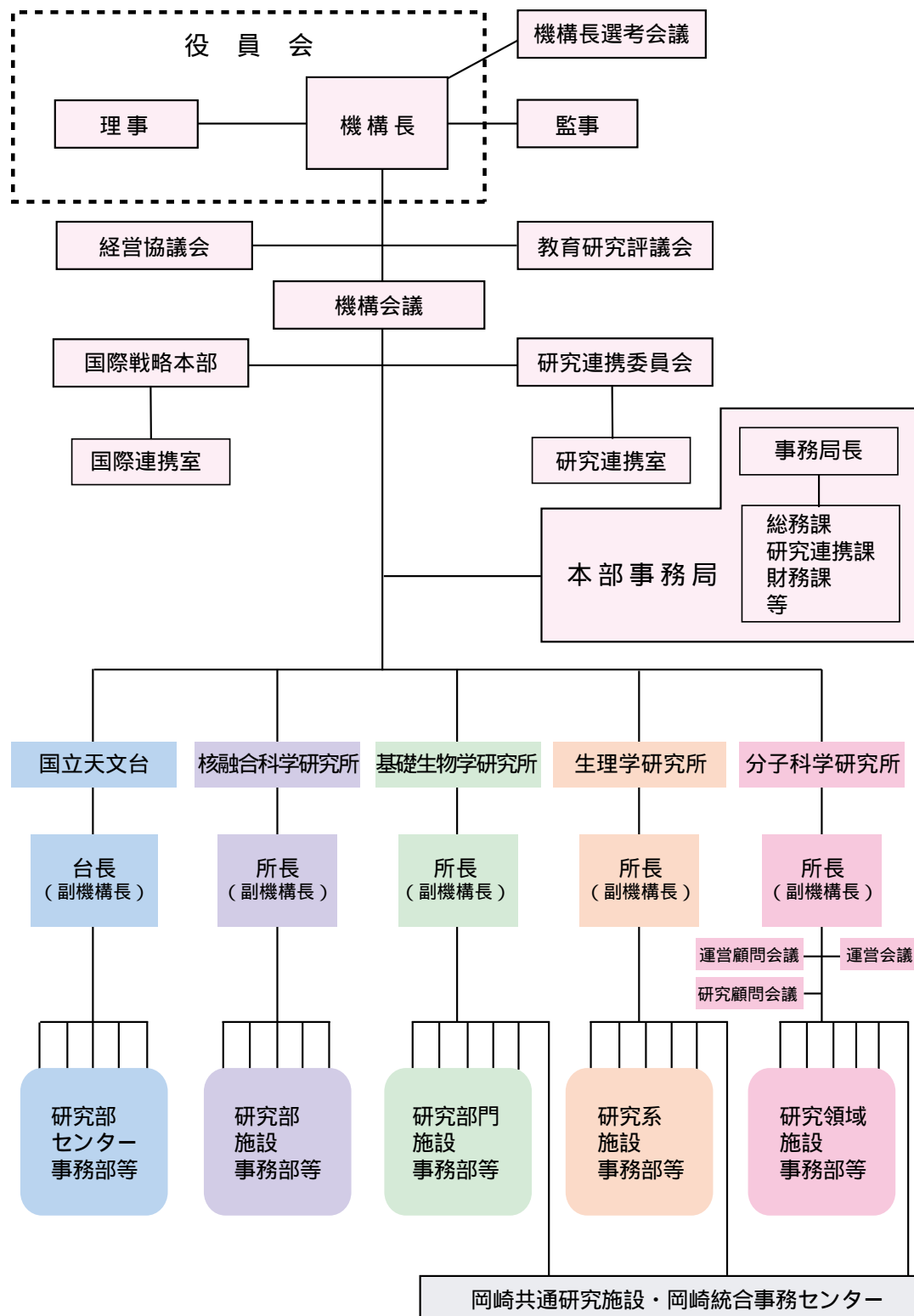
- 1965. 12.13 日本学術会議は、「分子科学研究所」(仮称)の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
- 1973. 10.31 学術審議会は「分子科学研究所」(仮称)を緊急に設立することが適当である旨 文部大臣に報告した。
- 1974. 4.11 文部大臣裁定により、東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室(室長:井口洋夫前東京大学物性研究所教授,定員3名)及び分子科学研究所創設準備会議(座長:山下次郎前東京大学物性研究所長,学識経験者35人により構成)が設置された。
- 1974. 7. 6 分子科学研究所創設準備会議において、研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
- 1975.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

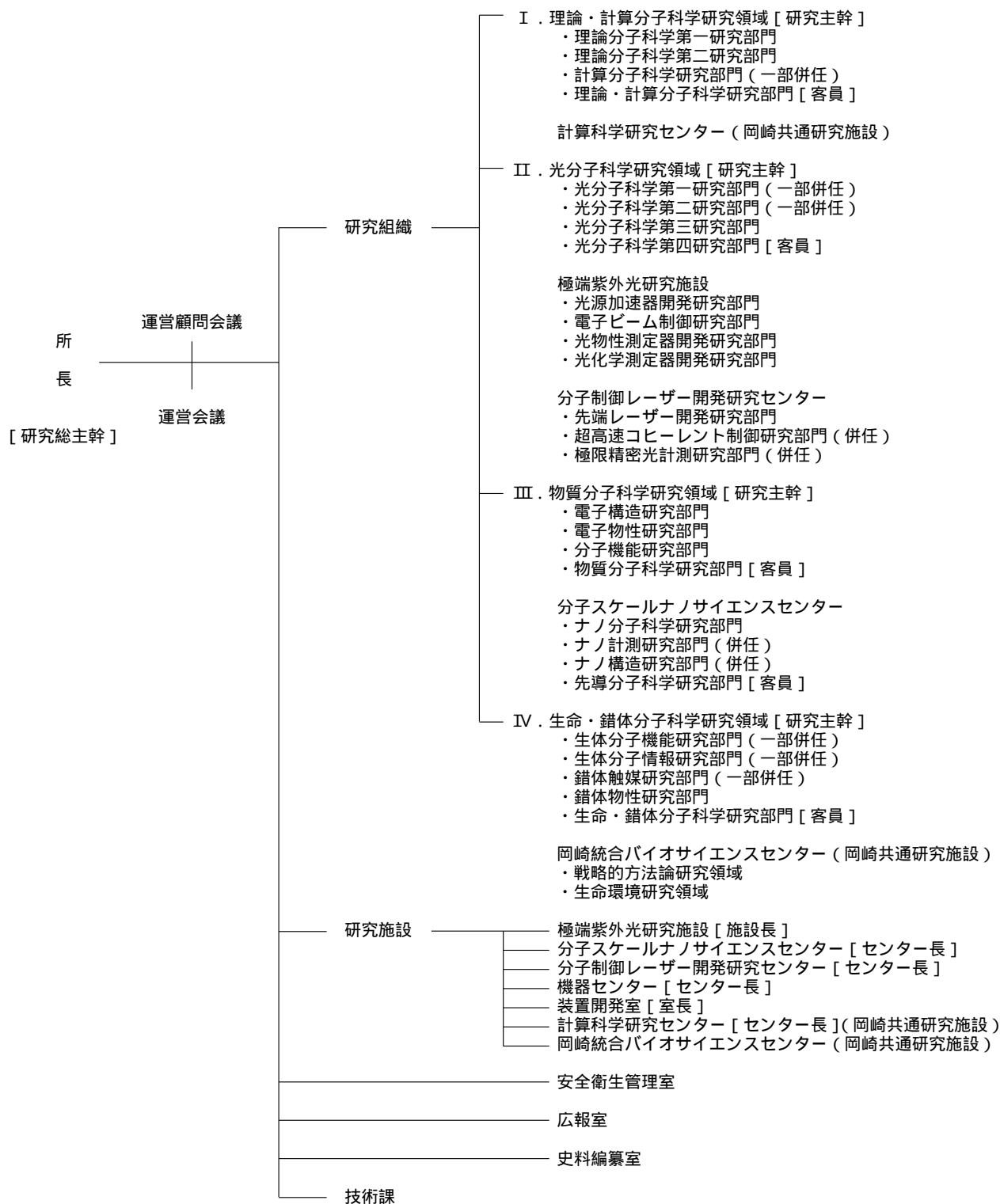
1979. 4. 1 分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され、管理局が総務部（庶務課，人事課，国際研究協力課），経理部（主計課，経理課，建築課，設備課），技術課に改組された。
1979. 11. 8 分子科学研究所創設披露式が挙行された。
1981. 4. 1 第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4.14 国立学校設置法の一部を改正する法律により，分子科学研究所と生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所，生理学研究所）は総合化され，岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され，管理局が岡崎国立共同研究機構管理局となり，技術課が研究所所属となった。
1982. 4. 1 研究施設として極端紫外光実験施設（UVSOR）が設置された。
1982. 6.30 極端紫外光実験棟第1期工事（1,281 m²）が竣工した。
1983. 3.30 極端紫外光実験棟第2期工事（1,463 m²）が竣工した。
1983. 4. 1 電子構造研究系に分子エネルギー変換研究部門が，分子集団研究系に分子集団動力学研究部門，極端紫外光研究部門が設置された。
1983. 11.10 極端紫外光実験施設ストレージリング装置に電子貯蔵が成功した。
1984. 2.28 極端紫外光実験施設の披露が行われた。
1984. 4.11 研究施設として，錯体化学実験施設（錯体合成研究部門，錯体触媒研究部門）が設置された。流動研究部門制度が発足し錯体化学実験施設に錯体合成研究部門が設置された。
1985. 5.10 分子科学研究所創設10周年記念式典が挙行された。
1987. 4. 1 第三代研究所長に井口洋夫分子科学研究所教授が任命された。
1989. 2.28 分子科学研究所南実験棟（3,935 m²）が竣工した。
1989. 5.28 分子集団研究系に界面分子科学研究部門が，関連領域研究系に有機構造活性研究部門（共に流動研究部門）が設置された。
1991. 3.27 極端紫外光実験棟（増築）（283 m²）が竣工した。
1991. 4.11 極端紫外光科学研究系（反応動力学研究部門）が設置された。基礎光科学，界面分子科学，極端紫外光の各研究部門は分子集団研究系から極端紫外光科学研究系へ振替された。
1993. 4. 1 第四代研究所長に伊藤光男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 m²）が竣工した。
1995. 3.31 関連領域研究系有機構造活性研究部門（流動）が廃止された。
1995. 4. 1 理論研究系に分子基礎理論第四研究部門が設置された。
1995. 5.12 分子科学研究所創設20周年記念式典が挙行された。
1996. 5.11 関連領域研究系に分子クラスター研究部門（流動）が設置された。
1997. 4. 1 機器センター，極低温センター，化学試料室が廃止され，分子制御レーザー開発研究センター，分子物質開発研究センターが設置された。
1999. 4. 1 第五代研究所長に茅幸二慶應義塾大学教授が任命された。
2000. 4. 1 電子計算機センター，錯体化学実験施設錯体合成研究部門が廃止され，電子計算機室が設置された。共通研究施設として，統合バイオサイエンスセンター，計算科学研究センター，動物実験センター，アイソトープ実験センターが設置された。
2002. 2.28 山手2号館（統合バイオサイエンスセンター，計算科学研究センター）（5,149 m²）が竣工した。
2002. 3.11 山手1号館A（動物実験センター，アイソトープ実験センター）（4,674 m²）が竣工した。
2002. 4. 1 関連領域研究系分子クラスター研究部門（流動），極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門（流動），分子物質開発研究センターが廃止され，分子スケールナノサイエンスセンター（分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門，ナノ触媒・生命分子素子研究部門，ナノ光計測研究部門，界面分子科学研究部門（流動），分子クラスター研究部門（流動））が設置された。
2003. 8.20 山手4号館（分子科学研究所分子スケールナノサイエンスセンター）（3,813 m²）が竣工した。

2004. 3. 1 山手 5 号館 (NMR)(664 m²) が竣工した。
2004. 3. 8 山手 3 号館 (統合バイオサイエンスセンター)(10,757 m²) が竣工した。
2004. 4. 1 国立大学法人法により，国立天文台，核融合科学研究所，基礎生物学研究所，生理学研究所，分子科学研究所が統合再編され，大学共同利用機関法人自然科学研究機構が創設された。理論研究系が理論分子科学研究系に改組された。計算分子科学研究系（計算分子科学第一研究部門，計算分子科学第二研究部門，計算分子科学第三研究部門）が設置された。分子スケールナノサイエンスセンターに，先導分子科学研究部門が設置され，界面分子科学研究部門，分子クラスター研究部門が廃止された。極端紫外光実験施設が，極端紫外光研究施設に改組された。安全衛生管理室が設置された。岡崎共同研究機構管理局が，大学共同利用機関法人自然科学研究機構岡崎統合事務センターとなり，総務部（総務課，国際研究協力課），財務部（財務課，調達課，施設課）に改組された。第六代研究所長に中村宏樹分子科学研究所教授が任命された。
2005. 5.20 分子科学研究所創設 30 周年記念式典が挙行された。
2007. 4. 1 研究系及び錯体化学実験施設が廃止され，理論・計算分子科学研究領域（理論分子科学第一研究部門，理論分子科学第二研究部門，計算分子科学研究部門，理論・計算分子科学研究部門），光分子科学研究領域（光分子科学第一研究部門，光分子科学第二研究部門，光分子科学第三研究部門，光分子科学第四研究部門），物質分子科学研究領域（電子構造研究部門，電子物性研究部門，分子機能研究部門，物質分子科学研究部門），生命・錯体分子科学研究領域（生体分子機能研究部門，生体分子情報研究部門，錯体触媒研究部門，錯体物性研究部門，生命・錯体分子科学研究部門）の 4 つの研究領域が設置された。極端紫外光科学研究施設に，光加速器開発研究部門，電子ビーム制御研究部門，光物性測定器開発研究部門，光化学測定器開発研究部門が設置（名称変更）された。分子スケールナノサイエンスセンターに，ナノ分子科学研究部門，ナノ計測研究部門，ナノ構造研究部門が設置され，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が廃止された。分子制御レーザー開発研究センターに，先端レーザー開発研究部門，超高速コヒーレント制御研究部門，極限精密光計測研究部門が設置された。機器センターが新たに設置された。広報室及び史料編纂室が設置された。

2-3 組 織

大学共同利用機関法人自然科学研究機構





[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。

2-4 運 営

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

2-4-1 運営顧問会議

法人組織となって、法律上は分子科学研究所の属する自然科学研究機構にだけ研究と教育に関する教育研究評議会（機構外委員，機構内委員，約半数ずつ）が置かれるようになった。また、機構の経営に関する経営協議会（機構外委員，機構内委員，約半数ずつ）も機構に置かれるようになった。その影響で、法人化前に法律上、各研究所に置かれていた評議員会（所外委員のみから構成）や運営協議員会（所外委員，所内委員，約半数ずつ）は消滅した。各研究所では内部組織について法律上の規定はなく、独自の判断での設置が可能であるが、それらの内部組織はすべて所長の諮問組織となる。法人化前、研究所に置かれていた評議員会の主な機能は、所長選考，事業計画その他の管理運営に関する重要事項の検討，であったが、法人化後はこれらは基本的には機構長・役員会が教育研究評議会・経営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。その委員には教育研究評議会・経営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、機構の教育研究評議会・経営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（2007 年度）

加 藤 伸 一	豊田中央研究所代表取締役
土 屋 莊 次	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（2007 年度）

MILLER, H. William	米国カリフォルニア大学バークレー校教授
LAUBEREAU, Alfred	ドイツ国ミュンヘン工科大学教授

2-4-2 運営会議

運営会議は所長の諮問組織として設置され、現在は、所外委員 10 名，所内委員 10 名の合計 20 名の組織である。学会等連絡会議で所外委員候補が選出される。運営会議は教授会議と連携をとりながら所長候補，研究者人事，共同研究について審議，検討する。運営会議では、その内部組織である人事選考部会（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も共同研究について審議する。所長候補検討も同様に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で行われる。

運営会議委員（任期 2006.4-2008.3）（：議長　○：副議長）

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 恆 雄	生命・錯体分子科学研究領域教授
大 森 賢 治	光分子科学研究領域教授（2007.4 から）
岡 本 裕 巳	光分子科学研究領域教授
小 川 琢 治	分子スケールナノサイエンスセンター教授（2007.9 まで）
小 杉 信 博	光分子科学研究領域教授
田 中 晃 二	生命・錯体分子科学研究領域教授
永 瀬 茂	理論・計算分子科学研究領域教授
西 信 之	物質分子科学研究領域教授
平 田 文 男	理論・計算分子科学研究領域教授
薬 師 久 彌	物質分子科学研究領域教授
横 山 利 彦	物質分子科学研究領域教授（2007.4 から）

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（2007年度）

廣 田 襄	京都大学名誉教授
近 藤 保	豊田工業大学客員教授
玉 尾 皓 平	理化学研究所フロンティア研究システム長

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・准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、准教授及び助教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、助教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名の助教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、“短期任用助教”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。教授又は准教授を任用する場合には、まず教授・准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フェローから助教への任用、あるいは総研大生又はその卒業生から助教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教（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教にも適用された）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月以降助教の任期制を見直し、分子研本来の制度に戻した。

人事選考部会委員（2007年度）（○：部会長）

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）	横 山 利 彦（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（2007年度）（○：委員長）

加 藤 晃 一（名市大教授）	西 信 之（分子研教授）
加 藤 昌 子（北大教授）	薬 師 久 彌（分子研教授）
中 原 勝（京大教授）	中 村 敏 和（分子研准教授）
藤 井 正 明（東工大教授）	信 定 克 幸（分子研准教授）
宇理須 恆 雄（分子研教授）	見 附 孝一郎（分子研准教授）
○田 中 晃 二（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、運営会議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。所長が議長を務める。

学会等連絡会議構成員（2007年度）

【所外委員】

（日本化学会推薦）

上 村 大 輔（名大院教授）	竜 田 邦 明（早大院研究科長）
戸 部 義 人（阪大院教授）	山 下 晃 一（東大院教授）

(物理学会推薦)

青 木 秀 夫 (東大院教授)

加 藤 礼 三 (理化研主任研究員)

(日本放射光学会推薦)

雨 宮 慶 幸 (東大院教授)

(錯体化学会推薦)

山 下 正 廣 (東北大院教授)

(分子科学会推薦)

榎 敏 明 (東工大院教授)

鈴 木 俊 法 (理化研主任研究員)

田 原 太 平 (理化研主任研究員)

寺 嶋 正 秀 (京大院教授)

中 嶋 敦 (慶大教授)

藤 井 正 明 (東工大院教授)

【所内委員】

岡 本 裕 巳 (分子研教授)

田 中 晃 二 (分子研教授)

西 信 之 (分子研教授)

平 田 文 男 (分子研教授)

見 附 孝一郎 (分子研准教授)

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・准教授で構成され、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所所属の研究教育職員，技術課長，他	点検評価規則	研究系ごとに外部評価を実施
将来計画委員会	研究所の将来計画について検討する。	所長，研究総主幹，教授数名，准教授数名	委員会規則	なし
放射線安全委員会	放射線障害の防止に関する重要な事項，改善措置の勧告。	放射線取扱主任者，研究所の職員 6 技術課長，他	放射線障害予防規則	なし
分子制御レーザー開発研究センター運営委員会	分子制御レーザー開発研究センターの管理運営に関する重要事項。施設利用の採択に関する調査。	センター長 センターの准教授 教授又は准教授 3 職員以外の研究者若干	委員会規則	2008.3.4
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 センターの教授及び准教授 センター以外の分子研の教授又は准教授若干 職員以外の研究者若干		2007.7.3
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 研究施設の教授及び准教授 教授又は准教授 4 職員以外の研究者 7	委員会規則	2007.8.21 2008.2.13
装置開発室運営委員会	装置開発室の運営に関する重要事項。	(原則) 各研究室から各 1 当該施設から若干 他の施設から若干		なし
分子研安全衛生委員会	安全衛生管理に関する事項。	(原則) 各研究室から各 1 施設から必要数	安全衛生委 管理規則	2008.2.18
図書委員会	購入図書の選定。他			なし
広報委員会	Annual Review，分子研レターズ等の研究所出版物作成に関すること。 研究所公式ホームページの管理運営。	関係研究者のうちから 7		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) 各研究系から各 1 施設から必要数		なし
情報ネットワークセキュリティ委員会	分子研情報ネットワークセキュリティに関する必要な事項。	各研究系教授各 1 各研究施設教授各 1 技術課長 分子研広報委員長 分子研ネットワーク委員長		なし
知的財産委員会	研究所における知的財産の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	委員会規則	2007.4.25, 6.27, 7.23, 10.18, 11.8, 2008.2.6

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	委員会規則	なし
---------	--------------------	--	-------	----

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	2007.4.17, 5.17, 6.19, 7.23, 9.18, 10.16, 11. 20, 12.18, 2008.1.16, 2.19, 3.18
岡崎 3 機関職員福利厚生 委員会	レクリエーションの計画及び実施に関 すること，職員会館の運営に関するこ と。他	研究教育職員 1 技術職員 1	委員会規則	2007.6.14
岡崎情報ネットワーク管 理運営委員会	岡崎情報ネットワークの管理運営に関 する必要事項。	副所長又は研究総主 幹，教授 1 計算科学研究セン ター長 責任担当所長 岡崎情報ネットワ ーク管理室次長(教授)	委員会規則	2008.2.26
岡崎情報ネットワーク管 理運営専門委員会	岡崎情報ネットワークの日常の管理。 将来における岡崎情報ネットワークの 整備，運用等について調査研究。	次長（技術担当） 教授 1 技術職員 1	委員会規則	2007.5.9, 5.29, 7.11, 9.12, 11.14, 2008.1.9, 3.26
岡崎 3 機関スペース・コ ラボレーション・システ ム事業委員会	事業計画，事業の運営方法に関するこ と。他	所長，教授 1 岡崎情報ネットワ ーク管理室次長	委員会規則	なし
岡崎 3 機関スペース・コ ラボレーション・システ ム事業実施専門委員会	事業計画に関する事項等について調 査。	事業委員会委員，研 究教育職員 1 岡崎情報ネットワ ーク管理室員	委員会要項	なし
岡崎共同利用研究者宿泊 施設委員会	宿泊施設（ロッジ）の運営方針・運営 費に関すること。	担当責任所長 教授 1	委員会規則	2008.2.7
岡崎コンファレンスセン ター運営委員会	センターの管理運営に関し必要な事 項。	担当責任所長 教授 1	センター規則	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 准教授 1	委員会規則	2008.3.18
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。	安全衛生管理者 2 職員 2	委員会規則	2007.4.17, 5.15, 6.19, 7.17, 9.18, 10.16, 11.20, 12.18, 2008.1.15, 2.19, 3.18

防火防災対策委員会	防火防災管理に関する内部規定の制定改廃，防火防災施設及び設備の改善強化。防火防災教育訓練の実施計画。防火思想の普及及び高揚。他	所長 防火防災管理者（技術課長） 高圧ガス保安員統括者	委員会規則	2007.10.31
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 技術課長	委員会規則	2007.7.11, 2008.3.12
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。	教授又は准教授 2	委員会規則	2007.7.25
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。	教授又は准教授 2	委員会規則	2007.9.5, 2008.2.29
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。	教授又は准教授 2	委員会規則	2007.6.26, 2008.3.14
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。	教授又は准教授 2 技術課長	委員会規則	2007.6.13
セクシュアル・ハラスメント防止委員会	セクシュアル・ハラスメントの防止並びにその苦情の申出及び相談に対応するため。 セクシュアル・ハラスメントの防止等適切な実施を期すため。	所長が指名する者 2	委員会等に関する規則	2007.5.23, 6.20, 10.3, 2008.2.7
文部科学省共済組合自然科学研究機構支部岡崎 3 機関食堂運営委員会	営業種目，営業時間。他	教授 1 技術課長	委員会規則	2007.10.2, 10.23
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		なし
アイソトープ実験センター明大寺地区実験施設放射線安全委員会	明大寺地区実験施設における放射線障害の防止に関し必要な事項を企画審議する。	研究教育職員 3 技術課長	センター明大寺地区実験施設放射線障害予防規則	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 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
岡崎山手地区連絡協議会	岡崎山手地区における建物の円滑な管理及び環境整備等を協議する。	教授 3 技術課長	委員会規則	2007.5.28, 2008.1.30, 3.14
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 教授 1 計算科学研究センター長 技術課長	所長会議申合せ	2007.4.23, 6.28
自然科学研究機構岡崎情報公開委員会	「独立行政法人等の保有する情報の公開に関する法律」を円滑に実施するため。	所長又は研究総主幹 教授 1	委員会規則	
生命倫理審査委員会	機構におけるヒトゲノム・遺伝子解析研究を，倫理的配慮のもとに適正に推進するため。	教授又は准教授 2	委員会規則	なし
さくら保育園運営委員会	さくら保育園の運営に関する事項を審議する。	研究教育職員 1 技術職員 1	委員会規則	2007.5.23

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^{*}

中 村 宏 樹	所長
西 信 之	研究総主幹(併)
長 倉 三 郎	特別顧問, 名誉教授
井 口 洋 夫	特別顧問, 名誉教授
伊 藤 光 男	特別顧問, 名誉教授
茅 幸 二	特別顧問, 名誉教授
岩 田 末 廣	名誉教授
岩 村 秀	名誉教授
北 川 禎 三	名誉教授
木 村 克 美	名誉教授
小 林 速 男	名誉教授
齋 藤 修 二	名誉教授
花 崎 一 郎	名誉教授
廣 田 榮 治	名誉教授
丸 山 有 成	名誉教授
諸 熊 奎 治	名誉教授
吉 原 經太郎	名誉教授

理論・計算分子科学研究領域 研究主幹(併) 平 田 文 男

理論分子科学第一研究部門

永 瀬 茂	教 授
大 塚 勇 起	助 教
CHOI, Cheol Ho	外国人研究職員 (慶北大学 助教授) '07.3.31 ~ '08.1.31
河東田 道 夫	専門研究職員
梶 田 理 恵	専門研究職員
GAO, Xingfa	専門研究職員
溝呂木 直 美	専門研究職員
GUO, Jingdong	専門研究職員
高 木 望	特別協力研究員
信 定 克 幸	准教授
安 池 智 一	助 教
野 田 真 史	研究員
久保田 陽 二	専門研究職員
柳 井 毅	准教授

理論分子科学第二研究部門

平 田 文 男	教 授
鄭 誠 虎	助 教
吉 田 紀 生	助 教
KIM, Bongsoo	外国人研究職員 (チャンウォン国立大学) '07.3.1 ~ '08.2.29
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
石 塚 良 介	専門研究職員
SOKOLOV, Vladimir	専門研究職員
米 満 賢 治	准教授

山 下 靖 文	助 教
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

計算分子科学研究部門

岡 崎 進	教 授(兼)
山 田 篤 志	助 教
三 上 泰 治	専門研究職員
安 藤 嘉 倫	専門研究職員
WANG, Jianyi	専門研究職員
千 葉 真 人	専門研究職員
齊 藤 真 司	教 授
金 鋼	助 教
矢ヶ崎 琢 磨	研究員
小 林 千 草	専門研究職員
森 田 明 弘	教 授(委嘱)(東北大院理)
石 田 干 城	助 教

理論・計算分子科学研究部門(客員研究部門)

浅 井 美 博	教 授(産総研基礎解析研究グループ)
秋 山 良	准教授(九大院理)
林 倫 年	准教授(国立台湾大)

光分子科学研究領域 研究主幹(併) 岡 本 裕 巳

光分子科学第一研究部門

岡 本 裕 巳	教 授
井 村 考 平	助 教
成 島 哲 也	助 教
JIANG, Yuqiang	研究員
大 島 康 裕	教 授
長谷川 宗 良	助 教
BAEK, Dae Yul	研究員
PAVLOV, Lubomir Iordanov	学振外国人招へい研究者 '07.5.31 ~ '08.3.30
須 磨 航 介	学振特別研究員

光分子科学第二研究部門

大 森 賢 治	教 授
香 月 浩 之	助 教
島 田 紘 行	共同研究員
DELAGNES, Jean-Christophe	共同研究員
平 等 拓 範	准教授(併)

光分子科学第三研究部門

小 杉 信 博	教 授
初 井 宇 記	助 教
KIMBERG, Victor	学振外国人招へい研究者 '06.8.7 ~ '08.8.6
見 附 孝一郎	准教授
片 柳 英 樹	助 教
八 木 創	研究員
黄 超 群	研究員

菱 川 明 栄	准教授
伏 谷 瑞 穂	助 教
松 田 晃 孝	研究員
THOMAS, Richard D.	特別訪問研究員

光分子科学第四研究部門（客員研究部門）

北 島 正 弘	教 授（物材機構材料研）
馬 場 正 昭	准教授（京大院理）
曾 田 一 雄	教 授（名大院工）
岡 田 和 正	准教授（広大院理）

物質分子科学研究領域 研究主幹(併) 西 信 之

電子構造研究部門

西 信 之	教 授
十 代 健	助 教
西 條 純 一	助 教
古 屋 亜 理	研究員
BOO, Bong Hyun	特別訪問研究員
松 本 智 絵	特別協力研究員
横 山 利 彦	教 授
中 川 剛 志	助 教
高 木 康 多	助 教
佃 達 哉	教 授(委嘱)(北大触媒化学研究セ)
根 岸 雄 一	助 教
角 山 寛 規	研究員
CHAKI, Nirmalya Kumar	研究員
七 分 勇 勝	研究員
柳 本 泰	特別協力研究員
中 尾 聡	特別協力研究員

電子物性研究部門

薬 師 久 彌	教 授
山 本 薫	助 教
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	准教授
古 川 貢	助 教

分子機能研究部門

江 東 林	准教授
石 塚 智 也	助 教
HE, Zheng	研究員
西 村 勝 之	准教授
飯 島 隆 広	助 教
上 釜 奈緒子	研究員
GUO, Jia	学振外国人特別研究員 '07.10.1 ~ '09.9.30

物質分子科学研究部門（客員研究部門）

馬 場 嘉 信	教 授（名大院工）
前 田 大 光	准教授（立命館大理工）
樋 口 昌 芳	准教授（物材機構物質研）

生命・錯体分子科学研究領域 研究主幹(併) 田 中 晃 二

生体分子機能研究部門

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 教
桑 島 邦 博	教 授(兼)(岡崎統合バイオサイエンスセンター)
藤 井 浩	准教授(兼)(岡崎統合バイオサイエンスセンター)
倉 橋 拓 也	助 教

生体分子情報研究部門

宇理須 恆 雄	教 授
手 老 龍 吾	助 教
MAO, Yanli	研究員
小 澤 岳 昌	教 授(委嘱)(東大院理)
竹 内 雅 宜	助 教
比 田 直 輝	研究員

錯体触媒研究部門

魚 住 泰 広	教 授
大 江 洋 平	研究員
松 浦 豊	研究員
杉 原 隆 広	特別訪問研究員
永 田 央	准教授(併)

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

学振外国人招へい研究者 '08.1.20 ~ '08.3.23

櫻 井 英 博 准教授(併)

錯体物性研究部門

田 中 晃 二	教 授
和 田 亨	助 教
木 村 将 浩	研究員
小 澤 弘 宜	研究員
滝川(越山)圭美	学振特別研究員
川 口 博 之	准教授
石 田 豊	助 教
赤 木 史 生	研究員
渡 邊 孝 仁	研究員

生命・錯体分子科学研究部門(客員研究部門)

北 川 宏	教 授(九大院理)
片 山 睦	准教授(理研ゲノム科学総合研究セ)
近 藤 満	准教授(静大機器分析セ)

極端紫外光研究施設 施設長(併) 小 杉 信 博

光源加速器開発研究部門

加 藤 政 博	教 授
島 田 美 帆	研究員

電子ビーム制御研究部門

光物性測定器開発研究部門

木 村 真 一	准教授
伊 藤 孝 寛	助 教
隅 井 良 平	特別訪問研究員
IM, Hojun	特別訪問研究員

光化学測定器開発研究部門

繁 政 英 治	准教授
彦 坂 泰 正	助 教
金 安 達 夫	研究員

分子スケールナノサイエンスセンター センター長(併) 横 山 利 彦

ナノ分子科学研究部門

小 川 琢 治	教 授(委嘱)(阪大院理)
田 中 啓 文	助 教
日 野 貴 美	研究員
鈴 木 敏 泰	准教授
阪 元 洋 一	助 教
永 田 央	准教授
長 澤 賢 幸	助 教
櫻 井 英 博	准教授
東 林 修 平	助 教
神 谷 育 代	研究員
田 中 彰 治	助 教

ナノ計測研究部門

岡 本 裕 巳	教 授(併)
西 信 之	教 授(併)
横 山 利 彦	教 授(併)
永 山 國 昭	教 授(併)(岡崎統合バイオサイエンスセンター)
西 村 勝 之	准教授(併)

ナノ構造研究部門

永 瀬 茂	教 授(併)
魚 住 泰 広	教 授(併)

先導分子科学研究部門 (客員研究部門)

加 藤 晃 一	教 授 (名市大院薬)
笹 川 拓 明	助 教

分子制御レーザー開発研究センター センター長(併) 大 森 賢 治

先端レーザー開発研究部門

加 藤 政 博	教 授(併)
平 等 拓 範	准教授
石 月 秀 貴	助 教
秋 山 順	研究員
佐 藤 庸 一	専門研究職員
山 田 圭 一	共同研究員
佐 藤 康 弘	共同研究員
東 康 弘	共同研究員

大 沢 慎 一	共同研究員
蝦 名 正 輝	共同研究員
猪 原 孝 之	共同研究員
常 包 正 樹	共同研究員
東 條 公 資	共同研究員
石 垣 直 也	共同研究員
曾 根 明 弘	共同研究員
酒 井 博	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

超高速コヒーレント制御研究部門

大 森 賢 治	教 授(併)
菱 川 明 栄	准教授(併)

密光計測開発研究部門

松 本 吉 泰	教 授(委嘱)(京大院理)
岡 本 裕 巳	教 授(併)
大 島 康 裕	教 授(併)

機器センター センター長(併) 薬 師 久 彌

装置開発室 室長(併) 宇理須 恆 雄

安全衛生管理室 室長(併) 岡 本 裕 巳
戸 村 正 章 助 教

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 教(兼)
澤 井 仁 美	学振特別研究員
桑 島 邦 博	教 授
CHAUDHURI, K. Tapan	外国人研究職員（インド科学技術研究所 助教授） '07.7.30 ~ '08.7.29
向 山 厚	研究員
VOLETY, Srinivas	学振外国人招へい研究者 '07.7.1 ~ '08.4.30
中 村 敬	専門研究職員
藤 井 浩	准教授
倉 橋 拓 也	助 教(兼)

計算科学研究センター センター長(併) 岡 崎 進

岡 崎 進	教 授
山 田 篤 志	助 教(兼)
松 田 成 信	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

齊 藤 真 司	教 授(兼)
金 鋼	助 教(兼)
石 田 干 城	助 教(兼)
大 野 人 侍	助 教

技術課 課 長 加 藤 清 則

機器開発技術班 班 長 鈴 井 光 一

機器開発技術一係

水 谷 伸 雄	係 長
矢 野 隆 行	技術職員

機器開発技術二係

青 山 正 樹	係 長
近 藤 聖 彦	技術職員

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

内 山 功 一	技術職員
豊 田 朋 範	技術職員

ガラス機器開発技術係

永 田 正 明	係 長
---------	-----

光技術班 班 長 堀 米 利 夫

極端紫外光技術一係

蓮 本 正 美	係 長
近 藤 直 範	技術職員

極端紫外光技術二係

山 崎 潤一郎	係 長
林 憲 志	技術職員

極端紫外光技術三係

中 村 永 研	係 長
酒 井 雅 弘	主 任

光計測技術係

上 田 正	技術職員
千 葉 寿	技術職員

機器利用技術班 班 長 山 中 孝 弥

機器利用技術一係

牧 田 誠 二	技術職員
藤 原 基 靖	技術職員

機器利用技術二係

岡 野 芳 則	技術職員
中 野 路 子	技術職員

低温技術班 班 長 高 山 敬 史

低温技術係

水 川 哲 徳 主 任

計算科学技術班 班 長 水 谷 文 保

計算科学技術一係

手 島 史 綱 主 任

岩 橋 建 輔 技術職員

計算科学技術二係

澤 昌 孝 技術職員

計算科学技術三係

内 藤 茂 樹 主 任

松 尾 純 一 技術職員

学術支援班

学術支援係

石 村 和 也 技術職員

賣 市 幹 大 技術職員

大 石 修 技術職員

原 田 美 幸 技術職員

南 野 智 技術職員

* 整理日付は2007年12月1日現在。ただし，外国人研究者で2007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、准教授、助教）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に委ねられている。さらに、厳密な選考を経て採用された准教授および助教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。施設の准教授・助教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、助教から准教授と准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、助教が6年を越えて勤務する際には毎年、本人の属する研究領域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。

教授と准教授の研究グループの研究活動に関しては、毎年教授・准教授全員が所長と研究顧問によるヒアリング、また3年おきには研究領域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、教授と准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准教授および助教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（2008年1月1日現在）

専任研究部門等（分子研のみ 岡崎共通研究施設は含まず 休職・休業含む）

職 名 区 分	所 長	教 授	准教授	助 手	技術職員	非常勤研究員 (IMSフェロー)
就任者数	6	43	72	235	149	190
転出者数	5	29	57	195	113	174
現 員	1	14(5)	15	40	36	16

() は委嘱で外数。

客員研究部門

職 名 区 分	教 授	准教授
就任者数	119	131
現 員	6	8

外国人客員研究部門

職 名 区 分	分子エネルギー変換研究部門		極端紫外光研究部門	
	教 授	助教授	教 授	助教授
就任者数	34	29	34	22

外国人客員研究部門は、2007年3月31日限りをもって廃止。
ただし、2007年度に外国人客員教授（外国人研究職員）1名を受入れた。

2-6 財 政

2-6-1 現員

2007.12.1

区分	所 長	教 授	准教授	助 教	小 計	技術職員	合 計
所長	1				1		1
理論・計算分子科学研究領域		3(3)	3(2)	8	14(5)		14(5)
光分子科学研究領域		4(3)	2(2)	7	13(5)		13(5)
物質分子科学研究領域		3(2)	3(2)	9	15(4)		15(4)
生命・錯体分子科学研究領域		3(4)	1(5)	6	10(9)		10(9)
研究施設		1(13)	6(2)	10	17(15)		17(15)
技術課						37	37
小計	1	14(25)	15(13)	40	70(38)	37	107(38)
岡崎統合バイオサイエンス センター		2	1	(2)	3(2)		3(2)
計算科学研究センター		1(1)		(3)	1(4)		1(4)
合計	1	17(26)	16(13)	40(5)	74(44)	37	111(44)

()内は客員，兼任（本務を本機構外に置く者で，分子研において職を委嘱する者）又は併任（本務を本機構内に置く者のうち当該研究領域等を兼務する者）の数で外数である。

2-6-2 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

区 分	2001 年度	2002 年度	2003 年度	2004 年度	2005 年度	2006 年度	2007 年度
件数（件）	16	15	16	21	21	15	10
金額（千円）	14,950	18,350	14,800	21,469	37,647	20,155	9,700

共通研究施設を除く

科学研究費補助金

区 分	2001 年度	2002 年度	2003 年度	2004 年度	2005 年度	2006 年度	2007 年度
件数（件）	82	59	62	59	61	74	75
金額（千円）	506,564	434,556	728,415	249,900	275,910	376,148	334,257

岡崎共通研究施設を除く
間接経費を含む

2007 年度科学研究費補助金

受入件数一覧

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		0	0	0
特定領域研究		23	4	27
萌芽研究		1	0	1
若手研究	（ A ）	3	0	3
若手研究	（ B ）	21	0	21
基盤研究	（ S ）	0	0	0
基盤研究	（ A ）	5	0	5
基盤研究	（ B ）	9	2	11
基盤研究	（ C ）	3	0	3
特別研究員奨励費		2	1	3
特別研究員奨励費	外国人	3	0	3
若手研究（スタートアップ）		3	0	3
合計		75	7	82

受入額一覧

(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		11,000	0	11,000
特別推進研究		0	0	0
特定領域研究		96,196	35,600	131,796
萌芽研究		3,500	0	3,500
若手研究	(A)	29,100	0	29,100
若手研究	(B)	28,623	0	28,623
基盤研究	(S)	0	0	0
基盤研究	(A)	71,600	0	71,600
基盤研究	(B)	37,859	7,800	45,659
基盤研究	(C)	4,300	0	4,300
特別研究員奨励費		2,200	1,100	3,300
特別研究員奨励費	外国人	3,000	0	3,000
若手研究 (スタートアップ)		4,020	0	4,020
合計		291,398	44,500	335,898

* 間接経費を除く。

共同研究

(単位：千円)

区 分	2001 年度	2002 年度	2003 年度	2004 年度	2005 年度	2006 年度	2007 年度
件数 (件)	6	7	8	13	17	13	12
金額 (千円)	11,980	17,120	10,590	14,740	39,334	38,812	23,231

2007 年 12 月 31 日現在

受託研究

(上段：件数、下段：金額 (単位：千円))

区 分	2001 年度	2002 年度	2003 年度	2004 年度	2005 年度	2006 年度	2007 年度
戦略的創造研究推進事業 (JST)	1	5	7	7	10	12	11
	7,700	13,000	19,206	21,827	24,115	32,500	96,171
科学技術試験研究委託費 (主要 5 分野の研究開発 委託事業 (文科省))	0	1	2	2	3	3	4
	0	263,000	540,574	916,847	584,312	497,850	590,576
その他	5	3	1	6	6	3	4
	232,625	6,800	4,200	163,792	64,907	32,657	32,150
合計	6	9	10	15	19	18	19
	240,325	282,800	563,980	1,102,466	673,334	563,007	718,897

(岡崎共通研究施設を含む)
2007 年 12 月 31 日現在

2-7 知的財産

分子科学研究所では、特許出願、特許権の帰属等に関する実質的な審議を行うため、知的財産委員会を設けている。委員会は、概ね各領域から教員 1 名、国際研究協力課長、財務課長に加えて、外部委員 1 名から構成されている。この分子科学研究所知的財産委員会での議決を機構知的財産委員会に諮り、機構として特許出願等を行うことになる。また、大学共同利用機関法人 4 機構の知財形成委員会・全体小委員会・連絡小委員会などとも連携し、情報交換に努めている。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の傾向にあったが、このところ横ばい状態にある。内容は、基礎研究から生まれた新しい材料の創成、生体関連物質の新しい分析手法、小型大出力セラミックスレーザーの開発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 18 年度の特許申請件数は、個人有としたものの 1 件、機構有としたもの 8 件（実出願 8 件）、19 年度は、個人有 1 件、機構有 5 件（実出願 3 件）であった（2007 年 12 月 11 日現在）。

2-8 岡崎共通施設

2-8-1 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1,476種（和283、洋1,193）、単行本94,876冊（和13,756、洋81,120）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。

2-8-2 岡崎コンファレンスセンター

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

岡崎3機関内の公募によって「岡崎コンファレンスセンター」と命名された建物は、延べ床面積2,863 m²、鉄筋コンクリート造2階建てで、大型スクリーン及び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。

2-8-3 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いう共同利用研究者宿泊施設がある。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

2-8-4 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。

3．共同研究と大学院教育

大学共同利用機関としての分子科学研究所は、所外の分子科学および関連分野の研究者との共同研究を積極的に推進しており、全国の研究者からの共同研究の提案を運営会議で審議し、採択された共同研究に対しては旅費および研究費の一部を支給している。また、海外の研究者との共同研究に対しては、研究者の派遣及び相手国研究者招聘のために国際共同研究事業を行っている。特に、東アジア地域での分子科学の急速な発展に対応して、日本学術振興会の支援により分子科学研究所が中心となり、アジアでの分子科学の協力研究体制の拠点ネットワークを作る目的で日本、韓国、中国、台湾の研究者が一堂に会するアジア研究教育拠点事業（Asian CORE プログラム）を行い、新領域創出による共同研究の萌芽を見いだす機会を設けている。

分子科学研究所は、また大学共同利用機関を基盤機関とする総合研究大学院大学・物理科学研究科に属し、構造分子科学専攻と機能分子科学専攻の二つの大学院専攻を持ち、他の大学院では整備されていない各種の高度な大型の研究施設・実験設備を活用して特色のある大学院教育を行っている。大学共同利用機関としての分子科学研究所の2専攻では、分子科学における最先端の基礎研究を行うとともに、学生の研究課題に応じて、複数指導体制を採用し、研究活動に密着した学生セミナー、国際シンポジウム、共同研究等を通して若手研究者育成のための大学院教育を行っている。さらに、他大学の大学院生や学部学生に対しても、それぞれ受託院生（特別共同利用研究員制度による）、体験入学者として受け入れ、先端的な研究施設を用いて積極的な教育研究活動を行っている。総合研究大学院大学への入学資格は、修士の学位をもつ方、大学を卒業して企業等で研究に従事し、修士の学位と同等と認められる方を対象とした博士後期課程に加えて、平成18年度より学部卒を対象とした5年一貫制博士課程を導入している。入学試験は原則として毎年4月、10月の2回行っている。

3-1 研究領域

理論・計算分子科学研究領域

- 研究目的 分子およびその集合体（気相，液相，固相），さらには生体分子やナノ物質など複雑系や複合系に関する構造および機能を量子力学，統計力学，分子シミュレーションを中心とした理論・計算分子科学の方法により解明する。

理論分子科学第一研究部門

- 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，電子状態，反応の理論的研究
- 研究課題 1 ,分子の設計と反応の理論と計算
2 ,ナノ構造物質における電子・核ダイナミクスの理論的・数値計算的研究
3 ,大規模量子化学計算

理論分子科学第二研究部門

- 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

計算分子科学研究部門

- 研究目的 分子および分子集合体の構造，動力学，機能および物性に関する理論・計算科学的研究
- 研究課題 1 ,凝縮系のダイナミクスと多次元分光法の理論・計算科学的研究
2 ,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
3 ,複雑な古典凝集系の分子動力学シミュレーション
4 ,界面和周波発生分光の計算手法の開発

理論・計算分子科学研究部門（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 ,単一分子伝導理論
2 ,固体表面の液体構造と化学反応
3 ,和周波発生分光理論と分子系への応用

光分子科学研究領域

研究目的 物質に光を照射すると、様々な興味深い性質を現したり、化学反応をおこす。様々な分子物質の構造や性質を光で調べることで、反応や物性を光で制御すること、及びそれに必要となる高度な光源開発を目的として研究を行う。

光分子科学第一研究部門

研究目的 主としてレーザー光源を用いた先端的分光法、顕微鏡法等を用いて、分子とその集合体の高精度・高精細な構造を明らかにすると同時に、新たな光機能の開拓や物質特性の光制御を目指した研究を行う

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 ,高強度かつ高コヒーレント光による分子運動の量子状態操作法の開拓、ならびに、分子構造や反応ダイナミクス研究への適用

光分子科学第二研究部門

研究目的 物質の量子論的な性質を、デザインされた光電場で詳細に観察し制御するための新しい方法論と、それを支える高度な光源の開発を目指した研究を行う

研究課題 1 ,高度にデザインされたレーザー場を用いて、原子・分子およびその集合体の量子ダイナミクスを精密に観測・制御するための研究

光分子科学第三研究部門

研究目的 真空紫外光や軟X線を用いた新奇な励起分子ダイナミクスの開拓と、それに関する動的プロセスの解明および制御を目指した研究を行う

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 ,極短パルス光による超高速現象の追跡
4 ,気相分子の光励起と光イオン化のダイナミクス

光分子科学第四研究部門（客員）

研究目的 比較的簡単な分子から、固体表面に吸着した分子やナノ構造体、さらに生体内分子までを広く対象とし、高度な時間分解・空間分解分光法、極端紫外光や特殊波長レーザー等を用いた光学測定によりそれらの性質を明らかにする

研究課題 1 ,デコヒーレンスの激しい凝縮系におけるコヒーレント制御法の開発
2 ,高分解能レーザー分光法による分子構造の精密決定、ならびに、励起状態ダイナミクスおよび分子間相互作用の詳細な探求
3 ,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・物性相関の研究
4 ,パーフルオロ化合物やフラーレンの多価イオン化と解離機構の研究

光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的 シンクロトロン光源用電子加速器に関する開発研究を行う

- 研究課題
- 1 ,先進的な光源加速器の設計開発研究
 - 2 ,相対論的電子ビームを用いた新しい光発生法に関する研究

電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的 シンクロトロン光源・自由電子レーザーなどの高性能化のための電子ビーム制御技術の開発研究を行う

- 研究課題
- 1 ,電子ビーム計測・制御技術に関する開発研究
 - 2 ,加速器におけるビーム物理学研究
 - 3 ,自由電子レーザーにおけるビーム物理学研究

光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的 固体の新奇物性に関わる電子状態を、新規に開発した放射光赤外・テラヘルツ分光および高分解能三次元角度分解光電子分光により明らかにする

- 研究課題
- 1 ,放射光を用いた固体分光用の観測システムの開発
 - 2 ,固体物質の局在から遍歴に至る電子状態の分光研究

光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

研究目的 放射光軟X線を利用した新しい分光法の開発とそれを用いた内殻励起における多電子効果の解明を目指した研究を行う

- 研究課題
- 1 ,放射光を用いた光化学実験用の観測システムの開発
 - 2 ,原子分子における多電子過程の分光研究

先端レーザー開発研究部門（分子制御レーザー開発研究センター）

研究目的 分子科学研究のためのテラヘルツから軟X線にいたる先端光源の開発

- 研究課題
- 1 ,マイクロチップレーザー，セラミックレーザー，高機能非線形波長変換など，マイクロ固体フォトリソの研究
 - 2 ,レーザーと加速器を組み合わせた新光源開発

超高速コヒーレント制御研究部門（分子制御レーザー開発研究センター）

研究目的 高出力超短パルスレーザーを用いた量子制御法の開発

- 研究課題
- 1 ,振幅と位相をデザインしたレーザー場による超精密コヒーレント制御法の開発

極限精密光計測研究部門（分子制御レーザー開発研究センター）

研究目的 高分解能分光法やナノ領域顕微分光法による分子とその集合体の精密構造研究法の開発

- 研究課題
- 1 ,高分解能分光法による分子の精密構造解析
 - 2 ,ナノ領域顕微分光法による原子・分子集合体の微細光学解析

物質分子科学研究領域

- 研究目的 新たな現象や有用な機能の発見を目指して、新規分子・物質の開発やそれらの高次集積化と、電子・光物性、反応性、触媒能、エネルギー変換などの研究を行う

電子構造研究部門

- 研究目的 新規な構造を有する金属 - 炭素結合体の開発によるその特異な電子構造特性を生かした機能の発現を実現する。また、磁気光学分光法による薄膜表面磁性の評価を行う。
- 研究課題 1 ,金属アセチリドの特性を生かした機能性新規ナノ構造体の開発
2 ,放射光やレーザーを用いた新規磁性薄膜の磁気特性評価、表面分子科学的磁化制御、ならびに紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の開発

電子物性研究部門

- 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

分子機能研究部門

- 研究目的 1 ,生体分子および分子材料を対象とした固体高分解能 NMR 新規測定法の開発
2 ,高分子化学、超分子科学等の分子科学関連分野の諸問題を構造と機能という観点から研究
- 研究課題 1 ,脂質結合型水和生体分子を対象とした新規固体 NMR 測定法の開発と適用および分子材料の固体高分解能 NMR による局所構造解析
2 ,多核金属集積体を用いたスピン空間の精密構築と新規 π 共役電子系の構築とその機能

物質分子科学研究部門（客員）

- 研究目的 物質分子科学の関連領域との交流を通して新しい先端的研究分野の開拓を目指す
- 研究課題 1 ,ナノバイオ分子科学の新展開
2 ,分子素子の基礎研究
3 ,興味ある物性を持つ新物質の開発

ナノ分子科学研究部門（分子スケールナノサイエンスセンター）

- 研究目的 単一分子から少数分子系での物性化学の確立を目指す。また、物質変換・エネルギー変換の為の新規なナノ構造体や分子系の創成と新しいナノ計測手法の開発を行う。
- 研究課題 1 ,単一分子で機能を持つ有機分子の設計・合成、およびその電気・光物性の計測
2 ,有機トランジスタ用の n 型半導体の開発及び有機太陽電池の材料開発
3 ,人工分子を用いた光合成型物質変換系の構築
4 ,非平面共役化合物「バッキーボール」の新規合成法の開拓と金属ナノクラスター触媒の開発

ナノ計測研究部門 (分子スケールナノサイエンスセンター)

研究目的 光や電子線，X線等を用いた新しいナノ計測手法の開発とそれを用いたナノ分子科学の最先端研究を展開する

研究課題 1 ,新しいイメージング計測手法の開発
2 ,ナノスケールの新しいイメージング手法を用いた新物質系の開拓やナノバイオ研究の新展開を図る

ナノ構造研究部門 (分子スケールナノサイエンスセンター)

研究目的 ナノ構造体の電子状態と物性との関連を明らかにして新物質系の開拓を目指すとともに，物質変換の為の新規なナノ構造体/ナノ触媒を創成する

研究課題 1 ,ナノ構造物質における電子・核ダイナミクスの理論的・数値計算的研究
2 ,両親媒性高分子に錯体触媒，ナノ触媒，不斉触媒などを固定化し水中不均一系で機能する触媒の開発
3 ,金属クラスターの精密合成と構造解析および金属クラスターの光学特性と触媒機能評価

先導分子科学研究部門 (客員)(分子スケールナノサイエンスセンター)

研究目的 タンパク質，複合糖質をはじめとする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 ,超高磁場 NMR 法の生体高分子高次構造解析への応用，複合糖質およびタンパク質の精密立体構造解析

生命・錯体分子科学研究領域

研究目的 生物が示す多彩な生体機能の発現が，どのような機構で行われているか分子レベルで解明するための研究を行う。中心金属と配位子の組み合わせで金属錯体が発現する多種多彩な機能を生かしてエネルギー・環境問題軽減のための高効率エネルギー変換，水中での有機化合物の分子変換，無機小分子の活性化を行う。

生体分子機能研究部門

研究目的 アミノ酸配列から蛋白質の立体構造が形成される過程(フォールディング)の分子機構を含めて，生物が示す多彩な機能の発現を種々の研究手法を駆使することで，その詳細な分子機構を明らかにするとともに，金属酵素がもつ特色のある反応場を，活性中心モデル錯体から解明し，既知の金属酵素の機能改質や人工酵素，機能性触媒などの新規物質の開発を進める

研究課題 1 ,新規な機能を有する金属タンパク質の構造機能相関解明
2 ,In vitro の蛋白質フォールディングの熱力学と速度論
3 ,蛋白質の細胞内フォールディングを介助する分子シャペロンの作用機構
4 ,金属酵素による酸素分子活性化機構
5 ,窒素循環サイクルに関わる金属酵素の分子機構

生体分子情報研究部門

- 研究目的 神経細胞ネットワーク機能解析素子開発，細胞内プローブ分子開発，細胞膜表面反応解析などの研究をととして，生体内での情報機能分子の構造と機能を調べる
- 研究課題 1 ,神経細胞ネットワーク機能解析素子開発
2 ,人工細胞膜の構造と物性および関連病原体分子の構造と機能
3 ,細胞内情報システムプローブ分子開発

錯体触媒研究部門

- 研究目的 分子間の共同作用的相互作用に立脚した化学反応の駆動，化学反応システムの構築
- 研究課題 1 ,水中での疎水的相互作用による有機分子変換触媒システム構築
2 ,分子集合挙動に基づく超分子触媒，高次構造触媒の設計と創製

錯体物性研究部門

- 研究目的 金属錯体を反応場とした化学エネルギーと電気エネルギーの相互変換と小分子の新しい反応性の開拓
- 研究課題 1 ,電子欠損型ヒドリド錯体の合成研究
2 ,配位子設計に基づく金属錯体の反応制御
3 ,金属錯体による小分子の活性化
4 ,二酸化炭素の6電子還元反応
5 ,メタノールの6電子酸化反応

生命・錯体分子科学研究部門（客員）

- 研究目的 生物無機化学的な観点から生体系での酸素酸化によるエネルギー代謝機構の解明
- 研究課題 1 ,金属 - 酸素錯体の反応性の解明
2 ,酸素添加と酸素呼吸の酵素モデルの合成

3-2 研究施設

極端紫外光研究施設

- 目 的 全国共同利用施設として UVSOR-II 光源加速器（電子蓄積リング）からのシンクロトロン光を国内の大学等の研究者に安定に供給して極端紫外光物性・光化学の共同利用研究を支援するとともに、極端紫外光源の高輝度化，加速器を利用した新しい光源に関する研究や新たな放射光分子科学の開拓的研究を国内外の研究者と共同して推進する。

分子スケールナノサイエンスセンター

- 目 的 分子スケールナノサイエンスセンターは，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センターである。現在は，平成 19 年度から始まった文部科学省ナノテクノロジー・ネットワークプロジェクトを通して，世界最高性能の 920MHz 核磁気共鳴装置，300kV 透過分析電子顕微鏡，高性能走査電子顕微鏡，集束イオンビーム加工装置などのセンター所有の共通機器に加え，センター専任併任教員所有の最先端機器を，民間を含めた全国共同利用に供している。

分子制御レーザー開発研究センター

- 目 的 本センターは，光分子科学研究領域との連携のもとに，分子科学の新分野を切り拓くための装置，方法論の開発研究を行なう施設である。新たに開発される装置や方法論は，所内外の分子科学者との先端的な共同研究のリソースとして提供される。主な開発研究分野としては，テラヘルツから軟 X 線にいたる先端光源の開発；高出力超短パルスレーザーを用いた量子制御法の開発；高分解能光イメージングとナノ領域顕微分光法の開発などが挙げられる。また，本センターは理化学研究所との連携融合事業であるエクストリームフォトンクスの中核センターとしての役割を果たしている。

機器センター

- 目 的 機器センターは物質開発を行う上で基盤設備となる汎用物性測定機器と汎用分析機器それに液体ヘリウム液化機を管理し，研究所内外の共同利用に資するために設立された。共同利用としては協力研究を通して利用する形態と施設利用の二種類がある。また，平成 19 年度より発足した化学系研究設備有効活用ネットワークの実務を担当している。

装置開発室

- 目 的 多様化する材料の精密加工技術および微細工具を用いたマイクロ加工技術の高度化，ならびに高密度集積回路の設計・製作・評価技術を確立し，所内研究あるいは共同利用研究の技術支援を行う。また，迅速な研究成果が求められる研究者からの要求に応じて装置の設計・製作を行う。

計算科学研究センター（岡崎共通研究施設）

- 目 的 全国共同利用施設として、超高速分子シミュレータならびに高性能分子シミュレータを国内の大学、研究機関の研究者に提供し、大学の研究室のクラスタ等では不可能な大規模計算に基づいた計算分子科学の共同利用研究を支援するとともに、計算分子科学に必要なライブラリの開発、整備を進め、また、グリッド技術による分子科学 VO 形成など新しいシステム運用技術の開発を行う。一方で、「次世代スーパーコンピュータプロジェクト」や「巨大計算手法の開発と分子・物質計算科学中核拠点形成」等のプロジェクト研究に対し、研究の場を提供する。

岡崎統合バイオサイエンスセンター（岡崎共通研究施設）

- 目 的 岡崎統合バイオサイエンスセンターは、分子科学、基礎生物学、生理科学などの学際領域にまたがる諸問題に対し、総合的な観点と方法論を適用、駆使するとともに、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た独創的研究により、新しいバイオサイエンスを切り開くことを目的としている。

3-3 共同利用研究

3-3-1 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：所内の教授又は准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。

3-3-2 2007 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 生体分子情報システムの研究方法論の構築	城西大学理学部 分子科学研究所 加藤 立久 宇理須恒雄

(2) 協力研究

課 題 名 (前期)	代 表 者
高周期 14 族元素を骨格に有する特異な芳香族系の構築とその電子状態及び物性の解明	埼玉大学大学院理工学研究科 斎藤 雅一
開口フラレン(穴あきフラレン)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
EB 法により作製された金属ナノ構造におけるプラズモンの空間特性 貴金属ナノ配列構造における局在プラズモン励起の空間構造と増強ラマン散乱	北海道大学電子科学研究所 物質・材料研究機構ナノ計測センター 三澤 弘明 北島 正弘
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 シソフィラン鎖によって組織された微粒子及びナノチューブの近接場測定 溶媒和 Fe イオンの赤外光解離分光 水素結合ネットワーク中における多重プロトン/水素原子リレーに関する研究	埼玉大学大学院理工学研究科 九州大学大学院工学研究院 九州大学大学院理学研究院 九州大学大学院理学研究院 坂本 章 新海 征治 関谷 博 迫田 憲治
パラジウム錯体の電子スペクトルの剪断応力効果 環拡張ポルフィリン金属錯体の磁気特性の解明 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 軟 X 線による無機透明物質のアブレーション カーボンナノチューブシート上の細胞培養 シナプス機能センシングのためのマイクロ流体能動素子の研究 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 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 常温接合を用いた半導体擬位相整合波長変換素子の開発 マイクロチップ Nd:YAG レーザーを用いた小型 is-TPG 光源の開発 高共役 π 分子修飾電極の作成と評価 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 UVSOR-FEL を用いたアミノ酸の合成および不斉分解 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基礎研究 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	室蘭工業大学工学部 京都大学大学院理学研究科 東京大学大学院新領域創成科学研究科 筑波大学大学院数理物質科学研究科 横浜国立大学大学院工学研究院 兵庫県立大学高度産業科学技術研究所 東北大学大学院理学研究科 大分大学教育福祉科学部 東京大学大学院工学系研究科 中央大学理工学部 (独)理化学研究所 愛媛大学総合科学研究支援センター 東京大学大学院理学系研究科 横浜国立大学大学院工学研究院 名古屋大学大学院工学研究科 大阪大学大学院基礎工学研究科 城谷 一民 田中 泰央 川合 真紀 牧村 哲也 荻野 俊郎 内海 裕一 福村 裕史 中島 俊男 古澤 明 庄司 一郎 林 伸一郎 宇野 英満 米澤 徹 小林 憲正 高嶋 圭史 芦田 昌明

表面改質処理したリチウム電池用正極活物質粒子の深さ方向分析	(独)産業技術総合研究所	小林 弘典
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	東京工業大学原子炉工学研究所	尾上 順
超高磁場固体 NMR を用いた新規ラセン高分子の動的構造解析	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
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	大阪大学大学院理学研究科	青島 貞人
白金(II)錯体を用いるプロトンと共役した電子移動反応	福島大学共生システム理工学類	大山 大
ガスソース法により生成したカーボンナノチューブの構造評価	名城大学理工学部	丸山 隆浩
ナノ粒子のパルスレーザー励起による局所的反応場の化学	東京大学大学院総合文化研究科	真船 文隆
(ET) ₂ MM'(SCN) ₄ [M = K, Rb, Cs, NH ₄ M' = Hg, Zn] の遠赤外及び近赤外分光測定	東京工芸大学工学部	比江島俊浩
屈曲型ドナーを用いた磁性伝導体の微小結晶構造解析と磁気的物性解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	藤原 秀紀
強レーザー場中イオン化における分子配向および分子回転の効果	(独)日本原子力研究開発機構量子ビーム 応用研究部門	板倉 隆二
分子およびクラスターの内殻光電離ダイナミクス研究	高エネルギー加速器研究機構物質構造化 学研究所	柳下 明
フラーレン薄膜及び金属内包フラーレンの磁気物性評価に関する研究	東北大学多元物質科学研究所	秋山 公男
量子スピン系の強磁場極低温磁化測定	神戸大学自然科学系先端融合研究環分子 フォトサイエンス研究センター	太田 仁
薬剤分子と生体膜の相互作用に関する分子動力学シミュレーションによる研究	姫路獨協大学薬学部	吉井 範行
フラーレンの振動子強度測定と総和則による検証	法政大学文学部	中島 弘一
ランダム媒質中のガラス転移	高知工科大学総合研究所	宮崎 州正
パーフルオロシクロブタンの多可イオン化と解離	広島大学大学院理学研究科	田林 清彦
蛋白質の構造安定性とフォールディング	九州工業大学情報工学部	入佐 正幸
有機/金属ハイブリッドポリマーにおける電子状態解析	(独)物質・材料研究機構ナノ有機センター	池田 太一
課 題 名 (後期)		代 表 者
積分方程式理論を用いた有機溶媒・水混合溶液の相分離に関する研究	熊本電波工業高等専門学校	松上 優
薬剤分子と生体膜の相互作用に関する分子動力学シミュレーションによる研究	姫路獨協大学薬学部	吉井 範行
EB 法により作成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
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
強レーザー場中イオン化における分子配向および分子回転の効果	(独)日本原子力研究開発機構量子ビーム 応用研究部門	板倉 隆二
分子およびクラスターの内殻光電離ダイナミクス研究	高エネルギー加速器研究機構物質構造科 学研究所	柳下 明
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
レーザー場における分子・電子散乱過程	電気通信大学量子・物質工学科	森下 享
フラーレンの振動子強度測定と総和則による検証	法政大学文学部	中島 弘一
高次フラーレンの光イオン化機構と光解離動力学	岡山大学大学院自然科学研究科	久保園芳博
遷移金属イオンの電子構造がその溶媒和構造に及ぼす影響	九州大学大学院理学研究院	大橋 和彦
ラマン分光法による溶液中の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
有機/金属ハイブリッドポリマーにおける電子状態解析	(独)物質・材料研究機構ナノ有機センター	池田 太一
相転移を示す分子性導体の分光学的研究	京都大学低温物質科学研究センター	中野 義明
光学スペクトルによる縮合多環芳香族炭化水素 TBP の構造に関する研究	山口東京理科大学基礎工学部	井口 眞
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
屈曲型ドナーを用いた磁性伝導体の微小結晶構造解析と磁気的物性解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	藤原 秀紀
量子スピン系の強磁場極低温磁化測定	神戸大学自然科学系先端融合研究環分子 フォトサイエンス研究センター	太田 仁
軟 X 線による無機透明材料のアブレーション	筑波大学大学院数理物質科学研究科	牧村 哲也
カーボンナノチューブ表面へのタンパク固定に関する研究	横浜国立大学大学院工学研究院	荻野 俊郎
神経毒性 Aβ 重合体の解析とその中和分子スクリーニング系の開発	国立長寿医療センター研究所	松原 悦郎
神経細胞機能センサー高機能化のための 3 次元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
神経細胞機能センサー高機能化のための Si 集積回路構成法の検討	中部大学工学部	石井 清
マイクロチップ Nd:YAG レーザーを用いた小型 is-TPG 光源の開発	(独)理化学研究所中央研究所	林 伸一郎
擬似位相整合素子による中赤外超短パルスの発生の最適化	東京大学生産技術研究所	志村 努
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	東京大学大学院工学系研究科	古澤 明
常温接合を用いた半導体擬似位相整合波長変換素子の開発	中央大学理工学部	庄司 一郎

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
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
3原子分子の二価イオン状態における分子変形の解明	新潟大学教育研究院自然科学系	副島 浩一
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	東京工業大学原子炉工学研究所	尾上 順
テラヘルツ領域における $\text{Sm}_2\text{Mo}_2\text{O}_4$ の電子状態の研究	神戸大学大学院理学研究科	難波 孝夫
スピנקロスオーバー錯体を含む高分子ミクロスフェアの合成と双安定性挙動	滋賀県立大学工学部	鈴木 厚志
ナノ粒子のバルスレーザー励起による局所的反応場の化学	東京大学大学院総合文化研究科	真船 文隆
キラル化合物認識高分子材料合成に用いる高効率金属触媒の探索	東京農工大学大学院共生科学技術研究院	前山 勝也
配位カルボニル基の反応性に及ぼす隣接基効果	福島大学共生システム理工学類	大山 大
facial 型配位子を有する aminyl radical 錯体の酸化反応性の評価	東京理科大学理学部	宮里 裕二
モリブデン - スルフィド錯体における Mo-S 結合の特性解明	大阪市立大学大学院理学研究科	杉本 秀樹
UVSOR-FEL を用いたアミノ酸の合成および不斉分解	横浜国立大学大学院工学研究院	小林 憲正
DMTTF- $\text{QBr}_x\text{Cl}_{4-x}$ の多周波・パルス ESR	東京大学大学院工学系研究科	岩瀬 文達
ガスソース法により生成したカーボンナノチューブの構造評価	名城大学理工学部	丸山 隆浩
過冷却液体の動的不均一性由来する種々の輸送異常の研究	東京大学生産技術研究所	古川 亮
胆汁酸ミセルの MD シミュレーション	大分大学教育福祉科学部	中島 俊男
ヘム依存性制御蛋白質の構造・機能解析	北海道大学大学院理学研究院	石森浩一郎
ヘム分解酵素 (HO) の構造・機能解析	東北大学多元物質科学研究所	齋藤 正男
球状蛋白質のフォールディング機構についての研究	名古屋大学大学院理学研究科	榎 互介
窒化マンガンナノドット周期配列の磁性	東京大学物性研究所	小森 文夫
脂質二重膜表面の曲率とホスホリパーゼ C- $\delta 1$ PH ドメインの立体構造変化の固体 NMR 分光法による解析	兵庫県立大学大学院生命理学研究科	辻 暁

(3) 研究会

放射光と表面電子顕微鏡——電顕ナノ材料科学の新しい進展——
2007年9月10日(月)～11日(火) 岡崎コンファレンスセンター

9月10日(月)

- 13:00 開会 横山利彦
- 13:10- 岡本裕巳、井村考平
「近接場光学イメージング：貴金属微粒子系における局在光電場とプラズモン」
- 14:00- Laszlo Toth、大門 寛、松田博之、松井文彦
「回転楕円メッシュを用いたエネルギーフィルター付き簡易型 PEEM の開発」
- 14:20- 新美大伸、嘉藤誠、川崎貴博、宮本剛志、中村元弘、和田敬広、鈴木秀士、田旺帝、工藤政都、河原直樹、堂井真、塚本勝美、朝倉清高
「実験室系 EXPEEM による表面化学マッピング」
- 14:40- 雨宮健太、佐古恵理香、宮脇淳、阿部仁、酒巻真粧子
「三次元顕微 XAFS 法を用いた薄膜磁性の解析法の開発」
- 15:10- 京谷 隆
「磁性金属を内包したカーボンナノ試験管」
- 16:00- 小飼真人、郭方准、谷口雅樹、石松直樹、圓山裕
「MLD-PEEM を用いた鉄隕石の磁区構造観察」
- 16:20- 鈴木雅彦、橋本道廣、上田将人、安江常夫、越川孝範、Ernst Bauer
「スピン偏極 LEEM (SPLEEM) による磁性薄膜の成長過程の観察」
- 16:40- ポスターセッション
- 18:00- 懇親会

9月11日(火)

- 9:00- 塚本尚義
「同位体顕微鏡による太陽系起源論の新展開」
- 9:50- 池本夕佳、森脇太郎
「SPring-8 BL43IR の赤外顕微分光」
- 10:10- 山本 勇、松浦 伸志、三賀森 雅和、山本 亮太、山田 剛司、上野 信雄、宗像 利明
「レーザー光電子顕微鏡による鉛フタロシアニン薄膜成長と電子状態」
- 10:40- 京谷 隆
「エネルギー分析型 LEEM による銀表面の電子分光イメージング」
- 11:00- 藤川安仁、櫻井利夫、J. B. Hannon、R. M. Tromp
「MLD-PEEM を用いた鉄隕石の磁区構造観察」

- 11:20- 永松 伸一、解良 聡、奥平 幸司、藤川 高志、上野信雄
「角度分解光電子分光法の理論研究と有機薄膜系への応用」
- 13:00- 恩田 健
「サブ 10 フェムト秒 2 光子光電子分光とその顕微分光への応用」
- 13:50- 福本恵紀、松下智裕、大沢仁志、中村哲也、室隆桂之、木下豊彦、新井邦明
「フェムト秒レーザーを用いた時間分解 XMCD-PEEM (SPring-8/BL25SU)」
- 14:10- 安江常夫、中口明彦、橋本道廣、A.Locatelli、T. O. Montes、E. Bauer、越川孝範
「LEEM/PEEM における離散的クーロン効果」
- 14:30- 小谷佳範、谷内敏之、長田実、佐々木高義、秋永広幸、小嗣真人、郭方准、渡辺義夫、久保田正人、小野寛太
「SPELEEM による遷移金属酸化物ナノシートの観察」
- 14:50- 中川剛志、横山利彦、渡邊一也、松本吉泰
「レーザー誘起磁気円二色性による光電子顕微鏡の研究」
- 15:10- 尾嶋正治
「東大放射光アウトステーション計画と 3D ナノ ESCA プロジェクト」
- 15:30- 柿崎明人
「SPring-8 による東大ビームライン計画におけるスペクトロスコピー研究計画」
- 15:50- 閉会 朝倉清高
- 10 日 16:40 ポスターセッション
- P1 NiO(100) 表面における反強磁性磁区構造の加熱効果の観察
新井邦明、福本恵紀、奥田太一、郭方准、脇田高德、松下智裕、室隆桂之、中村哲也、蔵 圭司、前田勇樹、孫海林、宮田洋明、為則雄祐、大浦正樹、竹内智之、小林啓介、柿崎明人、木下豊彦
- P2 EXPEEM を利用したデバイス評価装置開発の試み
内藤俊雄、朝倉清高、新美大伸、田澤豊彦、嘉藤誠、武藤正雄、上田映介、菅育正、小高仁重、田谷嘉浩、菅原智明、下野功、高橋志郎、高橋幸悦
- P3 放射光 XPEEM による In/Si(111) 上の Ag の成長過程観察
上田将人、橋本道廣、郭方准、鈴木雅彦、松岡由明、木下豊彦、小林啓介、辛埴、大浦正樹、竹内智之、安江常夫、越川孝範
- P4 In/Si(111) 上の Sb の成長過程の動的観察
橋本道廣、郭方准、鈴木雅彦、上田将人、松岡由明、木下豊彦、小林啓介、辛埴、大浦正樹、竹内智之、斎藤祐児、松下智裕、安江常夫、越川孝範
- P5 XANAM
鈴木秀士、朝倉清高
- P6 Ni₂P 触媒の PEEM 観察
宮本剛士、新美大伸、鈴木秀士、朝倉清高
- P7 生体内必須微量元素（セレン、亜鉛）の分布と状態分析
宇尾基弘、亘理文夫、朝倉清高
- P8 細線上に成長した垂直型カーボンナノファイバーの観察
大南祐介、Quoc Ngo、Alan M. Cassell、Jun Li、朝倉清高、Cary Y. Yang
- P9 磁性金属を内包したカーボンナノ試験管
京谷 隆
- P10 回転槽円メッシュを用いたエネルギーフィルター付き簡易型 PEEM の開発
Laszlo Toth、大門 寛、松田博之、松井文彦
- P11 レーザー誘起磁気円二色性による光電子顕微鏡の研究
中川剛志、横山利彦、渡邊一也、松本吉泰

生細胞の分子科学

2007 年 5 月 22 日（火）～ 23 日（水） 岡崎コンファレンスセンター

5 月 22 日（火）

9:30 ～ 開会の挨拶

セッション 1

9:40 ～ 9:50 浜口宏夫（東大院理）
イントロダクトリー・トーク

9:50 ～ 10:20 加納英明（東大院理）
生細胞の非線形ラマン分光イメージング

10:20 ～ 10:50 藤井正明（東工大資源研）
2 波長ピコ秒赤外超解像顕微鏡の開発と細胞への応用

11:10 ～ 11:40 小倉尚志（兵庫県立大院生命理）
ミトコンドリアにおける酸素活性化反応の追跡

11:40 ～ 12:10 神取秀樹（名工大院工）
ロドプシンの赤外分光法：より生理的な測定を目指して

12:10 ~ 12:40	宇理須恒雄（分子研） 神経変性疾患の分子機構解明と単一神経細胞機能解析技術開発
セッション 2	
14:00 ~ 14:10	松永是（東京農工大院） イントロダクトリー・トーク
14:10 ~ 14:40	田中剛（東京農工大院） 生物ナノ磁石の生成機構解析とその応用
14:40 ~ 15:10	中村史（産総研） AFM で動作するナノスケールの針を用いた単一細胞操作と力学解析
15:10 ~ 15:40	春山哲也（九州工大院生命） 多様なアプローチによる細胞バイオセンシング系の構築

セッション 3	
16:00 ~ 16:30	植田充美（京大院農） イントロダクトリー・トーク
16:30 ~ 17:00	福崎英一郎（阪大院工） メタボロミクスの基礎技術開発と応用
17:00 ~ 17:30	梶山慎一郎（阪大院工） レーザーを用いた細胞操作と分析
17:30 ~ 18:00	田丸浩（三重大院生物資源） ゼブラフィッシュにおける生体内分子イメージング
19:00 ~	懇親会

5月23日（水）

セッション 4	
9:20 ~ 9:30	太田信廣（北大電子研） イントロダクトリー・トーク
9:30 ~ 10:00	中林孝和（北大電子研） 蛍光寿命イメージングと用いた細胞内の環境変化の In Vivo 計測
10:00 ~ 10:30	金城政孝（北大電子研） 蛍光相関分光法を利用した In Vivo 分子間相互作用解析
10:30 ~ 11:00	小澤岳昌（分子研） 生体分子を可視化する蛍光・発光プローブの現状と課題
11:20 ~ 11:50	新留康郎（九大院工） 光吸収・散乱プローブとしての金ナノロッド
11:50 ~ 12:20	増原 宏（阪大院工、濱野生命科学研究財団） 単一生細胞の分光イメージングとフェムト秒非線形プロセッシング
12:20 ~ 12:50	三室 守（京大院地球環境学堂） 単細胞シアノバクテリアを用いた光合成系の解析と生物学的「摂動」による情報の高品位化

若手分子化学研究者のための物理化学研究会 2007年6月23日（土） 分子科学研究所 研究棟 201 号室

13:30 ~ 13:35	開会の辞	菱川 明栄（分子科学研究所）
13:35 ~ 14:15	講演	応用生物物理化学 秋山 良（九州大学）
14:15 ~ 14:55	講演	衝突反応過程に波束法を使えるようになるための基礎 島倉 紀之（新潟大学）
14:55 ~ 15:35	講演	分子結晶の励起状態ダイナミクス 朝日 剛（大阪大学）
15:50 ~ 16:30	講演	分子クラスター：過去・現在・未来 藤井 朱鳥（東北大学）
16:30 ~ 17:10	講演	多電子励起分子の物理と化学 河内 宜之（東京工業大学）

（講演 30 分、討論 10 分）

分子情報通信 (Molecular Communication) のサイエンス基盤
2007 年 9 月 28 日 (金) ~ 29 日 (土) 岡崎コンファレンスセンター中会議室

9 月 28 日 (金)

13:00-13:10 開会挨拶 (分子科学研究所 宇理須恒雄)

座長 檜山 聡

13:10-13:35 内海裕一 (兵庫県立大学高度産業科学技術研究所)
放射光を用いたバイオフィクロデバイスの作成

13:35-14:00 服部 渉 (NEC ナノエレクトロニクス研究所)
タンパク質分子を検出するマイクロ流体チップ

14:00-14:25 栗田弘史 (豊橋技術科学大学)
1 分子 DNA 操作技術を用いた DNA - タンパク質間相互作用の解析

座長 住友弘二

14:40-15:05 大岩和弘 (情報通信研究機構未来 ICT 研究センター)
タンパク質モーターを用いたナノメートル・マイクロメートルサイズの情報通信

15:05-15:30 檜山 聡 (NTT ドコモ総合研究所)
モータータンパク質と DNA を利用した分子伝送システム

15:30-15:55 宇理須恒雄 (分子科学研究所)
イオンチャンネルバイオセンサーの開発

座長 大岩和弘

16:10-16:35 秋谷昌宏 (武蔵工業大学生体医工学科)
LB 膜を用いた味覚センサの開発

16:35-17:00 平田孝道 (武蔵工業大学生体医工学科)
カーボンナノチューブを用いたバイオナノセンサの開発

17:00-17:25 奥村幸司 ((株) アイシンコスモス研究所)
バイオアッセイを用いた微量物質検出装置の開発

座長 吉川研一

17:35-18:15 吉村由美子 (名古屋大学環境医科学研究所)
大脳皮質局所神経回路のシナプス伝達様式

18:15-20:30 懇親会

9 月 29 日 (土)

座長 菊池純一

9:00- 9:25 吉川研一 (京都大学大学院理学研究科)
DNA: 塩基配列は長期記憶、それでは短期記憶の機能はどこに?

9:25- 9:50 湊元幹太 (三重大学大学院工学研究科)
人工細胞モデル構築へ向けて: 膜蛋白質システムをどう組み込むか

9:50-10:15 野村 M. 慎一郎 (東京医科歯科大学生体材料工学研究所)
人工細胞の手法による膜タンパク質機能化リボソームの調製と評価

座長 内海裕一

10:30-10:55 住友弘二 (NTT 物性科学基礎研究所)
細胞間情報伝達機構の解明とデバイス応用への取り組み

10:55-11:20 木賀大介 (東京工業大学大学院総合理工学研究科)
合成生物学: 細胞内と試験管内それぞれにおける人工遺伝子回路の構築

座長 宇理須恒雄

11:25-12:05 松原悦朗 (国立長寿医療センター研究所)
A β クリアランスを標的としたアルツハイマー病治療法開発

座長 奥村幸司

13:00-13:40 佐竹伸一郎 (生理学研究所)
神経伝達物質の拡散により仲介される異種シナプス抑制

座長 荻野俊郎

13:45-14:10 堀 勝 (名古屋大学大学院工学研究科)
プラズマバイオニクス創成と進展

14:10-14:35	澤田和明（豊橋技術科学大学） イオン情報をリアルタイムに画像化する２次元ダイナミックバイオイメーシングセンサ
14:35-15:00	浜口智志（大阪大学大学院工学研究科） 大気圧プラズマを用いた液中プラズマプロセス
座長 浜口智志	
15:15-15:40	菊池純一（奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科） 人工細胞をもちいる分子通信
15:40-16:05	手老龍吾（分子科学研究所） 酸化物基板上での脂質二重膜の熱および光誘起形状変化と脂質膜アレイ形成への応用
16:05-16:30	荻野俊郎（横浜国立大学工学部） 生体関連物質の固体表面への吸着特性
16:30-16:40	閉会挨拶（NTT ドコモ総合研究所 檜山 聡）

分子科学における連成シミュレーションの基礎理論と応用
Coupled Simulation in Molecular Science: Theories and Applications
2007年8月29日（水）～31日（金） 分子科学研究所 山手3号館大会議室、中会議室

8月29日	
13:30-14:00	趣旨説明、等
14:00-15:30	基調講演 渡部雅浩（北大） 「マルチスケール系としての気候とそのモデル化」
16:00-17:30	招待講演 諸熊奎治（京都大） 「複雑分子系の複合分子理論によるシミュレーションを目指して」
18:00-20:00	懇親会
8月30日	
09:00-12:00	セッション1 伊藤伸泰（東京大） 「分子運動・熱平衡状態・非平衡現象」 岸本泰明（京都大） 「多階層・複合系としてのプラズマダイナミクスと揺らぎの構造」
13:30-16:30	セッション2 小松崎民樹（神戸大） 「生体分子時系列情報から我々は何を学ぶ取ることができるか？」
16:30-18:00	ポスターセッション（山手3号館2階中会議室）
8月31日	
09:00-12:00	セッション3 森田明弘（東北大、分子研） 「分子軌道計算に基づくモデリングとMD計算の組み合わせによる界面和周波発生分光の第一原理的シミュレーション手法の開発」 柳井 毅（分子研） 「高精度量子化学計算の理論開発：マルチ分解能法と多参照正準変換電子相関理論」
13:30-16:30	セッション4 岡本吉史（理研） 「有限要素法による共振器内部の各種運動を考慮した電磁波・熱伝導連成解析」 松本正和（名古屋大） 「最適化問題としてのシミュレーション物理」
16:30-17:00	事務連絡、等

「金属と分子集合」——新領域創生を目指して——
2007年6月1日（金）～3日（日） 分子科学研究所 山手3号館大会議室

6月1日（金）	
13:20-13:30	開会の挨拶
13:30-14:10	講演1 野地博行（阪大産研） 回転分子モーターのナノサイエンス
14:10-14:50	講演2 松尾 豊（ERATO, JST） 金属フラーレン複合体の超分子構造制御と光電子機能
14:50-15:10	学生講演1

15:30-16:10	講演 3 横山士吉 (九大院工)	分子スケールから見た dendrimer の光エレクトロニクスへの応用
16:10-16:50	講演 4 樋口昌芳 (物材研)	有機 - 金属ハイブリッドポリマーの精密合成とデバイス応用
16:50-17:10	学生講演 2	
18:00-20:00	懇親会	

6月2日(土)

9:00- 9:40	講演 5 植村卓史 (京大院工)	錯体ナノ空間と高分子
9:40-10:20	講演 6 竹内正之 (九大院工)	分子情報処理システムの構築: 小分子から超分子集合体まで
10:40-11:20	講演 7 奥村光隆 (阪大院理)	貴金属超微粒子の構造と電子状態に関する理論的研究
11:20-12:00	講演 8 川口博之 (分子研)	還元系フェノキシド錯体による小分子活性化
13:30-14:10	講演 9 石田敬雄 (産総研)	自己組織化膜の表面改質・錯形成多層化及びそれを利用したデバイス作製
14:10-14:50	講演 10 吉沢道人 (東大院工)	自己組織化錯体空間を活用した高次 π 共役集積体の構築
14:50-15:10	学生講演 3	
15:30-16:10	講演 11 吉本惣一郎 (産総研)	電極表面における分子集合体の制御: ナノ構造形成とその機能発現
16:10-16:50	講演 12 高谷 光 (阪大院基礎工)	メタル化ペプチドの合成および自己組織化挙動
16:50-17:10	学生講演 4	
17:10-17:30	記念写真	
17:30-19:30	ポスター発表	

6月3日(日)

9:00- 9:40	講演 5 上野隆史 (名大院理)	蛋白質分子集合体による金属イオン制御
9:40-10:20	講演 6 田中 剛 (東京農工大院)	磁性細菌が生合成するマグネタイトナノ結晶の形成制御機構
10:40-11:20	講演 7 金原 数 (東大院工)	フェロセンを利用した次世代分子機械の設計
11:20-12:00	講演 8 大越慎一 (東大院理)	ナノ構造磁性材料の化学的合成と外場刺激応答性
12:00-12:20	学生講演 5	
12:20-12:30	閉会の挨拶	

先端的 ESR 手法による分子性物質の新機能性探索

2007 年 12 月 17 日 (月) ~ 18 日 (火) 岡崎コンファレンスセンター大会議室

12月17日(月)

13:00-13:10 中村敏和 (分子科学研究所物質分子科学研究領域)
はじめに & 事務連絡

座長 中村敏和 (分子科学研究所物質分子科学研究領域)

13:10-13:30 櫻井敬博 (神戸大学研究基盤センター)
二次元三角格子モット絶縁体 $\text{EtMe}_3\text{P}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ の ESR 測定

13:30-14:00 三野広幸 (名古屋大学大学院理学研究科)
ESR 法からみた光合成タンパク質の分子進化

14:00-14:30 木俣 基 (物質・材料研究機構)
有機伝導体の電気的検出 ESR

14:30-15:00 手木芳男 (大阪市立大学大学院理学研究科)
 π 共役スピン系の光励起スピン整列と交換相互作用、および励起状態スピンダイナミクス

座長 生駒忠昭 (新潟大学大学院自然科学研究科)

15:30-16:00 菊池彦光 (福井大学大学院工学研究科)
二次元三角格子磁性体の ESR

16:00-16:30 神野賢一 (和歌山大学システム工学部)
自己束縛励起子の緩和配置と時間域磁気共鳴

16:30-17:00 河合明雄 (東京工業大学大学院理工学研究科)
動的なスピン分極を用いた光物理・光化学過程の時間分解 ESR 観測

17:00-17:30 光藤誠太郎 (福井大学遠赤外領域開発研究センター)
高出力テラヘルツ波を用いた磁気共鳴装置の開発

18:00-19:00 ポスターセッション（中会議室）
19:00-20:00 自由討論（中会議室）

12月18日（火）

座長 溝口憲治（首都大学東京大学院理工学研究科）

9:00-9:20 神澤恒毅（大阪府立大学理学部）
二次元混合スピン系 BIPNNBNO の ESR
9:20-9:40 大久保晋（神戸大学分子フォトサイエンス研究センター）
幾何学的フラストレーション系の ESR による研究
9:40-10:10 丸本一弘（筑波大学大学院数理物質科学研究科）
分子性デバイスにおける両極性電界注入キャリアの ESR 研究

座長 加藤立久（城西大学理学部）

10:30-11:00 寺寄 亨（豊田工業大学クラスター研究室）
フォントラップ法による捕捉イオン種の磁気光学分光
11:00-11:30 小堀康博（静岡大学理学部）
時間分解 ESR 法によるタンパク質ラジカルの構造と運動の観測
11:30-12:00 松井弘之（東京工業大学・産業技術総合研究所）
ペンタセン薄膜トランジスタの電場誘起 ESR における Motional Narrowing 効果

座長 荒田敏昭（大阪大学大学院理学研究科）

13:30-14:00 細越 裕子（大阪府立大学理学部）
低次元有機磁性体の ESR
14:00-14:30 佐藤和信（大阪市立大学大学院理学研究科）
コヒーレントマイクロ波パルス ELDOR による量子状態制御と分光学への応用
14:30-15:00 萩原政幸（大阪大学極限量子科学研究センター）
 $S=1$ 擬一次元反強磁性体の強磁場多周波 ESR
15:00-15:30 米田忠弘（東北大学多元物質科研究所）
走査トンネル顕微鏡を用いた原子スケールでのスピン計測
15:30-15:40 集合写真

座長 萩原政幸（大阪大学極限量子科学研究センター）

16:00-16:30 加藤 立久（城西大学理学部）
分子内での結合スピン系
16:30-17:00 黒田新一（名古屋大学大学院工学研究科）
有機薄膜デバイス中の電荷キャリアの電子スピン共鳴観測
17:00-17:30 荒田敏昭（大阪大学大学院理学研究科）
スピンラベル ESR 法——機能中の巨大タンパク質複合体の構造と物性
17:30-18:00 野尻浩之（東北大学金属材料研究所）
ナノ磁性多面体の ESR
18:00-20:00 懇親会（中会議室）

12月19日（水）

座長 野尻浩之（東北大学金属材料研究所）

9:00-9:20 八代晴彦（大阪大学極限量子科学研究センター）
整数スピン金属タンパク質の測定が可能な高感度多周波 ESR 装置の開発
9:20-9:40 田中久暁（名古屋大学大学院工学研究科）
擬一次元ハロゲン架橋金属錯体におけるソリトンの光生成と ESR 観測
9:40-10:00 古川 貢（分子科学研究所物質分子科学研究領域）
パルス ESR による有機導体のスピンダイナミクス研究

座長 太田 仁（神戸大学分子フォトサイエンス研究センター）

10:20-10:50 太田雅壽（新潟大学工学部）
ESR による X 線照射した黒胡椒の吸収線量評価
10:50-11:20 坂井 徹（日本原子力研究開発機構 SPring-8）
ESR によるスピンギャップ直接観測の選択則とその応用
11:20-11:50 浅野素子（首都大学東京大学院理工学研究科）
二中心で相互作用する励起三重項 - 二重項系のスピン多重度の磁場依存性

座長 佐藤 和信（大阪市立大学大学院理学研究科）

13:10-13:40 生駒忠昭（新潟大学大学院自然科学研究科）
Peculiarity in the Electronic Structure of Cu(II) Complex Ferromagnetically Coupled with Bisimino Nitroxides

- 13:40-14:10 太田 仁(神戸大学分子フォトサイエンス研究センター)
電子スピン共鳴測定法の新展開——多重極限 ESR 測定装置の開発——
- 14:10-14:40 溝口憲治(首都大学東京大学院理工学研究科)
電子のダイナミクスを見る：温度、周波数、圧力依存性を通して
- 14:40-15:10 中村敏和(分子科学研究所物質分子科学研究領域)
磁気共鳴法による分子性固体の新電子相・新機能探索
- 15:10-15:20 溝口憲治(首都大学東京大学院理工学研究科)
おわりに

ポスタープログラム(岡崎コンファレンスセンター 中会議室)

- P1 神戸高志(岡山大学大学院自然科学研究科)
フラレン磁性体の分子配向秩序と磁気秩序
- P2 脇田源太(名古屋大学大学院理工学研究科)
1次元量子系の電子状態に対する境界効果
- P3 山口博則(大阪大学極限量子科学センター)
二次元三角格子磁性体 NiGa_2S_4 の強磁場多周波 ESR
- P4 藤田 渉(首都大学東京大学院理工学研究科)
有機磁性分子結晶が示すラジカルカップリング反応
- P5 兒玉 健(首都大学東京大学院理工学研究科)
金属内包フラレンの内包金属の磁気的性質の研究
- P6 谷 篤史(大阪大学大学院理工学研究科)
ガスハイドレートにおけるラジカル-ゲスト分子間の水素移動
- P7 三宅祐輔(東京工業大学大学院理工学研究科)
イオン液体中におけるニトロキシドラジカルの回転拡散
- P8 木村尚次郎(大阪大学極限量子科学センター)
擬一次元 Ising 型反強磁性体 $\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ の強磁場 ESR
- P9 岡村久一(新潟大学工学部)
希土類イオンで付活したヒドロキシアパタイトの ESR 特性
- P10 加藤弥生(静岡大学理学部)
ウシ血清アルブミンとキノン類における光誘起電子移動反応
- P11 朽方将登(静岡大学理学部)
レーザー光を用いた KatG における反応初期過程の研究
- P12 神崎祐貴(大阪市立大学大学院理工学研究科)
ニトロキシドピラジカル系における Biradical Paradox
- P13 近藤 徹(名古屋大学大学院理工学研究科)
Electron transfer in the homodimeric type I reaction center of *Heliobacterium modesticaldum* : Two types of ESP-ESR signals from the light-induced two radical pair species
- P14 永島 舞(首都大学東京大学院理工学研究科)
金属をドーピングした DNA の電子状態
- P15 林 泰之(首都大学東京大学院理工学研究科)
ESR を用いた導電性高分子による活性酸素発生機構の研究

分子の視点から見る光合成

2008 年 3 月 10 日(月)～11 日(火) 岡崎コンファレンスセンター小会議室

3 月 10 日(月)(1 日目)

13:30-13:35 開会挨拶

座長 船橋靖博(名工大)

- 13:35-14:10 沈 建仁(岡山大)
「光化学系 II 酸素発生複合体の構造と機能」
- 14:10-14:45 杉浦美羽(大阪府大)
「好熱性ラン藻の遺伝子組換え体を用いた光化学系 II 反応中心の分子構造と機能の研究」
- 14:45-15:20 野口 巧(筑波大)
「光化学系 II における水・キノン酸化還元反応の分子機構：赤外分光法による解析」
- 15:20-15:55 熊崎茂一(京大)
「酸素発生型光合成膜微細構造変化を直接捉える顕微分光法」

座長 熊崎茂一(京大)

- 16:15-16:50 長谷川淳也(京大)
「紅色光合成細菌の反応中心の励起状態と電子移動：電子理論による研究」

16:50-17:25 出羽毅久（名工大）
「光合成細菌由来アンテナ / 反応中心複合体の平面脂質二分子膜への組織化と直接観察」

17:25-18:00 林 重彦（京大）
「分子シミュレーションで探るバクテリオロドプシンの光駆動プロトンポンプ」

18:30-20:00 懇親会（職員会館）

3月11日（火）（2日目）

座長 杉浦美羽（大阪府大）

9:00-9:35 栗栖源嗣（東大）
「シトクロム b_6f 複合体周辺の電子伝達とX線構造解析」

9:35-10:10 蘆田弘樹（奈良先端大）
「RuBisCO-like protein の研究から光合成 CO_2 固定酵素 RuBisCO の分子進化の謎にせまる」

座長 永田 央（分子研）

10:30-11:05 船橋靖博（名工大）
「PhotosystemII 酸素発生部位クラスターに対する合成のアプローチ」

11:05-11:40 和田 亨（分子研）
「エネルギー変換を指向した酸素発生錯体の開発」

11:40-12:15 八木政行（新潟大）
「合成金属錯体を用いた光合成酸素発生錯体のモデル化」

座長 八木政行（新潟大）

13:45-14:20 江 東林（分子研）
「マルチボルフィリン・マルチフラレンを用いた超分子巨大車輪の構築」

14:20-14:55 酒井 健（九大）
「白金錯体を触媒活性部位に有する単一分子光水素発生デバイスの開発」

14:55-15:30 石谷 治（東工大）
「金属錯体を中核とした人工光合成系の構築」

15:30-15:40 閉会挨拶

光機能性と高選択的反応性の融合が切り拓く新しい錯体光化学
2007年12月4日（火）～5日（水） 分子科学研究所 山手3号館会議室

12月4日（火）

13:00-13:15 開会：趣旨説明 鈴木孝義（阪大院理）

座長：廣津昌和（阪市大院理）

13:15-13:50 稲垣昭子（東工大資源研）
可視光増感ユニットをもつパラジウム錯体による触媒的光反応

13:50-14:25 梶谷正次（上智大理工）
機能発現を目指したメタラジカルコゲノレン錯体の官能基変換

14:25-15:00 桑田繁樹（東工大院理工）
架橋窒素原子をもつ二核錯体の合成とその反応性

座長：近藤 満（静岡大機器セ）

15:15-15:50 小坂田耕太郎（東工大資源研）
有機金属口タキサンの構造と光機能

15:50-16:25 小幡 誠（奈良女大院人間文化）
Click Chemistry を利用した配位子合成と錯体化学への応用

16:25-17:00 西岡孝訓（阪市大院理）
糖修飾 N -ヘテロ環カルベン錯体

座長：松尾貴史（阪大院工）

17:15-17:50 俣野善博（京大院工）
ハイブリッド型ボルフィリン類縁体を配位子とする金属錯体の合成と反応性

17:50-18:25 古田弘幸（九大院工）
近赤外吸収・発光特性をもつ異種ボルフィリノイドの創製

19:00-21:00 懇親会（職員会館）

12月5日（水）

座長：海老原昌弘（岐阜大工）

9:00-9:35 安里英治（琉球大理）
電子、プロトン移動能を付与した C_6O_6 リガンドベースのクラスター化学

9:35-10:10	林 宣仁（金沢大院自然科学） クラウンエーテル型バナジウムポリオキソ酸配位子の配位化学
10:10-10:45	會澤宣一（富山大院理工） ホスフィンスルフィドを有する低酸化数金属錯体の性質とホスフィン上のカルコゲン原子交換反応
座長：小島隆彦（阪大院工）	
11:00-11:35	柘植清志（北大院理） 鎖状構造を持つ強発光性銅 (I) - 銀 (I) 混合金属錯体
11:35-12:10	馬越啓介（長崎大工） 金属間相互作用により発現する白金および混合金属錯体の興味深い物性
12:10-12:45	石谷 治（東工大院理工） 光機能性レニウム多核錯体の開発
12:45-13:00	閉会：総括 木下 勇（阪市大院理）

(4) UVSOR 施設利用

（前期）

MFI 上の MoO_x 触媒活性種の L-XANES による微細構造解析	埼玉工業大学	有谷 博文
セラミックス材料の X 線照射損傷その場観察 (Si 及び AlK 殻吸収端 X 線の利用)	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
バイオセラミクス中の添加元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
表面改質処理正極電極の長期試験前後での表面の電子状態変化についての検討	産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
CI および AlK XAFS 測定による各種ナフタロシアン錯体の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
Pd 添加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
水晶シリコン K 殻の発光 XAFS 測定	神戸大学発達科学部	中川 和道
色素増感太陽電池に用いる複合酸化物電極材料の XAFS 解析	京都大学大学院工学研究科	岩本 伸司
窒化物半導体の Al-K 内殻励起による可視・紫外発光 4	金沢大学工学部	直江 俊一
層状構造を有する遷移金属酸化物の Li 脱離・挿入に伴う XANES 観察	関西大学工学部	荒地 良典
ポリビニルアルコール系化合物・シリカ（チタニア）無機・有機複合体の構造評価	愛知県産業技術研究所	深谷 英世
タングステン及びモリブデン酸塩の異方性反射測定と発光ダイナミックスの研究	信州大学工学部	伊藤 稔
極端紫外光照射による無機蛍光体の励起現象 (4)	新潟大学工学部	太田 雅壽
希土類イオンを添付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
温度可変下での LiYF_4 単結晶中希土類イオンの吸収スペクトルの研究	関西学院大学理工学部	小笠原一禎
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
軌道・電荷秩序を持つ層状ペロブスカイト型酸化物の紫外分光	東京大学大学院工学系研究科	十倉 好紀
ボロンドープ超伝導ダイヤモンドの真空紫外分光	京都薬科大学	有本 収
真空紫外光用フッ化物蛍光体の発光・励起スペクトル	大阪電気通信大学大学院工学研究科	大野 宣人
誘電体結晶中の Ti^{4+} 型不純物センターの発光特性の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
アミノ酸および DNA 分子の真空紫外分光	神戸大学発達科学部	中川 和道
複合フッ化物結晶の真空紫外発光・吸収測定	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	猿倉 信彦
極低エネルギー光電子分光機器のためのフィルター特性の吸収による測定	大阪大学大学院基礎工学研究科	菅 滋正
小型斜入射分光システムの絶対検出効率測定	首都大学東京大学院理工学研究科	田沼 肇
極端紫外光を用いたアモルファス半導体光誘起現象の観察	岐阜大学工学部	林 浩司
定在波分光用 Mo/Si 反射多層膜の反射率測定	東北大学多元物質科学研究所	柳原 美広
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	三重大学大学院工学研究科	元垣内敦司
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
希薄磁性半導体 GaCrN における磁性元素 Cr の d 軌道エネルギー位置の同定	大阪大学産業科学研究所	江村 修一
アミノ酸および DNA 分子の UVU-SX 吸収スペクトル測定	神戸大学発達科学部	中川 和道
EUV-FEL 用ミラーの反射率測定	理化学研究所 XFEL 計画推進本部	永園 充
小型真空紫外分光システムの検出効率測定	首都大学東京大学院理工学研究科	田沼 肇
有機分子・Si 複合ナノ粒子の高分解能価電子帯及び内殻光電子分光	神戸大学大学院工学研究科	田中 章順
Pd 系バルク金属ガラスおよび Fe 基ボイスラー型合金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
定在波光電子分光による Fe/Si 多層膜界面の価電子帯測定	東北大学多元物質科学研究所	江島 丈雄
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
強相関単結晶薄膜の光電子分光	分子科学研究所	木村 真一
Cu(001) 表面上の Fe 超薄膜の角度分解光電子分光測定	名古屋大学大学院工学研究科	柚原 淳司

Fermi surface variation across the quantum critical point in heavy fermions	Sungkyunkwan University(分子科学研究所)	IM, Hojun
BL5U におけるユーザタイム前調整および整備作業	分子科学研究所	伊藤 孝寛
セリウム単結晶における α - γ 相転移の角度分解光電子分光研究	分子科学研究所	伊藤 孝寛
超伝導を示す半導体の電子構造の遠赤外分光	東海大学情報理工学部	犬島 喬
InN 薄膜の顕微近・遠赤外反射	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
BL6B の整備	分子科学研究所	木村 真一
強相関半導体の圧力下テラヘルツ分光	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
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
蛋白質のテラヘルツ領域での吸収スペクトル測定	関西医科大学医学部	木原 裕
FEL と放射光による希ガスの 2 光子イオン化	分子科学研究所	彦坂 泰正
複合フッ化物薄膜の深紫外光伝導特性評価	名古屋工業大学	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
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 皓永
AlN 及び AlGaIn の偏光反射・吸収測定	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
AlN 及び AlGaIn の発光励起と時間分解測定 (IV)	福井大学遠赤外領域開発研究センター	福井 一俊
蛍光体単結晶の真空紫外吸収スペクトル	福井工業高等専門学校	北浦 守
セラミックス材料の X 線照射損傷その場観察 (OK 殻吸収端 X 線の利用)	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
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 (II)	産業技術総合研究所	小林 弘典
XAFS 法を用いた各種リチウム化合物の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
機能性アモルファスカーボン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
層状構造を有する遷移金属酸化物の Li 脱離・挿入に伴う XANES 観察	関西大学工学部	荒地 良典
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
共役ポリマーへの有機分子の分散による電子構造変化の研究	島根大学	田中 仙君
Li-Ni 系複合酸化物の真空紫外光電子分光	愛媛大学大学院理工学研究科	宮崎 隆文
角度分解紫外光電子分光法による機能性 LB 膜の分子配向評価	千葉大学工学部	奥平 幸司
角度分解光電子分光法による有機配向薄膜のバンド構造	千葉大学大学院自然科学研究科	解良 聡
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	千葉大学工学部	上野 信雄
紫外光電子分光によるイオン溶液の電子構造 II	九州シンクロトロン光研究センター	吉村 大介
金属単結晶上のアセン類単分子膜の角度分解光電子分光による研究	名古屋大学物質科学国際研究センター	金井 要
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
(後期)		
MFI 上の MoO _x 触媒活性種の L-XANES による微細構造解析	埼玉工業大学	有谷 博文
セラミックス材料の X 線照射損傷その場観察 (Si 及び AlK 殻吸収端 X 線の利用)	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
バイオセラミクス中の添加元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
表面改質処理正極電極の長期試験前後での表面の電子状態変化についての検討	産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
CI および AlKXAFS 測定による各種ナフタロシアン錯体の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
Pd 添加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
色素増感太陽電池に用いる複合酸化物電極材料の XAFS 解析	京都大学大学院工学研究科	岩本 伸司
窒化物半導体の Al-K 内殻励起による可視・紫外発光 4	金沢大学工学部	直江 俊一
層状構造を有する遷移金属酸化物の Li 脱離・挿入に伴う XANES 観察	関西大学工学部	荒地 良典
メソポーラスアルミナ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
CVD ダイヤモンドフォトン検出器の軟 X 線領域における特性評価	大阪大学大学院工学研究科	伊藤 利道
タングステン及びモリブデン酸塩の異方性反射測定と発光ダイナミックスの研究	信州大学工学部	伊藤 稔
極端紫外光照射による無機蛍光体の励起現象 (4)	新潟大学工学部	太田 雅壽
希土類イオンを添付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
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
ボロンドープ超伝導ダイヤモンドの真空紫外分光	京都薬科大学	有本 収
真空紫外光用フッ化物蛍光体の発光・励起スペクトル	大阪電気通信大学大学院工学研究科	大野 宣人
誘電体結晶中の TI ⁺ 型不純物センターの発光特性の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
水・イオン液体表面での光イオン化	九州大学大学院総合理工学研究院	原田 明
真空紫外励起スペクトル測定による酸化物中 Er イオンの 4f5d 遷移に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	吉野 正人

有機分子 - 遷移金属複合系における円磁気二色性実験	日本原子力研究機構先端基礎研究センター	松本 吉弘
極端紫外光を用いたアモルファス半導体光誘起現象の観察	岐阜大学工学部	林 浩司
定在波分光用 Mo/Si 反射多層膜の反射率測定	東北大学多元物質科学研究所	柳原 美広
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	三重大学大学院工学研究科	元垣内敦司
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
アミノ酸および DNA 分子の UVU-SX 吸収スペクトル測定	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
アミノ酸蒸着膜・滴下乾燥薄膜の UVU-SX 吸収スペクトル測定	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
有機分子 - Si 複合ナノ粒子の高分解能価電子帯及び内殻光電子分光	神戸大学大学院工学研究科	田中 章順
Pd 系バルク金属ガラスおよび Fe 基ホイスラー型合金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
定在波光電子分光による Fe/Si 多層膜界面の価電子帯測定	東北大学多元物質科学研究所	江島 丈雄
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
強相関単結晶薄膜の光電子分光	分子科学研究所	木村 真一
Cu(001) 表面上の Fe 超薄膜の角度分解光電子分光測定	名古屋大学大学院工学研究科	柚原 淳司
Temperature dependence of the Kondo resonance in magnetic and non-magnetic regimes	Sungkyunkwan University(分子科学研究所)	IM, Hojun
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
半導体表面上金属超薄膜のラッシュバ効果とその制御	東京大学物性研究所	松田 巖
超伝導を示す半導体の電子構造の遠赤外分光	東海大学情報理工学部	犬島 喬
BL6B の整備	分子科学研究所	木村 真一
強相関半導体の圧力下テラヘルツ分光	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
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
2 次, 3 次構造の異なった種々の蛋白質のテラヘルツ領域での吸収スペクトル測定	関西医科大学医学部	木原 裕
ZnO と MgO の格子振動に及ぼす点欠陥の影響	早稲田大学理工学術院	山本 知之
FEL と放射光による希ガスの 2 光子イオン化	分子科学研究所	彦坂 泰正
複合フッ化物薄膜の深紫外光伝導特性評価	名古屋工業大学	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 の偏光反射・吸収測定	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
AlN 及び AlGaIn の発光励起と時間分解測定 (IV)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
アミノ酸および DNA 分子の真空紫外分光	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
複合フッ化物結晶の真空紫外発光・吸収測定	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	猿倉 信彦
蛍光体単結晶の真空紫外吸収スペクトル	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 スペクトルの測定	明治大学理工学部	松本 皓永
Al 系窒化物半導体量子井戸構造の発光特性評価に関する研究	三重大学大学院工学研究科	元垣内敦司
フラーレン薄膜の光吸収絶対断面積測定	分子科学研究所	見附孝一郎
強相関薄膜の電子状態	分子科学研究所	木村 真一
Angle-resolved Photoemission Spectroscopy Study of $\text{Bi}_2\text{M}_2\text{Co}_2\text{O}_y$ ($M = \text{Ba}, \text{Sr}, \text{Ca}$)	分子科学研究所	木村 真一
極低エネルギー高分解能光電子分光による極相関物質電子状態変化の観測	大阪大学大学院基礎工学研究科	菅 滋正
BL7U におけるユーザータイム前調整および整備作業	分子科学研究所	伊藤 孝寛
低励起エネルギー角度分解光電子分光による擬一次元有機導体におけるラッテンジャー面の直接観測	分子科学研究所	伊藤 孝寛
Character of the Ce 4f-electron weakly hybridized with the conduction electron	Sungkyunkwan University(分子科学研究所)	IM, Hojun
レーザー高次高調波用薄膜フィルターの透過率評価	分子科学研究所	菱川 明栄
セラミックス材料の X 線照射損傷その場観察 (OK 殻吸収端 X 線の利用)	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
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 (II)	産業技術総合研究所関西センター	小林 弘典
XAFS 法を用いた各種リチウム化合物の状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
機能性アモルファスカーボン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
層状構造を有する遷移金属酸化物の Li 脱離・挿入に伴う XANES 観察	関西大学工学部	荒地 良典
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
Li-Ni 系複合酸化物の真空紫外光電子分光	愛媛大学大学院理工学研究科	宮崎 隆文
角度分解紫外光電子分光法による機能性 LB 膜の分子配向評価	千葉大学工学部	奥平 幸司
角度分解光電子分光法による有機配向薄膜のバンド構造	千葉大学大学院自然科学研究科	解良 聡
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	千葉大学工学部	上野 信雄
放射光を用いた有機薄膜中のフェルミ準位シフトの可能性 2	千葉大学大学院自然科学研究科	小野 正樹
紫外光電子分光によるイオン溶液の電子構造 II	九州シンクロトロン光研究センター	吉村 大介

金属単結晶上のアセン類単分子膜の角度分解光電子分光による研究	名古屋大学物質科学国際研究センター	金井 要
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
光触媒における酸化還元機構の解明	新潟大学工学部	太田 雅壽
光電子分光による有機半導体単結晶の電子構造の観測	千葉大学先進科学研究教育センター	石井 久夫

(5) 施設利用

機器センター

(前期)

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
希土類薄膜磁石の高磁気特性	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
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
有機分子および金属錯体のX線結晶構造解析	兵庫県立大学大学院工学研究科	北村 千寿
核酸化学修飾法の開発	岡崎統合バイオサイエンスセンター	永山 國昭
側鎖液晶性エチレン・マレイミド共重合体の構造解析	名古屋工業大学大学院工学研究科	山本 勝宏
金属錯体分子磁性体の磁気物性測定	慶應義塾大学理工学部	秋津 貴城
フラレン誘導体ナノウィスカー結晶の合成と物性研究	法政大学工学部	緒方 啓典
フェノチアジンカチオンラジカルをスピン源とする高スピン分子の磁気特性評価	徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部	岡 博之
周期的ナノ構造膜の磁気機能の評価に関する実験	秋田工業高等専門学校物質工学科	丸山 耕一
ポルフィラジン鉄(III)錯体の磁気物性	島根大学総合理工学部	池上 崇久
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
ゲストとして磁性金属イオンを捕捉した集積化型金属錯体の構築	名古屋工業大学	市枝 直子
微小分子性結晶の単結晶構造解析	東京大学物性研究所	高橋 一志
ESRによるキラル磁性体結晶の研究	広島大学大学院理学研究科	谷本 能文
液体金属、強磁性体金属、半導体の電流磁気効果に関する厚さとナノ構造の研究	静岡大学電子工学研究所	荻田 正巳
金属錯体の合成と核磁気共鳴法(NMR)による構造決定	愛知県立大学	田浦 俊明
金属錯体の結晶構造解析	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	満身 稔
Tsai型正二十面体相準結晶における遍歴電子磁性の研究	北海道大学大学院工学研究科	柏本 史郎
ポルフィリン関連鉄(III)錯体の磁気的性質に関する研究	東邦大学医学部	大胡 恵樹
有機トランジスタの電子スピン共鳴	産業技術総合研究所強相関電子技術研究所センター	長谷川 達生
有機電荷移動錯体の磁性およびそれに対する光照射効果の測定	北海道大学電子科学研究所	太田 信廣
ヘム蛋白質マトリクス中でのポルフィリン誘導体の反応性および物性評価	大阪大学大学院工学研究科	松尾 貴史

(後期)

核酸化学修飾法の開発	自然科学研究機構岡崎統合バイオサイエンスセンター	片岡 正典
フェノチアジンカチオンラジカル誘導体の光および磁気物性の評価	徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部	岡 博之
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
クレイ層間の極微小空間に拘束された高分子の運動特性と構造解析	名古屋工業大学大学院工学研究科	山本 勝宏
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
有機分子および金属錯体のX線結晶構造解析	兵庫県立大学大学院工学研究科	北村 千寿
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
希土類薄膜磁石の高磁気特性	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
分子導体・磁性体の微小単結晶のX線構造解析	東京大学物性研究所	高橋 一志
液体金属(強磁性体金属、半導体等も含む)の電流磁気効果に関する厚さとナノ構造の研究	静岡大学電子工学研究所	荻田 正巳
III-V 窒化物半導体の中性欠陥の探索	福井大学工学部	福井 一俊
キラル反強磁性体の ESR 測定	広島大学大学院理学研究科	井上 克也
低次元有機磁性体 F ₂ NNNO の電子スピン共鳴実験による磁気相互作用の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	細越 裕子
コバルト酸化物の単結晶 X 線構造解析	名古屋大学大学院理学研究科	伊藤 正行
ランタン型ルテニウム(II)(III)二核錯体の磁気物性	島根大学総合理工学部	池上 崇久
3d 遍歴電子と 4f 局在電子が共存した Tsai 型準結晶の磁気特性	北海道大学大学院工学研究科	柏本 史郎
ポルフィリン関連鉄(III)錯体の磁気的性質に関する研究	東邦大学医学部	大胡 恵樹

リチウムイオン二次電池材料の磁気的性質	関西大学化学生命工学部	荒地 良典
希薄磁性半導体の微細組織制御に関する研究	秋田工業高等専門学校	丸山 耕一
磁歪性酸化物微細磁性体の磁気特性に関する研究	秋田工業高等専門学校	丸山 耕一
キラル分子磁性体における非線形磁気応答検出	九州工業大学工学部	美藤 正樹

装置開発室

(前期)

配向分子の電子運動量分光装置のための多次元同時計測電子回路の開発	東北大学多元物質科学研究所	高橋 正彦
ミリ波サブミリ波領域でのビーム伝送系に用いる高精度楕円金属鏡の開発	大阪府立大学大学院理学系研究科	小川 英夫

(後期)

ミリ波サブミリ波領域でのビーム伝送系に用いる高精度楕円金属鏡の開発	大阪府立大学大学院理学系研究科	小川 英夫
電子顕微鏡用位相板および位相板ホルダーの微細加工検討	自然科学研究機構生理学研究所	大河原 浩
ミリ波サブミリ波観測装置に組み込む、高精度ハーメチックウェーブガイドの製作技術の確立	国立天文台先端技術センター	岡田 則夫
ドリフトチューブ用の電源の整備	高知工業高等専門学校	長門 研吉
水熱合成用オートグレーブの制作	広島大学大学院理学研究科	秋田 素子

計算機利用

遷移金属錯体の構造と反応機構に関する理論的研究	お茶の水女子大学	福田 豊
金属錯体および生体関連分子の構造・反応・励起状態に関する理論的研究	お茶の水女子大学大学院	鷹野 景子
理論化学計算を積極的に活用した有機合成反応における選択性発現の解明	愛知教育大学	赤倉松次郎
化学反応の ab initio 計算による研究	愛媛大学	長岡 伸一
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	森 聖治
時間依存密度汎関数法による機能性色材の光学スペクトルの高精度予測	横浜国立大学	千住 孝俊
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	立川 仁典
蛋白質の動的構造と機能の解析	横浜市立大学大学院	木寺 詔紀
界面非線形分光の理論	計算科学研究センター	森田 明弘
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	中川 幸子
分子軌道法によるインフルエンザ HA とシアロ糖鎖受容体の相互作用解析	岐阜大学	橋本 智裕
分子動力学法、及び ab initio 法による分子間相互作用の評価	岐阜大学	桑田 一夫
高分子電解質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
異核金属原子間に結合をもつランタン型複核錯体の電子状態	岐阜大学工学部	海老原昌弘
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、生物、表面の量子化学：励起状態と化学反応	京都大学	江原 正博
複合および非複合理論による複雑分子系の化学反応のシミュレーション	京都大学	諸熊 奎治
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	石田 俊正
複合電子系の構造、電子状態、反応過程、溶媒和構造に関する理論的研究	京都大学大学院	榊 茂好
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	仲西 功
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	田中 一義
計算科学の超精密化と巨大化	京都大学大学院工学研究科	福田 良一
Rigged QED 理論に基づく局所量に関する研究	京都大学大学院工学研究科	立花 明知
数値シミュレーションによる分光スペクトルの計算	京都大学大学院理学研究科	谷村 吉隆
金属クラスターの原子構造、磁気構造、および磁気異方性に関する第一原理的研究	金沢大学自然科学研究科	小田 竜樹
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
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
酵素系における化学反応に関する量子化学的研究	九州大学	吉澤 一成
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	南部 伸孝
モデル内殻ポテンシャル法による新規機能分子の電子状態の理論的探求	九州大学大学院	三好 永作
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院	季村 峯生
分子のひずみを介した有機固相反応の計算機シミュレーション	慶應義塾大学	ファジャール ブラディクタ
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	慶應義塾大学	光武亜代理
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	山内 淳
励起状態とその緩和過程に関する理論的研究	慶應義塾大学	藪下 聡

分子シミュレーションによるヒトβ - ガラクトシダーゼの反応定数の予測	慶應義塾大学理工学部	柚木 克之
分子の励起状態とその動的挙動の研究	広島大学大学院	岩田 末廣
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	相田美砂子
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	田林 清彦
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	斎藤 稔
擬1次元 1/4 充填有機分子性固体 (EDO-TTF) ₂ PF ₆ の光誘起相転移の第1原理計算による解明	高エネルギー加速器研究機構	岩野 薫
ランダム媒質中のガラス転移	高知工科大学	宮崎 州正
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
シリコンナノ構造体の原子構造および電子状態に関する理論研究	三重大学大学院工学研究科	秋山 亨
ペロブスカイト型遷移金属酸化物の機能発現機構の理論的研究	三重大学大学院工学研究科	大西 拓
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	野々山信二
共役分子の励起状態と光学的性質に関する研究	産業技術総合研究所	下位 幸弘
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	産業技術総合研究所	森下 徹也
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	産業技術総合研究所	石田 豊和
色素増感太陽電池用の色素の吸収スペクトルに関する理論的研究	産業技術総合研究所エネルギー技術研究部門	北尾 修
シリコン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
生体系を規範とする柔軟なナノサイズ分子の分子設計	分子科学研究所	永田 央
積分方程式を用いた溶液内分子の電子状態理論	分子科学研究所	吉田 紀生
ヘテロ環化合物とその分子集合体に関する量子化学的研究	分子科学研究所	戸村 正章
光機能性リガンドの DFT 計算	分子科学研究所	江 東林
金属クラスターの電子構造と電子ダイナミクスの理論計算	分子科学研究所	信定 克幸
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
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
前周期遷移金属錯体の構造と反応性に関する理論的研究	分子科学研究所	石田 豊
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
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
金属酵素モデルとしての金属錯体の理論計算	分子科学研究所	藤井 浩
NAD ⁺ /NADH 型配位子を有するルテニウム錯体に関する理論研究	分子科学研究所	木村 将浩
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
共役分子の先進的電子状態モデリングと大規模多参照問題へのチャレンジ	分子科学研究所	柳井 毅
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
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 拓明
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
ガラス系の遅い動力学の基礎研究	首都大学東京	赤石 暁
重原子を含む化合物の基底・励起電子状態と分子物性に関する量子化学計算	首都大学東京	波田 雅彦
2 自由度系における動的局在とカオスのトンネル効果	首都大学東京大学院理工学研究科	石川 明幸
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	天辰 禎晃
励起状態を生成するペニンゲイオン化の生成過程	新潟大学	徳江 郁雄
凝縮系における分子ダイナミクス	神戸大学	富永 圭介
分子動力学計算を用いた、RNA 結合タンパク質 Pumilio の塩基認識特異性の研究	神戸大学大学院自然科学研究科	栗崎以久男
分子内および分子間電子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
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	坂田 健
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	鳥居 肇
金属錯体に関する理論的研究	静岡理工科大学	関山 秀雄
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	太田 幸則
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	星野 忠次
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	中井 浩巳
π-d 相互作用によるペプチドナノリングの金属イオン捕捉過程	早稲田大学	武田 京三
1,4- ジヒドロキシナフタレンの 0.5~6 テラヘルツにおける分子間・分子内相互作用のモデル化	大阪大学	猿倉 信彦

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	奥村 光隆
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
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
金属含有タンパク質の反応制御機構に関する理論的研究	大阪大学蛋白質研究所	鷹野 優
胆汁酸ミセルの MD シミュレーション	大分大学	中島 俊男
ナノ・バイオ物質の電子状態・構造・機能の相関	筑波大学	押山 淳
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	岡田 晋
次世代 LSI 用ゲート電極材料とゲート絶縁膜の界面物性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
ハロ酸脱ハロゲン化酵素とシステイン合成酵素の反応機構解析	長浜バイオ大学	中村 卓
階層的電子状態計算理論とナノ構造プロセス	鳥取大学工学部	星 健夫
ポイントフッ素化有機化合物の分子配座と分子間相互作用の関係	鳥取大学工学部物質工学科	早瀬 修一
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	斎藤 晋
生体分子の構造と機能に関する理論化学的研究	東京工業大学	櫻井 実
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～量子化学計算を用いた反応経路～	東京工業大学資源化学研究所	藤井 正明
遷移金属錯体を触媒とするアルキン類の求電子的活性化に基づく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
新規ホウ素求核種ポリリチウムを用いた求核的ホウ素導入法によるポリル金属錯体の合成と性質の解明	東京大学	山下 誠
生体分子の光化学反応とアクチニド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	常田 貴夫
第一原理電子構造理論の拡張と物質設計	東京大学	藤原 毅夫
コレステロールの有無による膜環境変化の分子動力学シミュレーション	東京大学	藤田 直也
過冷却液体の動的不均一性による種々の輸送異常の研究	東京大学生産技術研究所	古川 亮
電子・負イオンのヘテロ溶媒和構造と安定化メカニズム	東京大学大学院	永田 敬
化学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	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	大和田智彦
分子軌道法による反応予測を基盤とする新有機合成反応の開発	東京大学大学院	中村 栄一
イオン液体および溶液系の液体構造の研究	東京大学大学院	浜口 宏夫
鎖状化合物の安定性および反応性に関する理論研究	東京大学大学院	友田 修司
ホスフィンルホン酸 / Pd 触媒を用いた酢酸ビニル / 一酸化炭素共重合系の反応機構解明	東京大学大学院工学系研究科	野崎 京子
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
SVM を用いた蛋白質のドメインリンカー予測法の開発	東京農工大学工学府	蝦名 鉄平
低振動数モードのラマン強度に関する分子軌道論からの研究	東北大学	山北 佳宏
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	福村 裕史
コンピュータ支援創薬を指向したタンパク質・リガンド複合体の分子シミュレーション	東北薬科大学	小田 彰史
ホタルの生物発光に関与するジオキセタノン分解反応における酵素ルシフェラーゼの活性部位が及ぼす影響	東洋大学大学院生命科学研究科	酒井 博則
計算化学による有機化学反応の追跡	奈良教育大学教育学部	山邊 信一
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	平井 國友
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
ab initio MO 法による金属イオン - 抽出剤錯体の構造研究	日本原子力研究開発機構	佐伯 盛久
薬剤分子と生体膜の相互作用に関する分子動力学シミュレーションによる研究	姫路獨協大学	吉井 範行
生体内素反応過程および分子複合体形成における新規機能性発現に関する量子化学的研究	福岡大学	新矢 時寛
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	物質・材料研究機構	西野 正理
表面・薄膜・クラスターの電子状態と反応過程	兵庫県立大学大学院	島 信幸
金属クラスターへの分子吸着・反応過程の解明	豊田工業大学	近藤 保
高分子濃厚系における高分子鎖の動的性質	防衛大学校	萩田 克美
化学反応および生体分子系における選択性と統計性の原理的理解	北海道大学電子科学研究所	小松崎民樹
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	北里大学一般教育部	江川 徹
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
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	岩松 将一

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	古賀 伸明
溶液内化学反応の理論研究	名古屋大学大学院	大峰 巖
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
タンパク質の分子内長距離情報伝達機構の解析	名古屋大学大学院理学研究科	倭 剛久
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	本多 一彦
生命関連星間分子の生成機構に関する理論的研究	明治学院大学	高橋 順子
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	理化学研究所	田原 太平
分子軌道計算を基盤とする単核及び二核金属触媒の設計と開発	立教大学	山中 正浩
蛋白質の構造機能相関計算	立命館大学	高橋 卓也
キラルリン酸触媒を用いた不斉反応の立体選択性制御因子の解明と遷移状態構造のデータベース化の試み	琉球大学	安藤 香
非線形量子系におけるソリトンとカオス	鈴鹿国際大学	大野 稔彦

3-3-3 共同利用研究実施件数一覧

分子科学研究所共同利用研究実施一覧

年度 項目	'76 ~ '00		'01		'02		'03		'04		'05		'06		'07		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	81	634	7	41	5	36	5	70	3	26	1	13	1	8	2	27	人数： 登録人数
協力研究	3,038	3,602	100	223	125	253	101	246	100	263	96	232	84	208	91	217	〃
招へい 協力研究	188	189	5	6	1	1	1	1	-	-	-	-	-	-	-	-	〃
所長 招へい	2,435	2,435	385	385	313	313	308	308	160	160	100	100	162	162	118	118	人数： 旅費支給者
研究会	249	3,621	6	129	11	332	8	229	13	304	11	206	13	310	9	149	〃
施設利用 I	1,475	3,230	49	139	63	188	54	150	55	154	53	106	47	86	55	106	件数： 許可件数 人数： 許可人数
電子計算機 施設利用 (施設利用 II)	3,618	11,236	144	584	134	558	120	525	154	587	132	510	142	538	139	607	〃
合計	11,084	24,947	696	1,507	652	1,681	597	1,529	485	1,494	393	1,167	449	1,312	414	1,224	
経費	445,420		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

('07 年度の数値は、2007.12 末現在)

分子科学研究所 UVSOR 共同利用研究実施一覧

年度 項目	'85 ~ '00		'01		'02		'03		'04		'05		'06		'07		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： 登録人数
協力研究	312	1,109	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	〃
招へい 協力研究	72	72	0	0	0	0	0	0	-	-	-	-	-	-	-	-	〃
研究会	30	464	1	13	0	0	1	51	1	16	1	59	3	37	2	55	人数： 旅費支給者
施設利用	1,717	8,485	157	707	160	805	129	715	128	582	126	643	113	494	149	670	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	2,169	10,553	158	720	160	805	130	766	129	598	127	702	116	531	151	725	
経費	184,301		16,512		15,780		13,884		-		-		-		-		千円

('07 年度の数値は、2007.12 末現在)

3-4 国際交流と国際共同研究

3-4-1 外国人客員部門等及び国際交流

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外国人研究職員として雇用したり、各種の若手研究者育成プログラムを活用し、諸外国から若手の研究者を受け入れて研究活動に参画させるなど、比較的長期間にわたる研究交流を実施している。また、当研究所で開催される国際研究集会等に参加する研究者や、研究現場、施設・設備の視察に訪れる諸外国行政機関関係者等、多くの短期的な訪問も受けて活発な国際交流が行われている。

表1 外国人研究者数の推移（過去10年間）

年度	長期滞在者			短期滞在者		
	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
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
06	10	4	47	52	150	263
合計	143	106	286	600	687	1,822

* 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
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
06	44	11	10	24	38	38	1	97	263
合計	334	107	138	125	237	214	91	576	1,822

表3 海外からの研究者（2007年度）

1. 外国人運営顧問			
MILLER, H. William	アメリカ	カリフォルニア大学バークレー校教授	
LAUBEREAU, Alfred	ドイツ	ミュンヘン工科大学教授	
2. 外国人客員研究部門			
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	18.10. 1-19. 6.30
KIM, Bongsoo	韓国	チャンウォン国立大学	19. 3. 1-20. 2.29
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
CHAUDHURI, K. Tapan	インド	インド科学技術研究所助教授	19. 7.30-20. 7.29
4. 日本学術振興会招へい外国人研究者等			
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	20. 1.21-20. 3.20
PAVLOV, Lubomir	ブルガリア	科学アカデミー教授	19. 5.31-20. 3.30
VOLETY, Srinivas	インド	Center for Cellular and Molecular Biology Technical officer	19. 7. 1-20. 4.30
KIMBERG, Victor	ロシア		18. 8. 7-20. 8. 6
KOWALSKA, Aneta	ポーランド	ウッジ工科大学化学者	18.10.24-20.10.23
GUO, Jia	中国	復旦大学博士課程学生	19.10. 1-21. 9.30
5. 国際共同研究			
LU, Jing	中国	北京大学物理学学科助教授	19. 4.20-19. 5. 1 19. 7. 8-19. 7.18 19.12. 8-19.12.18
ZHOU, Jing	中国	北京大学物理学科大学院生	19. 4.20-19. 7.18 19.12. 8-19.12.18
SIMON, Marc	フランス	LCPMR, Universite Pierre et Marie Curie 教授	19. 5. 6-19. 5.17
GUILLEMEN, Renand	フランス	CNRS, Laboratoire de Chimie 研究員	19. 5. 6-19. 5.17
VIJAYARAGHABAVAN, Dolly	インド	Indian Institute of Chemical Technology 大学院生	19. 5. 7-19. 7.31
SHAR, Shailesh R	インド	The MS University of Baroda 准教授	19. 5.14-19. 6.30
AKA, Gerard Philippe	フランス	Ecole Nationale Supérieure de Chimie Paris 教授	19. 6. 2-19. 6.16
LOISEAU, Pascal	フランス	Ecole Nationale Supérieure de Chimie Paris 准教授	19. 6. 2-19. 6.23
XU, Ke	フランス	Ecole Nationale Supérieure de Chimie Paris 大学院生	19. 6. 2-19. 6.23
GUO, Jinghua	アメリカ	University of California 主任研究員	19. 6.10-19. 6.21
KWON, Yong Seung	韓国	成均館大学教授	19. 7.17-19. 8. 7
LEE, Kyung Eun	韓国	成均館大学大学院生	19. 7.17-19. 7.25
SONG, Yun Young	韓国	成均館大学大学院生	19. 7.17-19. 8. 7
MUCKERMAN, James	アメリカ	Brookhaven National Laboratory, Senior Chemist	19. 9. 7-19. 9.13
BIELAWSKI, Serge	フランス	Universite des Sciences et Technologies de Lill 教授	19. 9.17-19.10.14
SZWAJ, Christophe	フランス	Universite des Sciences et Technologies de Lill 講師	19. 9.17-19.10.14
ELAND, John Hugh David	イギリス	University of Oxford 名誉教授	19.10. 4-19.11. 4
GUELMOUKHANOV, Faris	イギリス	The Royal Institute of Technology 教授	19.10. 7-19.10.20
SASTRY, Narahari	インド	Indian Institute of Chemical Technology 准教授	20. 1.23-20. 1.30
6. 所長招へい協力研究員			
PAL, Tarasankar	インド	Indian Institute of Technology 教授	19. 9. 3-19. 9. 5
馬 暁東	ドイツ	Max-planck Institut fuer Mikrostruktur physik 博士研究員	19.11.28-19.12.16
7. 特別訪問研究員			
IM, Hojun	韓国		18.10. 1-19. 3.31
THOMAS, Richard D.	スウェーデン		19. 4. 1-19. 5. 3
BOO, Bong Hyun	韓国		19. 7. 1-19. 7.31

8 . 招へい研究員			
OLEG, V. Prezhdo	アメリカ	University of Washington 教授	19. 4.25–19. 4.27
TOY, Patrick H.	中国	The University of Hong Kong 準教授	19. 6. 7–19. 6. 8
CHEN, Zhongfang	アメリカ	University of Georgia 研究員	19. 7. 2–19. 7. 4
趙 翔	中国	Xi'an Jiaotong University 教授	19. 7.15–19. 8.27
BU, Xian-He	中国	南開大学教授	19. 7.21–19. 8. 6
CASTNER, Edward W.	アメリカ	The State University of New Jersey 教授	19. 8. 1–19. 8. 2
MARTIN, Kotora	チェコ	Charles University 教授	19. 8. 6–19. 8. 9
WANG, Changchun	中国	復旦大学教授	19. 8. 9–19. 8.17
SUTCLIFFE, Brian Terence	ベルギー	Universite Libre de Bruxelles Visiting Professor	19. 8.20–19.11.11
SUBRAMANIAM, Chandramouli	インド	Indian Institute of Technology, Madras 大学院生	19.10.18–19.11.30
MILLER, R. J. Dwayne	カナダ	University of Toronto 教授	19.10.31–19.11.11
SALIKHOV, Kev M.	ロシア	the Russian Academy of Science Kazan Physical-Technical Institute 教授	19.11. 4–19.11.14
CHAMPION, Paul M.	アメリカ	Northeastern University Professor	19.11. 7–19.11.13
WAKER, Robert A.	アメリカ	University of Maryland Professor	19.11. 7–19.11.13
GREEN, Michael T.	アメリカ	The Pennsylvania State University Professor	19.11. 7–19.11.13
HANH, Huynh Boi	アメリカ	Emory University Professor	19.11. 8–19.11.13
WEINKAUF, Rainer	ドイツ	Heinrich Heine University Professor	19.11. 8–19.11.13
GEDROC, David P.	インド	Indiana University Professor	19.11. 9–19.11.14
MANHO, Lim	韓国	Pusan National University Professor	19.11. 9–19.11.13
MYROSLAV, Holovko	ウクライナ	Institute for Condensed Matter Physics National Academy of Sciences of Ukraine 教授	19.11.20–19.12. 1
JUNGWIRTH, Pavel	チェコ	Academy of Sciences of the Czech Republic Organisation 研究グループ主任	19.11.25–19.11.26
JUNGWIRTH, Pavel	チェコ	Academy of Sciences of the Czech Republic Organisation 研究グループ主任	19.11.28–19.11.29
PETROSKY, Yamakoshi Tomio	アメリカ	The University of Texas at Austin 教授	20. 1. 6–20. 2. 8
AKA, Gerard Philippe	フランス	Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris(ENSCP) 教授	20. 1.26–20. 2. 2
SHAKHNOVICH, Eugene	アメリカ	Harvard University 教授	20. 2.18–20. 2.24
TSALLIS, Constantino	ブラジル	Centro Brasileiro de Pesquisas 教授	20. 2.24–20. 2.26
BRADY, John	アメリカ	Temple University 大学院生	20. 3.15–20. 3.30
SMITH, Stanley	アメリカ	Temple University 研究員	20. 3.21–20. 3.30

3-4-2 岡崎コンファレンス

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、「岡崎コンファレンス」を再開することを決断し、平成18年度に6年半ぶりに第66回岡崎コンファレンスを開催した。また平成19年度は公募方式によって開催課題を募集し、1件を採択して下記の第67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67回岡崎コンファレンス

“Molecular Science and Chemical Biology of Biomolecular Function”

期 間：2007年11月10日～12日

場 所：岡崎コンファレンスセンター

組織委員：水谷泰久(阪大院理、提案代表者)、青野重利(岡崎統合バイオ、所内対応者)、石森浩一郎(北大院理)、斎藤正男(東北大多元研)、関谷博(九大院理)、田原太平(理研)、藤井正明(東工大資源研)

内 容：

分子科学は、化学と物理学の境界領域として誕生し、発展してきた。その拡大したフロンティアのひとつとして、生体機能に代表される自己組織化した分子システムの理解と制御があげられる。他方、化学と生物学との境界領域では、これまでに生化学、生物無機化学などの融合分野が発展してきた。これらは今日ケミカルバイオロジーとして統合的に呼ばれている。分子科学とケミカルバイオロジーはアプローチを異にするものの、そのゴールは「生体機能の

理解」という共通のものである。そこで、それぞれの研究の最前線を紹介し、それらに対する議論を行うためのフォーラムとしてこのコンファレンスを企画した。分子科学からのトピックスでは、個々の蛋白質の各論ではなく、水素結合ネットワークおよびソフトな界面という生体機能発現にかかわる根源的な問題に焦点を当てた。また、生体機能の理解に向けた先端計測法についても議論を行った。ケミカルバイオロジーからは、蛋白質の構造 - 機能相関、活性部位のモデル化合物および人工設計、細胞での恒常性維持機構など、生体機能についての具体的なトピックスが提供された。

本岡崎コンファレンスでは、以下に示すような合計 31 件の招待講演からなる 5 つのオーラルセッションとポスターセッションを設け、上記トピックスを中心として議論を行った。

November 10

Opening address (Hiroki Nakamura, Director General, IMS)

Introductory talk (Yasuhisa Mizutani, Osaka Univ.)

Session 1. Hydrogen bonding network and proton transfer

Discussion leader: Yasuhiro Ohshima (IMS)

Infrared Spectroscopy of Large-Sized Protonated Clusters: Morphological Development of Hydrogen Bond Network

Asuka Fujii (Tohoku Univ.)

Real-time Observation of Excited State Hydrogen Transfer in H-bonded Clusters by UV-IR-UV Picosecond Time-resolved IR Spectroscopy

Masaaki Fujii (Tokyo Inst. Tech.)

Discussion leader: Kiyokazu Fuke (Kobe Univ.)

Spectroscopic Study on Hydrogen-Bonded Clusters in the Gas Phase: New Aspects of Multiple-Proton Transfer Reactions

Hiroshi Sekiya (Kyushu Univ.)

Electronic properties of isolated open shell and closed shell ions of biomimetic molecules

Rainer Weinkauff (Heinrich-Heine-Univ. Düsseldorf)

The Determinants of Light-Energy and Light-Signal Conversion in Rhodopsins

Hideki Kandori (Nagoya Inst. Tech.)

Session 2. Properties and dynamics of soft interface

Discussion leader: Hiroshi Onishi (Kobe Univ.)

Studies of Solvation at Liquid Interfaces with Nonlinear Optical Spectroscopy

Robert A. Walker (Univ. Maryland)

New Nonlinear Electronic and Vibrational Spectroscopy for Interfaces

Tahei Tahara (RIKEN)

Electronically-Vibrationally doubly resonant SFG spectroscopy; a sensitive and selective probe for aromatic molecules at interfaces

Taka-aki Ishibashi (Hiroshima Univ.)

Discussion leader: Tahei Tahara (RIKEN)

Apply Chemistry to Buried Interfaces: Fourth-order Raman Spectroscopy and Dynamic Force Microscopy

Hiroshi Onishi (Kobe Univ.)

Self-assembly of light-harvesting polypeptide/pigment complexes for construction of an artificial photoenergy conversion system

Mamoru Nango (Nagoya Inst. Tech.)

November 11

Session 3. Protein structure and dynamics: spectroscopy and crystallography

Discussion leader: Shigeichi Kumazaki (Kyoto Univ.)

Spectroscopy of Single Proteins at Liquid Helium Temperature

Michio Matsushita (Tokyo Inst. Tech.)

Investigations of Coherent Motion and Ligand Binding in Heme and Heme Proteins

Paul M. Champion (Northeastern Univ.)

Dynamics of CO rebinding to guanidine HCl-denatured heme proteins

Manho Lim (Pusan National Univ.)

Discussion leader: Yasuhisa Mizutani (Osaka Univ.)

Micro-regulation of oxygenic photosynthesis unveiled by fluorescence microspectroscopy

Shigeichi Kuamazaki (Kyoto Univ.)

Living Cell Molecular Science: A New Frontier
Hiro-o Hamaguchi (Univ. Tokyo)

Discussion leader: Teizo Kitagawa (Toyota Physical and Chemical Research Inst.)

Probing Chemical Reactions in Intact Whole Mitochondria through Analysis of Molecular Vibrations
Takashi Ogura (Univ. Hyogo)

Structure and Function of Fe Centers in Proteins revealed by Mössbauer Investigations
Boi Hanh Vincent Huynh (Emory Univ.)

Understanding C-H Bond Activation in Heme Proteins
Michael T. Green (Penn State Univ.)

Discussion leader: Masao Ikeda-Saito (Tohoku Univ.)

Heme Binding and Heme-mediated Oxidative Modification in Heme-regulated Proteins
Koichiro Ishimori (Hokkaido Univ.)

Molecular Mechanism by Which Heme-Based Sensor Proteins Sense Their Effector Gas Molecules
Shigetoshi Aono (Okazaki Institute for Integrative Bioscience)

Discussion leader: Koichiro Ishimori (Hokkaido Univ.)

Cytochrome P450: Its Variety and Vitality
Yoshitugu Shiro (RIKEN)

Catalytic Mechanism of Heme Oxygenase
Masao Ikeda-Saito (Tohoku Univ.)

Banquet

November 12

Session 4. Design of active sites of proteins and model complexes

Discussion leader: Shunichi Fukuzumi (Osaka Univ.)

Role of Heme-Propionate Side Chains in Cytochrome P450cam: Each Propionate is Essential to Retaining the Enzyme Activity
Takashi Hayashi (Osaka Univ.)

Monooxygenase Activity of Dioxygen Carrier Copper Protein Hemocyanin
Shinobu Itoh (Osaka City Univ.)

Introduction of Metal Cofactors in Protein Cages: Construction of Organometalloproteins
Yoshihito Watanabe (Nagoya Univ.)

Discussion leader: Yoshihito Watanabe (Nagoya Univ.)

Reactivity of Peroxodiiron(III) and Dicopper(II) Complexes: Functional Models for Dioxygen Binding and Activating Diiron and Dicopper Metalloenzymes

Masatatsu Suzuki (Kanazawa Univ.)

Bioinspired Artificial Photosynthesis
Shunichi Fukuzumi (Osaka Univ.)

Session 5. Biomolecular function: from molecules to cells

Discussion leader: Shigetoshi Aono (Okazaki Institute for Integrative Bioscience)

Metal Sensor Proteins: To Switch or not to Switch
David P. Giedroc (Indiana Univ.)

Molecular Machineries for Energy Conversion and Photosynthetic Bio-Assimilation in Chloroplasts
Toshiharu Hase (Osaka Univ.)

Discussion leader: Toshiharu Hase (Osaka Univ.)

Mechanism Underlying the Iron-Dependent regulation of the Iron-Sensing Transcription Factor Aft1p in *Saccharomyces cerevisiae*
Kazuhiro Iwai (Osaka City Univ.)

Carbon monoxide as a guardian for liver injury: A novel mechanism mined out by metabolome analyses
Makoto Suematsu (Keio Univ.)

Closing address (Masao Ikeda-Saito, Tohoku Univ.)

3-4-3 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」、「化学反応ダイナミックス」の3つの重点分野について、国際共同研究の推進プログラムを独自の努力により試行し、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、准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、平成18年度12件、本年度10件と推移しており、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、米国、ドイツ、インド、英国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。昨年度開始されたアジア研究教育拠点事業とともに、来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。

2007年度実施状況

代表者	研究課題名
小杉 信博	軟X線共鳴分光に関する国際共同研究（UVSOR BL3U）
木村 真一	強相関係の局在から遍歴に至る電子状態変化の光学的・光電的研究
加藤 政博	自由電子レーザー発振のビーム力学的研究
櫻井 英博	バッキーボウルカラム構造に関する研究
繁政 英治	電子・イオン同時計測による共鳴オーজেダイナミックスの解明
永瀬 茂	単層カーボンナノチューブの化学修飾と機能化の理論研究
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
平等 拓範	COB系結晶によるマイクロチップレーザーの高効率波長変換
大森 賢治	振幅と位相をデザインした光パルスによる原子分子の量子制御
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

3-4-4 日韓共同研究

分子科学研究所と韓国科学技術院（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た。またこの覚え書きは2004年に更新された。その後の韓国側の組織体制の都合上、2006年に、この覚え書きは分子科学研究所と韓国化学会物理化学ディビジョン（Physical Chemistry Division, The Korean Chemical Society）との間のものに変更して更新された。今後はこの2者の事業として継続する予定である。

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、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」が開催された。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。2007年7月には済州島で第12回シンポジウム「光分子科学の最前線」が開催された（このシンポジウムの実行にあたっては、日本学術振興会（JSPS）と韓国化学技術財団（KOSEF）による二国間セミナープログラムに申請して採択され、この援助を受けて実施することができた）。次回の日韓分子科学シンポジウムは、2009年に日本で開催する予定（テーマは2008年度から議論の予定）である。これらの継続的なシンポジウムでは、活発な研究発表と研究交流はもとより、両国の研究者間の親睦が高められてきている。

また、1991年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。

3-4-5 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日に北京友誼賓館で開催され、日本からは52名が参加し、中国からは69名が参加した。

3-4-6 東アジア多国間共同研究

21世紀はアジアの時代と言われている。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が期待される。

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（日本学術振興会ホームページより抜粋：http://www.jsps.go.jp/j-bilat/acore/01boshu_acore.html）」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、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を4拠点研究機関とする日本、中国、韓国、台湾の東アジア主要3カ国1地域の交流を、アジアコア事業の一環として平成18年度にスタートさせた。アジアコア事業の特徴の一つとして、互いに対等な協力体制に基づく双方向交流が挙げられる。本事業においても、4拠点研究機関のそれぞれがマッチングファンドを自ら確保し

ており、双方向の活発な研究交流が着実に進展している。また、4 拠点研究機関以外の大学や研究機関が研究交流に参加することも可能である。平成 19 年度の活動の概要を以下にまとめる。

(1) 共同研究

物質分子科学においては、 π 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、先端ナノバイオエレクトロニクス、自己組織化金属錯体触媒の開発（以上、中国との共同研究）、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（韓国との共同研究）、バッキーボウルの合成と物性（台湾との共同研究）に関する研究が進展した。

光分子科学においては、特異なナノ分子システムのナノ光学、テラヘルツ時間領域分光法を用いたジシアノビニル置換芳香族分子の分子間振動および構造（以上、中国との共同研究）、コヒーレントレーザー分光による反応ダイナミックスの解明（台湾との共同研究）に関する研究が進展した。

理論分子科学においては、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（台湾との共同研究）に関する研究が進展した。

(2) セミナー

「中国・日本機能性分子の合成と自己組織化シンポジウム」（北京）、「日中ナノバイオ若手研究者交流」（北京）、「有機固体の電気伝導と光伝導に関する日中合同セミナー」（北京）、「先端レーザー分光シンポジウム」（神戸）、「次世代触媒創製を目指した機能物質シンポジウム」（北京）、「物質・光・理論分子科学のフロンティア」冬の学校（岡崎）などが開催された。

3-4-7 その他

(1) 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。

3-5 大学院教育

3-5-1 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 ～ 97	98	99	00	01	02	03	04	05	06	07
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	30	1									2
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	9			1	1						
新潟大学	4									1	1
福井大学	4	1	3	2							
信州大学	3				1						
岐阜大学	2										
名古屋大学	64	3	1	2	6	2	2			3	4
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	4	2	1								
京都大学	32	2	1	3	1	1			2	1	1
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	24			1	1						
神戸大学	1	1	1	1		1					1
奈良教育大学	1										
奈良女子大学	4										
島根大学						1					
岡山大学	11				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	36	1	1	2	2	2	1				

佐賀大学	13										
長崎大学								2			
熊本大学	6										
宮崎大学			2	4							
琉球大学		1									
北陸先端科学技術 大学院大学						4		2			
首都大学東京	17							2		1	
名古屋市立大学				4					9	8	5
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	2										
慶應義塾大学	5	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	7	2			1	1	1	1			
明治大学										1	
名城大学	2	2									
岡山理科大学									1		
* その他											3
計	427	28	19	27	31	28	26	17	14	16	17

* 外国の大学等

3-5-2 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 専攻の入学者数，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（2007 年 12 月現在） 単位：人

専 攻	教 授	准教授	助 教
構造分子科学専攻	10	7	20
機能分子科学専攻	8	9	16
計	18	16	36

在籍学生数（2007 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	2007 年度	計	定 員
構造分子科学専攻	5 年一貫	0	0	0	1	3	4	2
	博士後期	0	3	9	10	6	28	3
機能分子科学専攻	5 年一貫	0	0	0	0	1	1	2
	博士後期	1	1	3	3	3	11	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 ～ 97	98	99	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007 (9 月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	37(6)	8(2)	7(2)	8(1)	3	11	6	3	7	5	0	95(11)
機能分子科学専攻	36(5)	6	6(1)	6	5	5(4)	1	5(4)	4	5	(1)	79(15)

（ ）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 ～ 97	98	99	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007
構造分子科学専攻	65	12	5	8	5	3	7	7	8	11(1)	9(3)
機能分子科学専攻	63	7	6	0	7	6	6	6	7	4	4(1)

（ ）は 5 年一貫で内数 定員は 2006 年度から各専攻共 5 年一貫 2，博士後期 3

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		
	1989-2005 年度	2006 年度	2007 年度	1989-2005 年度	2006 年度	2007 年度
中 国	10	5	1	4		
フランス				1		
ロシア				1		
バングラディッシュ	6			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 ~ '05	'06 年度	'07 年度	'89 ~ '05	'06 年度	'07 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					1	4
静岡大学	2			1			3
名古屋大学	2			4		1	7
名古屋工業大学	1						1
豊橋技術科学大学	4						4
三重大学	1						1
京都大学	9		2	14		1	26
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		1	2			5
広島大学	1			3			4
山口大学	1			1			2
愛媛大学	2			2			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			3			7
奈良先端科学技術大学院大学			1				1

東京都立大学				1	1	1	3
名古屋市立大学				2		1	3
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				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	4			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	2						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		1				3
立命館大学			1	2			3
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
放送大学			1				1
* その他	21	5	1	13	2		42

* 外国の大学等

() は5年一貫で内数

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
准教授	7	13
講 師	3	4
助 教	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

3-5-3 オープンハウス・分子研シンポジウム

2007年6月8日（金）午後～9日（土）午前まで分子研シンポジウム2007を開催し、引き続き9日（土）午後に第17回分子科学研究所オープンハウスを開催した。本企画は、全国の大学院生を含む若手研究者、学部学生および社会人を対象に、分子科学の先端的な研究や現在、分子研の現場で行なわれている研究の内容を分かり易く解説するとともに、学術研究拠点機関としての研究者養成活動、大学共同利用機関としての共同利用・共同研究活動、総合研究大学院大学の基盤機関としての教育活動等について、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。今回の所外参加人数は35名で、内訳は下記の表の通りである。なお、分子研シンポジウムは今回から始めた新しい試みで、分子研の4研究領域それぞれで先端的な研究を行っている所外研究者（総合研究大学院大学OB、分子研OB、分子研の共同研究者など）を講師にお願いした。また、今回から、オープンハウスのガイダンス時に、共同利用の説明も行うことにした。

	学部学生	修士課程	博士課程	その他
北海道・東北	2	1	1	0
関東（東京、千葉、群馬）	3	2	0	0
信越・北陸（石川）	0	0	1	0
東海（愛知、静岡、三重）	8	1	0	3
関西（大阪、兵庫）	0	3	0	1
中国（広島）	0	2	0	0
四国	0	0	0	0
九州・沖縄（福岡）	0	5	1	1
合計 35名	13	14	3	5

（参加のあった都道府県名を括弧内に明記）

3-5-4 夏の体験入学

2007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4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	立命館大学	学部3年	スピン転移物質の合成	江准教授
2	日本大学	学部3年	光合成モデル化合物の合成	永田准教授
3	新潟大学	学部4年	機能性を持つ単結晶薄膜の育成と電子状態評価	木村准教授
4	近畿大学	学部4年	分子科学応用を目指した全固体新型レーザーの研究	平等准教授
5	日本大学	学部4年	金属錯体の合成実験——フェロセンの合成	川口准教授
6	信州大学	学部3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
7	横浜市立大学	修士1年	レーザー、質量分析、超音速分子線、この3つのアイテムを使いこなそう！	大島教授
8	兵庫県立大学	修士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	中村准教授
9	上智大学	学部3年	同上	中村准教授
10	岡山理科大学	学部4年	結晶中の電子運動についてモデル計算を行い、固体中の電子状態を考えてみよう	米満准教授
11	長崎大学	卒業	計算化学のハッキング体験学習	柳井准教授
12	首都大学東京	学部2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	同上	田中教授
14	立命館大学	学部3年	固体NMRを用いた生体分子・分子材料の構造研究	西村准教授
15	近畿大学	修士1年	超高真空中での磁性超薄膜の作成と <i>in situ</i> 磁化測定	横山教授
16	日本大学	学部3年	クラスター触媒を用いた反応の一例を体験	櫻井准教授
17	北海道大学	修士2年	ナノの金属ロッドを作って波動関数を見る	岡本教授
18	広島大学	学部4年	金クラスターの合成と評価	佃准教授
19	信州大学	学部4年	スピン転移物質の合成	江准教授
20	東京大学	学部3年	ナノ加工と生体分子情報受信素子の研究	宇理須教授
21	東京大学	学部4年	金属タンパク質を対象とした研究を体験してみよう	青野教授
22	豊橋技術科学大学	学部4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	中村准教授
23	明星大学	学部4年	緑色蛍光蛋白質の巻き戻りを調べてみよう	桑島教授

3-5-5 総研大 / アジアコア共催「冬の学校」

総研大と JSPS アジア研究教育拠点(アジアコア)事業との共同主催のもとに、2008 年 1 月 24 日(木) ~ 26 日(土), 岡崎コンファレンスセンターならびに分子科学研究所にて「アジア冬の学校」が開催された。総研大・物理科学研究科では、研究科内の 5 専攻で行っている研究・教育活動をアジア諸国の大学生・大学院生および若手研究者の育成に広く供すべく、2004 年度よりアジア冬の学校を開催してきた。分子研(構造分子科学専攻・機能分子科学専攻)での開催では、これまでの総計で 150 名を超える学生・若手研究者がアジア各国から参加してきている。一方、JSPS アジアコア事業として、分子研では「物質・光・理論分子科学のフロンティア」と題して、中国・韓国・台湾・日本間での研究教育交流を 2006 年度よりスタートしている。この事業の一環として、2006 年 12 月に北京にて第 1 回の冬の学校を開催し、100 名近い学生・若手研究者が参加した。

本年度は、この 2 つの冬の学校を融合する形で開催し、中国から 18 名、韓国 30 名、台湾 7 名、タイ 4 名、計 59 名の研究者・学生が参加した。国内からは 73 名の参加があり、そのうち総研大生は 23 名であった。さらに米国から 2 名、カナダから 1 名の出席者があったので、参加者は合計 135 名に上った。

当冬の学校では、全体講義、一般講義、選択講義という 3 形態の講義と、ポスター発表ならびに研究所内見学が行なわれた。全体講演では、物質・光・理論の各領域から東アジア地域出身で世界的に活躍している研究者 5 名が、これまでの業績を中心に研究の背景や意義から今後の展望までを紹介した。一般講義では、アジアコア事業の拠点 4 機関からの講師 6 名が、分子科学の各領域における最先端のトピックスや関連事項に関する講義を行なった。選択講義は、同一の時間帯に行なわれる 3 つの講義から受講者が選択するという形式で行なわれた。受講生は 30 名以下に制限して、会場はセミナー室などの比較的小規模の部屋を利用する等、できるだけ interactive な内容となるよう配慮し、さらに、基本事項の解説に十分な時間を割いて講義を行なった。なお、プログラムの詳細は下記のとおりである。

The Winter School of Sokendai/Asian CORE Program
“Frontiers of Material, Photo-, and Theoretical Molecular Sciences”

January 23 (Wednesday)

11:00 – 18:00 Registration
18:00 – 20:00 Reception

January 24 (Thursday)

8:50 – 9:20 Opening Remarks
9:20 – 10:10 Prof. Deqing Zhang (ICCAS, China)
 “Molecular switches, machines, and logic gates”

10:30 – 11:20 Dr. Jim Jr-Min Lin (IAMS, Taiwan)
 “Probing chemical interactions between two closed-shell molecules with *ab initio* calculations and crossed molecular beam experiments”
11:20 – 12:00 Prof. David Churchill (KAIST, Korea)
 “Word reduction editing”
12:00 – 13:20 Lunch
13:20 – 14:10 Prof. YounJoon Jung (Seoul National University, Korea)
 “Computational studies of dynamic heterogeneities in supercooled liquids and room temperature ionic liquids”
14:10 – 15:00 Dr. Ying-Cheng Chen (IAMS, Taiwan)
 “Laser cooling of atoms”

15:30 – 17:00 Prof. Koichiro Mitsuke (IMS, Japan)
 “Electronic structures and electron dynamics of free molecules”
 Prof. Toshi Nagata (IMS, Japan)
 “How to capture solar energy—molecular aspects of photosynthesis”

Prof. Takeshi Yanai (IMS, Japan)
“Computational and molecular modeling with quantum chemistry”

17:45 – 20:00 Poster Session

January 25 (Friday)

8:50 – 9:40 Prof. David Churchill (KAIST, Korea)
“Metal ions in solution molecular switching and sensing”
9:40 – 10:30 Prof. Chun-Ru Wang (ICCAS, China)
“Novel fullerene molecules, fullerene nanostructures, and fullerene applications as MRI contrast agents”
10:30 – 11:30 Prof. Chao-Jun Li (McGill University, Canada)
“Our future challenges in synthetic chemistry”
11:30 – 12:30 Lunch
12:30 – Visiting

January 26 (Saturday)

8:50 – 10:20 Prof. Cheol Ho Choi (Kyungpook National University, Korea)
“Material studies with hybrid and fast theoretical methods”
Prof. Yunqi Liu (ICCAS, China)
“Design and synthesis of organic semiconductors and their application in organic field-effect transistors”
Prof. Yuh-Lin Wang (IAMS, Taiwan)
“Nanomaterial fabrication by constrained self-organization of atoms and molecules”

10:40 – 12:10 Laboratory tour in IMS
12:10 – 13:30 Lunch
13:30 – 14:30 Prof. Mitsuhiro Shionoya (University of Tokyo, Japan)
“Supramolecular approaches to nanoscopic metal array, space, and motion: artificial metallo-DNA, dynamic nanocapsules, and molecular machines”
14:30 – 15:30 Prof. Mu-Hyun Baik (Indiana University, U.S.A.)
“Understanding water oxidation catalysis: insights from computer simulations”

15:50 – 16:50 Dr. Jun Ye (JILA, NIST and University of Colorado, U.S.A.)
“Cold and ultracold molecules”
16:50 – 17:50 Prof. Sheng-Hsien Lin (IAMS and National Chiao-Tung University, Taiwan)
“Molecular principles of photochemistry and photophysics”
17:50 – 18:00 Closing Remarks
18:00 – 20:30 Dinner Party

4．研究支援等

ここに記載しているのは、直接研究活動を行わないが、研究を遂行する上で、なくてはならない研究支援業務であり、主に技術課が担当・支援しているものである。特に法人となってからは、全国の分子科学コミュニティの連帯を強めるために、研究支援部門を強化してきた。法人化後に新設された部門には、「安全衛生管理室」、「広報室」、「史料編纂室」がある。

技術課は、研究支援組織の中核になる大きな集団を構成している。分子科学研究所は、共同利用部門を強力に支援するために、技術課に所属する技術職員を公募で採用し、また研究室配属の技術職員を研究施設に配置転換し、大型の研究施設を維持管理する部門や共同利用を直接支援する部門を増強した。平成 19 年 4 月に組織編成を見直した。「2-5 構成員」を参照。

安全衛生管理室は、法人化に伴い、研究所の総括的な安全衛生が、労働安全衛生法という強制力を持つ法律によって規制されるようになったため、その法律の意図するところを積極的且つ効率的に推進するために設置された。それまでは、設備・節約・安全委員会という意味決定のための委員会が存在していたが、安全衛生の実際の執行は技術課が一部を担当したものの、専門に執行する組織はなかった。現在、安全衛生管理室には、専任の助教と事務支援員、十名弱の兼任の職員を配置し、執行組織として、多くの施策を実行している。安全衛生を維持するのに必要な資格は全て取得している。

広報室も新しい組織である。法人化する前は、単に研究活動報告や要覧誌の発行などを行っていただけであった。法人化以降は国民に、より積極的に研究所で行っている研究内容を分かりやすく紹介することに重点を置くようになった。そのため、専任の技術職員を 1 名配置し、非常勤職員 1 名との 2 名体制にした。分子研の発行誌も、上述した観点で見直している。分子研及び分子科学コミュニティの情報を早く且つ分かりやすく伝えるために、ウェブサイトをリアルタイムで更新し、また事業内容を動画で紹介する企画が進行している。

史料編纂室は法人化後に設置された支援組織としては一番新しい。法人化後まもなく迎えた創立 30 周年記念行事の中で分子研設立の経緯を残すことの重要性が認識された。このため、総研大葉山高等研究センターを中心に発足した「大学共同利用機関の歴史」研究プロジェクトに参加する形で史料編纂室を発足させた。分子研設立の過程と共に、過去に所員が行ってきた研究、分子科学コミュニティの形成過程などの歴史をきちんと記録し公開することを目指している。所はそのために非常勤職員 2 名を配置した。

4-1 技術課

技術課は所長に直属した技術職員の組織で、2007年4月1日の構成員は、7班15系の総勢37名である。技術職員は、主に研究施設に配属され、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。ただし、研究室配属の技術職員は定員削減により廃止の方向で検討が進んでいる。一方、研究施設に配属された職員は、先端的装置を駆使し、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、化学系研究設備有効活用ネットワーク、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、機器利用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（兼任）、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、作業環境測定士及び放射線・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等、事務センターと技術課が協力し行っている。

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。

4-1-1 技術研究会

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

表1 技術研究会開催機関

年度	開催機関	開催日	分科会	備考
昭和50	分子科学研究所	昭和50年2月26日	機械	名大(理)(工)のみ
昭和51	分子科学研究所	昭和50年7月20日	機械	学習院大など参加
		昭和51年2月	機械、(回路)	名大(工)回路技術

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

4-1-2 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
平成 18 年度	6

表3 技術研修受入状況(2007.1.1～12.31)

氏名	所属	受入期間	備考
小澤 忠夫	名古屋工業大学	平成19年2月15日	講演
熊谷 宜久	神戸大学	平成19年3月5日-3月6日	理化学ガラス機器製作研修
立花 健二	名古屋大学	平成19年6月4日-6月15日	装置開発室機械工作研修
熊谷 宜久	神戸大学	平成19年10月11日-10月12日	理化学ガラス機器製作研修
森本 浩行	名古屋大学	平成19年10月5日-3月28日	UVSOR 研修
熊谷 宜久	神戸大学	平成19年11月1日-11月2日	理化学ガラス実験機器製作研修
伴 和紀	九州大学	平成19年12月12日-12月13日	装置開発室機械工作研修
山之内真司	九州大学	平成19年12月12日-12月13日	装置開発室機械工作研修

表4 研修受講実績(平成19年度)

研修名	開催機関	日程	参加者
平成19年度前期放送大学	愛知学習センター	4/06～9/06	吉田、青山、近藤(聖)、内藤、豊田
平成19年度後期放送大学	愛知学習センター	10/06～3/07	牧田、水川、中野、岩橋

4-1-3 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、広く人材を登用するため、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きた。しかし、法人化後は、手続きが確定していないため停止せざるを得ない状況となった。

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(前職あるいは転出先)
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	基礎生物学研究所
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	
2007年1月1日	採用	計算科学技術班	沼津高専
2007年3月15日	転出	研究・広報技術班	静岡市役所
2007年12月31日	転出	学術支援班	日本電子データム

4-1-4 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（1986） 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（2007）
吉田久史	日本化学会化学技術有功賞（2008）

4-2 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 職場の安全衛生を推進するために必要な 作業環境測定（必要に応じ外部に委託）や、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。

また安全衛生管理室では、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。雇入れ時の安全衛生教育は年度初旬に定例として行なう他、講習テキストと講習会 DVD を用意し、年度途中の採用者に対しても、随時雇入れ教育が可能となるよう配慮している。また長期滞在する外国人研究者のため、英文の安全衛生講習会テキストの作成、講習会 DVD の英訳字幕の挿入等の作業なども進め、外国人研究者への配慮も行っている。外国人に対しては、すでにこの教材を用いた安全衛生教育を進めている。雇入れ教育用の DVD 教材、特に英語版教材については、改善の余地も残されており、今後も改訂作業を継続していく。

安全衛生に必要な情報は、管理室の WEB ページ（<http://info.ims.ac.jp/safety/>）にまとめており、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ーリングリスト（safety@ims.ac.jp）も設定しており、各種の質問などに機動的に対応できる体制になっている。1 年に数回、分子研安全衛生委員会（岡崎 3 機関の「安全衛生小委員会」に相当）と合同で連絡会議を開催し、所内の安全衛生状況に関する情報交換、連絡の徹底等が円滑に行なわれる体制を採っている。

4-3 広報室

2007年度の「広報室」の活動を以下に報告する。

4-3-1 分子研ホームページ

現在のホームページは2005年に作成して以来、「トピックス欄」の増設、バナーの設置など誌面を魅力あるものにするための様々な改訂を行ってきたが、いくつかの問題が表面化していた。そのひとつは「トピックス欄」が途絶えがちになったことである。その大きな理由は研究者が投稿する原稿が専門的に過ぎ、それを親しみ易い原稿に改訂するために専門職員（技術職員）の負担が過大に成り過ぎたことによる。この問題を解決するため、「トピックス」原稿の内容については広報室担当教員がチェックし、執筆者に改訂を請求するようにした。この改善により、少なくとも、毎月ひとつは、新たな「トピックス」が追加されるようになった。もうひとつの特徴的な問題は、分子研共同利用業務との連携が不十分だったことである。すなわち、分子研ホームページにアクセスした研究者が共同利用申請に至るまでの「流れ」が「見えにくい」という問題が指摘された。この問題を解決するために、共同利用研究のページに「利用の手引き」や「機器一覧」等を追加するなど大幅な見直しに着手した。

以上のように、広報室ではホームページをより魅力あるものにするための様々な改善を行ってきたが、それらは「継ぎはぎ」的な改訂であり、他の先進的な大学や研究機関のホームページに匹敵する「親しみ易い」ホームページにするためには全面的な改訂が必要であるという認識に至った。このため、広報室では「ホームページ改訂ワーキンググループ」を発足させ、所内の若い研究者の協力を得て、全面改訂の作業を進めている。「動画」なども効果的に利用することにより、より親しみ易いホームページとなるよう企画が練られている。この改訂によって、研究面でのアクティビティーはもとより、共同利用研としての意義と具体的な利用の仕方、総研大を含む教育面での貢献等について、「誰が見ても直ぐ分かる」画面が生み出されることが期待される。

4-3-2 Annual Review 誌

Annual Review 誌は分子科学研究所の研究活動を外国に発進するための唯一の年間レビュー誌として重要な役割を果たしてきた。しかしながら、現在の Annual Review は論文の「アブストラクト」を単に寄せ集めたような体裁になっていて、「ほとんど読む気にならない」という声が出ていた。このことは単に外国の研究者に分子研の存在を知らしめる点においてマイナスであるだけでなく、特に、外国からの留学生を引きつけるという意味においてはより致命的な欠陥であるという認識にいたった。このため広報室では本年度 Annual Review 誌の全面改訂（写真）を行った。主な改訂のポイントは以下のとおりである。

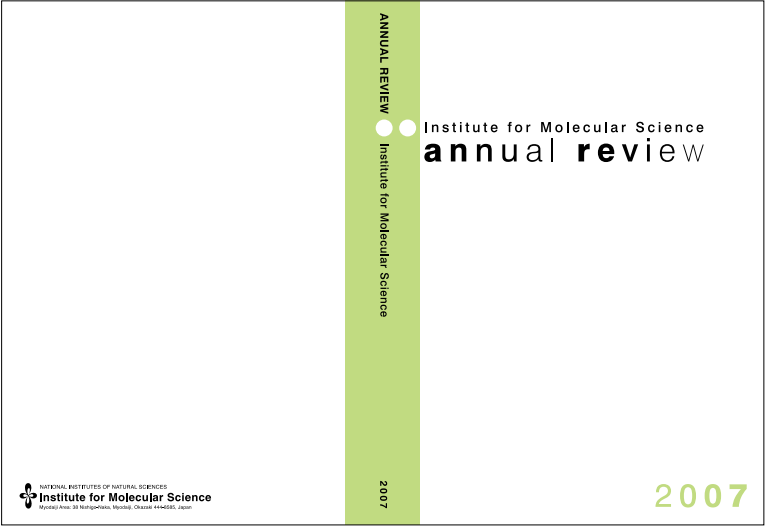
- (1) 研究内容の紹介を「アブストラクト」ではなく、図やポンチ絵などを含めてトピックス的にわかり易くまとめる。
- (2) 研究者や研究スタッフの写真を載せ、研究所の「顔」が見えるようにする。
- (3) 全体をカラーにする。

4-3-3 プレスリリース

現在、大学法人化に伴い研究成果を社会にアピールするための活動、特に、新聞、テレビなど報道機関への発信を強化することが求められている。分子研における取り組みのレベルについては様々な議論があり、現在、所内で意見を取りまとめつつあるが、「できるだけ分かり易い形で」研究成果を社会に発信していくことの必要性については、コンセンサスが得られていると考えられる。このような要請を受けて、広報室ではプレスリリースまでの手続きの簡

素化など報道機関への情報発信を支援し、奨励するための取り組みを行った。このような取り組みの結果、プレスリリースに関する研究者の積極的な申し出が出始めており、今後、さらにその件数が増加することが期待される。

一方、その発信内容を「分かり易くする」という点では、まだまだ努力が必要であり、いくつかの解決すべき問題が残されている。そのひとつは「分子科学」という学問分野そのものの特殊性にあり「物理」や「化学」に関するバックグラウンドが全く無い一般人に研究成果を「分かり易く」説明することが果たして「可能かどうか」、そもそもそれが「必要であるかどうか」、「どのようにしてそれが実現できるか」という根本的な問いを発する必要がある。実はこの問題は分子科学に限らず広く多くの学問分野に共通する課題であり、厳に、留意しなくてはならないことであるとする。即ち、一般社会の理解を得やすい課題がややもすると重要視され、それが学問そのものの発展にとって真に良いこととなるのかと言う問題である。この問題は社会への説明責任とそのあり方、もっと広くは、「科学と社会の関わり」に深く関係している。いずれにしろ、所内における特別な部門の創設も含めて更に検討を加えていくべき課題であらう。



Annual Review 2007 表紙



プレスリリース用資料

4-4 史料編纂室

4-4-1 はじめに

分子研は平成 16 年に創立 30 周年を迎え、その翌年（平成 17 年）「史料編纂室」が分子研南実験 109 号室に設置された。それ以来、アーカイブズ活動を行っている（分子研リポート 2006 参照）。分子研の設立の歴史はかなり長く、分子研設立の勧告が日本学術会議から出されたのは昭和 40 年であったが、国内事情により分子研設立まで十年の歳月が経過した。日本化学会は昭和 38 年に化学研究将来計画委員会を設け、化学の諸分野から提案された 6 研究所について設立案が検討され、学術会議の審議を経て分子研設立が勧告された。分子研創設に至る長い年月にわたる貴重な記録や歴史的な資料（とくに分子研設立に関連する種々の委員会の議事録や配付資料など）を可能な限り収集・保管することはアーカイブズの観点から極めて重要である。

4-4-2 昨年までの状況

史料編纂室では、これまで、「分子研設立に至った経緯」、「準備室時代」、「創設第 1 期」などの史料の収集・整理を行って、その目録を作成するとともに「文書保存箱」に収納する作業を進めている。昨年度の分子研リポート 2006（38 ページ）では、長倉三郎先生および井口洋夫先生から提供された史料について紹介した。長倉先生から提供された史料は、1) 学術会議の勧告以前に設けられた「日本化学会将来計画委員会」の動向、2) 学術会議の勧告以後の「分子研小委員会」の動向、3) 分子科学特定研究の課題などに関するものである。井口先生からの史料は、1) 分子研準備室時代、2) 分子研創設初期のものなどである。

4-4-3 今年度の活動状況

今年度は、長倉先生から新たに次のような追加史料が提供された。1) 第 2 回化学研究将来計画委員会議事録（昭 39）、2) 農化・薬学との Joint Committee 議事録（昭 39）、3) 分子科学サーキュラー（第 2 号）に掲載された「分子研設立計画について」の長倉先生の手書き原稿、4) 分子科学特定研究の申請書（昭 45）、中間報告（昭 46）、報告（昭 48）、5) 分子研創設準備会議第 1 回（昭和 49）から第 6 回（昭和 50）まで、6) 分子科学研究所 前史」（長倉著）化学研究将来計画委員会の審議から創設準備室の設置まで。

さらに、細矢治夫氏（お茶の水女子大名誉教授）・岩田末廣氏（分子研名誉教授）から分子研に関する次の資料が提供された。1) 分子研サーキュラー No.1-19（ただし No.13-15 欠落）、2) 創設協力者会議第 1 回（昭 50）- 第 14 回（昭 51）、3) 分子科学研究会会報 No.1（昭 42）から No.12（昭 46）、第 4 期（昭 50）- 第 11 期（昭 61）、4) 分子科学若手の会——夏の学校（昭 39）、会報 No.2, 4（昭 48）など。その他、岡崎統合事務センターからは分子研の評議員会、運営協議員会、運営連絡会議、学会等連絡会議などの議事録や配付資料など多数が提供された。

最近、総研大はじめ、種々の共同利用研究所（核融合研、高エネ研など）においてアーカイブズ活動が活発に行われている。そうした研究機関のアーカイブズ室（史料室）との連携を保つことはアーカイブズに関するノウハウを得るのに非常に参考になっている。具体的には、核融合研「アーカイブズ打合せ」（毎月 1 回）、総研大プロジェクト「大学共同利用機関の歴史」研究会（平成 19 年 3 月）および「大学共同利用機関の歴史とアーカイブズに関する打合せ（EAD による資料目録共有化の検討および作業）」（平成 19 年 9 月）、そのほか UCLA-KEK- 総研大の国際シンポジウム（平成 19 年 8 月）などに参加し、アーカイブズについて有益な多くの情報が得られた。

最後に、今後の方針であるが、上記の共同利用機関アーカイブズ室との連携を保ちながら、史料の収集・保管を進めるとともに、史料の複写およびデジタル化（PDF）、共同利用研との史料共有化の作業も検討していく。

4-5 社会との交流

4-5-1 自然科学研究機構シンポジウム

自然科学研究機構シンポジウムは、著名なジャーナリストであり本機構の経営協議会委員でもある立花隆氏によって提案・コーディネートされ、下記のようにこれまでに計4回開催されている。

第1回：「見えてきた！ 宇宙の謎。生命の謎。脳の謎。科学者が語る科学最前線」，サンケイプラザ（東京都千代田区），2006年3月21日。

第2回：「爆発する光科学の世界——量子から生命体まで——」，東京国際フォーラム（東京都千代田区），2006年9月24日。

第3回：「宇宙の核融合・地上の核融合」，東京国際フォーラム，2007年3月21日。

第4回：「生命の生存戦略 われわれ地球生命ファミリーはいかにしてここに かくあるのか」，東京国際フォーラム，2007年9月23日。

そもそも本シンポジウムは、自然科学研究機構が国内最高水準の学術的アクティビティーを有しながら一般にはほとんど知られていないという現状を残念がられた立花氏が、コーディネーターとして自ら進んで計画されたものである。氏は、東京大学教養学部で担当されているゼミナールの受講生とともに事前に講演者に取材を行い、最先端の研究内容をいかに面白く、かつ、分かり易く伝えるかについて、貴重なご助言をされてきている。そのおかげもあり、事前に予約受付をした500名以上の参加者で毎回会場は満席となり、また、ほぼ丸一日を費やす盛り沢山のプログラム編成にも関わらず途中退席する人はほとんどいない。

本シンポジウムに対して、分子科学研究所は以下のような様々な企画で積極的に関与してきている。まず、第1回において、「21世紀はイメージング・サイエンスの時代」と銘打ったパネルディスカッション中で、岡本裕巳教授が「ナノの世界まで光で見えてしまう近接場光学」というタイトルで講演を行った。第2回目は、講演会全体の企画を分子科学研究所が中心となって行なった。全講演のうちの半数を分子研のスタッフ（松本吉泰教授、平等拓範准教授、加藤政博教授、大森賢治教授、江東林准教授）が担当し、中村宏樹所長が閉会の挨拶で締めくくった（詳細は分子研リポート2006を参照）。なお、本講演会の収録集が、本年度10月に（株）クバプロより出版された。また、本シンポジウムでは、講演会の開催と併せて、展示コーナーを設けてビデオやパネルを用いた説明を行なっている。短い休憩時間をぬって展示スペースを訪れ熱心に質問をされる参加者の方々も多く、「研究の面白さ」を伝える試みが一定の成果を挙げていることが実感される。

機構シンポジウムは、今後も春秋年2回ペースでの開催が検討されている。第5回は、生理学研究所が中心となって2008年3月20日に開催予定である。

4-5-2 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、2007年12月で803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71回開催されている。今年行われた講演の中では，大阪大学教授の菊池誠先生によるニセ科学のお話（第69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。また，市民と研究者を交えた活発な討論が行われた。講演内容では，第37回の東京大学助教授の高野陽太郎先生，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，講演者に工夫をお願いしている。毎回簡単な講演要旨を事前に講演者に書いてもらい，それを愛知県内の大学や岡崎市内の色々な機関に送ると共に，分子研ホームページにも載せている。一般市民の参加数は会毎に大幅に変わるので，開催案内はかなりいきわたっていると思われる。テーマや講演者の選考，広報の仕方等にコロキウム委員のアイディ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活動となっている。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くことが期待される。

回	開催日	テーマ	講演者
66	2007.1.10	夢を現実にする空間の化学	北川 進 (京都大学大学院工学研究科教授)
67	2007.2.28	宇宙史の暗黒時代に迫る——最遠銀河の発見、補償光学、次世代望遠鏡——	家 正則 (自然科学研究機構国立天文台教授)
68	2007.3.7	ナノフォトニクス——光技術の質的変革——	大津元一 (東京大学大学院工学系研究科教授)
69	2007.6.13	ニセ科学を考える	菊池 誠 (大阪大学サイバーメディアセンター教授)
70	2007.6.27	量子乱流——もうひとつのダ・ヴィンチ・コード——	坪田 誠 (大阪市立大学大学院理学研究科教授)
71	2007.11.14	ナノテクノロジーで生命を測る	馬場 嘉信 (名古屋大学大学院工学研究科教授)

4-5-3 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

4-5-4 その他

(1) 安城市民公開講座等

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

分子科学研究所が担当して行ったものは、以下のとおりである。

安城市民公開講座

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

安城市シルバーカレッジ

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

(2) 岡崎商工会議所（岡崎ものづくり推進協議会）との連携

岡崎商工会議所は産学官連携活動を通じて地元製造業の活性化と競争力向上を目的に「岡崎ものづくり推進協議会」を設立し多くの事業を行っている。この協議会と自然科学研究機構の岡崎 3 研究所との連携事業の一環で、会員である市内の中小企業との交流会を、2007 年 6 月 22 日および 10 月 9 日に分子研で行った。商工会議所が推し進める「ものづくり」には製造業を主体としていることから第 1 回は技術課機器開発班、第 2 回は電子機器・ガラス機器開発班が中心となって対応した。

交流会は技術課機器開発班および電子機器・ガラス機器開発班の持つ技術領域と関連深い企業、また研究部門からの依頼開発で直面している技術的問題点などを課題とした内容から適合する業種の企業が選定され実施された。第 1 回の参加企業は機械系を中心に鍛造、精密加工、放電加工、研磨、溶接、接着の分野から 7 社、第 2 回は電子系を中心にプリント基板設計、電子回路設計の分野から 4 社の参加で行われた。交流会の内容は、自己紹介の後、レーザー

機器開発研究の平等研究グループの研究室見学および装置開発室の施設見学を行い、その後、相互の技術内容紹介およびそれぞれの技術班が取り組んでいる技術課題などから「ものづくり連携」の可能性について意見交換を行った。

この交流会を機に現在、マイクロチップレーザー用ヒートシンクの新規製作法開発と有機磁性体の研究で用いる圧力セルの銅合金系高強度材料の開発が市内の企業の協力で進んでいる。

また、岡崎ものづくり推進協議会が主催する「ものづくり岡崎フェア 2008」が2008年2月15、16日の2日間に渡って岡崎市竜美丘会館に於いて開催され、自然科学研究機構の岡崎3機関として3研究所のニーズを紹介するブースを出展した。分子研からは前述した交流会から発展した「ものづくり連携」について、技術課機器開発班が市内企業との開発事例をパネルで紹介した。

4-6 理科教育への協力

4-6-1 スーパーサイエンスハイスクール

分子科学研究所は平成 14 年度以来文部科学省が推進してきた「スーパーサイエンスハイスクール事業」に岡崎高校を支援する形で協力してきた。この事業は昨年度で一旦終了したが、岡崎高校は継続事業として平成 19 年度より始まる SSH 事業に応募し、この提案が文部科学省より採択された。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した。具体的には永田准教授および中村准教授が下記のテーマで岡崎高校のスーパーサイエンス部活動を支援している。

(1) 化学班の実験指導，およびプレゼンテーション指導。

研究テーマは「三層系を用いた光合成型電子移動反応の観察」「フェロインを用いた化学振動」など。

(2) 物理班の実験指導。

研究テーマは「超伝導体 YBCO($\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$) の作成と高温超伝導実験」など。

4-6-2 国研セミナー

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

分子科学研究所が担当したものは以下のとおりである。

回	開催日	テーマ	講 師
2	1986. 1.18	分子研の紹介	諸熊 奎治 教 授
3	1986. 6. 7	シンクロトロン放射とは (加速器・分光器・測定器の見学)	渡邊 誠 助教授 春日 俊夫 助教授
6	1986.10. 4	人類は元素をいかに利用してきたか	齋藤 一夫 教 授
9	1987. 6.13	レーザーの応用について	吉原経太郎 教 授
12	1987. 9.26	コンピュータで探る分子の世界	柏木 浩 助教授
15	1988. 7. 2	目で見える低温実験・発光現象と光酸化現象	木村 克美 教 授
18	1988.10.29	人工光合成とは何か	坂田 忠良 助教授
21	1989. 6.24	星間分子と水——生命を育む分子環境——	西 信之 助教授
24	1989.10.21	常温での超伝導は実現できるか	那須奎一郎 助教授
27	1990. 6.23	目で見える結晶の生成と溶解 ——計算機による実験（ビデオ）——	大瀧 仁志 教 授
30	1990.10.20	電気と化学	井口 洋夫 所 長
33	1991. 6.22	自己秩序形成の分子科学 ——分子はどのようにしてリズムやパターンを作り出すか——	花崎 一郎 教 授
37	1991.12.14	からだと酸素，そしてエネルギー：その分子科学	北川 禎三 教 授
39	1992. 7. 7	サッカーボール分子の世界	加藤 立久 助教授
42	1992.11.13	炭酸ガスの化学的な利用法	田中 晃二 教 授
45	1993. 6.22	化学反応はどのように進むか？	正畠 宏祐 助教授
48	1993.10. 1	宇宙にひろがる分子の世界	齋藤 修二 教 授
51	1994. 6.21	分子の動き	伊藤 光男 所 長

54	1995. 6.20	生体内で活躍する鉄イオン——国境なき科学の世界——	渡辺 芳人 教 授
57	1996. 6.28	分子を積み上げて超伝導体を作る話	小林 速男 教 授
60	1997. 6.13	生体系と水の分子科学	平田 文男 教 授
63	1998. 6.12	電子シンクロトロン放射光による半導体の超微細加工——ナノプロセスとナノ化学——（UVSOR 見学）	宇理須恆雄 教 授
66	1999. 6. 8	レーザー光で、何が見える？ 何ができる？	猿倉 信彦 助教授
69	2000. 6. 6	マイクロチップレーザーの可能性	平等 拓範 助教授
72	2001. 6. 5	ナノメートルの世界を創る・視る	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
90	2007. 6.15	光で探る生体分子の形と機能	小澤 岳昌 准教授

4-6-3 小中学校での出前教室

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の秘密	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
矢作西小	2007.12. 4	原子の世界	櫻井 英博 准教授

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
23	2007.11.27	身の回りにも不思議はいっぱい	青野 重利 教授

4-6-4 職場体験学習

岡崎市内及び近隣の中学校及び高等学校の要請により，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みよう」として中・高生の受け入れに協力している。

期 間	学校名	人 数
2007. 6.13 ~ 2007. 6.15	岡崎市立甲山中学校	3
2007. 8. 7	豊田西高等学校	3
2007. 8.22 ~ 2007. 8.23	岡崎市立竜海中学校	3
2007.10.17 ~ 2007.10.19	豊橋市立中部中学校	1
2008. 1.23 ~ 2008. 1.25	岡崎市立竜南中学校	1

4-6-5 その他

(1) おかざき寺子屋教室

(社)岡崎青年会議所との共催で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たが，(社)岡崎青年会議所の都合で，2006 年度をもって終了した。

分子科学研究所が担当したものは以下のとおりである。

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

備 考

参加者：小学校 5 ～ 6 年生 40 ～ 50 名程度

(2) 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

(3) 岡崎市小中学校理科作品展

2007 年 10 月 7 日の日曜日、中央総合公園で開催された「岡崎市小中学生理科作品展」に分子研ブースを出展し、パネルによる研究所紹介に加えて、一日実験教室を実施した。見附孝一郎准教授が講師として参加し、色素増感太陽電池と酸化チタンカラフル塗装の実体験の手伝いをした。小学生から大人まで、多くの参加者に太陽電池を作製していただき、起電力を競ったり、オルゴールを動作させたりして楽しんでいただいた。この太陽電池は、2 枚の導電性ガラスの一方にハーブティーの色素を沈着させた酸化チタンを付け、他方には鉛筆を塗り付け、それらの間にヨウ素電解質溶液を挟むことにより容易に作ることができる。動作原理はかなり高度な内容を含むため、すべてを理解してもらうことは困難だったが、全員がその構造の簡単さと性能の高さに驚き、研究所に対する期待や憧れを抱く子供達もいたようである。

4-7 一般公開

研究活動や内容について、広く一般の方々に理解を深めていただくため研究所内を公開し、説明を行っている。現在では岡崎市にある3つの研究所が輪番に公開を実施しているので、3年に1回の公開となっている。公開日には実験室の公開と講演会が行われ、約2000人の見学者が分子研を訪れる。

回 数	実施月日	備 考
第1回	1979.11. 9 (Fri)	創設記念一般公開
第2回	1980.11.15 (Sat)	
第3回	1981.11.14 (Sat)	3 研究所同時公開
第4回	1985. 5.11 (Sat)	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

4-8 見学者受け入れ

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。

年度	受入件数	見学者数	見学受入機関名
1990	10	250	(財)レーザー技術総合研究所 東京工業大学理学部応用物理学科学生 ほか
1991	3	110	静岡県新材料応用研究会 名古屋大学工学部電気・電子工学科学生 ほか
1992	7	162	三重大学技術職員研修会 慶応義塾大学理工学部化学科学生 ほか
1993	9	211	(財)名古屋産業科学研究所超伝導調査研究会 東京工業大学化学科学生 ほか
1994	7	145	(社)日本化学工業界技術部 慶応義塾大学理工学部化学科学生 ほか
1995	4	122	日本電気工業会名古屋支部 静岡県高等学校理科研究会 ほか
1996	7	180	(財)新機能素子研究開発協会 明治大学附属中野中学・高等学校理科教員 ほか
1997	9	436	(財)科学技術交流財団 慶応義塾大学理工学部化学科学生 ほか
1998	6	184	東京地方裁判所司法修習生 開成高等学校 ほか
1999	8	206	愛知県商工部 愛知県高等学校視聴覚教育研究協議会 ほか
2000	12	225	(財)衛星通信教育振興協会 東京農工大留学生 ほか
2001	8	196	中部経済産業局統計調査員協会 愛知県立豊田西高等学校 ほか
2002	5	118	関西工業教育協会 静岡県立浜松西高等学校 ほか
2003	8	146	中部経済連合会 一宮高等学校 ほか
2004	11	198	中部電力(株) 立命館高等学校 ほか
2005	10	317	自動車技術会中部支部 慶熙大学(Kyung hee University) ほか
2006	8	144	山梨県立都留高等学校 西三河地区理科教育研究会 ほか
2007	8	303	愛知教育大学、(社)電気学会、(社)半田法人会、 岡崎市保健所関係者、光ヶ丘女子高等学校、瑞穂市議 会関係者、安城南高等学校、海陽学園中学校

5 . 各種事業

大学共同利用機関である分子科学研究所は、分子科学研究推進の中核として所内外の頭脳による共同研究と設備の共同利用を積極的に推進し、周辺分野を含めたコミュニティの世界的水準での活性化を重要な役割としている。法人化後、研究所は様々な提案を行い、文部科学省、自然科学研究機構、日本学術振興会による公募に採択されて予算配分を受け、多様な事業を展開している。近年の政府財政の改革に伴い、大学に於ける研究設備の老朽化に対する手当の不十分さから、化学の分野の研究者はその研究水準の維持向上を図る上で極めて危機的な状況に曝されている。この危機に対処するために、平成 19 年度からの 5 カ年計画としてスタートした「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」事業は、全国の大学の化学系研究者の支持を受けて、全国的な設備の相互利用を可能にするインターネットによる設備利用予約と利用料金の受け渡しシステムを構築し、使用困難な設備の復活再生と新規最先端設備の重点的配置を行うものである。この事業を大学共同利用期間としての分子科学研究所が行い、全国の大学の教育研究の充実に資すると共に、我が国の化学研究のより一層の活性化に寄与する事は重要であろう。一方で、研究所の研究活動の飛躍的向上を図るという観点から、理化学研究所との連携融合事業「エクストリームフォトニクス」が、平成 17 年度からスタートしている。これは、物理と化学の 2 領域にわたるフォトニクスの問題を基礎的な量子論の応用による分子の状態制御と先端光源開発までを含めた最先端の課題として取り組むものである。自然科学研究機構が主催する「分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成事業」では、分子科学研究所が主体的にまとめている「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」、5 機関共同で進めている「イメージング・サイエンス」および「自然科学における階層と全体」プロジェクトを実施しており、それぞれ着実な成果を上げ進展に寄与している。日本学術振興会が行っている多国間交流事業「アジア研究教育拠点事業」では、研究所が提案する「物質・光・理論分子科学のフロンティア」が平成 18 年度より採択され、中国、韓国やタイ、マレーシア、シンガポールなど東南アジア各国の若手研究者の交流と育成、共同研究プログラムを積極的に実行している。また、大学ばかりでなく産業界の研究開発の支援を行う文部科学省の先端研究施設共用イノベーション創出事業「ナノテクノロジーネットワーク」では、本年度より「中部地区ナノテク総合支援」プロジェクトの幹事機関として名古屋大学、名古屋工業大学、豊田工業大学とともに各種装置の共用支援を行っている。最も規模の大きな事業としては、文部科学省の「最先端・高性能スーパーコンピューターの開発利用」プロジェクトに於ける「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」を推進している。

このような、各種事業を通して大学や産業界の研究者が分子研に集い、所内の研究者との活発な情報交換と共同研究が実施されることによって、分子科学やその周辺分野の研究推進に大きく寄与するであろう。

5-1 化学系研究設備有効活用ネットワークの構築（文部科学省）

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・地域設備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を目的として、特別教育研究経費による「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）がスタートした。本ネットワークには全国 73 の機関が参加している。19 年度は調査費相当の 950 万円が計上されたに止まったが、この事業が正式に認められ、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。ここには、全国的な相互利用の試行を行うための設備リストや予約課金システムが搭載され、機器管理者とのやり取りや設備利用終了後の課金処理と自動集計が可能となっている。平成 20 年 6 月には、大幅なシステムのアップグレードが行われ、設備管理者の権限の強化やマシンタイムの 5 分ごとの予約設定などユーザーフレンドリーなソフトウェアに進化する予定である。設備のネットワーク相互利用には 56 機関が設備を供出し、117 台の装置が運用されている。平成 20 年 1 月現在の登録研究室数は 1172 研究室であり登録利用者数は 4286 名に上っている。また、利用件数は 4800 件に達している。試行 1 年目は、正にユーザー自身も試行してみるという気持ちが強く、頻繁に外部の設備を使うまでには至っていない。しかし、各研究者がその幅を広げて様々な周辺分野の研究内容にも取り組んで行くことが可能になった点は、評価されている。今後、より使いやすい環境への整備を図ることによって大学間相互利用の割合を増やして行く必要がある。

平成 20 年度概算要求は、文部科学省から 50 億円強の予算が計上されたが、財務省査定は 1 億円に止まり、多くの研究者の望みを糸でつなぐ状況となった。世話人の落胆を全国の皆さんが逆に励ましへと繋げて頂いたことは大変ありがたいことであった。予算の内の 8 割を十分ではないが緊急に措置が必要な設備の復活再生に投入し、最小限の対応を図る。予算の残りの 2 割の内、旅費や運営費以外として、最終的には 1000 台規模の研究設備の予約・管理・課金が可能となるシステムの高度化にむけた大改造に当てる予定である。特に、各設備の管理者の裁量が大幅に強化され、課金の設定、装置利用時間の修正、メンテナンス時間の設定など運用に必要な種々の機能が搭載される。

大学共同利用機関としての分子科学研究所の本活動が、財政的に厳しい状況の中、我が国の化学の教育研究活動を支える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であろう。全国の研究者の声に支えられてこれを確立して行きたい。

5-2 連携融合事業「エクストリームフォトンクス」(文部科学省)

平成 17 年度から理化学研究所との連携融合事業として「エクストリーム・フォトンクス」を推進している。「光を造る」、「光で観る」、「光で制御する」という 3 つの観点から、両研究所が相補的に協力交流することによって、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、3 つの観点のそれぞれにおいて以下の課題を選定し、いずれも精力的に研究を推進してきた。

(1) 「光を造る」

「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)

(2) 「光で観る」

「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)

(3) 「光で制御する」

「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)

これらの課題の成果は、既に *Science* 誌、*Physical Review Letters* 誌、*Nature Methods* 誌などの超一流の学術誌に度々発表されただけでなく、多数の新聞各紙で取り上げられ社会的にも大きな注目を集めた。また、日本学士院学術奨励賞、日本学術振興会賞、文部科学大臣表彰若手科学者賞、日本化学会進歩賞、日本分光学会奨励賞、光科学技術研究振興財団研究表彰など、多くの権威ある表彰の対象となってきた。また、マイクロチップレーザーの開発では、産業界との共同研究が進展した。

この他に、両研究所の研究打合せや成果報告のため、毎年 2 回、定期的に理研・分子研合同シンポジウムを開催している。17 年度は、4 月に理化学研究所にて第 1 回の合同研究会を開催した。この研究会では、各参加グループのリーダーがそれまでの研究成果を紹介した上で今後の研究計画を披露し、これを中心に議論を行った。これに対して、11 月には「分子イメージングとスペクトロスコピーの接点」を主題とした研究会を行い、より突っ込んだ議論を進めた。18 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。19 年度は、4 月に理化学研究所にて「バイオイメージング」をテーマに第 5 回シンポジウムを開催した。ここでは、高感度レーザー顕微鏡やテラヘルツ分光を利用した生体系のイメージングについて議論した。さらに、11 月には「先端光源開発と量子科学への応用」を主題とした第 6 回シンポジウムを行い、高強度超短パルスレーザーを始めとする先端レーザー光源の開発と、それらを原子分子クラスターあるいは表面ダイナミックスの観察や制御へと応用した研究成果と今後の展望について議論した。いずれのシンポジウムにおいても、両研究所内外の研究者に講演を依頼し、関連分野の先端について深い議論を行った。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。

5-3 分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成事業 自然科学研究機構)

5-3-1 概要

自然科学研究機構では、新分野創成型連携プロジェクトとして「分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成事業」を行っている。これは、機構内で2月に公募され、審査によって採択課題が決められ、年度末に評価を行っている。

分子科学研究所からは、研究所が主体的にまとめている「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」、5機関共同で進めている「イメージング・サイエンス」および「自然科学における階層と全体」プロジェクトに多くのメンバーが参加している。またこの他に、少人数のグループ研究が走っている。「自然科学における階層と全体」では、世界的に著名な研究者を海外から招き、「International Symposium on Hierarchy and Holism (ISHH) —Bridging across Different Hierarchies in Natural Sciences—」を岡崎コンファレンスセンターにおいて開催した。これは、広い範囲の研究者に自然科学研究機構の活動と組織を広く知らしめると共に、細分化・専門化した蛸壺的な研究の流れが支配的となっている現状を脱皮し、これら各階層を支配する統一的な概念を探ろうという趣旨で行われた。

5-3-2 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

本プロジェクトは、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いる。また、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、2007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・岡崎、平田、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、斉藤、核融合研・中島、東北大・森田)

連携課題(14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(分子研・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(分子研・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（分子研・永瀬）
- ・電磁場と露に相互作用した多電子ダイナミックスの解析（分子研・信定）
- ・3次元RISMによる分子認識（分子研・平田）
- ・分子動力学計算に基づく凝縮系ダイナミックス（分子研・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）
- ・界面和周波発生分光の理論計算手法の開発（東北大・森田）

(2) ライブラリの整備

(3) ワークショップ

- ・第4回連携シンポジウム 2月13日
- ・分子・物質シミュレーション中核拠点セミナー 第21回～第27回
- ・討論会、学会の共催

(4) 人材育成

第3回分子・物質シミュレーション中核拠点形成事業人材育成講座

「分子シミュレーションスクール——基礎から応用まで——」12月17日 - 21日

(5) 実施体制

機構内11グループ 理論・計算分子科学、天文台、核融合研、生理研、基生研
 機構外3グループ 東大、東北大、産総研

5-3-3 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・准教授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・電顕関連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。このシンポジウムの記録の出版は諸々の事情で遅れていたが、平成20年に出版の予定で編集作業が行われている。

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。また平成19年8月23日・24日には、「画像計測研究会2007」が核融合科学研究所一般共同研究の一環として、核融合科学研究所において開催された。

5-3-4 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、小澤岳昌准教授がテーマ(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、5月16日、17日の二日間、岡崎コンファレンスセンターにおいて「自然科学における階層と全体」第4回シンポジウムを開催した。本シンポジウムでは、2件の特別講演の他、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、および外部からの講演者による13件の講演が行われた。

また、2月21日から23日の3日間、岡崎コンファレンスセンターにおいて「International Symposium on Hierarchy and Holism—Bridging Across Different Hierarchies in Natural Sciences」と題した国際シンポジウムを開催した。

5-4 アジア研究教育拠点事業「物質・光・理論分子科学のフロンティア」 (日本学術振興会)

21世紀はアジアの時代と言われている。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が期待される。

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（日本学術振興会ホームページより抜粋：http://www.jsps.go.jp/j-bilat/acore/01boshu_acore.html）」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、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を4拠点研究機関とする日本、中国、韓国、台湾の東アジア主要3カ国1地域の交流を、アジアコア事業の一環として平成18年度にスタートさせた。アジアコア事業の特徴の一つとして、互いに対等な協力体制に基づく双方向交流が挙げられる。本事業においても、4拠点研究機関のそれぞれがマッチングファンドを自ら確保しており、双方向の活発な研究交流が着実に進展している。また、4拠点研究機関以外の大学や研究機関が研究交流に参加することも可能である。平成19年度までの2年間の活動の概要を以下にまとめる。

(1) 共同研究

物質分子科学においては、 π 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、先端ナノバイオエレクトロニクス、自己組織化金属錯体触媒の開発（以上、中国との共同研究）、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（韓国との共同研究）、バッキーボウルの合成と物性（台湾との共同研究）に関する研究が進展した。

光分子科学においては、特異なナノ分子システムのナノ光学、テラヘルツ時間領域分光法を用いたジシアノビニル置換芳香族分子の分子間振動および構造（以上、中国との共同研究）、コヒーレントレーザー分光による反応ダイナミックスの解明（台湾との共同研究）に関する研究が進展した。

理論分子科学においては、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（台湾との共同研究）に関する研究が進展した。

(2) 共同セミナー

18年度は、「中国・日本グリーン化学合成シンポジウム」（中国・北京）、「第1回物質・光・理論分子科学のフロンティア冬の学校」（中国・北京）、「第1回全体会議」（日本・岡崎）が開催された。

19年度は、「中国・日本機能性分子の合成と自己組織化シンポジウム」（中国・北京）、「日中ナノバイオ若手研究者交流」（中国・北京）、「有機固体の電気伝導と光伝導に関する日中合同セミナー」（中国・北京）、「先端レーザー分光シンポジウム」（日本・神戸）、「次世代触媒創製を目指した機能物質シンポジウム」（中国・北京）、「物質・光・理論分子科学のフロンティア」冬の学校（日本・岡崎）、「第2回全体会議」（韓国・デジョン）が開催された。

5-5 ナノテクノロジーネットワーク事業「中部地区ナノテク総合支援」 (文部科学省)

5-5-1 概要

分子科学研究所は、名古屋大学、名古屋工業大学、豊田工業大学の愛知県内機関と連携して、文部科学省の先端研究施設共用イノベーション創出事業・ナノテクノロジーネットワークプロジェクトを受託し、中部地区ナノテク総合支援事業を展開している。中部地区にナノテクノロジー総合支援拠点を形成し、ナノ計測・分析（分子研・名工大）、超微細加工（名大・豊工大）、分子・物質合成（分子研）の3つの指定領域にわたって、超高磁場 NMR、先進電顕等の最先端機器利用、有機・生体関連分子等の設計合成評価、最先端設備技術を用いた半導体超微細加工等を総合的に支援している。特に、各要素単体の支援に留まらず、4機関の特徴を活かした連携融合支援を推進する予定である。

分子研では、分子スケールナノサイエンスセンターが母体となり、超高磁場 NMR、300kV 分析透過電子顕微鏡、時空間分解近接場光学顕微鏡、紫外磁気円二色性光電子顕微鏡などの先端機器利用や、有機・生体関連分子等の設計合成評価、大規模量子化学計算支援を実行している。今年度は初年度のため、昨年度までのナノ支援プロジェクトと比べてやや申請課題数が少ないが、それでも協力研究 36 件、施設利用 18 件（1 月 9 日現在）を採択し、うち協力研究 25 件、施設利用 19 件は実施済である。所内利用も前期だけで 23 件に上っている（後期末集計）。

表 1 に分子科学研究所が担当する支援要素の一覧、表 2 に平成 19 年度採択課題一覧を示す。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。課題申請等の詳細は <http://nanoims.ims.ac.jp/> にあり、本務の共同利用と同様に、通常申請（年 2 回）と随時申請がある。申請は分子スケールナノサイエンスセンター運営委員会の下部組織であるナノネット小委員会では審査される。本務の共同利用と異なり、本事業では産業界からの申請も無償（ただし結果の公開が義務付けられる）で幅広く受け付けている。

表 1 支援装置・プログラム一覧（分子科学研究所担当分）

支援装置・プログラム	装置・プログラムの概要	支援責任者	所属
近接場分光イメージング支援（SNOM）	新規光物性、コヒーレント光制御、超高速センサー、光加工・メモリ、エネルギー情報伝達、ナノデバイス等に向けたフェムト秒時間分解近接場顕微鏡支援。空間分解能 50 nm、励起光 Ti:sapphire (780–920 nm 100 fs) または各種 CW。透過、ラマン、非線形に対応。超高速分光を兼備した世界的に類のないオリジナル機器。	岡本裕巳教授	光分子科学研究領域
波長可変ピコ秒時間分解ラマン分光支援	フォトリック有機ナノデバイスなどの物性評価のためのピコ秒時間分解波長広域連続可変ラマン分光システム。195 nm から 11 mm まで連続波長可変、4 ps、3 mJ 以上、1000 Hz。	西 信之教授	物質分子科学研究領域
高分解能透過分析電子顕微鏡支援（TEM）	ナノ粒子などの構造および電子状態解析のための電界放出型エネルギーフィルター高分解能透過電子顕微鏡。JEOLJEM-3200、粒子像分解能 0.17 nm、格子像分解能 0.10 nm。走査像観察、nm 領域の元素分析、液体窒素冷却も可能。主に施設利用に対応。	西 信之教授	物質分子科学研究領域

磁気光学表面ナノ磁性評価支援	新規磁性材料・ナノ磁性体の磁気特性観測を目的とした紫外磁気円二色性光電子顕微鏡 (UV MCD PEEM) と超伝導磁石 X 線磁気円二色性 (XMCD) 計測支援。UV MCD PEEM は当グループ発見に基づく全く独創的な機器。空間分解能 50 nm, 超高速時間分解計測にも対応予定。超伝導 XMCD は UVSOR 利用, 7 T, 2 K。他に超高真空磁気光学 Kerr 効果測定装置 (0.3 T, 100 K) も提供。	横山利彦教授	物質分子科学研究領域
集束イオンビーム加工と走査電子顕微鏡支援 (SEM/FIB)	集束イオンビーム加工と走査電子顕微鏡を提供。主に施設利用に対応。	横山利彦教授	物質分子科学研究領域
X 線光電子分光支援 (ESCA)	汎用の X 線光電子分光器 (Al, Mg-K α 線利用) を提供。施設利用として気軽に利用いただける。	横山利彦教授	物質分子科学研究領域
ナノバイオ素子機能形態解析支援 (生体 TEM)	有機材料・ナノバイオ素子等の形態と機能を解析するための高分解能透過電子顕微鏡 in situ 観察支援。独創的で世界的にも例のない位相差法を備えた生体関連物質に特化した透過電子顕微鏡。電子顕微鏡元素イメージング法も併用可能。	永山國昭教授	生理研
超高磁場 NMR ナノ計測支援	920MHz NMR による難結晶蛋白, 固体ナノ触媒, 有機-無機複合コンポジット, カーボンナノチューブ, 巨大天然分子などの精密構造解析支援。現状世界最高性能の 920MHz NMR。固体, 多次元, 3 重共鳴にも対応。	魚住泰広教授	生体・錯体分子科学研究領域
分子電子素子のための素子作成と電気・光特性計測支援	自己組織化を利用した 10nm 級のナノギャップ電極作成とその電気特性の計測, 点接触電流画像原子間力顕微鏡によるナノ構造体の電流特性空間分布の計測, 定フォトン照射装置を利用した素子の光特性の計測。GPC 分取システム, マグネトロンスパッター, 定フォトン照射装置, 金属顕微鏡, 極低温真空プローバー, 点接触電流イメージング原子間力顕微鏡, 全自動分子合成装置など。	小川琢治教授	分子スケールナノサイエンスセンター
大規模量子化学計算支援	ナノ分子系の構造・電子状態・機能の研究およびこれらの設計と合成の高効率化のための高精度大規模量子化学計算シミュレーション。クラスター PC。	永瀬 茂教授	理論・計算分子科学研究領域
機能性有機ナノ材料設計支援	機能性有機ナノ材料, 金属半導体クラスター, 生体系を規範とした有機ソフトナノ分子などの合成経路探索設計。鈴木・永田・櫻井准教授が各専門分野の分子物質に対応。	鈴木敏泰准教授 永田 央准教授 櫻井英博准教授	分子スケールナノサイエンスセンター

5-5-2 2007 年度採択課題一覧（分子科学研究所担当分）

(1) 協力研究

課 題 名（前期）	支援装置	代 表 者
海洋生物由来の生物活性ナノ有機分子の構造解析	NMR	北海道大学大学院薬学研究院 久保田高明
光合成での光電変換機能をもつアンテナ系タンパク質色素複合体の組織化と機能評価	分子素子	名古屋工業大学つくり領域 南後 守
SiC からのカーボンナノチューブ生成制御に関する研究	ESCA	名城大学理工学部材料機能工学科 丸山 隆浩
有機金属ナノクラスターの創製：構造と機能制御	TEM	愛知教育大学教育学部 日野 和之
電気化学的処理をしたポルフィラジン薄膜の表面分析	ESCA	名古屋大学大学院理学研究科 阿波賀邦夫
分子研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の電気特性評価	分子素子	名古屋大学大学院工学研究科 中里 和郎
高分解能電子顕微鏡による炭素系超潤滑物質の構造の解明	TEM	愛知教育大学教育学部 三浦 浩治
有機分子 - 遷移金属複合系における円磁気二色性実験	磁気光学	(独)日本原子力研究開発機構 松本 吉弘 先端基礎研究センター
マイクロ波選択加熱による非平衡動的過程を応用したナノ物質創成実験研究	TEM	核融合科学研究所・連携研究推進センター 高山 定次
高共役 π 分子修飾電極の作成と評価	分子素子	愛媛大学総合科学研究支援センター 宇野 英満
固体電解質のナノスイッチの作製とその特性評価	分子素子	(独)物質・材料研究機構 長谷川 剛
課 題 名（後期）	支援装置	代 表 者
有機金属ナノクラスターの創製：構造と機能制御	TEM	愛知教育大学教育学部 日野 和之
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	量子計算	京都大学化学研究所 時任 宣博
SiC(000-1) 基板の表面酸化に関する研究	ESCA	名城大学理工学部材料機能工学科 丸山 隆浩
光合成での光電変換機能をもつアンテナ系タンパク質色素複合体の組織化と機能評価	分子素子	名古屋工業大学つくり領域 南後 守
室温で動作する単電子デバイスの作製の試み	分子素子	科学技術振興機構 根岸 良太
高周期 14 族元素を骨格に有する特異な芳香族系の構築とその電子状態及び物性の解明	量子計算	埼玉大学大学院理工学研究科 斎藤 雄一
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	NMR	名古屋市立大学大学院薬学研究科 山口 芳樹
刺激応答性星型ポリマーを用いた金属ナノ微粒子の創製	有機材料	大阪大学大学院理学研究科 青島 貞人
有機分子保護金属ナノクラスターの分子設計および機能発現	量子計算	近畿大学理工学部応用化学科 藤原 尚
リコンビナントプリオン蛋白質のアミロイド線維の構造解析	NMR	岐阜大学人獣感染防御研究センター 桑田 一夫
単層カーボンナノチューブの選択的相互作用の発現と解明	量子計算	東京学芸大学教育学部 前田 優
ナノサイズ分子キャビティを活用した活性化学種の反応性制御	量子計算	東京工業大学大学院理工学研究科 後藤 敬
金属ナノ微粒子配列における局在光物性と局所配列構造の相関解明	SNOM	(独)物質・材料研究機構ナノ計測センター、筑波大学大学院数理物質科学研究科 北島 正弘
金属内包フラーレンの化学修飾による内包金属の動的制御	量子計算	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機構解明	量子計算	筑波大学先端学際領域研究センター 土屋 敬広
高分解能電子顕微鏡による炭素系超潤滑油物質の構造の解明	TEM	愛知教育大学教育学部 三浦 浩治
超高磁場固体 NMR を用いたラセン高分子の動的構造の比較	NMR	北海道大学大学院工学研究科 平沖 敏文
ナノスケール磁石構築のための磁気異方性金属錯体の開発	分子素子	東邦大学理学部化学科 加知 千裕
固体電解質ナノスイッチの作製とその特性評価	分子素子	(独)物質・材料研究機構 長谷川 剛
海洋生物由来の生物活性ナノ有機分子の構造解析	NMR	北海道大学大学院薬学研究院 小林 淳一
大規模計算を用いた酵素反応メカニズムの理論的解析	量子計算	大阪府立大学大学院理学系研究科 麻田 俊雄
マイクロ波選択加熱による非平衡動的過程を応用したナノ物質創成実験研究	TEM	核融合科学研究所・連携研究推進センター 高山 定次
ガスソース法により作製したカーボンナノチューブの透過電子顕微鏡観察	TEM	名城大学理工学部材料機能工学科 丸山 隆浩
金属結合型ペプチドの高次構造解析と超音波ゲル化機構の解明	NMR	大阪大学大学院基礎工学研究科 高谷 光

(2) 施設利用

課 題 名 (前期)	支援装置	代 表 者
正常型リコンビナントブリオントンパク質の構造解析	NMR	岐阜大学・人獣感染防御研究センター 桑田 一夫
酸化亜鉛電析膜の内部ナノ構造観察	SEM/FIB	岐阜大学大学院工学研究科 吉田 司
LB 膜の導電特性評価	分子素子	(株)荏原総合研究所 佐藤 弘一
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	TEM	東海興業(株)研究開発部 前川美穂子
課 題 名 (後期)	支援装置	代 表 者
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	TEM	東海興業(株)研究開発部 前川美穂子
フッ化物を用いた光学素子に関する研究	SEM/FIB	名古屋工業大学大学院工学研究科 小野 晋吾
赤外近接場顕微分光装置に使用する微小開口カンチレバーの試作開発	SEM/FIB	(財)高輝度光科学研究センター 森脇 太郎
磁性酸化物のナノ加工と観察	SEM/FIB	大阪大学大学院基礎工学研究科 多田 博一
3 糖体酵素基質 / 阻害剤の構造解析	NMR	(独)産業技術総合研究所北海道センター 清水 弘樹
固体 NMR によるゴムの加硫機構解明、劣化メカニズム解明	NMR	SRI 研究開発(株) 小林 将俊
実装不良発生メカニズムの解明および対策技術の確立	SEM/FIB	ソニーイーエムシーエス(株) 浅井 正幸 幸田テック
酸化亜鉛電析膜の内部ナノ構造観察	SEM/FIB	岐阜大学大学院工学研究科 吉田 司
分子クラスター電池を構成する電極材料の分析	ESCA	名古屋大学大学院理学研究科 吉川 浩史
炭素マトリックスに担持した分子クラスターの状態観察	TEM	名古屋大学大学院理学研究科 吉川 浩史
固体担持金属ナノ触媒を用いた有機変換反応の開発	NMR	琉球大学理学部海洋自然科学科 鈴鹿 俊雅
固体パルスシーケンスの作成	NMR	日本電子(株)名古屋支店 NM グループ 大谷 圭一

5-6 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

(文部科学省)

分子科学研究所は2006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」を推進している。並行して行って来た NAREGI プロジェクトは2007年度を最終年度としており、グリッドミドルウェアの実証研究が最終段階に入っている。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、進捗状況、今後の課題について以下に述べる。

5-6-1 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も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」にのっての技術基盤として大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よって、これまでの枠組みを大幅に越えることな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旨とする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

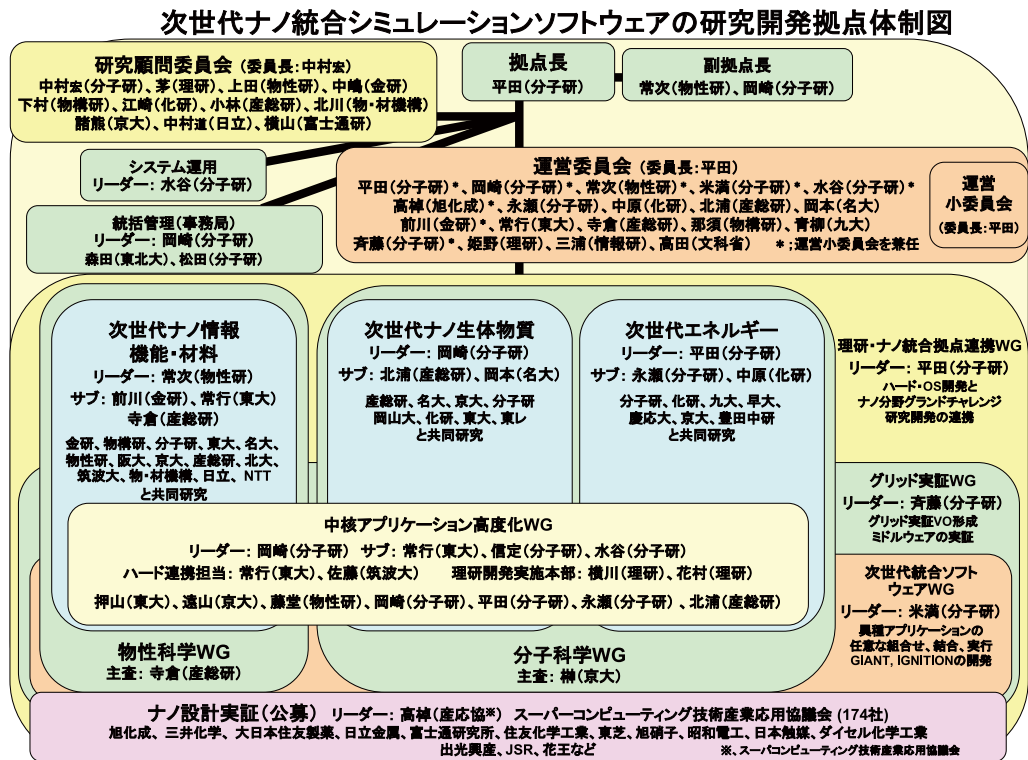
化石燃料に代わる恒久的エネルギー源として太陽エネルギーの固定、利用、貯蔵技術、特に、セルロースから酵素反応によりエタノールを生成する技術における計算科学的方法論の確立に貢献。

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。

5-6-2 研究体制

ナノ統合拠点の研究体制を下図に示す。



5-6-3 研究課題（個人）

ナノ統合拠点の研究課題を下表に示す。

1 次世代ナノ情報機能材料
次世代ナノ複合材料

課題名	氏名	所属
(1) ナノ複合電子・強度材料		
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	石橋 章司	産業技術総合研究所
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	毛利 哲夫	北海道大学大学院工学研究科
(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		
ナノ構造構成要素と複合系の機能	押山 淳	東京大学大学院工学系研究科
第一原理ナノ構造探査	常行 真司	東京大学大学院理学系研究科
(3) 電子励起によるナノ複合電子材料の機能制御		
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	那須奎一郎	高エネルギー加速器研究機構
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	杉野 修	東京大学物性研究所
(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		
高効率大規模電子状態計算手法の開発	寺倉 清之	産業技術総合研究所
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	川添 良幸	東北大学金属材料研究所

次世代ナノ電子材料

課題名	氏名	所属
(1) 次世代ナノ非線形光学素子開発		
強相関電子系におけるナノ非線形光学デバイスの理論	遠山 貴己	京都大学基礎物理学研究所
非マルコフ・非負定値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	那須奎一郎	高エネルギー加速器研究機構
光誘起集団電荷移動と伝導の制御	米満 賢治	自然科学研究機構分子科学研究所
(2) 新機能ナノ量子デバイス開発		
ナノスケール電子状態を用いた新規機能設計	永長 直人	東京大学大学院工学系研究科
低次元電子系の特異な状態の探索	小形 正男	東京大学大学院理学系研究科
量子ドット列におけるバンドエンジニアリングと電子物性制御	田村 浩之	N T T・物性科学基礎研究所
(3) スピン注入ナノスピントロニクス素子開発		
ナノスピントロニクス理論の構築	前川 禎通	東北大学金属材料研究所
複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	井上順一郎	名古屋大学大学院工学研究科
スピン注入型ナノ電子デバイス	市村 雅彦	日立製作所基礎研究所

次世代ナノ磁性材料

課題名	氏名	所属
(1) 超高記録密度磁気デバイス材料の構造制御		
自己組織化を用いたナノ磁性材料	常行 真司	東京大学大学院理学系研究科
(2) 新しい磁性発現機構をもつナノ磁気素子の開発		
分子磁性体での局所磁気構造	宮下 精二	東京大学大学院理学系研究科
ナノ磁性の第一原理計算	赤井 久純	大阪大学大学院理学研究科
(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		
格子変形の自由度のもとでの磁気相転移	藤堂 眞治	東京大学大学院工学系研究科
強相関電子系における新奇量子相	常次 宏一	東京大学物性研究所
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——	川島 直輝	東京大学物性研究所

2 次世代ナノ生体物質

課題名	氏名	所属
(1) タンパク質高度シミュレーション新規方法論の開発		
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——	北浦 和夫	産業技術総合研究所
拡張アンサンブルシミュレーションによるナノサイエンス研究	岡本 祐幸	名古屋大学大学院理学研究科
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	木下 正弘	京都大学エネルギー理工学研究所
生体分子系のプロトン輸送に関する基礎過程	三浦 伸一	金沢大学大学院自然科学研究科
(2) イオンチャネルの分子過程		
イオンチャネルの選択性 ——蛋白質によるイオンの選択的認識——	平田 文男	自然科学研究機構分子科学研究所
(3) ウイルスの分子科学		
ウイルスの全原子シミュレーション	岡崎 進	自然科学研究機構分子科学研究所
ナノチューブ中の水、水溶液：制約空間がもたらす新規な物性と相転移ダイナミクス	田中 秀樹	岡山大学大学院理学研究科

(4) 細胞膜の分子科学		
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——	平田 文男	自然科学研究機構分子科学研究所
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——	岡崎 進	自然科学研究機構分子科学研究所
がん発現にかかわる分子スイッチの分子動力学計算	斉藤 真司	自然科学研究機構分子科学研究所
(5) ナノ生体物質輸送		
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——	中原 勝	京都大学化学研究所
ミセル生成とミセルによる物質の取り込み、輸送	岡崎 進	自然科学研究機構分子科学研究所
細胞膜（脂質二重膜）における低分子の透過機構の研究	三上 益弘	産業技術総合研究所
高分子ゲルのダイナミクスと物質輸送	茂本 勇	東レ（株）機能材料研究所
(6) 新規ナノ生体物質の創生と利用		
既知ナノ生体物質の機能メカニズム解明	北尾 彰朗	東京大学分子細胞生物学研究所

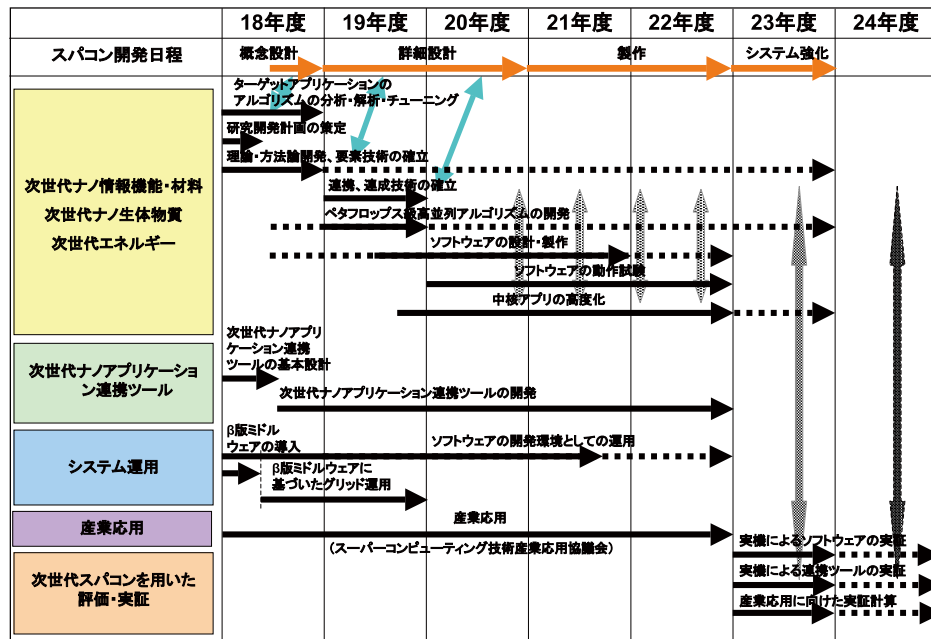
3 次世代エネルギー

課題名	氏名	所属
(1) 光触媒による太陽エネルギーの固定		
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	中井 浩巳	早稲田大学理工学術院
(2) 光合成による太陽エネルギーの固定		
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	藪下 聡	慶應義塾大学理工学部
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	信定 克幸	自然科学研究機構分子科学研究所
光エネルギー変換共役分子の先進的電子状態モデリング	柳井 毅	自然科学研究機構分子科学研究所
(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		
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	平田 文男	自然科学研究機構分子科学研究所
新規無触媒化学サイクルの創成	中原 勝	京都大学化学研究所
(4) 燃料電池の作動原理における分子過程の解明		
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	永瀬 茂	自然科学研究機構分子科学研究所
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	森田 明弘	東北大学大学院理学研究科
非断熱現象を利用した分子設計	南部 伸孝	九州大学情報基盤センター
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	兵頭 志明	豊田中央研究所計算物理研究室
(5) 高効率物質変換		
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	榊 茂好	京都大学大学院工学研究科
溶液内及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	加藤 重樹	京都大学大学院理学研究科
(6) 電極反応の解明		
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	青柳 睦	九州大学情報基盤センター

5-6-4 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



5-6-5 研究の進捗状況と課題

(1) グランドチャレンジ中核アプリの選定

昨年度の後半から本年度の前半にかけて、上記グランドチャレンジ3課題を解決するための中核となる6本のアプリケーションプログラムを選定した。それらは固体や分子の電子状態計算、液体・溶液系の統計力学および分子シミュレーションなどナノ分野の計算科学にとって不可欠の理論・方法論であり、物性科学（固体電子論）から3本、分子科学領域から3本のプログラムを選定した（下表参照）。

中核アプリケーションの概要

中核アプリケーション名	責任者氏名	概要
実空間第一原理ナノ物質シミュレータ	押山 淳 (筑波大)	10nm 以下の素子を利用した次世代エレクトロニクスのデバイス開発。 10万原子系を扱える電子状態計算と効率的位相空間探索プログラム。
動的密度行列繰り込み群法	遠山 貴巳 (京大基研)	電子の強い相関効果に起因する光照射量子現象の解明。 動的に拡張された密度行列繰り込み群法。
大規模並列量子モンテカルロ法	藤堂 真治 (東大物性研)	ナノ磁性体や電子系などの量子格子模型のシミュレーション。 並列化された量子モンテカルロ法、厳密対角化法などのプログラム。
高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト	岡崎 進 (分子研)	1000万原子系の巨大システムや自由エネルギーの計算。 長距離力を考慮した高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト。
RISM/3D-RISM	平田 文男 (分子研)	蛋白質などナノ分子の水和構造や水和自由エネルギーの計算。 分子の分布関数に関する積分方程式理論。
高速量子化学計算ソフト	永瀬 茂 (分子研) 北浦 和夫 (産総研)	電子相関を取り組んだ超巨大分子の電子状態計算。 FMO法に基づいた高精度高速大規模量子化学並列計算。

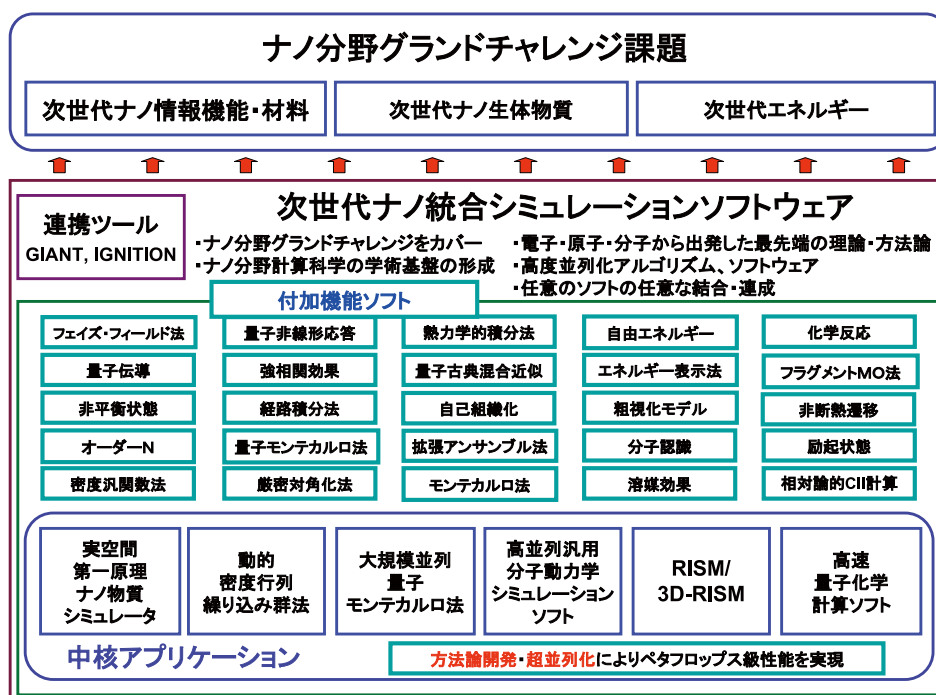
方法論開発・超並列化によりベタフロップス級性能を実現

これらの内5本は理研に設置されたターゲットアプリ検討委員会において次世代スパコンの概念・基本設計用のターゲットアプリとして選定され、概念・基本設計に貢献した。また、これらのうち分子動力学シミュレーションプログラムおよび実空間密度汎関数(RSDFT)プログラムに関しては次世代スパコンに向けた高度化(超並列化など)の作業をすでに開始している。

(2) ナノ統合シミュレーションプログラム

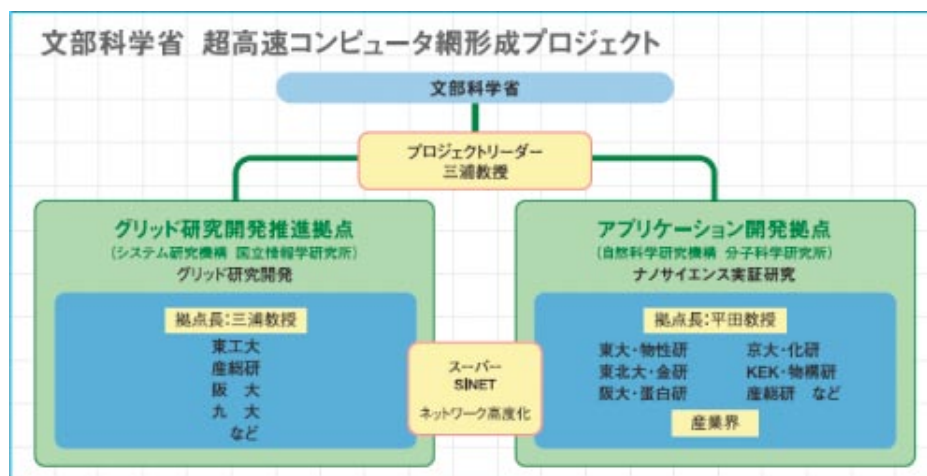
ナノスケールの諸現象は無限の広がりをもつ均一系と不均一な少数多体系が複雑にからみあったマルチスケール・マルチフィジックス現象であり、単一の理論や物理では対応できないものがほとんどである。上記6本の中核アプリは単一の物理現象(例えば、分子の電子状態)を解明する上では強力な武器であるが、それだけではナノ現象に太刀打できない。ナノ現象を解明するためにはこれらの理論・方法論およびプログラムを様々な組み合わせた方法論を開発する必要がある。しかしながら、全く異なる「物理」を組み合わせる場合「竹に木を継ぐ」ようなやり方では両方の方法論が死んでしまう。異なる階層の「物理」を整合的に結合する新しい理論・方法論の開発が必要である。(液体の統計力学(RISM理論)と分子の電子状態計算法(SCF)を結びつけて、溶液内の電子状態計算を可能にしたRISM-SCFはその例である。)さらに、従来、各階層の物理に対応するプログラムは異なる研究者によって開発されているため、それらのデータ構造もまちまちであるという事情も考慮する必要がある。これらの要請を考慮し、ナノ現象の多様性に対応するアプリケーションソフトとして開発を進めているのが「ナノ統合シミュレーションプログラム」である。その構造、機能および特徴は次のとおりである(下図参照)。

- ・個々の物理現象を高速に計算する6本の中核ソフト。
- ・それらの中核ソフトを多様な仕方で組み合わせてナノ現象に対応するための付加機能ソフト(物理変換・結合機能)
- ・中核ソフト間のデータ変換と共有を可能にする機能(GIANT)
- ・ユーザーの負担を最小限にして初期データ生成機能(IGNITION)



(3) NAREGI ナノ実証研究

NAREGI プロジェクトからの継続として、量子化学計算、分子動力学法、固体電子論、統計力学、物性物理等の方法論に基づき、ナノ物質の構造とその機能発現の解明に対し、NAREGI 環境の有用性の実証を進めている。



6月中旬から分子研グリッドコンピューティングシステムにグリッドミドルウェアβ2版のインストール作業を開始し、インストールが完了した機能から確認テストを進め、9月末にDetaGridを除くインストールが完了した。その後、グリッドミドルウェアβ2版でのメタコンピューティングおよびハイスループット計算などに関する実証として、アプリケーション（下記アプリケーション一覧の1から9）を用いたテストを実施してきた。これらの確認テスト、実運用に向けた実証研究用アプリケーションを通して約70件の問題点を見出し、情報研および関係機関の協力のもと問題解決を進めている。平成19年度はNAREGIプロジェクトの最終年度にあたる。そのため、これまでの実証研究用アプリに加え、下記一覧の10から22の新たに13本のアプリケーションを追加募集し、これらの22本のアプリを用いた実証を進めている。

また、分子研グリッドコンピューティングシステムと物性研をはじめとするユーザーサイドクラスタとの間でのナノサイエンスVO形成を進め、PSE機能を用いたアプリケーションの配信、VO内の利用可能計算サーバを有効活用などの実証を行う。

さらに、統合的グリッド環境での一般利用をめざし、1月末にはプロジェクト参加者への講習会を岡崎および東京で開催し、2月からは分子研グリッドコンピューティングシステムを中心とするVOにおいて、グリッド環境の一般利用を開始する。

最終評価のために用いるアプリケーション一覧

1	MP2 (GridMPI)	永瀬 (分子研)
2	非断熱遷移 (GridMPI)	那須 (物構研) 石田 (東芝)
3	熱力学的積分 (GridRPC)	岡崎 (分子研)
4	密度行列繰り込み群 (GridRPC)	遠山 (京大)
5	双極子系のEwald和 (GridRPC)	富田 (物性研)
6	RISM-Replica 交換 MC (連成計算)	平田 (分子研) 岡本 (名大)
7	MD-MO (連成計算)	岡崎 (分子研) 森田 (東北大)
8	Gaussian 1000 本 (ハイスループット)	高棹 (旭化成)
9	大規模 MD 可視化 (可視化)	岡崎 (分子研)
10	レプリカ交換 MC (GridMPI)	岡本 (名大)

11	大規模 MD (GridMPI)	兵頭 (豊田中研)
12	有限要素法 (GridMPI)	市村 (日立)
13	不規則系コンダクタンス (GridMPI)	伊藤、井上 (名大)
14	トランスコリレイティッド法電子状態計算 (GridMPI)	常行 (東大)
15	ALPS/parpack+looper (GridMPI)	藤堂 (東大)
16	スピン系のツリー近似計算 (GridMPI)	川島 (物性研)
17	積分方程式を用いた第一原理量子輸送計算 (GridMPI)	小林 (筑波大)
18	QMAS (GridMPI)	石橋 (産総研)
19	rtdft (GridMPI)	矢花 (筑波大)
20	FPSEID (GridMPI)	宮本 (NEC)
21	有限要素基底の電子状態計算法 (GridMPI)	土田 (産総研)
22	3D-RISM-FMO (連成計算)	高見 (九大)

(4) 各チームの研究進捗状況

本年度のグランドチャレンジ3課題の進捗状況は次のとおりである。(運営委員会資料、2007年8月31日(金)時点)

1 次世代ナノ情報機能・材料 次世代ナノ複合材料研究進捗報告

1) 研究内容の進捗

- ・平面波基底 PAW 法に基づく第一原理材料シミュレータ QMAS をプラットフォームとて、各種物性パラメータの微視的分布を得る計算ツールを開発・整備し、界面・点欠陥を含む様々な物質で適用研究を行なった。(石橋、田村、田中、香山、寺倉)
- ・絶縁膜中の欠陥への電子のトラップ準位について、クラスターモデルを用いた解析法を検討し、計算方法による準位の違いを調べた。(加賀爪、佐々木)
- ・カーボンナノチューブの曲げに関する形状記憶効果のメカニズムを明らかにした。(尾方)
- ・アルミニウムの粒界構造と粒界特性の関係を明らかにすべく、幾つかの粒界について第一原理計算が可能なように構造モデルを準備した。(上杉)
- ・組織形成のマルチスケール・シミュレーションにおける空間スケールの定量化のため、スピン系を対象として提案されていた経路確率法の自然逐次法を空孔媒介型拡散機構の取り扱いへ拡張した。(大野、毛利)
- ・Pd-H 系の規則相の全エネルギーを種々の空孔濃度を含む場合に対して FLAPW 法により算出した。(陳、毛利)
- ・Fe-Ni 系 Invar 合金の熱膨張特性と相安定性に及ぼす弾性エネルギーの効果の計算を行った。(陳、毛利)
- ・正方格子を対象に、クラスター変分法とフェーズフィールド法を組み合わせた規則 - 不規則逆位相境界の時間発展挙動の計算を行った。(毛利)
- ・炭素ナノ物質内のナノ空間への異種物質の挿入可能性と新奇物性の発現、またシトクローム酸化酵素中でのプロトン移動機構の解明について、密度汎関数理論に基づく計算を行った。(押山)
- ・超高圧下のシリケート構造変化について新しい知見を得た。(土屋)
- ・Wang-Landau のアルゴリズムに基づくマルチカノニカル法で、圧力一定のシミュレーションを安定動作させるアルゴリズムを得た。(常行、吉本)

- ・ TDDFT に基づく電子の励起ダイナミクス計算。方法論開発 (励起の散逸・非断熱過程), コード開発 (並列化), 応用 (吸収率の異常、表面散乱) など。(杉野、宮本)
- ・ 可視光誘起グラファイト - ダイヤモンド構造相転移に関連し, 4000 個程の炭素原子系に半経験的ポテンシャル法を適用し, 両相間のエネルギー障壁を算出したところ, 1.5 eV 程度である事が判明した。これは, チタン・サファイヤ・レーザー数発で十分である事を示す。(那須)
- ・ 有限要素基底を用いたオーダー N 法の応用計算を進め, 1000 原子超から成る液体エタノール系の第一原理分子動力学シミュレーションを行い, 十分な精度が出ていることを確認した。(土田)
- ・ グラフェンの電子デバイス応用に向け, オーダー N プログラム (OpenMX) を用いて電界下の第一原理計算を行い, 2 層の場合だけ電界に比例したバンドギャップが生じるという知見を得た。また, 金属と接することにより電子状態は 1 層少ない場合の特徴を示すことを明らかにした。(大淵)
- ・ DNA 塩基対の DFT 計算を CONQUEST で行い, PBE を用いることによって, 塩基間の水素結合が精度良く再現されることが分かった。さらに, DNA⁺ 水の系に適用し, 密度行列にもとづくオーダー N 法が精度良く行えることが分かった。(宮崎)
- ・ 密度行列を用いたオーダー N 法のプログラム CONQUEST の beta 版の公開 (5 月) を行った。(宮崎)
- ・ パナジウム (V) とベンゼン (Bz) からなる multiple-dekker クラスタ V_nBz_{n+1} の強磁性安定性機構を明らかにした。(Weng、尾崎、寺倉)
- ・ 分子のフント則を精密な配置間相互作用を取り込んだ分子軌道法計算によって算定し, 従来発表されていた CH₂ などの解釈の誤りの確認と正しい解釈に成功した。また, 鉄原子に対する拡散量子モンテカルロ法計算は相関相互作用を 50% 以上の精度で算定できるレベルを達成した。(川添)

2) 次世代スパコンに関する進捗

- ・ RSDFT プログラムの PACS-CS 上でのチューニングを進め, 現時点での実効性能は, 256 ノードを使用した計算で, 理論ピーク性能の約 10-20% である。

4) 学術論文 (省略)

5) 受賞・表彰など

- ・ 尾方成信 (大阪大学基礎工) 日本機械学会計算力学講演会優秀講演賞 2007.3
- ・ 尾方成信 (大阪大学基礎工) 日本機械学会賞 (論文) 2007.4
- ・ 尾方成信 (大阪大学基礎工) 2006-2007 大阪大学年間論文 100 選 2007.7
- ・ 重田育照 (筑波大学) 日本化学会および Royal Society of Chemistry PCCP (Physical Chemistry Chemical Physics) Prize

6) 昇進 (就職) など

- ・ 尾方成信 (大阪大学大学院基礎工学研究科機能創成専攻): 同工学研究科助教授より基礎工学研究科教授へ昇任
- ・ 邱宇 (Qiu Yu) 博士 (総研大物質構造科学専攻 (2006.9.31 卒業)): 浙江師範大学教授 (中国、金華市) に採用

1 ．次世代ナノ情報機能・材料 次世代ナノ電子材料研究進捗報告

1) 研究内容の進捗

- ・低濃度硼素注入ダイヤモンドの常伝導状態に関する光電子スペクトルを量子モンテカルロ法により計算し、この物質では常伝導体でも、フォノン過程による多重散乱構造がスペクトルに明瞭現れる等、強い電子格子相互作用が存在する事を理論的に立証した。(那須)
- ・転送行列法によるグリーン関数の計算により、新しい電子状態クラスである量子スピンホール系における局在問題を調べ、トポロジーにより保護された非局在状態の存在および、新しい普遍クラスの存在を見出した。(永長)
- ・埋め込み型から横結合型ヘテロ構造を変化させるシミュレーションを行ったところ、ポイントコンタクト(一番狭くなっているところ)のエネルギーの(フェルミ面に対する)高さによってファノ・パラメータの大きさや符号を変化させることができ、それによって遷移の様子が大きく変化することが分かった。(田村)
- ・TMR 素子の磁化反転層における電流誘起磁化反転シミュレーション技術を確立した。(市村)
- ・LDA 第 1 原理電子状態計算プログラムと量子モンテカルロ計算プログラムを組み合わせることにより、種々の磁性半導体物質探索のための大規模計算プログラムを完成させた。(前川)

2) 次世代スパコンに関する進捗

- ・動的密度行列繰り込み群法のプログラムの高速化を図るとともに並列化を高めた。

3) グリッド実証に関する進捗

- ・特になし

4) 学術論文(省略)

5) 受賞・表彰など

- ・村上修一 第 1 回日本物理学会若手奨励賞「スピンホール効果の理論」

6) 昇進(就職) など

- ・松枝宏明(東北大学理学研究科助手): 仙台電波工業専門高等学校助教(4 月)
- ・筒井健二(東北大学金属材料研究所助手): 独立行政法人日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門研究員(4 月)
- ・邱宇(Qiu Yu) 博士(総研大物質構造科学専攻(2006.9.31 卒業)): 浙江師範大学教授(中国、金華市) に採用
- ・伊藤博介: 関西大学システム理工学部准教授(2007 年 4 月 1 日)

1 ．次世代ナノ情報機能・材料 次世代ナノ磁性材料研究進捗報告

1) 研究内容の進捗

- ・N/Cu(100) 自己組織化表面構造に対する不純物吸着酸素の効果について実験・理論の両面から検討し、論文にまとめた。(常行)(物性研小森グループとの共同研究)
- ・量子系の粒子操作に関するプログラム、外場の変化による状態変化に関するプログラム弾性相互作用による相転移に関するプログラムを完成し、論文を発表した。(宮下)

- ・オーダ $N \cdot KKR$ 法を用いたナノ構造体を取り扱うための手法の開発が新たに進展した。これまでは物理的直感に基づいて、有効な参照系を設定することによってオーダ N を実現するという方法を用いてきたが、参照系という考えを捨て、純粋にアルゴリズムの問題として取り扱うことによって大幅な単純化が得られた。これにより計算時間の大きな短縮と計算の安定性が達成される可能性がでてきた。(赤井)
- ・長距離相互作用スピン系に対する $O(N)$ モンテカルロ法をフラストレーションのある系に拡張した。また $O(N)$ レプリカ交換法を開発した。(藤堂)
- ・磁気 4 重極相やスピンギャップ相などの新しいタイプの磁性相を高精度に計算するための新しい量子モンテカルロ法に基づくプログラム群を開発した。(川島)
- ・フラストレートした 2 次元と 3 次元スピン系の飽和磁場近傍の静的特性について詳細に研究を行い、有限温度での磁気転移の性質を調べた。(常次)

2) 次世代スパコンに関する進捗

- ・弾性格子グリーン関数のサブルーチンを組み込んだ、表面自己組織化シミュレーションのための分子動力学法コードを作成した。(常行)
- ・大規模量子ダイナミクスアルゴリズムを作成中。(宮下)
- ・超並列を視野にいれたコード開発を行っている。(赤井)
- ・超並列計算機用多重並列スケジューラ ALPS/parapack を整備し、レプリカ交換法用モジュールを作成した。GUI による格子エディタを開発した。(藤堂)
- ・スピン系のモンテカルロ法のさらなる高速化に向けて作業中。(常次)

5) 受賞・表彰など

- ・所 裕子(東京大学大学院理学系研究科宮下研究室) 日本化学会第 87 春季大会優秀講演賞 2007.4

6) 昇進(就職)など

- ・常行真司(東京大学大学院理学系研究科): 准教授より教授(2007.8.16 付)

2. 次世代ナノ生体物質研究進捗報告

1) 研究内容の進捗

- ・脂質膜やミセルなどのナノ生体物質、分子集合体への分子の付加、コンホメーション変化等様々なプロセスに対する自由エネルギー変化の計算に着手した。(岡崎)
- ・フラグメント分子軌道法をベースとした TDDFT 法(FMO-TDDFT)法を開発し、巨大分子系の励起状態計算を可能にした。(北浦)
- ・最近、新しく開発したマルチカノニカル・マルチオーバーラップ法をアルツハイマー病の原因ペプチドのフラグメントである $A\beta(29-42)$ の 2 分子系に適用して、2 つのペプチドが近づく時に、 β シート構造ができることを示した。(岡本)
- ・蛋白質立体構造予測用の斬新な方法を開発した。10 種類の蛋白質に対して、600-700 通りの構造セットの中から天然構造を射当ててことに成功した。(木下)

- ・癌の発現にかかわるタンパク質 Ras に関して分子動力学計算，電子状態計算（QM/MM 計算）を行った。Ras に結合することにより GTP 加水分解を促進するタンパク質 GAP が Ras に与える影響を明らかにした。（斉藤）
- ・球状ミセルと平面状二分子膜を比較し，頭部の親水性の強さと膜内物質分布の局在性の関連を明らかにした。超臨界水反応の QM/MM - 自由エネルギー解析によって，溶媒水分子の触媒能を定量的に示した。（中原）
- ・脂質二重膜における低分子の透過機構を解明するために，脂質二重膜を低分子が透過する時の自由エネルギーの高速高精度計算法を開発した。（三上）
- ・ポリマー材料中に存在する低分子の自由エネルギーを評価する技術を開発した。（茂本）
- ・T4 ファージ先端の脂質 2 重膜貫通シミュレーションの初期試行を行い，本格的なシミュレーションに必要な膜変形の概要を観察することに成功した。（北尾）

2) 次世代スパコンに関する進捗

- ・前年度までに開発した大規模系に対する長距離力を含む MD 計算のアルゴリズムに従って modylas の完全領域分割化の作業に着手し，これまでに 7 ～ 8 割がたの作業を終えた。（岡崎）
- ・フラグメント分子軌道法をベースとした TDDFT 法（FMO-TDDFT）法のプログラムを開発し，GAMESS に組み込んだ。（北浦）

3) グリッド実証に関する進捗

- ・ナノ初期情報生成ツールである IGNITION の機能付加作業を終了し，bug fix 作業を継続して行っている。今年度にはいつからでもすでに 30 件程度の修正を行ってきているが，問題となる bug は終息しつつあり，現在，暫定的な公開へ向けての最終段階に入りつつある。なお，これらの作業と並行して，マニュアルの整備も行っている。（岡崎）

4) 学術論文（省略）

5) 受賞・表彰など

6) 昇進（就職）など

- ・北浦和夫（産総研）：京都大学大学院薬学研究科教授に異動（2007.4.1）
- ・吉井範之（分子研）：ポスドクから姫路獨協大学薬学部准教授に採用（2007.4.1）
- ・山田篤志（分子研）：ポスドクから同助教に採用（2007.7.1）
- ・梶本真司（分子研）：ポスドクから東北大学大学院理学研究科助教に採用（2007.8.1）
- ・篠田恵子（分子研）：ポスドクから（株）三菱科学技術研究センター研究員に採用（2007.4.1）

3．次世代エネルギー研究進捗報告

1) 研究内容の進捗

- ・電気二重層キャパシタ（スーパーキャパシタ）の設計に不可欠な炭素細孔内の電気二重層の構造を REPLICARISM 理論により解明した。（平田）

- ・酵素反応やイオンチャネルの解析に不可欠な蛋白質による選択的イオン結合を 3D-RISM 理論により解明した。(平田)
- ・蛋白質の圧力変性の初期過程における水の役割を解明した。(平田) 3D-RISM 理論により求めた自由エネルギー曲面上での溶質のダイナミクスを記述する新しいシミュレーション手法を提案した。(平田)
- ・DC MP2 法を開発し、MP2 計算の $O(N)$ が達成された。(中井)
- ・周期系に対する新しい解析方法 (PBC-EDA) を開発し、固体中の不純物・欠陥などの定量的な解析が可能となった。(中井)
- ・比較的大きな分子の、二量体、三量体の励起状態における励起子モデルの検証を行っている。その他、複素基底関数法による共鳴状態からの緩和速度の定量的計算法を開発中である。(藪下)
- ・表面への電子エネルギー散逸の効果をとり込んだ表面吸着系電子状態理論の開発を行った。また、金チオラートクラスターの幾何学的構造と電子物性の詳細を明らかにし、金チオラートクラスターにおいては Au-S 結合が強固な籠状のネットワーク構造を作り、その籠の中に金コアクラスターを閉じ込める構造 (Core-in-Cage Cluster) が安定化の原因であることを見出した。(信定)
- ・大規模多参照量子化学計算に向けた、多参照正準変換電子相関理論を開発し、多重化学結合の解離を定量的に記述できることを数値的に検証した。(柳井)
- ・球状ミセルと平面状二分子膜を比較し、頭部の親水性の強さと膜内物質分布の局在性の関連を明らかにした。超臨界面反応の QM/MM - 自由エネルギー解析によって、溶媒水分子の触媒能を定量的に示した。(中原)
- ・SCS(Spin Component Scale)-MP2 法のエネルギー微分計算の高速化を行った。また、MP2 法による周期境界条件計算の並列プログラムの作成と電子配置を用いた量子モンテカルロ法の確立を行っている。(永瀬)
- ・酸水溶液界面においてヒドロニウムイオンが特異的に表面配列する構造と和周波スペクトルとの関係を明確に同定した。(森田)
- ・フッ素置換においても水素原子透過の可能性を見出した。また、新たに、ボロン繊維での可能性を探索し始めた。一方、水素分子を用いる方法はかなり困難であることがいろいろ調べ判明してきている。具体的には、非断熱遷移を起こすことは可能だが、ランダウ - ツェーナー型の擬交差であったり、透過障壁がかなり高いということが上げられる。Mg 等の埋め込む方法も考えたが、あまり芳しくなかった。一方、生体内で利用が可能と思われる新たな蛍光指示薬の理論および実験合成に成功した。(南部)
- ・射影演算子によって導いた粗視化動力学方程式にあらわれる運動力の項に基づき、ランダム力の“振幅”を分子動力学計算から見積もった。ブラウン粒子の拡散係数が良く一致することを確認した。(兵頭)
- ・前年度に引き続き全原子モデルによる厚さ 0.4 μm の油膜のせん断シミュレーションを行い、部分粘性モデルによる界面すべり発生機構を提示した。(兵頭)
- ・高効率物質変換反応で重要なアルカンの C-H 結合活性化反応の理論的研究を行い、反応機構と支配因子、重要な軌道相互作用を明らかにした。(榊)
- ・RISM-3D, PHASE, FMO の 3 連成計算による凝縮系界面の計算および流体力学 + 音波電波の連成解析について、プログラムを開発中。(青柳)

2) 次世代スパコンに関する進捗

- ・FMO の疎結合部分を含めた超並列化を遂行中。(青柳)

3) グリッド実証に関する進捗

- ・東工大・阪大・九大・国情を結ぶ NAREGIβII 環境を準備中。(青柳)

4) 学術論文(省略)

5) 受賞・表彰など

- ・松林伸幸 溶液化学研究会学術賞 2007.7.31

6) 昇進(就職)など

- ・森田明弘: 東北大学大学院理学研究科教授(4月)

6 . 研究領域の現状

6-1 論文発表状況

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
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
2006.9. ~ 2007.8.	2007	267	44

6-2 理論・計算分子科学研究領域

理論分子科学第一研究部門

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、金属内包フラーレンの $\text{La}_2@C_{80}$ のシリル化による内包金属の二次元ホッピング運動、 Sc_2C_2 を内包した C_{80} フラーレンの新規な構造と化学修飾、一次元に並んだ K_nC_{60} を内包したカーボンナノチューブの構造と電子特性、ナフタレンなどの芳香族化合物のカーボンナノチューブ表面への吸着の選択性へのホールドーピング効果、 ZnO ナノチューブの構造と安定性、 AlN ナノワイヤーとカーボンナノチューブあるいは BN ナノチューブからなるナノケーブルの構造と電子特性、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等を理論計算で明らかにして実験と共同して解明した。金属内包フラーレンの化学修飾と機能化の一連の実験との共同研究の成果は、*Chem. Commun.* の表紙や日経サイエンスの記事としても紹介された。
- b) 高周期元素は新しい結合と多種多様な機能電子系の宝庫である。このために、典型元素化学で話題のケイ素 - ケイ素三重結合化合物の構造と特異な反応、三重結合に匹敵するほど異常に短いガリウム - ガリウム距離をもつ化合物の構造、かさ高い置換基に立体保護されたスズおよび鉛の多重結合化合物と単結合化合物の結晶中と溶液中の構造、炭素置換基に囲まれたスズの超原子価化合物、 $(\text{ZnO})_n$ クラスターの構造と成長プロセス、ルミフラビンの酸化状態と還元状態の電子スペクトル等を理論と計算あるいは実験と共同して明らかにした。
- c) 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上手く取り扱えるように MP2 (second-order Møller Plesset perturbation) 法の並列高速化を昨年に引き続き行い、分子の対称性によるスピードアップも整備した。また、 SCS (spin-component-scaled) MP2 法のエネルギー微分計算の並列高速化により、非共有結合相互作用を精度高く取り込んで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した。周期系のバンド計算は、計算コストが低いのとプログラムが容易なのでほとんど例外なく密度汎関数法によっているのが現状であるが、ナノ系で重要な非共有結合相互作用を取り扱うことができない。このために、 MP2 法による周期境界条件計算の高速並列化のプログラムの作成に着手した。また、基底状態および励起状態の高精度なエネルギー計算を可能にするために、configuration state function (CSF) を用いたプロジェクトモンテカルロ (CSF-PMC) 法と名付ける理論的スキームをほぼ完成して、この方法の有効性を簡単な H_4 系や LiH の解離反応のテスト計算で確認した。

B-1) 学術論文

- Z. SLANINA and S. NAGASE**, “A Computational Characterization of $N_2@C_{60}$,” *Mol. Phys.* **104**, 3167–3171 (2006).
- W. SONG, J. LU, Z. GAO, M. NI, L. GUAN, Z. SHI, Z. GU, S. NAGASE, D. YU, H. YE and X. ZHANG**, “Structural and Electronic Properties of One Dimensional K_xC_{60} Crystal Encapsulated in Carbon Nanotube,” *Int. J. Mod. Phys. B* **21**, 1705–1714 (2007).
- Z. SLANINA, S. -L. LEE, F. UHLIK, L. ADAMOWICZ and S. NAGASE**, “Computing Relative Stabilities of Metallofullerenes by Gibbs Energy Treatments,” *Theor. Chem. Acc.* **117**, 315–322 (2007).
- N. TAKAGI and S. NAGASE**, “Effects of Bulky Substituent Groups on the Si–Si Triple Bonding in $RSi\equiv SiR$ and the Short Ga–Ga Distance in $Na_2[RGaGaR]$. A Theoretical Study,” *J. Organomet. Chem.* (a special issue) **692**, 217–224 (2007).
- Y. -K. CHOE, S. NAGASE and K. NISHIMOTO**, “Theoretical Study of the Electronic Spectra of Oxidized and Reduced States of Lumiflavin and Its Derivative,” *J. Comput. Chem.* **28**, 727–739 (2007).
- N. TAKAGI and S. NAGASE**, “Tin Analogues of Alkynes. Multiply Bonded Structures vs Singly Bonded Structures,” *Organometallics* **26**, 469–471 (2007).
- B. WANG, S. NAGASE, J. ZHAO and G. WANG**, “Structural Growth Sequences and Electronic Properties of Zinc Oxide Clusters $(ZnO)_n$ ($n = 2-18$),” *J. Phys. Chem. C* **111**, 4956–4963 (2007).
- D. G. FEDOROV, K. ISHIMURA, T. ISHIDA, K. KITaura, P. PULAY and S. NAGASE**, “Accuracy of the Three-Body Fragment Molecular Orbital Method Applied to Møller-Plesset Perturbation Theory,” *J. Comput. Chem.* **28**, 1467–1484 (2007).
- Z. SLANINA, F. UHLIK and S. NAGASE**, “Computational Evaluation of the Relative Production Yields in the $X@C_{74}$ Series ($X = Ca, Sr, \text{ and } Ba$),” *Chem. Phys. Lett.* **440**, 259–262 (2007).
- F. UHLIK, Z. SLANINA and S. NAGASE**, “ $Mg@C_{74}$ Isomers: Calculated Relative Concentrations and Comparison with $Ca@C_{74}$,” *Phys. Status Solidi A* **204**, 1905–1910 (2007).
- Z. SLANINA, F. UHLIK, S. LEE, L. ADAMOWICZ and S. NAGASE**, “Calculations on Endohedral C-74 Complexes,” *J. Nanosci. Nanotechnol.* **7**, 1339–1345 (2007).
- Z. SLANINA, F. UHLIK, X. ZHAO, L. ADAMOWICZ and S. NAGASE**, “Relative Stabilities of C-74 Isomers,” *Fullerenes, Nanotubes, Carbon Nanostruct.* **15**, 195–205 (2007).
- R. KINJO, M. ICHINOHE, A. SEKIGUCHI, N. TAKAGI, M. SUMIMOTO and S. NAGASE**, “Reactivity of a Disilyne $RSi\equiv SiR$ ($R = Si^iPr[CH(SiMe_3)_2]_2$) toward π -Bonds: Stereospecific Addition and a New Route to an Isolable 1,2-Disilabenzene,” *J. Am. Chem. Soc.* **129**, 7766–7767 (2007).
- K. ISHIMURA, P. PULAY and S. NAGASE**, “New Parallel Algorithm of MP2 Energy Gradient Calculations,” *J. Comput. Chem.* **28**, 2034–2042 (2007).
- T. WAKAHARA, M. YAMADA, S. TAKAHASHI, T. NAKAHODO, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, T. AKASAKA, M. KAKO, K. YOZA, E. HORN, N. MIZOROGI and S. NAGASE**, “Two-Dimensional Hopping Motion of Encapsulated La Atoms in Silylated $La_2@C_{80}$,” *Chem. Commun.* 2680–2682 (2007).
- Y. IIDUKA, T. WAKAHARA, K. NAKAJIMA, T. NAKAHODO, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, T. AKASAKA, K. YOZA, M. T. H. LIU, N. MIZOROGI and S. NAGASE**, “Experimental and Theoretical Studies of the Scandium Carbide Endohedral Metallofullerene $Sc_2C_2@C_{82}$ and Its Carbene Derivative,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **46**, 5562–5564 (2007).

N. TAKAGI and S. NAGASE, "Do Lead Analogues of Alkynes Take a Multiply Bonded Structure?" *Organometallics* **26**, 3627–3629 (2007).

Z. SLANINA, F. UHLIK, S. -L. LEE, L. ADAMOWICZ and S. NAGASE, "Computed Structure and Relative Stabilities of Be@C₇₄," *Int. J. Quantum Chem.* **107**, 2494–2498 (2007).

D. WANG, J. LU, L. LAI, M. NI, W. N. MEI, G. LI, S. NAGASE, Y. MAEDA, T. AKASAKA, Z. GAO and Y. ZHOU, "Effects of Hole Doping on Selectivity of Naphthalene towards Single-Wall Carbon Nanotubes," *Comput. Mater. Sci.* **40**, 354–358 (2007).

B. WANG, S. NAGASE, J. ZHAO and G. WANG, "The Stability and Electronic Structure of Single-Walled ZnO Nanotubes by Density Functional Theory," *Nanotechnology* **18**, 345706 (2007).

J. LU, L. LAI, G. LUO, J. ZHOU, R. QIN, D. WANG, L. WANG, W. N. MEI, G. LI, Z. GAO, S. NAGASE, Y. MAEDA, T. AKASAKA and D. YU, "Why Semiconducting Single-Wall Carbon Nanotubes Are Separated from Their Metallic Counterparts?" *Small* **3**, 1566–1576 (2007).

M. SAITO, S. IMAIZUMI, T. TAJIMA, K. ISHIMURA and S. NAGASE, "Synthesis and Structure of Pentaorganostannate Having Five Carbon Substituents," *J. Am. Chem. Soc.* **129**, 10974–10975 (2007).

Y. MAEDA, M. HASHIMOTO, T. HASEGAWA, M. KANDA, T. TSUCHIYA, T. WAKAHARA, T. AKASAKA, Y. MIYAUCHI, Y. MARUYAMA, J. LU and S. NAGASE, "Extraction of Metallic Nanotubes of Zeolite-Supported Single-Walled Carbon Nanotubes Synthesized from Alcohol," *NANO* **2**, 221–226 (2007).

Z. SLANINA, F. UHLIK, S. LEE, L. ADAMOWICZ and S. NAGASE, "Computations of Production Yields for Ba@C₇₄ and Yb@C₇₄," *Mol. Sim.* **33**, 563–568 (2007).

Z. ZHOU and S. NAGASE, "Coaxial Nanocables of AlN Nanowire Core and Carbon/BN Nanotube Shell," *J. Phys. Chem. C* **111**, 18533–18537 (2007).

E. RIVARD, R. C. FISCHER, R. WOLF, Y. PENG, W. A. MERRILL, N. D. SCHLEY, Z. XHU, L. PU, J. C. FETTINGER, S. J. TEAT, I. NOWIK, R. H. HERBER, N. TAKAGI, S. NAGASE and P. P. POWER, "Isomeric Forms of Heavier Main Group Hydrides: Experimental and Theoretical Studies of the [Sn(Ar)H]₂ (Ar = Terphenyl) System," *J. Am. Chem. Soc.* **129**, 16197–16208 (2007).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Z. SLANINA, F. UHLIK and S. NAGASE, "Computational Screening of Metallofullerenes for Nanoscience: X@C₇₄ Series (X = Ca, Sr, Ba)," 2007 NSTI Nanotechnology Conference and Trade Show-NSTI Nanotech 2007, Technical Proceedings, Nano Science and Technology Institute, Cambridge, MA, pp. 489–492 (2007).

B-3) 総説、著書

前田 優、長谷川正、赤坂 健、永瀬 茂,「単層CNTの化学修飾と分散化」ナノカーボンハンドブック, 遠藤守信、飯島澄男監修, エヌ・ティー・エス出版, pp. 253–260 (2007).

土屋敬広、赤坂 健、永瀬 茂,「金属内包フラーレンの化学修飾」ナノカーボンハンドブック, 遠藤守信、飯島澄男監修, エヌ・ティー・エス出版, pp. 608–613 (2007).

Z. SLANINA, K. KOBAYASHI and S. NAGASE, “Isomeric Fullerenes and Endofullerenes: Stability Computations on Promising Nanoscience Agents,” in *Handbook on Theoretical Computational Nanotechnology*, M. Rieth, W. Schommers, Eds., American Scientific Publishers; Los Angeles, **Vol. 8**, pp. 457–505 (2007).

B-4) 招待講演

S. NAGASE and N. TAKAGI, “Heavier Group 14 Element Analogues of Alkynes,” Symposium on Practicing Chemistry with Theoretical Tools, Hawaii (U.S.A.), January 2007.

永瀬 茂, 「金属内包フラーレンの構造」第32回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム, 名古屋, 2007年2月.

永瀬 茂, 「大きな分子の量子化学計算」第3回分子・物質シミュレーション中核拠点連携研究会, 岡崎, 2007年3月.

S. NAGASE, “MP2 Energy and Gradient Calculations,” Molecular Quantum Mechanics: Analytical Gradients and Beyond, Budapest (Hungary), May 2007.

永瀬 茂, 「高周期典型元素の特性——多重結合の構造と反応」理学研究流動シンポジウム(元素の個性. どう見るか、どうつくるか、どう使うか) 東京, 2007年11月.

S. NAGASE, “MP2 Calculations of Large Molecules,” The 2nd Japan-Czech-Slovakia Joint Symposium for Theoretical/Computational Chemistry, December 2007.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

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

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

分子構造総合討論会運営委員会幹事.

フラーレン・ナノチューブ研究会幹事.

学会の組織委員

Korea-Japan Joint Symposium on Theoretical and Computational Chemistry 組織委員長.

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.

戦略的創造研究推進事業 ERATO 型研究中間評価委員.

学会誌編集委員

Silicon Chemistry, Subject Editor (2001–).

J. Comput. Chem., Editorial Advisory Board (2004–).

Mol. Phys., Editorial Board (2006–).

Theochem, Editorial Board (2007–).

B-8) 大学での講義、客員

城西大学大学院, 集中講義「有機物質設計特論」2007年7月19-21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-9) 学位授与

溝呂木直美, “Theoretical Study of Structures and Chemical Functionalization of Endohedral Metallofullerenes,” 2007年3月, 博士(理学)

B-10) 外部獲得資金

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、変化のバリエーションを飛躍的に増大させることができる。ナノスケールでの分子設計理論と実用的な量子化学計算コンピューターシミュレーション法を確立し、新規な機能性分子を開発する。これらの分子を効率的に合成実現するためには、従来のように小さい分子から順次組み上げていくのではなく、自己集合的に一度に組織化する機構の解明と理論予測はきわめて重要である。また、現在の量子化学的手法は、小さな分子の設計や構造、電子状態、反応を精度よく取り扱えるが、ナノスケールでの取り扱いには飛躍的な進展が望まれている。

信 定 克 幸 (准教授)(2004 年 6 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：分子物理学、理論化学

A-2) 研究課題：

- a) 電子エネルギーの散逸を伴うナノ構造物質の電子ダイナミクス
- b) 有機分子で保護された金属クラスターの電子物性
- c) 電極反応の理論

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と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。先ずこの研究課題を、多電子ダイナミクスを記述するための方法論の開発と電子エネルギーの量子散逸を取り扱うための理論的手法の開発の問題に大別し、各々の問題点に焦点を絞った研究を進めている。多電子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。一方、電子エネルギーの量子散逸の研究においては、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た。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することに成功した。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が可能となった。
- 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。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体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。また、金クラスターがチオラート分子と結合することによって、多量体化した金クラスターを形成することができると理論的に示した。これはボトムアップ的手法により金クラスターを集積化することが可能であることを意味しており、材料物性科学の観点からも興味深い研究結果を与えることができた。
- c) 電極反応は、電子状態理論、溶液論、表面・界面の理論等の分子科学の主要な理論が関与する極めて複雑な研究対象である。当然、量子論的に正確に電極反応を取り扱うことは非常に難しい。我々は、理論的方法論開発の第一段階として、有限温度密度汎関数理論に基づく化学ポテンシャル一定の電子状態計算と誘電体モデルによる溶媒和記述の手法を組み合わせた方法を開発し、電極反応の量子化学的解明を行った。

B-1) 学術論文

- T. IWASA and K. NOBUSADA**, “Theoretical Investigation of Optimized Structures of Thiolated Gold Cluster $[\text{Au}_{25}(\text{SCH}_3)_{18}]^+$,” *J. Phys. Chem. C* **111**, 45–49 (2007).
- K. NOBUSADA and K. YABANA**, “Photoinduced Electric Currents in Ring-Shaped Molecules by Circularly Polarized Laser Pulses,” *Phys. Rev. A* **75**, 032518 (7 pages) (2007).
- Y. KUBOTA and K. NOBUSADA**, “Efficient Numerical Method for Calculating Exciton States in Quantum Boxes,” *Phys. Lett. A* **369**, 128–131 (2007).
- T. IWASA and K. NOBUSADA**, “Gold-Thiolate Core-in-Cage Cluster $[\text{Au}_{25}(\text{SCH}_3)_{18}]$ Shows Localized Spins in Charged States,” *Chem. Phys. Lett.* **441**, 268–272 (2007).
- K. IKEDA, Y. KOBAYASHI, Y. NEGISHI, M. SETO, T. IWASA, K. NOBUSADA, T. TSUKUDA and N. KOJIMA**, “Thiolate-Induced Structural Reconstruction of Gold Clusters Probed by ^{197}Au Mössbauer Spectroscopy,” *J. Am. Chem. Soc.* **129**, 7230–7231 (2007).
- K. NOBUSADA and T. IWASA**, “Oligomeric Gold Clusters with Vertex-Sharing Bi- and Triicosahedral Structures,” *J. Phys. Chem. C* **111**, 14279–14282 (2007).
- T. YASUIKE and K. NOBUSADA**, “Open-Boundary Cluster Model for Calculation of Adsorbate-Surface Electronic States,” *Phys. Rev. B* **235401** (12 pages) (2007).
- K. SHIRATORI and K. NOBUSADA**, “Finite-Temperature Density Functional Calculation with Polarizable Continuum Model in Electrochemical Environment,” *Chem. Phys. Lett.* **451**, 158–162 (2007).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- Y. KUBOTA and K. NOBUSADA**, “An Efficient Numerical Method for Exciton States in Quantum Boxes,” *Comput. Phys. Commun.* **177**, 43 (2007).
- K. SHIRATORI and K. NOBUSADA**, “Electronic Structure Calculations at Constant Chemical Potential toward the Application to Electrochemistry,” *Comput. Phys. Commun.* **177**, 47 (2007).
- K. NOBUSADA and K. YABANA**, “Electric Currents in Ring-Shaped Molecules Induced by Circularly Polarized Laser Pulses,” *Comput. Phys. Commun.* **177**, 54 (2007).

B-4) 招待講演

- K. NOBUSADA**, “Nonlinear electron dynamics induced by femtosecond laser pulses: Electric currents in ring-shaped molecules,” International Symposium on Molecular Science of Ultrafast Electronic Dynamics, Sendai (Japan), May 2007.
- 信定克幸, 「金属 - 分子複合系クラスターの電子物性と散逸系電子ダイナミクス」コンピューターによる材料開発・物質設計を考える会, 東京, 2007年4月.
- 信定克幸, 「特異な構造を持つ金チオラートクラスターの電子物性」日本物理学会, 札幌, 2007年9月.
- 信定克幸, 「ナノメートルサイズ金属クラスターの電子物性とダイナミクス」科学研究費特定領域研究, 東京, 2007年11月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本物理学会領域1 (原子・分子分野)世話人 (2003–2004).
科学技術振興機構地域振興事業評価委員会専門委員 (2005–2006).
文部科学省科学技術・学術審議会専門委員 (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).
理論化学シンポジウム運営委員会代表 (2006–).

B-8) 大学での講義、客員

筑波大学計算科学研究センター, 共同研究員, 2006年6月–.
総合研究大学院大学物理科学研究科, 「計算化学」2007年7月18日–7月20日.

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–2007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, 電極反応などの系において, 多電子がどのような振る舞いをするのか, 特に非線形光学応答や電荷移行反応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。

A-1) 専門領域：量子化学、理論化学、計算化学

A-2) 研究課題：

a) 量子化学的手法に基づく多参照電子状態理論の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 電子やエネルギーの移動が化学の基本であるなら、我々はそれらの化学プロセスをどのような記述できるだろうか？当研究グループでは、化学現象の本質が「電子と電子との複雑な多体相互作用の複雑な量子効果」である化学現象や化学反応をターゲットに、その高精度な分子モデリングを可能とするような量子化学的な手法開発を目指している。特に着目するのは、多重化学結合と解離、ポリマー、ナノチューブ、生体反応中心などの共役分子の光化学、金属化合物の電子状態などに表れる「複雑な電子状態」であり、その解明は大変興味が持たれている一方で、理論的な取り扱いにはチャレンジングな問題（多参照問題）である。多参照電子状態を正しく記述するためのキーとなる物理は、原子間スケールで凝縮した電子状態に由来する強い電子相関効果であり、この相関効果の問題の複雑さは分子サイズに対して指数関数的に複雑化し、既存の量子化学計算法ではこの現象を効率よく高精度で計算することができない。当研究では、この複雑な電子状態を扱う強力な新規手法として「正準変換理論（CT法）」の基礎理論を確立した。CT法は、Hamiltonian を指数型の多体演算子でユニタリー変換を行い、強い相関と弱い相関との相互作用の構造を有効ハミルトニアン $H = e^{-A} H e^A$ として構築する。特徴的な点として、複雑な強い相関の構造は、対応する密度行列を通して取り扱われるため、飛躍的に計算効率がよい。有効ハミルトニアンに現れる高次の電子相関に関して、三体演算子を低次の多体演算子へと分解する手法を用いて近似的に記述する。発表論文では、従来型の多参照 CI 法の計算精度を、実行速度で 1,2 桁高速に再現できることを示した。また、共役 π 軌道の非局在的な電子相関を、ab initio 密度行列繰り込み群（DMRG）法の厳密対角化により、多配置 CASSCF 波動関数で記述するための手法開発を行っている。既に、これまで絶対取扱不可能だと思われたサイズの大規模な CASSCF 計算を実現している。配置数では $10^{20\sim30}$ の（天文学的）電子配置数を扱い、同時に軌道最適化を行える。C24 までのポリアセチレンの全 π 価電子軌道の CASSCF 計算を行い、その電子励起状態を記述した。

B-1) 学術論文

S. HIRATA, T. YANAI, R. J. HARRISON, M. KAMIYA and P. -D. FAN, “High-Order Electron-Correlation Methods with Scalar Relativistic and Spin–Orbit Corrections,” *J. Chem. Phys.* **126**, 024104 (14 pages) (2007).

T. YANAI, R. J. HARRISON, T. NAKAJIMA, Y. ISHIKAWA and K. HIRAO, “New Implementation of Molecular Double Point-Group Symmetry in Four-Component Relativistic Gaussian-Type Spinors,” *Int. J. Quantum Chem.* **107**, 1382–1389 (2007).

T. YANAI and G. K.-L. CHAN, “A Canonical Transformation Theory from Extended Normal Ordering,” *J. Chem. Phys.* **127**, 104107 (14 pages) (2007).

B-3) 総説、著書

G. K-L. CHAN and T. YANAI, "Canonical Transformation Theory for Dynamic Correlations in Multi-reference Problems," in *Advances in Chemical Physics*, Vol. 134 "REDUCED-DENSITY-MATRIX MECHANICS: WITH APPLICATION TO MANY-ELECTRON ATOMS AND MOLECULES," D. A. Mazziotti, Ed., Wiley; New York, pp. 343–384 (2007).

B-4) 招待講演

柳井 毅,「高精度量子化学計算の理論開発：マルチ分解能法と多参照正準変換電子相関理論」分子研研究会「分子科学における連成シミュレーションの基礎理論と応用」岡崎(分子研)2007年6月.

T. YANAI, "Canonical Transformation Theory for Dynamic Correlations in Multireference Problems," The 3rd Asian Pacific Conference on Theoretical & Computational Chemistry, Beijing (China), September 2007.

T. YANAI, "Quantum chemistry with canonical transformation and renormalization group," The 2nd Japan-Czech-Slovakia Joint Symposium for Theoretical/Computational Chemistry, Fukui Institute, Kyoto, December 2007.

B-7) 学会および社会的活動

その他

「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」理論・計算分子科学コミュニティWGメンバー(2007–).

B-8) 大学での講義、客員

総合研究大学院大学物理科学研究科,「機能分子基礎理論」2007年前期.

C) 研究活動の課題と展望

当該研究活動で当面課題とする問題は,多重化学結合と解離,ポリマー,ナノチューブ,生体反応中心などの共役分子の光化学 金属化合物の電子状態などに表れる「複雑な電子状態」であり 理論的な取り扱いはチャレンジングな問題(多参照問題)である。問題の複雑さは,問題のサイズ(分子サイズ)に対して指数関数的に複雑化するので,この問題を解くのはなかなか容易ではない。当研究グループが開発を進める「密度行列繰り込み群」および「正準変換理論」は,いままでにない大規模でプレディクティブな多参照量子化学計算を実現する可能性を秘めている。本年度の成果はその可能性を実証することができたが,一方で理論の実装はまだ実験段階にあり,よりリアルな系の定量的な大規模多参照計算を実践するに至っていない。これまで開発した基礎理論をベースに,ペタスケール大型計算機が間近に利用可能になることを念頭に置きつつ,手法の洗練された実装,アルゴリズム開発を行う予定である。

理論分子科学第二研究部門

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

当研究グループでは統計力学理論に基づき液体・溶液の構造、ダイナミクス、相転移を含む熱力学挙動、およびその中で化学反応を解明する理論の構築を目指して研究を進めている。特に、最近は様々な界面における液体の構造とそこにおける化学過程に着目しており、電極 - 溶液界面、気液界面、液液界面、炭素細孔界面、生体分子界面における溶液の構造を分子レベルで解明して来た。これらの溶液界面は触媒や酵素に典型的に見られるように化学反応の反応場として重要な役割を演じている。溶液界面は極めて不均一な構造をしており「平均場」近似を基礎とする従来の統計力学が最も苦手とするところであった。しかしながら、最近、我々は液体の統計力学のひとつである 3 次元 RISM 理論が蛋白質内部の狭い空間に閉じ込められた小分子の分布を実験 (X 線や中性子回折) を越える分解能で記述できることを見出した。これは酵素反応やイオンチャネルなど生命現象の素過程で重要な役割を演じる「分子認識」の問題が統計力学の対象になったことを意味する歴史的な発展である。以下に、本年度の主な成果として水分子透過チャネルであるアクアポリンとセルロース分解酵素に関する研究を紹介する。

- a) アクアポリン (水チャネル) の水透過機構の解明：アクアポリンは 4 個の分子チャネルからなる複合チャネルであるが、水分子を透過することにより細胞内の水の濃度を調節する重要な蛋白質である。このチャネルの水分子透過機構 (特に、ゲーティングのメカニズム) を解明するためにはチャネル内部の水分子の分布を求める必要があるが、現在の実験の分解能では蛋白質の構造と水分子の分布の相関を求めることは極めて難しい。我々は 3 次元 RISM 理論を用いて、結晶構造が決定しているアクアポリン (AQPZ) の 4 つの構造に関して、そのチャネル内部の水分子の分布を決定することに初めて成功した。これらの 4 つのうちひとつは水分子を透過している時の構造であり、他の 3 つは透過しない時のそれである。水の分布関数の解析から、チャネルを構成しているひとつのアミノ酸残基 (R189) の配向がチャネルの開閉機能 (ゲーティング) に関わっていることを明らかにした。[*Chem. Phys. Lett.* **449**, 196 (2007) に既報]
- b) セルロース分解酵素の反応中間体を理論的に同定：セルロース (糖鎖高分子) から単糖類を生成するプロセスは太陽エネルギーを有効に利用する上でその鍵となる化学過程であり、それを実現する最も効率の良い方法は酵素反応であると考えられる。この反応は加水分解反応であり、セルロースとともに水分子もひとつの基質であるため、酵素 (蛋白質) 内の水分子の位置が反応機構の解明に本質的意義を有する。しかしながら、実験的に酵素内の水分子の位置を決定することは不可能に近い。その理由はこの水分子が「反応中間体」であり、反応によって消滅してしまうからである。我々は、X 線結晶構造解析から得られたセルロースオリゴマー (6 量体) とセルロース分解酵

素の複合錯体を水に浸し、その周辺および活性部位における水分子の分布を3次元 RISM 理論により求めた。その結果、活性部位を構成する二つのグルタミン酸 (Glu186 と Glu359) のカルボニル酸素および糖鎖のグリコシド酸素からの水素結合距離内に水分子の強いピークを見出した。我々はこの水分子がグリコシド結合を求核的に攻撃する基質であると結論した。[*J. Am. Chem. Soc. (Communication)* に投稿中]

B-1) 学術論文

A. E. KOBRYN and F. HIRATA, “Statistical-Mechanical Theory of Ultrasonic Absorption in Molecular Liquids,” *J. Chem. Phys.* **126**, 044504 (2 pages) (2007).

T. IMAI, R. HIRAOKA, A. KOVALENKO and F. HIRATA, “Locating Missing Water Molecules in Protein Cavities by the Three-Dimensional Reference Interaction Site Model Theory of Molecular Solvation,” *Proteins: Struct., Funct., Bioinf.* **66**, 804–813 (2007).

Y. IKUTA, Y. MARUYAMA, M. MATSUGAMI and F. HIRATA, “Probing Cations Recognized by a Crown Ether with the 3D-RISM Theory,” *Chem. Phys. Lett.* **433**, 403–408 (2007).

A. TANIMURA, A. KOVALENKO and F. HIRATA, “Structure of Electrolyte Solutions Sorbed in Carbon Nanospaces, Studied by the Replica RISM Theory,” *Langmuir* **23**, 1507–1517 (2007).

T. YAMAZAKI, T. IMAI, F. HIRATA and A. KOVALENKO, “Theoretical Study of the Cosolvent Effect on the Partial Molar Volume Change of Staphylococcal Nuclease Associated with Pressure Denaturation,” *J. Phys. Chem. B* **111**, 1206–1212 (2007).

N. YOSHIDA, S. PHONPHANPHANEE and F. HIRATA, “Selective Ion-Binding by Protein Probed with the Statistical Mechanical Integral Equation Theory,” *J. Phys. Chem. B* **111**, 4588–4595 (2007).

Y. IKUTA, Y. MARUYAMA, F. HIRATA and S. TOMODA, “Theoretical Study of Solvent Effect on Diastereo Selectivity in Protonation of Methyl 3-Fluorobutanoate Anion by Ethanol: Application of the 3D-RISM Theory,” *THEOCHEM* **811**, 183–190 (2007).

T. IMAI, S. OHYAMA, A. KOVALENKO and F. HIRATA, “Theoretical Study of the Partial Molar Volume Change Associated with Pressure-Induced Structural Transition of Ubiquitin,” *Protein Sci.* **16**, 1927–1933 (2007).

T. IMAI, H. HARANO, M. KINOSHITA and A. KOVALENKO, “A Theoretical Analysis on Changes in Thermodynamic Quantities upon Protein Folding: Essential Role of Hydration,” *J. Chem. Phys.* **126**, 225102 (9 pages) (2007).

T. IMAI, R. HIRAOKA, T. SETO, A. KOVALENKO and F. HIRATA, “Three-Dimensional Distribution Function Theory for the Prediction of Protein-Ligand Binding Sites and Affinities: Application to the Binding of Noble Gases to Hen Egg-White Lysozyme in Aqueous Solution,” *J. Phys. Chem. B* **111**, 11585 (2007).

T. MIYATA and F. HIRATA, “Combination of Molecular Dynamics Method and 3d-RISM Theory for Conformational Sampling of Large Flexible Molecules in Solution,” *J. Comput. Chem.* 10.1002/jcc. 20844.

S. PHONPHANPHANEE, N. YOSHIDA and F. HIRATA, “A Statistical Mechanics Study on Equilibrium Water Distribution in the Channel of Aquaporin,” *Chem. Phys. Lett.* **449**, 196–201 (2007).

S. -H. CHONG, M. AICHELE, H. MEYER, M. FUCHS and J. BASCHNAGEL, “Structural and Conformational Dynamics of Supercooled Polymer Melts: Insights from First-Principles Theory and Simulations,” *Phys. Rev. E* **76**, 051806 (22 pages) (2007).

T. MIYATA, “Reference Interaction Site Model Study on the Anomeric Equilibrium of D-Glucose in Aqueous Solution,” *Cond. Matt. Phys.* **10**, 433–439 (2007).

N. YOSHIDA, “Analytical Free Energy Gradient for the Molecular Ornstein-Zernike Self-Consistent-Field Method,” *Cond. Matt. Phys.* **10**, 363–372 (2007).

Y. MARUYAMA, M. MATSUGAMI and Y. IKUTA, “Probing Cations Recognized by a Crown Ether with the 3D-RISM Theory. II. 18-Crown-6 Ether,” *Cond. Matt. Phys.* **10**, 315–322 (2007).

B-3) 総説、著書

F. HIRATA, “Condensed Matter Physics (Ukraine),” **volume 10**, number 3 & 4 (2007). (special issues dedicated to the 60th anniversary of Fumio Hirata)

B-4) 招待講演

平田文男, 「グリッド環境を利用したこれからの計算化学」 NAREGI シンポジウム 2007, 東京(一橋記念講堂) 2007年2月.

平田文男, 「RISM: today & Future」 「RISM 理論の新展開」 研究会, 岡崎コンファレンスセンター, 2007年3月.

平田文男, 「分子の言葉で綴る生命現象の理論: 現状と課題」 日本化学会第87春期年会, 第二次先端ウオッチングイブニングセッション「生命分子科学の進展」 関西大学千里山キャンパス, 2007年3月.

F. HIRATA, “Molecular Recognition Realized by the 3D-RISM Theory,” 60th Birthday lecture tour in USA, UC San Diego, Univ. Houston, Texas University Rutgers University, Austin (U.S.A.) April 2007.

平田文男, 「生命現象の素過程としての分子認識」 九州工業大学生命情報工学科バイオサーモプロジェクト, 九州工業大学, 2007年10月.

F. HIRATA, “Molecular Recognition Realized by the Statistical Mechanics Theory,” 9th International Symposium on Polymers for Advanced Technologies (PAT2007), Shanghai (China), October 2007.

F. HIRATA, “A grand challenge application for the next-generation supercomputer in the soft nano-science,” First French-Japanese Workshop “Petascale Applications, Algorithms and Programming(PAAP),” RIKEN (Tokyo), November 2007.

吉田紀生, 「3D-RISM 理論の生体分子への応用 The application of 3D-RISM theory to biomolecule」 科学研究費補助金特定領域研究「次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法の開発」 A02班主催ミニワークショップ 大規模・高精度電子状態計算手法に関する研究会 (独)物質・材料研究機構, つくば市, 2007年7月.

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.

Condensed Matter Physics, Editorial Board.

J. Chem. Phys., Editorial Board (2007–2010).

その他

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」拠点長 (2003–2007).

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」拠点長 (2006–).

B-8) 大学での講義、客員

名古屋大学大学院理学研究科, 集中講義「液体の統計力学：構造とダイナミクス」7月23日–7月25日.

B-10) 外部獲得資金

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).

特定領域研究(計画)「生体内化学過程の統計力学理論」平田文男 (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

我々は過去数年の研究において「分子認識の理論」とも呼ぶべき新しい統計力学理論を構築しつつある。それは溶液内の超分子や蛋白質などによる分子認識(複合体形成)過程を第一原理的に実現する方法論である。しかしながら、現在までの理論では十分に扱うことができない問題がある。それは蛋白質の構造揺らぎと共役した機能発現過程(化学過程)である。酵素反応やイオンチャネルなど蛋白質の機能発現においては基質分子を蛋白内に取り込む過程(分子認識)が重要であるが、このプロセスは単に「鍵と鍵孔」のような機械的なフィッティング過程ではない。例えば、酵素反応の場合、酵素の反応ポケット周辺の構造が変化して、基質を取り込む現象は実験的にも良く知られている。また、イオンチャネルにイオンを取り込む際の「ゲーティング」という機構も同様の構造揺らぎによって実現される。このような蛋白質の構造揺らぎと共役した化学過程を取り扱うために、溶液のダイナミクスと共役した蛋白質の構造揺らぎを記述する理論の発展は今後の重要な課題である。このような理論を発展させる上で、構造揺らぎのスケールに応じて二つの方向が考えられる。ひとつは蛋白質のフォールディングのようにグローバルな構造揺らぎを追跡する場合で、この場合は構造変化の時間的分解能よりはそのグローバルな安定構造を探索することが重要である。この問題に対して我々はすでに3D-RISM理論と拡張アンサンブル法を組み合わせた方法論を提案しており、最近、分子動力学法と組み合わせた新しい方法論を開発した。一方、酵素反応の反応速度を追跡する場合のように、蛋白質の比較的速い構造揺らぎが関与する場合には、溶液のダイナミクスと蛋白質の構造揺らぎとの動的相関を記述する理論が必要である。我々は一般化ランジェヴィアン理論と3D-RISM/RISM理論を結合した新たな理論の開発に着手する予定である。

米 満 賢 治 (准教授) (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) 有機塩 (EDO-TTF)₂PF₆ の光誘起電荷新秩序とコヒーレンスのプローブ依存
- b) スピン・パイエルス絶縁体の光誘起ポラロン状態とスピン電荷結合励起
- c) α 型および θ 型有機塩 (BEDT-TTF)₂X の電荷秩序相転移の詳細比較
- d) 金属絶縁体界面を通した電荷輸送特性の絶縁機構による違い

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 擬 1 次元 1/4 フィリング系の有機塩 (EDO-TTF)₂PF₆ は、(0110) 型電荷秩序をもつ絶縁相において光照射すると伝導度が桁違いに上がるため、光誘起絶縁体金属転移とみなされてきた。しかし、光誘起伝導度スペクトルの形状は高温金属相のそれと大きく異なり、謎であった。そこで従来のパイエルス・ホルシュタイン・ハバードモデルを拡張し、 π 電子間の長距離クーロン相互作用とアニオンによる電子格子相互作用を考慮した。これらは、平衡状態の性質をほとんど変えないように繰り込むことが可能だが、光誘起ダイナミクスを本質的に変える。観測されている過渡スペクトルを再現するパラメタでは、(1010) 型の新たな電荷秩序とキャリアーが光照射により生成されていた。スペクトルは高エネルギーではコヒーレントに、低エネルギーではインコヒーレントに振動しており、これも実験を再現する。これは観測するエネルギーに対応して、電子運動のスケールが違うことによる。
- b) 1 次元スピン・パイエルス絶縁体の K-TCNQ は、光照射により二量化が弱まりギャップが減少する様子が理論的によく説明されていたが、光照射直後に現れるギャップ内状態の起源が謎であった。格子緩和を必要としない純粋に電子的な瞬時の変化だとすると、伝導度スペクトルのドルーデ成分がないことと矛盾する。そこで、パイエルス型とホルシュタイン型の電子格子相互作用を考慮し、格子緩和の強さを変えながら伝導度スペクトルを計算した。ギャップ内状態のエネルギーを再現するにはパイエルス型の格子歪みが必要なことをつきとめた。ギャップ内状態は、格子自由度がなければ分離しているスピンと電荷の結合した励起状態であることを、励起エネルギーおよびスピン密度と電荷密度の相対分布の解析評価から示した。
- c) 2 次元 1/4 フィリング系の α 型および θ 型の BEDT-TTF 塩は、ともに長距離クーロン相互作用が効いて、低温で電荷秩序をもつ。しかし θ 型は電子格子相互作用なしでは、低温での結晶構造も水平ストライプ型の電荷秩序も再現されないこと、特に分子回転によるトランスファー積分の変調が効くこと、 α 型は電子格子相互作用の影響が小さいことを示してきた。どちらの塩も不連続転移をするが、 θ 型はとびが大きく、 α 型はとびが小さいことも理論的に再現できた。 θ 型では高温で 3 倍周期の電荷相関をもつことと関係している。これらにより電荷秩序の光誘起融解ダイナミクスにおける格子効果を計算するための基礎データを得られた。
- d) 金属と絶縁体を接すると一般に仕事関数が異なるためにショットキー障壁が生じる。通常のバンド絶縁体の場合は、電圧の向きによって電流の絶対値が大きく変わる整流作用が現れ、モット絶縁体の場合は、整流作用が抑制されることを示してきた。しかし、界面付近のポテンシャル変化を求める際に、これまで収束が悪く電流を過小評価していた。これを回避するため、ポワソン方程式を解く際に電子密度とポテンシャルの関係を仮定することにより解析的に解を求め、それをを用いた量子的時間発展計算を行った。バンド絶縁体とモット絶縁体の電流電圧特性を実験結果と比較し、非常に良い一致をみた。

B-1) 学術論文

- Y. TANAKA and K. YONEMITSU**, “Effects of Electron-Lattice Coupling on Charge Order in θ -(ET)₂X,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 053708 (5 pages) (2007).
- S. MIYASHITA and K. YONEMITSU**, “Charge Ordering in θ -(BEDT-TTF)₂RbZn(SCN)₄: Cooperative Effects of Electron Correlations and Lattice Distortions,” *Phys. Rev. B* **75**, 245112 (6 pages) (2007).
- N. MAESHIMA and K. YONEMITSU**, “Charge-Transfer Excitations in One-Dimensional Dimerized Mott Insulators,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 074713 (5 pages) (2007).
- H. INOUE and K. YONEMITSU**, “Relaxation Process in the Photoinduced Neutral-Ionic Paraelectric–Ferroelectric Phase Transition in Tetrathiafulvalene-*p*-Chloranil,” *Phys. Rev. B* **75**, 235125 (13 pages) (2007).
- K. YONEMITSU and N. MAESHIMA**, “Photoinduced Melting of Charge Order in a Quarter-Filled Electron System Coupled with Different Types of Phonons,” *Phys. Rev. B* **76**, 075105 (6 pages) (2007).
- K. YONEMITSU, N. MAESHIMA and T. HASEGAWA**, “Suppression of Rectification at Metal–Mott-Insulator Interfaces,” *Phys. Rev. B* **76**, 235118 (7 pages) (2007).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- N. MAESHIMA and K. YONEMITSU**, “Theory of Optical Responses of Photoexcited Halogen-Bridged Metal Complexes in Different Insulating Phases,” *Multifunctional Conducting Molecular Materials*, G. Saito, F. Wudl, R. C. Haddon, K. Tanigaki, T. Enoki, H. E. Katz and M. Maesato, Eds., RSC; Cambridge, 185–188 (2007).
- K. YONEMITSU**, “Mechanism of Ambipolar Field-Effect Transistors on One-Dimensional Organic Mott Insulators,” *Multifunctional Conducting Molecular Materials*, G. Saito, F. Wudl, R. C. Haddon, K. Tanigaki, T. Enoki, H. E. Katz and M. Maesato, Eds., RSC; Cambridge, 276–281 (2007).

B-3) 総説、著書

- 米満賢治, 「光で電子を一斉に動かし物性を変えるしくみの理論」*光アライアンス (Optical Alliance)* **18**, No.7, 29–33 (2007).

B-4) 招待講演

- 米満賢治, 「強相関電子系としての分子性物質の非平衡協力現象」第22回日本原子力研究開発機構・兵庫県立大学合同コロキウム, SPring-8, 2007年2月.
- K. YONEMITSU**, “Theoretical Approaches to Photoinduced Phase Transition Dynamics,” 2nd France-Japan Advanced School on Chemistry and Physics of Molecular Materials, Tokyo (Japan), March 2007.
- K. YONEMITSU and N. MAESHIMA**, “Photoinduced Melting Dynamics in Spin-Peierls and Charge-Ordered Systems,” 4th Japan-France Symposium on Molecular Materials: Electronics, Photonics and Spintronics, Tokyo (Japan), March 2007.
- 米満賢治、前島展也, 「1/4 フィルド電子系の電荷秩序に対する異なるフォノンの役割と光誘起融解ダイナミクス」物質科学セミナー, 東京工業大学, 2007年4月.
- 米満賢治, 「光誘起相転移ダイナミクスの理論: 秩序の融解と過渡スペクトル」分子性導体の機能・構造に関する研究と放射光利用研究会, SPring-8, 2007年6月.

K. YONEMITSU, “Photoinduced Melting of Charge and Lattice Orders Viewed from Theoretical Transient Spectra,” Pre-conference “Photoinduced Phase Transition” Seminar, Wroclaw (Poland), June 2007.

K. YONEMITSU, “Photoinduced Charge Order and Melting Dynamics in Quarter-Filled Organic Conductors,” 9th China-Japan Joint Symposium on Conduction and Photoconduction in Organic Solids and Related Phenomena, Beijing (China), October 2007.

K. YONEMITSU, “Suppressed Rectification and Ambipolar Field-Effect Injections through Metal–Mott-Insulator Interfaces,” Oak Ridge National Laboratory Materials Science and Technology Seminar, Oak Ridge (U.S.A.), November 2007.

K. YONEMITSU, “Photoinduced Charge Order and Melting Dynamics in 1/4-Filled Organic Conductors,” International Meeting of Japan-France Core-to-Core Project, Rennes (France), December 2007.

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 (1996–1997, 1998–2000).

日本物理学会第56期代議員 (2000–2001).

日本物理学会領域7 (分子性固体・有機導体分野) 世話人 (2003–2004).

日本物理学会第63期～第64期代議員 (2007–).

学会誌編集委員

日本物理学会誌, 編集委員 (1998–1999).

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

B-10) 外部獲得資金

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).

基盤研究(C), 「分子性低次元導体の光誘起相転移動力学の理論」 米満賢治 (2007年–2010年).

C) 研究活動の課題と展望

これまで強相関電子系としての分子性物質が非平衡状態において発現する機能やダイナミクスを中心に研究してきた。現実には重要でありながら強相関電子系としては取り扱いが難しいものとして緩和過程がある。系と熱浴の結合でなく、系そのものの性質が緩和速度に影響している可能性が、光誘起ダイナミクスに関して示唆されながら、まだ誰も答えられていない。また、金属絶縁体界面を通した電荷輸送について、これまで量子的時間発展に基づいた計算を行ってきた。しかし、定常状態を扱うには金属電極や摂動の導入に無限大を考慮する必要がある。これらに共通の課題は、数値計算の可能な有限系での非平衡ダイナミクスと無限系との関係である。これらにアプローチすべく、解析的な方法と数値計算を組み合わせることを考えている。界面を通した輸送については電流のほか熱流を、非平衡環境を与えるものとして電場のほかに温度勾配をも含め、より広い視点から電子系の非平衡ダイナミクスを研究していく。

計算分子科学研究部門

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) 水溶液中における両親媒性溶質分子の自己集合体生成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 分子振動ポピュレーション緩和や振動状態間デコヒーレンスなど、溶液中における溶質の量子力学を取り扱うことのできる計算機シミュレーション手法の開発を進めている。これまですでに、調和振動子浴近似に従った経路積分影響汎関数理論に基づいた方法論や、注目している溶質の量子系に対しては時間依存のシュレディンガー方程式を解きながらも溶媒の自由度に対しては古典的なニュートンの運動方程式を仮定する量子 - 古典混合系近似に従った方法論を展開してきているが、これらにより、溶液中における量子系の非断熱な時間発展を一定の近似の下で解析することが可能となった。今年度は特に、溶質の状態間のエンタングルメントを解析し得る方法論を確立すべく定式化を行い、数値計算プログラムの開発に着手した。
- 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。今年度は特に、断熱表示での注目している系と溶媒に対する運動方程式を導出し、モデル計算を行った。
- c) 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で高並列汎用 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、ミセルの疎水核中への分子の取り込みについて検討を行った。また、コレステロールを含む脂質二重層膜に対する MD 計算を行い、NMR 実験との関係においてプロトンの関わる結合の回転の相関関数を求めた。

B-1) 学術論文

Y. OKAMOTO, T. MIKAMI, N. YOSHII and S. OKAZAKI, "A Molecular Analysis of the Vibrational Energy Relaxation Mechanism of the CN^- Ion in Water Based upon Path Integral Influence Functional Theory Combined with a Dipole Expansion of the Solute-Solvent Interaction," *J. Mol. Liq.* **134**, 34-39 (2007).

N. YOSHII and S. OKAZAKI, "Free Energy of Water Permeation into Hydrophobic Core of Sodium Dodecyl Sulfate Micelle by Molecular Dynamics Calculation," *J. Chem. Phys.* **126**, 096101 (3 pages) (2007).

S. KAJIMOTO, N. YOSHII, J. HOBLEY, H. FUKUMURA and S. OKAZAKI, "Electrostatic Potential Gap at the Interface between Triethylamine and Water Phases Studied by Molecular Dynamics Simulation," *Chem. Phys. Lett.* **448**, 70–74 (2007).

N. YOSHII and S. OKAZAKI, "A Molecular Dynamics Study of Structure and Dynamics of Surfactant Molecules in SDS Spherical Micelle," *Cond. Matt. Phys.* **4**, 573–578 (2007).

B-4) 招待講演

N. YOSHII and S. OKAZAKI, "A molecular dynamics study of free energy of micelle formation in water," 62nd Calorimetry Conference held jointly with The Japan Society of Calorimetry and Thermal Analysis (Calcon 2007), Hawaii (U.S.A.), August 2007.

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–).

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総合 PT 情報通信 PT 研究開発領域検討会委員 (2008–).

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) 大学での講義、客員

国立情報学研究所, 客員教授.

名古屋大学, 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。

斉 藤 真 司 (教授) (2005 年 10 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：理論化学

A-2) 研究課題：

- a) 過冷却水のダイナミクス、多孔質媒体中の粒子のガラス転移の理論研究
- b) 生体高分子における構造揺らぎと反応の理論研究
- 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。水においては、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い。我々は、分子動力学計算を用い過冷却水の構造・密度・エネルギー揺らぎの解析を進めている。また、薄膜や多孔質媒体などの制限空間におけるガラス転移に関する研究も進めている。バルク状態で液体相であっても、固定粒子の増加とともに運動が遅くなりガラス相に変化すること、固定粒子の密度により 2 種類のガラス転移が存在することを明らかにした。さらに、パーコレーション閾値に近い非常に高い固定粒子密度において、流動粒子密度を増やすと自由体積が減少するにも関わらずガラス相から液体相に転移し、さらに流動粒子密度を増やすと再びガラス相になるリエントラント現象があることを明らかにした。
- 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 Ras が活性型に固定されると、細胞増殖が異常に続き癌となる。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、GTP 加水分解反応前後の構造や揺らぎの変化が、どのように反応（機能発現）に影響しているか分子動力学法、電子状態計算を用い調べている。その結果、GAP の結合により加水分解反応に関わる水分子の動きが抑制され、反応の妨げとなる揺らぎを抑えていること等が明らかとなってきた。現在、反応機構の解析も進めている。
- c) 凝縮系のダイナミクスを解析法として、多次元分光法の理論解析を進めている。我々は、2 次元赤外分光法により水の分子間運動の理論研究を行っている。その結果、衡振運動の相関が約 110 fs で喪失すること、また、約 180 fs で衡振運動から分子間並進運動へ緩和することを明らかにした。さらに、非調和性の強い水の分子間並進運動が、これら運動の相関の喪失および緩和に大きな影響を及ぼしていることを明らかにした。このように、水中の速い緩和が、高速な衡振運動の存在だけによるものではなく、衡振運動に比べ 3 倍以上も遅い分子間並進運動によって引き起こされることを明らかにした。

B-1) 学術論文

M. KAMIYA, S. SAITO and I. OHMINE, "Proton Transfer and Associated Molecular Rearrangements in Photocycle of Photoactive Yellow Protein; Role of Water Molecular Migration on Proton Transfer Reaction," *J. Phys. Chem. B* **111**, 2948–2956 (2007).

B-4) 招待講演

S. SAITO, "Theoretical Two-Dimensional Spectroscopy of Water," Japan-Korea Symposium, Jeju (Korea), July 2007.

S. SAITO, "Theoretical Two-Dimensional Spectroscopy of Water," Joint Conference of JMLG/EMLG Meeting 2007 and 30th Symposium on Solution Chemistry of Japan, Fukuoka (Japan), November 2007.

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-).

分子シミュレーション研究会幹事 (2007-).

日本化学会東海支部幹事 (2007-).

B-8) 大学での講義、客員

名古屋大学理学部, 「物理化学基礎」 2007年前期.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「機能分子基礎理論」 2007年 7月-9月.

東京大学大学院総合文化研究科, 関連基礎科学特別講義I「溶液の分子論的ダイナミクスと分光解析」 2007年 12月10日-12月12日.

東京大学大学院総合文化研究科, 客員助教授, 2005年 4月-2006年 3月, 客員教授, 2006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、液体や過冷却水のダイナミクス、多孔質媒体における粒子のガラス転移、生体高分子における構造揺らぎと反応、さらに、多次元分光法に基づくダイナミクスの理論研究を進めている。

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。ポテンシャルエネルギーの変化、密度変化によるエネルギー揺らぎの変化を明らかにし、液体構造変化に由来する遅い揺らぎの解析を進める。

多孔質媒体における粒子のダイナミクスの詳細は、未だに明らかになっていない部分が多い。今後、2種類のガラス転移における揺らぎの違い、リエントラント現象における流動性の回復の分子論的機構などについて解析を進める。

生体高分子における構造揺らぎと反応の解析として、細胞増殖に関わるRasにおけるGTPの加水分解反応の解析をさらに進める。とくに、GTPの加水分解反応がどのような機構で、また、何によって引き起こされるのかを明らかにする。

多次元分光による凝縮系ダイナミクスの解析として、2次元赤外分光法に基づく理論研究を過冷却水や氷へと展開し、温度、構造により緩和過程がどのように変化するかを明らかにする。さらに、溶液系の1次元および多次元分光法の解析を行い、溶質の存在により水の運動がどのような影響を受けるのかなど溶液のダイナミクスの詳細を解析する。

森 田 明 弘 (准教授) (2004 年 1 月 1 日 ~ 2007 年 3 月 31 日)^{*}

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

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、界面構造をプローブする実験手法として近年広く用いられるようになってきた。とくに液体界面を分子レベルで観測する手法として他に類例がなく有力であり、電気化学、高分子化学、大気化学など多くの関連分野への展開が図られている。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。本年の成果としては、電解質水溶液および酸水溶液界面の構造解析に関して新たな進展を得た。電解質水溶液界面におけるイオンの分布は、誘電体モデルによる鏡像電荷を超えて、イオン種によって多様であることが近年の分子シミュレーションによって予想されているが、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た。そこで本研究グループでは、界面和周波分光の実験結果を精密に解析し、Br⁻ や I⁻ のようなアニオンでは確かに界面から露出する状態が実験的に観測されていることを実証し、詳細に報告した。また酸水溶液界面に対しても同様の解析を行い、ヒドロニウムイオン H₃O⁺ が界面第 1 層で特異的に存在することの確かな証拠を与えることができた。これらは、和周波分光の有効性を拡大するうえでも重要な成果となった。
- 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とともに、上記の和周波分光を支配する非線形分極を表現するうえでも必要である。本年は、水溶液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、上記の計算に応用した。さらに和周波分光を記述できる分子モデルの一般化を目指して、charge response kernel (CRK) 理論に基づいて、アルキル分子鎖の分子モデリング手法を開発した。

B-1) 学術論文

- T. ISHIYAMA and A. MORITA**, "Molecular Dynamics Study of Gas-Liquid Aqueous Sodium Halide Interfaces I. Flexible and Polarizable Molecular Modeling and Interfacial Properties," *J. Phys. Chem. C* **111**, 721–737 (2007).
- T. ISHIYAMA and A. MORITA**, "Molecular Dynamics Study of Gas-Liquid Aqueous Sodium Halide Interfaces II. Analysis of Vibrational Sum Frequency Generation Spectra," *J. Phys. Chem. C* **111**, 738–748 (2007).
- T. ISHIYAMA and A. MORITA**, "Molecular Dynamics Analysis of Interfacial Structures and Sum Frequency Generation Spectra of Aqueous Hydrogen Halide Solutions," *J. Phys. Chem. A* **111**, 9277–9285 (2007).

B-4) 招待講演

森田明弘, 「エアロゾル表面の分子論と界面物質移動の理論的検討」第1回「エアロゾルの核生成 - CCN - 雲微物理 - 気候システム」ワークショップ, 横浜, 2007年2月.

A. MORITA, "Molecular dynamics study of interfacial sum frequency generation spectroscopy," 12th Korea-Japan Joint Symposium on Frontiers of Molecular Science "Leading-Edge and the Future of Photo-Molecular Science," Jeju (Korea), July 2007.

A. MORITA and T. ISHIYAMA, "Computational Analysis of Interfacial Sum Frequency Generation Spectroscopy," 234th ACS National Meeting, Symposium on "Recent Advances in Studies of Molecular Processes at Interfaces," Boston (U.S.A.), August 2007.

森田明弘, 「分子軌道計算に基づくモデリングとMD計算の組み合わせによる界面和周波発生分光の第一原理的シミュレーション手法の開発」分子研研究会「分子科学における連成シミュレーションの基礎理論と応用」岡崎, 2007年8月.

A. MORITA, "Theoretical Aspects of Interfacial Sum Frequency Generation Spectroscopy," 1st Asian Science Forum, Sendai, September 2007.

森田明弘, 「分子シミュレーションと和周波分光で探る溶液界面の電気二重層構造の多様性」第27回物理化学コロキウム, 山形, 2007年9月.

森田明弘, 「界面和周波分光における実験と理論のインタープレイ」科研費特定研究「実在系の分子理論」A02, A03班合同研究会, 東京, 2007年11月.

A. MORITA, "Local Interface Structure of Electrolyte Solutions Probed by Sum Frequency Generation and Molecular Simulation," 2nd Japan-Czech-Slovakia Joint Symposium for Theoretical/Computational Chemistry, Kyoto (Japan), December 2007.

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).

第1回分子科学討論会実行委員 (2007).

学会誌編集委員

分子シミュレーション研究会誌「アンサンブル」編集委員 (2007-).

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).

特定領域研究「実在系の分子理論」(公募)代表者 (2007).

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).

特定領域研究,「実験と理論の連携による界面と周波発生分光の解析」森田明弘(2007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

本年度初頭に東北大学に転任となり,本年度は引き続き分子研の兼任として研究活動を行った。界面と周波分光の理論計算は世界的にも初めての試みであり,分子研在職中に上記のアイデアを具体化するうえで,分子研のスタッフや設備等には非常にお世話になったことを感謝したい。しかし今度萌芽的段階を超えて,界面現象の解明に大きく貢献できる実用的な理論的方法論とするためには,まだ多くの仕事が残されている。今後,理論自体を深化させるとともに,大規模計算を活用した幅広い応用を図って,研究の領域を広げてゆきたい。また,後進の指導にも新たに力を注いでゆきたいと考えている。

*) 2007 年 4 月 1 日東北大学大学院理学研究科教授,分子科学研究所教授兼任

6-3 光分子科学研究領域

光分子科学第一研究部門

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有機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数年前に完成し、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、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。また電子線描画等による任意形状の 2 次元金属ナノ構造で、特徴的なプラズモン共鳴の解明と制御を目指した研究を開始している。
- d) 貴金属微粒子を凝集・配列した試料の近接場領域での光学的性質に関する研究を、所外との共同研究で行っている。我々は近接場イメージングによって、微粒子凝集体における微粒子間空隙に生じる強い光電場とその表面増強ラマン散乱への寄与を、初めて実験的に実証することに成功している。これを発展させ、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研究を進めている。また金属微粒子を用いた新たなイメージング法の開発、光反応場の研究への展開の可能性を探っている。

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. IMURA and H. OKAMOTO, “Ultrafast Near-Field Microscopy of Single Gold Nanoparticles,” *Proc. SPIE* **6471**, 647103-1–647103-9 (2007).

H. OKAMOTO and K. IMURA, “Imaging of Optical Field Distributions and Plasmon Wavefunctions in Metal Nanoparticles,” *Proc. SPIE* **6642**, 66420A-1–66420A-9 (2007).

B-4) 招待講演

K. IMURA and H. OKAMOTO, “Ultrafast near-field microscopy of single gold nanoparticles,” SPIE Photonics West, Ultrafast Phenomena in Semiconductors and Nanostructure materials XI (Conference 6471A), San Jose (U.S.A.), January 2007.

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」日本分光学会中部支部平成18年度講演会 分子・ナノ・バルクをつなぐスペクトロスコピー, 名古屋, 2007年1月.

岡本裕巳, 井村考平, 「金属ナノ粒子系のプラズモンダイナミクス: 近接場イメージングによる研究」日本物理学会2007年春季大会, 鹿児島, 2007年3月.

井村考平, 「近接場分光イメージングの新手法の開拓とナノ物質の局所励起と波動関数の研究」日本化学会第87春季年会, 吹田, 2007年3月.

岡本裕巳, 井村考平, 「金属微粒子系における光電場分布とプラズモン波動関数の近接場イメージング」日本化学会第87春季年会, 吹田, 2007年3月.

H. OKAMOTO and K. IMURA, “Imaging of Optical Field Distributions and Plasmon Wavefunctions in Metal Nanoparticles,” SPIE Optics & Photonics 2007, Plasmonics: Nanoimaging, Nanofabrication, and their Applications III (Conference 6642), San Diego (U.S.A.), August 2007.

岡本裕巳, 井村考平, 「近接場光学イメージング: 貴金属微粒子系における局在光電場とプラズモン」分子研研究会「放射光と表面電子顕微鏡——顕微ナノ材料化学のあたらしい進展」岡崎, 2007年9月.

H. OKAMOTO and K. IMURA, “Near-field imaging of optical fields and plasmon wavefunctions in metal nanoparticles,” The Colloquium Spectroscopicum Internationale XXXV (35th International Conference on Spectroscopy), Xiamen (China), September 2007.

井村考平, 「近接場イメージングによる貴金属微粒子の表面プラズモンの研究」平成19年度日本分光学会年次講演会, 東京, 2007年11月.

岡本裕巳, 井村考平, 「ナノ分光イメージング: 金属ナノ構造における光電場分布と波動関数」東京大学物性研究所短期研究会, 柏, 2007年11月.

岡本裕巳, 井村考平, 「金属微粒子系における局在光電場の近接場イメージング」日本光学会年次学術講演会シンポジウム, 吹田, 2007年11月.

H. OKAMOTO and K. IMURA, “Near-field optical imaging of nanoscale optical fields and plasmon waves,” 14th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (ICSPM14), Atagawa (Japan), December 2007.

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).
井村考平, 光科学技術研究振興財団研究者表彰 (2007).
井村考平, 日本化学会進歩賞 (2007).
井村考平, 日本分光学会賞(奨励賞) (2007).

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-8) 大学での講義、客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「分子分光基礎論」 2007年12月10日–12日.

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-2007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-2007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-).

特定領域研究(光-分子強結合場)「近接場顕微分光に基づく光反応場の動的可視化・制御」岡本裕巳(2007年-).

C) 研究活動の課題と展望

数年前から、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。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、金属ナノ構造の性質・機能(特に光電場増強に基づく光学特性、新たな光反応場としての機能)の新たな可能性や、プラズモン電場、波動関数の空間制御等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。今年度は諸般の事情でプロダクティビティーが見かけ上落ちてしまったが、次年度はこれを是非とも挽回したい。

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) 非断熱励起によって生成する量子波束の実験的特定
- d) 高分解能非線形コヒーレント分光の開発
- e) 強レーザー場イオン化ダイナミクスについての分光学的研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 大振幅なねじれ運動のプロトタイプであるメチル基の内部回転について、その振動量子波束の実時間観測に取り組んでいる。既に、各種のトルエン置換体に対して非線形フェムト秒時間分解分光を適用し、電子励起状態ならび電子基底状態における波束生成とその時間発展を実験的に明らかにしている。本年度は、これまでの実測結果を解析するために動力学計算を進め、測定に用いる共鳴フェムト秒パルスの波長と観測される量子干渉信号との相関関係を定量的に再現することができた。
- b) 高強度な極短パルス光と分子との相互作用によって量子状態分布を非断熱的に移動する手法の開発を行っており、最も基本的な系である2原子分子については非断熱回転励起の実現に成功している。本年度は、この方法論をさらに推し進めて多原子分子であるベンゼンに適用した。動力学計算も併用することによって、初期状態の回転量子数によって非断熱励起の経路が顕著に変化することを明らかにした。
- c) 前項で述べた非断熱回転励起では、高強度極短パルス光による多段階のラマン過程によって回転波束が生成する。この波束生成は極めて鋭敏に光強度に左右されるため、量子波束の実験的な特定が本質的に重要となる。新たな波束特定法として、ダブルパルス励起と状態選択的プローブを組み合わせた方法を提案し、モデル計算によってその有効性を検証した。現在、ベンゼンを対象とした実験に着手したところである。
- d) 分子間相互作用ポテンシャルの詳細決定などへの展開を目指して、高分解能非線形コヒーレント分光の開発を行っている。そのために不可欠な光源の1つとして、連続発振 Ti:Sapphire レーザーの出力をパルス的に増幅するシステムの整備を完了した。ベンゼンの高分解能電子スペクトル測定を行い、紫外領域におけるバンド幅は~300 MHz であり、測定システム全体として~30 MHz の精度で遷移周波数を決定できることが確認された。また、ベンゼンを含む幾つかの分子クラスターに関して、高分解能電子スペクトルの測定も行った。さらに、もう1つの独立な光源として、半導体レーザーの出力をシード光とするパラメトリック発振レーザーを自作した。単一縦モード発振を実現し、~5 mJ/pulse という十分な出力が得られることを確認した。
- e) 強レーザー場中における分子のトンネルイオン化過程を、特に、分子の配向や回転状態との相関に着目して、分光学的手法を活用して解明する研究を開始した。上記 b), c) で展開している非断熱回転励起に関する動力学計算に、分子の配向に依存したイオン化過程を取り込んだ解析コードの開発を行っている。

B-1) 学術論文

T. OKINO, K. YAMANOUCI, T. SHIMIZU, K. FURUSAWA, H. HASEGAWA, Y. NABEKAWA and K. MIDORIKAWA, “Attosecond Molecular Coulomb Explosion,” *Chem. Phys. Lett.* **432**, 68 (6 pages) (2006).

T. SHIMIZU, T. OKINO, K. FURUSAWA, H. HASEGAWA, Y. NABEKAWA, K. YAMANOUCI and K. MIDORIKAWA, “Observation and Analysis of an Interferometric Autocorrelation Trace of an Attosecond Pulse Train,” *Phys. Rev. A* **75**, 033817 (12 pages) (2007).

B-4) 招待講演

Y. OHSHIMA, “Nonadiabatic rotational excitation by nonresonant intense ultrafast laser fields,” The 2nd Canada-Japan SRO-COAST Symposium on Ultrafast Intense Laser Science, Quebec (Canada), March 2007.

Y. OHSHIMA, “Methyl internal-rotation wavepackets probed by femtosecond time-resolved spectroscopy,” Institute of Atomic and Molecular Sciences, Taipei (Taiwan) and National Tsing Hua University, Hsinchu (Taiwan), March 2007.

H. HASEGAWA, “Rotational-state control by nonadiabatic excitation with nonresonant intense femtosecond laser fields,” Institute of Atomic and Molecular Sciences, Taipei (Taiwan) and National Tsing Hua University, Hsinchu (Taiwan), March 2007.

K. SUMA, “Spectroscopic studies of transient molecules relevant to the atmospheric chemistry,” Institute of Atomic and Molecular Sciences, Taipei (Taiwan) and National Tsing Hua University, Hsinchu (Taiwan), March 2007.

H. HASEGAWA, “Generation and control of rotational wave-packet by intense nonresonant femtosecond laser fields,” Asian CORE Symposium on Advanced Laser Spectroscopy, Kobe (Japan), September 2007.

B-6) 受賞、表彰

大島康裕, 分子科学研究奨励森野基金 (1994).

北野健太, 第23回化学反応討論会ベストポスター賞 (2007).

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 (2005–2006).

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(2006-2007).

B-8) 大学での講義、客員

京都大学大学院理学研究科,「化学特別講義(分子クラスターの構造と反応)」, 2007年 6月 26日-27日.

神戸大学大学院理学研究科,「特別講義(分子クラスターの構造と反応)」, 2007年 7月 11日-12日.

総合研究大学院大学物理科学研究科,「分子分光基礎論」, 2007年 12月 10日-12日.

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・変形の変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ックスの観測と制御」, 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

分子研で新たに研究室を立ち上げてから3年が経過し,非共鳴な高強度極短パルス光との非断熱相互作用を利用した量子状態分布や量子波束の操作について,基本的な原理検証ならびに実験施設の整備はほぼ完了した。ただし,これまでの一連の研究を通じて,高精度の操作を行なう上で極短パルス光の空間的不均一性が大きな問題となることが明らかになった。均一なレーザー場中での観測を可能とする測定系へと早急に改良し,量子波束の完全な特定や高効率な状態分布移動の実現を目指す。また 時間依存偏光回転などの高度な光パルス制御技術の確立にも取り組みたい。その上で より多様なターゲットへの展開や,光解離や光イオン化などの化学反応ダイナミックス研究への適用をはかる。一方,高分解能レーザーを用いた非線形コヒーレント分光に関しては,複数のコヒーレントパルス光源の開発・整備がようやく完了しつつあり,高い状態選択性を保持した断熱的分布移動の実現に早急に着手したい。特に,クラスターにおける分子間振動準位構造の詳細決定への適用を図る。

光分子科学第二研究部門

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) 強レーザー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実験的に検証した。
- 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。さらに、分子波束を用いた量子フーリエ変換を開発した。

- e) 分子の振動波束を構成する振動固有状態の振幅と位相を強レーザー場で制御することに成功した。
- 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, K. HOSAKA, H. CHIBA and K. OHMORI, “Read and Write Amplitude and Phase Information by Using High-Precision Molecular Wave-Packet Interferometry,” *Phys. Rev. A* **76**, 013403 (13 pages) (2007).

B-4) 招待講演

H. KATSUKI, “Designing molecular wave-packets by attosecond precision interferometry,” Canada-Japan Bilateral Meeting in Ultrafast Intense Laser Science, Québec (Canada), March 2007.

H. KATSUKI, “Weaving Picometric Quantum Carpets by Ultrafast Wave-Packet Interferometry,” Atomic and Molecular Dynamics: Observation and Control, Toulouse (France), March 2007.

H. KATSUKI, “Visualizing and Controlling Ultrafast Vibrational Wave-Packet Interference,” 11th East Asian Workshop on Chemical Dynamics, Tokyo (Japan), May 2007.

K. OHMORI, “Some applications of ultrahigh-precision coherent control,” COAST One-day Symposium on Ultrafast Intense Laser Science 3, Tokyo (Japan), May 2007.

K. OHMORI, “Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules,” International Symposium on Molecular Science of Ultrafast Electronic Dynamics, Sendai (Japan), May 2007.

J. C. DELAGNES, K. HOSAKA, H. KATSUKI, H. CHIBA, K. OHMORI, K. WATANABE, Y. MATSUMOTO, K. ISHIOKA, M. KITAJIMA and K. G. NAKAMURA, “Optical Control of Coherent Phonons in Bismuth,” 3rd Asian Symposium on Intense Laser Science, Kuala Lumpur (Malaysia), July 2007.

H. KATSUKI, “Visualizing and Controlling Quantum Interference in Molecules,” 「日韓分子科学合同シンポジウム」光分子科学の最前線と将来」 Jeju (Korea), July 2007.

K. OHMORI, “Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules,” XXV International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC), Freiburg (Germany), July 2007.

K. OHMORI, “Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules,” Workshop on Coherent Control of Ultracold Molecular Processes, Vancouver (Canada), August 2007.

K. OHMORI, “Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules,” Gordon Research Conference on “Quantum Control of Light and Matter,” Newport (U.S.A.), August 2007.

K. OHMORI, “Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules,” The Brijuni 2007 Conference on Laser Pulse Shaping and Coherent Control of Molecules, Brijuni (Croatia), August 2007.

H. KATSUKI, “Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules,” CLEO Pacific Rim, Seoul (Korea), August 2007.

K. HOSAKA, "Quantum Fourier transform with high-precision molecular wave-packet interferometry," Asian CORE Symposium on Advanced Laser Spectroscopy, Kobe (Japan), September 2007.

香月浩之,「アト秒精度の波束干渉を用いた振動波束の制御と観測」物性研短期研究会「短波長コヒーレント光と物質中のコヒーレンスの生成・消滅」東大物性研, 柏, 2007年11月.

香月浩之,「アト秒精度の波束干渉を用いた振動波束の制御と観測」日本分光学会先端レーザー分光部会, 東京大学, 本郷, 2007年12月.

B-6) 受賞、表彰

香月浩之, 光科学技術研究振興財団研究表彰 (2007).

大森賢治, 日本学士院学術奨励賞 (2006).

大森賢治, 日本学術振興会賞 (2006).

大森賢治, 光科学技術研究振興財団研究表彰 (1998).

大森賢治, 東北大学教育研究総合奨励金 (1995).

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–).

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

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

分子構造総合討論会実行委員 (1995).

第19回化学反応討論会実行委員 (2003).

原子・分子・光科学(AMO)討論会プログラム委員 (2003–).

APS March meeting; Focus Topic Symposium "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」

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—「量子のさざ波を光で制御する」

B-8) 大学での講義、客員

総合研究大学院大学物理科学研究科,「電子状態動力学・分子エネルギー変換」2007年1月9日-2月20日.

東京工業大学応用セラミックス研究所,客員教授,2007年4月-2008年3月.

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。

光分子科学第三研究部門

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，ほぼ完成させた。評価の結果，エネルギー分解能 5000 を越えていることを確認した。
- 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

I. NAKAI, H. KONDOH, T. SHIMADA, R. YOKOTA, T. KATAYA, T. OHTA and N. KOSUGI, "Geometric and Electronic Structures of NO Dimer Layers on Rh(111) Studied with Near Edge X-Ray Absorption Fine Structure Spectroscopy," *J. Chem. Phys.* **127**, 024701 (6 pages) (2007).

V. KIMBERG and N. KOSUGI, “Calculation of K-Edge Circular Dichroism of Amino Acids: Comparison of Random Phase Approximation with Other Methods,” *J. Chem. Phys.* **126**, 245101 (10 pages) (2007).

M. FURUKAWA, H. S. KATO, M. TANIGUCHI, T. KAWAI, T. HATSUI, N. KOSUGI, T. YOSHIDA, M. AIDA and M. KAWAI, “Electronic States of the DNA Polynucleotides Poly(dG)-Poly(dC) in the Presence of Iodine,” *Phys. Rev. B* **75**, 045119 (9 pages) (2007).

Y. HIKOSAKA, T. KANEYASU, E. SHIGEMASA, Y. TAMENORI and N. KOSUGI, “Autoionization Dynamics of Core-Valence Doubly Excited States of N_2 ,” *Phys. Rev. A* **75**, 042708 (5 pages) (2007).

T. GEJO, A. MACHIDA, K. HONMA, E. SHIGEMASA, E. NAKAMURA, N. KOSUGI and Y. TAMENORI, “The Vibrational Structure of a Conjugated Shake-Up Satellite Band in the C 1s Core-Level Photoemission of CO,” *J. Electron Spectrosc.* **156**, 274–278 (2007).

B-4) 招待講演

N. KOSUGI, “Molecular Inner-shell Spectroscopy: Experiment and Theory,” 12th Korea-Japan Joint Symposium on Frontiers of Molecular Science “Leading-Edge and the Future of Photo-Molecular Science,” Jeju (Korea), July 2007.

N. KOSUGI, “Energy shift in inner-shell ionization of molecular clusters,” 52nd IUVESTA International Workshop on Structure and Dynamics of Free and Supported Nanoparticles Using Short Wavelength Radiation, Erice (Italy), July 2007.

N. KOSUGI, “Intermolecular Interaction and Multi-electron Processes in Photoionization of Free Molecular Clusters,” The 4th Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications ASOMEA-IV, Chiba (Japan), October 2007.

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

日本放射光学会評議員 (1994–1995, 1998–1999, 2002–2003, 2006–2008)、庶務幹事 (1994).

日本放射光学会特別委員会委員 (将来計画 2001–2003、先端的リング型光源計画 2005–2006).

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).

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

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).

ICESS 電子分光及び電子構造国際会議国際諮問委員 (2006–).

ICESS-11 電子分光及び電子構造国際会議共同議長 (2007–).

ICESS-8,9,10 電子分光及び電子構造国際会議国際プログラム委員 (2000, 2003, 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, 2007–).

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 X線吸収微細構造国際会議実行委員(1992)、組織委員(2000)、プログラム委員(1992, 2000)、国際諮問委員(2003).

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).

日仏自由電子レーザーワークショップ副組織委員長 (2002).

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).

文部科学省放射光施設の連携・協力に関する連絡会議作業部会委員 (2007–2008).

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).

日本学術振興会国際科学協力事業委員会委員 (2002–2003).

大学共同利用機関法人自然科学研究機構教育研究評議員 (2004–2006).

高エネルギー加速器研究機構運営協議員会委員 (2001–2003).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所運営協議員会委員 (2001–2003).

高エネルギー加速器研究機構加速器・共通研究施設協議会委員 (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).

学会誌編集委員

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Editorial Board member (2005–2006), Editor (2007–).

その他

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).

アジア・オセアニア放射光フォーラムAOFSSR Cheiron School 国際諮問委員 (2007).

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 評価委員会委員 (2002, 2003, 2004)、専用施設審査委員会委員 (2007–).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光共同利用実験審査委員 (1997–2001).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光研究施設評価分科会委員 (2001–2002).

B-8) 大学等での講義、客員

第1回アジア・オセアニア放射光フォーラム Cheiron School 2007,「Photoemission(1) Spectroscopy」2007年9月14日.

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–2008年).

C) 研究活動の課題と展望

ここ4年ほど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、その開発研究もほぼ最終段階になってきた。我々はこれまで孤立分子系や分子固体を中心に直線偏光軟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のでき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。研究室のメンバーも完全に入れ替わったところなので、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弱い相互作用系における基礎過程の研究を新たに展開する。

見 附 孝一郎 (准教授) (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

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展開している（装置に関し特許取得）。最近では C_{60} や C_{70} の絶対光吸収断面積を測定し、巨大共鳴ピーク（ ~ 20 eV）に付随する形状共鳴遷移を初めて観測した。また、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。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、偏極励起原子の光イオン化ダイナミクスの研究を行った。また、特定の化学結合を選択的に切断したり、特異的な化学反応を起こすような光励起過程を実現するための方法論の開発と実用化を目指している。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行った。
- c) 軌道放射光施設に分子線光解離装置と正イオン・負イオン同時計測装置を製作し、 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。

B-1) 学術論文

B. P. KAFLE, H. KATAYANAGI and K. MITSUKE, “Photofragment Imaging Apparatus for Measuring Momentum Distributions in Dissociative Photoionization of Fullerenes,” *AIP Conf. Proc.* **879**, 1809–1812 (2007).

K. KANDA, K. MITSUKE, K. SUZUKI and T. IBUKI, “Photodissociation of Butyl Cyanides and Butyl Isocyanides in the Vacuum UV Region,” *AIP Conf. Proc.* **879**, 1817–1820 (2007).

K. MITSUKE, H. KATAYANAGI, C. HUANG, B. P. KAFLE, MD. S. I. PRODHAN, H. YAGI and Y. KUBOZONO, “Relative Partial Cross Sections for Single, Double and Triple Photoionization of C_{60} and C_{70} ,” *J. Phys. Chem. A* **111**, 8336–8343 (2007).

T. WANG, S. LI, B. YANG, C. HUANG and Y. LI, “Thermal Decomposition of Glycidyl Azide Polymer Studied by Synchrotron Photoionization Mass Spectrometry,” *J. Phys. Chem. B* **111**, 2449–2455 (2007).

K. NISHIKAWA, S. WANG, H. KATAYANAGI, S. HAYASHI, H. HAMAGUCHI, Y. KOGA and K. TOZAKI, “Melting and Freezing Behaviors of Prototype Ionic Liquids, 1-Butyl-3-Methylimidazolium Bromide and Its Chloride, Studied by Using a Nano-Watt Differential Scanning Calorimeter,” *J. Phys. Chem. B* **111**, 4894–4900 (2007).

B-4) 招待講演

見附孝一郎, 「フラーレンと放射光科学」原子分子の内殻励起および軟X線技術共同研究会, SPring-8, 兵庫県佐用町, 2007年2月.

見附孝一郎, 片柳英樹, 「電気化学の基礎とその実生活への利用」科学技術振興機構平成19年度サイエンスパートナーシッププロジェクト, 海陽中等教育学校, 蒲郡, 2007年10月及び11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).

学会誌編集委員

原子衝突研究協会誌編集委員 (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).

サイエンスパートナーシッププロジェクト連携担当機関実施責任者 (2007–).

B-8) 大学での講義、客員

総合研究大学院大学物理科学研究科,「極端紫外分光光学」2007年10月,11月.

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。

菱 川 明 栄 (准教授) (2003 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：光子場物理化学、原子分子光物理学

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) 9 fs および 40 fs 超短パルス強レーザー場 ($2 \times 10^{15} \text{ W/cm}^2$) におけるオゾン (O_3) の 3 体クーロン場爆発過程, $\text{O}_3^{3+} \rightarrow \text{O}^+ + \text{O}^+ + \text{O}^+$, をコインシデンス運動量画像法を用いて測定した。Dalitz プロットに基づいた運動量ベクトル相関の解析から, レーザー場のパルス幅が長くなるにつれて, 対称伸縮振動及び屈曲振動座標方向に加えて非対称伸縮振動座標方向への構造変形が誘起されることが示された。
- b) マイケルソン干渉計によって得た高強度 9 fs レーザーパルス対 ($1.3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$) を重水素化アセチレンに照射し, これによって生成した $\text{C}_2\text{D}_2^{3+}$ からのクーロン爆発過程をコインシデンス運動量画像法によりモニターした。パルス対の時間遅延を 30 fs から 90 fs に変化させたところ, D^+ および C^+ イオンの運動量がなす角の分布ピークが 30 度から 120 度に変化し, その後 280 fs で再び 30 度にピークを示すことが見いだされた。このことは, 水素原子が片方の炭素サイトから他方へ極めて高速 ($\sim 90 \text{ fs}$) にシフトした後, 元の炭素サイトへ再移動することを意味しており, 強レーザーパルスによって生成したアセチレン 2 価イオンにおいて水素移動反応が再帰的に起こる様子を可視化することに成功した。
- c) 希ガス非線形媒質 (Ne, Ar) を用いて発生させた高調波を, 希ガス圧, セル長, 集光強度を制御変数として最適化を行い, その特性を評価をした。その結果, 59 次高調波 (波長: 13.5 nm) において単位時間あたり光子数 10^9 程度, 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。また, 特定次数の高調波を取り出すための誘電多層膜ミラーと, ポンプ・プローブ時間遅延部を備えたビームラインを構築した。

B-1) 学術論文

A. HISHIKAWA, A. MATSUDA, M. FUSHITANI and E. J. TAKAHASHI, "Visualizing Recurrently Migrating Hydrogen in Acetylene Dication by Intense Ultrashort Laser Pulses," *Phys. Rev. Lett.* **99**, 258302 (4 pages) (2007).

A. MATSUDA, E. J. TAKAHASHI and A. HISHIKAWA, "Dalitz Plot Analysis of Coulomb Exploding O_3 in Ultrashort Intense Laser Fields," *J. Chem. Phys.* **127**, 114318 (6 pages) (2007).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

A. HISHIKAWA, A. MATSUDA, M. FUSHITANI and E. J. TAKAHASHI, "Visualizing Recurrently Migrating Hydrogen by Few-Cycle Intense Laser Pulses," *J. Phys.: Conf. Series* **88**, 12056 (6 pages) (2007).

B-3) 総説、著書

A. HISHIKAWA and K. YAMANOUCHI, “Coulomb Explosion Imaging of Molecular Dynamics in Intense Laser Fields,” in *Progress in Ultrafast Intense Laser Science II*, K. Yamanouchi, S. L. Chin, P. Agostini and G. Ferrante, Eds., Springer; Heidelberg, pp. 1–24 (2006).

B-4) 招待講演

A. HISHIKAWA, “Real-time reaction imaging by ultrashort intense laser pulses and high-order harmonics,” International Symposium on Spectroscopy, Reaction Dynamics and Manipulation of Atoms and Molecules, Sendai (Japan), February 2007.

A. HISHIKAWA, “Visualizing recurrently migrating hydrogen in acetylene dication by Sub-10-fs Intense Laser Pulses,” COAST One-day Symposium on Ultrafast Intense Laser Science 3, Tokyo (Japan), May 2007.

A. HISHIKAWA, “Visualizing Recurrently Migrating Hydrogen in Acetylene Dication by Ultrashort Intense Laser Pulses,” XXV International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Freiburg (Germany), July 2007.

A. HISHIKAWA, “Visualizing Molecular Dynamics by Ultrashort Intense Laser Pulses,” 29th International Symposium on Free Radicals, Montana (U.S.A.), August 2007.

A. HISHIKAWA, “Visualizing Chemical Reactions by Laser Coulomb Explosion Imaging,” Asian CORE Symposium on Advanced Laser Spectroscopy, Kobe (Japan), September 2007.

菱川明栄, 「レーザー高次高調波によるレーザー場反応追跡: 現状と展望」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「シード光を用いた短波長コヒーレント光発生技術の現状と展望」広島国際会議場, 広島, 2007年1月.

菱川明栄, 「高次高調波によるレーザー場反応追跡: 現状と展望」UVSOR 研究会「自由電子レーザー開発の現状と将来～利用研究に向けて～」分子科学研究所, 岡崎, 2007年3月.

菱川明栄, 「極短パルスレーザー場における分子」第4回AMO 討論会, 電通大, 調布, 2007年6月.

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」理研・分子研合同シンポジウム「エクストリームフォトリクス研究」ホテル竹島, 蒲郡, 2007年11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).

菱川明栄, 平成19年度分子科学奨励森野基金 (2007).

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, 2006–2008).

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 (2004–2007).

強光子場科学懇談会幹事 (2007-).

日本化学会東海支部代議員 (2007-).

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).

レーザー学会第28回年次大会プログラム委員 (2007-2008).

Asia Pacific Laser Symposium (APLS) 2008 プログラム委員 (2007-2008).

B-8) 大学での講義、客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「光化学」 2007年 8月 23日-25日.

京都大学大学院理学研究科化学専攻, 連携併任准教授, 2005年 4月-2008年 3月.

B-10) 外部獲得資金

松尾学術助成, 「強光子場中分子の電子相関ダイナミクス」 菱川明栄 (1999年).

基盤研究(C), 「多原子分子ドレスト状態の高分解能干渉ドップラー分光」 菱川明栄 (1999年).

基盤研究(B)(2), 「同時計数運動量測定による強光子場中多原子分子ドレスト状態の解明」 菱川明栄 (2000年-2001年).

若手研究(A), 「電子-イオンコインシデンス運動量計測による強光子場中分子ダイナミクス」 菱川明栄 (2002年-2004年).

特定領域研究(公募), 「分子ドレスト状態における核波束実時間追跡: コインシデンス画像法によるアプローチ」 菱川明栄 (2004年-2005年).

科学技術振興機構戦略的創造事業さきがけ, 「光電子ホログラフィーによるレーザー場反応追跡」 菱川明栄 (2005年-2009年).

C) 研究活動の課題と展望

- a) 強レーザー場中における基礎的な分子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) クーロン爆発イメージングを利用した光誘起反応過程の実時間追跡および, 強レーザー場における分子過程の「その場」観測を行う。
- c) レーザー高次高調波が有する高い時間分解能と, 軟X線領域の高い光子エネルギーを利用した実時間反応追跡のための新規手法の開発を行い, 超高速核ダイナミクスの追跡だけにとどまらず, 反応過程を決定づける電子の運動を明らかにしたい。

光源加速器開発研究部門（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。入射器のフルエネルギー化と放射線遮蔽の増強，更に入射路のフルエネルギー化が完了し，蓄積リングへのフルエネルギー入射に成功した。光源リングでは4台目となるアンジュレータである可変偏光アンジュレータの立ち上げ調整が完了し，利用実験に供されている。
- b) 自由電子レーザーでは施設の最短波長記録を更新し続けており，発振波長は 199 nm に達した。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 レーザーの三倍波の発生に成功しているが，現在，その特性の計測を進めている。
- c) 外部レーザーを用いて電子パルス上に微細な密度構造を形成することで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ているが，特に，周期的な密度構造を形成することで準単色のコヒーレント放射光を一樣磁場中で生成することに世界で初めて成功した。

B-1) 学術論文

T. NAKAGAWA, T. YOKOYAMA, M. HOSAKA and M. KATOH, “Measurements of Threshold Photoemission Magnetic Dichroism Using Ultraviolet Lasers and a Photoelastic Modulator,” *Rev. Sci. Instrum.* **78**, 023907 (2007).

A. MOCHIHASHI, M. KATOH, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA and Y. HORI, “Touschek Lifetime Measurement with a Spurious Bunch in Single Bunch Operation in the UVSOR-II Electron Storage Ring,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A* **572**, 1033–1041 (2007).

M. LABAT, M. HOSAKA, A. MOCHIHASHI, M. SHIMADA, M. KATOH, G. LAMBERT, T. HARA, Y. TAKASHIMA and M. E. COUPRIE, “Coherent Harmonic Generation at UVSOR-II Storage Ring,” *Eur. Phys. J. D* **44**, 187–200 (2007).

M. SHIMADA, M. KATOH, S. KIMURA, A. MOCHIHASHI, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, T. HARA and T. TAKAHASHI, “Intense Terahertz Synchrotron Radiation by Laser Bunch Slicing at UVSOR-II Electron Storage Ring,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **46**, 7939–7944 (2007).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

A. MOCHIIHASHI, M. KATOH, M. HOSAKA, J. YAMAZAKI, K. HAYASHI, Y. TAKASHIMA and H. SUZUKI, “Upgrade of Main RF Cavity in UVSOR-II Electron Storage Ring,” *Proc. 10th Euro. Particle Accel. Conf.*, 1268–1270 (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. 10th Euro. Particle Accel. Conf.*, 3377–3379 (2006).

A. MOCHIIHASHI, M. KATOH, M. HOSAKA, M. SHIMADA, S. KIMURA, Y. TAKASHIMA and T. TAKAHASHI, “Observation of THz Synchrotron Radiation Bursts in UVSOR-II Electron Storage Ring,” *Proc. 10th Euro. Particle Accel. Conf.*, 3380–3382 (2006).

M. LABAT, G. LAMBERT, M. E. COUPRIE, D. NUTARELLI, M. HOSAKA, A. MOCHIIHASHI, J. YAMAZAKI, M. SHIMADA, M. KATOH, Y. TAKASHIMA and T. HARA, “Coherent Harmonic Generation Experiment on UVSOR-II Storage Ring,” *Proc. 10th Euro. Particle Accel. Conf.*, 50–52 (2006).

A. MOCHIIHASHI, M. HOSAKA, M. KATOH, J. YAMAZAKI, K. HAYASHI, Y. TAKASHIMA and Y. HORI, “Ion-Related Phenomenon in UVSOR/UVSOR-II Electron Storage Ring,” *Proc. 10th Euro. Particle Accel. Conf.*, 1265–1267 (2006).

M. KATOH, M. HOSAKA, A. MOCHIIHASHI, M. SHIMADA, T. HARA, J. YAMAZAKI and K. HAYASHI, “Present Status of UVSOR-II,” *Proc. 10th Euro. Particle Accel. Conf.*, 3374–3376 (2006).

M. KATOH, M. HOSAKA, A. MOCHIIHASHI, M. SHIMADA, S. KIMURA, Y. TAKASHIMA and T. TAKAHASHI, “Coherent Terahertz Radiation at UVSOR-II,” in *The Ninth Internat. Conf. on Synchrotron Radiation Instrumentation, AIP Conf. Proc.* **879**, 71–73 (2007).

M. KATOH, E. SHIGEMASA, S. KIMURA and N. KOSUGI, “Present Status of UVSOR-II,” in *The Ninth Internat. Conf. on Synchrotron Radiation Instrumentation, AIP Conf. Proc.* **879**, 192–195 (2007).

S. KIMURA, T. ITO, E. NAKAMURA, M. HOSAKA and M. KATOH, “Design of a High Resolution and High Flux Beamline for VUV Angle-Resolved Photoemission at UVSOR-II,” in *The Ninth Internat. Conf. on Synchrotron Radiation Instrumentation, AIP Conf. Proc.* **879**, 527–530 (2007).

M. KATOH, A. MOCHIIHASHI, M. SHIMADA, J. YAMAZAKI, K. HAYASHI, M. HOSAKA and Y. TAKASHIMA, “Recent Developments at UVSOR-II,” *Proc. 22nd Particle Accel. Conf.*, 1028–1030 (2007).

B-3) 総説、著書

加藤政博、原 徹、保坂将人, 「シード光を用いた短波長コヒーレント光発生技術の現状と展望」 *放射光 (Journal of Japanese Society for Synchrotron Radiation Research)* **20**, No.4, 226–232 (2007).

B-4) 招待講演

M. KATOH, “FEL and CSR at UVSOR-II,” The second Workshop of the Asia/Oceania Forum for Synchrotron Radiation Research, Shinchu (Taiwan), November 2007.

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).

科学研究費の研究代表者、班長等

科学研究費補助金基盤研究(B)(2) 代表者 (2003–2004).

科学研究費補助金基盤研究費(B) 代表者 (2005–).

その他の委員

日中拠点大学交流事業(加速器科学分野)国内運営委員会委員 (2000–2005).

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) 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年度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ン光源としては世界的にも最高レベルの性能を有する施設となった。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, シンクロトンのフルエネルギー化を実施し, 放射線遮蔽増強も完了した。入射効率の向上, 漏洩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進んでおり, 昨年建設された4台目となる可変偏光型のアンジュレータは既にユーザー利用に供されている。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。調整の省力化, 安定性の向上, 実験ステーションへのレーザー光の輸送などに取り組んでいる。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。今年度は199nmでの発振に成功したが, 今後更に短波長化を試みる。

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の研究を進めている。準単色のテラヘルツ光を一様磁場中で生成することに世界で初めて成功した。今後は実用化を意識して、更に研究を進めていきたいと考えている。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。

光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

木 村 真 一（准教授）（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) 機能性固体・薄膜の電子状態の分光研究
- b) 低エネルギー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) 機能性固体・薄膜の電子状態の分光研究：磁性と伝導が複雑に絡み合うことにより、新しい機能性が期待できる物質について、低温・高圧・高磁場下の赤外・テラヘルツ分光と高分解能三次元角度分解光電子分光を行うことにより、機能性の起源である電子状態を詳細に決定している。また、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、機能性固体・薄膜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。

巨大磁気抵抗物質 EuO 単結晶薄膜の育成と電子状態の評価

高圧下テラヘルツ分光による SmS の excitonic instability

重い電子系 CeIn₃ の高圧下赤外分光による局在から遍歴に至る電子状態

強相関層状物質 CeTe₂ の CDW の三次元効果

スピン揺らぎが強い系（ZrZn₂, SrFe₄Sb₁₂, YnIr₂Si₂）の電荷ダイナミクス

- b) 低エネルギー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 三次元角度分解光電子分光（BL5U）と赤外・テラヘルツ顕微分光（BL6B）、SPring-8 の多重極限環境下赤外分光（BL43IR）は順調に結果を出している。昨年度から今年度にかけて開発してきた UVSOR-II 真空紫外高分解能角度分解光電子分光ビームライン（BL7U）では、 $h\nu = 7 \sim 40$ eV の狭い範囲ではあるが、実用分解能では世界トップレベルの性能が得られ、2007 年度後期からユーザー利用が進行している。この分光器の特徴は、UVSOR-II 光源の高輝度性を使って入射スリットをなくすことにより、光電子分光に必要な高フラックスかつ高分解能が実現できるようにした点である。このビームラインは、光源の性能に依存するため、次年度予定されている UVSOR-II のトップアップ運転によって、さらなる性能アップが期待できる。

B-1) 学術論文

S. KIMURA, N. KIMURA and H. AOKI, “Low-Energy Electrodynamics of Heavy Quasiparticles in ZrZn₂,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 084710 (5 pages) (2007).

S. KIMURA, H. J. IM, T. MIZUNO, S. NARAZU, E. MATSUOKA and T. TAKABATAKE, “Infrared Study on the Electronic Structure of the Alkaline-Earth-Filled Skutterudites AM₄Sb₁₂ (A = Sr, Ba; M = Fe, Ru, Os),” *Phys. Rev. B* **75**, 245106 (6 pages) (2007).

- T. NISHI, S. KIMURA, T. TAKAHASHI, H. J. IM, Y. S. KWON, T. ITO, K. MIYAGAWA, H. TANIGUCHI, A. KAWAMOTO and K. KANODA**, “Magnetic-Field-Induced Superconductor–Insulator–Metal Transition in an Organic Conductor: An Infrared Magneto-Optical Imaging Spectroscopic Study,” *Phys. Rev. B* **75**, 014525 (5 pages) (2007).
- Y. SAKURAI, S. KIMURA and K. SEKI**, “Infrared Reflection-Absorption Spectroscopy of Alq_3 Thin Film on Silver Surface Using Synchrotron Radiation,” *Appl. Phys. Lett.* **91**, 061922 (3 pages) (2007).
- K. MATSUBAYASHI, K. IMURA, H. S. SUZUKI, T. MIZUNO, S. KIMURA, T. NISHIOKA, K. KODAMA and N. K. SATO**, “Effect of Single Crystal Composition on Electrical, Optical, Magnetic and Thermodynamic Properties of SmS ,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 064601 (6 pages) (2007).
- M. SHIMADA, M. KATOH, S. KIMURA, A. MOCHIHASHI, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, T. HARA and T. TAKAHASHI**, “Intense Terahertz Synchrotron Radiation by Laser Bunch Slicing at UVSOR-II Electron Storage Ring,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **46**, 7939–7944 (2007).
- J. ONOE, T. ITO, S. KIMURA, K. OHNO, Y. NOGUCHI and S. UEDA**, “The Valence Electronic Structure of a Peanut-Shaped C_{60} Polymer: In Situ High-Resolution Photoelectron Spectroscopic and Density-Functional Studies,” *Phys. Rev. B* **75**, 233410 (4 pages) (2007).
- J. ONOE, T. ITO, S. KIMURA and K. OHNO**, “In Situ High-Resolution Valence Photoelectron Spectra of a Peanut-Shaped C_{60} Polymer,” *Eur. Phys. J. D* **43**, 141–142 (2007).
- T. TAKEUCHI, D. FUKAMAKI, H. MIYAZAKI, K. SODA, M. HASEGAWA, H. SATO, U. MIZUTANI, T. ITO and S. KIMURA**, “Electronic Structure and Stability of the Pd-Ni-P Bulk Metallic Glass,” *Mater. Trans.* **48**, 1292–1298 (2007).
- I. OUCHI, I. NAKAI, M. ONO and S. KIMURA**, “Features of Fluorescence Spectra of Polyethylene 2,6-Naphthalate Films,” *J. Appl. Polym. Sci.* **105**, 114–121 (2007).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- J. ONOE, Y. OCHIAI, T. ITO, S. KIMURA, S. UEDA, Y. NOGUCHI and K. OHNO**, “Electronic and Electron-Transport Properties of Peanut-Shaped C_{60} Polymers,” *J. Phys.: Conf. Series* **61**, 899–903 (2007).
- S. KIMURA and T. MIZUNO**, “Application of Terahertz Synchrotron Radiation at UVSOR-II,” *AIP Conf. Proc.* **902**, 67–70 (2007).
- H. J. IM, T. ITO, H. D. KIM, S. KIMURA, J. B. HONG and Y. S. KWON**, “Electronic Structure of $\text{CeNiGe}_{2-x}\text{Si}_x$ Studied by Resonant Photoemission,” *J. Magn. Magn. Mater.* **310**, 411–413 (2007).
- Y. S. KWON, K. E. LEE, M. A. JUNG, E. Y. SONG, H. J. OH, H. J. IM and S. KIMURA**, “Hybridization Gap Collapse at a Quantum Critical Point of $\text{CeNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ge}_2$,” *J. Magn. Magn. Mater.* **310**, 310–312 (2007).
- T. ITO, H. J. IM, S. KIMURA and Y. S. KWON**, “Three-Dimensional Fermi Surface of CeTe_2 Studied by Angle-Resolved Photoemission,” *J. Magn. Magn. Mater.* **310**, 431–433 (2007).
- S. KIMURA, T. NISHI, T. TAKAHASHI, T. MIZUNO, K. MIYAGAWA, H. TANIGUCHI, A. KAWAMOTO and K. KANODA**, “Pressure Dependence of Phase Separation in Deuterated $\kappa\text{-(ET)}_2\text{Cu[N(CN)}_2\text{]Br}$ at the Mott Boundary,” *J. Magn. Magn. Mater.* **310**, 1102–1104 (2007).
- T. ITO, S. KIMURA, H. J. IM, E. NAKAMURA, M. SAKAI, T. HORIGOME, K. SODA and T. TAKEUCHI**, “BL5U at UVSOR-II for Three-Dimensional Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy,” *AIP Conf. Proc.* **879**, 587–590 (2007).

M. KATOH, E. SHIGEMASA, S. KIMURA and N. KOSUGI, “Present Status of UVSOR-II,” *AIP Conf. Proc.* **879**, 192–195 (2007).

M. KATOH, M. HOSAKA, A. MOCHIIHASHI, M. SHIMADA, S. KIMURA, Y. TAKASHIMA and T. TAKAHASHI, “Coherent Terahertz Radiation at UVSOR-II,” *AIP Conf. Proc.* **879**, 71–74 (2007).

S. KIMURA, T. ITO, E. NAKAMURA, M. HOSAKA and M. KATOH, “Design of a High-Resolution and High-Flux Beamline for VUV Angle-Resolved Photoemission at UVSOR-II,” *AIP Conf. Proc.* **879**, 527–530 (2007).

S. KIMURA, Y. SAKURAI, E. NAKAMURA and T. MIZUNO, “Terahertz Microspectroscopy and Infrared Reflection-Absorption Spectroscopy Apparatuses at UVSOR-II,” *AIP Conf. Proc.* **879**, 595–598 (2007).

B-4) 招待講演

S. KIMURA, “Infrared Magneto-Optical Imaging on Correlated Materials,” 4th International Workshop on Infrared Spectroscopy and Microscopy with Accelerator Based Sources, Awaji Island (Japan), September 2007.

S. KIMURA, “Closing Remark,” UVSOR Workshop on Terahertz Coherent Synchrotron Radiation, Okazaki (Japan), September 2007.

S. KIMURA, “Electrodynamics on spin fluctuation materials,” Berichte aus der Physik, Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe, Dresden (Germany), July 2007.

S. KIMURA, “Application of terahertz synchrotron radiation at UVSOR-II,” 2nd International Symposium on Portable Synchrotron Light Sources and Advanced Applications, Kusatsu (Japan), January 2007.

T. ITO, “Angle-resolved photoemission study on strongly correlated f electron systems,” Festkörperphysikalisches Kolloquium, Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe, Dresden (Germany), July 2007.

木村真一, 「テラヘルツ放射光の現状と大強度CSRの利用」 ERL 研究会「コンパクトERL が拓く世界」物構研, 2007年7月.

木村真一, 「空間分解能とエネルギー分解能を上げたARPESでの展望」物性研究所短期研究会「高輝度軟X線放射光が拓く物質科学の新たな地平」東大物性研, 2007年7月.

木村真一, 「放射光赤外利用研究の現状と今後の方向」立命館大学SRセンター成果報告会, 草津市, 2007年6月.

木村真一, 「分子性導体の赤外磁気光学イメージング」「分子性導体の機能・構造相関の研究と放射光利用」研究会, 兵庫県佐用郡, 2007年6月.

木村真一, 「テラヘルツ放射光利用の現状と大強度CSR テラヘルツ光への期待」放射光セミナー, 物構研, 2007年4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 (2006–2008).

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).

日本放射光学会行事委員 (2003–2004, 2007–2009).

日本物理学会名古屋支部委員 (2007-).

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

5th International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources, International Advisory Board (Banff, Canada, September 2009).

第21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、実行委員 (2007).

4th 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——先端的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).

学会誌編集委員

真空誌編集委員 (2007-2009).

B-8) 大学での講義、客員

総合研究大学院大学物理科学研究科,「極端紫外分光光学」2007年10月6日-20日.

立命館大学 COE 推進機構特別招聘准教授, 2007年4月-.

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-.(伊藤助教)

(財)理化学研究所播磨研究所, 非常勤連携研究員, 2003年4月-.(伊藤助教)

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,「 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)島津科学技術振興財団・研究開発助成金,「テラヘルツ磁気光学分光法の開発」木村真一 (1999年).

(財)実吉奨学会・研究助成金,「赤外イメージング分光による磁性体の局所電子構造の研究」木村真一 (1999年).

(財)マツダ財団・研究助成金,「テラヘルツ磁気光学素子としての強相関 4f 電子系の基礎研究」木村真一 (1998年).

奨励研究(A),「赤外磁気光学効果による強相関伝導系物質の低エネルギー励起の研究」木村真一 (1997年–1998年).

若手研究(B),「角度分解光電子分光によるスピン配列した磁性薄膜における電子状態」伊藤孝寛 (2005年–2007年).

C) 研究活動の課題と展望

分子研着任の際に提案していた真空紫外高分解能角度分解光電子分光ビームライン(BL7U)が完成し,これまでに立ち上げてきた三次元角度分解光電子分光ビームライン(BL5U)と赤外・テラヘルツ顕微分光ビームライン(BL6B)と合わせて,本格的に研究の場が整備されたところである。これらの装置を用いることで,これまで以上に高いレベルの研究が遂行できるものと期待される。今後,これらのビームラインと第一原理電子状態計算を併せて行うことで,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。

一方で,機能性薄膜試料を育成し,そのままの状態でも電子状態を評価する手法も確立しつつある。この方法を用いて,今後は電子状態を評価することによる新奇物質開発への道を切り開いていく方針である。

光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

繁 政 英 治（准教授）（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。高分解能斜入射分光器を有する新しいアンジュレータビームラインとして、BL6Uの建設計画を策定し、来年度後半からの利用研究開始を目指して物品調達を進めている。このビームラインは、30 ~ 600 eVの光エネルギー範囲で、分解能10000以上を達成する事を目指しており、分光器は不等刻線平面回折格子を用いた可変偏角タイプである。このビームラインでは、主として気体の高分解能光電子分光を行う予定であり、関連する装置の準備も合わせて進めている。
- b) 分子の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継続して行っている。具体的には、二次元光電子分光法を用いた共鳴オージェ電子スペクトル及び低速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、二原子分子については、多電子励起状態の崩壊過程における非常に複雑な脱励起過程が明らかにされた。現在、三原子分子へと研究の展開を図っている。
- c) 磁気ボトル型電子エネルギー分析器を利用した、原子分子の多重光電離過程の解明に関する国際共同研究を継続中である。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、更には、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ている。最近、同様の磁気ボトル型分析器をUVSORにも整備し、フェムト秒レーザーによる多重電離過程の直接観測を目指して、菱川グループとの共同研究も進めている。

B-1) 学術論文

Y. HIKOSAKA, T. KANEYASU and E. SHIGEMASA, "Ion Pair Formation in the Vacuum Ultraviolet Region of NO Studied by Negative Ion Imaging Spectroscopy," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **154**, 43–47 (2006).

T. AOTO, K. ITO, Y. HIKOSAKA, E. SHIGEMASA, F. PENENT and P. LABLANQUIE, "Properties of Resonant Interatomic Coulombic Decay in Ne Dimers," *Phys. Rev. Lett.* **97**, 243401 (4 pages) (2006).

Y. HIKOSAKA, T. KANEYASU, E. SHIGEMASA, Y. TAMENORI and N. KOSUGI, "Autoionization Dynamics of Core-Valence Doubly Excited States in N₂," *Phys. Rev. A* **75**, 042708 (5 pages) (2007).

Y. HIKOSAKA, P. LABLANQUIE, F. PENENT, T. KANEYASU, E. SHIGEMASA, J. H. ELAND, T. AOTO and K. ITO, "Double Photoionization into Double Core-Hole States in Xe," *Phys. Rev. Lett.* **98**, 183002 (4 pages) (2007).

- Y. HIKOSAKA, T. KANEYASU, E. SHIGEMASA, P. LABLANQUIE, F. PENENT and K. ITO**, “Multielectron Coincidence Spectroscopy for Core-Valence Doubly Ionized States of CO,” *J. Chem. Phys.* **127**, 044305 (4 pages) (2007).
- T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, E. SHIGEMASA, F. PENENT, P. LABLANQUIE, T. AOTO and K. ITO**, “State-Selective Cross Sections of Multiple Photoionization in Ne,” *Phys. Rev. A* **76**, 012717 (7 pages) (2007).
- Y. HIKOSAKA, P. LABLANQUIE, F. PENENT, T. KANEYASU, E. SHIGEMASA, J. H. D. ELAND, T. AOTO and K. ITO**, “Single, Double, and Triple Auger Decay of the Xe 4p Core-Hole States,” *Phys. Rev. A* **76**, 032708 (6 pages) (2007).
- Y. HIKOSAKA, T. GEJO, T. TAMURA, K. HONMA, Y. TAMENORI and E. SHIGEMASA**, “Core-Valence Multiply Excited States in N₂ Probed by Detecting Metastable Fragments,” *J. Phys. B* **40**, 2091–2097 (2007).
- T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, E. SHIGEMASA, F. PENENT, P. LABLANQUIE, T. AOTO and K. ITO**, “Autoionization of the Ne⁺ Rydberg States Formed via Valence Photoemission,” *J. Phys. B* **40**, 4047–4060 (2007).
- P. LABLANQUIE, T. AOTO, Y. HIKOSAKA, Y. MORIOKA, F. PENENT and K. ITO**, “Appearance of Interatomic Coulombic Decay in Ar, Kr, and Xe Homonuclear Dimers,” *J. Chem. Phys.* **127**, 154323 (9 pages) (2007).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA and E. SHIGEMASA**, “Development of Auger-Electron-Ion Coincidence Spectrometer on Decay Dynamics of Core-Excited Molecules,” *AIP Conf. Proc.* **879**, 1793–1796 (2007).
- E. SHIGEMASA, T. KANEYASU, Y. TAMENORI and Y. HIKOSAKA**, “Photoelectron Recapture through Post-Collision Interaction in N₂,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **156-158**, 289–293 (2007).
- Y. HIKOSAKA, T. KANEYASU, Y. TAMENORI and E. SHIGEMASA**, “Negative Ion Formation Following Inner-Shell Photoexcitation in CO₂ Studied by Velocity Imaging Spectroscopy,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **156-158**, 284–288 (2007).
- T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA and E. SHIGEMASA**, “Electron-Ion Coincidence Spectrometer for Studies on Decay Dynamics of Core-Excited Molecules,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **156-158**, 279–283 (2007).
- T. GEJO, M. MACHIDA, K. HONMA, E. SHIGEMASA, E. NAKAMURA, N. KOSUGI and Y. TAMENORI**, “The Vibrational Structure of a Conjugate Shake-Up Satellite Band in the C 1s Core-Level Photoemission of CO,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **156-158**, 274–278 (2007).

B-4) 招待講演

- 彦坂泰正, 「分子内殻領域の多電子励起状態の分光と崩壊ダイナミクス」原子分子の内殻励起および軟X線実験技術共同SPRING-8研究会, 高輝度光科学研究センター, 2007年2月.
- 金安達夫, 「多電子同時計測法を用いた多重イオン化過程の研究」原子分子の内殻励起および軟X線実験技術共同SPRING-8研究会, 高輝度光科学研究センター, 2007年2月.
- T. KANEYASU**, “Multi-Electron Spectroscopy for Double Photoionization Study of Atoms and Molecules,” International Symposium on (e,2e), Double Photoionization and Related Topics, Königstein (Germany), August 2007.

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–).

日本放射光学会渉外幹事 (2007–).

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).

第21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 (2007).

第2回 AOFSSR (放射光研究アジア - オセアニアフォーラム) プログラム委員 (2007).

学会誌編集委員

Synchrotron Radiation News, Correspondent (2001–).

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 (2005–2006).

B-8) 大学での講義、客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「光化学」 2007年 7月 23日–25日.

名古屋大学小型シンクロトロン光研究センター, 客員准教授, 2007年 9月–.

B-10) 外部獲得資金

基盤研究(B)(2), 「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).

若手研究(B), 「同時計測法で探る分子 2 価イオン状態の解離ダイナミクス」 彦坂泰正 (2004年–2005年).

松尾学術研究助成, 「分子クラスターを用いたイオン - 分子反応の立体ダイナミクスの解明」 彦坂泰正 (2006年).

基盤研究(B), 「多重同時計測法で探る内殻励起分子の超高速緩和ダイナミクス」 繁政英治 (2007年–2008年).

若手研究(B), 「分子配向を制御した低速イオン - 分子反応実験」 彦坂泰正 (2007年–2008年).

若手研究(B), 「多電子相関解析で探る原子分子の多重電離ダイナミクス」 金安達夫 (2007年–2008年).

C) 研究活動の課題と展望

我々のグループでは、放射光を利用した開発要素の強い研究や予備的な実験は UVSOR の BL4B で集中的に実施し、分解能や光強度が必要な実験に関しては、他施設を含めたアンジュレータビームラインで適宜行う方針で研究を進めて来た。しかし、

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年度後半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ライン，BL6U の建設計画を立案した。現在，ビームライン構成要素の調達が進んでおり，2008年8月末にはビームラインの建設が終了する予定である。このビームラインでは，分子の多電子励起状態の電子構造とその崩壊過程を二次元光電子分光法によって解明するという研究を中心に行いたいと考えている。これにより，現在 SPring-8 で行っている研究を低エネルギー領域に拡張することが可能となる。また，BL6U の分光性能を活かして，高励起一価イオン状態や二価イオン状態の分光情報を取得する実験手法の開発にも取り組んで行きたい。

先端レーザー開発研究部門（分子制御レーザー開発研究センター）

平 等 拓 範（准教授）（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ニクスの研究

- a) マイクロドメイン構造制御に関する研究
- b) マイクロドメイン光制御に関する研究
- c) マイクロ固体フォトニクスの展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

先鞭をつけたマイクロチップ Nd:YVO₄ レーザー（1990年）、Yb:YAG レーザー（1993年）、セラミックレーザー（1997年）は、高機能非線形波長変換可能とするバルク擬似位相整合（QPM）素子である大口径周期分極反転 MgO:LiNbO₃（PPMgLN）の展開と相まって研究が大きく広がりつつある。

- a) マイクロドメイン構造、界面（粒界面、結晶界面、さらには自発分極界面）を微細に制御する固相反応制御法の研究としてレーザーセラミックス、レーザー素子、分極反転素子の作製プロセスの高度化を図っている。
- b) 光の発生、増幅、変換の高度制御を可能とする為の研究として、希土類イオンの発光・緩和機構の解明、固体中の光、エネルギー伝搬、さらにはマイクロドメイン構造と光子及び音子の相互作用機構解明、非線形光学過程の解明、モデル化を進めている。Yb レーザーの機構解明、Nd レーザーの直接励起可能性、希土類レーザーの励起光飽和特性、YVO₄ の高熱伝導率特性の発見、実証に繋がったばかりでなく、マイクロ共振器の高輝度効果、レーザー利得と非線形光学過程の量子相関などの興味深い展開も見せている。
- c) 開発した光素子を用いた新規レーザー、波長変換システムの開発と展開を図っている。エッジ励起セラミック Yb:YAG マイクロチップレーザーにおける連続波（CW）414W 発生（出力密度 200 kW/cm²）、手のひらサイズ高輝度温度マイクロチップ Q スイッチレーザー（エネルギー：～4 mJ、パルス幅：500 ps、光強度：～8 MW）、200mJ 級の高効率・高出力のナノ秒光パラメトリック発生、波長 5～12 μm に至る広帯域波長可変中赤外光発生、マイクロチップレーザーからの UV 光（波長：266 nm）からテラヘルツ波（波長：～200 μm）、さらにはコヒーレント軟 X 線（波長：～5 nm）・アト秒（200–300 as）発生などをマイクロ固体フォトニクスで実証した。さらには、新素子は高品質スクイズド光の高効率発生も可能と期待されており、量子テレポーテーションなどの量子光学などの分野へも展開されつつある。

B-1) 学術論文

M. TSUNEKANE and T. TAIRA, “High-Power Operation of Diode Edge-Pumped, Composite All-Ceramic Yb:Y₃Al₅O₁₂ Microchip Laser,” *Appl. Phys. Lett.* **90**, 121101 (3 pages) (2007).

I. SHOJI, T. TAIRA and A. IKESUE, “Thermally-Induced-Birefringence Effects of Highly Nd³⁺-Doped Y₃Al₅O₁₂ Ceramic Lasers,” *Opt. Mater.* **29**, 1271–1276 (2007).

Y. SATO, J. SAIKAWA, T. TAIRA and A. IKESUE, “Characteristics of Nd³⁺-Doped Y₃ScAl₄O₁₂ Ceramic Laser,” *Opt. Mater.* **29**, 1277–1282 (2007).

- J. SAIKAWA, Y. SATO, T. TAIRA and A. IKESUE**, “Femtosecond Yb³⁺-Doped Y₃(Sc_{0.5}Al_{0.5})₂O₁₂ Ceramic Laser,” *Opt. Mater.* **29**, 1283–1288 (2007).
- M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “Design and Performance of Compact Heatsink for High-Power Diode Edge-Pumped, Microchip Lasers,” *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **13**, 619–625 (2007).
- Y. SATO, A. IKESUE and T. TAIRA**, “Tailored Spectral Designing of Layer-by-Layer Type Composite Nd:Y₃ScAl₄O₁₂/Nd:Y₃Al₅O₁₂ Ceramics,” *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **13**, 838–843 (2007).
- J. SAIKAWA, M. FUJII, H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “High-Energy, Narrow-Bandwidth Periodically Poled Mg-Doped LiNbO₃ Optical Parametric Oscillator with a Volume Bragg Grating,” *Opt. Lett.* **32**, 2996–2998 (2007).
- Y. PEITIT, B. BOULANGER, P. SEGONDS and T. TAIRA**, “Angular Quasi-Phase-Matching,” *Phys. Rev. A* **76**, 063817 (2007).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “>400W CW Operation of Diode Edge-Pumped, Composite All-Ceramic Yb:YAG Microchip Laser,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, MA2 (2007).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Comparative Study on the Coercive Field in Undoped and MgO-Doped Congruent LiNbO₃,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, MB7 (2007).
- J. SAIKAWA, M. MIYAZAKI, M. FUJII, H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Difference Frequency Generation in a ZnGeP₂ Crystal Pumped by a Large Aperture Periodically Poled MgO:LiNbO₃ Optical Parametric System,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, MB8 (2007).
- T. SUZUDO, Y. SATOH, M. HIROI, H. MIFUNE, Y. SATO, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, O. NAKAMURA, S. WATANABE and Y. FURUKAWA**, “Diode-Pumped Nd:GdVO₄ Microchip Laser with a Single-Pass Green Generation in PPMgLN,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, TuC3 (2007).
- S. HAYASHI, T. SHIBUYA, H. SAKAI, H. KAN, T. TAIRA, Y. OGAWA, C. OTANI and K. KAWASE**, “Terahertz-Wave Parametric Generation Pumped by Microchip Nd:YAG Laser,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, TuC7 (2007).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Thermal Conductivities of Polycrystalline Nd³⁺- and Yb³⁺-Doped Y₃Al₅O₁₂ Ceramics,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, WB16 (2007).
- M. MATSUKURA, O. NAKAMURA, S. WATANABE, A. MIYAMOTO, Y. FURUKAWA, Y. SATO, T. TAIRA, T. SUZUDO and H. MIFUNE**, “Core-Clad-Type Composites of Nd:GdVO₄ Single Crystal Grown by the Double Die EFG Method,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, WC3 (2007).
- T. TAIRA**, “High Brightness-Temperature Micro-Lasers,” *Defense & Security Symposium 2007*, 6552-13 (2007).
- M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “High-Power CW Operation and Beam Quality of a Diode Edge-Pumped, Composite All-Ceramic Yb:YAG Microchip Laser,” *CLEO 2007*, CThDD3 (2007).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Thermo-Optical and -Mechanical Parameters of Nd:GdVO₄ and Nd:YVO₄,” *CLEO 2007*, JWA87 (2007).
- J. SAIKAWA, M. FUJII, H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “High-Energy Periodically Poled MgO:LiNbO₃ Optical Parametric System with a Bragg Grating,” *CLEO 2007*, CTuK5 (2007).

- Y. SATO, T. TAIRA, T. SUZUDO and H. MIFUNE**, “Laser Properties of Composite Nd:GdVO₄ Single Crystal Grown by the Double Die EFG Method,” *CLEO 2007*, CFA2 (2007).
- N. ISHII, X. GU, T. FUJII, M. SCHULTZE, V. PERVAK, R. HOLZWARTH, R. BUTKUS, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, R. HARTMANN, S. ROITHER, M. KITZLER, A. BALTUSKA, A. PISKARSKAS and F. KRAUSZ**, “Development of a Few-Cycle Infrared OPCPA System and Its Use in High-Harmonic Generation,” *CLEO 2007*, CMK2 (2007).
- M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “Highly Thermal-Shock-Resistant Operation of Diode Edge-Pumped, Composite All-Ceramic Yb:YAG Microchip Lasers,” *CLEO/Europe 2007*, CA-6-MON (2007).
- T. DASCALU, Y. OISHI, M. TSUNEKANE, K. MIDORIKAWA and T. TAIRA**, “Thermally Induced Birefringence in Edge-Pumped Microchip Yb:YAG Ceramic,” *CLEO/Europe 2007*, CA-32-MON (2007).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “The Study of Thermo-Mechanical and -Optical Properties of GdVO₄ and YVO₄,” *CLEO/Europe 2007*, CA7-5-WED (2007).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Mg-Doped Congruent LiTaO₃ for High Power Quasi-Phase Matching Device,” *CLEO/Europe 2007*, CE7-3-THU (2007).
- T. TAIRA**, “Ceramic Lasers,” *Journées Nationales des Cristaux pour l’Optique (JNCO), OPTIQUE Grenoble 2007*, JNCO-JE1 (2007).
- Y. PETIT, B. BOULANGER, P. SEGONDS and T. TAIRA**, “Le Quasi-Accord de Phase Angulaire dans PPLN,” *Journées Nationales des Cristaux pour l’Optique (JNCO), OPTIQUE Grenoble 2007*, JNCO-JE6 (2007).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Study on the Field-Poling Dynamics in Mg-Doped LiNbO₃ and LiTaO₃,” *Nonlinear Optics: Materials, Fundamentals and Applications (NLO)*, WE35 (2007).
- J. SAIKAWA, M. FUJII, H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “High-Energy, Narrow-Bandwidth Periodically Poled MgO:LiNbO₃ Optical Parametric Oscillator with a Volume Bragg Grating,” *Nonlinear Optics: Materials, Fundamentals and Applications (NLO)*, FA3 (2007).

B-3) 総説、著書

- T. TAIRA**, “Ceramic YAG lasers,” *Comptes Rendus Physique* **8**, 138–152 (2007).
- 平等拓範, 「マイクロチップレーザー」 *O PLUS E* **29**, 374–380 (2007).
- T. TAIRA**, “RE³⁺-ion-doped YAG ceramic lasers,” *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **13**, 798–809 (2007).
- 平等拓範, 「Advanced Solid-State Photonics 2007国際会議報告」 *レーザー研究* **35**, 402–406 (2007).
- 平等拓範, “Conference report on advanced solid-state photonics 2007,” *オプトニュース* **1**, 37–40 (2007).

B-4) 招待講演

- T. SUZUDO, Y. SATOH, M. HIROI, H. MIFUNE, Y. SATO, H. ISHIZUKI, T. TAIRA O. NAKAMURA, S. WATANABE and Y. FURUKAWA**, “High power green laser development for new type of printing system using full-color rewritable paper,” Technical Report of IEICE, EID2006-22, 35-38 (2006).
- 平等拓範, 「マイクロ固体フォトリソの新展開」 大型スペクトログラフ研究会「大型スペクトログラフ高度化装置を利用した研究成果に関わる討論会」 自然科学研究機構, 岡崎, 2007年 3月.
- 平等拓範, 「マイクロチップレーザー技術の進展」 日本光学会名古屋講演会「最近のレーザー応用技術」, 名古屋大学, 名古屋, 2007年 3月.

T. TAIRA, “High power, tunable microchip lasers,” CLEO/Europe 2007, Munich (Germany), June (2007).

T. TAIRA, “Ceramic lasers,” Journées Nationales des Cristaux pour l’Optique (JNCO), OPTIQUE Grenoble 2007, Campus universitaire de St-Martin d’Hères, Grenoble (France), July 2007.

B-5) 特許出願

特願 2007-220951, 「固体レーザーモジュール」 常包正樹、平等拓範(JST、自然科学研究機構) 2007年.

特願 2007-293255, 「レーザー点火装置、内燃機関、及びレーザー点火方式」 平等拓範、藤川武敏、秋濱一弘、蝦名正輝(自然科学研究機構、(株)豊田中央研究所) 2007年.

特願 2007-306233, 「周期分極反転用電極及び周期分極反転素子の製造方法」 平等拓範、石月秀貴(自然科学研究機構) 2007年.

特願 2007-340019, 「配向多結晶材料及びその製造方法」 平等拓範、秋山順、浅井滋生、原 邦彦(自然科学研究機構、名古屋大学、(株)コンボン研) 2007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ー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ー用先端光学材料に関する専門委員会委員 (2000–2002).

(財)光産業技術振興協会光材料・応用技術研究会幹事 (2004–).

NEDO 評価委員 (2005).

(社)レーザー学会評議員 (2005–).

(社)レーザー学会「マイクロ固体フォトリクス」専門委員会主査 (2006–2009).

学会の組織委員

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).

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-).

23rd International Laser Radar Conference, 国際会議実行委員 (2005-2006).

Int. Conf. “Micro- to Nano-Photonics—ROMOPT 2006,” プログラム委員 (2005-2006).

CLEO, Nonlinear Optics Application, 国際会議分科委員 (2007-).

NLO, 国際会議プログラム委員 (2007-).

3rd International Laser Ceramics Symposium, プログラム委員 (2006-2007).

ASSP 2008, 国際会議プログラム委員会委員長 (2007-2008).

APLS 2008, 国際会議プログラム委員 (2007-2008).

3rd EPS Europhoton Conference on Solid-State and Fiber Coherent Light Sources 国際会議分科委員 (2007-2008).

(社)レーザー学会学術講演会第 28 回年次大会実行委員会委員 (2007-2008).

レーザー・光波・マイクロ波国際会議 2008 (ILLMC2008)国際学会諮問委員 (2007-2008).

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-).

日本学術振興会第 130 委員会委員 (2007-).

その他

愛知県産業労働部愛知県若手奨励賞審査員 (2006-).

B-8) 大学での講義、客員

理化学研究所, 客員研究員, 1999 年 4 月-2007 年 3 月.

福井大学大学院工学研究科, 「電気・電子工学特別講義第三」2007 年 12 月 13 日-14 日.

豊橋技術科学大学先端フットニック情報メモリリサーチセンター, 客員教授, 2007 年後期.

東京工業大学統合研究院, 統合研究院ソリューション研究教員, 2007 年後期.

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ーの提案」平等拓範 (1998 年-1999 年).

基盤研究(B)(2) (展開) 「広帯域波長可変超短パルス光源のための高出力 Yb:YAG モードロックレーザーの開発」平等拓範 (1998 年-2000 年).

特別研究員奨励費, 「非線形波長変換に適した高輝度レーザーシステムの開発研究」平等拓範 (1999 年-2000 年).

基盤研究(B)(2) (一般) 「大出力小型固体レーザーによる広帯域赤外光発生に関する研究」平等拓範 (1999 年-2001 年).

地域連携推進研究費(2), 「界面制御による高機能光計測用波長可変クロマチップレーザーの開発研究」平等拓範 (2000 年-2002 年).

基盤研究(A)(2) (一般) 「次世代セラミックレーザー」平等拓範 (2003 年-2005 年).

産学官共同研究の効果的な推進, 「輻射制御直接励起マイクロチップレーザー」平等拓範 (2002 年-2004 年).

地域新生コンソーシアム, 「ヒートシンカー体型 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-2006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ーの研究開発」平等拓範(2006年-2008年).

先端計測分析技術・機器開発事業,「イオン化光源としてのマイクロチップレーザーの開発」再委託(研究代表 東京工業大学)(2007年).

B-11)産学等共同研究

澁谷工業(株)「高出力 100W 級 Yb:YAG マイクロチップレーザーの開発」平等拓範(2007年).

(株)コンパン研究所,「マイクロ固体フォトニクスの基礎研究」平等拓範(2007年).

浜松ホトニクス(株)「マイクロチップレーザーの光増幅に関する研究」平等拓範(2007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(2007年).

(株)豊田中央研究所,「レーザー点火最小パルスエネルギー低減に関する研究」平等拓範(2007年).

(株)日本自動車部品総合研究所,「自動車エンジン用レーザーイグニッションの研究」平等拓範(2007年).

(株)日本自動車部品総合研究所,「中赤外 4.3 μ m CW レーザの研究」平等拓範(2007年).

三菱電機(株)情報技術研究所,「Nd:YVO₄(GdVO₄) 固体レーザー材料の研究」平等拓範(2007年).

C) 研究活動の課題と展望

先端的レーザー光源の中で,特にビーム高品質化(空間特性制御)ならびに短パルス化(時間特性制御)などの高輝度化,そしてスペクトルの高純度化を広い波長領域(スペクトル特性制御)でコンパクト化と同時に実現することは,極めて重要な課題である。すでに,マイクロ固体フォトニクスは,医療,バイオ,エネルギー,環境,ディスプレイ,光メモリ分野での展開が図られつつある。一方で,コヒーレントX線からテラヘルツ波発生,超高速レーザーの極限であるアト秒発生,さらには量子テレポーテーション等の光科学の最先端分野も,このキーワードで深化しつつあり,その学術的拠り所としての基盤構築が必要な時期となっている

極限精密光計測研究部門（分子制御レーザー開発研究センター）

松 本 吉 泰（教授）（2003 年 4 月 1 日～2007 年 3 月 31 日）^{＊）}

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) 金属表面上での反応の時間・空間発展に関する研究
- c) 和周波顕微分光装置の試作とその応用
- 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) 本研究グループは金属表面上に吸着した原子の振動をコヒーレントに励起でき（振動核波束の生成）、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により研究している。本年度は振動核波束の生成がどのような電子状態間の遷移によって誘起されるのかについて集中して実験をした。注目した吸着系は Cu(111) 表面に吸着したナトリウムである。この吸着系の表面電子状態は実験、計算ともよく研究されている。励起光のエネルギーを変えながらコヒーレントフォノンに基づく振動の初期強度を測定したところ、この作用スペクトルは基板である銅の吸収スペクトルに極めて近いことが分かった。したがって、コヒーレント振動励起の初期過程は表面近傍の基板の電子励起であることが明らかとなった。
- b) 表面反応は不均一反応の典型的な例であり、巨視的に平均化された反応速度論的な知見と共に、どのように空間的に反応が進行するかを研究することが必要である。本研究課題では、Ag(110) 表面上に準備した擬一次元化合物である AgO 鎖と水との反応がどのように時間・空間発展するかを走査型トンネル顕微鏡によって観測した。その結果、この反応はある誘導時間の後に、突如、反応が迅速に起きる反応フロントが出現し、これが表面上を移動するという極めて珍しい空間発展を捉えることができた。
- 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。本年度は、これを用いて、金属メッシュ試料における和周波信号の空間分布をイメージングし、また、赤外光と可視光パルスを遅延させることにより、和周波信号の遅延時間依存性を測定した。
- 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。佃グループとの共同研究により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して、金ナノクラスターを準備した。また、これを酸素エッチングにより酸化した試料に紫外光を照射すると酸化物が容易に還元されることを見出した。

B-1) 学術論文

T. MATSUMOTO, P. NICKUT, T. SAWADA, H. TSUNOYAMA, K. WATANABE, T. TSUKUDA, K. AL-SHAMERY and Y. MATSUMOTO, “Deposition and Fabrication of Alkanethiolate Gold Nanocluster Films on TiO₂(110) and the Effects of Plasma Etching,” *Surf. Sci.* **601**, 5121–5126 (2007).

T. MATSUMOTO, P. NICKUT, H. TSUNOYAMA, K. WATANABE, T. TSUKUDA, K. AL-SHAMERY and Y. MATSUMOTO, “Thermal and Photochemical Reactivity of Oxygen Atoms on Gold Nanocluster Surfaces,” *Surf. Sci.* **601**, 5226–5231 (2007).

H. TSUNOYAMA, P. NICKUT, Y. NEGISHI, K. AL-SHAMERY, Y. MATSUMOTO and T. TSUKUDA, “Formation of Alkanethiolate-Protected Gold Clusters with Unprecedented Core Sizes in the Thiolation of Polymer-Stabilized Gold Clusters,” *J. Phys. Chem. C* **111**, 4153–4158 (2007).

Y. MATSUMOTO, “Photochemistry and Photo-Induced Ultrafast Dynamics at Metal Surfaces,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **80**, 842–865 (2007).

O. NAKAGOE, N. TAKAGI, K. WATANABE and Y. MATSUMOTO, “Explosive Evolution of Hydrogen Abstraction of Water on Oxidized Ag(110) Surfaces Studied by Scanning Tunnelling Microscopy,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9**, 5274–5278 (2007).

M. FUYUKI, K. WATANABE, D. INO, H. PETEK and Y. MATSUMOTO, “Electron–Phonon Coupling at an Atomically Defined Interface: Na Quantum Well on Cu(111),” *Phys. Rev. B* **76**, 115427 (4 pages) (2007).

B-4) 招待講演

Y. MATSUMOTO, “Ultrafast dynamics of coherent phonons at metal surfaces covered by alkali metals,” DIET XI, Berlin (Germany), March 2007.

松本吉泰, 「超高速非線形分光による吸着種の振動ダイナミクス」物性研究所短期研究会「物性化学のフロンティア2007」, 千葉, 2007年11月.

渡邊一也, 「表面における超高速分光」第27回表面科学講演大会, 東京, 2007年11月.

B-6) 受賞、表彰

松本吉泰, Hanse Wissenschaftskolleg (Fellow of Hanse Institute for Advanced Studies), Germany (2002).

松本吉泰, 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-9) 学位授与

冬木正紀, “Coherent surface phonon dynamics at alkali-metal-covered surfaces,” 2007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).

特定領域研究(A), 「表面フォノンによる表面反応制御機構の解明」 松本吉泰 (2007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ープやマイクロスコープの手法を新たに開発し、不均一反応の根源的な理解を促進する。

*) 2007 年 4 月 1 日京都大学大学院理学研究科教授、分子科学研究所教授兼任

6-4 物質分子科学研究領域

電子構造研究部門

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) 金属と炭素による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た機能性物質の創成）
- 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・金属ドット列
- c) 超高速分光法による分子間化合物や金属錯体における励起状態ダイナミックス
- 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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 銅アセチリドナノワイヤーから生成させた世界最小の炭素被覆銅ナノケーブルは、径が 5–8 nm で長さが 1 μm 程度のもので、炭素同士の相互作用によってバンドルになりやすい。これは、電圧が 3 V 以下では 1 M Ω 程度の抵抗値を示すが、酸素雰囲気下では 1 気圧でこれが半減する。この抵抗値の酸素分圧に対するプロットは吸着等温線に従い、物理吸着、即ち、完全に可逆的な脱着を示し、零下 20 度から室温においても酸素センサーとして機能する。キャリアーはホールであり、ホッピングによって電気が流れていることが明らかになった。この結果は、*J. Am. Chem. Soc.* の Communication として掲載された。一方、燃料電池やスーパーキャパシタ、或いはリチウムイオン電池の負極などに用いられる炭素電極は、電気的には連続的でない炭素粒子の圧着体として制作されるために大きな抵抗が問題となっていた。ところが、銀アセチリドはこの問題に革新的な解決法をもたらすことが明らかになった。即ち、銀アセチリドを超音波を用いた特殊な合成法によって、ナノ樹状結晶として析出させ、これを弱く加熱して外皮を炭素層とし、急激な加熱によって炭素樹状形状を保ったまま内部の銀を突沸噴出させ、メソ多孔性炭素ナノ樹状体を生成させることに成功した。これは、BET 表面積が 1350 m²/g 以上、窒素ガスの分圧が 0.95 に於ける吸着量は 2,000 mL/g と極めて大きな値を示した。最も重要なことは、これが数百ミクロンの範囲で 1 体であり電導性が高く、イオンの流動性が良好であるため理想的な充放電特性を示すことである。（特願 2007-321170）
- b) 銀 - フェニルエチニル超長クラスター分子のワイヤー結晶のサイズを、溶媒分子のサイズを変えることによって制御できることを見出した。このワイヤーに光を照射するとエチニル基による金属イオンの還元反応が起こり、銀原子が粒子状に析出してくる。更に加熱を行うと、銀粒子の合体と有機物質の昇華が起こり、疑似 1 次元に銀ナノ粒子が配列する。即ち 銀ドット列を簡便に作成することが出来る。この成果は、*アメリカ物質科学会誌*にホットトピックとして大きく紹介された。
- c) 遷移金属原子を含む錯体では、大きなスピン軌道相互作用のため様々な多重項励起状態間の遷移や緩和が起こるが、励起状態のエネルギー差が近接している場合は、多重項間の状態平衡が観測される。Cr(tetraphenyl porphyrin)(Cl)(L)] (L = pyridine, 1-methylimidazole) では、 ${}^4\text{T}_1 \rightleftharpoons {}^6\text{T}_1$ 平衡が数百ピコ秒の間持続することが明らかになった。常温溶液中でこのような長時間励起状態平衡が持続する例は珍しい。（愛知教育大学との共同研究）

d) 金属陽イオンの水和錯体は生体内でも重要な機能を発現するが、その水和構造は中心となる金属イオンの電子構造によって大きな違いを見せる。先ず、s-p 混成軌道を取るアルミニウムイオンでは、水和体は基本的には sp^3 型の 3 次元配置を取るが、遷移金属では s-d 混成となり、金属イオンには 1 次元的に 2 個の水分子が配位し、それ以上の水分子はこれらの 2 個の水に水素結合によって配位する事になる。メタノールがアルミニウムイオンに配位する場合は、最初のアアルコールの C-O 結合が解離し、 $CH_3-Al-OH$ という全く新しい化学種を反応によって生成する。このような化合物の生成は、金属イオンが触媒反応をおこなうモデル様式となるであろう。水和金属イオンクラスターでは、水和による電荷移動が特徴的であり、様々な遷移金属イオンの水和様式、特に電子構造に注目した系統的な追求が必要である。

B-1) 学術論文

N. NISHI, J. NISHIJO, K. JUDAI, C. OKABE and O. OISHI, "Photo-Induced Evolution of Copper Sheets from Cluster Molecules and Its Application to Photolithographic Copper Patterning," *Eur. Phys. J. D* **43**, 287–290 (2007).

T. IINO, K. OHASHI, K. INOUE, K. JUDAI, N. NISHI and H. SEKIYA, "Coordination and Solvation of Noble Metal Ions: Infrared Spectroscopy of $Ag^+(H_2O)_n$," *Eur. Phys. J. D* **43**, 37–40 (2007).

A. FURUYA, M. TSURUTA, F. MISAIZU, K. OHNO, Y. INOKUCHI, K. JUDAI and N. NISHI, "Infrared Photodissociation Spectroscopy of $Al^+(CH_3OH)_n$ ($n = 1-4$)," *J. Phys. Chem. A* **111**, 5995–6002 (2007).

K. INOUE, K. OHASHI, T. IINO, K. JUDAI, N. NISHI and H. SEKIYA, "Coordination and Solvation of Copper Ion: Infrared Photodissociation Spectroscopy of $Cu^+(NH_3)_n$ ($n = 3-8$)," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9**, 4793–4802 (2007) (Cover article).

M. INAMO, C. OKABE, T. NAKABAYASHI, N. NISHI and M. HOSHINO, "Femtosecond Time-Resolved Photo-Absorption Studies on the Excitation Dynamics of Chromium(III) Porphyrin Complexes in Solution," *Chem. Phys. Lett.* **445**, 167–172 (2007).

J. NISHIJO, O. OISHI, K. JUDAI and N. NISHI, "Facile and Mass-Productible Fabrication of One-Dimensional Ag Nanoparticle Arrays," *Chem. Mater.* **19**, 4627–4629 (2007).

T. INO, K. OHASHI, K. INOUE, K. JUDAI, N. NISHI and H. SEKIYA, "Infrared Spectroscopy of $Cu^+(H_2O)_n$ and $Ag^+(H_2O)_n$: Coordination and Solvation of Noble-Metal Ions," *J. Chem. Phys.* **126**, 194302 (2007).

B-4) 招待講演

N. NISHI, "Structure and Functionality of Metal Acetylides: Nanocrystals Nanowires, Nanosheets, Nanosponge, and Hollow Graphitic Polyhedrons," Gordon Research Conference, "Clusters, Nanocrystals & Nanostructures," Mount Holyoke College, South Hadley (U.S.A.), July–August 2007.

西 信之, "Structure and Functions of Nano-Materials Produced by Microwave Heating, Photoirradiation or Normal Heating," 冒頭招待講演, 文部科学省特定領域研究「マイクロ波励起・高温非平衡反応場の科学」公開シンポジウム「マイクロ波による物質材料の加熱と処理」ホテルゆうぽうと, 東京, 2007年12月.

B-5) 特許出願

特願PDT/JP2007/069690,「酸素検出素子、及び酸素ガス検出素子用ナノワイヤー」西 信之、十代 健, 2007年.

特願 2007-321170,「金属内包樹状炭素ナノ構造物、炭素ナノ構造体、金属内包樹状炭素ナノ構造物の作製方法、及び炭素ナノ構造体の作製方法」西 信之、沼尾茂悟、十代 健、西條純一, 2007年.

B-6) 受賞、表彰

西 信之, 井上學術賞 (1991).

西 信之, 日本化学会學術賞 (1997).

B-7) 学会および社会的活動

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).

日本学術振興会グローバルCOE プログラム委員会専門委員.

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 (2002–2006).

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) 大学での講義、客員

大阪大学理学研究科, 非常勤講師「化学A」2007年度前期.

九州大学理学研究院, 非常勤講師「分子科学特別講義」2007年度後期.

B-10) 外部獲得資金

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).

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

金属アセチリドの研究の中から, その大きな発熱性を利用して金属を突沸によって系外に排出し, 炭素ナノ構造体を作るという手法を開発した。これは, ガス吸着体としてばかりでなく, 全体が1体となっており, グラファイト構造に富むために, スーパーキャパシタや燃料電池の電極として活用されることが期待される全く新しい炭素構造体である。化学結合の持つ力は大きく,

大きな圧力をかけてもスポンジのようにすぐに元に戻る。マイクロ波を使ってこの構造体を作るとグラファイト部の平坦面が多くなり、スポンジ特性は失われ空隙率は減少するが大きな表面積と高い電導特性は、表面に酸化バナジウム膜を張ることによってリチウムイオン電池電極にも発展しうる。このような新しい炭素物質の性質の解明と、金属原子やクラスターの担持体としての可能性も追求されるであろう。特に、チタン原子を細密に担持し、水素分子の分子状吸着の研究への発展も期待が持てる。

スーパークラスター研究の究極である、金属エチニル超超クラスター分子の研究も、芳香属分子の無限スタック構造が実現しているために様々なモディフィケーションによって電子構造的にも興味深い分子系が構築できそうである。

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の表面磁性
- b) 超高速時間分解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) 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。当研究室では、実験室で簡便に行える磁気光学 Kerr 効果 (MOKE) 法に加え、UVSOR-II BL4B を用いた X線磁気円二色性法 (XMCD) を用いて、様々な磁性薄膜の磁気特性検討を行ってきた。今年度は、XMCD 観測系において、超高真空仕様超伝導磁石 / 極低温クライオスタットを導入し、7 T, 5 K での測定が可能となるような大改造を行った (従来は 0.3 T, 100 K)。立ち上げはほぼ順調に終了し、Cu(001) 表面に作成した 0.4 原子層 Co の磁気異方性、Cu(001) 表面に作成した Co, Ni 薄膜の磁気特性の NO 吸着効果、N 吸着 Cu(001) 表面に作成した 1 原子層 FeN の磁気特性、Cu(001)Cu(110)-(2×3)N 表面に自己組織化的に成長させた Co ナノロッドの磁気特性などを検討した。
- b) 紫外光による磁気円二色性は放射光 X 線に比べ一般に感度が 2 桁程度も悪く、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。しかし、一昨年度から昨年度にかけて、我々は、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感度が 2 桁も向上し、放射光 X 線と同程度になり、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、昨年度、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。レーザーによるポンププローブ法を用いることで、時間分解能が容易に 100 fs 程度に到達でき、放射光 X 線の 100 ps よりはるかに高速な時間分解能が得られるので、この開発に着手した。既に 400 nm の Ti:sapphire レーザーを用いて試験的に時間分解 (100 fs 程度) 顕微像を得ることに成功した。現在、220–300 nm 程度の深紫外レーザー (Ti:sapphire レーザー 3, 4 倍波) を導入し、また、試料槽の整備等を行っているところである。さらに、光電子分光器を導入し、二光子磁気円二色性光電子分光も検討している。

B-1) 学術論文

- T. NAKAGAWA, T. YOKOYAMA, M. HOSAKA and M. KATOH**, “Measurements of Threshold Photoemission Magnetic Dichroism Using Ultraviolet Lasers and a Photoelastic Modulator,” *Rev. Sci. Instrum.* **78**, 023907 (5 pages) (2007).
- J. MIYAWAKI, D. MATSUMURA, A. NOJIMA, T. YOKOYAMA and T. OHTA**, “Structural Study of Co/Pd(111) and CO/Co/Pd(111) by Surface X-Ray Absorption Fine Structure Spectroscopy,” *Surf. Sci.* **601**, 95–103 (2007).
- T. NAKAGAWA, M. OHGAMI, H. OKUYAMA, M. NISHIJIMA and T. ARUGA**, “Transition between Tetramer and Monomer Phases Driven by Vacancy Configuration Entropy on Bi/Ag(001),” *Phys. Rev. B* **75**, 155409 (7pages) (2007).
- A. SAITO, K. TAKAHASHI, Y. TAKAGI, K. NAKAMATSU, K. HANAI, Y. TANAKA, D. MIWA, M. AKAI-KASAYA, S. SHIN, S. MATSUI, T. ISHIKAWA, Y. KUWAHARA and M. AONO**, “Study for Noise Reduction in Synchrotron Radiation Based Scanning Tunneling Microscopy by Developing Insulator-Coat Tip,” *Surf. Sci.* **601**, 5294–5299 (2007).

K. TOMATSU, K. NAKATSUJI, T. IIMORI, Y. TAKAGI, H. KUSUHARA, A. ISHII and F. KOMORI, “Atomic Seesaw Switch Realized by Tilted Asymmetric Sn-Ge Dimers on the Ge(001) Surface,” *Science* **315**, 1696–1698 (2007).

Y. TAKAGI, K. NAKATSUJI, Y. YOSHIMOTO and F. KOMORI, “Superstructure Manipulation on a Clean Ge(001) Surface by Carrier Injection Using an STM,” *Phys. Rev. B* **75**, 115304 (10 pages) (2007).

D. SEKIBA, Y. YOSHIMOTO, K. NAKATSUJI, Y. TAKAGI, T. IIMORI, S. DOI and F. KOMORI, “Strain-Induced Change in Electronic Structure of Cu(100),” *Phys. Rev. B* **75**, 115404 (12 pages) (2007).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

H. ABE, K. AMEMIYA, D. MATSUMURA, T. OHTSUKI, E. SAKAI, T. YOKOYAMA and T. OHTA, “Depth-Resolved XMCD Application to Fe/Ni/Cu(001) Films,” *AIP Conf. Proc.* **882**, 384 (2007).

B-3) 総説、著書

中川剛志、横山利彦, 「可視・紫外レーザーによる磁性薄膜での光電子磁気二色性」 *日本物理学会誌*, **62**, 522–526 (2007).

太田俊明、横山利彦, 編著, 「内殻分光——元素選択性をもつX線内殻分光の歴史・理論・実験法・応用——」 1章「はじめに」p.1–5, 4章「XAFS」1節「はじめに」p.79–79, 2節「EXAFSと熱振動」p.80–86を横山が分担執筆, アイ・ピー・シー出版 (2007) .

齋藤 彰、高橋浩史、高木康多、花井和久、中松健一郎、細川博正、田中義人、三輪大五、矢橋牧名、松井真二、石川哲也、辛埴、桑原裕司、青野正和, 「放射光STMを用いたナノスケール表面元素分析」 *表面科学会誌*, **28**, 453–458 (2007).

小森文夫、高木康多、中辻 寛、吉本芳英, 「トンネルキャリア注入とその伝播によるナノスケール遠隔原子操作」 *固体物理*, **42**, 19–27 (2007).

B-4) 招待講演

中川剛志, 「紫外レーザー誘起光電子を利用した磁気二色性の研究」 日本表面科学会第27回表面科学講演大会, 東京, 2007年11月 .

B-6) 受賞、表彰

中川剛志, 日本表面科学会第3回若手研究者部門講演奨励賞 (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 (2001.1–2007.12).

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, 2007).

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).

その他

文部科学省先端研究施設共用イノベーション創出事業 ナノテクノロジーネットワーク「中部地区ナノテク総合支援：ナノ材料創製加工と先端機器分析」拠点長 (2007–2011).

B-8) 大学での講義、客員

東京工業大学大学院理学研究科,「薄膜表面磁性(化学特別講義第二)」2007年10月23日–24日.

理化学研究所播磨研究所(RIKEN/SPRING-8)協力研究員, 2007年9月–.(高木康多)

B-9) 学位授与

馬曉東 (MA, Xiao-Dong), “Magnetism of chemically modified ultrathin metal films and nanorods studied by magneto-optical methods,” 2007年3月, 博士(理学)

B-10) 外部獲得資金

基盤研究(A),「フェムト秒時間分解紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の開発」横山利彦 (2007年–2009年).

文部科学省先端研究施設共用イノベーション創出事業 ナノテクノロジーネットワーク,「中部地区ナノテク総合支援：ナノ材料創製加工と先端機器分析」横山利彦(拠点長) (2007年–2011年).

若手研究(A),「磁性薄膜でのレーザー光電子による偏光可変・多光子磁気二色性と光電子顕微鏡の研究」中川剛志 (2007年–2009年).

若手研究(B),「半導体表面のドーパントの元素識別 - 放射光STMを用いて - 」高木康多 (2007年–2009年)

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).

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).

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).

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).

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(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).

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と新しい磁気光学分光法の開発を主テーマとして研究グループをスタートさせた。前者では、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。後者としては、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などがある。

今年度はX線磁気円二色性法システムの電磁石を超伝導磁石(7 T)とし、極低温下(5 K)での測定を可能とした。既に多くの共同研究を行い始めているが、高磁場極低温測定が必要な磁気異方性に関する研究やクラスター・ナノロッド磁性を検討する。また、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、このたび試験的にではあるが紫外パルスレーザー利用 100 fs 超高速時間分解紫外光電子顕微鏡測定に成功した。紫外波長可変レーザーを整備したので、本実験に入る段階である。今後は、これまでほとんど全く研究されていない二光子磁気円二色性光電子分光を含めて検討する。さらに、空間分解能向上のため、走査トンネル顕微鏡を用いて同じ測定が可能かどうか、また、自然円二色性顕微鏡の開発などにも着手したい。

佃 達 哉 (准教授)(2000 年 1 月 1 日 ~ 2007 年 9 月 30 日)^{*}

A-1) 専門領域：物理化学、クラスター化学

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。グルタチオン保護金クラスターの構造を ^{197}Au メスバウアー分光法で調べ、信定らが理論的に提唱した core-in-cage 構造を支持する結果を得た。 $\text{Au}_{25}(\text{SC}_6\text{H}_{13})_{18}$ クラスターをモデルとして、レドックス反応とエレクトロスプレーイオン化質量分析法を用いて、安定性の起源を検証した。その結果、電子的な効果よりもむしろ幾何的な閉殻構造をとることが安定性の原因であると結論した。 $\text{Au}_{38}(\text{SC}_{12}\text{H}_{25})_{24}$ や $\text{Au}_{144}(\text{SC}_{12}\text{H}_{25})_{59}$ などの一連の魔法組成クラスターの選択合成と分子式の決定に初めて成功した。チオラート保護銀クラスターの魔法組成を見い出した。
- 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。ポリビニルピロリドン保護金クラスター(平均サイズ 1.3 nm)の電子状態を、XPS, XANES, 吸着 CO の赤外分光によって調べた。その結果、金クラスター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。星型高分子で安定化した金クラスターが、劣化することなくアルコール空気酸化に対して高い活性を示すことを明らかにした。また、熱感応性を利用した回収再利用を実証した。

B-1) 学術論文

- H. SAKURAI, H. TSUNOYAMA and T. TSUKUDA, "Oxidative Homo-Coupling of Potassium Aryltrifluoroborates Catalyzed by Gold Nanocluster under Aerobic Conditions," *J. Organomet. Chem.* **692**, 368–374 (2007).
- H. TSUNOYAMA, T. TSUKUDA and H. SAKURAI, "Synthetic Application of PVP-Stabilized Au Nanocluster Catalyst to Aerobic Oxidation of Alcohols in Aqueous Solution under Ambient Conditions," *Chem. Lett.* **36**, 212–213 (2007).
- H. TSUNOYAMA, P. NICKUT, Y. NEGISHI, K. AL-SHAMERY, Y. MATSUMOTO and T. TSUKUDA, "Formation of Alkanethiolate-Protected Gold Clusters with Unprecedented Core Sizes in the Thiolation of Polymer-Stabilized Gold Clusters," *J. Phys. Chem. C* **111**, 4153–4158 (2007).
- N. K. CHAKI, H. TSUNOYAMA, Y. NEGISHI, H. SAKURAI and T. TSUKUDA, "Effect of Ag-Doping on Catalytic Activity of PVP-Stabilized Au Clusters in Aerobic Oxidation of Alcohol," *J. Phys. Chem. C* **111**, 4885–4888 (2007).
- I. KAMIYA, H. TSUNOYAMA, T. TSUKUDA and H. SAKURAI, "Lewis Acidic Character of Zero-Valent Gold Nanoclusters under Aerobic Conditions: Intramolecular Hydroalkoxylation of Alkenes," *Chem. Lett.* **36**, 646–647 (2007).
- Y. SHICHIBU, Y. NEGISHI, H. TSUNOYAMA, M. KANEHARA, T. TERANISHI and T. TSUKUDA, "Extremely High Stability of Glutathionate-Protected Au_{25} Clusters against Core Etching," *Small* **3**, 835–839 (2007).

- Y. SHICHIBU, Y. NEGISHI, T. WATANABE, N. K. CHAKI, H. KAWAGUCHI and T. TSUKUDA**, “Biicosahedral Gold Clusters $[\text{Au}_{25}(\text{PPh}_3)_{10}(\text{SC}_n\text{H}_{2n+1})_5\text{Cl}_2]^{2+}$ ($n = 2-18$): A Stepping Stone to Cluster-Assembled Materials,” *J. Phys. Chem. C* **111**, 7845–7847 (2007).
- K. IKEDA, Y. KOBAYASHI, Y. NEGISHI, M. SETO, T. IWASA, K. NOBUSADA, T. TSUKUDA and N. KOJIMA**, “Thiolate-Induced Structural Reconstruction of Gold Clusters Probed by ^{197}Au Mössbauer Spectroscopy,” *J. Am. Chem. Soc.* **129**, 7230–7231 (2007).
- M. IMAMURA, T. MIYASHITA, A. TANAKA, H. YASUDA, Y. NEGISHI and T. TSUKUDA**, “Electronic Structure of Dendrimer-Encapsulated Au Nanocluster,” *Eur. Phys. J. D* **43**, 233–236 (2007).
- S. PANDE, S. K. GHOSH, S. PRAHARAJ, S. PANIGRAHI, S. BASU, S. JANA, A. PAL, T. TSUKUDA and T. PAL**, “Synthesis of Normal and Inverted Gold-Silver Core-Shell Architectures in β -Cyclodextrin and Their Application in SERS,” *J. Phys. Chem. C* **111**, 10806–10813 (2007).
- Y. NEGISHI, N. K. CHAKI, Y. SHICHIBU, R. L. WHETTEN and T. TSUKUDA**, “Origin of Magic Stability of Thiolated Gold Clusters: A Case Study on $\text{Au}_{25}(\text{SC}_6\text{H}_{13})_{18}$,” *J. Am. Chem. Soc.* **129**, 11322–11323 (2007).
- S. KANAOKA, N. YAGI, Y. FUKUYAMA, S. AOSHIMA, H. TSUNOYAMA, T. TSUKUDA and H. SAKURAI**, “Thermosensitive Gold Nanoclusters Stabilized by Well-Defined Vinyl Ester Star Polymers: Reusable and Durable Catalysts for Aerobic Alcohol Oxidation,” *J. Am. Chem. Soc.* **129**, 12060–12061 (2007).
- T. MATSUMOTO, P. NICKUT, T. SAWADA, H. TSUNOYAMA, K. WATANABE, T. TSUKUDA, K. AL-SHAMERY and Y. MATSUMOTO**, “Deposition and Fabrication of Alkanethiolate Gold Nanocluster Film on $\text{TiO}_2(110)$ and the Effects of Plasma Etching,” *Surf. Sci.* **601**, 5121–5126 (2007).
- T. MATSUMOTO, P. NICKUT, H. TSUNOYAMA, K. WATANABE, T. TSUKUDA, K. AL-SHAMERY and Y. MATSUMOTO**, “Thermal and Photochemical Reactivity of Oxygen Atoms on Gold Nanocluster Surfaces,” *Surf. Sci.* **601**, 5226–5231 (2007).

B-3) 総説、著書

- T. TSUKUDA, H. TSUNOYAMA and Y. NEGISHI**, “Systematic Synthesis of Monolayer-Protected Gold Clusters with Well-Defined Chemical Compositions,” in *Metal Nanoclusters in Catalysis and Materials Science: The Issue of Size-Control*, B. Corain, G. Schmid, N. Toshima, Eds., Elsevier, 385–394 (2007).

B-4) 招待講演

- 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構造・機能」ナノ学会第五回大会, 筑波, 2007年5月.
- 根岸雄一, 「チオール保護金クラスターの示すサイズ特異的構造と機能」神戸大VBLセミナー, 神戸, 2007年7月.
- 佃 達哉, 「配位子保護金クラスターの合成と構造」錯体化学夏の学校, 箱根, 2007年8月.
- 佃 達哉, 「金クラスターのサイズ選択的合成と構造・物性」第1回分子科学討論会, 仙台, 2007年9月.
- 佃 達哉, 「魔法数金クラスターの化学合成と構造・物性評価」日本物理学会第62回年次大会, 札幌, 2007年9月.
- T. TSUKUDA**, “Magic Gold Cluster Compounds: Synthesis and Structures,” ICAM Bangalore (India), October 2007.
- 佃 達哉, 「金クラスターのサイズと構造・物性」理学研究流動機構シンポジウム, 東京, 2007年11月.
- 佃 達哉, 「魔法数金クラスター——合成・構造・機能——」第18回日本MRS学術シンポジウム, 東京, 2007年11月.

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).
根岸雄一, 第1回PCCP Prize (2007).

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 (2005–2007).

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 (2005–2007).

学会誌編集委員

「ナノ学会会報」編集委員 (2003–2004).

B-8) 大学での講義、客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「基礎電子化学」2007年前期.
九州大学先端物質科学研究所, 非常勤講師「金クラスターのサイズ選択合成と構造・物性・触媒作用」2007年12月3日.

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).
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).
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).
特定領域研究「実在系の分子理論(領域代表: 榊茂好)」, 「チオール修飾魔法数金25量体クラスターの電子・幾何構造とチオール構造の相関の解明」根岸雄一 (2007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).

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).

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を理解するためには、幾何構造の解明は不可欠である。単結晶X線構造解析に加えて、衝突誘起解離や負イオン光電子分光などの新しい実験を立ち上げ、構造決定にむけて努力したい。また、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。

*) 2007 年 10 月 1 日北海道大学触媒化学研究センター教授，分子科学研究所教授兼任

電子物性研究部門

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) 電子間のクーロン反撥エネルギーが電子の運動エネルギー利得を上回るとき電子は局在化する。分子導体の多くの物質では両エネルギーが拮抗する境界領域にあるために、電子の局在化に起因する金属・絶縁体転移が数多く観測されている。このような絶縁状態では、クーロン反発エネルギーを最小にするために、電荷分布に規則正しい濃淡が発生する。電荷秩序相をもつ物質の中には反転対称性を失って自発分極を発生する強誘電性の物質がある。また、電荷秩序相を圧力等で壊すと超伝導性が発現する物質がある。このような物質における超伝導の対生成には電荷ゆらぎがかかっているとの提案がある。我々はこのような電荷秩序状態を振動分光法を用いて研究している。本年度は β -(*meso*-DMBEDT-TTF)₂PF₆ の金属絶縁体転移が電荷秩序状態への相転移であることを明らかにした。また、この構造変化を伴う電荷秩序相転移は電気抵抗が上昇に転ずる温度より低いため、電荷均一な金属状態から、電荷均一な非金属状態を経て、電荷不均一な電荷秩序状態（絶縁体）へと変化することが明らかになった。ラマン分光法を用いて圧力・温度相図を作成したところ、超伝導状態は電荷秩序状態に隣接しているのではなく、電荷均一な非金属状態と接していることが分かった。電荷均一な非金属状態の詳細はまだ良く分かっていないが、異なる配列を持つ電荷秩序状態がフラストレートしながら高速でゆらいている状態ではないかと推測している。強誘電性に関する研究では α -(BEDT-TTF)₂I₃ について非線形分光法を用いた研究を行ってきたが、本年度は SHG 顕微鏡を自作して自発分極をもつ対向分域の観測に成功した。分域の大きさは大きいもので数百 μm 程度ある。主な分域壁は *a* 軸に沿っており、*b* 軸方向に配列した電荷秩序状態と整合している。この実験結果は強い SHG 信号と共に電荷秩序相が強誘電体であることを強く指示している。
- b) イオン結晶であるピフェロセン⁻-(F₁TCNQ)₃ は価数変換相転移を起こす。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。広い温度幅でこのような相分離状態が発生するとき、通常はスピントロニクスオーバー錯体やリラクサー強誘電体のように、高温相と低温相の分域はナノメートル以下の非常に小さなサイズをもつ。この物質は 50 度という広い温度範囲でマクロなサイズの相分離状態をとるのが特徴である。何故、このような相分離状態が発現するのか分かっていないが、たとえば結晶内に生ずる大きな歪に原因を求める模型を提唱した。大きな歪は高温相と低温相の体積差が 3% にも及ぶ大きな値をもつために発生すると考えている。

B-1) 学術論文

S. IWAI, K. YAMAMOTO, A. KASHIWAZAKI, H. NAKAYA, K. YAKUSHI, H. OKAMOTO, H. MORI and Y. NISHIO, "Photoinduced Melting of Stripe-Type Charge Order and Metallic-Domain Formation in Layered BEDT-TTF Based Salt," *Phys. Rev. Lett.* **98**, 09740 (4 pages) (2007).

T. YAMAMOTO, J. EDA, A. NAKAO, R. KATO and K. YAKUSHI, "Charge Ordered State and Frustration of the Site-Charges in $(\text{ET})_3\text{Te}_2\text{I}_6$ and $(\text{BETS})_2\text{Te}_2\text{I}_6$," *Phys. Rev. B* **75**, 205132 (17 pages) (2007).

M. URUICHI, Y. YUE, K. YAKUSHI and T. MOCHIDA, "Two-Phase Coexistence in the Monovalent-to-Divalent Phase Transition in Dineopentylbiferrocene-Fluorotetracyanoquinodimethane, $(\text{npBifc}-(\text{F}_1\text{TCNQ})_3$), Charge-Transfer Salt," *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 124707 (6 pages) (2007).

T. KUBO, Y. GOTO, M. URUICHI, K. YAKUSHI, M. NAKANO, A. FUYUHIRO, Y. MORITA and K. NAKASUJI, "Syntheses and Characterizations of Acetylene-Linked Bisphenalenyl and Metallic-Like Behavior in Its Charge-Transfer Complex," *Chem. -Asian J.* **2**, 1370–1379 (2007).

B-4) 招待講演

葉師久弥, 「Electronic structure of one-dimensional phthalocyanine conductors: Comparison between $(\text{NiPc})_2\text{AsF}_6$ and $(\text{CoPc})_2\text{AsF}_6$ 」d- π 系の物理と化学に関する研究会, 北陸先端大学, 2007年9月.

葉師久弥, 「赤外・ラマン分光法による α -(BEDT-TTF) $_2\text{I}_3$ の電荷秩序相転移の研究」基研研究会「分子性ゼロギャップ物質の新物性」京都大学基礎物理学研究所, 2007年12月.

葉師久弥, 「赤外ラマン分光法による分子導体の電荷秩序状態の研究」東京工芸大学ナノ科学センターナノ科学セミナー, 東京工芸大学, 2007年12月.

B-6) 受賞、表彰

山本 薫, ISCOM2007 (International Symposium on Crystalline Organic Metals, superconductors, and ferromagnets) Poster Prize (2007).

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, 9回日中合同シンポジウム組織委員(第5回, 7回, 9回は日本側代表, 6回, 8回は組織委員長)(1989, 1992, 1995, 1998, 2001, 2004, 2007).

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, 2007–).

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),「 π -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 π -d 電子系の研究」葉師久弥 (1997年–2000年).

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

基盤研究(B),「電荷秩序系を中心とする不均一な電子状態をもつ電荷移動塩の研究」葉師久弥 (2007年–2009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).

萌芽研究,「有機伝導体の電子強誘電転移における分域成長の観測と分域壁への光電荷注入」山本 薫 (2007年).

C) 研究活動の課題と展望

θ -型BEDT-TTF 塩の金属相と電荷秩序相の中間相で発生する遅い電荷のゆらぎを観測するために光散乱の実験を試みているが、未だ成功していない。光の波長や温度、また物質を変えて、引き続き最適の条件を探している。

遠赤外用の反射分光法の装置がほぼ立ち上がったので、 α -、 β -、 κ -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の光学伝導度の温度依存性また、懸案の β'' -(BEDT-TTF)(TCNQ)の遠赤外領域の光学伝導の温度依存性を測定し、温度と共に変化する充填率 1/4 の電子系の電子状態を解明することを計画している。

β -(DMBEDT-TTF) $_2$ PF $_6$ の電荷均一非金属相における速い電荷ゆらぎを観測するためには伝導面の発達した大きな単結晶が必要である。伝導面での光学スペクトル(できれば遠赤外領域まで)とラマン分光法における幅広い 10 meV モードの観測で速い電荷ゆらぎの存在を示唆できると考えている。

従来の強誘電体はその発現機構から BaTiO $_3$ のようなイオン変位型と NaNO $_2$ のような秩序無秩序型に大別されている。いずれもイオンの動きが強誘電性発現を担っている。 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の強誘電性は電荷秩序化が引き金になっているため、我々は電子強誘電性の可能性が強いと主張している。今後、電子-格子相互作用の役割を明らかにするために遠赤が領域のソフトモードの有無を確認しようと考えている。さらに、非線形分光法を用いて強誘電性を発現する物質の探索も計画している。これに関連して、操作型円二色性(CD)顕微鏡を自作して、強誘電分域を観測する手法の開発を計画している。

小 林 速 男 (教 授) (1995 年 7 月 1 日 ~ 2007 年 3 月 31 日)^{*}

A-1) 専門領域：物性分子科学

A-2) 研究課題：

- a) ポーラス分子空間を利用した誘電体の開発
- b) 超高压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

- a) 最近ポーラス結晶のナノ空間に閉じ込められたゲスト分子の機能に注目した新規な機能性分子物質の開発を行って来たが、最近ポーラス結晶中の水分子が高温で液体状態にあり、350 K 程度の温度で大きな格子変形を伴って反強誘電固体状態に転移する系を見いだした。新たな機能性物質の開発やナノ空間内の分子クラスターの物理化学的研究の観点から意義があるものと思われる。
- b) 最近、単一種の分子だけで構成された金属結晶が開発されたが、単一種の分子が集合して金属となる条件を単純化して考えると、 高压を加える事によりによりバンド幅を HOMO-LUMO ギャップ程度にまで増大させる事、および HOMO-LUMO ギャップを通常の分子性伝導体のバンド幅程度まで極端に小さくする事、という2通りの方法が考えられる。このうち単一分子性金属の開発は の方法を用いた事に相当する。残った のプロセスを具体的に考えには、従来あまり考えてこられなかった「分子構造の崩壊」という状況を考察する必要があると考えている。

B-1) 学術論文

B. ZHANG, Z. WANG, M. KURMOO, S. GAO K. INOUE and H. KOBAYASHI, “Guest-Induced Chirality in the Ferrimagnetic Nanoporous Diamond Framework $\text{Mn}_3(\text{HCOO})_6$,” *Adv. Funct. Mater.* **17**, 577–584 (2007).

E. FUJIIWARA, K. YAMAMOTO, M. SHIMSMURA, B. ZHOU, A. KOBAYASHI, K. TAKAHASHI, Y. OKANO, H. CUI and H. KOBAYASHI, “ $(\text{Bu}_4\text{N})[\text{Ni}(\text{dmstfdt})_2]$: A Planar Nickel Coordination Complex with an Extended-TTF Ligand Exhibiting Metallic Conduction, Metal–Insulator Transition and Weak Ferromagnetism,” *Chem. Mater.* **19**, 553–558 (2007).

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 (1998–2007).

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 (2002–2008).

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・磁性体の構築」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–2008年).

C) 研究活動の課題と展望

分子科学研究所での研究活動は2007年3月末をもって終了した。

*) 2007 年 10 月 1 日 日本大学文理学部客員教授

中 村 敏 和 (准教授) (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 による有機導体・分子性固体の電子状態理解
- b) パルス ESR による一次元電子系の相転移近傍スピンドYNAMIX
- c) 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) 有機導体・導電性分子性固体・低次元スピン系の特異な電子状態に興味を持ち、微視的な観点からその電子状態やスピン・電荷ダイナミクスを明らかにするため NMR 測定を行っている。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} 、スピンエコー緩和 (T_{2G}^{-1} , T_{2L}^{-1}) を測定すると共に詳細な解析を行っている。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、非常に興味を持たれている。この系の競合電子相の起源に迫るために、種々の塩に対して電荷秩序相および基底状態に対する研究を行っている。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。ヨウ素をドーブすると、スピンを持ったキャリアが生成し高い伝導性を持っていることが分かる。 ^1H NMR スピン格子緩和時間 T_1 は、極低温で非常に遅くなり量子極限状態に入っているものと考えられる。これは幾何学的かつ電子状態的に特異な構造を持つスピン系に由来するものと考えている。この他、超伝導相近傍に存在する二次元系の電荷の乱れに対しても研究を行っている。
- b) 上記の一次元電子系の競合電子相問題に関連し、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 法による研究を行っている。1/2 バンド充填 (モットハバード絶縁体) 系であり典型的なスピンパイエルズ転移を示す MEM(TCNQ)₂ と 1/4 バンド充填で電荷秩序転移を示す (TMTTF)₂PF₆ に対してスピンパイエルズ転移近傍でのスピン - 格子・スピン - スピン緩和率の温度依存性を測定した。1/4 バンド充填系では、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た。スピンパイエルズ転移温度以下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) 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YNAMIX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

K. MIZOGUCHI, S. TANAKA, M. OJIMA, S. SANO, M. NAGATORI, H. SAKAMOTO, Y. YONEZAWA, Y. AOKI, H. SATO, K. FURUKAWA and T. NAKAMURA, "AF-Like Ground State of Mn-DNA and Charge Transfer from Fe to Base- π -Band in Fe-DNA," *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 043801 (4 pages) (2007).

M. ITOI, M. KANO, N. KURITA, M. HEDO, Y. UWATOKO and T. NAKAMURA, “Pressure-Induced Superconductivity in Quasi-One-Dimensional Organic Conductor (TMTTF)₂AsF₆,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 053703 (5 pages) (2007).

T. NAKAMURA, K. FURUKAWA and T. HARA, “Redistribution of Charge in the Proximity of the Spin-Peierls Transition: ¹³C NMR Investigation of (TMTTF)₂PF₆,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 064715 (5 pages) (2007).

T. KAKIUCHI, Y. WAKABAYASHI, H. SAWA, T. TAKAHASHI and T. NAKAMURA, “Charge Ordering in α-(BEDT-TTF)₂I₃ by Synchrotron X-Ray Diffraction,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 113702 (4 pages) (2007).

B-2) 総説、著書

T. NAKAMURA, T. HARA and K. FURUKAWA, “Pronounced Enhancement of Charge Ordering Transition Temperatures in TMTTF Salts with Deuteration,” in *Multifunctional Conducting Molecular Materials*, G. SAITO, F. WUDL, R. C. HADDON, K. TANIGAKI, T. ENOKI, H. E. KATZ, M. MAESATO, Eds., Royal Society of Chemistry; Cambridge, pp.83–86 (2007).
中村敏和,「高圧技術ハンドブック」毛利 信男他編, 丸善, pp.274–280 (2007).

B-4) 招待講演

T. NAKAMURA, “Pulsed ESR and NMR Investigation of Charge and Spin Dynamics in One-dimensional Organic Conductors,” Molecular Photoscience Research Center International Workshop—Low Energy excitations in Condensed Phases—, Kobe (Japan), November 2007.

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 (2001–2007).

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–).

東京大学物性研究所物質合成・設備共同利用委員会委員 (2005–2007).

学会の組織委員

A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology (ISESS-SEST2007) Shizuoka, Japan Organizing Committee.

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).

電子スピンサイエンス学会編集アドバイザー (2006–).

B-8) 大学での講義、客員

大阪市立大学大学院理学研究科,「電子物性学特別講義I」2007年12月25日-26日.

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。

分子機能研究部門

江 東 林 (准教授)(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) 多核金属集積体を用いたスピン空間の精密構築
- b) 新規 π 共役電子系の構築と機能

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 多核金属集積体を用いたスピン空間の精密構築：サレンなどのシフ塩基配位子は、ほとんど全ての金属と安定な平面錯体を作ることが知られ、中心金属の種類によって、強磁性やスピン転移などの磁気的性質、発光などの光機能性、不斉反応などへの触媒活性を示す。本研究は、空間形態が明確な樹木状分子を活用することで、サレン金属錯体の配列制御を通じて、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。具体的に、本年度では、次元・サイズ・形態の異なるサレン金属集積体の構築、具体的に、デンドリマーを用いた低次元配位高分子の構築、 π 共役系を用いた低次元金属集積体の構築を中心に検討した。その結果、多核金属錯体を有する平面状共役系分子の合成に成功し、溶液から容易に一次元ナノワイヤーやシートをつくれることを見いだした。また、一次元ロッド状金属配位高分子を合成し、溶液において室温付近で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、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、スピン状態を制御できる。興味深いことに、キャストリングにより得られたフィルムでは一次元ロッドが自己組織化、分子間相互作用により高・低スピンの両状態をともに安定化することが可能となり、広い温度範囲をわたってヒステリシスを示した。
- b) 新規 π 共役電子系の構築と機能：本研究では、金属配位結合や水素結合、 π - π 相互作用などの分子間相互作用を利用・制御し、新規な光機能性ナノ構造体を創出し、小分子ユニットに見られない新しい機能の開拓を目指している。本年度では新規拡張型 π 電子系の合成を行い、自己組織化による光機能性ナノ構造体の構築に成功した。

B-1) 学術論文

T. FUIGAYA, D. -L. JIANG and T. AIDA, "Spin-Crossover Physical Gels: A Quick Thermoreversible Response Assisted by Dynamic Self-Organization," *Chem. -Asian J.* **2**, 106–113 (2007).
A. XIA, J. HU, C. WANG and D. -L. JIANG, "Synthesis of Magnetic Microspheres with Controllable Structure via Polymerization-Triggered Self-Positioning of Nanocrystals," *Small* **3**, 1811–1817 (2007).
Z. HE, T. ISHIZUKA and D. -L. JIANG, "Dendritic Architectures for Design of Photo- and Spin-Functional Nanomaterials," *Polym. J. (Tokyo, Jpn.)* **39**, 889–922 (2007).

B-3) 総説、著書

江 東林, 「ナノテクノロジー入門シリーズ(II) ナノテクのための化学・材料入門」第1章「ナノスケール構造 基本構造 機能性有機分子、超分子、ナノチューブ、機能性モチーフとしてのデンドリマー」共立出版社 (2007) .

江 東林,「自然科学研究機構シンポジウム講演収録集2 科学者が語る科学最前線 爆発する光科学の世界 量子から生命体まで」,「光を吸う分子の木」(株)クパプロ, pp.113-126 (2007) .

B-4) 招待講演

D. -L. JIANG, “Dendritic and Supramolecular Approaches to Photo and Spin Functional Materials,” National Polymer Symposium of China, Chengdu (China), October 2007.

D. -L. JIANG, “Synthesis and Functions of Spin-Crossover Soft Materials,” The 9th China-Japan Joint Symposium on Conduction and Photo-conduction in Organic Solids and Related Phenomena, Beijing (China), October 2007.

B-6) 受賞、表彰

江 東林, 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).

江 東林, 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).

日本学術振興会・アジア研究教育拠点事業「物質・光・理論分子科学のフロンティア」第一回冬の学校(北京)日本側 Chair (2007).

B-8) 他大学での講義、客員

総合研究大学院大学物理科学研究科,「相関分子科学」2007年12月3日-5日.

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

研究室はスタッフや学生が増え,研究体制を整えた。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,分子科学の未踏領域の開拓を狙っている。

西 村 勝 之 (准教授) (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) 分子運動下の脂質結合型生体分子を対象とした新規固体 NMR 測定法の開発
- b) 膜表在性タンパク質フォスホリパーゼ C- $\delta 1$ の運動性解析
- c) スペクトルの高分解能化を行う新規固体 NMR 測定法の開発
- d) 分子材料の固体高分解能 NMR による局所構造解析
- e) 固体 NMR 装置周辺機器の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 分子運動によって著しく平均化を受けた弱い磁気双極子相互作用を等方化学シフトで分離し、2次元スペクトルではなく1次元スペクトルの信号強度変化として、増幅して観測することにより、短時間測定で精密に決定する2種の新規測定法開発に成功した。本測定法は脂質分子や、脂質膜に結合した膜表在性タンパク質の局所的な磁気双極子相互作用を検出可能であり、適切な解析法と組み合わせることにより、分子運動性、構造解析の双方が可能になる。開発した測定法は飽和、不飽和脂質から調製したマルチラメラベシクルの脂質分子に適用し、その有用性および精度を証明した。
- b) 開発した上記測定法を完全水和した脂質二重膜に結合した膜表在性タンパク質フォスホリパーゼ C- $\delta 1$ の PH ドメインの解析に適用した。Ala 側鎖メチル基炭素を ^{13}C 安定同位体標識した試料を大腸菌株で発現し、不飽和脂質から調製したマルチラメラベシクル表面に結合した状態で残留磁気双極子相互作用の測定を行った。結合した脂質との協調的な回転拡散運動に基づく解析から、各 Ala 残基での局所運動性の解析に成功した。現在さらに詳細な分子運動モデルを構築し、分子運動の寄与の分離解析を試みている。
- c) 特定の内部相互作用を MAS 下、配向試料で増幅して観測する2次元固体 NMR 測定法の汎用的アルゴリズムを開発した。開発したアルゴリズムを用いて MAS 下および配向試料を対象とする測定法をデザインし、各々の条件下で偶数倍に増幅した内部相互作用を反映するスペクトルの観測に2つの異なる内部相互作用で実験的にも成功した。本アルゴリズムは結果としてスペクトル分解能向上を実現するため、微弱な相互作用を精度良くスペクトルとして観測することが可能である。現在、さらに様々な測定法拡張を試みている。
- d) 触媒等の無機材料に含まれる核種の多くは核スピンの1以上の四極子核であり、一般に高分解能 NMR スペクトル測定は容易でない。より高感度な高分解能スペクトルの測定を目標に、ラジオ波パルス列を試料に照射した時の核スピンの振る舞いや検出される NMR 信号をシミュレーションするコンピュータ・プログラムの開発を行った。本プログラムを用いて最適ラジオ波パルスの照射方法の検討を行い、現在、標準物質で NMR 測定を行っている。
- e) 昨年度開発を開始した生体配向試料用自作プローブのデザインを改良し、温度調節機構の見直し、および回路の再検討を行った。現在、有効試料領域を拡大し、かつ試料発熱の原因となるラジオ波の電場成分を抑制するコイルデザインおよび実装の検討を行っている。また無機材料で特に有用な低周波二核を対象とした XY 二重共鳴 MAS プローブを開発中である。

B-1) 学術論文

I. KAWAMURA, N. KIHARA, M. OHMINE, K. NISHIMURA, S. TUZI, H. SAITO and A. NAITO, “Solid State NMR Studies of Two Different Backbone Conformation at Tyr185 as a Function of Retinal Configurations in the Dark, Light, and Pressure Adapted Bacteriorhodopsin,” *J. Am. Chem. Soc.* **129**, 1016–1017 (2007).

I. KAWAMURA, Y. DEGAWA, S. YAMAGUCHI, K. NISHIMURA, S. TUZI, H. SAITO and A. NAITO, “Pressure Induced Isomerization of Retinal on Bacteriorhodopsin as Disclosed by Fast Magic Angle Spinning NMR,” *Photochem. Photobiol.* **83**, 346–350 (2007).

B-4) 招待講演

西村勝之, 「生体分子を対象とした固体 NMR の基礎と最近の研究について」第 8 回若手 NMR 研究会, 岡崎, 2007 年 7 月.

西村勝之, 「脂質膜結合型生体分子運動性解析のための新規固体 NMR 測定法開発」第 46 回 NMR 討論会, 札幌, 2007 年 9 月.

西村勝之, 「固体 NMR による水和生体分子の解析」第 17 回 JEOL ユーザーズミーティング, 名古屋, 2007 年 12 月.

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).

飯島隆広, 日本核磁気共鳴学会 若手ポスター賞 (2005).

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), 「新規な多量子コヒーレンス生成法に基づく固体高分解能 NMR」飯島 隆広 (2006 年–2007 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).

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).

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).

C) 研究活動の課題と展望

昨年は着任後 1 人での研究室立ち上げを行ったが, 2007 年 1 月から助教, 4 月からは IMS フェローがメンバーとして加わり, ようやく研究室と呼べる状態になった。本年度は研究を本格的に立ち上げるため 生体分子を対象とした測定法開発に注力し,

目的とした測定法の開発に成功した。今後、水和生体分子の解析に必要な一連の関連測定法の開発を進め、さらにそれらを用いたデータの解析法も開発し、研究手法のフレームワークとして完成させたい。また、上記研究で開発した測定法から発したアイデアで特定内部相互作用を増幅して観測する新しい汎用測定法開発アルゴリズムの発見に至った。これは生体分子に限らず、既存の多くの測定法に適用可能であり、今後定式化を行いたい。分子材料分野は無機材料を対象にした測定法開発の進行が遅れており、来年度の完成を期待する。一方、ハードウェア開発は測定法開発に時間を割いたために、自作生体配向試料用プローブ開発は進展しなかった。しかし、無機材料等で有用な低周波二核用二重共鳴プローブを製作中であり、この完成を期待する。来年度はハードウェア開発に、より多くの研究時間を配分する予定である。

ナノ分子科学研究部門（分子スケールナノサイエンスセンター）

小 川 琢 治（教授）（2003年2月1日～2007年9月30日）^{*}

A-1) 専門領域：有機化学、ナノサイエンス

A-2) 研究課題：

- a) サブマイクロメータ長 π 共役ポルフィリンワイヤーの合成と表面上での自己組織化
- b) 表面上での有機分子自己組織化の制御
- c) 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
- d) 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) 分子ワイヤーと称するものの多くは電導性基板上で作製されており、絶縁性基板上で直線的な構造を保った例はなかった。サブマイクロメータ長 π 共役ポルフィリンワイヤーがHOPG表面で直線的な自己組織化体を表面上一様に形成する条件を見いだすことに成功し、またこの組織体を絶縁性のエポキシ樹脂やアルミナ上に転写することに成功した。
- b) HOPG表面上での有機分子自己組織化をドナー分子として代表的なポルフィリンとアクセプター分子として代表的なジイミドを用いその構造をSTMで観察した。アルキル基の長さが異なる一連のジイミド化合物を用いて研究したところ、アルキル基の長さによりドラスティックに2次元組織体の構造が変わることを見だし、その分子レベルでの構造を決定した。
- c) 硫化銀／白金のギャップ間に光応答性の有機分子を挟み込み「光応答性原子スイッチ」を目指した実験を行ったところ、基本的な動作を確認することに成功した。
- d) 二探針電導性原子間力顕微鏡がほぼ完成した。

B-1) 学術論文

R. NEGISHI, T. HASEGAWA, K. TERABE, M. AONO, H. TANAKA, H. OZAWA and T. OGAWA, “Different I-V Characteristic of Single Electron Tunneling Induced by Using Double-Barrier Tunneling Junctions with Differing Symmetric Structures,” *Appl. Phys. Lett.* **90**, 223112 (3 pages) (2007).

T. OGAWA, H. OZAWA, M. KAWAO and H. TANAKA, “Photo Responsibility of Au Nano-Particle/Porphyrin Polymer Composite Device Using Nano-Gap Electrodes,” *J. Mater. Sci: Mater. Electron.* **18**, 939–942 (2007).

H. OZAWA, M. KAWAO, H. TANAKA and T. OGAWA, “Synthesis of Dendron Protected Porphyrin Wires and Preparation of a One-Dimensional Assembly of Gold Nanoparticles Chemically Linked to the π -Conjugated Wires,” *Langmuir* **23**, 6365–6371 (2007).

W. HUANG, Z. CHU, S. GOU and T. OGAWA, “Construction of Macrocyclic-Based Molecular Stairs Having Pendant 4-Aminopyridine, 4-Dimethylaminopyridine and Isonicotinonitrile Groups,” *Polyhedron* **26**, 1483–1492 (2007).

T. YAJIMA, H. TANAKA, T. MATSUMOTO, Y. OTSUKA, Y. SUGAWARA and T. OGAWA, "Refinement of Conditions of Point-Contact Current Imaging Atomic Force Microscopy for Molecular-Scale Conduction Measurements," *Nanotechnology* **18**, 095501 (5 pages) (2007).

R. NEGISHI, T. HASEGAWA, H. TANAKA, K. TERABE, H. OZAWA, T. OGAWA and M. AONO, "Size-Dependent Single Electron Tunneling Effect in Au Nanoparticles," *Surf. Sci.* **601**, 3907–3911 (2007).

B-4) 招待講演

小川琢治, "Construction of nano-structures from conductive nano-materials with functional molecules, and studies on their electric properties," International Scanning Probe Microscopy Conference, Jeju (Korea), 2007年6月.

小川琢治, 「分子エレクトロニクスのための有機分子・無機ナノ構造体の固体表面上での自己組織化」第56回高分子討論会, 名古屋工業大学, 名古屋市, 2007年9月.

小川琢治, 「分子エレクトロニクスのための有機分子・無機ナノ構造体の自己組織化」第68回応用物理学会学術講演会シンポジウム, 北海道工業大学, 札幌市, 2007年9月.

小川琢治, 「分子エレクトロニクス実現に向けての有機分子・無機ナノ構造体の自己組織化とナノスケール電気特性の計測」第4回鈴木シンポジウム, 愛媛大学, 松山市, 2007年9月.

小川琢治, 「有機分子・無機ナノ構造複合体の作製と物性計測」九州大学大学院工学研究科特別講演会, 2007年5月.

B-5) 特許出願

特願 2007-207166, 「スイッチング素子とその応用」長谷川剛、青野正和、矢野史子、寺部一弥、鶴岡徹、海老原知子、小川琢治、田中啓文、日野貴美, 2007年.

特願 2007-027190, "Carbon nanotube-porphyrin composite rectifying devices," Tanaka, Hirofumi; Ogawa, Takuji; Yajima, Takashi, 2007年.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

有機合成協会幹事 (1997–1998).

国際高等研究所特別研究「次世代エレクトロニクスに向けての物質科学とシステムデザイン」プロジェクトメンバー (2001–2005).

応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会幹事 (2002–2004).

国際高等研究所「電子系の新しい機能」プロジェクトメンバー (2005–2008).

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 (2005–2008).

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 (2002–2007).

B-8) 大学での講義、客員

九州大学大学院工学研究科, 集中講義「分子ナノ科学」2007年5月21–22日.

B-9) 学位授与

小澤寛晃, 「Preparation and properties of nano-structures fabricated from porphyrin polymers with inorganic nano-materials」
2007年3月, 博士(理学)

B-10) 外部獲得資金

重点領域研究, 「含ピスマス-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).

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ソ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).

基盤研究(B), 「カーボンナノチューブ電極による単分子電子素子の研究」小川琢治、田中啓文 (2007年–2009年).

萌芽研究, 「ナノ球リソグラフィ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-).

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

計測機器としての二探針電導性原子間力顕微鏡やナノギャップ電極の作成技術,有機分子の自己組織化や転写など,分子スケール電子素子の研究に必要な基礎技術,手法はかなりの進展が見られた。2008年は大阪大学において単分子で機能を持つ有機分子の開発を行い,これらの手法で物性計測を行い,当初の目的を達成したい。

*) 2007 年 10 月 1 日大阪大学大学院理学研究科教授,分子科学研究所教授兼任

鈴木 敏 泰 (准教授) (1998 年 1 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：有機合成化学

A-2) 研究課題：

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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機 / 金属界面における電子構造は、有機エレクトロニクス素子の性能を決める上で重要な因子である。角度分解紫外光電子分光法により、金基板上におけるペンタセン薄膜とパーフルオロペンタセン薄膜の界面を比較検討した。イオン化ポテンシャルはパーフルオロペンタセンのほうがはるかに高いが、単分子膜では両者のホール注入障壁がほぼ等しいという結果になった。これはペンタセン / 金界面における真空準位シフトが、パーフルオロペンタセン / 金界面のそれより大きいためである。再配向エネルギーはパーフルオロペンタセン / 金界面で増大している。

B-3) 学術論文

N. KOCH, A. VOLLMER, S. DUHM, Y. SAKAMOTO and T. SUZUKI, "The Effect of Fluorination on Pentacene/Gold Interface Energetics and Charge Reorganization Energy," *Adv. Mater.* **19**, 112–116 (2007).

A. HINDERHOFER, U. HEINEMEYER, A. GERLACH, S. KOWARIK, R. M. J. JACOBS, Y. SAKAMOTO, T. SUZUKI and F. SCHREIBER, "Optical Properties of Pentacene and Perfluoropentacene Thin Films," *J. Chem. Phys.* **127**, 194705 (6 pages) (2007).

B-8) 大学での講義、客員

総合研究大学院大学物理科学研究科,「関連分子科学」2007年12月5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ディスプレイへの実用化研究」鈴木敏泰 (2000年–2001年).

奨励研究(A),「新規含フッ素芳香族化合物の合成と有機EL素子における電子輸送材料への応用」阪元洋一 (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).

若手研究(B),「フッ素化ペンタセン類の合成と有機薄膜素子への応用」阪元洋一 (2003年–2004年).

若手研究(B),「チューブ状多環芳香族炭化水素の合成」阪元洋一 (2006年–2007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。

永 田 央 (准教授) (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) 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
- b) 金属錯体を用いた光合成酸素発生複合体のモデル研究
- c) 空間制御された大型有機分子内での電子移動

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ポルフィリンとピリジン・ジホスフィン配位子を結合した化合物を合成し、これを用いて一連のポルフィリン・コバルト錯体結合化合物を合成した。補助配位子としてペンタメチルシクロペンタジエニルを用いた場合、+3 価の錯体が得られ、ポルフィリンの蛍光は強い酸化的消光を受ける。一方、補助配位子としてターピリジンを用いた場合、+2 価の錯体が得られた。この錯体は常磁性種であるにもかかわらず、ポルフィリンの蛍光消光は比較的弱かった。以前に報告した常磁性金属錯体結合ポルフィリンでは、ポルフィリンの励起一重項からの系間交差が常磁性種の存在により加速され、酸化還元を伴わない消光が見られていたが、今回の系はこれとは異なっている。この結果は、常磁性金属錯体を結合したポルフィリンでも、電位を適切に設定すれば光励起電子移動を主要反応経路に導くことができることを示唆しており、今後の分子設計に重要な手がかりを与える。
- b) 光合成酸素発生複合体に見られるマンガン多核カルボキシラト錯体を合理的に合成するため、トリアリールメシチレン骨格を用いたトリカルボン酸配位子について検討した。この配位子はアリール・アリール結合の回転障害のため、3 つのカルボン酸側鎖がメシチレン平面に対して同じ向きに突き出しており、多核錯体を形成するのに適切な位置となっている。鉄・マンガン錯体を合成し、鉄錯体については X 線構造解析により期待通りの錯体が形成していることが確認できた。また、これらの錯体を用いて、植物の光化学系 II タンパク質複合体の酸素発生部位の再構成実験を試みたところ、これらのマンガン錯体は無機マンガン塩よりも効果的に再構成を起こすことがわかった。
- c) ベンズアニリド型 dendrimer を結合したポルフィリン合成を行った。この骨格は剛直性と比較的高い溶解度とを合わせ持っており、キノンプール分子の基本骨格として有望であることがわかった。

B-1) 学術論文

T. NAGATA, T. NAGASAWA, S. K. ZHARMUKHAMEDOV, V. V. KLIMOV and S. I. ALLAKHVERDIEV, "Reconstitution of the Water-Oxidizing Complex in Manganese-Depleted Photosystem II Preparations Using Synthetic Binuclear Mn(II) and Mn(IV) Complexes: Production of Hydrogen Peroxide," *Photosynth. Res.* **93**, 133–138 (2007).

T. NAGASAWA and T. NAGATA, "Synthesis and Electrochemistry of Co(III) and Co(I) Complexes Having C₅Me₅ Auxiliary," *Biochim. Biophys. Acta* **1767**, 666–670 (2007).

T. NAGATA and Y. KIKUZAWA, "An Approach towards Artificial Quinone Pools by Use of Photo- and Redox-Active Dendritic Molecules," *Biochim. Biophys. Acta* **1767**, 648–652 (2007).

T. NAGATA, "Automated Design of Protecting Molecules for Metal Nanoparticles by Combinatorial Molecular Simulations," *J. Organomet. Chem.* **692**, 225–233 (2007).

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-8) 大学での講義、客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「ナノ分子の分類・合成・活用法(基礎電子化学)」, 2007年4月–6月.

東京工業大学資源化学研究所, 「人工分子で光合成を組み立てる(化学エネルギー変換論)」, 2007年11月13日.

B-10) 外部獲得資金

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).

基盤研究(C), 「人工キノプールのを用いた光合成物質変換系の構築」, 永田 央 (2007年–2009年).

C) 研究活動の課題と展望

研究課題(a)については, 光照射下での反応を追求していく。有望な予備的結果が得られており, 金属錯体部分の酸化還元電位を系統的に変化させて挙動の変化を観測する必要がある。研究課題(b)については, より複雑な錯体設計が可能な配位子を開発していく。現在検討している配位子は, 一部が課題(a)の金属錯体と共通の合成ルートを持つため, 効率よく開発を進めることができる。研究課題(c)については, 新しい骨格を採用することで合成操作を大幅に省力化できると考えており, 独自性の高いキノプールの化学をさらに発展させる足がかりを得た。

分子研在任中の目標は, 上記(a)～(c)の要素をすべて盛り込んだナノサイズ分子を開発することである。そのためには(a)(b)で用いている配位子をさらに精密に設計する必要があり, また(c)の分子のハンドリングをさらに高める必要がある。次年度はこれらの問題点を意識しながら具体的な結果を出して行く。

また, 植物の光合成分子との融合が興味深い展開を見せつつある。未だ萌芽的な段階ではあるが, 将来の研究展開のため, 所外(海外)研究者との共同研究を引き続き継続して行く。

櫻 井 英 博 (准教授) (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) お椀型共役化合物「バッキーボウル」は、フラーレン・単一組成カーボンナノチューブ合成達成への鍵物質として、あるいは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。我々はバッキーボウルの「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初めて成功することができた。またそのラセミ化速度を CD スペクトルにより測定し、バッキーボウルに特徴的な動的挙動であるボウル反転のエネルギー値を実測することにも成功した。
- b) ナノメートルサイズの金属クラスターはバルク金属とも単核金属錯体とも異なる特性を示し、従来にない触媒の開発が期待される。特に金属表面と分子との相互作用が弱く、バルクにおける触媒活性がない金のクラスターに注目して研究を行っている。今年度の研究においては、水溶性高分子ポリビニルピロリドン (PVP) で保護した平均粒径 1.3 nm の金クラスター触媒が、アルコール酸化反応、有機ホウ素化合物のホモカップリング反応において高い一般性を有していることを明らかにした。またこれらの空気酸化反応のみならず、同様な反応条件にもかかわらず酸化過程を伴わない、形式的なルイス酸触媒反応である炭素-炭素多重結合へのアルコールの付加反応も触媒することを見出した。さらに、大阪大学大学院理学研究科青島研究室との共同研究で、単分子ミセルを形成する星形ブロックコポリマーが、金クラスター触媒によるアルコール酸化反応に最適かつ回収再利用容易な保護マトリクスであることも見出した。

B-1) 学術論文

H. SAKURAI, H. TSUNOYAMA and T. TSUKUDA, "Oxidative Homo-Coupling of Potassium Aryltrifluoroborates Catalyzed by Gold Nanocluster under Aerobic Conditions," *J. Organomet. Chem.* **692**, 368–374 (2007).

S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI, "Synthesis of an Enantiopure *syn*-Benzocyclotrimer through Regio-Selective Cyclotrimerization of a Halonorbornene Derivative under the Palladium Nanocluster Conditions," *Chem. Lett.* **36**, 18–19 (2007).

H. TSUNOYAMA, T. TSUKUDA and H. SAKURAI, "Synthetic Application of PVP-Stabilized Au Nanocluster Catalyst to Aerobic Oxidation of Alcohols in Aqueous Solution under Ambient Conditions," *Chem. Lett.* **36**, 212–213 (2007).

N. K. CHAKI, H. TSUNOYAMA, Y. NEGISHI, H. SAKURAI and T. TSUKUDA, "Effect of Ag-Doping on the Catalytic Activity of Polymer-Stabilized Au Clusters in Aerobic Oxidation of Alcohol," *J. Phys. Chem. C* **111**, 4885–4888 (2007).

K. TANI, H. FUJII, L. MAO, H. SAKURAI and T. HIRAO, "Iridium(III) Complexes Bearing Quinoxaline Ligands with Efficient Red Luminescence Properties," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **80**, 783–788 (2007).

I. KAMIYA, H. TSUNOYAMA, T. TSUKUDA and H. SAKURAI, “Lewis Acid Character of Zero-Valent Gold Nanoclusters under Aerobic Conditions: Intramolecular Hydroalkoxylation of Alkenes,” *Chem. Lett.* **36**, 646–647 (2007).

S. KANAOKA, N. YAGI, Y. FUKUYAMA, S. AOSHIMA, H. TSUNOYAMA, T. TSUKUDA and H. SAKURAI, “Thermosensitive Gold Nanoclusters Stabilized by Well-Defined Vinyl Ether Star Polymers: Reusable and Durable Catalysts for Aerobic Alcohol Oxidation,” *J. Am. Chem. Soc.* **129**, 12060–12061 (2007).

B-3) 総説、著書

櫻井英博, 「無機化学と有機化学をつなぐ新しい「炭素」化合物」*化学と教育*, **55**, 606–609 (2007).

B-4) 招待講演

H. SAKURAI, “Gold Nanoclusters as a *quasi*-Homogeneous Catalyst in Organic Synthesis,” Department Seminar, National University of Kaohsiung, Kaohsiung (Taiwan), June 2007.

H. SAKURAI, “Synthetic Strategy of C_{3v} -Symmetric Buckybowls,” Department Seminar, National Cheng-Kung University, Tainan (Taiwan), June 2007.

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48回白鷺セミナー, 堺, 2007年6月.

櫻井英博, 「過去の自分との対話～スマネンの逆合成計画を例に～」第42回有機反応若手の会, 岐阜, 2007年7月.

H. SAKURAI, “Gold Nanoclusters as a *quasi*-Homogeneous Catalyst in Organic Synthesis,” Department Seminar, National University of Malaya, Kuala Lumpur (Malaysia), August 2007.

櫻井英博, 「バッキーボウルのキラリティ制御」日本化学会第1回関東支部大会, 八王子, 2007年9月.

櫻井英博, 「ナノメートルサイズのお椀と粒の話」大塚有機合成シンポジウム, 徳島, 2007年10月.

H. SAKURAI, “Gold Nanoclusters as a *quasi*-Homogeneous Catalyst in Organic Synthesis,” Department Seminar, Indian Institute of Chemical Technology, Hyderabad (India), November 2007.

H. SAKURAI, “Gold Nanoclusters as a *quasi*-Homogeneous Catalyst in Organic Synthesis,” Department Seminar, Indian Institute of Technology-Madras, Chennai (India), November 2007.

H. SAKURAI, “Synthetic Strategy to Construct C_{3v} -symmetric Buckybowls, Bowl-shaped Aromatic Compounds,” Department Seminar, Indian Institute of Technology-Bombay, Mumbai (India), November 2007.

H. SAKURAI, “How to make a plan of your own project? —my personal history of buckybowl chemistry—,” The 3rd Mathematical & Physical Science Graduate Congress, Kuala Lumpur (Malaysia), December 2007.

B-5) 特許出願

国際出願PCT/JP2007/000503, 「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)) 2007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 (2005–2007).

その他

出前授業岡崎市立矢作西小学校 (2007.12).

B-8) 大学での講義、客員

九州大学先端物質科学研究所, 非常勤講師, 2007年1月.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「錯体触媒化学」 2007年12月17日–19日.

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)₆/CO系による効率的新規カルボニル化反応の開発」 櫻井英博 (1999年).

科学技術振興調整費, 「高度な光機能を発現する有機金属分子システムの創製」 櫻井英博 (2002年–2003年).

若手研究(B), 「金属カル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) 「バッキーボウルの自在構築」 櫻井英博 (2006年–2008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).

科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業さきがけ研究, 「有機化学手法によるカーボンナノチューブのキラリティ制御」 櫻井英博 (2007年–2010年).

倉田奨励金, 「触媒的1電子酸化反応系の構築」 櫻井英博 (2000年).

ノバルティス科学振興財団, 「アシル金属種を用いた新規合成手法の開発」 櫻井英博 (2000年).

医薬資源研究振興会研究奨励, 「還元反応の再構築: 金属亜鉛を用いた還元反応による多官能性化合物の選択的合成法の開発」 櫻井英博 (2001年).

近畿地方発明センター研究助成, 「ボウル型共役炭素化合物のテラーメイド合成」 櫻井英博 (2002年).

徳山科学技術振興財団研究助成, 「ヘテロフラレン合成を指向したボウル型共役化合物合成法の開発」 櫻井英博 (2004年).

石川カーボン研究助成金, 「バッキーボウル分子の一般的合成法の開発と物性評価」 櫻井英博 (2004年).

旭硝子財団研究助成, 「ヘテロフラレン合成を指向したバッキーボウル分子の自在合成」 櫻井英博 (2005年–2006年).

住友財団基礎科学研究助成, 「お椀型共役化合物「バッキーボウル」の自在合成」 櫻井英博 (2005年).

C) 研究活動の課題と展望

研究室も4年目に入り, バッキーボウルの化学に関しては, 当初ターゲットのひとつであるキラルボウルの合成を達成することができた。今後は本手法を更に展開することで, 最終的にナノチューブのキラリティ制御への道筋をつけていきたいと考えている。他のターゲット分子も解決点が見え始めており, これまで焦らずに独自の反応, 合成経路を丹念に検討してきた成果が

徐々に上がってきていると思う。あとは、各研究者の不断の努力次第である。

金属ナノクラスター触媒の化学は、これまで共同研究を進めてきた佃グループが北海道大学に転出したことで転機を迎えつつある。今後は、他大学の研究室との共同研究も積極的に行いつつ、パッキーボウルの化学に直接関連する技術への展開を図る。

合成化学は最終的には人材の確保が極めて重要である。今後も積極的に共同研究を進めていくが、研究グループとしても人員の増強に努めていきたい。

田 中 彰 治 (助教) (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) 当研究室では、巨大分子内に多種多様な光・電子機能ブロックを非周期的、合目的に定序配列化するための逐次精密合成法の開拓により、「単一巨大分子内単電子／正孔素子回路」の実現を目指している。今年度は、「位置選択的接合サイト」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)」を付与した汎用鎖状構築ブロックのサイズを、従来の 10 nm 級から 40 nm 級にまで拡張した。これにより、分子鎖長を 1–80 nm の範囲で 1 nm 刻みで指定することが可能となり、微細加工で“再現性良く構築可能”なサイズ(20–30 nm 以上)の平坦化ナノギャップ電極(単一分子の実空間観測用)に完全対応となった。共同研究として(阪大・多田 G)、アンカーポイント及び絶縁被覆付きチオフェンオリゴマー(5, 8, 11, 14, 17, 20 量体)の単一分子伝導度計測を、STM-ブレイクジャンクション法により実施し、従来研究(1–2 nm)よりも格段に広い範囲(1–8 nm)における伝導度-鎖長依存性を明らかにした。さらに、低エネルギーギャップユニットの導入により、単一分子伝導度を桁違いに向上可能なことも実験的に明らかにした。京大・松重/山田 G には、平坦化ナノギャップ電極上における大型分子の電場配向技術の開拓用に、10 nm 超級の分子を各種供給している。また、汎用構築ブロックを他の合成研究グループに輸出することも始めた。愛媛大・宇野 G では、量子井戸の候補であるポルフィリン系分子との接合に成功し、含ポルフィリン分子電線の伝導度計測の系統的研究が可能となった。京大・田中 G では、発光性分子との接合が進行中である。
- b) 本項目は、横浜市大・横山 G との共同研究に基づく。上記の汎用構築ブロックは、嵩高いブロック状置換基と長鎖アルキル基を合せ持つため、STM による実空間観測に基づく分子鎖内配座異性体や鏡像異性体の識別が、在来分子系よりも容易である。今年度は、パルスジェット法で 10 nm 級分子を清浄金属基板上に設置、超高真空下の高分解能 STM 観測により基板上の孤立分子を多数観測して、その分子内配向を統計的に解析・検討した。結果、比較的簡単なモデル分子の配座解析計算結果を基に大型分子の分子内配座を予想できる可能性が判明した。これを実験的に確認するため、立体障害により特徴的な分子内配座を有する 10 nm 級分子を新たに作製した。その比較検討実験が進行中である。

B-4) 招待講演

田中彰治,「単一分子内トンネル接合系の逐次構築」高分子エレクトロニクス研究会「分子素子研究の新展開」東京, 2007 年 1 月.

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), 「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).

基盤研究(C)(2), 「単一分子内多重トンネル接合系の精密構築法の開拓」田中彰治 (2007年–2008年).

C) 研究活動の課題と展望

π 共役鎖中の単一荷電担体のサイズは2–3 nmと見積もられている。そのサイズよりも十分大きな共役系を有し、かつ系内ポテンシャルの凸凹を合目的に制御した分子を精密構築して、その単一分子骨格内の単一荷電担体の動きを直接観測・制御してみたいというのが基本的な願いである。その際の最初の関門が、「研究しようとする性質が最も純粋に発現すると予想される分子群」を作ることである(これを無視して基礎研究はありえない!!)。分子が大型化するにつれ可能な化学プロセスの数も激増し、よって余計な過程を一つ一つ押さえるための分子修飾上の工夫も多大になる。色々な意味で一昔前は「無謀」とされた試みではあるが、ここ10年ほどの合成実績により「無謀」から「困難」くらいまでには進展した模様である。現在のボトルネックは、この種の巨大分子の取り扱いや精製の技術・設備を持った計測研究者が不足していることである。過去に無い分子群なので、指導者層も素人。ウチから供与した大型分子群で経験をつんだ学生さんも卒業してしまうと振り出しにもどる。ため息ひとつ。まだまだ長丁場になりそうなので、とりあえず減量して体力をつけることにしよう。

先導分子科学研究部門（客員研究部門）（分子スケールナノサイエンスセンター）

加 藤 晃 一（客員教授）（2004 年 10 月 16 日着任）^{*}）

A-1) 専門領域：NMR 構造生物学、糖鎖構造生物学

A-2) 研究課題：

- a) 生体を構成する主要な高分子である複合糖質およびタンパク質の精密立体構造解析
- b) NMR を利用した生体高分子の相互作用と内部運動の解析
- c) 超高磁場固体 NMR 法の生体高分子の高次構造解析への応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 免疫グロブリン G (IgG) は高等動物の生体防御系において中心的な役割を演じている多機能糖タンパク質である。IgG の発現するエフェクター機能は Fc 領域に存在する糖鎖の構造に依存しており、殊に糖鎖の還元末端付近に位置するフコース残基が欠落している IgG 分子は標的細胞を殺傷する ADCC 活性が 100 倍程度向上していることが最近明らかとされている。我々は、X 線結晶構造解析法と超高磁場 NMR 分光法を利用して、フコース残基の欠失に伴うヒト IgG の Fc 領域の高次構造を比較解析した。その結果、フコース残基の除去に伴う Fc 領域の構造変化は当該残基の周辺に限局されているが、その周囲の水分子の配置とアミノ酸残基の運動性には有意な変化が生じていることが明らかとなった。また、酸味を甘味と感じさせる植物タンパク質クルクリンについて結晶構造解析と NMR 解析を行い、部位特異的変異実験の結果と併せて本タンパク質の味覚修飾活性の分子機構に関するモデルを提起した。
- b) 細胞内におけるタンパク質分解の中核を担うユビキチンリガーゼの作動メカニズムの構造基盤を明らかにするために NMR を利用した分子の相互作用解析を行なった。SCF 複合体と総称される一群のユビキチンリガーゼは、Cullin サブユニットに Nedd8 とよばれるユビキチン様タンパク質がイソペプチド結合を介して連結することを契機として活性化される。我々は、NMR 解析と部位特異的変異実験の結果に基づいて、Cullin 上で空間的に近接して存在する Nedd8 と Rbx1 が協働して、ユビキチンを担う酵素 (E2) を選択的にリクルートすることが SCF 複合体の活性発現の本質であることを示した。また、細胞質において糖タンパク質を認識するユビキチンリガーゼ SCF^{Fbs1} のレクチンドメインについて、安定同位体標識を施した糖ペプチドとの相互作用様式を明らかにした。これにより、本酵素は標的糖タンパク質の糖鎖とポリペプチド鎖との連結部と相互作用することを通じてそのフォールディング状態を認識し、さらにユビキチン鎖の形成に際して標的を脱糖鎖酵素より保護しているというモデルを提唱するに至った。
- c) 超高磁場における固体 NMR 計測は四極子核の観測においてメリットをもたらすことが期待される。¹⁷O を部位特異的に濃縮した単糖を用いて糖鎖の固体 NMR 構造解析における 920MHz NMR 装置の有用性を検討した。

B-1) 学術論文

E. SAKATA, Y. YAMAGUCHI, Y. MIYAUCHI, K. IWAI, T. CHIBA, Y. SAEKI, N. MATSUDA, K. TANAKA and K. KATO, “Direct Interactions between NEDD8 and Ubiquitin E2 Conjugating Enzymes Upregulate Cullin-Based E3 Ligase Activity,” *Nature Struct. Mol. Biol.* **14**, 167–168 (2007).

S. MATSUMIYA, Y. YAMAGUCHI, J. SAITO, M. NAGANO, H. SASAKAWA, S. OTAKI, M. SATOH, K. SHITARA and K. KATO, “Structural Comparison of Fucosylated and Non-Fucosylated Fc Fragments of Human Immunoglobulin G1,” *J. Mol. Biol.* **368**, 767–779 (2007).

Y. YAMAGUCHI, T. HIRAO, E. SAKATA, Y. KAMIYA, E. KURIMOTO, Y. YOSHIDA, T. SUZUKI, K. TANAKA and K. KATO, “Fbs1 Protects the Malformed Glycoproteins from the Attack of Peptide:N-Glycanase,” *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **362**, 712–716 (2007).

H. SASAKAWA, E. SAKATA, Y. YAMAGUCHI, M. MASUDA, T. MORI, E. KURIMOTO, T. IGUCHI, S. HISANAGA, T. IWATSUBO, M. HASEGAWA and K. KATO, “Ultra-High Field NMR Studies of Antibody Binding and Site-Specific Phosphorylation of α -Synuclein,” *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **363**, 795–799 (2007).

E. KURIMOTO, M. SUZUKI, E. AMEMIYA, Y. YAMAGUCHI, S. NIRASAWA, N. SHIMBA, N. XU, T. KASHIWAGI, M. KAWAI, E. SUZUKI and K. KATO, “Curculin Exhibits Sweet-Tasting and Taste-Modifying Activities through Its Distinct Molecular Surfaces,” *J. Biol. Chem.* **282**, 33252–33256 (2007).

B-3) 総説、著書

山口芳樹、加藤晃一, 「NMRによる糖鎖 - タンパク質相互作用の解析」*実験医学*, **25**, 1137–1144 (2007).

加藤晃一、栗本英治, 「ストップフロー法」*生物物理学ハンドブック*, 石渡信一、桂 勲、桐野豊、美宅成樹編, 朝倉書店, pp.552–555 (2007).

加藤晃一、山口芳樹, 「NMRによる抗体の高次構造解析」*抗体医薬の最前線*, 植田充美監修, シーエムシー出版, pp.116–126 (2007).

N. TAKAHASHI, H. YAGI and K. KATO, “The two-/three-dimensional HPLC mapping method for the identification of N-glycan structures,” in *Comprehensive Glycoscience*, J. P. Kamerling, Ed., Elsevier; Oxford, **vol.2**, pp.283–301 (2007).

Y. YAMAGUCHI, N. TAKAHASHI and K. KATO, “Molecular interactions: Antibody structures,” in *Comprehensive Glycoscience*, J. P. Kamerling, Ed., Elsevier; Oxford, **vol.3**, pp.745–763 (2007).

K. KATO and Y. KAMIYA, “Structural views of glycoprotein-fate determination in cells,” *Glycobiology*, **17**, 1031–1044 (2007).

B-4) 招待講演

K. KATO, Y. YAMAGUCHI, Y. KAMIYA, M. UTSUMI, H. SASAKAWA and N. TAKAHASHI, “920 MHz ultra-high field NMR analyses of sugar-protein interactions,” *Glycobiology and Sphingobiology 2007*, Tokushima (Japan), February 2007.

K. KATO, “Stable-isotope-assisted NMR analyses of post-translational modifications,” *International Workshop on Perspectives on Stable Isotope Aided NMR Methods for Protein Structural Analysis*, Osaka (Japan), March 2007.

加藤晃一, 「糖タンパク質の細胞内運命を決定するシステムの構造的基盤」第27回日本糖質学会年会, 福岡, 2007年8月.

加藤晃一、高橋禮子、矢木宏和、内海真穂、笹川拓明、栗本英治、山口芳樹, 「超高磁場NMRと糖鎖ライブラリーによるアプローチ」第29回生体膜と薬物の相互作用シンポジウム, 仙台, 2007年11月.

加藤晃一, 「翻訳後に多様化するタンパク質への構造生物学的アプローチ」CBRC2007, 東京, 2007年12月.

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-).

日本核磁気共鳴学会評議員 (2006-).

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) 大学での講義、客員

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・カルレチキュリンの分子認識機構の解明」, 加藤晃一 (2001年).
財団法人病態代謝研究会研究助成金, 「神経変性疾患に関与する細胞内タンパク質品質管理システムの構造生物学的研究」, 加藤晃一 (2001年).

名古屋市立大学特別研究奨励費, 「NMR を利用したオステオポンチンの分子構造解析」, 加藤晃一 (2001年).

基盤研究(B), 「免疫系で機能する複合糖質の立体構造形成と分子認識機構に関する構造生物学的研究」, 加藤晃一 (2001年-2002年).

(財)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コピ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

安定同位体標識を施した糖脂質の集合系を対象に超高磁場NMR 解析を行い,これまでにその可能性が提唱されていたが実体が明らかでなかった糖鎖間の相互作用の存在を明らかにする。さらにタンパク質と糖脂質クラスターの相互作用系を対象に超高磁場NMR 解析を行い,アルツハイマー病の発症にかかわるタンパク質会合体(アミロイド)の形成機構の構造基盤を明らかにする。一方,自己組織化する金属錯体を利用して形成した有限ナノ空間における生体高分子の挙動を,NMR を利用して探査することを通じて,生体分子のフォールディング,ダイナミクス,相互作用に関する新規概念の創出をはかる。

*) 本務は名古屋市立大学大学院薬学研究科教授

安全衛生管理室

戸村正章(助教)(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。以上のような指針に基づき、拡張 π 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・C-H $\cdots$ O相互作用などの分子間の弱い相互作用を導入し、いくつかの興味ある超分子構造を見出した。
- b) 1,2,5-チアジアゾール、1,3-ジチオール、チオフェン、ピリジン、フラン、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、分子間ヘテロ原子相互作用により特異な分子集合体を形成するものや、高伝導性の電荷移動錯体およびラジカルイオン塩の成分分子となりうるものがあった。さらに、有機分子デバイスへの応用を目的として、オキサジアゾールやペンタセン骨格を持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、チエノ基やフラノ基を持つホウ素錯体に関してはその蛍光特性について検討し、いずれも有用な知見を得た。

B-1) 学術論文

K. ONO, K. YOSHIKAWA, Y. TSUJI, H. YAMAGUCHI, R. UOZUMI, M. TOMURA, K. TAGA and K. SAITO, "Synthesis and Photoluminescence Properties of BF_2 Complexes with 1,3-Diketone Ligands," *Tetrahedron* **63**, 9354–9358 (2007).

K. ONO, H. TOTANI, T. HIEI, A. YOSHINO, K. SAITO, K. EGUCHI, M. TOMURA, J. NISHIDA and Y. YAMASHITA, "Photooxidation and Reproduction of Pentacene Derivatives Substituted by Aromatic Groups," *Tetrahedron* **63**, 9699–9704 (2007).

M. TOMURA, K. ONO, M. KAIDEN, K. TSUKAMOTO and K. SAITO, "2H,10H-1,4-Dioxepino[5',6':4,5]thieno[3,2-e][1,4]dioxepine-5,7(3H,9H)-dione," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **63**, o4568–o4569 (2007).

M. TOMURA, K. ONO and K. SAITO, "9,9-Bis(4-methoxyphenyl)-9H-cyclopenta[2,1-b:3,4-b']dipyridine," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **63**, o4612–o4612 (2007).

M. KUJIME, T. KURAHASHI, M. TOMURA and H. FUJII, " ^{63}Cu NMR Spectroscopy of Copper(I) Complexes with Various Tridentate Ligands: CO as a Useful ^{63}Cu NMR Probe for Sharpening ^{63}Cu NMR Signals and Analyzing the Electronic Donor Effect of a Ligand," *Inorg. Chem.* **46**, 541–551 (2007).

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。そのために、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、すなわち「分子集合体設計」というコンセプトが極めて重要となってくる。しかしながら、現状では、簡単な有機分子の結晶構造予測さえ満足には成し遂げられていない。このことは、逆に言えば、拡張 π 電子系内に、水素結合などの分子間の弱い相互作用を導入し、種々の分子集合体を設計・構築するという方法論には、無限の可能性が秘められているということを示している。今後は、水素結合だけではなく、ヘテロ原子間相互作用・C-H $\cdots$ π 相互作用・立体障害といった新しいツールによる分子集合体設計、特に、格子状有機超分子構造体の構築に取り組みたい。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。

6-5 生命・錯体分子科学研究領域

生体分子機能研究部門

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) 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に関する研究
- b) 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) 本研究ではヘムを活性中心とする一酸化炭素センサータンパク質 CooA, および酸素センサータンパク質 HemAT の構造機能相関の解明を目的として研究を行った。CooA に関しては, 好熱性一酸化炭素酸化細菌 *C. hydrogenoformans* 由来の CooA (Ch-CooA) の結晶構造解析に成功した。今回得られた結晶構造は, 分子中の還元型ヘムにイミダゾールが配位した構造である。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。しかし, 今回の構造は, 以前に報告されている不活性型 (還元型 CooA) とはいくつか異なる構造を示していた。特に, N 末センサードメインと C 末 DNA 結合ドメインをつなぐリンカー部分の折れ曲がり角度が, 両者で大きくことなっていることが分かった。これらの違いを詳細に検討することにより, CooA 中のヘムに CO が結合した際にどのような構造変化が誘起されることにより CooA が活性化されるのかについて検討した。HemAT に関しては, CO 結合型 HemAT にレーザー光を照射し, CO を光解離させた後の時間分解共鳴ラマンスペクトルの測定を行い, 外部配位子の有無による HemAT 中のヘム近傍構造の変化について検討した。得られた結果を基に, HemAT が酸素をセンシングした後に誘起される構造変化についてのモデルを提案した。
- b) アルドキシム脱水酵素はアルドキシムの脱水反応によりニトリルを生成する反応を触媒する新規なヘム含有酵素である。本年度の研究では, アルドキシム脱水酵素の構造機能相関の解明を目的とし, *Rhodococcus* sp. N-771 株由来のアルドキシム脱水酵素 (OxdRE) の結晶構造解析を試みた。結晶化条件の詳細な検討を行い, いくつかの結晶化条件下で, 構造解析可能な回折データを与える OxdRE の単結晶を得ることに成功した。

B-1) 学術論文

H. YOSHIMURA, Y. MIZUTANI and S. AONO, “The Formation of Hydrogen Bond in the Proximal Heme Pocket of HemAT-Bs upon Ligand Binding,” *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **357**, 1053–1057 (2007).

H. KOMORI, S. INAGAKI, S. YOSHIOKA, S. AONO and Y. HIGUCHI, “Crystal Structure of CO-Sensing Transcription Activator CooA Bound to Exogenous Ligand Imidazole,” *J. Mol. Biol.* **367**, 864–871 (2007).

B-4) 招待講演

S. AONO, “Mechanism of oxygen sensing and signal transduction in HemAT revealed by resonance Raman spectroscopy,” International Symposium on the Biological Application of Vibrational Spectroscopy, Hyogo (Japan), March 2007.

青野重利, 「気体分子により駆動される生体内シグナル伝達の分子機構」第7回日本蛋白質科学会年会, 仙台, 2007年5月.

S. AONO, “Molecular mechanism by which heme-based sensor proteins sense their effector gas molecules,” 67th Okazaki Conference “Molecular Science and Chemical Biology of Biomolecular Function,” Okazaki (Japan), November 2006.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本化学会生体機能関連化学部会幹事 (2007–).

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 (2005–2007).

日本学術振興会国際事業委員会書面審査員 (2005–2007).

学会誌編集委員

J. Biol. Inorg. Chem., Editorial Advisory Board (2002–2004).

B-8) 大学での講義、客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「相関分子科学」2007年12月3日–5日.

B-9) 学位授与

吉村英哲, 「The mechanism of oxygen sensing and signal transduction in the heme-based oxygen sensor protein HemAT from *Bacillus subtilis*」2007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).

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),「生体機能制御に關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).

倉田記念日立科学技術財団 倉田奨励金(研究助成),「一酸化炭素、一酸化窒素、酸素による遺伝子発現制御の分子機構」青野重利(2006年).

基盤研究(B),「気体分子を生理的エフェクターとする金属含有センサータンパク質の構造と機能」青野重利(2007年–2009年).

特定領域研究「細胞感覚」,「ガス分子により駆動される新規なセンサータンパク質の機能発現機構」青野重利(2007年–2008年).

C) 研究活動の課題と展望

これまでは、ヘムをセンサー本体として利用している気体分子センサータンパク質を主な研究対象とし、これらセンサータンパク質の構造機能相関の解明を目的として研究を進めてきた。これらセンサータンパク質の機能は、基本的にはセンサータンパク質が感知するエフェクター分子の有無により、センサータンパク質の分子構造が変化することで機能制御されている。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。ここ数年、活性型CooAの構造解析を試みてはいるが、いまだ成功するには至っていない。また、酸素センサータンパク質であるHemATの構造解析についても未だ成功していない。今後はCooA, HemATの不活性型および活性型の構造決定を目指して研究を行う予定である。また、CooA, HemAT以外の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。

桑 島 邦 博 (教授) (2007 年 1 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：蛋白質科学、生物物理学、生体分子科学

A-2) 研究課題：

- a) α ラクトアルブミンとカルシウム結合性リゾチームのフォールディング機構
- b) α ラクトアルブミンのモルテン・グロビュール状態の特性と生物機能
- c) アミロイド形成能を持つ β_2 ミクログロブリンのフォールディング機構
- d) 大腸菌シャペロニンの機能発現の分子機

A-3) 研究活動の概要と主な成果

- a) α ラクトアルブミンとリゾチームは互いにアミノ酸配列の類似した相同蛋白質であり、それらのフォールディング反応が類似しているか否かを実験的に明らかにすることは、蛋白質のフォールディング問題を考える上で重要である。昨年までの研究で、ヤギ α ラクトアルブミンのフォールディング反応の速度論的解析を行い、フォールディングの遷移状態で構造化する領域は、C ヘリックスと α - β ドメイン境界にあるカルシウム結合部位近傍に局在化していることが明らかになっている。本年は、イヌ乳リゾチームのフォールディング反応の速度論的解析を行い、遷移状態ではカルシウム結合部位の構造は形成されていないことが明らかとなった。したがって、 α ラクトアルブミンとリゾチームは互いに相同で立体構造も類似しているがフォールディング経路が異なることになる。
- b) α ラクトアルブミンのモルテン・グロビュール状態はフォールディング反応の中間体として知られているが、脂肪酸と複合体を形成して腫瘍細胞を選択的に細胞死に導く働きのあることも知られている。このような α ラクトアルブミン - 脂肪酸複合体の物理化学的特性を明らかにすることを目的として、本年は、ヤギ α ラクトアルブミンの酸性条件下におけるモルテン・グロビュール状態の構造を、水素交換二次元 NMR スペクトルを用いて調べた。モルテン・グロビュール状態では C ヘリックス部分がわずかに（水素交換保護度にして 10 ~ 20 程度）安定化していることがわかった。
- c) 透析アミロイドーシスの原因となる β_2 ミクログロブリンのフォールディング機構を調べることを目的として、その酸変性状態からの巻き戻り反応を、ストップフロー法、実時間 NMR スペクトルを用いて解析した。その結果、巻き戻り反応には、不感時間内のバースト相に続いて 4 つの過程が観測された。変性状態では X-プロリンペプチド結合のシス - トランス異性化に由来する二つの分子種が存在し、これらが二つの並行経路に沿って巻き戻ってゆくことが明らかになった。非天然のトランス・プロリン異性体も実質上天然構造まで巻き戻り、その後、ゆっくりとトランス型からシス型へ変換することもわかった（これが 4 つの過程の最後に対応する）。
- d) 大腸菌シャペロニン GroEL は分子量 57 k のモノマーが二重リング状に積み重なった 14 量体であり、ATP 依存的にアロステリックな構造転移を起こして、コ・シャペロニン GroES と複合体を形成する。したがって、GroEL への ATP 結合はその生物機能発現にとって本質的であるが、GroEL モノマーあたりの ATP 結合部位は一つであると考えられている。しかし、最近われわれは、GroEL 単一リング変異体を用いて、ATP 結合によるアロステリック転移の速度論的解析を行い、GroEL モノマーあたり二つの ATP 結合部位があるとの予想をたてた。ATP により誘起される GroEL アロステリック転移の ADP による阻害実験から、400 μ M ATP-100 μ M ADP の条件下では第二 ATP 結合部位が ADP によって占有されることがわかった。この条件下で、azido-ADP による光親和性標識を行い、標識

GroEL を得た。蛍光性亜鉛錯体を用いて標識 GroEL 中のリン酸基の存在を確認できたので、第二 ATP 結合部位の存在が確認されたことになる。今後 第二 ATP 結合部位のアミノ酸配列上の位置を明らかにすることが必要である。

B-1) 学術論文

A. KATO, K. MAKI, T. EBINA, K. KUWAJIMA, K. SODA and Y. KURODA, “Mutational Analysis of Protein Solubility Enhancement Using Short Peptide Tags,” *Biopolymers* **85**, 12–18 (2007).

H. NAKATANI, K. MAKI, K. SAEKI, T. AIZAWA, M. DEMURA, K. KAWANO, S. TOMODA and K. KUWAJIMA, “Equilibrium and Kinetics of the Folding and Unfolding of Canine Milk Lysozyme,” *Biochemistry* **46**, 5238–5251 (2007).

T. OROGUCHI, M. IKEGUCHI, M. OTA, K. KUWAJIMA and A. KIDERA, “Unfolding Pathways of Goat α -Lactalbumin as Revealed in Multiple Alignment of Molecular Dynamics Trajectories,” *J. Mol. Biol.* **371**, 1354–1364 (2007).

B-3) 総説、著書

桑島邦博, 「タンパク質のアンフォールディングとフォールディング」生物物理ハンドブック, 石渡、桐野、美宅編, 分担執筆, 朝倉書店 (2007).

桑島邦博, 「リサーチ・ナビ 文部科学省——特定領域研究『水と生体分子が織り成す生命現象の化学』」未来材料, 2月号, 62–65 (2007).

B-4) 招待講演

桑島邦博, 「蛋白質のフォールディング問題:物質科学と生命科学の接点」日本化学会第87春季年会イブニングセッション「生体分子科学の進展」関西大学千里山キャンパス, 2007年3月.

K. KUWAJIMA, “Molecular Mechanism of Protein Folding,” 1st International Symposium on Nanomedicine-from Basic to Applications-(ISNM2007) & 2nd Molecule-Based Information Transmission and Reception (MB-ITR2007), Okazaki (Japan), April 2007.

桑島邦博, 「真性体および組換え体 α ラクトアルブミンの構造の安定性とダイナミクス」平成19年度日本酪農科学シンポジウム, ホテルグランヴェール岐山, 岐阜市, 2007年8月.

K. KUWAJIMA, “Folding of Canine Milk Lysozyme: A Ca^{2+} -Binding Lysozyme,” The 7th KIAS—Soongsil Conference on Protein Structure and Function, Seoul (Korea), October 2007.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本生物物理学会運営委員 (1992–1993, 1999–2000).

日本蛋白質科学会理事 (2001.4–2005.3).

The Protein Society, Executive Council (2005.8–2007.7).

日本生化学会評議員 (2005–).

学会の組織委員

第24回谷口国際シンポジウム“ Old and New Views of Protein Folding, ”木更津(かずさアカデミアパーク)世話人 (1999).

The 1st International Conference on Biomedical Spectroscopy: From Molecule to Men, Cardiff (U.K.), 組織委員 (2002).

The 1st Pacific-Rim International Conference on Protein Science, Yokohama (Japan), 組織委員 (2004).

KIAS Conference on Protein Structure and Function, Seoul (Korea), 組織委員 (2001–).

日本生物物理学会第45回年会, 横浜(パシフィコ横浜) 年会長 (2007).

文部科学省、学術振興会等の役員等

科学研究費審査部会専門委員会委員 (2002, 2004).

JST 若手個人研究推進事業(CREST)領域アドバイザー (2001–2005).

JST 戦略的創造研究推進事業評価委員 (2004, 2005).

学会誌編集委員

Folding & Design, Editorial Board (1996–1998).

Biochimica et Biophysica Acta, Editorial Board (1998–2003).

J. Biochem. (Tokyo), Editorial Board (1997–2002).

Protein Science, Editorial Board (2001–2006).

Proteins: Structure, Function & Bioinformatics, Editorial Manager (1993–).

J. Mol. Biol., Editorial Manager (2004–).

BIOPHYSICS, Editorial Manager (2005–).

Spectroscopy—Biomedical Applications, Editorial Board (2002–).

科学研究費の研究代表者、班長等

特定領域研究「水と生体分子が織り成す生命現象の化学」領域代表者 (2003–2007).

その他

大阪大学蛋白質研究所外部評価委員 (2000, 2007).

B-8) 大学での講義、客員

Lund 大学(スウェーデン)大学院医学研究科博士論文審査員(Opponent) Jenny Petterson, “ Structure-Function Analysis of HAMLET– human α -lactalbumin made lethal to tumor cells, ”2007年12月, Ph.D.

B-10)外部獲得資金

一般研究(A), 「シャペロニン GroEL の標的タンパク質認識の分子機構」 桑島邦博 (1995年–1997年).

基盤研究(B), 「シャペロニンの機能発現の分子メカニズム」 桑島邦博 (1998年–1999年).

基盤研究(B), 「高圧温度ジャンプ法と計算機シミュレーションによる蛋白質フォールディング研究」 桑島邦博 (2000年–2002年).

基盤研究(C) (企画調査) 「蛋白質フォールディング研究の企画調査」 桑島邦博 (2001年).

特定領域研究(公募) 「蛋白質一生」 「大腸菌シャペロニンの機能発現の速度論」 桑島邦博 (2002年–2003年).

特定領域研究(公募) 「ゲノム情報科学」 「蛋白質フォールディングの物理化学的解析」 桑島邦博 (2002年)

特定領域研究(計画(2)) 「水と生体分子」 「蛋白質フォールディング機構の物理化学的解明」 桑島邦博 (2003年–2007年).

特定領域研究(計画(1)) 「水と生体分子」 「水と生体分子が織り成す生命現象の化学に関する研究の総括」 桑島邦博 (2003年–2007年).

基盤研究(B), 「シャペロニンの機能発現の速度論的解析」 桑島邦博 (2005年–2007年).

C) 研究活動の課題と展望

蛋白質のフォールディング問題は物理化学としても興味深い、生命科学や医学とも深い関わりを持っている。特に、フォールディング中間体であるモルテン・グロビュール状態の α ラクトアルブミンが脂肪酸(オレイン酸)と複合体(HAMLET)を形成すると抗腫瘍活性を発現するのは興味深い現象であるが、この現象の物理化学的基盤は、今のところ、全く不明である。来年の一つの目標は、水素交換標識と二次元NMRスペクトルを利用してHAMLET複合体の構造解析を行うことである。また、シャペロニンは細胞内の蛋白質フォールディングに関わっており、シャペロニンの作用の分子機構を明らかにすることは、蛋白質フォールディングとより高次の生命現象との関係を解き明かす上で重要である。GroELの第二のATP結合部位のアミノ酸配列上の位置を同定することは来年の大きな課題である。来年は、さらに、水素交換標識二次元NMRを用いてGroEL/ES複合体の構造のダイナミクスを解析する課題にも取り組んでゆきたい。

藤 井 浩 (准教授) (1998 年 3 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：生物無機化学、物理化学

A-2) 研究課題：

- a) 酸化反応に関与する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

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。また同様な反応中間体は、金属錯体を触媒として用いる酸化反応中にも存在すると考えられている。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を合成し、電子構造と反応性の関わりを研究した。オキソ鉄 4 価ポルフィリン π カチオンラジカル錯体とシクロヘキセンの反応を速度論的に解析した結果、シクロヘキセンのアリル位水酸化反応がエントロピー制御であることを明らかにした。また、立体障害をもつマンガン 3 価サレン錯体からオキソマンガン 4 価サレン錯体の合成、同定に成功した。マンガンイオンに配位したオキソ配位子は、容易にプロトン化を受けてマンガン 4 価ヒドロキシ錯体に、さらにはマンガン 3 価フェノキシラジカル錯体に変化す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。イミダゾール基やピラゾール基をもつ 3 座配位子から銅 1 価亜硝酸錯体の合成に成功した。
- 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。 ^{63}Cu NMR は、シグナルが極端に広幅化するため、観測困難な核種の一つであった。我々は、銅イオンに一酸化炭素が配位すると、 ^{63}Cu NMR シグナルが極端に先鋭化することを見出した。種々の配位子から銅錯体を合成し、一酸化炭素による先鋭化を検討した。その結果、合成したすべての錯体で ^{63}Cu NMR シグナルの先鋭化が観測できた。線幅の温度依存性から、一酸化炭素は銅イオンの核四極子緩和過程を変化させていることがわかった。

B-1) 学術論文

M. KUJIME, T. KURAHASHI, M. TOMURA and H. FUJII, “ ^{63}Cu NMR Spectroscopy of Copper(I) Complexes with Various Tridentate Ligands: CO as a Useful ^{63}Cu NMR Probe for Sharpening ^{63}Cu NMR Signals and Analyzing the Electronic Donor Effect of a Ligand,” *Inorg. Chem.* **46**, 541–551 (2007).

A. TAKAHASHI, T. KURAHASHI and H. FUJII, “Activation Parameters for Cyclohexene Oxygenation by an Oxoiron(IV) Porphyrin π -Cation Radical Complex: Entropy Control of an Allylic Hydroxylation Reaction,” *Inorg. Chem.* **46**, 6227–6229 (2007).

B-4) 招待講演

藤井 浩, 「高原子価ヘム酵素反応中間体の反応選択性」分子研研究会「ヘム代謝に関わる酵素の分子科学」岡崎, 2007年3月.

H. FUJII, “Role of highly conserved three-histidines ligand environment of type-2 copper site in copper containing nitrite reductase,” 13th International Conference on Bioinorganic Chemistry, Vienna (Austria), July 2007.

B-6) 受賞、表彰

高橋昭博, 日本化学会学生講演賞 (2007).

B-8) 大学での講義、客員

兵庫県立大学大学院生命科学研究科, 客員准教授, 2007年2月-.

B-10) 外部獲得資金

奨励研究(A), 「ヘム酵素の軸配位子が多様な酵素機能を制御する機構の解明」藤井 浩 (1997年-1999年).

重点領域研究(公募)「生体金属分子科学」 「チトクロームc酸化酵素反応中間体モデル錯体の構築と反応機構の研究」藤井 浩 (1997年-1998年).

上原記念生命科学財団 研究奨励金, 「ヘムオキシゲナーゼにおける反応特異性およびヘム代謝機構の研究」藤井 浩 (1999年).

重点領域研究(公募)「生体金属分子科学」 「¹⁷O-NMR による銅 - 酸素錯体の配位した酸素の電子構造と反応性の研究」藤井 浩 (1999年).

内藤財団 科学奨励金, 「ヘムオキシゲナーゼによる位置特異的ヘム代謝機構の解明」藤井 浩 (2000年).

基盤研究(C), 「合成ヘムとミオグロビン変異体による亜硝酸還元酵素モデルの構築と反応機構の研究」藤井 浩 (2000年-2002年).

基盤研究(B), 「単核非ヘム酵素反応中間体として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).
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).

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).

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質と反応性の関係を解明していきたいと考える。また, これらの研究を通して得られた知見を基に, 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。

生体分子情報研究部門

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微細加工とその表面への生体情報伝達システムの構築
- 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（イオンチャンネルバイオセンサー）を作成する。我々の素子も含め、従来型の素子においては、動作寿命が 30 分程度でかつ不安定（素子をくみ上げたあとしばしば素子が動作しない）という欠点があった。2007 年度は、素子内で細胞を培養できる新構造を提案し製作に成功した。従来型の素子では創薬スクリーニング適用しか用途が無かったが、我々の新素子の成功で、細胞の機能計測やイオンチャンネルの評価など広い応用が一気に開けたと言える。また、XeF₂ ガスによる放射光エッチングにより、微細機械加工の難しい PDMS が放射光エッチングできることを初めて確認した。これにより、PDMS によるマイクロ流路形成や細胞外マトリックスの印刷などにおいて従来できなかった各種の構造を形成することが可能となった。
- b) 脂質二重膜 / 膜タンパク集積系は、細胞の基本的機能を支配する、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。2007 年度は 不透明基板の脂質二重膜の動きを単一光子レベルで観測することに成功した。脂質分子の拡散定数を単一分子レベルで計測した。Aβ40 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 SiO₂ 表面に形成した。マイカ表面ではユニークな相分離が観測されるが、SiO₂ 表面では均一な相しか観測されない、という表面構造依存性が見られた。さらにマイカ表面では Aβ40 の凝集反応が SiO₂ 表面に比べて桁違いに早くすすみ、凝集体の構造も方向性を持ったフィブリル状となる。これらの現象が GM1 分子の分子構造変化が Aβ40 の凝集速度の変化に関与していると考え分子動力学による解析を進めている。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完了し各種のタンパク質のスペクトル測定を開始した。
- c) 神経細胞ネットワーク診断素子開発に関連して、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の開発、光で神経細胞の活動電位を発生させることのできるチャンネルロドプシンを発現した C2C12 細胞のシリコン基板上での培養実験、を開始した。

B-1) 学術論文

R. AOKI, T. ARAKAWA, N. MISAWA, R. TERO, T. URISU, A. TATEUCHI and T. OGINO, “Immobilization of Protein Molecules on Step-Controlled Sapphire Surfaces,” *Surf. Sci.* **601**, 4915–4921 (2007).

T. ASANO, Z. -L. ZHANG, H. UNO, R. TERO, K. SUZUI, S. NAKAO, T. KAITO, K. SHIBASAKI, M. TOMINAGA, Y. UTSUMI and T. URISU, “Fabrication of a Planar Type Patch-Clamp Biosensor Using Silicon on Insulator Substrate,” *J. Surf. Sci. Soc. Jpn.* **28**, 385–390 (2007).

Z. L. ZHANG, T. ASANO, H. UNO, R. TERO, M. SUZUI, S. NAKAO, T. KAITO, K. SHIBASAKI, M. TOMINAGA, Y. UTSUMI, Y. L. GAO and T. URISU, “Fabrication of Si-Based Planar Type Patch-Clamp Biosensor Using SOI Substrate,” *Thin Solid Films* **516/9**, 2831–2833 (2007).

R. TERO, T. UJIHARA and T. URISU, “Supported Lipid Bilayers Membranes on SiO₂ and TiO₂: Substrate Effects on Membrane Formation and Shape Transformation,” *Proc. SPIE-Int. Soc. Opt. Eng.* **6769**, 67690J (2007).

B-4) 招待講演

T. URISU, “Developments of Ionchannel Biosensor and Plasma Process,” The 1st Workshop on Biological Applications of Plasma/Photon Processing, Osaka, March 2007.

T. URISU, “Development of Planer type ion-channel biosensor,” The 5th International Forum of Post-Genome Technologies (5’IFPT), Suzhou (China), September 2007.

T. URISU, “Si based planer type ion-channel biosensor and its applications,” The 2007 International Conference on Solid State Devices and Materials, Tsukuba, September 2007.

宇理須恒雄,「イオンチャンネルバイオセンサーの開発と応用」日本学術振興会分子ナノテクノロジー第174委員会, アクトシティ浜松コンgresセンター, 2007年6月.

宇理須恒雄,「シリコンを基板としたインチャンネルバイオセンサーの開発と応用」第68回応用物理学学会学術講演会シンポジウム, 2007年9月.

宇理須恒雄,「イオンチャンネルバイオセンサーの開発とアルツハイマー発症機構解明への応用」放射光表面科学研究会, 東京大学化学科講堂, 2007年12月.

宇理須恒雄,「イオンチャンネルバイオセンサーの開発と応用——物質・分子科学者による脳機能研究の重要性——」早稲田大学125周年記念講演会, 早稲田大学大隈講堂, 2007年12月.

宇理須恒雄,「イオンチャンネルバイオセンサーの開発と応用」日本生物物理学会第45年会, パシフィコ横浜, 2007年12月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

レーザー学会評議員 (1983–1985).

日本放射光学会評議員 (1993–1994, 1997–1998, 2001–2002).

電気学会, 放射光励起プロセス技術調査専門委員会幹事 (1992–1994).

電気学会, 放射光による材料加工技術調査専門委員会委員長 (1994–1997).

大型放射光施設安全性検討委員会委員 (1993–).

東北大学電気通信研究所研究外部評価委員 (1995–).

日本工業技術振興協会, 放射光の半導体への応用技術研究委員会顧問委員 (1995–2000).

新機能素子研究開発協会, 新世紀素子等製造評価技術の予測委員会 / ハードフ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).

佐賀県シンクロトロ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・バイオプロセッシング技術調査専門委員会」アドバイザー (2004.5–).

日本表面科学会評議員 (2003.4–).

日本放射光学会評議員 (2003.4–2006.12).

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 23rd, 24th, 25th Annual International Symposium on Microlithography, 論文委員 (1997, 1998, 1999).

レーザ学会第19回年次大会プログラム委員 (1998–1999).

レーザ学会第23回年次大会プログラム委員 (2002–2003).

UK-JAPAN International Seminar, 組織委員長 (1999, 2000).

Pacificchem 2000, Symposium on Chemical Applications of Synchrotron Radiation, 組織委員 (2000).

MB-ITR2005, 2006, 2007, 組織委員長 (2005, 2006, 2007).

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」誌編集委員会委員 (2004–).

日本表面科学会, 出版委員 (2005.6–2007.5).

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).

特定領域研究(公募研究), 「イオンチャンネルに着目したアルツハイマー発症初期過程の網羅的探索」宇理須恒雄 (2007年–2008年).

基盤研究(A), 「イオンチャンネルバイオセンサーの単一神経細胞解析への応用」宇理須恒雄 (2007年–2010年).

財団法人コスメト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

2001年よりシリコン表面への生体物質集積の研究をはじめたが, 2007年度は大きな進展があった。第一は, アルツハイマー病発症機構に関係してアミロイドペプチド(A β)の凝集がガングリオシドGM1の分子構造および周辺脂質分子のドメイン構造の違いによって反応速度が大きく変わることの発見である。このことは神経変性疾患に共通したタンパク質の凝集において, 従来から言われている分子レベルの研究以上に, 生体内における化学反応において分子科学レベルの研究が重要であることを示唆するものである。もう一つの進展は, 従来のイオンチャンネルバイオセンサーにおいて, 素子に搭載する細胞の寿命が30分程度と短く, かつ素子自体の動作も不安定であるという問題があったが, われわれは, 素子内に置いて細胞を培養する機能を付与することを発案し, これに成功した。これにより, 従来は創薬スクリーニング応用に限られていたイオンチャンネルバイオセンサーが神経細胞の機能計測など学術研究に応用できる道が開かれたと言える。これらの状況を考え今後は, A β -GM1凝集体の分子構造の解明を実験とシミュレーションによりすすめるとともに, これと平行して, 神経細胞ネットワークの機能解析素子を開発し, 実際の神経細胞システムにおけるA β 凝集の原因解明に結びつける。

小澤 岳 昌 (准教授) (2005 年 4 月 1 日 ~ 2007 年 9 月 30 日)*)

A-1) 専門領域：分析化学、生物物理

A-2) 研究課題：

- a) ミトコンドリア mRNA の可視化検出法に関する研究
- b) 細胞内小分子の可視化検出法に関する研究
- c) ペプチド結合切断酵素活性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) 生きた細胞内ミトコンドリアで機能する RNA を、塩基配列特異的に可視化する蛍光プローブを開発した。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。ND6 mRNA の選択的な認識を目的として、RNA 結合タンパク質 Pumilio の変異体を作製した。ND6 mRNA 配列選択的なプローブの認識を、ゲルシフトアッセイにより実証した。このプローブを用いて、生きた単一のミトコンドリア内における ND6 mRNA の局在とその動態を、蛍光顕微鏡により観察し明らかにした。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) 植物個体やツメガエル卵は自家蛍光が強いため、蛍光プローブを用いた生体分子観察が容易ではない。細胞内情報伝達物質の一つ、cyclic guanosine monophosphate (cGMP) を標的分子として、植物個体とツメガエル卵で機能する cGMP を可視化するための生物発光プローブを開発した。生きた培養細胞を用いて、開発したプローブが cGMP を高感度かつ可逆的に可視化できることを実証した。cGMP プローブを発現する遺伝子導入シロイヌナズナを作製した。外界環境変化に応答して、シロイヌナズナ細胞内の cGMP 濃度が上昇することを見いだした。
- c) 生物発光タンパク質 (ルシフェラーゼ) の N 末端と C 末端を連結し、環状構造を有する新たな発光プローブの概念を創出した。ルシフェラーゼの N 末端と C 末端をプロテインスプライシングにより連結した。この環状ルシフェラーゼは発光能が失われていることを確認した。次にペプチド切断酵素 (caspase-3) を作用させると環状ルシフェラーゼの一部が切断され、発光能が回復することを明らかにした。この環状ルシフェラーゼは、マウス個体内で機能する caspase-3 の活性を低侵襲的に可視化する優れたプローブとなることを実証した。

B-1) 学術論文

A. KANNO, Y. YAMANAKA, H. HIRANO, Y. UMEZAWA and T. OZAWA, "Cyclic Luciferase for Real-Time Sensing of Caspase-3 Activities in Living Mammals," *Angew. Chem., Int. Ed.* **46**, 7595–7599 (2007).

T. OZAWA, Y. NATORI, M. SATO and Y. UMEZAWA, "Imaging Dynamics of Endogenous Mitochondrial RNA in Single Living Cells," *Nat. Methods* **4**, 413–419 (2007).

S. B. KIM, A. KANNO, T. OZAWA, H. TAO and Y. UMEZAWA, "Nongenomic Activity of Ligands in the Association of Androgen Receptor with Src," *ACS Chem. Biol.* **2**, 484–492 (2007).

T. OZAWA, Y. NATORI, Y. SAKO, H. KUROIWA, T. KUROIWA and Y. UMEZAWA, "A Minimal Peptide Sequence That Targets Fluorescent and Functional Proteins into the Mitochondrial Intermembrane Space," *ACS. Chem. Biol.* **2**, 176–186 (2007).

S. B. KIM, T. OZAWA, H. TAO and Y. UMEZAWA, “A Proinflammatory Cytokine Sensor Cell for Assaying Inflammatory Activities of Nanoparticles,” *Anal. Biochem.* **362**, 148–150 (2007).

M. TAKEUCHI and T. OZAWA, “Methods for Imaging and Analyses of Intracellular Organelles Using Fluorescent and Luminescent Proteins,” *Anal. Sci.* **23**, 25–29 (2007).

B-3) 総説、著書

T. OZAWA and Y. UMEZAWA, “A Genetic Method to Identify Mitochondrial Proteins in Living Mammalian Cells,” *Methods Mol. Biol.* **390**, 119–130 (2007).

T. OZAWA and Y. UMEZAWA, “Identification of Proteins Targeted into the Endoplasmic Reticulum by cDNA Library Screening,” *Methods Mol. Biol.* **390**, 269–280 (2007).

C. WEI, M. YAMOTO, W. WEI, Z. ZHAO, K. TSUMOTO, T. YOSHIMURA, T. OZAWA and Y. J. CHEN, “Genetic Nanomedicine and Tissue Engineering,” *Med. Clin. North Am.* **91**, 889–898 (2007).

小澤岳昌, 「光プローブの新しいデザインと生体機能の可視化」*化学工業*, **58**, 860–864 (2007).

小澤岳昌, 「細胞の構造と機能：細胞内」*ナノテクのためのバイオ入門*, 荻野俊郎、宇理須恒雄編, 共立出版, 7–24 (2007).

B-4) 招待講演

小澤岳昌, 「生きた細胞と生物個体内の生体分子イメージング」名古屋大学公開セミナー, 愛知, 2007年12月.

小澤岳昌, 「生体分子を可視化する分子プローブの開発と応用」日本分光学会・生細胞分光部会, 神奈川, 2007年12月.

T. OZAWA, “Protein engineering for biomolecular imaging,” Tateshina Conference 2007, Nagano, 2007年11月.

小澤岳昌, 「光タンパク質でひろがる生理機能イメージング」学習院大学生命分子科学シンポジウム, 東京, 2007年10月.

小澤岳昌, 「生体分子を光センシングする機能性タンパク質」化学センサー研究懇談会, 徳島, 2007年9月.

小澤岳昌, 「創薬に向けた生体分子イメージングの新たな技術開発」ゲノム創薬フォーラムキーテクノロジー2007, 東京, 2007年9月.

小澤岳昌, 「細胞と生物個体内の生体分子イメージング法」第9回分子ダイナミック分光ワークショップ, 静岡, 2007年7月.

小澤岳昌, 「レポータータンパク質の再構成法を利用した生きた生物個体内の生体分子イメージング」第40回日本発生物学会, 福岡, 2007年5月.

T. OZAWA, “Visualization of organelle-localized proteins in living cells using split-reporter reconstitution analysis,” VII European Symposium of the Protein Society, Stockholm (Sweden), 2007年5月.

T. OZAWA, “Imaging biomolecules in living cells and animals using split-reporter reconstitution analysis,” 1st International Symposium on Nanomedicine, Aichi, 2007年4月.

T. OZAWA, “Genetic approaches to identifying mitochondrial proteins and their localization,” Asian Society for Mitochondrial Research and Medicine, Seoul (Korea), 2007年2月.

小澤岳昌, 「細胞と個体内の生体分子イメージング」電気学会バイオ・マイクロシステム研究会, 名古屋, 2007年1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

日本化学会春季年回講演企画委員 (2007-).

東京コンファレンス実行委員 (2004-2006).

日本化学会年会プログラム編成委員 (2004-2005).

学会誌編集委員

日本分析化学会「ぶんせき」編集委員 (2007-).

日本化学会欧文誌編集委員 (2007-).

その他

基礎生物学研究所バイオイメージングアドバイサリー委員 (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 (2006-2008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).

科学技術振興機構さきがけ研究, 「不透明な生体内における細胞内小分子の可視化と光制御法の開発」小澤岳昌 (2007年-2010年).

C) 研究活動の課題と展望

蛍光・発光タンパク質の切断と再連結を利用したタンパク質再構成法は、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様な応用可能性を有している。これまでに開発したRNAや細胞内小分子検出プローブは、従来困難であった生細胞内で機能する分子の「時空間情報」が得られる特徴を有する。今後は機構内外の共同研究を推進し、プローブを動植物組織・個体に応用した生体分子可視化技術の発展研究と、さらに生命現象の新たな発見を目指す。また生命の本質を理解する上で観る技術に加え、未知の生体分子を同定する技術、および特定の生体分子を制御する技術が今後重要になる。新たな独創的原理に基づいた生体分子のライブラリースクリーニング法や、生体分子の光制御法を開発し、研究をさらに展開し発展させる予定である。

*) 2007 年 10 月 1 日東京大学大学院理学系研究科教授、分子科学研究所教授兼任

錯体触媒研究部門

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. M. A. YAMADA, T. ARAKAWA, H. HOCKE and Y. UOZUMI, "A Nanoplatinum Catalyst for Aerobic Oxidation of Alcohols in Water," *Angew. Chem., Int. Ed.* **46**, 704–706 (2007).

Y. UOZUMI, R. NAKAO and H. RHEE, "Development of an Amphiphilic Resin-Dispersion of Nanopalladium Catalyst: Design, Preparation, and Its Use in Aquacatalytic Hydrodechlorination and Aerobic Oxidation," *J. Organomet. Chem.* **692**, 420–427 (2007).

M. KIMURA and Y. UOZUMI, "Development of New P-Chiral Phosphorodiamidite Ligands Having a Pyrrolo[1,2-c]diazaphosphol-1-one Unit and Their Application to Regio- and Enantioselective Iridium-Catalyzed Allylic Etherification," *J. Org. Chem.* **72**, 707–714 (2007).

Y. M. A. YAMADA, H. GUO and Y. UOZUMI, "Tightly Convuluted Polymeric Phosphotungstate Catalyst: An Oxidative Cyclization of Alkenols and Alkenoic Acids," *Org. Lett.* **9**, 1501–1504 (2007).

M. MINAKAWA, K. TAKENAKA and Y. UOZUMI, "Pd Pincer Complex as a Probe to Index the Coordination Ability of Various Ligands," *Eur. J. Inorg. Chem.* 1629–1631 (2007).

Y. M. A. YAMADA and Y. UOZUMI, "Development of a Convuluted Polymeric Nanopalladium Catalyst: α -Alkylation of Ketones and Ring-Opening Alkylation of Cyclic 1,3-Diketones with Primary Alcohols," *Tetrahedron* **63**, 8492–8498 (2007).

Y. UOZUMI, "Asymmetric Allylic Substitution of Cycloalkenyl Esters in Water with an Amphiphilic Resin-Supported Chiral Palladium Complex," *Pure Appl. Chem.* **79**, 1481–1489 (2007).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. UOZUMI, Y. M. A. YAMADA, T. BEPPU, N. FUKUYAMA, M. UENO and T. KITAMORI, "Instantaneous Carbon–Carbon Bond Formation Using a Microchannel Reactor with a Catalytic Membrane," *The Proceedings of μ TAS 2007 Conference*, **1**, 625–627 (2007).

B-3) 総説、著書

魚住泰広, 「両親媒生高分子触媒を用いる水中での有機合成」, 『固定化触媒のルネッサンス』, シーエムシー出版, 22–38 (2007).

魚住泰広, 「ピンサー型錯体触媒の新展開」, 『ファインケミカル』, シーエムシー出版, **36**, 6, 49–57 (2007).

B-4) 招待講演

魚住泰広, 「高分子担持遷移金属触媒の新展開：理想の化学変換を目指して」, 日本化学会北海道支部, 函館, 2007年1月.

魚住泰広, "Heterogeneous Aquacatalytic Reactions toward Ideal Chemical Process," 愛媛大学応用化学学科シンポジウム, 松山, 2007年2月.

Y. UOZUMI, "Heterogeneous Aquacatalytic Organic Reactions with Amphiphilic Polymer-Supported Transition Metal Complexes and Nanoparticles," マックスプランク研究所セミナー, Mülheim (Germany), February 2007.

Y. UOZUMI, "Heterogeneous Aquacatalytic Organic Reactions with Amphiphilic Polymer-Supported Transition Metal Complexes and Nanoparticles," ユトレヒト大学化学学科セミナー, Utrecht (Netherlands), February 2007.

Y. UOZUMI, "Heterogeneous Aquacatalytic Organic Reactions with Amphiphilic Polymer-Supported Transition Metal Complexes and Nanoparticles," デルフト大学化学学科セミナー, Delft (Netherlands), February 2007.

魚住泰広, 「高分子担持ナノ金属粒子触媒の創製と機能開発」, 大学共同利用機関連携による新技術説明会, 東京, 2007年3月.

Y. UOZUMI, "Development of Polymeric Catalysts Realizing Fine Chemical Synthesis in Water," GSC-AON2007, Tokyo, March 2007.

Y. UOZUMI, "Heterogeneous Aquacatalytic Organic Reactions with Amphiphilic Polymer-Supported Transition Metal Complexes and Nanoparticles," カールスバーグ研究所セミナー, Copenhagen (Denmark), March 2007.

Y. UOZUMI, "Heterogeneous Aquacatalytic Organic Reactions with Amphiphilic Polymer-Supported Transition Metal Complexes and Nanoparticles," チャールス大学有機化学学科セミナー, Prague (Czech Republic), March 2007.

魚住泰広, 「シナジスティック機能を発現する遷移金属触媒の開発」, 日本化学会第87回春季大会, 大阪, 2007年3月.

魚住泰広, 「理想科学プロセスを実現する触媒創製：高機能性不均一触媒の開発研究」, 日本化学会第87回春季大会, 大阪, 2007年3月.

Y. UOZUMI, "Heterogeneous aquacatalytic asymmetric synthesis with polymeric palladium complexes," GSC-3 SYMPOSIUM 3rd international Conference on Green and Sustainable Chemistry, Delft (Netherlands), July 2007.

山田陽一, "Instantaneous Carbon–Carbon Bond Formation Using a Microchannel Reactor with a Catalytic Membrane," ボトムアップ若手の会第2回研究会, つくば, 2007年7月.

山田陽一, 「微小空間系不均一触媒システムの構築」, 第2回Shibasaki セミナー, 東京, 2007年7月.

山田陽一, 「自己組織化金属高分子触媒の創製と有機合成化学への応用」, 大阪大学基礎工学部講演会, 大阪, 2007年8月.

B-5) 特許出願

PCT-JP2007-053583,「マイクロリアクター」魚住泰広、山田陽一、福山尚志、別府朋彦、北森武彦、上野雅晴, 2007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, 日本薬学会奨励賞 (2005).

魚住泰広, 第6回グリーン・サステナブル・ケミストリー賞、文部科学大臣賞 (2007).

魚住泰広, 平成18年度日本化学会学術賞 (2007).

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 (2006–2007).

触媒学会創設50周年記念国際シンポジウム組織委員 (2007–).

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 (2002–2007).

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 (2004–2007).

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 誌アドバイザー - 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 (2002–2007).

理化学研究所研究チームリーダー (2007–).

B-8) 大学での講義、客員

鳥取大学, 非常勤講師.

九州大学, 客員教授.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「錯体触媒講義」2007年12月17日-18日.

B-9) 学位授与

荒川孝保, 「両親媒性PS-PEG 担持白金族触媒による水中高機能性触媒の開発」2007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 研究が終了したことから、今後の研究環境・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。

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：

- 金属錯体を触媒とする二酸化炭素の多電子還元反応
- 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
- 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

- 二酸化炭素由来の Ru-CO 結合のカルボニル炭素に連続して二つのヒドリド供給が可能な Ru 錯体の合成に成功した。
- Ru- アンミン錯体からのプロトン解離による Ru- アミノラジカル錯体の生成を証明し、アミノラジカル錯体を活性種とするアルコール酸化反応を見出した。
- 電気化学的に 2 電子 1 プロトンの酸化還元反応が可能な配位子の合成により、単核の Ru 錯体の 2, 4, 6 電子移動を伴う光化学的多電子酸化還元反応が可能となった。

B-1) 学術論文

H. OHTSU, S. TAKAISHI, K. IMAMURA, A. ISHII, K. TANAKA, M. HASEGAWA and M. YAMASITA, “Remarkable Functions of Long-Chain Alkyl Groups in Halogen-Bridged Nickel(III) Nanowire Complexes,” *Eur. J. Inorg. Chem.* 4425–4428 (2007).

H. TANNAI, T. KOIZUMI, T. WADA and K. TANAKA, “Electrochemical and Photochemical Behavior of a Ruthenium(II) Complex Bearing Two Redox Sites as a Model for the NAD⁺/NADH Redox Couple,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **46**, 7112–7115 (2007).

Y. MIYAZATO, T. WADA, J. MUCKERMAN, E. FUJITA and K. TANAKA, “Generation of Ru(II)–Semiquinone–Anilino Radical through Deprotonation of Ru(III)–Semiquinone–Anilido Complex,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **46**, 5728–5730 (2007).

D. POLYANSKY, D. CABELLI, J. MUCKERMAN, E. FUJITA, T. KOIZUMI, T. FUKUSHIMA, T. WADA and K. TANAKA, “Photochemical and Radiolytic Production of an Organic Hydride Donor with a Ru^{II} Complex Containing an NAD⁺ Model Ligand,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **46**, 4169–4172 (2007).

H. TANNAI, T. KOIZUMI and K. TANAKA, “Palladium(II) Complexes Bearing the Terpyridine-Type Tridentate Ligand with Benzo[b]-1,5-naphthyridin-2-yl groups,” *Inorg. Chim. Acta* **360**, 3075–3082 (2007).

K. TSUTSUI, T. KOIZUMI, K. TANAKA and H. HAYASHI, “Anion-Dependent Selective Formation of Intermolecular Non-Covalent Bonds,” *J. Mol. Struct.* **829**, 168–175 (2007).

B-4) 招待講演

K. TANAKA, “Oxidation of Alcohols Aimed at Power Generation from Chemical Energy in Homogeneous Reactions,” 233rd ACS National Meeting, Chicago (U.S.A.), March 2007.

K. TANAKA, “Ru–oxyl and –aminyl Radical Complexes Generated through the acid-base equilibrium of Ru–aqua and –amine Complexes,” Seminar at Brookhaven National Laboratory, New York (U.S.A.), March 2007.

K. TANAKA, “Generation of Ru–Oxyl and –aminyl Radical Complexes Aimed at Energy Converter from Chemical energy to Electrical One,” Japan-US Joint Symposium on Chemistry of Coordination Space, Northwestern University, Chicago (U.S.A.), June 2007.

K. TANAKA, “Photochemical and Electrochemical Behavior of Ruthenium(II) Complexes having the Function of Biological NAD⁺/NADH Redox Couple,” The First Asian Conference of Coordination Chemistry, Okazaki Conference Center, July–August 2007.

K. TANAKA, “Oxidation of Alcohols Catalyzed by Ru-aminyl Radical Complexes Aimed at Energy Converter,” Bioinorganic and Organometallic Perspectives in Activation of Small Molecules, Okazaki Conference Center, November 2007.

田中晃二, 「エネルギーサイクルと人工光合成とについて」知財フェスタ in 大阪, 高津ガーデン, 2007年11月.

田中晃二, 「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錯体触媒による還元的炭素 - 水素結合生成と酸化的開裂反応」九州大学大学院理学研究科セミナー, 2007年3月.

田中晃二, 「持続可能な社会の構築を目指した金属錯体による化学エネルギーと電気エネルギーの相互変換」錯体化学若手の会, 京都大学, 2007年12月.

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 (1990–1993).

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 (1990–1994).

第8回生物無機化学国際会議組織委員 (1995–1997).

第1回アジア錯体会議計画委員 (2006–2007).

文部科学省、学術振興会等の役員等

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–).

日本学術振興会学術センター・化学調査班委員 (2007–).

研究員等審査会専門委員 (1995–1996).

学術審議会専門委員(科学研究費分科会)(1992–1994, 2003–).

文部省重点領域研究「生物無機化学」班長 (1992–1994).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (1996–1997, 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 (1999–2006).

NEDO 技術委員 (2001–2002).

その他

総合研究大学院大学先導科学研究科構造分子科学専攻長 (2005–2008).

B-10) 外部獲得資金

戦略的創造研究推進事業 CREST, 「化学エネルギー変換素子の構築」田中晃二 (2001年度–2005年度).

基盤研究 (A), 「電気エネルギー貯蔵のための二酸化炭素の多電子還元反応」田中晃二 (2005年度–2007年度).

特定領域研究, 「化学エネルギー変換のための新規酸化反応活性種の創造」田中晃二 (2007年–2008年).

C) 研究活動の課題と展望

遷移金属上での一酸化炭素と求核試薬との反応は有機合成の最も重要な素反応の一つである。二酸化炭素は金属 - η^1 - CO_2 錯体を形成させると速やかに金属 - CO 錯体に変換可能であるが、二酸化炭素還元条件下では金属 - CO 結合の還元的開裂が起こり CO が発生する。したがって、二酸化炭素を有機合成の C1 源とするためには CO_2 由来の金属 - CO 結合を開裂させることなく各種の試薬と反応させる方法論の開発にかかっている。還元型の配位子を CO_2 還元の電子貯蔵庫として使用するのみならず金属 - CO 結合へのヒドリドの供給により、金属 - CO 結合の還元を目指している。さらに CO_2 の多電子還元反応は、電気エネルギーから化学エネルギーへの変換手段としても大きな期待がかけられる。

アコ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ニ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 (准教授) (2000 年 5 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：錯体化学

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) これまで直鎖状に連結した 3 座フェノキシド配位子を用いた前周期遷移金属ヒドリド錯体の合成を行ってきた。本年度は直鎖型から三脚型にフェノキシド基を配列した多座配位子を用いた錯体合成を行った。三脚型配位子を用いることにより、これまで単離が困難であった金属錯体の構造および反応性を明らかにした。
- b) 三脚型配位子をもつヒドリド錯体が窒素分子と容易に反応し、窒素 - 窒素 3 重結合の切断を伴い、ニトリド錯体を与えることを見いだした。
- c) アダマンチル基をオルト位に導入した嵩高いフェノキシド配位子を用いて、通常では合成が困難な低原子価錯体の前駆体となりうる錯体の合成に成功した。

B-1) 学術論文

D. ZHANG, H. AIHARA, T. WATANABE, T. MATSUO and H. KAWAGUCHI, “Zirconium Complexes of the Tridentate Bis(aryloxide)-*N*-Heterocyclic-Carbene Ligand: Chloride and Alkyl Functionalized Derivatives,” *J. Organomet. Chem.* **692**, 234–242 (2007).

M. KONDO, Y. IRIE, M. MIYAZAWA, H. KAWAGUCHI, S. YASUE, K. MAEDA and F. UCHIDA, “4,4’-Oxybis(benzoate) Building Ligands: Construction of Coordination Polymers with Heteroorganic Bridges,” *J. Organomet. Chem.* **692**, 136–141 (2007)

T. KOMURO, H. KAWAGUCHI, J. LANG, T. NAGASAWA and K. TATSUMI, “[MoFe₃S₄]³⁺ and [MoFe₃S₄]²⁺ Cubane Clusters Containing a Pentamethylcyclopentadienyl Molybdenum Moiety,” *J. Organomet. Chem.* **692**, 1–9 (2007).

G. WU, Y. WANG, X. -F. WANG, H. KAWAGUCHI and W. -Y. SUN, “Synthesis and Crystal Structure of Mn(II) and Zn(II) Complexes with 1,3,5-Tris(carboxymethoxyl)benzene Ligand,” *J. Chem. Crystallogr.* **37**, 199–205 (2007).

L. -Y. KONG, X. -H. LU, Y. -Q. HUANG, H. KAWAGUCHI, Q. CHU, H. -F. ZHU and W. -Y. SUN, “Unusual One-Dimensional Branched-Chain Structures Assembled by a Novel Imidazole-Containing Tripodal Ligand with Cadmium(II) Salts and Their Fluorescent Property,” *J. Solid State Chem.* **180**, 331–338 (2007).

Y. SHICHIBU, Y. NEGISHI, T. WATANABE, N. K. CHAKI, H. KAWAGUCHI and T. TSUKUDA, “Biicosahedral Gold Clusters [Au₂₅(PPh₃)₁₀(SC_nH_{2n+1})₅Cl₂]²⁺ (*n* = 2–18): A Stepping Stone to Cluster-Assembled Materials,” *J. Phys. Chem. C* **111**, 7845–7847 (2007).

T. MATSUO and H. KAWAGUCHI, “Anisole–Diphenoxide Ligands and Their Zirconium Dichloride and Dialkyl Complexes,” *Inorg. Chem.* **46**, 8426–8434 (2007).

F. AKAGI, T. MATSUO and H. KAWAGUCHI, "Dinitrogen Cleavage by a Diniobium Tetrahydride Complex: Formation of a Nitride and Its Conversion to Imide Species," *Angew. Chem., Int. Ed.* **46**, 8778–8781 (2007).

B-6) 受賞、表彰

川口博之, 錯体化学研究会研究奨励賞 (1996).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

錯体化学会理事 (2006–2007).

学会の組織委員

第一回アジア錯体化学会議事務局 (2007).

学会誌編集委員

錯体化学会誌 (2007).

B-10) 外部獲得資金

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

金属錯体を反応場とした窒素分子, 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これまでに見いだしてきた。本年度は, これらの反応に於ける中間体の単離を目指し研究を進めてきたが, 達成できずにいる。配位子の設計等を検討し, 反応活性種の単離, 同定を通して, 小分子活性化の機構を明らかにしたい。

7．点検評価と課題

平成 19 年度には分子研全分野に亘る外部評価を実施した。各研究領域に対する評価の公開部分が以下の節（7-1 - 7-4）に掲載されている。多大なご尽力を頂いた外部の先生方にここで改めてお礼を申し上げる。多くのお褒めの言葉と共に厳しいご意見も頂いており、所員一同改めて気を引き締めて一層の努力をする必要がある。主要なポイントは以下のものである（7-5 も参照）。

内部昇格禁止を緩和したらどうか：色々な議論のあるところであるが、所内で議論した結果、やはり維持することとした。

新分野創出と分野をリードする努力をすること：教授、准教授は改めてこの認識を深め、独自性と気概を持って精進することが必要であろう。

設備インフラの充実を図ること：UVSOR、大型計算機、NMR の世界的レベルの維持・発展を図ると同時にその他設備の充実についても、国の財政逼迫の中で極めて厳しいが、国への要求の努力を続ける必要がある。また、「研究設備有効活用ネットワーク」の拡充も極めて大事である。

研究グループサイズが小さい：厳しい採用人事を行い現在の研究グループ制を維持することはやはり重要であると考え。一方、一部教授に二人目の助教を配分しているが、研究所からの支援は限られるので、科研費を核とする外部資金獲得の努力を一層進めるべきである。また、優れた大学院生の獲得も大きな課題である。奨学金制度の拡充が望まれるが、RA 制度の充実と宣伝の努力も必要であろう。また、所内の研究グループ間の協力研究及び客員教授・准教授との協力研究をもっと推進すべきである。

IMS フェローのあり方についての議論も進んでいる。待遇改善とより柔軟性のある制度の模索を行う必要がある。

以上に加えて、大学共同利用機関としての分子研のあり方についての検討を行い、運営会議等においても議論をして頂いた。7-5 にその内容がまとめられている。

（中村宏樹）

7-1 理論・計算分子科学研究領域

国内評価委員会開催日：平成 19 年 8 月 11 日

委員 榊 茂好（京都大学，教授）
樋渡保秋（金沢大学，名誉教授）
前川禎通（東北大学，教授）
北原和夫（国際基督教大学，教授）

国外評価委員面接日：平成 20 年 3 月 17 日～21 日

委員 William H. Miller（Professor, University of California, Berkeley）

7-1-1 点検評価国内委員の報告

(1) 当該研究領域の研究分野での分子研の役割，寄与と位置づけ

理論・計算分子科学研究領域は全部で 9 グループ（理論 6，計算 3）を擁し，わが国の大学における化学系学科では最大の陣容を誇り，国際的に第一線の研究成果を数多く発信しているだけでなく，共同利用機関として計算科学研究センターの管理・運営に責任をもち，全国，600 件／年にも及ぶ計算分子科学研究の「中核拠点」としての役割を果たしている。また，これらの活動を通して，数多くの研究者を育て，各レベルの人材（助教，准教授，教授）を全国大学等に輩出している。

(2) 当該研究領域の研究内容と各研究グループに対する個別評価

当該研究領域の研究は分子およびその集合体の構造・物性・ダイナミクスおよび機能を分子科学基礎理論（量子化学，統計力学）および分子シミュレーションに基づき解明することを目的とするものであり，その対象とする物質も電子系から生体分子まで多岐にわたっている。また，対象とする物質の相も気相，液相，固相と全範囲に及んでいる。以下に，過去 3 年間ににおける当該研究領域の活動と各研究グループの特筆すべき研究成果およびその評価について述べる。

当該研究領域の活動

理論・計算分子科学研究領域は領域全体の取り組みとして下記の 3 事業を遂行している。

計算科学研究センターの共同利用事業

NAREGI プロジェクトにおける「ナノサイエンス実証研究」拠点および「次世代スパコン」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」拠点としての事業

自然科学研究機構の「中核拠点形成」事業

計算科学研究センターはいわば分子科学研究所における共同利用事業における中核的研究施設のひとつであり，全国の分子科学分野の計算科学者に計算資源を提供するだけでなく，その共同研究を促進し，理論・計算科学分野の発展に貢献している。施設のユーザー数はワークステーションやパソコンクラスターなどの普及とともに漸減傾向にあるが，今なお，60 グループ，約 600 人の大学研究者がこの施設を利用し，100 パーセントに近い稼働率を維持していることは他に類を見ない特長であり高く評価できる。

一方，その利用形態を見てみると注目すべき特徴がある。それは利用者が理論・計算分子科学分野のプロパーの研

究者と有機化学者などを含む実験研究者に大きく分かれていることである。そして、実験研究者の多くはセンターにインストールされている Gaussian (量子化学) や AMBER (分子シミュレーション) などのプログラムを使用できることにメリットを求めている。これは分子科学分野における理論と実験との実質的な共同であり、分子科学分野の成熟度のひとつの指標でもある。今後、計算科学研究センターが分子科学分野の基盤的研究施設としての位置づけをより一層高めるためには、このような共同研究を促進することが肝要であり、これまで理論・計算分子科学分野で開発してきたプログラムのライブラリ化などを通じて、分子科学分野の研究者に供することが求められる。

理論・計算分子科学研究領域は文部科学省からの委託事業である「NAREGI ナノサイエンス実証研究」を 2003 年度から実施している。この事業は文科省の「超高速コンピュータ網形成」プロジェクトの一貫として、情報科学研究所を拠点としたチームによって作られた「グリッドミドルウェア」の実証計算を行うことを第一のミッションとしている。このプロジェクトチームは分子科学研究所、東大物性研、東北大金研、京大化研、産総研など全国 6 研究機関および 12 大学の研究者から構成され、分子科学研究所はそのプロジェクト拠点としての役割を果たしている。本プロジェクトにおいて達成された学術的成果は 2005 年度に実施された文科省での中間評価の段階ですでに「RISM-FMO」を含む各種連成計算、1000 万原子系の巨大分子動力学計算の実現など多岐にわたっており、高い評価を得ている。また、本プロジェクトでは「グリッドナノシミュレータ」と呼ばれる計算支援ソフトウェアを作成している。このソフトウェアは全く独立に作成された個々のプログラムをシームレスに連成することを可能にすることから、グリッド上での連成計算はいうまでもなく、現在、構築中の「次世代スパコン」においても威力を発揮すると思われる。本年度はプロジェクトの最終年度に当たり、グリッドミドルウェアの最終的な「実証研究」に取組んでおり、その成果が大いに期待される。

一方、「ナノ統合シミュレーションソフトウェアの開発」プログラムは 2006 年度に開始された文科省プロジェクト「最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用」の一貫として、次世代スパコンを有効に活用するソフトウェアの開発を目的としている。この目的のため、1. 次世代情報機能材料、2. 次世代ナノ生体物質、3. 次世代エネルギー、という 3 つの「グランドチャレンジ課題」を設定し、それらの研究課題に沿って研究チームを編成している。これらの課題を達成する上で必要な理論および方法論を構築すると同時に、それらに対応する計算プログラムを作成し、次世代スパコンでの実証計算を行うことを目指している。現時点ではプロジェクトが開始されて未だ 1 年半程しか経っていない現状にあり、何らかの結論的な評価を下す段階にはない。しかしながら、これまでの活動でも、理研で開発を進めているスパコンハードウェアのアーキテクチャ選定における「ターゲットアプリケーション」として、上記のグランドチャレンジ課題に対応する 6 本 (うち 3 本は分子研から提案) のプログラムをベンチマークに供したことは高く評価できる。

理論・計算分子科学領域は自然科学研究機構プロジェクト「分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成」における「巨大計算新手法の開発と分子・物質シミュレーション中核拠点の形成」プログラムの拠点として活動をしている。このプログラムは機構内におけるシミュレーション分野の連携を促進し、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。2005 年度に開始された本プログラムにおいて、すでに、24 回におよぶセミナー、3 回の機構内連携研究会、2 回の国際シンポジウムを開催するなど活発な連携活動を行っており、その活動は高く評価できる。

(3) この分野の国内、国外での研究分野としての重要性

本研究分野は量子力学、統計力学、分子シミュレーションを中心とした分子科学分野の理論・方法論を基礎として、分子およびその集合体の構造、物性、化学反応、相転移、ダイナミクスなど物質が示す様々な現象を電子・原子レベルから理論的に考究する学術分野であり、計算機科学の発展とも相俟って、現在、急速にその重要性に対する認識が高まりつつある。とりわけ、現在、急速にその研究が進みつつある「ナノ科学」および「生命科学」においては、分解能や感度などの限界から、実験では到底解明することのできない様々な現象にぶつかっており、理論的な解析なくしては学術分野そのものの発展が停滞してしまう状況にある。一方、これらの分野の諸現象は、例えば、水溶液中の酵素反応に典型的に見られるように、電子から無限の広がりをもつ溶媒まで、広いスケールと複数の物理・化学現象が絡みあった複雑な対象であり、従来の分子科学理論の枠を超えた新しい理論・方法論の発展が期待されている。

理論・計算分子科学の重要性は単に基礎学術研究からのそれだけに止まらない。上に述べた「ナノ科学」や「生命科学」は将来の生産技術や医療技術の科学的基礎としても重要な位置づけを担っており、この分野におけるブレークスルーがそのまま生産や医療におけるブレークスルーに直結する可能性が高い。例えば、分子レベルでの電子デバイスや新しい機能をもつ人工酵素の設計などがそれである。

(4) この分野の発展はあるか、どのような方向か

上に述べたように、この分野の発展は従来の「要素還元型」の研究からより現実的な系（分子およびその集合体）の構造、物性、ダイナミクス、機能を分子レベルから解明していく、いわば、「総合型」研究のフェーズに突入しつつある。その意味において、現代の科学研究において計算機が占める位置を再認識する必要がある。これまでは、現象の背後にある因果関係をモデルによって説明する際に、解析を容易にするために本質的な部分を抽出したモデルを考えることが多かった。しかしながら、現代では、計算機の発達によって、複雑な要因を取り入れたモデルをそのまま数値的に解析することが可能となり、複雑な要因からなる現実的なモデルの有効性を検定しさらにそこでのパラメータを変えることによって新たな現象を予測することも可能となる。このような時代において、理論やモデル構築を行う研究者と、数値解析の高速化のアルゴリズムなどを研究する計算機科学分野の研究者とが出会って協同する可能性を拓く教育の在り方を考えるべきである。また、アルゴリズム研究の成果は広く使えるような仕組みも必要である。以上のことから、我が国の理論・計算分子科学振興のために、以下の施策を提言する。

現在、非常に限られた化学系学科にしか置かれていない理論分子科学（理論化学）部門を全国の高等教育機関に増設し、学部時代から計算機を用いた理論分子科学に親しめる環境を作る。

大型計算機センターをもつ高等教育機関においては、センターを単なる計算機利用施設に留まらず、理学（理論化学、理論物理）と計算機科学あるいは計算機工学の共同研究の実践する教育研究施設とする。

物性研と分子研には、計算ソフトのライブラリーとしての機能を持たせ、基礎研究のための情報発信機能をもたせる。

(5) 分子研の当該研究領域は今後どのように進むべきか

理論・計算分子科学研究領域は当該分野の全国の研究者の共同研究を促進する上で本質的役割を果たしており、その活動は高く評価できる。今後とも、この方向で努力を継続すべきである。同時に、わが国における理論・計算分子科学分野のさらなる発展という視点からは、いくつかの克服すべき課題も指摘される。

これまで理論・計算分子科学研究領域の共同利用に関する活動は計算科学研究センターの運営と管理に責任をもち、主として、計算機資源を分子科学分野のユーザーに提供することを中心に行われてきた。これまでも量子化学計算ソ

フトとして GAUSSIAN や分子動力学計算ソフトとして AMBER などの市販ないしは公開ソフトをユーザーの利用に供してきたが、それはあくまでも付随的な活動に過ぎなかった。しかしながら、先にも述べたように、現在の分子科学分野における計算科学の研究対象はこれらの市販ないしは公開ソフトだけでは太刀打できないレベルに達しており、わが国の分子科学分野で開発した独自の理論や方法論および計算プログラムを共通の知的財産として共同利用に供すること、すなわち、「ハード」を中心にした共同利用から「ソフト（知識）」を中心にした共同利用へと大きく転回することが求められている。この意味で理論・計算分子科学研究領域は独自に開発した理論・方法論およびソフトウェアを計算科学研究センターのライブラリ化などを通じて積極的に公開してだけでなく、全国の理論・計算分子科学者が開発したすぐれたソフトウェアに関してもその開発者にライブラリとして公開していただくよう協力を求める必要がある。また、これらのライブラリを維持・管理し、発展させるためには現在の計算科学研究センターの人員および組織体制では不十分であるため新たな措置を講じる必要がある。

7-1-2 国外委員の評価

原文

To: Hiroki Nakamura, Director-General of IMS

From: William H. Miller, Kenneth S. Pitzer Distinguished Professor of Chemistry, University of California, Berkeley

Subject: Report of my visit to IMS, March 17–21, 2008

Though I have had the pleasure of visiting IMS a number of times, it is sobering to realize that it has been approximately 30 years since my first visit, not long after the Institute was founded. It is clear that this “experiment” in scientific organization in Japan has been a great success in many areas of molecular science, and quite specifically in theoretical/computational chemistry (= molecular science) that is the subject of my review. By almost any measure one can easily conclude that the group in theory and computation at IMS is one of the premier such groups in the world. In size alone—I will comment on its quality below—it ranks at the top. I heard presentations from 9 research groups, and though Professor Okamoto has left for Nagoya University, my understanding is that a recruitment is currently in progress for a new appointment. For comparison, my own institution—the College of Chemistry (the departments of Chemistry and Chemical Engineering) at UC Berkeley—has 6 theorists in Chemistry and 2 in Chemical Engineering, comprising the K. S. Pitzer Center for Theoretical Chemistry, and we are the largest collection of theoretical chemists in the US. To my knowledge, there is no institution in Europe with this number of independent theoretical research groups in chemistry or molecular science.

Before discussing the scientific programs, I would like to make some comments about issues that I think are relevant to theoretical/computational chemistry in general, and to IMS in particular:

1. There has been such great progress in theoretical methodology (electronic structure theory, molecular dynamics simulation methods, etc.) in the last 2 or 3 decades that it can now be fruitfully applied to almost the entire array of molecular phenomena. The work at IMS and elsewhere is testament to this. While we all applaud the energetic *application* of theoretical tools to problems in bio-molecular systems, nano-materials, novel electronic devices, etc., one cannot help but see a tendency to minimize the funding and support for more *fundamental methodological theory*. I am sensitive to this trend in my own country, where most young theorists think (rightly

or wrongly) that they must somehow work “nano” or “bio” into their research proposals in order for them to have any chance of being funded, and I have seen evidence for similar trends here in Japan. My general plea—and recommendation to Japanese funding sources, in particular—is not to minimize support for the creative *applications* of theory that are being pursued at IMS and elsewhere, but that creative research in *basic theoretical methodology* also be supported and encouraged. Not to do so is akin to “eating one’s seed corn” (I hope there is a Japanese version of this expression) and is a recipe for stagnation in the future.

2. I believe that a mandatory retirement age is a good thing. (I think it is a mistake that we abandoned such in the US.) Though the earlier age of 60 certainly seemed too young, something between 65 and 70 does seem about right; each society must of course decide what works best for them. Yes, some persons will still be doing excellent work at retirement age—and there should be provisions for emeritus faculty to maintain scientific viability if they still have a vigorous research program—but it is important that they relinquish their formal positions to make way for new appointments of young faculty.

3. The policy of not promoting Associate Professors at IMS is different from that in the US, where a “stay or go” decision is made at the end of a person’s assistant professorship (the tenure decision, about 5 or 6 years after the initial appointment). It is similar, however, to that of the German system, where a C3 professor (= associate professor) must move to another institution to move up to a C4 (= full professor) position. The only danger I see is that you will lose the best faculty, who will be attracted to senior positions at universities, say, and the ones who remain will thus not be the best. However I see no evidence for this at IMS, so the policy seems to be working well. It does have the positive effect of making positions available for recruiting new beginning faculty, and the importance of this cannot be over-stated. One of the best things about the large size (~50) of our faculty at Berkeley is that we are recruiting for one or two beginning assistant professors every year; it is quite exciting to always be looking for the “best and brightest” and seeing what research directions they are choosing.

4. I find the “privatization” of the national universities and research institutes to be potentially troublesome for theoretical/computational science. Yes, theory and computation are playing an increasingly important role in “practical” research that can attract money from private sources, but it usually in a supporting role to experimental programs and thus not so visible. I believe that a large part of the success of theory at IMS has been the stable support it has had from the national government over its lifetime. I am unsure how well it will fare if it is forced to sell itself on the open market. I could make these same comments about the US—all these trends seem to be global—where universities (mine included) are aggressively pursuing partnerships with industry to help fund their research programs. This is not necessarily bad, but it certainly could be if not carefully monitored. I fear that our governments are in favor of these directions primarily as a way to lessen the demands on their budgets.

5. I am glad to see that IMS can now offer a doctorate degree to graduate students, for this certainly helps in attracting talented young co-workers. Institutions like IMS, the Max Planck Institutes in Germany, and the National Laboratories in the US, always have difficulties in attracting students since they have no undergraduate teaching role. IMS seems to be doing reasonably well in this regard, though I did see comments in an earlier review that the small size of experimental groups was somewhat of a problem. Fortunately for theoretical research, a large group is usually not necessary—or even desirable—in order to carry out a very successful program.

I was immensely impressed by the quality and variety of the research programs I heard described over an intense two-day period at IMS. Most all of the groups have interesting and novel approaches for new theoretical methodology and as well as creative applications to a wide variety of very timely molecular problems. For purposes of discussion, I comment first on the four research groups dealing primarily with *electronic structure and dynamics*. *Professor Nagase* described some very novel applications of DFT (density functional theory) to show the important role played by bulky substituent groups on the formation of multiple bonds between heavier group 14 elements, and also to the structure and functionalization of endohedral metallofullerenes. He also described the development of very efficient new algorithms for generating energy gradients at the MP2 level of electronic structure theory, the crucial tool for determining reactions paths of chemical reactions, and he also discussed the beginnings of a very novel Monte Carlo approach in electron configuration space (as opposed to the physical coordinate space of the electrons) for highly accurate electronic structure calculations. *Professor Yanai* described two very novel approaches for attacking the fundamental problem of electron correlation: a canonical transformation (CT) approach (similar in spirit, but not the same, as coupled-cluster theory) for treating the short-range dynamic correlation, and a density matrix renormalization group (DMRG) method for greatly enhancing the efficiency of CASSCF methods that treat the valence-mixing, or non-dynamical correlation. The combination of these two allow him to achieve highly accurate results much more efficiently than previous approaches. *Professor Nobusada* described his use of DFT to study gold-methane-thiolate clusters, and of TDDFT (time-dependent DFT) to show how circularly polarized light induces ring current in ring-shaped molecules. He also described an open-boundary cluster model (OCM) he developed to treat adsorbates on finite clusters. The open-boundary (outgoing wave boundary conditions) removes artifacts due to the finiteness of the cluster. *Professor Yonemitsu*, a condensed matter theorist, described projects dealing with electron dynamics strongly coupled to phase transitions in various materials, in particular the effect of photo-excitation of electron-hole pairs on conductivity, permittivity, and magnetic susceptibility. Some of the phenomena he has studied are photo-induced neutral-ionic/paraelectric-ferroelectric phase transitions in charge transfer complexes, charge transfer excitations in 1D dimerized Mott insulators, and effects of electronic correlation and lattice distortion on charge order in 2D organic salts.

The other five groups deal with a variety of complex molecular systems, making extensive use of *molecular dynamics (MD) simulation methods* (including extensions of this methodology), coupled with electronic structure calculations as necessary in some cases. *Professor Hirata* is of course very well known for his extensive work in extending the basic RISM idea far beyond the realm for which it was initially designed. He described applications to site-selective binding of ions to proteins, and in particular how this varies when mutations are introduced into the protein. Another application was to show how water is forced into a protein under high pressure, and how this leads to denaturation of the protein. *Professor Saito's* work deals with dynamics in the condensed phase, primarily aqueous solution. He described an impressive study of conformational changes associated with GTP hydrolysis in the RAS protein, using MD simulations to investigate the fluctuations and conformational changes; structures were characterized by QM/MM energy calculations. He also described MD simulations of the higher order time correlation functions that are necessary to calculate 2D infrared spectra, in particular those related to intermolecular dynamics in water. *Professor Morita* described his very extensive development of MD simulation methodology focused on calculation of sum frequency generation (SFG) spectra, a property most sensitive to interfacial regions of molecular ensembles. He emphasized that such careful theoretical simulations of the spectra are essential for extracting useful information from such experiments. He also described a very careful development of flexible and polarizable potentials that are necessary to make the MD simulations feasible.

Professor Okazaki described state-of-the-art MD simulations of extremely large molecular systems, micelles in water, lipid bilayers, and cholesterol molecules in membranes. He also described an MD simulation for the vibrational relaxation of CN^- ions in water; this was done by using a harmonic influence functional to represent the solvent, the harmonic model coming from the instantaneous normal mode (INM) model of the solvent. In so doing he was able to show that only water molecules in the first solvation shell contribute to the relaxation, and that the vibrational energy from the CN^- is deposited primarily in bending and rotational/librational modes of the water molecules. *Professor Okamoto's* research is also focused on classical MD simulations, primarily on improving the Monte Carlo (MC) and MD sampling methodology that is so important when treating truly complex processes, such as protein folding. Straight-forward approaches tend to get “trapped” in local minima and not sample the entire ensemble correctly. He has been instrumental in developing algorithms such as multi-canonical MC sampling, replica-exchange, parallel tempering, and multi-overlap MD methods. He described the application of some of these approaches to amyloid formation, a critical aspect of Alzheimer's disease.

So as stated in the prolog, the variety of problems being tackled by the IMS theoretical groups is quite astounding. The fact that the quality of the work is so high make this even more impressive. My overall finding is that the theoretical/computational group is in excellent shape. My only recommendation is that in future appointments you continue to focus on the intellectual quality and perceived creativity of the candidates and not too much on the particular topical area of the research (within reason, of course). I have found that departments and committees do a very poor job of trying to predict the most fruitful directions for research; rather, my experience is that the best directions are the ones that the best young people choose.

訳文

To: 中村宏樹 分子科学研究所所長

From: ウィリアム H. ミラー カリフォルニア大学バークレー校ケネス S. ピツァー抜群教授 (化学)

Subject: 2008 年 3 月 17 - 21 日 分子研訪問の報告

これまで何度も楽しく分子研を訪問しましたが、研究所が創立してまもなくだった最初の訪問から約 30 年たったことに気づいてハッとしています。日本でこのような科学の組織をつくるという“実験”が、分子科学の多くの分野で偉大な成功を収めてきたことは明らかだと思います。私のレビュー対象の理論化学/計算化学 (= 分子科学) においては特に。ほとんどどの評価基準でみても、分子研の理論・計算分子科学研究領域は世界で一位のグループのひとつであることが容易に結論付けられます。以下では質についてコメントしますが、サイズだけでもトップに位置づけられます。9 つの研究グループの発表を聴きました。岡本祐幸教授が名古屋大学に異動しましたが、新たな任命に向けて採用が現在進められていると理解しています。比較のため、私の施設 (カリフォルニア大学バークレー校の化学科と化学工学科からなる化学カレッジ) は化学科に 6 名、化学工学科に 2 名の理論家があり、K. S. ピツァー理論化学センターを含んでいて、米国では理論化学者の最大の集団です。私の知る範囲では、ヨーロッパにおいても化学または分子科学においてこれだけの数の独立した理論研究グループがある施設はありません。

科学プログラムを議論する前に、一般に理論化学/計算化学にそして特に分子研に関連すると思う課題にコメントしたいと思います。

1. この20～30年間に理論的方法論（電子構造論，分子動力学シミュレーション法など）は非常に大きく進展し，今では分子の関わる現象のほとんどすべての領域に応用され実りを挙げています。分子研等の業績はその証拠になっています。我々全員が理論的手段を生体分子系，ナノ材料，新規電子デバイスなどの問題に精力的に応用することを称賛していますが，より基本的／原理的な方法論への財政的支援や支持を軽視する傾向を見ざるを得ません。私は自国でこの傾向に敏感になっていて，そこではほとんどの若手理論家が財政的支援を得るため研究計画書に“ナノ”か“バイオ”という言葉何とかして織り込まなければならないと（正しいか間違っているかはさておき）考えていますが，ここ日本においても同様な傾向があるという証拠を見ました。日本の，とりわけ資金源に対して一般に懇願あるいは勧告することは，分子研等で追及されている理論の創造的な応用を過小評価してはならないということです。基礎的な理論的方法論における創造的な研究も支援し奨励するべきです。してはならないのは，“種トウモロコシを食べる”（この表現の日本語版があると思います）ことであり，そうすれば将来低迷して不振に陥ることになります。

2. 私は強制的な定年制はよいことだと信じます。（米国でこれを放棄したことは間違いだと思います。）以前の60歳という年齢は確かに若すぎるように思えますが，65歳から70歳までの年齢なら適当に思えます。個々の社会がもちろん自分たちに最良のものを決めなければなりません。確かに，定年の年齢においても卓越した仕事をまだ行っている人がいます。名誉教授がもし積極的な研究プログラムを持っているなら，科学においての実行可能性を維持できる設備等条件を用意するべきです。若手教員を新規採用する道を譲るために，彼らが正式な地位を放棄することが重要ですが。

3. 分子研では准教授を昇進させないという方針があり，“留まるか出て行くか”の判断が助教の任期終了後（テニュアーの決定，最初の任命の約5～6年後）に行われる米国での方針とは異なります。しかし，C3プロフェッサー（准教授）がC4プロフェッサー（教授）に着くためには他の施設に移らなければならないドイツの制度と似ています。私が感じる唯一の危険は，大学の高い地位に引き付けられるような最良の教員を失い，残る教員が最良でなくなることです。しかし分子研ではこのような兆候が見当たりませんし，この方針がよく機能しているように見えます。新しく始める教員を採用する地位をあけておくという建設的な効果が確かにあり，この重要性はどんなに言っても誇張にはなりません。我々のパークレーでの教員の規模が大きいこと（50名ほど）で最良なことのひとつは，毎年1～2名新たに助教になる人を採用していることです。最も優秀で聡明な人を常に探し，どの研究方向を彼らが選んでいるかを見ることは非常に胸を躍らせることです。

4. 国立大学と研究所の法人化が理論科学／計算化学に困難を与えるかもしれないことが見受けられます。確かに，理論と計算は民間の財源から資金を引き出せる“実用的な”研究でますます重要になる役割を果たしています。しかし通常は実験プログラムを支援する役割においてであって，目立つものではありません。分子研の理論の成功の大部分は日本政府から永年にわたって安定した支援を受けたことによると信じます。もしこれが自由市場に売ることを強制されたら，ことがどれだけうまく運ぶか確かではありません。全く同じこれらのコメントを米国にもできます——これらの傾向はグローバルに見えます——（私の所属しているのを含め）大学は研究プログラムに資金を出すのを助ける産業界との提携を強引に追及しています。これは必ずしも悪いことではないかもしれませんが，注意深く監視しない限り悪いことになりえます。日米の政府が予算要求を軽減するためにこれらの方向を主に支持することを恐れます。

5. 分子研がいまや大学院生に博士号を与えられることを知って嬉しいです。これで確かに，能力のある若い共同研究者を引き付ける助けになるでしょう。分子研，ドイツにおけるマックス・プランク研究所，米国における国立研究所のような施設は，学部生を教える役割がないために，常に学生を引き付けるのが難しい状況にあります。分子研はこの点，以前のレビューでは実験グループのサイズが小さいことが問題になっているとのコメントを見たものの，適

度によくやっているように見えます。理論研究では幸いにも、大きなグループは、とても成功したプログラムを遂行するためには、通常は必要ないか、または望ましくありません。

分子研での情熱的な2日間にわたって説明されたことを聴いて、それらの研究プログラムの質と多様性に、私は非常に感銘を受けました。ほとんどすべてのグループが興味深く新規なアプローチで新しい理論的方法論に取り組んでおり、広く多様性を持つとても時宜になかった分子科学の問題に創造的な応用をしています。議論をするために、まず電子構造とダイナミクスを主に扱う4つの研究グループをコメントします。永瀬教授はいくつかとても新しい密度汎関数理論(DFT)の応用を説明して、より重い14属元素の間の多重結合の形成にバルキーな置換基が果たす重要な役割と金属内包フラーレンの構造と機能化を示しました。また化学反応の反応経路を決定する重要な手段である、電子構造理論のMP2レベルでのエネルギー勾配生成のとても効率的な新しいアルゴリズムの発展を説明しました。また高精度の電子構造計算のための(電子の物理的な座標空間ではなく)電子配置空間におけるとても新しいモンテカルロ計算によるアプローチの始まりを議論しました。柳井准教授は電子相関の基本的な問題に取り組むための2つのとても新しいアプローチを説明しました。ひとつは短距離動的相関を扱うための(精神としては結合クラスター理論と似ているが、同じではない)正準変換(CT)アプローチで、もうひとつは価数混成または非動的相関を扱うCASSCF法の効率を大いに高める密度行列繰り込み群(DMRG)法です。これら2つの方法の組み合わせで、以前のアプローチよりもずっと効率的に高精度の結果を得ることができます。信定准教授はDFTを使っている金-メタン-チオラートクラスターの研究と、時間依存DFT(TDDFT)を使っていかに円偏光の光が輪状分子上を周る電流を誘導するかを説明しました。また、有限クラスター上の吸着質を扱うために彼の発展させた開いた境界クラスター模型(OCM)を説明しました。開いた境界(外向き波の境界条件)はクラスターの有限性による人為的影響を取り除きます。物性理論研究者の米満准教授はさまざまな物質の相転移に強く結合した電子ダイナミクスを扱う研究課題、具体的に言うと伝導性、誘電性、磁気的感受率に対する電子正孔の光励起効果を説明しました。彼の研究してきた現象は、電荷移動錯体における光誘起中性-イオン性/常誘電-強誘電相転移、1次元二量化モット絶縁体における電荷移動励起、2次元有機塩の電荷秩序に対する電子相関と格子ひずみの効果などです。

他の5つのグループは、分子動力学(MD)シミュレーション法(この方法論の拡張を含む)を大規模に使う場合によって必要に応じて電子構造計算と結合させて、さまざまな複雑分子系を扱っています。平田教授は基本的なRISM理論の考えを最初に考案された領域よりもはるかに拡張するという広範囲に及ぶ業績でももちろんとても有名です。蛋白質へのイオンのサイト選択的な結合、特に蛋白質に突然変異を導入したときこれがいかに変わるか、に対する応用を説明しました。ほかの応用は、高圧下の蛋白質に水が押し込められるか、これがいかに蛋白質の変性にいたるかを示すことでした。斉藤教授の仕事は凝縮相におけるダイナミクス、主に水溶液に関わることです。揺らぎと構造変化を調べるためにMDシミュレーションを使って、RAS蛋白質のGTP加水分解に関連する構造変化に対する印象深い研究を説明しました。構造はQM/MMエネルギー計算で特徴付けられました。また2次元赤外分光の計算に必要な高次の時間相関関数、特に水の分子間ダイナミクスに関する相関関数に対するMDシミュレーションを説明しました。森田教授は分子アンサンブルの境界領域に最も敏感な性質である和周波発生(SFG)スペクトルの計算に焦点をあてたMDシミュレーション計算法のとても大規模な発展を説明しました。このような実験から有益な情報を引き出すにはこのように注意深いスペクトルの理論シミュレーションが本質的なことを強調しました。またMDシ

ミュレーションを実行可能にするのに必要な柔軟性と分極性をもったポテンシャルのとても注意深い発展を説明しました。

岡崎教授は水中のミセル、脂質二重層、膜中コレステロール分子など巨大な分子に対する最先端の MD シミュレーションを説明しました。また水中の CN イオンの振動緩和に対する MD シミュレーションを説明しました。これは溶媒を表す調和的な影響関数を使ってなされたもので、調和模型は溶媒の瞬間的なノーマルモード (INM) 模型から来ています。これを行うことで、第一溶媒和殻の水分子だけが緩和に寄与すること、そして CN イオンからの振動エネルギーが主に水分子の曲げモードと回転 / 秤動モードに蓄積することを示すことができました。岡本教授の研究も古典 MD シミュレーションに焦点をあてており、蛋白質折り畳みなど真に複雑な過程を扱うときに重要なモンテカルロ (MC) 法と MD サンプリング法の改良を主に行っています。直接的なアプローチでは極小点に “ 捉われる ” 傾向があり、アンサンプル全体を正確にサンプルすることができません。マルチカノニカル MC サンプリング、レプリカ交換、並列焼き戻し、マルチオーバーラップ MD 法などのアルゴリズムを発展することで役立ちました。アルツハイマー病の重大な側面であるアミロイド形成へのこれらのアプローチの応用を説明しました。

序文でも述べたように、分子研の理論グループにより取り組まれている問題の多様性はとても驚異的です。業績の質がとても高い事実がこれをさらに目覚ましいものにしています。私の総合的な発見は理論 / 計算グループが絶好調であるということです。唯一提言することは、将来の教員選定に際し、候補者の聡明な質と認識される創造性に焦点を当て続け、特定の話題性のある研究領域に（もちろん、理にかなった範囲で）焦点をあてすぎないことです。私は学科や委員の類が研究の最も実り多い方向を予言しようとするのがとても下手なことを見てきました。むしろ、私の経験では最良の方向は最良の若手研究者が選ぶ方向です。

7-2 光分子科学研究領域

国内評価委員会開催日：平成 19 年 8 月 8 日（水）

委員 太田信廣（北海道大学電子科学研究所 教授）
春日俊夫（高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 教授）
高橋 隆（東北大学大学院理学研究科 教授）
大島康裕（分子科学研究所 教授）
大森賢治（分子科学研究所 教授）
岡本裕巳（分子科学研究所 教授）
加藤政博（分子科学研究所 教授）
小杉信博（分子科学研究所 教授）

国外評価委員面接日：平成 19 年 10 月 15 日～17 日

委員 Alfred Laubereau（Professor, Technische Universität München）

7-2-1 点検評価国内委員会の報告

国内委員による評価は、面接により、以下の研究グループの研究活動に関して行なった。

光分子科学第一研究部門 岡本グループ、大島グループ
光分子科学第二研究部門 大森グループ
光分子科学第三研究部門 小杉グループ、見附グループ、菱川グループ
分子制御レーザー開発研究センター 平等グループ
極端紫外光研究施設 加藤グループ、木村グループ、繁政グループ

(1) 全体討論

所内委員 F H：（組織の再編と領域の新設について概要説明）

所内委員 F：このような組織再編に関して、所外の立場からのご意見やアドバイスがあれば伺いたい。

外部委員 B：UVSOR のメンバーが施設と領域の両方に入っているのはどのような趣旨か。

所内委員 F H：施設のメンバーは二重国籍のような形とし、施設外のメンバーも施設を自分の問題と考えることを目論んでいる。

外部委員 C：そのような形にしたことにより具体的に新たな協力体制はできたのか。

所内委員 H：具体的には今後の課題と考えている。レーザーセンター等で検討中である。自由電子レーザー等の将来構想もあり、UVSOR 教授がレーザーセンターを併任している。

外部委員 A：領域内の各グループの方向性のバランスが取れている感じがする。各種波長、時間領域の分光、空間分解分光、高強度光等。一方で、グループの独立性に固執せず、数グループで一つのことにとりかかるようなことを考えてもよいのではないか。

所内委員 E：エクストリームフォトンクス事業はそれに近い考え方で進めている。レーザーセンターでは共同利用の負担が減り、研究上 3 本の柱（光源開発、超高速・量子制御、空間分解観測）を進めるような方向で考えている。

外部委員 A：昨今では理論との共同研究も大切になっているが、これはどうなっているか。

所内委員 E：一部の研究グループでは理論のグループとの共同研究を開始している。

外部委員 A：大学等では、特任等の枠組みを利用して、グループ内に異なるバックグラウンドを持つメンバーを入れるようなことも行われつつある。いずれにしても、バランスはよく取れた構成だと思う。

外部委員 C：施設のメンバーが領域に入ったことで、施設の研究者が自分の研究を進めるにあたっての環境にも配慮されているか？

所内委員 H：UVSOR の研究者は、自分専用のビームラインを作る、施設のビームラインを用いて自分の課題を進める等のことを行っている。以前に比べてサービスの負担は減っている。

外部委員 C：サービス中心でなく、自らの研究でアクティビティを是非上げてほしい。

外部委員 B：分子研内では UVSOR は大きな組織だが、その中で大きな装置を維持するグループ、使うグループの切り分けをどの程度しているか。

所内委員 H：現在では全グループについて、自分のグループのアクティビティを上げることを優先している。人事を進めるときには研究面を重視して採用する。

外部委員 B：技術職員に維持管理を任せる等の方法で、各グループがより研究アクティビティを挙げる環境を作ることはいかないか。技術職員への高給与が前提となるかもしれないが。

所内委員 H：通常のビームラインではそれに近くなっている。研究者は維持と老朽化対策よりも、将来を見据えた開発を優先して行い、維持については技術職員にかなり任されている面が大きい。それが結果的に UVSOR の性能を時代に合わせて維持することになる。

外部委員 A：大学では技術職員が大幅に削減されているが、分子研ではその点はどうか。

所内委員 H：研究技官が減っている。施設は現在までのところ、減らさずに来ている。

所内委員 F：施設の技術職員が大きく削減になれば、分子研の存在意義の根幹にも関わってくる。

外部委員 A：施設の技術職員の確保は守ってほしい。退職後の再雇用、技術継承等はどうなっているか。

所内委員 H：技術課長になってからの退職の場合は、既に現場を離れており、再雇用は困難になる。今後、必ずしも技術課長からの退職のケースだけではなくるので、再雇用を考える必要はあるだろう。

外部委員 A：研究グループの人数が 5 名前後で、大学と比べて人数が少ないが。

(所内委員)：本当は是非とも増やしたい。

外部委員 C：総研大の学生数はどの程度か。

所内委員 F：定員としては 1 学年 12 名程度。

所内委員 H：平均でその程度だが、実際に分子研 2 専攻への志望については合成系が多く、光分子科学領域への志望学生は比較的少ない。受託学生等が増えればよいのだが。

外部委員 A：公費を人件費に使える自由度が必要では。研究者の質と数は重要なので、予算に関する自由裁量があるのであれば、必要に応じて増やせるようにするのがよい。

所内委員 F：現在大学附置研に関して見直しの圧力があり、その先には分子研を含む共同利用機関にもその圧力がかかる可能性が十分ある。そのときに、共同利用機関としての機能をうまく果たしているかどうか重要になるが、その側面に関する分子研の評価をお尋ねしたい。

外部委員 A：例えば今年度開始した化学系ネットワークを考えると、大型装置の共同利用等は、大学の教員（特に准教授や助教）が独立性を保っていくには必須である。小さいグループになると、大きな装置をグループ単位で持ったり維持することは困難になる。今後グループの細分化が加速することは十分ありうる。分子研はその役割においても重要である。

所内委員 F：聞くところでは、現状では化学系ネットワークの大学間の利用が少ない点が問題で、改善の必要があるとのこと。現場でのこの事業に対する必要度はどうか。

外部委員 A：現場で、まだ「あそこに行けばあの装置が使える」という意識がまだ十分にない。周知が進んで一般的になれば、相互利用も頻繁になるのではないか。アイデアのある研究者は積極的に利用するはず。

所内委員 H：大学の一部の研究者は大きな予算を持っていて、そのような事業を必要としなくなっているが、一方で予算削減が厳しく、このような事業に対する要求が高まっているようにも感じる。

外部委員 C：自分も分子研の共同利用の枠組みは利用させてもらっている。共同利用は重要な側面として機能していると思う。しかし分子研のレベルを保つためには、それだけでよいではなく、しっかりした研究者をおいておかないと、大学との競争にも勝てなくなってくる。共同利用と独自研究の両方が必要である。

外部委員 A：その意味では、学生が少ないというのは困難な状況。

所内委員 F：大学と連携大学院を組むという動きが分子研内でも一部で検討されている。

外部委員 C：最近の学生は研究設備等の面を結構よく見ており、それで志望先を考えている。分子研では設備が充実しているが、学生の志望の状況はどうか？

所内委員 F：学生の志望は多くなく、集めるのが大変である。博士後期への入学金等も問題である。

外部委員 B：入学金は、何とかして免除すべきである。

外部委員 A：大学では COE 等の予算があり、学生に対するケアが手厚くなってきている。そのような手段を使って、学生の引止めにも必死である。大学の中でさえ大変な状況である。

(2) 国内委員の意見書

委員 A

I. 研究領域の評価

光分子科学研究領域に所属する岡本、大森、大島、菱川、平等、松本氏らの各グループは、何れもレーザーが関与した研究を進めているが、そのレベルは総じて極めて高いと評価できる。

(1) 分子研の役割、寄与と位置付け

分子科学研究所の役割は、分子科学の研究分野において世界をリードし、世界にその成果を発信し、社会への学術的および文化的貢献を果たすことにあると思われる。分子科学の大きな柱として、電子構造や分子構造に関する研究、種々の反応ダイナミクスとその機構解明に関する研究、分子集合体により形成される機能物性研究が考えられており、さらに最近では生命現象の分子論的解明も対象となっている。これらは勿論、お互いに強い相関をもっている。今回の評価対象グループは、分子科学の中でも光、特にレーザーが関与した研究を行っている。岡本氏らのレーザー光を用いた独自の二光子励起蛍光イメージング分光計測法の開発による金ナノロッドの研究はナノ粒子の電子構造に関する研究であり、大森、大島、菱川の各グループの研究は、生成する電子状態、振動状態の制御、さらには反応ダイナミクスの制御をレーザー光により行うものである。平等グループは光源としてセラミックを用いた固体レーザーの開発を進めている。松本グループは触媒反応等も密接に関係する表面吸着種の電子構造や反応ダイナミクスをレーザー

光を用いた分光法の開発により進めてきた。このように研究の方向性は、主にレーザー光を用いた構造と反応ダイナミクスの解明およびその制御を目指しており、いずれも世界をリードする成果につながっている。

(2) 各研究分野の研究内容と各研究グループに対する個別評価

岡本氏らは、近接場二光子励起分光・イメージング測定により金ナノロッドの励起状態の波動関数の形状を顕微分光学手法で初めて直接明瞭に可視化することに成功し、関係する一連の研究を精力的に行っている。金の二光子励起発光を用いた研究を最近よくみかけるが、その先鞭をきった研究といえる。また金属微粒子の集合体では、光照射により微粒子間の空隙に強い光電場が発生し、それが表面増強ラマン散乱の主な起源になると理論的に考えられていたが、二光子励起発光イメージング法を適用し、回折限界以下の空間分解能で光電場を可視化することに成功し、実験的にその妥当性を明らかにしている。これらの研究は非常に高く評価されるべきである。今後、これらの研究がどのように進展するのかに多いに注目したい。

大森氏らは、二つの分子波束の量子干渉をコントロールできることをお互いの位相がアト秒時間スケール以内でロックされている対のフェムト秒パルスを使って波束を発生させ、別のフェムト秒パルスにより時間発展を観測することにより明らかにしている。量子波束の衝突と干渉がリアルタイムで観測されたのは、非常に優れた業績である。量子干渉の時間発展がロックされたレーザーパルス間の相対位相の関数として変化することを示し、このことを利用して分子の波動関数に含まれる振幅と位相の両方の情報を読み出せることを示している。小さな気相分子を用いての研究は確実に進展しており、今後の固体試料への発展を多いに期待したい。

大島氏らは、振動や回転に関する量子波束や状態分布を操作する方法論を、高輝度かつコヒーレンスを有する光との相互作用を活用することに開発している。具体的には、光電場と分子との相互作用を利用することにより、回転状態分布を特定の準位に集中させ、その量子波束を特定できることを示した。またメチル基内部回転の量子波束運動の実時間観測にも成功するとともに、量子波束の緩和過程への振動・回転相互作用の効果を実験的に示している。高分解分光法による分子構造の精密決定に関するこれまでの深い知識を基にした、独自の方向性が感じられ、着実に進展していることが伺える。

菱川氏らは、極短パルス強レーザー照射時のクーロン爆発過程およびその他の分子ダイナミクスに関する研究を行っている。例えば、コインシデンス運動量イメージング法により、分子座標系の配向とフラグメントの運動量の相関をクーロン爆発事象毎に計測し、電子および核のダイナミクスがレーザーの偏光方向に応じて変化すること、すなわち電子をどの方向に揺さぶるかで分子構造を制御できることを示した。必要に応じてサブ10フェムト秒のパルスレーザーの作製等も兼ねながら進めているので、研究には時間がかかるが、その方向性および進展が確実に見てとれる。

平等氏らは先鞭をつけたマイクロチップレーザー、セラミックレーザーの開発を精力的に行っている。透明なポリクリスタル状のセラミックを用いることにより、単結晶を用いた固体レーザーに比して、多くの製作面での利点があり、最近ではフェムト秒の非常に高速のものや、非常に小型のマイクロチップを用いた高出力のCWレーザー等を開発することで産業界との連携も深めながらその研究を積極的に進めている。「マイクロ固体フォトンクス」を提唱し、レーザー光の高輝度化を実現すると共に、新たな波長変換素子の開発により紫外光から可視光、近赤外光、中赤外光から遠赤外光のテラヘルツ波領域までを手のひらサイズ光源でカバーすることにすでに成功しており、これら開発している光源は、今後幅広い応用が期待される。

松本氏らはキャラクタライズされた固体表面に原子や分子が吸着された系での超高束ダイナミクスを、フェムト秒パルスを照射することにより調べている。例えば、固体表面でのコヒーレントな核運動を時間分解SHGにより観測するとともに、振動コヒーレンスがコントロールできることを示している。固体表面での反応ダイナミクスへの研究

は非常にユニークであり、この研究分野をリードしている松本教授の転任は分子研にとっては大変残念ではあるが、今後いろんな面での共同研究を期待したい。

(3) この分野の国内、国外での研究分野としての重要度

光分子科学研究といった場合、これまでは光と物質（分子）の相互作用を摂動としてとらえ、種々の分光法を用いて物質の性質を調べる研究が主であった。かかる研究は現在も物質科学や生物科学研究において分析手段として常套的に用いられている。最近、回折限界を超えた分光手法の開発により、無侵襲かつ分子レベルで物を観るための研究が活発に行われている。この点で、岡本氏らの近接場二光子励起蛍光イメージング法による波動関数の可視化は重要な貢献と考えられる。さらに最近の技術革新により、数フェムト秒の時間幅で位相制御された光や非常に高出力のパルス光といった極限的な光を取り出すことができるようになった技術的革新により、従来になかった新たな研究領域が展開されつつある。光は単なる摂動ではなく、積極的に光で分子の状態を制御し、さらには反応を制御しようというものである。これに関しては、国内外の多くの理論研究が先行している感があるが、レーザー技術の進歩により、実験的な検証が行われるようになってきたといえる。大森、大島、菱川の各氏が果敢に取り組んでいる領域である。分子の量子制御や反応制御が光で自由自在にできるようになれば、光と分子を利用した量子情報通信、光量子コンピューターが可能とする説もある。そのための具体的な道筋が見えているとはとても思えないが、かかる可能性にも注目しておく必要がある。また光分子科学研究には光の存在は不可欠であり、平等氏が推進しているような種々のレーザーの開発は大変重要である。

(4) この分野の発展はあるか、どの方向か

光分子科学研究領域を分子と光の相互作用を調べる研究分野と定義するのであれば、物質科学や生命科学の発展のためにもこの分野の発展を期待せずにはいられない。新たな実験手法をたえず考えながら、光技術の発展により得られる新たな光と分子の相互作用を調べることが必要である。その結果として高空間分解能、高時間分解能の新分光法が得られるのであれば、それは確実に他の研究領域の研究に有用となるであろうことは、最近の生物科学の発展が種々の光イメージング測定の発展に密接に結びついていることから明らかである。また光で反応を自由自在に制御できるようになると期待したい。興味や研究の対象を深く掘り下げていくことは勿論重要であるが、興味の対象を広く持つことも重要である。一見異なる領域間の共同研究は大変重要であり、現在行っている研究が他の分野とどのような関係にあるかを広くアンテナを広げておくことが研究の新たな展開に結びつくように思われる。

(5) 分子研の当該研究領域は今後どのように進むべきか

高空間分解、高速時間分解分光に基づいて、気相、固体（表面）の各層を対象とする研究者が構造と反応を主として研究を行っている。お互いの研究は非常に関連すると思われるにもかかわらず、所内での共同研究はほとんど行われていないのは残念である。表面や固体ナノ量子を扱う研究者もいるが、気相分子を対象としている方が多いという印象をもつ。気相以外に、凝集系を独自の視点から扱う研究者の存在も望ましいように思われる。この研究領域には、X線から、紫外、可視、赤外の広い波長領域にわたり、しかも連続光から超短パルス光の異なる時間幅を有する光を扱っている研究者が所属しており、また、レーザー開発に携わっている研究者も所属していることを考えると、この領域内で一つのプロジェクトを立ち上げて一緒に同じ問題に取り組むことが可能ではないか。学生数が少ないということもあり、各グループの人数は決して多いというわけではないので、グループ間の連携を是非検討して欲しい。そしてプロジェクトに必要であれば、外部の方も組み込むようなシステムを考えてはどうだろうか。将来的には大きな国際プロジェクトへと発展する可能性を視野にいれてはどうだろうか。その際に基本となるのは、各グループ独自の研究手法および実験手法である。周波数分解分光および時間分解分光を得意とする研究者と多種多彩であり、この

点では分子研の過去の良き伝統を受け継いでおり、これらの特徴を活かしたプロジェクトが考えられるように思われる。さらに分子研には、多くの理論研究者があられることから、実験グループと理論グループの所内共同研究をもっと押し進めることも必要ではないか。

II. 分子研全体に対する意見

「大学共同利用機関としての分子研の存在意義と将来への展望」

分子研で行っている研究を中心としたプロジェクトを編成し、他の組織の方々を巻き込んでの共同研究をたえず行っている状況が理想的と考える。ただ、分子研のみならず多くの大学や研究所においても最新の大型設備が整備されている現状においては、研究設備も含めて分子研だけが突出しているとはいいいにくい。しかし、大学教員を含む多くの研究者は、一部の研究者を除けば一般にいわれているほど研究資金は潤沢ではなく、慢性的な研究費不足に悩まされているのが実状ではないだろうか。そのようなことを考えた場合、たとえば分子研が中心に行っているように、装置に関してのネットワークを構築し、それを利用することによりアイデアがあれば研究を進めることが可能なようにシステムを構築することが分子科学研究の基盤を拡げるためにも重要ではないだろうか。

ただし、このようなシステムを構築し運用することが、最先端の研究を行っている分子研の研究者の雑用を増やし、足を引っ張ることになってはこまるので、共通機器の整備だけではなく、依頼測定も可能なように測定に携わる人員を増やすことはできないであろうか。現在分子研の共同研究に関わっておられる方はある程度に限られており、まだ全国の大学が利用している、とはいえないような気がしており、お互いの共同研究がしやすいような環境造りがまだ必要なのではないかと考えている。また、国際的な観点から、たとえば分子研をアジアネットワークの中心として、5～10年任期の外国人教授のポストを造るのも一つの考えではないか。

委員 B

分子研光科学研究領域に関する評価（極短紫外光研究施設光源分野）

1) 光源性能向上について

直線部の四極電磁石の配置を変更し、エミッタンスを従来 160nm.rad から 27nm.rad まで大幅に向上させると共に、挿入光源用の直線部を確保した。比較的低いエネルギーで高輝度の電子ストレージリングの場合、電子ビーム寿命の制約が問題となる。これを解決すべくトップアップ入射実現のための計画を着実に遂行している。計画の一環であるブラスターシンクロトロンエネルギー増強はすでに終了した。この様に、第2世代のシンクロトロン放射光源であった UVSOR を、短期間の改造で第3世代光源と同等の性能にまで高めるのに成功したことは大いに評価できる。これらの光源自体の改造と共に、多様な挿入光源の整備を行っていることは大いに評価できる。

2) 光源加速器を用いた研究について

放射光源グループの研究活動に関して特記すべきことは、光源性能を着実に向上させる努力のみならず、光源加速器を用いた特徴ある研究を遂行していることである。自由電子レーザーの研究、レーザースライシング法の開発、コヒーレント放射、テラヘルツ光発生の研究などである。これらの研究水準は世界に抜kindでたレベルにあり、外国研究機関との共同研究が活発になされている。また、これらの研究成果を即放射光利用研究者が共有できている。すなわち、これらの研究成果として得られた特徴ある放射光を用いた利用研究が行われている。これらの研究活動は大いに賞賛されるべきものである。

3) 将来の展望、他機関との共同研究

光源グループは光源性能をより向上させるべく、エミッタンスのより一層の低減（15nm.rad）、挿入光源のための直

線部を確保すべく、新しいリングの設計を行っている。さらに同グループは、国外を含む多くの大学、研究機関との共同研究を遂行していることは評価出来る。

4) 提言

これらの研究活動は、少数の優秀な光源研究者により遂行されていることは賞賛に値する。しかしながら、放射光源を含む加速器の研究は広大な学問分野の集大成により成り立っている。この観点から、広範囲な研究分野をカバーすべく加速器研究者を確保・拡充することは重要であろう。また加速器研究者の育成は、優秀な光源を有し、特徴ある研究を遂行している研究施設の責務であろう。他大学との共同のもとに学生、大学院生の教育に積極的に関与し、多くの加速器研究者の養成を行っているが、より一層の努力をお願いしたい。

委員 C

光分子科学研究領域には、主にレーザーを使用するグループと放射光を使用するグループがある。レーザーを用いた研究グループでは、まさに state-of-art とも言うべき緻密で高精度の光分子科学研究が強力に推進されている。各研究グループの研究ピークは非常に高く、どれをとっても世界の第一線に伍している。ただ惜しむらくは、各研究グループ間の協力の成果がはっきりとした形では見えていない。ピークを保ちつつその間の谷を埋めることで大きな山を作れることを期待したい。

放射光を利用する研究グループは、比較的少人数の構成でありながら、性能を飛躍的に向上させることに成功した UVSOR-II を用いて世界最先端の研究を推進している。以下に個別に意見を述べる。

小杉グループ

比較的単純な構造を持つ原子分子の高分解能内殻励起スペクトルの実験および理論的研究を精力的に推進しており、世界のこの研究分野をリードする研究グループである。とりわけ、内殻励起状態において振電相互作用や Rydberg - 価電子混合などポテンシャルエネルギー曲面の詳細な知見が得られることを明確に示した最近の対称性分離内殻励起分光法の研究成果は、国際会議の基調講演や招待講演に取り上げられるなど、世界的に高く評価されている。また、理研・阪大グループと共同で行った「DNA の共鳴光電子分光」は、生体物質に光電子分光を適用してその伝導機構を探るというオリジナリティの高いユニークな研究であり、今後の研究発展の一つの方向を示すものと言えよう。

見附グループ

フラーレン C₆₀ の真空紫外線から軟 X 線領域の光による光励起電離解離過程の非常に詳細な精度の高い実験的研究を行っており、当該研究領域において注目を集めている。今後、本研究を通して蓄積してきた高い実験技術や解析法の、より広範な分子系への適用発展が強く望まれる。

繁政グループ

分子の内殻励起における多電子過程とその崩壊ダイナミクスの研究と、そのための新しい計測法や計測装置の開発を行っており、本研究領域における世界のフロントランナーである。とりわけ、窒素分子の 1s 電離しきい値近傍で中性準安定解離種が効率的に生成することを見出した最近の研究は、光電子の再捕獲を示唆するものとして大きな注目を集めている。さらに KEK-PF と共同で開発した新型磁気ボトル電子エネルギー分析器は、高い捕獲効率と高効率の多電子同時計測を可能とするもので、本装置を用いた今後の研究の進展に期待したい。

木村グループ

赤外および光電子分光を用いて、f 電子系を中心とした強相関化合物の物性発現機構と電子構造の関係を研究して

いる。放射光を用いた多重極限下での赤外分光研究のパイオニア的存在であり、豊富な経験と実績を有している。とりわけ最近行われた CeSb の低温・高圧・高磁場下での測定で、擬ギャップの存在を初めて実験的に見出した成果は、長年の問題を解決するものとして大きな注目を集めている。また、本グループが中心となって建設を進めてきた超高分解能光電子ビームラインは、低光エネルギー領域に的を絞って固体バルクの電子構造を直接観測しようというものであり、現在の光電子分光研究の目指す方向に合致しており、今後の大きな進展が期待できる。

7-2-2 国外委員の評価

原文

Director-General Hiroki Nakamura

Institute for Molecular Science

Okazaki, Japan

Report

of my visit of the Institute for Molecular Science (IMS), October 15–17, 2007

During my visit of the IMS on October 15 to 17, 2007 the opportunity was given to me to meet the leading scientists of the Department of Photo-molecular Science including the Laser Research Center for Molecular Science and of the UVSOR facility. I had intensive open discussions of the current scientific work with inspiring displays of scientific ideas and analyses of the present frontiers of research. The present report is focused onto this Department and all subsequent statements refer to the Department and not necessarily to the IMS in general. The informal interviews of the group leaders provided information about future developments and of possible shortcomings due to the limitations of available funds. I also visited several labs and the UVSOR facility giving me direct insight in the experimental investigations and the developed experimental techniques. The level of sophistication of the acquired and self-built instrumentation is impressive and is highly competitive to the equipment and facilities in other world-wide leading research institutions in the field.

Professor Hiromi Okamoto investigates collective electronic excitations of nano-structured air:metal interfaces by the help of scanning near-field spectroscopy, which is a field of particularly great interest. The experimental techniques involve one- and two-photon induced luminescence, surface-enhanced Raman scattering and different approaches of near-field transmission measurements providing state-of-the-art images of nanoplatelets, -rods and other structures with a spatial resolution of 100–50 nm. Most important, a time resolution of 100 fs was implemented in the interface spectroscopy using ultrashort laser pulses. The inventive combination of local, temporal and spectral information provides a deeper understanding of the observed features, *e.g.* of longitudinal plasmon resonances of gold nanorods. The work has been also extended to molecular nanowires observing longitudinal propagation of the optical excitations.

Professor Yasuhiro Ohshima has been developing methods for the optical manipulation of quantum state distributions. Current activities are focused on nuclear motions, *i.e.* rotational and low-frequency vibrational wave packets relevant for chemical processes. Both ultrashort laser pulses and laser sources with high spectral resolution are used to study molecules at low temperatures in the

supersonic expansion including molecular clusters. The investigations pave the way for a fully state-resolved measurement of reaction dynamics. To this end, new techniques have been developed. An example is excitation pulse sequences representing significant progress for the manipulation of quantum state distributions.

A remarkable achievement are the measurements of phase-controlled interferences of vibrational wave-packets of Professor Kenji Ohmori, investigating small molecules in the supersonic expansion. Using highly reproducible femtosecond laser pulses attosecond time resolution is obtained using a special, amazingly stable Michelson interferometer that generates the phase-controlled linear superposition of two excitation pulses. It is demonstrated that the phase information of the pulse pair is transferred to the vibronic excitation of the molecules *e.g.* I_2 yielding both the amplitude and phase information of the wave function of the molecular ensemble. In addition the population distribution of vibrational eigenstates is measured with narrow-band ns-pulses. The results of this work allow novel quantum computational applications, *e.g.* the development of logical quantum gates.

Coherent control is also the key word for the work of Professor Akiyoshi Hishikawa, studying atoms and molecules with high-intensity sub-10-fs laser pulses in the range of 10^{15} W/cm². Under such conditions the external laser field is comparable with the internal Coulomb field of the molecules leading to new phenomena. An example is the Coulomb explosion of hydrogen sulfide, the dynamics of which was studied by coincidence momentum imaging of the fragment ions. The results were interpreted in terms of charge-transfer states that control the structural deformation. It was shown that the explosion process can be manipulated by the help of the polarization of the laser pulse. For other molecules the same imaging technique provided evidence for transient hydrogen migration that competes with the dissociation process. The generation of attosecond pulses via high-harmonic generation in neon is in progress implementing even higher temporal resolution in these investigations.

Considerable progress was achieved in the field of diode-pumped lasers by Professor Takunori Taira, who demonstrated novel laser systems with high cw output power exceeding 300 W. The properties of the developed microchip solid state lasers and nonlinear frequency conversion schemes are striking and will attract considerable technological interest. The impact on the fundamental research of the IMS is not obvious.

It is an important function of the IMS to make advanced instrumentation available for guest scientists, in particular beam lines of the UVSOR facility. Under the direction by Professor Nobuhiro Kosugi and in collaboration with Professor Masahiro Katoh important progress has been achieved. Installing bending-magnet and undulator beamlines the upgrading of the system to UVSOR-II was completed with reliable operation for beam energies of 750 MeV. Options for a further increase of emittance and photon energies in the soft X-ray region are pursued at the present, demonstrating the special expertise of Professor Katoh. An example is the free-electron laser of UVSOR-II, the short-wavelength limit of which has been shifted below 200 nm, with a pulse duration of 10 ps and a maximum output power of 1 W. Using the laser bunch slicing technique with a synchronized femtosecond Ti:Sa laser, intense THz pulses are now available in the 1 ps range.

The research of Professor Kosugi is at the fore-front of inner-shell excitations dynamics of molecules in the vacuum UV that were studied by resonant photoelectron spectroscopy and soft X-ray emission spectroscopy. The wide range of interests includes VUV and X-ray spectroscopy of free molecules, molecular clusters and solids.

Another IMS group using the UVSOR system is the one of professor Koichiro Mitsuke who has an impressive record of publications on photoionization and photofragmentation phenomena. His most recent work that is concentrated on the multiple ionization of C_{60} and C_{70} and the photoabsorption of metallofullerenes in the soft X-ray region will receive great interest of the scientific community.

He has developed a new design of a ZEKE photoelectron spectrometer that utilizes the UVSOR storage ring.

An important application of the UVSOR machine in the infrared is devoted to strongly correlated electron systems investigated by Professor Shin-ichi Kimura. The electronic structure of bulk metallic glasses and multi-element amorphous alloys was obtained by synchrotron light photoemission spectroscopy and compared with theoretical simulations advancing the understanding of the glass forming ability of these compounds. The results are significant.

Professor Eiji Shigemasa also benefits from the UVSOR facility in his investigations of molecular inner-shell processes of gas-phase molecules in the soft X-ray region. Topics are multi-electron processes induced by single photon absorption that reveal the properties of multiply excited states (including decay dynamics) and the dissociation dynamics of core-excited molecules. In this context an innovative momentum imaging spectrometer for anions was developed. Examples are double photoionization of Ne, Xe atoms and N₂ molecules, photo-fragmentation of CF₄ and electron correlation in the Auger decay of noble gases. Very detailed, quantitative results were obtained in these studies.

In summary I can say that the scope of scientific interest is wide spread and addresses the key areas of fundamental research in molecular science. The expertise of the scientists is excellent. The scientific output as confirmed by the numerous publications in the leading international journals is significant, in spite of short comings to be addressed below.

Comments

One general impression is that the research groups in the institute are not very large, especially the number of graduate students and post-docs is rather small. Although the limited size may allow for a larger number of different activities, under-critical size limits the progress of the scientific work. In fact, comparing the structure of the groups with other places in Europe and North America the shortage of graduate students and post-docs is evident. It is proposed to attract more graduate students to the institute, intensifying in this way also the collaboration with universities. The effort required for the training of students is paid back by the contribution of young coworkers to the research. Most important, the acquired expertise may be furtherly used in subsequent post-doc activities. In other words the availability of highly gifted post-doc researchers is notably favored by a reasonable PhD-program.

The obvious explanation for the present lack of graduate students and post-docs in the Department of Photo-Molecular Science obviously is the lack of funds for these purposes. The Department should make an effort to enlarge funds available for stipends and scholarships as well as for current expenses required for the intensified experimental activities. In addition, the personal support of the individuals has to improved, i.e. the size of the stipends that seems unattractive for students from abroad. I understand that the IMS is involved in collaborative programs in this respect, but I seriously doubt that the financial frame of these programs compares with the actual requirements.

Another point in the personal structure is the limited size of the technical staff both of the Department and of the UVSOR facility. Compared to the situation for related research at Max Planck Institutes and German universities there is a notable difference and the size of the technical staff appears to me as non-optimal. I propose to re-consider the number of technicians that directly contribute to the experimental investigations. Again, this includes a financial problem since additional resources would be required for a larger technical staff.

The funds available for instrumentation at the IMS appear unsatisfactory. The present situation at the IMS obviously reflects the result of a world-wide trend that until recently politics supported projects in technology and applied research rather than fundamental science. Since molecular science is rapidly developing the relation between basic research and applications is rather close and a sound balance between the different directions of research and development has to be regained. This was recognized in the meantime and the mentioned trend stopped in several industrial countries. An example here is Germany where substantial additional funds have been made available for selected institutions towards basic research. To my understanding similar plans are being discussed in Japan and positive decisions in this respect are urgently needed to maintain first rank research. I wish to emphasize that the IMS with the Department of Photo-Molecular Science should participate notably in such an improved funding.

Garching, December 19th, 2007

A. Laubereau

訳文

分子科学研究所 中村宏樹 所長 殿
日本，岡崎市

分子科学研究所（IMS）訪問にかかる報告書，2007年10月15 - 17日

私が2007年10月15日から17日に分子研を訪問した際，レーザーセンターとUVSORを含む光分子科学研究領域の研究グループリーダーたちと会うことができました。進行中の研究に関して突っ込んだ率直な議論を行ないましたが，それらは研究の最前線における科学的なアイデアと解析の着想に満ちたものでした。この報告書はこの領域（光分子科学研究領域）に関することに絞っており，以下の記述は必ずしも分子研全体に係ることではないことをお断りしておきます。グループリーダーとのインフォーマルな面談を通じて，将来の発展の可能性や資金不足のために十分でない点等に関しても知ることができました。UVSORの幾つかの研究室も回り，実験研究と開発された実験技術に関して直接知ることができました。購入された装置や自作装置群は洗練されたもので，そのレベルに感銘を受けました。これらはこの分野における他の先導的な研究施設の装置と比較しても世界的に高い競争力を持つものです。

岡本裕巳教授は，走査型近接場分光を用いて金属ナノ構造：空気界面における電子の集団励起を研究しており，極めて興味深い研究分野であると言えます。用いられている実験法は一光子及び二光子励起発光，表面増強ラマン散乱，及び異なった手法として近接場透過測定で，これらを用いてナノプレート，ナノロッド，その他の構造体について，空間分解能100–50 nmの最先端のイメージングを可能としています。特に重要なのは，超短レーザーパルスを用いて100 fsの時間分解能で界面の分光に成功したことです。局所的，時間的，分光学的情報の独創的なコンビネーションによって，金ナノロッドの縦プラズモン共鳴などの特徴的な観察結果に対して深い理解を可能としています。またこの研究法は分子ナノワイヤの光学励起の伝搬の観測にも適用しています。

大島康裕教授は量子状態の分布を光学的に操作するための方法論を開発しています。現在，分子の回転や化学過程に関与する低振動数核波束運動等，原子核の運動に焦点を当てた研究活動を行っています。超短パルスレーザーと高

スペクトル分解レーザー光源の双方を使い、超音速噴流中の低温分子や分子クラスターを研究しています。この研究は反応ダイナミクスの完全な状態選別測定への道筋を付けるものです。それを実現するための新たな技術開発も行なわれています。量子状態の分布操作についての重要な進展を提示したパルスシーケンスの開発はその一例です。

大森賢治教授は超音速噴流中の小分子で、振動波束の位相を制御した干渉を観測するという、目覚ましい成果をあげています。再現性の高いフェムト秒レーザーパルスを用い、独特な驚くべき安定性をもつマイケルソン干渉計で、二つの励起パルスの位相制御された線形重ね合わせを実現し、アト秒時間分解を可能としています。パルス対の位相情報が I_2 分子等に転写でき、分子集団の波動関数の振幅及び位相情報を与えることが可能であることを示しています。更に、振動固有状態の分布を狭帯域ナノ秒パルスで測定しています。この研究の成果は量子論理ゲートの開発等、新たな量子計算への応用を可能とするものです。

コヒーレント制御は菱川明栄准教授の研究キーワードでもあり、彼らは 10^{15} W/cm² 領域のサブ 10 フェムト秒高強度レーザーパルスを用いて原子・分子の研究を行っています。このような環境下では、外部レーザー電場は分子内のクーロン電場と同程度となり、新たな現象を引き起こします。例えば、彼らは硫化水素のクーロン爆発の動的過程がフラグメントイオンの運動量コインシデンスイメージング法により研究しています。その実験結果は、電荷移動状態が構造変形を決定するとして解釈しています。爆発過程がレーザーパルスの偏光によって制御可能であることも示されました。他の分子についても同じイメージング法を適用し、水素原子の移動が解離と競合することを示すことを突き止めています。ネオン中の高次高調波発生によるアト秒パルス発生の研究が進行中で、それはこれらの研究に更に高い時間分解能を与えるものです。

平等拓範准教授のダイオード励起レーザーの分野での成果は注目すべきもので、新たなレーザーシステムで 300 W を超える高出力 cw 発振を立証しました。開発されたマイクロチップ固体レーザーや非線形波長変換の方法は目覚ましいもので、技術的にも大きな興味を引くものとなるでしょう。分子研における基礎研究へのインパクトについては未知数です。

分子研、とりわけ UVSOR のビームラインでは、外来の研究者が利用できる高度な装置群を制作することが、重要な機能の一つです。小杉信博教授の指揮下、また加藤政博教授の協力により、重要な進展がなされています。偏向磁石やアンジュレータービームラインの設置により、システムの UVSOR-II へのアップグレードが完了し、750 MeV のビームエネルギーで信頼性の高い運転が可能となっています。現在更に、加藤教授の高度で専門的な技術を活かした、エミッタンスや軟 X 線領域の光エネルギーの改善に向けた努力がなされています。例えば UVSOR-II の自由電子レーザーでは、10 ps のパルス幅で、短波長の限界は 200 nm 以下に及び、最大出力は 1 W に達しています。フェムト秒チタンサファイアレーザーと同期したレーザーバンチスライスの技術により、現在、強いテラヘルツパルスが 1 ps の領域で得られるようになっています。

小杉教授の研究は、真空紫外域の共鳴光電子分光や軟 X 線発光分光を用いた、分子の内殻励起ダイナミクスの最前線に位置づけられるものです。その興味は多岐にわたり、自由分子、分子クラスター、固体等を含む系について、VUV や X 線の分光を行なっています。

UVSOR を利用している今一つの分子研のグループである見附孝一郎准教授のグループでは、光イオン化と光フラグメンテーション現象に関する印象深い論文を出しています。彼は最近では、軟 X 線領域における C_{60} と C_{70} 分子の光イオン化と金属内包フラーレンの光吸収に集中しており、この仕事は研究コミュニティの大きな興味を引くと思われます。彼は UVSOR 蓄積リングを用いた ZEKE 光電子分光の新装置設計・開発をも行なっています。

木村真一准教授による強相関係の研究において、UVSOR 装置の赤外域での重要な応用が行なわれています。バルクの金属ガラスや多成分アモルファス合金の電子構造が、放射光による発光分光によって得られ、理論シミュレーションとの比較により、これらの化合物のガラス生成能に関する理解を深めました。この成果は意義のあるものです。

繁政英治准教授も、UVSOR 施設を利用して、気相分子の軟 X 線領域における内殻過程の研究を行っています。1 光子吸収で誘起される多電子過程を用いた、多電子励起の性質（緩和のダイナミクスを含む）の研究や、内殻励起分子の解離ダイナミクスの研究をテーマとしています。この目的のために、革新的な陰イオンの運動量イメージング分光装置を開発しています。例えば、Ne 原子や Xe 原子、N₂ 分子の二重光イオン化、CF₄ 分子の光フラグメンテーション、また希ガスのオージェ緩和における電子相関の研究等がなされています。これらの研究では非常に詳細で定量的な結果が得られています。

結論として、研究対象の範囲は多岐にわたり、また分子科学における基礎研究の重要な分野に取り組んでいると言えます。研究者の各専門領域における研究レベルは非常に優れています。下記に述べるような問題点はあるものの、サイエンティフィックな成果の高さは、国際的な一流の論文誌に多数論文が公表されていることから裏付けられています。

コメント

印象として、研究所内の各研究グループはあまり大きくなく、特に大学院生や博士研究員の数はかなり少ないと感じます。限られたサイズであることによって多くの異なる研究活動が可能になるという面はありますが、限界以下のサイズでは科学研究の進展を制限してしまいます。実際に、ヨーロッパや北アメリカの他の機関のグループ構成に比べて、大学院生や博士研究員の不足は明らかです。より多くの大学院生を研究所に引きつけることが望まれます。それによって大学との協力も強固になるでしょう。学生の養成に必要な取り組みによって、若手共同研究者の研究への寄与という見返りが得られます。そして特に重要なのは、彼らが獲得した専門知識が更にそれ以降の博士研究員としての活動に役立つということです。言い換えると、高い能力を持つ博士研究員の供給には適切な博士課程プログラムが強く望まれるということです。

現在光分子科学研究領域に大学院生や博士研究員が不足しているのは、明らかにそのための資金が足りないからでしょう。当該研究領域では、実験研究を強化して行くのに必要な資金を得ることに加えて、給与や奨学金のための資金を拡大することへの努力が必要です。加えて、各個人への待遇の改善、具体的には外国人留学生にとって魅力に欠ける現在の給与を改善する必要があります。これに係る研究協力プログラムに分子研が関わっていることは知っていますが、その財源が実際に必要な額に見合っているとはとても思えません。

人員構成に関して今一つの問題点は、研究領域と UVSOR 施設の両方で、技術スタッフの人数が限られていることです。関連研究領域のマックスプランク研究所やドイツ国内の大学に比較すると、技術スタッフの人数には大きな差があり、私にはこれが適正規模であるようには思えません。私は、実験研究に直接関わることでできる技術職員の人数を見直すことを提案致します。これもまた、技術スタッフの数を増やすことには費用が必要で、財政的な問題が含まれることになります。

分子研の研究設備構築のための資金は十分とは言えないように見受けます。この分子研の現状は、政府が最近に至るまで、基礎研究よりも技術や応用研究に関するプロジェクトを支援して来たという、世界的な傾向を反映したものでしょう。分子科学は急速に発展して来ており、基礎研究と応用の間は相当近づいています。研究と開発の方向性の違いの、適正なバランスを回復することが必要です。幾つかの先進工業国では、このことが認識されるようになり、上述の世界的傾向は終息しています。例えばドイツでは、いくつかの研究機関で、基礎研究のための付加的な資金が相当額得られるようになって来ています。私の理解するところでは、日本でも同様な計画が議論されていると聞きますが、一流の研究水準を維持するには、この点での積極的な決定が早急になされる必要があります。私は分子研と光分子科学研究領域が、とりわけそのような資金強化に参画すべきであるということを、強調したいと思います。

2007年12月19日、Garching にて

A. Laubereau

7-3 物質分子科学研究領域

国内評価委員会開催日：平成 19 年 7 月 10 日

外部委員 福山秀敏（東京大学，名誉教授・東京理科大学，教授）

榎 敏明（東京工業大学大学院，教授）

齋藤軍治（京都大学大学院，教授）

国外評価委員面接日：平成 19 年 7 月 23 日～24 日

委員 Peter Day（Professor, Davy Faraday Research Laboratory）

7-3-1 点検評価国内委員会の報告

物質分子科学研究領域では，平成 19 年 7 月 10 日に福山秀敏東京大学名誉教授・東京理科大学教授，榎敏明東京工業大学大学院教授，齋藤軍治京都大学大学院教授に外部委員として来所頂き，これに領域主幹が司会者として加わり，領域内の関連教授・准教授の業績発表と外部委員による評価点検の会を持った。以下に，外部評価委員による書面に記入された総合評価と個別評価の結果を記載する。

(1) 物質分子科学研究領域における研究展開に対する総合評価

委員 A

孤立した分子についての理解は十分進み，そこには挑戦すべき科学研究の大きな対象は多くない。対照的に，分子を構成要素とする「物質」の性質究明はこれからの重要な研究テーマである。分子性結晶はもとより蛋白質・DNA 等の生物物質が分子凝縮系であることを考えるとこの傾向は自然である。このような状況において，分子科学研究所に「物質分子科学研究領域」が置かれていることの意義は極めて大きく，先見性に改めて敬意を表する。実際，この領域から既に興味ある重要な成果が数多く報告されている。インパクトの大きいテーマの選択・明確なメッセージを持つ成果の提示等，「分子系の物性研究」をさらに推進するためには「物性研究」における発想法・実験手法についてより深く理解を進めることが有効であり，「物性物理」コミュニティとのより系統的な連携体制の構築が望まれる。このような「文化の異なる研究者の連携」は双方にとって大きな刺激となり重要な成果が生まれやすい。「化学」「物理」の学問としてのそれぞれの軸足を確固に保ちつつ，「分子を基礎とした物質科学」を総体的に強力に推進することが分子科学研究所には期待されている。

委員 B

分子研物質分子科学研究領域の研究活動は全体的にかなり高い水準で活動が行われている。材料開拓とその物性研究では，小林，西，薬師，中村，鈴木，佃グループは大きな存在感のある研究を行っており，小林グループの π -d 系分子導体，新規分子導体，分子性ポラス強誘電体の実現，西グループでの銅からなるナノワイヤーの作成とその構造の解明，ナノ構造体を基礎とする新たなナノ電子機能の開拓，薬師，中村グループのラマン分光法，磁気共鳴法をもちいた有機伝導体の電荷秩序詳細の解明，鈴木グループの新しい有機ドランジスタ材料の開拓での貢献，佃グループの構造を特定した金クラスターの開拓等は特筆すべきものである。また，実験手法では横山グループがナノ磁気構造の解明への展開に波長可変レーザーを用いることができる興味ある手法を展開しており，超高速時間分解測定への道を築くものとして期待される。また，小川グループの単一分子の電気特性と分子増の同時計測も重要な貢献である。生体物質に関しては，加藤グループは，たんぱく質分解系の制御因子である NEDD8 の作動機構に重要な情報を与え

る研究を展開し、国際的に高く評価されている。以上、分子科学における日本を代表する研究所として、その研究活動は高く評価できる。

(2) 外部評価委員 3 名による個別評価（個別の評価を（順不同）で示す）

電子構造研究部門

西グループ

ナノ構造作成と物性機能の開拓の独創的な研究である。これからの展開で新しい分野の発展が期待できる。基礎から応用にまたがっている。非常にユニークな課題に取り組み面白い結果を得ている。データを如何に論理的にまとめるかに苦労する感じである。簡単な手法による導電性ナノワイヤーの作成は非常に波及効果を持つ。また、光照射による金属クラスターやスポンジの作成も将来触媒他の応用も想定され重要である。課題として、(ナノ構造体の)電気伝導度や物性の直接測定法の確立が要請される。金属アセチリドを対象として光照射後の金属ナノワイヤーの作成過程を追求。伝導度、磁性等の直接測定手法の確立が期待される。

横山グループ

UV 磁気円二色性の増大の発見、高感度紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の開発等大きな研究を展開しており、重要な成果として位置づけられる。測定法の開発として超高速時間分解によるスピンドYNAMIKSの研究は非常に重要である。明確なサイエンスの方向を意識した上でのユニークな装置開発を展開している。

佃グループ

金ナノ粒子の独創的な研究であり、興味ある成果が得られている。これから大きな展開が期待され、新しい成果も生まれるであろう。金クラスターの作成、物性、また触媒作用について興味深い結果を得ている。物性測定に関しより深い検討が必要であろう。新手法により、ナノサイズ金クラスターの電子状態について新しい知見が得られている。

電子物性研究部門

薬師グループ

Raman スペクトルを用いた電荷秩序を研究する着実な研究であり、関連分野への貢献も大きい。今後の研究展開にも興味がある。CO 状態の光学的な観測と詳細な相図の作成と、しっかりした成果を挙げている。SRO 相、ferroelectricity 状態の詳しい情報を得る事が将来の課題であろう。分子性結晶での重要な電子状態変化である電荷秩序に関する赤外・ラマン分光を用いた徹底した研究。電荷の自由度とスピンの自由度との相互作用過程が解明出来れば大変面白い。

中村（敏）グループ

TMTTF 系における電荷秩序状態の詳細な研究結果は、基礎科学に大きく貢献する多彩な磁気共鳴手法による研究である。機能性材料への展開が面白い。但し、小さな研究グループなので守備範囲をある程度絞る必要がある。よくやっている。着実な研究を地道に展開しているが全般的に研究の発想に後追い感がある。新しい展開を示されたが今後の活躍に期待したい。分子性結晶における電荷秩序に関して NMR を手段とした徹底した研究により新しい知見を得ている。更に、将来的に興味のある多くのテーマを追求。

小林グループ（旧分子集団動力学研究部門）

研究業績が優れており大きな実績が残されたと評価される。これからの発展も期待される。 従来からの多くの業績に加えて、分子性ポーラス強誘電体の初めての合成に成功した。

分子機能研究部門

江グループ

興味あるナノ物質開拓の研究であり、新しい物理化学の展開となっている。これからの研究発展が期待される。提出された論文の質は良い。（今後の）課題としてデンドリマーの配向制御、分子間相互作用の制御、単分子素子としての開発の必要性等がある。 物質合成という観点からは見事。

西村グループ

NMR の測定法の開拓を基礎とした研究である。着任直後の為、これからの研究の展開が本番である。実績を積んでおり、今後の展開が期待される。 可溶性の無い重要な生理活性を示す膜タンパク質の構造を解析できる固体 NMR 解析法、手法の開発は長いスパンでの仕事であり重要である。 これからの展開が期待される。

分子スケールナノサイエンスセンター

ナノ分子科学研究部門

小川グループ

分子ナノ構造集合体を用いた電子輸送現象の研究展開であり、高いポテンシャルを持っている。優れた研究展開を行っている。 カーボンナノチューブに物理吸着した Zn ポルフィリンの整流作用は、極めて重要な発見である。Zn ポルフィリンの吸着状態と整流との関係の解明が重要である。I-V 特性、フォトカレント、整流性の測定に関して再現性の確認が必要。LB 膜や SAM での整流、I-V 特性との比較で重要である。 様々な重要な知見が得られている。ポルフィリン中の金属イオンを変えて状況の可能性を増やすことによって良い多くの知見が得られると期待される。

鈴木グループ

アクセプター性の FET 材料を狙った研究であり、応用の観点から評価できる研究である。 n 型半導体の開発に関し良い。設計指針を立てて成功している。デバイス作成の研究者、電子構造解析の研究者らとの議論を通して優れた分子設計、更に経済設計を行って欲しい。 フッ素を含む新しい有機半導体の合成に成功。

先導分子科学研究部門

加藤（晃）グループ

大きな成果がでていし、関連分野の発展にも大きな寄与が認められる。 糖鎖蛋白のライブラリーを完成する事により生体超分子の溶液内での構造解明を行っており、非常に先端的な研究を進めている。蛋白質の 3 次構造と生体機能の関連を探るために時間分解 NMR の開拓が望まれる。 見事な成果であり、将来の更なる発展が期待される。印象的であった。

Comments and advice about the Department of Materials Molecular Science

Review Report, July 2007

Prof. Peter Day

Davy Faraday Research Laboratory

Royal Institution of Great Britain

London, UK

First, a most generic comment: Research at IMS in the Department of Molecular Materials Science is of a very high standard indeed, both as regards Technical accomplishment and, just as important, in attacking some important issues in this still quite new and enlarging field of science. An Institute like IMS is especially well suited to identify and solve key problems in molecular materials science because the field is, of its very nature, multidisciplinary, embracing all the traditional sub-divisions of chemistry but also crucially calling on input from physicists, crystallographers, materials scientists, as, well as people skilled in developing new physical and characterisation tools. Such cross-cutting activities are often difficult to initiate and sustain in a university environment organized along traditional disciplinary lines. As well as the quality of the individuals hired and supported to carry out the work, that factor in itself gives an important advantage to an organisation such as IMS.

In those circumstances it is legitimate to ask oneself the question whether, overall, the work coming out of the Department of Molecular Materials Science at IMS capitalises on the advantages just mentioned. There can be no doubt that much of it is highly distinguished and some of its scientists are recognised throughout the world as leaders and authorities in their particular fields. The harder question to answer is the extent to which the work is shaped by the special circumstances prevailing at IMS. By “special circumstances” I mean those pertaining to a stand-alone research institute, as opposed to what in Britain or the USA has become known as a “research university.” In the former, a Professor devotes himself full-time to research, though aided by only a small group of co-workers while, in the latter, he devotes a significant amount of effort to teaching, though often aided by a larger number of Research Associates, postdocs and graduate students. Even in many of the world’s leading research universities there remain barriers to inter-disciplinary contact and cooperation, brought about by the traditional Departmental structures (*e.g.* organic, inorganic, physical chemistry and solid state physics) which result from the demands of teaching. Where a relatively new and highly multi-disciplinary subject is concerned, in an environment freed from such Departmental barriers, one might expect to see more coordination between the individual research programmes, so that the undoubted talents of the research group leaders may reinforce one another.

General comments and suggestions about IMS

The phrase “molecular sciences” means many different things to different people. It could be said to encompass high resolution gas phase spectroscopy of small molecules, organic superconductors and most biological structures and processes. Hence it is very hard (and perhaps even misguided) to identify common themes as far as specific research topics are concerned. Looking as far as possible dispassionately from the outside, I would say that historically, IMS has achieved its highest reputation and visibility in two

fields: Vacuum ultraviolet and soft X-ray spectroscopy based especially on the UVSOR facility and electronic properties of crystalline molecular solids. It is certainly right that such topics should continue to figure in the research portfolio but equally important to look more widely when selecting new areas and the staff to pursue them.

If, on the other hand, one does not wish to define a research strategy in terms of specific topics, I see several functions which IMS is well placed to emphasise.

· Hosting unique state-of-the-art equipment for multi-user access, building on a strong in-house programme in relevant fields. Here UVSOR showed the way, and the 920Mhz NMR facility is an excellent new example. Could there be more?

· As an “incubator” of talented young researchers who, liberated from the demands of teaching for a few years, are given the opportunity to open up a new topic and cement the foundations of a career. Present policy against internal promotions certainly works in that direction.

· More speculatively, the structure of IMS could make it a suitable platform for mounting attacks on carefully chosen “Grand Challenge” problems.

A final point, which I also recall making on my previous review visit in 2003, is that attention really should be given to protecting (and then hopefully licencing) intellectual property arising from the research. From my interviews it appeared that more than one group may be doing work that carries such opportunities.

Having seen IMS evolve over the last 15 years or so, I am confident it will maintain its place as one of the world’s leading laboratories for the molecular sciences. I wish it every success in meeting the new challenges.

I would like to thank all the members of the Department of Molecular Materials Science for making me welcome and giving me such a lot to think about, and especially Profs. Nishi and Yakushi for overseeing the arrangements.

訳文

物質分子科学研究領域への批評と助言

2007 年 7 月

Prof. Peter Day

Davy Faraday Research Laboratory

Royal Institution of Great Britain

London, UK

最初に最も総括的な意見を述べましょう。分子科学研究所の物質分子科学研究領域で展開されている研究は、専門的な実績ばかりでなく、大変重要な事なのですが、科学における尚新鮮で更に拡大しつつある分野における幾つかの重要な課題に取り組んでいるという点において、極めて高い水準にあると言えます。(周辺分野のスタッフを有する)分子研のような研究所は、それぞれの領域自体が、必然的に周囲の様々な分野を包含する、即ち、化学の伝統的な小分野ばかりではなく新しい物理学的な手法の発展に専門的な貢献をして来た人々と同様に、物理学者や結晶学者、そ

して材料科学者をも含めた人々からの大きな貢献を必要としていますから、分子物質科学の鍵となる諸問題を見いだし解決して行く為には最適の場所と言えるでしょう。このような分野交差型の研究を活性化させ又維持して行くことは、従来の伝統的な専門領域研究の線に沿って組織された大学環境ではしばしば困難となるでありましょう。分子研のような組織では、この目的の為に質の高い研究者を雇用し、その研究活動を支援することは大変好都合な状況にあると言えるでしょう。

このような環境において、分子研の物質分子科学研究領域から出てくる仕事が全体的にこの組織の利点を最大限活用したものになっているかどうかを問う事は正当なことでしょう。疑いもなく、その多くが極めて顕著なものであり、何人かの科学者は世界的なリーダーであり専門分野の権威として認められています。分子研が持っている“特別な環境”によってそれぞれの仕事かどの程度有効な結果を得ているかを判断することは少しばかり難しいことかもしれませんが。この“特別な環境”という言葉によって 私は（分子研が）英国やアメリカ合衆国において“研究大学（Research University）”と呼ばれているものとは、全く異なった比類のない独自の研究所であることを指摘したいのです。英国の Research University の教授は、少数の共同研究者と一緒にその全時間を研究に没頭することが出来ますが、米国においては、かなりの数の助手や博士研究員、そして大学院生の助けを得ながら、教育にも多くの時間を割かねばなりません。世界の多くの著名な研究大学においてさえ、その教育上の要請による伝統的な学科の構成（例えば、有機、無機、物理化学、そして固体物理）に起因して、学際的な接触や共同研究を実行するには大きな障害があるのです。比較的新しく、高度に学際的な課題に関しては、個々の研究者の研究計画の間での更に有機的なつながりを期待できるでしょう。これによって、研究グループリーダーの真の才能が互いに磨き上げられるでしょう。

分子研への一般的な意見と提言

“分子科学”という言葉は、それぞれの人によって異なった対象を意味するかもしれません。この言葉は、小さな分子の気相高分解能分光、有機超伝導体、多くの生物構造や（生物活性）過程を網羅していると言えるでしょう。従って、それぞれ特定の研究課題が関係するような共通なテーマを規定する事は大変困難であり、むしろ誤った方向に導く恐れがあるでしょう。外部から出来るだけ冷静に眺めてみて、分子研は歴史的に、UVSOR 施設を用いた真空紫外および軟X線分光光学と分子性結晶の電子物性と言う点で、高い評判と知名度を挙げてきました。確かに、このような研究課題を研究資産として受け継いで行くことも正しい道ではありますが、それと同時に重要な事は、更に広い分野を開拓し、その仕事を遂行できるスタッフを選考する事でしょう。

一方で、もし特別の課題を設定した研究戦略を定めようと望まないのであれば、私は分子研が努めて果たすべき幾つかの機能があると思います。

- ・関連する領域のコミュニティ内での強力なプログラムを作り、多くの利用者のアクセスが可能な特徴のある最高水準の装置の導入。これに関しては、すでに UVSOR がその道を示しましたし、920MHz NMR は素晴らしい新規な例でしょう。他にもこのような装置の可能性があるのでないでしょうか。

- ・才能のある若い研究者が教育の義務を数年間離れて新しい研究課題を開拓し、経歴の基礎を固めるための機会を与える、いわば“培養器”としての機能を果たす。現在取られている内部昇進の禁止という方針は、明らかにこの方向に機能するでしょう。

- ・更に思いを馳せると、分子研は、慎重に選ばれた“Grand Challenge: これから挑戦すべき大きなテーマへの野心的な取り組み”を実行する適切なプラットフォームでしょう。

最後のポイントは、2003年に行った評価の際に述べた事を思い出しますが、研究から生じた知的財産を保護する

（そして望むらくは，これを権利化する）ことに真の努力が必要なことです。私が，面談した中では，少なくとも幾つかのグループがそのような可能性を持った研究を展開していると思います。

これまでのおよそ 15 年間の分子研の発展を見て，私は研究所が分子科学の分野において世界の指導的立場にある研究機関の一つである事を確信します。新しい挑戦に出会い，これらが全て成功する事を期待します。

物質分子科学研究領域の皆さんが私を快く迎えられ，このような多くの思索の機会を与えて頂いた事に感謝したいと思います。とりわけ，この機会の準備を頂いた西・薬師教授に感謝します。

7-4 生命・錯体分子科学研究領域

国内評価委員会開催日：平成 19 年 7 月 20 日～21 日，8 月 21 日～22 日

委員 山下正廣（東北大学大学院理学研究科，教授）

西原 寛（東京大学大学院理学系研究科，教授）

長野哲雄（東京大学大学院薬学系研究科，教授）

西野武士（日本医科大学大学院医科生物化学分野，教授）

国外評価委員面接日：平成 19 年 9 月 10 日，8 月 21 日

委員 Dan DuBois (Senior Scientist, Pacific Northwest National Laboratory)

Peter E. Wright (Professor, The Scripps Research Institute)

7-4-1 国内委員の評価（錯体分子科学分野）

委員 A

(1) 現状の問題

分子科学研究所が設立されてから 30 年以上が経過し，その間に「錯体化学研究所」設立に向けて錯体化学実験施設が開設された。その開設からおよそ 20 年が経過し，「生命・錯体分子科学研究領域」に改組された（あくまで錯体化学分野からの見方である）。分子科学研究所のような直轄研（全国共同利用研）は大学の附置研とも大学の講座制研究室とも違った研究体制と運営ならびに研究テーマ設定が要求される。このような変遷の中で，「生命・錯体分子科学研究領域」が今後どのような方向性を見いだすかを思索，決定する大変重要な時期を迎えている。

分子科学研究所の設立時は 10 年以上にわたって分子科学分野を中心に熱心な議論が古手や若手研究者の区別なく行われた。それは，分子科学研究所を設立した目的に適うものであった。その目的とは，当時の分子科学分野が世界的に，大型の測定装置やコンピューターを必要とする時期に向かいつつあり，それらの機器を各大学でばらばらに購入することは不可能だったため，分子科学のセンターとして分子科学研究所を設立し，そこに最新の大型機器を導入して全国共同利用研として全国の分子科学者が集まり，分子科学分野の研究者の世界トップレベルを維持することであった。更に分子研には化合物を合成し所内の測定研究者に試料を提供することを目的の一部として，関連領域や化学試料室も設置された。設立当時の分子研のスタッフは教授から助手まで錚々たるメンバーであり，身分の違いに関係なく朝早くから夜遅くまでサイエンスに対する熱い議論が毎日行われていた。その当時の助手が現在の日本の分子科学分野だけにとどまらず，化学会全体のリーダーとして活躍しているのを見れば先端のサイエンスを先導していたのは明らかである。また，数年前のノーベル賞受賞に関連する研究の一部が分子研化学試料室や関連領域で行われていたことから当時の高い研究レベルは明らかである。分子科学研究所設立の目的は十分に果たされていたと言える。

事態が変化し始めたのは設立後 20 年弱が経過した頃からであろうか？ その要因には外面的なものと内面的なものがある。外面的なものとして，各大学において大型の機器が購入できるようになり，分子研まで出張してきて測定する必要がなくなったことである。更に「科研費」を初めとして多様・多額な競争資金を個人が獲得できるようになり，その結果，一部の研究者は分子研で共同研究や「研究会」開催の必然性が薄れてきたのが外的要因としてあげられる。

内面的なものとしては，人事制度や運営制度，研究の方向性などの問題があげられる。助教には任期がつき，准教授は教授に昇任できない。よって上のポジションを得るには他の研究機関へ移らなければならないため，研究者の交流を促進する利点があるが，合成化学のような時間のかかる研究に取り組むにはリスクが大きい。また教授も含めて半講座制であるが，合成化学のようなマンパワーが必要な研究テーマは不利である。半講座が良い場合もあり，また

完全講座が良い場合も有るので、研究分野に応じて柔軟に研究室体制を変えられる制度を取り入れるのも一案であろう。また半講座であるにも関わらず、特定の教授に雑用が集中するのを防ぐためにも、マネジメントや広報を専任とする教員を雇用する対策も検討する必要があるだろう。一方、日本の研究・教育機関のなかでは、分子研教員の流動性は群を抜いて高いことは事実であり、そのために日本の殆どの分子科学研究者は何らかの形で分子研にかかわり合いを持っている。その意味で分子研の存在意義は今でも充分大きいし、影響力も大きい。

21世紀に入り、科学技術政策が大きく変わりつつある。例えば科研費のなかで「学術創成研究」がなくなり、「特定領域研究」が「新学術領域研究」へと小規模なものに改変されようとしている。このような中で分子研の存在意義は以下のような意味で重要になると考えられる。一つは「情報の集約と発信」である。直轄研の特徴を生かし情報収集を積極的に行い全国の分子科学研究者へ迅速かつ正確に発信することで分子研の存在意義は重要となる。また、特定領域研究がなくなることにより、分子研研究会の存在意義が増し、岡崎コンファレンスの重要性が増すと考えられる。このような研究会や会議への援助を増やすべきである。また、これまで特定研究により中小規模の大学の研究者は大いに助けられていたが、この機会が極端に減る可能性があり、全国大学共同利用機関としての分子研の役割は再び大きくなることから共同研究制度の充実と拡充が期待される。さらに、科学技術政策の中で「ナノ」、「バイオ」、「情報」、「環境」の重要性が強調されているが、教員の高い流動性から分子研では、この分野の研究組織の先取りは大学に比してはるかに容易であることから、積極的な対応により、21世紀にふさわしい分子研への変革が期待される。

このような過程の中で、「錯体化学実験施設」は当初は独立した「錯体化学研究所」設立に向けての準備段階として分子研内に施設として発足したが、「独立研究所」の可能性は皆無となり、「生命・錯体分子科学研究領域」に改組された。共同利用研の存在の正否はその分野のすそ野がどれだけ大きいか、かつそのすそ野の研究者たちのサポートがどれだけ得られるかに懸かっている。その意味で、全国の錯体化学者を巻き込んだ議論を、分子研がマネジメントの中核を担い、全国の広範な錯体化学者の組織である「錯体化学会」を核として進めることが重要である。これらの問題を解決するには、第一に「生命・錯体分子科学研究領域」が世界をリードする研究をすることである。この問題は、研究所にふさわしい研究テーマを行うことのできる研究者を集める人事を行うことで、ある程度の解決は可能である。第2番目としては全国の錯体化学者が共同利用研として分子研をどれだけ利用するかである。この問題も、現在、大学の運営費交付金は極端に減額されており、特に、中小規模の大学では科研費などの外部資金がなければ全く研究できない状況にある。このような状況から、分子研での共同研究や施設利用などを行うことで、大きく研究が発展することが期待できる大学の研究者を分子研の客員教授・客員准教授として採用し、それ相当の研究費を支給し、共同研究を行うことができれば、大学の苦しい研究資金状況も大幅に解決可能である。さらに共同実験のために分子研に同行した学生、大学院生が、分子研および総研大をよく理解する機会を与え、結果的に分子研の求心力を生み、錯体化学の全体の活性化に繋がると考えられる。このように、共同研究制度を質・量ともに、より充実させ財政的なサポートを全国の錯体化学者を分子研に集める努力をすることが必要である。

以上、述べたことは独断と偏見による部分も多いと思われるが今こそ、総点検をして21世紀の分子科学、錯体化学をリードするような研究所の展開に向けて日本中の分子科学者や錯体化学者を総動員して議論をすることが重要である。

(2) 個別評価

今回、面接を行った、田中グループ、魚住グループ、川口グループ、永田グループ、櫻井グループのいずれも少人数の研究グループながらすべて平均値以上の研究成果をあげている。しかし、世界でトップかといわれればそれぞれ

課題が残されている。共通しているのは、もう少しグループが大きければもっと色々な方向の研究のテーマとアプローチが可能となり、大きな発展が期待されることである。総研大生を集めることや、博士研究員（PD）を増やすことなどの方法が考えられる。最低、10名の研究メンバーは必要である。また、共通的なキーワードとして、「触媒」や「エネルギー問題」があげられるがこれでグループ間の共同研究はできないか？ 共同研究ができれば「触媒」や「エネルギー問題」をキーワードとして世界的に「生命・錯体分子科学研究領域」のカラーが強調できるのではないか？

田中グループ

炭酸ガス還元錯体触媒開発のために Ru - カテコール錯体に焦点を絞ってかなり良い成果が上がっている。他の金属、例えばイリジウムなどや他の有機配位子ではどうかなど研究の方向性は考えられるが、小グループのためにターゲットを絞らざるを得ない。研究体制の充実が課題である。

川口グループ

多座フェノール配位子を持つ金属錯体を用いた小分子の活性化について大変素晴らしい成果が上がりつつある。早急に論文を作成し、良いジャーナルに外部発表をすべきである。

魚住グループ

水中における不均一触媒、ナノ金属粒子の触媒、不斉触媒など、グリーンケミストリーを目指した研究が着実に行われている。共同研究における Lab-on-chip も将来性の有る研究テーマである。今後の展開が期待される。

永田グループ

光合成を人工分子で行わせることはエネルギー問題などの観点で興味深い。そのアプローチとしてポリカルボン酸配位子やデンドリマーボルフィリン錯体などを用いた研究の今後の成果が期待される。早急に論文を発表すべきである。

櫻井グループ

バッキーボールの最終目的はフラレンの全合成と考えられる。世界中で一時期、取り組まれていたがいまだ誰も成功していない。このテーマに集中し世界初の全合成をすることは大変興味ぶかい。金属ナノクラスター触媒を用いた研究は所内での共同研究が上手く進んでおり、今後も追及すべきである。

委員 B

(1) 全般的な問題

国立大学の法人化、国の研究支援制度改革に伴って、現在、産官学全ての研究者の状況が急速に変化している。この時期に、30年間、分子科学の中心としての役割を担い、かつ共同利用研として国内外の研究者を支援してきた分子科学研究所は変革の時期にある。その中の「生命・錯体分子科学研究領域」も、その前身である「錯体化学実験施設」が「錯体化学研究所」設立を目指していた経緯と離別し、新しい組織としての役割が求められている。具体的には、大別して二つの役割が考えられる。第一に、最先端の測定、解析、理論に基づく「物理化学」が主流の分子研の中で、合成化学を基盤とするユニークな研究グループの集まりである本研究領域が重要な役割を担っている。なぜ

なら、「物理化学」においても特殊な構造、優れた物性、特異な化学反応性を示す「分子」を対象とすることが不可欠であり、それらの分子を合成することのできる研究者と組むことが必要だからである。逆に、新しい分子や反応を見つければ、積極的に研究所内の解析、測定グループと共同研究をできる状況にある。第二に、「錯体化学」のまとめ役、牽引者としての役割も重大である。これまで錯体化学会の事務局として、日本の錯体研究者のネットワークの基点となり、特に若手を中心とする錯体化学者の集会を数多く開催してきた。それらの実績を踏まえ、これまで以上に拡大する錯体化学の発展のための拠点として様々な施策をリードする立場を築いてほしい。そのために、本研究領域の拡充を求めたい。

しかし、上記の両役割を果たすには、現在の本研究拠点の組織は不十分といわざるを得ない。最大の問題は、いまだに合成化学研究に必須な研究者数が絶対的に不足していることである。それは、単に絶対的な研究パワーの不足のみならず、研究室主宰者（教授、准教授）の事務的な負担（雑用）を過度に増加させる結果も招いている。それらの問題を解決するのは、本研究拠点の自助努力だけでは困難であり、総合的に分子研や総研大の制度・システムを改革する必要があるだろう。1 グループあたりのスタッフ数の増加、内外の共同研究の推進、積極的な外国人大学院生、ポスドクの勧誘、採用などにより、1 グループあたりの研究者数を10名程度までに増やす抜本的対策に取り組むことが切望される。

本領域の5つの研究グループのインタビューを2日にわたり行なったが、いずれのグループも本質的に上記のような研究者数の制限を受けている状況で、可能な最善の研究を行っているとの印象を受けた。すなわち、研究対象を新しい視点のもとに他の研究者と競合しにくい独創性の高いものに設定している。また、分子研内外の研究グループとの共同によって、研究の広がりを目指している。今後は、研究者数の課題をクリアするとともに、各グループの研究をいくつかの共通のキーワード（例えば、「エネルギー」、「環境」、「新反応」、「生体」など）でくくった新領域、融合領域の核としての立場を鮮明に打ち出し、錯体化学の新しい方向性を示す先鋭組織としてアピールされることを期待したい。

(2) 個別評価

田中グループ

従来からライフワークとされている化学エネルギーと電気エネルギーの変換に関して、最近のCRESTの研究プロジェクトで非常に目覚ましい成果を挙げている。二大テーマのアルコールの酸素酸化反応の電気エネルギー系への変換およびCO₂の光還元は、これまでの独自のアイデアの集大成となる成果が得られつつある。CRESTが終了したので、これらの研究を続けるための研究者数の確保が望まれる。

川口グループ

フェノキシド配位子の特性に着目して、H₂、N₂、CO、CO₂などの小分子を巧みに活性化する独創性のある金属錯体の合成やユニークな反応の発見に成功している。今後、研究員を増やすことによって、見出した興味深い研究の種の発展が期待される。

魚住グループ

高分子錯体触媒の有用性を精力的に追求し、特にその疎水場効果を水中で利用した環境調和型触媒やマイクロチャンネルリアクターへの応用展開など多彩なアイデアで、興味深い成果を挙げている。CRESTなどの大型外部資金の獲得などへも力を入れている。

永田グループ

光合成系に焦点をあてた錯体化学を展開している。特に、生体系の構造もまだはっきりと分からない研究のハードルが高い酸素発生中心のモデルとなるマンガンクラスター錯体の合成的なアプローチに果敢にチャレンジしている点が評価される。国際共同研究による生体系の再構成などを積極的に続け、この分野の先端的な成果を挙げることを期待したい。そのためにも、今後、研究員を増やすことが望まれる。

櫻井グループ

フラレーンの部分構造となるバッキーボウルの合成を、巧みな有機合成の組み合わせによって世界で最初に実現し、さらに色々な構造へ展開している点が評価される。そのほかに分子研内での、金属ナノ粒子の触媒反応などの共同研究に積極的にとりこんでおり、持ち前の有機合成のセンスとパワーを十分に発揮にしている。研究員の増加による大きな研究展開を期待する。

7-4-2 国内委員の評価（生命分子科学分野）

委員 C

(1) 当該研究領域の研究分野での分子研での役割、寄与と位置付け

分子科学研究所は、分子の構造と機能に関する実験的研究並びに理論的研究を行い、さらに分子の科学の研究を推進するために、その中核として全国の研究者の共同利用を目的に大学共同利用機関としての役割をミッションとして担っている。

生命・錯体分子科学研究領域においては、この領域の世界最先端の研究を行うと同時に、分子研・基生研・生理研の三研究所の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に所属する教員もあり、学際領域にまたがる新しいバイオサイエンスを切り開くことが求められている。

このようなミッションに基づいて研究を遂行している下記の5グループから研究成果の報告を受けた。

総合的評価として、いずれも極めて質の高い研究をおこなっており、この分野での先端的研究に位置付けられる。学際領域の観点からも研究内容のオリジナリティーは高く、分子研の掲げる壮大なミッションに応えつつある。

惜しむらくは、いずれの研究内容も実験科学であることから、それなりの研究者数が必要であるにもかかわらず、一部のグループは研究者数が少ないため、爆発的に世界を席捲・先導できる迄には至っていないように見える。今後大学院生数の増加もあまり期待できないと予想されることから、この点が今後、生命・錯体分子科学研究領域が抱える課題として大きく顕在化してくるであろう。

なお、大学共同利用機関として生命・錯体分子科学研究領域がどのような役割を果たしたかについては十分には理解できなかった。

(2) 当該研究領域の研究内容と各研究グループに対する個別評価

青野グループ：青野グループは気体分子センサータンパク質を研究対象にしているが、分子生物学、分光学、錯体化学などの全く異なる実験手法を駆使して、この興味あるテーマに取り組んでいる。まさに学際研究である。気体分子である酸素、一酸化窒素、一酸化炭素などが転写調節など生体内での新たな役割を果たしていることを明らかにしつつ、その活性発現機構を詳細に分子レベルで解明した成果は特筆に値する。

桑島グループ：タンパク質のフォールディングの分子機構解明が研究テーマである。タンパク質は生命の現象の多

くを担っていることから、極めて大きなそして生命科学において根源的研究課題である。桑島グループはこのような競争が激しく、難しい研究テーマに取り組み、成果をあげている。同グループの報告論文の引用回数からも同グループの研究レベルの高さが窺える。研究の更なる発展も大いに期待できる。

藤井グループ：金属酵素の構造と機能の相関を研究課題としている。このグループは極めて少ない人数で、金属酵素活性部位のモデル錯体の合成と解析、金属酵素の機能改変などの研究に挑んでいる。得られた成果は興味深く、注目できるが、研究内容は人手に頼る要素が大きいと思われるので、更なる展開を図る上からはポストドクあるいは大学院生の確保、更に積極的な共同研究などが求められるであろう。分子研全体でこれを支援する体制も必要と思われる。

宇理須グループ：AFM, IRRAS, Fluorescence microscopy, computer simulation を用いて、リピッドと膜タンパク等あるいはアルツハイマー病との関連で A β の aggregation の解析を研究テーマとしている。また、イオンチャネルのバイオセンサーの開発もテーマの一つである。学際的でユニークな研究と思われる。しかしながら、私の専門とは異なるため正確な評価ができないのが残念である。具体的には、例えば新たなパッチクランプのバイオセンサーが開発できた暁には、世界的に見て電気生理学の分野でどれ程重要で汎用性のあるものとなるのか、十分には理解できなかった。成果の論文での発表に評価を委ねたい。

小澤グループ：生体分子の可視化が研究課題である。現在、アメリカ NIH のロードマップにおいても分子イメージングの重要性が唱えられている。生体分子の機能あるいは細胞内動態をリアルタイムで解析することは、細胞内ネットワーク解析などの基礎生命科学においても、また疾病との関わりから応用的生命科学研究においても重要である。この分野で小澤グループは他を圧倒しており、群を抜いている。スプリットタンパク質を用いて蛍光顕微鏡システムによる生体分子の細胞内動態観察は独創的であり、世界を先導していると言える。

(3) この分野の国内、国外での研究分野としての重要度

上記したように、各グループともに国内外で重要と考えられている研究課題に取り組んでおり、些末で矮小なテーマではない。分野として極めて重要と考えられる。

(4) この分野の発展はあるか、どのような方向か

この分野の研究は今後益々、*in vivo* 系に近づいて行くであろう。すなわち、酵素から細胞、細胞から生体組織、生体組織から個体 (*in vivo*) に研究に向かっていくことは必定。そして最終的に、酵素、受容体、遺伝子、糖、生理活性小分子などの生体分子の個体での動態を解析し、それらの機能の解析を化学の分子レベルで行うことになる。

(5) 分子研の当該研究領域は今後どのように進むべきか

分子研の抱える問題は前述したように、少人数の研究員でどの様にして世界のトップを維持していくかであろう。

大学での研究に対する最近の国の政策は、まさに弱肉強食である。競争の資金を増やし、運営交付金を減らす方向にある。そして、実は総額は減っている。それに対して、分子研の研究資金は大学に比べ余裕があるように見える。この資金を総花的に配布するのではなく、研究を絞り込んでそこに研究員も投入してその領域の世界最高峰の研究を構築するのが、分子研の最も良い将来の方向であると思う。

研究所の方針には、卑近な例で恐縮であるが、いわゆる総合デパート方式と専門店（秋葉原）方式があると思う。人も研究費も潤沢にあれば、総合デパート方式で世界一を各領域で勝ち取れるかもしれない。しかしながら、最近では大型資金が、極く一部ではあるが大学にも出るようになってきており、大型資金で購入した装置機器で世界をリー

ドし続けることは至難の技である。分子研が今後とも人的資源が見込まれないのであれば、専門店方式でその分野の専門家を集め、研究分野に近い研究者同士で切磋琢磨することで、その分野の世界最高峰を維持することは可能であるとする。

委員 D

生体分子機能研究部門および生体情報研究部門の全体的な評価と意見

部門の教授 3 名および准教授 2 名のそれぞれの過去 5 年間ほどの論文発表および口頭による研究内容の説明および質疑による全体の評価および印象を報告させていただきます。

今まで分子科学研究所としては、大学にない突出した高度な分析機器や施設を有し、生物、化学、物理の境界領域を『分子科学』という切り口で研究を進め、大学等の研究機関の研究者との共同研究が行われ独特の大きな役割を果たしてきたと評価しています。しかし、生命科学分野はいまやその他の研究所（理化学研究所など）や大学において広範な研究者が分子科学の性格をもち、それぞれ大規模な研究に着手している状況にあるといえます。分子科学研究所としての特色とインパクトを与えるには難しい状況になりつつあるとも思われます。そのような状況にある当研究所の当部門については、個別の研究内容はそれぞれ特徴のある独自の研究領域や手法を持ち、国際的標準からみれば幾つかの部門は学問的には高い水準にあると評価できると思われませんが、研究全体の印象は、分子科学研究所の期待される役割から見ればまだ弱く、小さな大学のあるレベルがそろった研究集団という感じを否めません。もちろん生命科学の研究がえてして表面的に流れる傾向が日本全体の研究のなかで見られる中で、基礎的で本質的な課題を深める研究がある一面でなされており、分子科学研究所の特色としては評価できます。しかし、生命科学の研究は、全体としては総合科学と考えられるため、それぞれ個別の研究の水準とレベルの深さとともに、より多くの組織集団としての取り組みが期待されます。

次の事項をご検討いただければと思います。

1) 小さな研究者集団である当部門としては研究者の分野が分散しており、相互に深め合うのが難しい状況にあると思われれます。現在のいくつかの研究の質の高さを考えれば、若く活発な研究者をスカウトしてより多くの独立した部門をつくり相互作用が深まるようにするか、それぞれの部門の研究者の数をマックスプランク研究所の一部門のように補強するかしないと外部へのインパクトも弱く内部的にも息切れするおそれがあります。現在は特に競争的研究資金が研究費の中心となりつつあり、その獲得のためにも重要と考えます。現在は若手の研究者の研究費は競争的研究資金でも重視されており、優れた若手にとってむしろより容易で潤沢である点も考慮が必要です。

2) 研究は人事が全てといっても過言ではありません。研究所の人事について言えば、今までは内部昇進はできない原則があったそうです。それは旧態依然として適当にしていれば内部昇格できるということの反省から取り入れた手法でしょうが、国内評価が重要なある時代では一定の役割をしたかも知れません。しかし、現在ではその内部昇格禁止の方法を採用していることが、むしろ保守的で、国内でのみ通用するような研究機関の権威と魅力の上に成り立つ仕方と思われれます。即ち、自然と外部から優れた研究者が応募して集まる研究所の権威と魅力ある状況があれば成り立つ話と思われれます。人事は選考と論文評価では不十分で、養成を含めた戦略が必要です。外部依存ばかりでなく、内部的活力を生み出す戦略をつくりだす必要があります。分子科学研究所が望まれる研究のレベルは世界一級の研究であり、研究費の体制も変わっているのですから、実力本位の選考をより積極的アグレッシブに取り入れるべきで、形式的ではなくより本質的に人事の戦略をとるべきだと思います。例えば、英国や米国の一部の活発な大学がおこなっ

ているような、独立して研究したがっている若手の准教授レベルをスカウトしその研究所在職中の研究状況を観察評価し、その証明された実力の評価に基づき、厳正に教授昇任の道をつくる仕方を取りいれるべきです。もちろん外部からすぐれた人材が教授として獲得することもあり得るので、一面的にはいえないのは当然ですが、外部からの応募者は実際に来てみればそれほどでないとか、外から判明しない別の評判の悪さが露呈するとかの危険性もあり得ます。重要なことは、内外区別なく真に実力本位をおこなうことであり、実際の研究の実施を厳正に評価し、それに基づく、本質的な人事を行うことであり、そのような人事が行われる体制づくりです。過去ではなく、採用した場所（分子研）での生まれた研究成果の評価を重視し、大きく発展する人材の養成を取り入れるべきではないかと思います。そうでないと本当に良い人は去りますし、良い人をスカウトできません。

3) それにしても、分子科学研究所は国内外の他の研究機関との研究者が来訪共同研究をするような施設の現代にふさわしい再設定とそれに相応する人員の確保が一方では戦略として望まれます。論文などの発表はどこの機関でも行われ、その研究機関の重要性を認識させるには限界があります。若手の研究者が体験的に認識するような体制と戦略（機器と人員を含め）の構築が望まれます。

7-4-3 国外委員の評価（錯体分子科学分野）

原文

Review of the Coordination Chemistry Group of the Institute for Molecular Science

Sep. 10, 2007

Dan DuBois

Fundamental Sciences Directorate

Pacific Northwest National Laboratory

Richland, WA USA

Overview of Activities

This report is the result of an on site review of the Coordination Chemistry Group of the Institute for Molecular Science (IMS) conducted on Sep. 10, 2007. The programs reviewed were those of Professor Koji Tanaka, Professor Yasuhiro Uozumi, Associate Professor Hidehiro Sakurai, Associate Professor Hiroyuki Kawaguchi, and Associate Professor Toshi Nagata. All of these programs are very basic and fundamental in nature, but all are also focused on providing the fundamental science required for achieving the sustainable and environmentally benign production of energy and materials necessary to maintain a high quality of life in our modern society.

Current production of energy and many useful materials (chemicals) is closely tied to the use of fossil energy reserves such as oil, natural gas, and coal. To accommodate the future energy and material needs of mankind without increasing the atmospheric concentration of CO₂ (a greenhouse gas) will require advances in our knowledge of how to produce fuels and chemicals from non-fossil sources such as solar, wind and nuclear energy and abundant raw materials such as water, carbon dioxide, nitrogen. In addition, the future production of fuels and chemicals from these non-fossil sources must be carried out with minimal impact on our environment. These are the considerations guiding the fundamental research efforts of the Coordination Chemistry Group. These efforts can be broadly divided into three areas. One is the development of catalysts for the interconversion of electrical energy and chemical energy.

A second area is the development of new materials, specifically carbon nanotubes, which can improve the efficiencies of fuel cells, photoelectrochemical cells, and other energy conversion devices. The third area involves green chemistry, or the ability to produce the chemicals we need in our daily lives with a minimal impact on the environment in terms of waste solvents and materials.

Non-fossil sources of energy include hydroelectric, solar, wind, nuclear, geothermal, and biomass. Although biomass can produce some of the fuels that will be needed in the future, this source of energy and materials is competitive with needs for agricultural and will only be able to supply a fraction of our future fuel and chemical needs. The other non-fossil energy sources all produce electricity and not fuels or chemicals as their primary product. As a consequence, this energy is not easily stored and results in a temporal mismatch between energy production and energy demand. Although batteries could in principle meet this storage requirement, the materials used in their construction and their energy densities will preclude their use on the scale required to replace fossil fuels. Scientific advances in the storage of electrical energy as chemical energy will be required to achieve energy storage on the enormous scales necessary to meet the demands of our modern society. This will necessitate the development of new catalysts for the electrochemical reduction of abundant small molecules such as CO_2 , H_2O , N_2 , *etc.* to form H_2 , CH_3OH , CH_4 , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, and NH_3 with the concomitant production of O_2 . It will also be necessary to reconvert this stored chemical energy back to electricity upon demand. It is these considerations that lead to the focus of several of the efforts of the coordination chemistry group (Tanaka, Kawaguchi, Nagata) on the development of molecular catalysts for the inter-conversion of small molecules and electrical energy. These reactions all require the development of new, highly efficient, and inexpensive catalysts that do not currently exist.

In addition to new catalyst development, efficient energy production and storage will require the development of new materials for fuel cells, solar cells, batteries, photoelectrochemical cells, and other devices. A limiting feature of many of these devices is the inability to control the transport of electrons and protons over nanometer to micrometer distances while interfacing these materials with the molecular scales of catalysts and the macroscopic scales required for device applications. The ability to control the structures, dimensions, and relative orientations of carbon nanotubes will play an important role in the development of superior electron transport properties in many energy conversion devices. The use of new fundamental synthetic approaches for precisely controlling the geometry and electronic properties of bucky bowls and ultimately carbon nanotubes is the focus of the research of Associate Professor Hidehiro Sakurai.

The ability to carry out chemical transformations efficiently (both in terms of energy and materials) will also play an important role in meeting the future needs for producing the chemicals without adversely impacting the environment. Ideally it is desirable to perform chemical reactions using either no solvent or an environmentally benign solvent such as water with very high selectivities and control of stereochemistry. The development of such processes is the focus of the research of Professor Yasuhiro Uozumi.

The independent and very distinct research efforts of the members of the Coordination Chemistry Group of the Institute for Molecular Science are complementary and their combined success will play an important role in providing the fundamental science required for a more energy secure and environmentally friendly future.

Discussions of Individual Research Efforts

Professor Koji Tanaka

Professor Koji Tanaka is the Director of the Coordination Chemistry Laboratory at IMS. His research focuses on the development of molecular catalysts for the reversible conversion between electrical energy and chemical energy. In particular, his work has focused on the development of molecular electrocatalysts for CO_2 reduction, methanol oxidation, and water oxidation. He has made insightful

contributions that have earned him international recognition in each of these areas. He is widely published in top quality journals of the American Chemical Society, leading European journals such as *Angewandte Chemie* and others, as well as Japanese journals. He has received numerous invitations to present his work at various national and international meetings as a result.

Professor Tanaka is one of the most original and innovative chemists in molecular catalysis. A distinguishing feature of his work is the use of ligands of various types to assist or participate in the chemical transformations of various substrates. For example, in his development of water oxidation catalysts, catecholate or dioxolene ligands were incorporated as an integral part of the catalyst design. The ability of these ligands to undergo redox reactions separate from those occurring on the metal underlies much of the unique chemistry observed for his catalysts. Professor Tanaka was the first to recognize and demonstrate the important role such ligands could play in water oxidation catalysts. Water oxidation/O₂ reduction catalysis is an extremely active area of research at the present time, because this half-reaction is involved in all fuel production and fuel utilization schemes. Professor Tanaka's catalysts are certainly among the most effective and unique molecular catalysts currently known. His work will certainly form the basis of much future work by many other research groups - the best criterion by which to judge the importance of research contributions.

Professor Tanaka is also successfully using a similar approach for developing catalysts for methanol oxidation. Again the inclusion of redox active dioxolene ligands plays an important role in the ability of these catalysts to function as alcohol oxidation catalysts. Understanding these catalysts will provide a strong basis for future development of methanol fuel cells.

Many molecular electrocatalysts for the electrochemical reduction of CO₂ have been reported, and some of them exhibit high activities and relatively low overpotentials. However, the products produced by the most active catalysts are either CO or formic acid (two electron reductions). The development of catalysts that can more completely reduce CO₂ to methanol is highly desirable. Professor Tanaka is currently engaged in an effort to develop catalysts that are capable of achieving such so-called "deep reductions." Once again he is using a novel approach in which a ligand is being used to carry out an extremely important role in the catalytic cycle. In this case the ligand possesses a functional unit that is similar to the biological hydride (H⁻) relay NADH. The role of this hydride donor ligand is to supply an intramolecular hydride source that can deliver a hydride ligand to coordinated CO. Although a CO reduction catalyst based on this approach has not been developed yet, the approach is novel, and given Professor Tanaka's past successes with other difficult catalytic processes, it certainly has an excellent chance of success. More importantly, his research is demonstrating the importance and generality of using ligands to play an active role in multi-proton and multi-electron processes that are required for efficient conversion between electrical energy and chemical energy (*i.e.* fuel production and utilization reactions).

Important collaborations have been sought out and developed with chemists Jim Muckerman and Etsuko Fujita at Brookhaven National Laboratory in the US. These collaborations provide access to fast kinetic experiments and theoretical capabilities. Because of Fujita's and Muckerman's interest in developing molecular catalysts for the reversible conversion between electrical energy and chemical energy using their respective strengths in fast kinetics and theory, this collaboration with Professor Tanaka, who excels at catalyst design, is very natural and productive.

Associate Professor Hiroyuki Kawaguchi

Associate Professor Kawaguchi's research focuses on the activation of small molecules such as N₂, CO, and CO₂ using early transition metals. In this research, efforts are being made to control the reactivity of the metal complexes (niobium, tantalum, and zirconium) by controlling the geometry of the complexes via ligand design. The ligands studied were either linear or tripodal tridentate phenoxide ligands. Impressive reactivity of these complexes with molecular nitrogen (N₂) has been observed in which the triple bond

of dinitrogen has been completely cleaved. Protonation and alkylation of the resulting nitrido ligands has also been observed. In addition, cycles of stoichiometric reactions for producing ammonia from N_2 and strong reducing agents followed by protonation have been demonstrated. These data clearly indicate that production of ammonia by these early transition metal complexes is feasible, but not catalytic.

Studies of low-valent ditantalum species resulted in intramolecular C–H and C–O bond cleavage reactions. In addition, an unprecedented coupling of six carbon monoxide ligands via C–C bond formation was observed upon the reaction of two low-valent ditantalum species with CO. Although the ligand resulting from the coupling of the six CO ligands has not yet been successfully removed from the metal, this result illustrates the ability of these low-valent early transition metal complexes to activate small molecules in new and exciting ways. In related chemistry, Zr complexes were used to demonstrate a cycle of stoichiometric reactions in which benzyl anions, two CO ligands, and H_2 were used to generate allene derivatives, again demonstrating the ability to activate and couple CO molecules as well as cleave the C–O triple bond. Finally the reduction of CO_2 to methane using triethylhydrosilane as the reductant has been demonstrated.

These results taken together demonstrate a remarkable ability of these low-valent early transition metal complexes containing triphenoxide based ligands to carry out the activation of a variety of small molecules. The observed reactions involve cleavage of extremely strong N–N and C–O triple bonds as well as remarkable and extensive C–C coupling reactions. These reactions are facilitated by the formation of strong M–O between the early transition metals and oxygen atoms, which require the use of highly energetic reagents to achieve cycle processes. Future studies will involve mechanistic studies that will provide additional insights on how these very interesting transformations occur, and hopefully lead to truly catalytic processes in which the unusual ability to cleave the strong triple bonds of CO and N_2 are preserved, but that do not require high energy reagents currently used to achieve a cyclic process.

Frequent publications of the research results outlined above in a variety of first tier ACS journals and European journals is consistent with an excellent research program that is very competitive with other international research programs on activation of small molecules using early transition metal complexes.

Associate Professor Toshi Nagata

Associate Professor Nagata's research is ambitious in that it seeks to reproduce photosynthesis using artificial molecules. Such a project requires multiple activities, and he has focused on two. The light-harvesting portion of his research involves the study of dendrimers with Zn porphyrins at the core and with quinone molecules attached to the branches of successive generations of dendritic molecules. The purpose of this research is to provide a mechanism for matching catalytic rates for redox reactions such as water oxidation, which are relatively slow reactions, with the rates of the photon adsorption, charge separation, and recombination which are much faster than the catalytic reaction. The quinone molecules attached to the dendrimer are expected to function as a pool for accepting and releasing multiple electrons. This is a novel approach to matching the reactivity of catalyst and light harvesting components. In a first step towards realizing this goal, the photoreduction of the quinone pool to hydroquinones by irradiation of the zinc porphyrin/quinone dendrimer ensemble using thiophenol as a sacrificial electron donor has been demonstrated.

The next step in the construction of this photosynthetic ensemble is to couple the quinone pool to a redox catalyst. Efforts are underway to develop highly active water oxidation catalysts that mimic the structure and function of the oxygen-evolving complex (OEC), the enzyme that catalyzes H_2O oxidation in natural photosynthetic systems. To achieve this goal, a pre-organized ligand

template has been synthesized that is designed to position three Mn centers in an arrangement like that observed in the OEC. This result has been achieved using Fe as the metal rather than Mn. This result is in contrast to previous efforts in other laboratories that use two positioned carboxylate ligands and self-assembly in attempts to mimic the structure and function of the OEC. Future research will explore the incorporation of Mn and the addition of a fourth Mn center in an asymmetric position to mimic the structure and hopefully the function of the OEC.

The effort to achieve a fully functional artificial photosynthetic system is a daunting task that will require the careful design and assembly of a multi-component system in which a large number of functional components will have to be very carefully arranged in space and matched in energy. Although this research is ambitious, the structures of the individual components are well conceived, and the approach to the assembly of these components is an original and interesting one. The publication record is consistent with an active research program for this young researcher.

Associate Professor Hidehiro Sakurai

Associate Professor Sakurai's work is focused in two main areas: (1) the development of highly efficient and selective synthetic routes to buckybowl (curved fragments of buckyballs, C_{60}), and (2) the exploration of gold nanoclusters as catalysts for organic transformations. In the first area, new and very elegant synthetic methods have been developed for the synthesis of sumanene and the homochiral trimethyl substituted sumanene. This synthetic methodology has required some very significant advances including the cyclotrimerization of chiral haloalkenes by Pd nanoclusters, the use of tandem ring opening and ring closing metathesis reactions, and low temperature electrolytic oxidation in the last step of sumanene synthesis. These studies have permitted the inversion barrier of sumanene (flipping from one bowl form to another) to be determined (21 kcal/mol). This elegant synthetic approach to sumanene derivatives forms a strong basis for the more long term goals of constructing larger bowls, bowls with precisely placed heteroatoms, and ultimately the controlled synthesis of high purity carbon nanotubes with specific structures. Such materials are not currently available, but would be of much interest for their potential use in a broad range of applications.

The second area of research under investigation is the use of poly(vinylpyrrolidone) stabilized Au nanoclusters as quasi-homogeneous catalysts in organic transformations. In this area an interesting size dependence has been observed for the catalytic aerobic oxidation of alcohols. These reactions also exhibit surprising structural specificity and selectivity that is very similar to that of molecular or homogeneous catalysts. This is unusual for what appears to be a surface catalyzed reaction. These unusual selectivity patterns suggest that the very small nanoparticles with diameters of 1–2 nm, the catalytic sites resemble those of single site molecular catalysts. Traditionally, synthetic organic chemists have not explored the utility of nano-catalysts in detail. These studies suggest that there may be much to be learned in the area of catalyzed organic transformations using metal nanoparticles and that both size and surface treatment will play an important role in catalyst performance.

This is a robust and active program in both areas under investigation. Numerous publications in *Science*, *JACS*, and other international journals reflect well on both the productivity and quality of the work being done. Overall the work is very creative and competitive at the international level.

Professor Yasuhiro Uozumi

The focus of this program is on green chemistry. In particular, Professor Uozumi's research deals with the development of heterogeneous catalysts for organic reactions that function in water with high efficiency and selectivity. One highly successful

approach to this goal has been the attachment of homogeneous metal complexes of Pd and Rh to supported phosphine ligands bound to poly(ethyleneglycol) (PEG) modified polystyrene (PS) particles (PEG-PS). This design allows for the formation of an amphiphilic region produced by the PEG region that is compatible with both water and organic substrates and a hydrophobic pocket formed by the metal complexes. This hydrophobic region provides a microreactor within the bulk aqueous phase that results in high local concentrations of organic reagents that facilitate the catalytic reaction. Using these PEG-PS beads modified with Pd and Rh phosphine complexes, a variety of known organic transformations that are normally conducted in organic solvents can be carried out in an aqueous solution, eliminating the need for an organic solvent. This method also results in a number of other significant advantages. Among these are the ability to easily recover the catalyst by simple filtration and to reuse the catalyst many times. It also results in the ability to use combinatorial methods for both catalyst development and for combinatorial screening of reactions for a large range of reagents. This method has been extended to the synthesis of chiral compounds with both high yields and high selectivities. Overall, this is an extremely powerful tool for achieving cleaner and safer organic reactions. Professor Ouzumi's work in this area has been recognized by his being awarded the Ministerial Award for Green Sustainable Chemistry and the Japan Chemical Society Award for Creative Research.

More recent work in collaboration with Dr. Yoichi Yamada involves the extension of the heterogenizing of homogeneous catalysts to the formation of catalytic membranes in microchannel reactors. Such approaches can have many advantages, such as much shorter reaction times and the facile separation of products.

In summary, Professor Ouzumi has made a substantial contribution in the area of 'green' chemistry that has resulted in publications in high quality journals and earned him international recognition in this area. These recognitions and accomplishments are a reflection of the high quality and productivity of his research group.

Summary

The overall quality of the research programs of the Coordination Chemistry Group of the Institute for Molecular Science is excellent. The research covers a broad range of activities in the molecular sciences and is fundamental in nature. The scientific focus of these research projects suggest that they will contribute to improvements in energy production without emissions of greenhouse gases and to more environmentally benign methods for producing the materials that we need in our daily lives.

訳文

分子科学研究所錯体分子科学研究領域に関する報告 (2007 年 9 月 10 日)

パシフィックノースウエスト国立研究所
基礎科学総本部
ダン・ドゥボア

活動についての概説

2007 年 9 月 10 日に実施した, 分子科学研究所錯体化学領域の点検評価に関する報告を述べる。対象研究は田中晃二教授, 魚住泰広教授, 櫻井英博准教授, 川口博之准教授, 永田央准教授によって推進されている内容である。全

ての研究は非常に基礎的研究であるが、同時に、現代社会におけるハイクオリティな生活を保つために必要な、持続的かつ環境調和的なエネルギー／物質生産の達成のための基礎科学を提供することにも焦点が向けられている。

現在、エネルギーや多くの有用物質（化成品）の生産は、石油、天然ガス、石炭といった化石エネルギー埋蔵量に依存している。大気中の二酸化炭素（グリーンハウスガス）濃度を増加させることなく、人類が将来必要とするエネルギー／物質生産のためには、太陽光や、風力、核エネルギー、または豊富に存在する水、二酸化炭素、窒素などの非化石原料からの、燃料や化成品の生産手法についてさらなる知識の進展が求められるであろう。さらに、将来における非化石原料からの燃料・化成品生産では、環境に対する負荷を最小限にすることが求められる。こうした観点を根本的な方向性として、錯体化学領域における研究は進められている。それは3分野に大別される。第1の分野は電気エネルギーと化学エネルギーの相互変換のための触媒開発である。第2の分野は新素材、とりわけカーボンナノチューブの開発である。カーボンナノチューブは燃料電池、光電気化学電池、他のエネルギー変換デバイスの効率性を向上させることができる。第3の分野はグリーンケミストリーに関することで、すなわち廃棄物（溶媒、化合物など）による環境に対する影響を最小限にしながら、日常生活に必要な化合物を生産する手法の開発に関する研究である。

非化石エネルギー源とは、水力発電、太陽光、風力、核、地熱、およびバイオマスを指す。バイオマスは相応量の燃料の生産は可能になるだろうが、バイオマス燃料源の多くは農産物としても必要であり、また供給できる燃料や化合物は必要量のごく一部にすぎないと考えられる。他の非化石エネルギー源は全て、一次生産物としては燃料や化合物ではなく電力を生産する。その結果、エネルギー貯蓄は容易ではなく、エネルギーの生産と需要との間に一時的なミスマッチを引き起こす。もちろん電池はこのエネルギー貯蓄の必要条件是満たしているものの、電池に用いられる材料やエネルギーの量を考えると、化石燃料を全て置き換えるほどのスケールで使用することはできないであろう。科学の発展によって電気エネルギーを化学エネルギーとして貯蓄することができるようになれば、現代社会の要求量を満たすだけの莫大なエネルギーを貯蓄することができるようになると思われる。これには、電気化学還元によって CO_2 、 H_2O 、 N_2 などの無尽蔵な小分子から H_2 、 CH_3OH 、 CH_4 、 $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ 、 NH_3 、それと同時に O_2 を合成する新しい触媒の開発が必要である。また同時に、このように貯蓄された化学エネルギーを需要に応じて再び電気エネルギーに再変換することも必要である。これらの検討については、錯体化学領域のいくつかのグループ（田中G、川口G、永田G）によって小分子と電気エネルギーの相互変換のための分子触媒の開発に関して精力的に研究されている。これらの反応には全て、現在知られていない新しい、高効率でかつ安価な触媒の開発が求められている。

新触媒の開発だけではなく、効率的なエネルギー生産と貯蓄には、燃料電池、太陽電池、電池、光電気化学電池、あるいは他のデバイスのための新材料の開発も求められる。これらのデバイスの多くは、ナノメートルを超えマイクロメートルにまでいたる距離では、電子／ホール伝導制御が不可能であるという限界を抱えている。それは分子スケールの触媒とデバイス応用に要求されるマクロスコピックなスケールとの界面の問題である。カーボンナノチューブの構造、次元、相対配向制御を実現することは、多くのエネルギー変換デバイスの電気伝導性の向上にとって大きな役割を果たすこととなる。新たな基本的な合成手法によって、バッキーボール、そして最終的にはカーボンナノチューブの構造や電子的性質を精密制御しようというアプローチは櫻井英博准教授によって行われている。

効率的な化学変換（エネルギー、物質いずれの場合においても）を可能にすることもまた、将来環境に悪影響を与えずに化合物を生産する要求を満たす上で重要な役割を果たすであろう。理想的には、無溶媒、あるいは水などの環境調和型の溶媒を用いて化学反応を行い、なお且つ高い選択性立体制御が実現することが望ましい。このような手法の開発に関しては魚住泰広教授が中心に研究を行っている。

分子科学研究所錯体化学領域のメンバーによって各々独立かつ独自に進められている研究は相補的であり、その結

集した成果は、さらなるエネルギーの確保や環境調和が求められる将来のための基礎科学を提供するうえで重要な役割を果たすであろう。

各研究成果に関する議論

田中晃二教授

田中晃二教授は、分子研錯体化学領域の主幹である。研究内容は電気エネルギーと化学エネルギー間の可逆的変換のための分子触媒の開発である。特に、CO₂還元、メタノール酸化、水酸化に対する電気化学的分子触媒の開発が中心である。田中教授はこれらの各々の分野において、洞察力に富んだ結果を残しており、既に国際的に認知されている。日本のジャーナルのみならず、アメリカ化学会のいくつかのトップジャーナル、*Angewandte Chemie* などのヨーロッパの先導的ジャーナルなどに数多く論文を報告している。その結果、国内外の学会から数多くの講演の招待を受けている。

田中教授は分子触媒の分野において、最も独創的かつ革新的な化学者の一人である。特筆すべき成果として、様々な基質の化学変換の補助的役割をする、あるいは化学変換に直接関与する多種多様な配位子の利用法を挙げることができる。例えば、水酸化触媒においては、カテコラート、ジオキソレン配位子が触媒設計において不可欠である。これらの配位子が持つ、金属上で起こるレドックス反応を切り離す能力が、彼の触媒で観測されるユニークな化学の多くの根底となっている。田中教授は、水酸化触媒においてこれらの配位子が重要な役割を果たすことを初めて認識し、立証した。水酸化/酸素還元触媒は、この半反応が全ての燃料生成と燃料利用スキームに含まれているために、現在極めて精力的に研究が行われている分野である。田中教授の触媒は現在知られている触媒の中でも、明らかに最も効率的かつ独創的な分子触媒の一つである。田中教授の成果は間違いなく、今後進められる他の研究グループの仕事の基礎——すなわち研究寄与の重要性を判断する上での最も良い基準——となるであろう。

さらに、田中教授は同様の手法によりメタノール酸化触媒の開発に成功している。ここでも同様にレドックス活性なジオキソレン配位子を導入することが鍵となり、アルコール酸化触媒活性を発現している。これらの触媒を理解することが、将来のメタノール燃料電池開発の非常に大きな基礎となっている。

二酸化炭素の電気化学還元触媒に関しては多くの報告例があり、その中には高い活性と比較的低い過電圧を示すものも報告されている。しかしながら、最も高活性を示す触媒による生成物は、一酸化炭素かギ酸（2電子還元）である。二酸化炭素をメタノールまで完全還元する触媒の開発が求められている。田中教授は現在、いわゆる「deep reduction」を可能にする触媒の開発に専心している。ここでも彼は新しいアプローチ、すなわち触媒サイクルにおいて極めて重要な役割を果たすような配位子の開発、を推進している。今回は、配位子内に生体内反応におけるヒドリド中継分子である NADH と同様な官能基を導入している。このヒドリド供与配位子は、分子内反応によってヒドリドを配位子上から金属上に配位している一酸化炭素へ供給する役割を果たす。このようなアプローチに基づく CO 還元触媒はこれまで開発されたことがないが、斬新であり、これまで田中教授によって行われてきた他の困難な触媒開発の成功過程を鑑みると、間違いなく成功の可能性が高い。より重要なのは、配位子に多プロトン、多電子過程に重要な役割を与えるという考え方が、重要かつ普遍的であることが示されている点にある。これらの多プロトン、多電子過程は、電気エネルギーと化学エネルギー間の変換（燃料生成/利用）において効率的におこることが求められている。

アメリカブルックヘイブン国立研究所の Jim Muckerman と Etsuko Fujita と重要な共同研究が行われ、成果をあげている。共同研究によって、高速速度論実験や理論研究が行われている。Fujita と Muckerman の関心は、彼らがそれぞれ得意としているこれら高速速度論実験や理論計算を用いた、電気エネルギーと化学エネルギー間の可逆的変換のた

めの分子触媒の開発にあるので、触媒デザインに秀でた田中教授との共同研究は極めて自然な流れであり、プロダクティブである。

川口博之准教授

川口准教授は、前周期遷移金属を用いた N_2 、 CO 、 CO_2 などの小分子の活性化に関する研究を行っている。配位子のデザインにより構造制御を行うことで、金属錯体（ニオブ、タンタル、ジルコニウム）の反応性を制御している。ここで用いられている配位子は、直線状あるいは三脚型のフェノキシ配位子である。これらの錯体は分子状窒素に対して特筆すべき反応性を示し、窒素 - 窒素 3 重結合が完全に切断される。また生じたニトリド配位子に対するプロトン化やアルキル化なども観測されている。さらに、強還元剤とそれに続くプロトン化反応によって、分子状窒素からアンモニアへの化学量論的な反応サイクルが実現している。これらのデータは、触媒的ではないものの、前周期遷移金属錯体を用いたアンモニア合成が可能であることを明確に示している。

低原子価タンタル二核錯体を用いた研究では、分子内 $C-H$ 、 $C-O$ 結合の切断反応が見いだされている。また、2 分子のタンタル二核錯体と一酸化炭素との反応においては、 $C-C$ 結合の生成を伴って 6 分子の一酸化炭素がカップリングするという予期せぬ反応が観測されている。この 6 分子の CO の反応で生成した配位子はまだ金属から取り出すことには成功していないものの、この結果は、これらの低原子価前周期遷移金属錯体が新奇かつ驚くべき様式で小分子の活性化を行うことができることを示している。以上に関連した化学として、ジルコニウム錯体によって、ベンジルアニオン、2 分子の CO 、および H_2 から、アレン誘導体を生成するという化学量論的な反応サイクルも報告されている。この反応では、先の反応と同様 CO が活性化されてカップリングすると同時に炭素 - 酸素 3 重結合も切断されている。また最後に、トリエチルヒドロシランを還元剤として用い、二酸化炭素からメタンを生成する反応も示されている。

以上の結果は全て、トリフェノキシドを基盤とする配位子を有する低原子価前周期遷移金属錯体が、様々な小分子の活性化に対して極めて高い活性を有していることを示している。観測された反応には、極めて強固な化学結合である窒素 - 窒素 3 重結合や、炭素 - 酸素 3 重結合の切断や、また驚くべきかつ多数の炭素 - 炭素結合生成反応などが含まれている。これらの反応は前周期金属と酸素間の強固な結合の生成によって促進されており、サイクルプロセスを実現するには高活性な試薬を必要とする。今後反応機構に関する研究が行われ、どのようにしてこれらの興味深い変換反応が進行しているかについての更なる知見が得られるであろう。そして、この強固な CO や N_2 の 3 重結合が切断されるという異常な反応性を損なわずに、かつ現在の触媒サイクルで使われているような高活性な試薬を用いることなく、真の触媒反応が実現することが期待される。

前周期遷移金属錯体を用いた小分子の活性化に関する研究は、国際的にも様々な研究が行われている激しい競争分野であるが、その中で、以上に示した結果は既に論文としてアメリカ化学会のいくつかのトップジャーナルや、ヨーロッパのジャーナルに数多く報告されていることは、本研究が秀逸であることを物語っている。

永田央准教授

永田准教授の研究は、人工的な分子を用いて光合成を再現しようとする野心的な内容である。このような研究の場合、多くの取り組みが必要であるが、彼はそのうち 2 点に焦点を絞って検討してきた。集光部位に関する研究では、亜鉛ポルフィリンをコアに有し、ブランチ部にあたるデンドロンの各世代にキノン分子を導入したデンドリマーについて検討を行っている。この研究の目的は、水酸化などのレドックス反応における反応速度にちょうどマッチした機構を実現することにある。このようなレドックス反応は、触媒反応よりも遥かに早い反応である光子吸収、電荷分離、

電荷再結合などに比べ、比較的遅い反応である。デンドリマーに導入されたキノン部位は多電子授受のプールとしての役割が期待される。これは触媒と集光部位との反応性を一致させる方法論として新しいアプローチである。このゴールを実現する第一歩として、チオフェノールを犠牲電子供与体として用いた、亜鉛ポルフィリン/キノンデンドリマー集合体の光励起による、キノンプール部位のヒドロキノンへの光還元反応が行われている。

この光合成集合体構築の次の段階は、キノンプールをレドックス触媒につなげることである。実際の光合成系において水酸化を触媒する酵素の酸素発生中心(OEC)に構造と機能を模倣した、高活性な水酸化触媒の開発が進行中である。OECで観測されているような配置で、3つのマンガン中心が位置するようにデザインされた、配位子のテンプレートをあらかじめ合成した。現段階ではマンガンではなく鉄を金属として用いている。これまで他の研究室によってカルボキシラートを二カ所有する配位子を用いて自己組織化するという手法でOECの構造や機能の再現が試みられてきたが、今回の試みはそれらの結果とは対照的である。OECの構造や、願わくは機能を再現できるように、今後は、実際に中心金属にマンガンを用い、さらに4番目のマンガン中心を不斉の位置に導入した系が検討されることになっている。

完全な人工光合成系を実現することは困難であり、数多くの機能部位が空間的にもエネルギー的にもマッチした形で非常に注意深く配置されていなくてはならないことから、これらの注意深いデザインと組織化が求められる。本研究は野心的であるが、個々の部位の構造はよく考えられており、各部位の組織化に対するアプローチは独創的で興味深いものである。論文発表状況は若い研究者の活発な研究に相応なものである。

櫻井英博准教授

櫻井准教授の研究は以下の二分野に大別される。 バッキーボウル(C₆₀などのバッキーボールの非平面部分構造)の高効率かつ選択的合成手法の開発、有機変換反応触媒としての金ナノクラスターに関する研究。第1の研究においては、スマネンおよびホモキラルなトリメチル置換スマネンの、新規でエレガントな合成手法が開発されている。本合成手法は、Pdナノクラスターによるキラルハロアルケンの環化三量化反応、タンデム開環/閉環メタセシス反応、スマネン合成の最終段階における低温での電解酸化反応など、いくつかの重要な進展のもとに成り立っている。この研究によってスマネンの反転障壁(片方のボウル構造から他方のボウル構造へのフリッピング)を決定することができた(21 kcal/mol)。このスマネン誘導体へのエレガントな合成アプローチは、長期的目標である、より大きなボウルの合成、ヘテロ原子を精密に導入したボウルの合成、そして究極的には単一構造を有する高純度カーボンナノチューブの選択的合成に至るまでの全ての手法の根幹となるものである。これらの物質は未だ入手不可能であるものの、広範囲の応用に活用されることが期待される。

第2の現在進行中の研究内容は、ポリビニルピロリドンで安定化された金ナノクラスターの擬均一系触媒としての有機合成反応への利用である。ここでは、アルコールの触媒的空気酸化反応において興味深いサイズ依存性が観測されている。また、これらの反応では分子触媒や均一系触媒に酷似した驚くべき構造特異性、選択性が発現している。これは表面触媒反応ではあまり見られないことである。このような異常な選択性の発現は、直径1-2 nm程度の非常に小さなナノ粒子における触媒サイトは、シングルサイトである分子触媒と類似していることを示唆している。これまで有機合成化学者はナノ触媒の活用についてあまり深く追求してこなかった。以上の研究は、金属ナノ粒子を用いた触媒的有機合成反応研究には多くの課題が残されており、またサイズと表面処理が共に触媒活性に重要な役割を示すことを示唆している。

現在進行中のいずれの研究もしっかりとしており活発に行われている。多くの論文がすでにサイエンスやJACS,

他の国際ジャーナルに発表されており、これは本研究のプロダクティビティとクオリティをよく反映している。総合的に、本研究は非常に創造的で、国際的に競争力のある内容である。

魚住泰広教授

本研究の中心はグリーンケミストリーである。特に、魚住教授の研究では水中で機能しかつ高い活性と選択性を示す不均一系有機反応触媒の開発が行われている。この目標に対する非常に成功した例として、ポリエチレングリコール (PEG) 修飾ポリスチレン (PS) 粒子 (PS-PEG) に結合した担持型リン配位子を用いた Pd や Rh の均一系金属錯体の導入が挙げられる。この設計によって、水と有機基質双方に親和性の高い PEG によってもたらされる両親媒性部位が生成し、金属錯体付近には疎水性ポケットが生じる。この疎水性部位が巨大な水相の中でマイクロリアクターとしての役割を果たし、結果として有機試薬が局所的に高濃度で濃縮され、触媒反応が促進されることになる。これら Pd や Rh のリン錯体で修飾された PEG-PS ビーズを用いることで、通常有機溶媒中で行われる多くの反応が水中で行うことができ、有機溶媒を使用する必要がない。本手法は他にも多くの重要な進歩をもたらしている。例えば、触媒が単なる過操作だけで簡単に除去することができ、また何度も再利用することができる。また、コンビナトリアル手法にも利用することができ、触媒開発においても、また広範囲の試薬を用いた反応のスクリーニングにおいても、本触媒によるコンビナトリアル手法を用いることができる。本手法は、キラル化合物の合成にも用いられており、高収率、高選択性を実現している。総じて、本手法は有機反応をよりきれいに、より安全に行うための極めてパワフルなツールであるといえる。この分野における魚住教授の業績に対して、グリーンサステナブルケミストリー文部科学大臣賞、日本化学会学術賞が授与されている。

山田陽一博士との最近の共同研究においては、均一系触媒の不均一化へと研究を展開し、マイクロチャンネルリアクター中での触媒膜の生成についての検討を行っている。このようなアプローチには、反応時間の短縮や、生成物の容易な分離など、多くの利点がある。

結論として、魚住教授は「グリーン」ケミストリーの分野において多大な貢献を果たしてきており、その結果、高クオリティのジャーナルへの論文発表が行われており、またこの分野において国際的に高く認知されている。このような認知と業績は、彼の研究グループの高いクオリティとプロダクティビティを反映している。

総括

分子科学研究所錯体化学領域の研究内容の全体的なクオリティは素晴らしいものがある。分子科学の広範囲の領域を網羅しており、また基礎的である。各研究プロジェクトの注目点から判断すると、これらのプロジェクトは、グリーンハウスガスを排出せずにエネルギーを生産するための進歩や、日常生活に必要な物質の生産におけるより環境調和的手法に、貢献するものと思われる。

7-4-4 国外委員の評価 (生命分子科学分野)

原文

General Comments about the Institute for Integrative Bioscience
and Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science

The IMS is internationally regarded as a center of excellence in the physical and molecular sciences. It is perhaps less well known

in the areas of biomolecular research than in the physical sciences and it is therefore worth considering what might be done to enhance the reputation and impact of IMS in the biosciences.

Current Trends in Biomolecular Research

The current trend in the US is to encourage collaborative interactions between scientists to promote cross-disciplinary research, to develop new technologies, and to create new research directions. Both the National Science Foundation and the National Institutes of Health have evolved funding mechanisms to support and promote such collaborative research efforts. The NIH Roadmap, for example, aims to create new organizational models to stimulate interdisciplinary research and foster an integrated approach to advance our understanding of complex biomolecular and biological systems. Disciplines that have been identified as central to this effort include chemistry, structural biology, computational biology, molecular and cellular imaging, and nanotechnology. Much effort is being made, especially in research institutes, to create cohesive research programs that cross disciplines. Many institutions also strive to achieve critical mass in key research areas, emphasizing recruitment of scientists who bring different techniques to bear on related research problems. This strategy helps to increase the visibility and impact of an institution.

Impact of the IMS in Biomolecular Science

The research performed by the laboratories that I visited in the Institute for Integrative Bioscience and the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science is uniformly outstanding. The individual laboratories are extremely well equipped with state of the art instrumentation and each group is making important and highly influential contributions in its own specialized field. However, the overall research program lacks cohesion and the individual laboratories largely work on unrelated projects. As a result, the overall impact of the IMS in the area of the biosciences is essentially the sum of the impact of each individual group. Increased focus and collaboration between groups would greatly increase the visibility of the IMS in this area, leveraging the current research effort so that the overall impact is much greater than the sum of its parts. All of the disciplines identified as central to the NIH Roadmap (chemistry, structural biology, computation and molecular simulation, molecular and cellular imaging, and nanotechnology) are well represented in the IMS, but there currently appears to be little communication or collaboration across disciplines. The potential already exists within the IMS, and the key technologies and resources are already in place, to make significant interdisciplinary advances in bioscience, provided that collaborative interactions between research groups can be promoted and financially supported.

While the laboratory facilities and instrumentation available to each research group are outstanding and the scientific staff are performing highly original and innovative research, many laboratories currently lack a critical mass of research personnel. The scientific output and reputation of IMS as an international center of excellence in molecular science could be greatly enhanced by increasing the number of junior scientists, postdoctoral fellows, and graduate students in the research programs. If there is a shortage of Japanese postdoctoral research associates, then it is important to look to other countries, especially other Asian countries, to recruit highly qualified postdoctoral researchers. Recruitment of additional postdoctoral fellows to IMS would greatly benefit individual research programs, would help bring in new ideas, and could provide a mechanism to enhance interdisciplinary collaborations. A second concern is the small number of graduate students at IMS. I gained the impression from my discussions that it is very difficult to recruit outstanding graduate students to IMS, in part because they tend to join the graduate schools at the universities from which

they receive their undergraduate degrees. A possible solution to this dilemma might be to increase the visibility of IMS in undergraduate institutions by establishing an outreach program. This might take the form of presentations at undergraduate colleges about the exciting science at IMS or introduction of a program in which senior undergraduate students are offered an opportunity to work in laboratories at IMS during the summer. Such undergraduate internships are common in US universities and research institutes.

Finally, it is important to consider how the reputation and impact of the IMS in the area of biosciences can be enhanced in future years. IMS is fortunate to have a nucleus of outstanding faculty whose research in the biosciences is at the highest level and who are achieving international recognition for their work. The recent addition of Professors Kuwajima and Kato to the biosciences program will go a long way towards increasing the visibility and impact of IMS in this field. Priority should be given to recruiting additional research groups working in complementary areas. Research areas that would complement existing programs include protein misfolding and disease, mass spectrometry based proteomics, structural biology of membrane proteins or macromolecular machines, single molecule spectroscopy of biomolecules, and systems biology. Single molecule spectroscopy, in particular, would tie in well with IMS' existing strength in spectroscopy and laser technology and would help to promote interdisciplinary collaborations. However, all of the above fields are rapidly growing and any one of them would interface well with existing research programs at the IMS and would greatly enhance the visibility and impact of the Okazaki Institute for Integrative Bioscience and the Department of Life and Coordination Complex Molecular Science.

Peter E. Wright

Cecil H. and Ida M. Green Investigator

Professor and Chairman

Department of Molecular Biology

The Scripps Research Institute

訳文

岡崎統合バイオサイエンスセンターと生命・錯体分子科学研究領域に関する一般的コメント

分子科学研究所（IMS）は、物理科学や分子科学の研究領域において国際的にも中核的研究機関と見なされている。しかし、生命科学の研究領域においては、恐らく、物理科学研究領域におけるほど有名ではない。したがって、生命科学における IMS の評判や影響力を上げるために何ができるかを問うことは考慮に値する。

生体分子研究の現在の動向

米国の現在の動向は科学者間の共同研究による相互作用を促進することに向けられており、これによって、領域横断的な研究を促進し、新技術を開発し、新しい研究の方向性を創造することができる。米国国立科学財団（NSF）と国立衛生研究所（NIH）は、このような共同研究を支援し促進するための研究費補助制度を展開している。例えば、NIH のロードマップは、複雑な生体分子系や生物系の理解をより一層高めるために、学際的な研究を振興し、統合的アプローチを促進することができる新たな組織モデルの制定を目指している。このような取り組みの中心にあると見られる研究分野が、化学、構造生物学、コンピュータ生物学、分子細胞イメージング技術、ナノテクノロジーなどで

ある。領域を横断する分野融合的な研究プログラムを創出するために、多くの努力が特に研究所等においてなされている。さらに、多くの研究機関が、これらの鍵となる重要な研究分野を本格化するために努力しており、関連した研究上の問題の解決に向かう技術を持ったいろいろな科学者を採用すると強調している。かかる戦略は、研究機関の知名度と影響力の拡大に役立つ。

生体分子科学における IMS の影響力

今回訪問した統合バイオサイエンスセンターと生命・錯体分子科学研究領域の研究室で行われている研究は一様に傑出している。個々の研究室は最先端の研究設備で大変よく整備されており、各研究グループはそれぞれの専門分野において重要でかつ大きな影響力のある業績を上げている。しかし、全体の研究プログラムはつながりに欠いており、個々の研究室は大部分互いに無関係な研究を行っている。その結果、生命科学分野における IMS の全体的な影響力は、実質上個々の研究グループの影響力の総和となっている。グループ間の興味の焦点を合わせ共同研究を促進するならば、現在の研究上の努力によって各グループの総和をはるかに超える大きな影響力を実現し、この分野における IMS の知名度を大幅に上げることができるかもしれない。NIH ロードマップによって中心課題と認められた学問分野のすべて（化学、構造生物学、計算機分子シミュレーション、分子細胞イメージング、ナノテクノロジー）が IMS においては十分な地位を占めているが、現在のところ異なる分野間のコミュニケーションや共同研究はほとんどないように見える。生命科学における学際的な前進を遂げるための可能性が既に IMS には存在し、鍵となる技術や人的資源も既にあるので、研究グループ間の共同研究を促進し研究費援助を行うことによってこれを実現することができる。

各研究グループが利用できる実験室設備や装置は大変優れており、研究員達は創造性高い革新的な研究を行っている一方で、多くの研究室が現在必要最少限の研究人員数を欠いている。研究プログラム中の若手研究者、博士研究員、大学院生の数を拡大することにより、分子科学の国際的な中核拠点としての IMS の科学的研究成果や評判を大幅に増強できるかもしれない。日本人博士研究員が不足しているなら、他の国々、特に、他のアジア諸国に目を向け、有能な博士研究員を募集することが重要である。IMS がより多くの博士研究員を採用すれば、それは個々の研究プログラムに大変役立つとともに、新しい考えを持ち込むことができ、学際的な共同研究を増強するためのメカニズムを提供することになるであろう。もう一つの心配事は IMS では大学院生が少ないことである。私は今回の議論の中で以下の印象をもった。つまり、一部には、日本の大学生は自らが卒業した大学の大学院に進学する傾向があるという理由のため、極めて優秀な大学院生を IMS で獲得するのは大変困難であるということである。このジレンマの可能な解決策は、アウトリーチ・プログラムを開設することによって、学部をもつ大学機関における IMS の知名度を上げることがかもしれない。これは、IMS のエキサイティングな科学に関するプレゼンテーションを大学の学部で行う、あるいは、上級学部生が夏に IMS の研究室で研究に参加する機会が提供されるプログラムを導入するなどの形式をとるかもしれない。このような学部学生のインターンシップは米国の大学や研究所では一般的である。

最後に、今後将来、生命科学分野において IMS の評判と影響力をいかにして高めることができるかを考えることは重要である。幸い IMS は、生命科学において研究が最も高い水準にあり、研究に関して国際的な認知を得ている、大変優れた核となる教授陣を持っている。生命科学プログラムへ桑島教授と加藤教授を最近加えたことは、この分野における IMS の知名度と影響力を拡大するのに大いに役立つであろう。相補的な研究分野で研究している研究グループをさらに補充することを優先しなければならない。既存のプログラムに相補的な研究分野とは、蛋白質ミスフォール

ディングと疾病，質量分析法を利用したプロテオミクス，膜蛋白質や巨大分子機械の構造生物学，生体分子の一分子分光法，システム生物学などである。特に，一分子分光法は，IMS に既存の分光法やレーザー技術の強みとよく結びつき，学際的な共同研究を促進させるであろう。しかしながら，上記の分野はすべて急速に成長しており，それらのいずれであっても IMS の既存の研究プログラムとうまく結びつけ，岡崎統合バイオサイエンスセンターと生命・錯体分子科学研究領域の知名度と影響力を大幅に向上させるであろう。

ピーター E. ライト

Cecil H. and Ida M. Green Investigator

教授，部門長

分子生物学部門

スクリップス研究所

7-5 大学共同利用機関としての在り方

7-5-1 はじめに

分子研創設以来30年以上が経ち、その間における学問の発展状況を鑑みると共に共同利用研究体制の充実を目指して、2年有余に及び議論の後平成19年4月から大幅な組織再編を実行した。それと共に、国内における研究環境の変化、国立大学等の法人化、国の財政逼迫等々の状況から、大学共同利用機関のあり方及び分子研のあり方を改めて議論しておくことの必要性を強く感じ、所内のみならず運営会議等においても議論を行って頂いた。議論の背景には次の二つの状況がある：

- (1) 30年前に比べて大学における研究設備の充実が進み「分子研に来なくては研究が出来ない」と言うほどの状況ではなくなった。
- (2) 反面、最近の国の財政逼迫と共に、応用研究と短兵急な社会還元の要求、及び、技術的イノベーション重視の施策からくる基礎学術研究軽視の風潮。

かかる背景においても、いや、かかる状況にあるからこそ、世界的にも大変ユニークな日本の共同利用研究体制を守り発展させていくことは極めて重要であると考え¹⁾。また、国家100年の計にとって「学術と文化」が如何に重要であり、それなくしては日本の将来が危ないと言うことを強く訴えていく必要がある^{2,3)}。国の高等教育や学術研究への投資が先進国としては低すぎるのである。

大学共同利用機関としての役割には、施設共同利用機能の中核と頭脳共同利用機能の中核の二つがあると考え⁴⁾る。は大学の研究設備の充実が進んだ中においてもなおかつ重要な役割を担っていると考え⁴⁾る。研究設備の進歩は日進月歩であり、新しい中・大型設備を大学共同利用機関に集中配備し、全国の研究者の利用に供することは依然として極めて大事なことである。これと共に、「研究設備有効活用ネットワーク」の充実⁴⁾は焦眉の急であり、共同利用機関がその中核的役割を果たすことが肝要である。については、共同利用・共同研究の場を提供する拠点として最初に建設された京都大学基礎物理学研究所（湯川記念館）の理念が示すとおり、共同利用機関は、全国の最先端の研究者が一堂に会する梁山泊となり、独自の哲学を持って未踏分野を開拓し卓越した研究成果を上げて、分野をリードして行く役割を担う拠点となるべきである⁴⁾。

以上を踏まえて、分子研のあり方について所内の検討委員会や運営会議等で行われた議論が次節以降にまとめられている。

1)「新たな全国共同利用研究体制の確立に期待する」, 松尾研究会報, 財団法人 松尾学術振興財団, Vol.13 (2004).

2) 中村宏樹,「先進文化国家日本を築くために」(上、下), 中日新聞, 2007年11月1日, 2日, 夕刊.

3) 中村宏樹,「基礎学術研究とは?」, 中部経済新聞, 2006年12月18日,「国立大学等の法人化——日本の将来は大丈夫か?」, 中部経済新聞, 2007年2月5日.

4) 中村宏樹,「いい加減にしよう、西洋かぶれ」, 中部経済新聞, 2007年3月26日,「独創的科学と東洋哲学」, 中部経済新聞, 2007年5月14日.

(中村宏樹)

7-5-2 系と施設の在り方等の検討（特に大学共同利用機関として）

平成 17 年度に、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、そこで議論された内容を報告書の形でまとめたところである（分子研レポート 2005, p.340, 分子研レポート 2006, p.286, 分子研レターズ 53 (2006.3) p.14 参照）。今回、共同利用研としての在り方についてさらに突っ込んだ議論をするために、委員会を再開した。今回の委員会メンバーは以下の 8 人である。

青野重利（岡崎統合バイオサイエンスセンター教授，生命・錯体分子科学研究領域兼務）

魚住泰広（生命・錯体分子科学研究領域教授）

川口博之（生命・錯体分子科学研究領域准教授）

大森賢治（光分子科学研究領域教授，分子制御レーザー開発研究センター長）

小杉信博（光分子科学研究領域教授，極端紫外光研究施設長，委員会まとめ役）

中村敏和（物質分子科学研究領域准教授）

横山利彦（物質分子科学研究領域教授，分子スケールナノサイエンスセンター長）

斉藤真司（理論・計算分子科学研究領域教授，計算科学研究センター教授兼務）

前回，2 年前の 8 人のメンバーの内，松本吉泰教授と森田明弘助教授の 2 人は転出したため，横山利彦教授，斉藤真司教授に入れ替えを行った。また，2 年前の検討に従って行われた再編により所属が全員変更になっている。

平成 19 年 5 月，6 月にそれぞれ 2 時間以上の時間を掛けて議論した。その内容を報告書案としてまとめ，それを元に各研究領域，主幹施設長会議，教授会議，運営会議で議論を行い，最終的に平成 19 年 10 月に本報告書を所長に提出した。本報告書をベースに次年度，コミュニティの意見を聴取する予定である。

なお，自然科学研究機構等における分野間連携，国家基幹技術等への参画，産学連携などのように分子科学コミュニティを越えた新たな活動に関することについては今回の検討対象から除いた。

(1) 分子研の位置づけの変遷

30 年以上前，大学で不可能な研究を実現するため分子研が作られた。研究部門や施設に採用された初代の研究者達はそのことを強く意識しながら，機器センター，装置開発室，化学試料室などの研究支援組織を立ち上げるとともに，レーザーや磁気共鳴のような特徴ある中型機器に加えて大型施設としてスーパーコンピュータ，放射光源加速器を導入することで，分子科学の新展開に中心的役割を果たしてきた。新規分子物性の観点で物質開発にも力を入れてきた。分子科学分野の国際化にも顕著な貢献を果たしてきた。

分子研の際だった特徴は，研究者の内部昇格禁止の内規によって人事流動が活発に行われるために，広く大学に研究成果が流動し行きわたることである。少数精鋭を基本として研究グループを構成してきたのも研究者及び研究分野の流動性を意識したものであった。総合研究大学院大学での博士号取得者数においても分子研が担当する 2 専攻が目立っており，大学院生の流動化にも貢献してきた。このように大学との活発な交流によって，人がどんどん入れ替わることで，研究内容を見直し，絶えず新しい取り組みができるように工夫されてきた。また，人の入れ替わりがあっても共同利用に支障がないように技術職員がしっかり支える体制を構築してきた。同じ意識で事務支援体制も形成されてきた。

その後，大学における研究環境の改善によって，汎用機器は必ずしも分子研の機器を共同利用しなくても済む時代が到来した。そのような背景の中，分子研でも機器センター，化学試料室，極低温センターを発展的に分子制御レーザー

開発研究センターと分子物質開発研究センターに改組した。さらに岡崎共通研究施設として統合バイオサイエンスセンターを新設したり、分子物質開発研究センターをコアとして所内からナノサイエンスに関わる関連研究部門を分子スケールナノサイエンスセンターに一旦集約することにした。従来、研究施設の位置づけを大きく越えた組織が生み出された。ただし、分子スケールナノサイエンスセンターは、平成19年度に行った研究所組織の再編の際、従来の研究施設の位置づけに戻し、ナノサイエンス関連研究部門は4大研究領域に配置し直すことにした。それと同時に研究施設として機器センターを再び立ち上げることにした。この機器センターの復活は、法人化後、国立大学側で研究設備の維持更新が困難になっている状況を意識したものであり、現在、全国的に連携して研究設備の整備と共同利用を図る流れが構築されつつある。

(2) 分子研の今後の在り方

大学共同利用機関は大学と関係がなくなればその存在意義を失う。また、教育再生会議の第二次報告（平成19年6月1日）の提言4「国公立大学の連携により地方の大学教育を充実する」の中の4項目中の1項目に「国際競争力に勝ちうる大学共同利用機関への徹底的な支援を行う」とあるところからも、国際的にも各分野を先導するような研究教育を推進し、コミュニティに発信していく役目がこれまで以上に大学共同利用機関に期待されている。分子研が大学共同利用機関として分子科学コミュニティに貢献していくには、所内の研究者と所外の共同利用研究者の両面から以下の(A)(B)のバランスを考えることが特に重要である。

(A) 組織として国際的に分子科学研究を先導していくのはもちろんのこと、個人レベルでも真に独創的な研究を生み出すための特徴ある方策（大学等の若手研究者を抜擢して優れた基礎学術研究環境に置くなど）を打ち出していくこと。

(B) 分子研の研究成果を大学等に還元していくとともに、特徴ある研究設備を精査して組織的に整備し共同研究に供していくこと。

以下では(A)(B)の面から今後の在り方について議論したことを記す。ただし、分子研の場合には、活発な人事流動を通して所内と所外が入れ替わる、つまり(A)と(B)は密接に関係していることが前提条件になっていることを忘れてはならない。

所内研究について

1) 基礎学術研究を中心に新しい研究分野を創出していく。萌芽的研究を開花するまでじっくり育てることのできる環境整備を進める。失敗を恐れず新しい着想に基づいて未踏分野にチャレンジできる雰囲気にするには、短期的な成果を求めることがあってはいけない。分子研がその新分野のメッカであると国際的にも認知されるように研究者の意識を高めると共に組織としての取組みをも強化する。

2) 人事流動があっても揺るがないように、各研究領域を支える研究インフラを強固なものにする。

3) 4大研究領域はそれぞれ長期ビジョンを持って相互作用しながら新分野創成・人材育成に取り組む。個々の研究グループのことに加えて、これらのことに責任を果たせる教授の研究環境を整備・強化する。

4) 研究に集中できる環境にある准教授、助教の充実によって、優秀な若手の人材を登用し育成するチャンスを増やす。

共同利用について

- 1) 現在所有の大型研究設備であるスーパーコンピュータ，UVSOR-II 光源加速器，高磁場 NMR 装置は，世界的競争力が保てるうちに，更新・性能アップサイクルを十分検討し，長期プランに従って戦略的に強化し続ける。一度，優位的地位を失うと，再浮上することは難しくなるので，所内の関係者はタイミングを失することのないような長期責任体制の構築に努める。
- 2) 現在所有の中型機器等は，更新サイクルを十分検討し，長期プランに従って計画的に更新していく。研究所の予算配分方針として縦割りの研究環境整備から共通基盤的研究環境整備にシフトする。
- 3) 次世代を支える若手研究者や大学院生に対する研究支援を強力に推し進める。所内外の若手研究者が各組織の枠を越えて自然な形で将来の夢を語る場やブレインストーミングの場を作り出せるように環境作りに配慮する。分子研究会や所長招へい研究会の弾力的な運用により，各専門分野で年に一回程度の縦割りの研究会ばかりでなく，分野に限らず自由参加可能な国際的な分子科学研究者コミュニティの創成，活性化，交流などを頻繁に企画する。国際共同を含んだ共同利用研究の支援を拡大する。
- 4) 各研究施設の高度な利用技術や新規開発技術などの講習会を各施設で随時，企画できるようにする。大学の研究者の協力の下，基盤的な教育活動も推し進める。
- 5) 技術職員に対しては技術力向上を図り，絶えず，新しい技術にチャレンジできる環境に置く。

以上の各項目は全所的に実行に移すことが理想であるが，順次対応可能な研究領域（施設を含む）から組織的に手を付けていくことが望ましい。

8．研究施設の現状と将来計画

日本の学術研究行政においては依然として憂うべき状況が続いており、その速やかな改善が望まれるところであるが、研究成果の客観的評価、及び、研究や研究所の将来に亘る在り方についての議論等は常に重要な事業であることから、分子研においては第一期中期計画の終了を近い将来に迎えた今、前節でも述べた通り平成 19 年度において、研究所全体に亘る評価を実施した。一方、大学評価の活動が必要以上に拡大化・詳細化しだしており、研究者の評価疲れが深刻な事態になって来ている。これは、法人化の問題の一つの憂うべき現象であり、今後の改善が切に望まれる。

昨年度の分子研レポートで既に報告した通り、平成 19 年 4 月から分子研の組織を 4 領域に大幅に改編したが、各領域内に留まらず領域をまたがった連携が深まることを大いに期待しているところである。これらの期待を踏まえた上での、各施設の現状紹介と将来計画についての報告が以下に述べられている。

極端紫外光研究施設においては、小型で世界最高輝度を誇る施設としてトップアップ運転を目指した準備等々が進められている。また、研究面でも良い成果がいくつも出ている。ただ、将来の次世代光源開発については多々議論を重ねているところであるが、国の財政状況等のため将来の見通しは残念ながら立っていない。分子スケールナノサイエンスセンターにおいては、文科省の事業として再出発した「ナノテクノロジーネットワーク支援事業」の中部地区の拠点を分子研が担っており、他大学との連携で既に良い成果を上げつつある。また、920MHz NMR の更なる有効活用を目指して、固体試料を温度制御した形で測定できる様に技術開発を進める準備をすると共に、他大学と連携して「超高磁場固体 NMR を用いたバイオマテリアル・先端分子材料研究のための基盤技術開発と応用」の事業を概算要求することを計画している。分子制御レーザー開発研究センターにおいては、理研との「エクストリームフォトリクス」連携研究が順調に進行している。また、光分子科学領域内の協力、特に、極端紫外光研究施設との協力により、新しい光の発生など新分野の創出が期待される。将来、センターの更なる拡充をも行う予定である。機器センターは昨年度新たに発足したが、技術職員の集中的配属により、様々な機器の内外研究者による有効な活用を目指した活動が開始されている。また、何と言っても将来に亘る最も重要な活動は「化学系研究設備有効活用ネットワーク」の運用である。将来においては、分子研 1 機関による概算要求枠を越えた形での支援により、全国 72 の国立大学の研究者の基盤的研究が支えられるようにすべきである。装置開発室においては、本施設を特定した形での外部評価を実施し、多くの有意義なコメント等を頂いた。技術職員一人一人がしっかりとしたビジョンを持ちつつ、日々レベルアップに努力すると共に常に技術レベルの客観的なチェックを行うこと、非常勤職員や熟練技術者の雇用を考えること、研究グループとの連携と共に研究論文における謝辞の徹底等々のご指摘は心すべきことであろう。また、設備の老朽化の解消も今後の大きな課題である。計算科学研究センターにおいては、高性能分子シミュレーターシステムが 3 月に更新され、新しい体制で利用者へのサービスが始まっている。大規模利用者のために設定された特別課題 S は順調に進められている。一方、神戸に設置されることが決まっている次世代スーパーコンピューターのソフト面の一つの大きな柱としての「ナノ分野グランドチャレンジ アプリケーション」の活動は、分子研が責任拠点となって本格的な活動を開始した。ナノサイエンスを含む分子科学分野の分野拠点として、同分野のコミュニティーの皆さんと常に連携を取りながら活動していくことが肝要である。

以上、いずれの研究施設も、分子科学コミュニティーの研究者が行う基盤的研究を支えると共に、最先端研究の遂行を支援するために欠くことのできない施設であり、常に整備されていることが必要である。研究者自身の努力と共に、国の学術研究支援強化が切望されるところである。

(中村宏樹)

8-1 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、2003 年の大改造以降の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（建設 / 立ち上げ調整中のものを除く）では世界最高性能である。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、1 日 24 時間の運転が可能となった。これによって、通常の 1 日 12 時間の共同利用に加えて将来に向けての R&D の時間を夜間等に確保できるようになった。

また、UVSOR-II 計画を実現させるための前準備として、22 本あったビームラインの評価を実施し、UVSOR-II 計画が実現したときにその光源性能を生かせるビームラインの強化策 / 改造策を打ち出す一方、光源性能を生かせないような老朽化したビームラインや他施設に比較して光源性能に優れないエネルギー領域まで拡大したビームラインを順次、廃止していった。現在、13 本まで絞り込んだが、2007 年度の研究成果は、22 本あった時代の研究成果をすでに量・質ともに越えるようになった。現在の UVSOR-II におけるビームライン再構築の大方針は、8 カ所ある偏向電磁石それぞれに明るいビームラインを 1 本ずつとし（光源の発散を複数のビームラインで分割して使うのではなく）、8 カ所ある直線部のうち、4 m の長直線部のすべてにアンジュレータを導入し、1.5 m の短直線部の 2 カ所にもアンジュレータを導入することである。現在、偏向磁石ラインは 10 本 → 9 本へ、直線ラインは 3 本 → 4 本へ移行中である。アンジュレータ 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、国際的な利用も始まっている。

8-1-1 UVSOR-II の高度化の現状と展望

今後 1 ~ 2 年の UVSOR-II 光源加速器の高度化としては、トップアップ運転の導入、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、

現在、スウェーデンで立ち上げ調整中の小型リング MAX-III の光源性能を超える 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) トップ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）と放射線遮蔽壁の増強とを完了し、入射路のフルエネルギー化を 2007 年春から可能にした。2008 年春に、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、2008 年度後半にトップアップ運転の定常化を目指す（加速器施設としての放射線変更申請の許可が必須）。また、トップアップ運転と 24 時間運転を組み合わせれば、予算増加がない中、同じようなビームラインの数を増やさなくても当分は利用者の増加を凌げることになる。ビームラインの絞り込みは質の向上のための予算確保の方策として不可欠である。

(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が、現在既にこの軌道変動の原因究明と軌道安定化システムの開発に目処がたったところである。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、水平垂直両方向の安定化システムを導入する。

(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。現在、BL6Uを建設中であり、そのあとはBL4Uがターゲットになる。さらに、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（最後の1カ所）を挿入光源用として、長尺のBL1Uを具体化する方向での議論を行っている。当面、外部資金獲得を目指す、うまく獲得できなかったときには、長期リースなどを利用することで、現予算から捻出することも考える。

(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の運転時間は現在、1日24時間が可能となった。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るのではないかと、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既にわかっているので、長直線部4カ所すべてに高性能なアンジュレータを導入することと併せて、検討を進めていく。

8-1-2 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専用リングの稼働、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。

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。BL1U計画を進める際に、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。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。

8-1-3 外部レーザーを併用した新しい次世代光源開発

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。

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、このパ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。切り出されたパ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く。

なお、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。パンチスライス法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、通常の放射光やFELを含めた、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今後、新しい研究分野を切り開くことにつながる可能性がある。

8-1-4 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使えるようにする必要がある。

現在考えられる将来計画の主なものについて以下にまとめておく。

(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、これについては現UVSORの後継機として岡崎の地で考える必要はなく、愛知県が名古屋大学等の県内大学の協力（UVSOR施設も部分的に協力）を得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 UVSOR-II では出せない硬 X 線領域まで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。また、UVSOR ではハード的な資源に限られ、大学等の学術研究に加えて、民間利用を受けるだけの余裕はないが、愛知県の施設では民間利用が中心になるので、UVSOR として愛知県の施設の場を使ってソフト面で民間利用への協力ができる可能性がある。

(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現在の日本では予算規模や敷地の問題など実現は容易ではなく、UVSOR の後継機の可能性のひとつにするのはあまりに非現実的である。一方、このクラスの施設は現在、中国、台湾、韓国では既に建設されていたり、計画が認められていたりしているため、今後は UVSOR の海外展開も視野に入れて考える必要がある。幸い、韓国からは光源開発への全面的協力など期待されているので、今後、連携を深めていく予定である。

(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。既存の加速器技術を用いて実現できる可能性があるものである。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。UVSOR の後継機としては、これが最も適当であろう。

(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 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。

8-2 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な研究設備の管理を行い、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な研究設備の管理と共同研究の推進」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機器センターに所属替えとなった。センター長は、物質分子科学研究領域・電子構造研究部門の横山利彦教授が併任で務め、ナノセンター専任教員は、ナノ分子科学研究部門の小川琢治教授（平成19年9月に大阪大学大学院理学研究科教授として転出、以降は当センター兼任）、鈴木敏泰准教授、永田央准教授、櫻井英博准教授、先導分子科学研究部門（客員部門）教員に加藤晃一教授（名古屋市立大学大学院薬学研究科、平成20年4月より岡崎統合バイオサイエンスセンター教授に着任）が配置された。

共同研究支援に関しては、平成19年度から文部科学省のナノテクノロジー・ネットワークプロジェクト（5-5 参照）を研究所として受託し、ナノセンターの業務としてこれを運営しており、この業務を遂行するため、併任教員を配置した。ナノ計測研究部門には、横山利彦教授、西信之教授、岡本裕巳教授、永山國昭教授（岡崎統合バイオサイエンスセンター）、ナノ構造研究部門には、魚住泰広教授、永瀬茂教授、佃達哉准教授（平成19年10月に北海道大学触媒科学研究センター教授として転出）が併任し、ナノネットプロジェクト業務を実施している。ナノセンターが管理する共通機器は、920MHz NMR、300kV 分析透過電子顕微鏡、走査電子顕微鏡、集束イオンビーム加工機、クリーンルームがあり、クリーンルームを除いてはナノネットを通して共同利用（協力研究と施設利用）に供されている。ナノネットの内容や成果に関しては5-5に記述する。

センター運営委員会は、センター長を委員長とし、専任併任教員・准教授全員、センター以外の教授・准教授若干名、外部委員からなる。19年度外部委員は、宇野英満愛媛大総合科学研究支援センター教授、松重和美京都大学大学院工学研究科教授、村田道雄大阪大学大学院理学研究科教授であった。特に超高磁場NMRに関する現状と将来に関して評価や提言をいただいた。

超高磁場NMRは昨年まで実施されていたナノサイエンス支援において設置された。溶液から固体試料のナノ構造精密研究を実現する世界最高かつ唯一の装置である。本機の機能を縦横に活用して固体ナノ触媒、有機-無機複合コンポジット、CNT（カーボンナノチューブ）及びフラレン類縁体の精密構造研究、タンパク（中でも膜タンパクや糖タンパクのような難結晶性複合タンパク）、海洋性巨大天然分子などのナノサイズ分子構造体の高次構造や動的挙動の精密解析などに対して、ナノネットを通して共同利用に供されている。

平成20年4月より、岡崎統合バイオサイエンスセンター教授として加藤晃一教授が着任しており、これまで以上に精力的に本装置を活用したタンパク質構造解析研究が遂行される。また、物質分子科学研究領域・分子機能研究部門の西村勝之准教授（ナノ構造研究部門併任）は温度可変プローブなどの開発を行い、本装置を活用した研究展開が進むであろう。さらに、桑島邦博教授のグループもパワーユーザーとして加わり、所外共同利用を含めてますます充実した先端利用が期待できる。

今後、短期的には、以下のような事業を計画中である。

- (i) 既に利用経験のある多くのユーザーや新たな潜在的ユーザーに広く超高磁場 NMR 装置の現況および施設・設備の環境や機能を周知するため、ニュースレターを発行する、
- (ii) 分子研を代表する大型測定機器として、より利用アクセスを高めるためのパンフレットなどを作成する、
- (iii) 溶液、固体双方の温度可変測定（温度可変領域の拡張）の実現に向けた検討を開始する。

また、人事に関しては現状で当面特に問題はないと考えるが、中期・長期的な事業展開として NMR 高度化を推進する。このため、まずは予備測定の実施を可能ならしめる 600MHz クラスの固体測定に対応できる中規模 NMR 装置の導入を実現したい。920MHz NMR を最大限有効に活用するには、同じ環境で作動する予備装置を利用できることが極めて重要である。また、現状では ^1H と ^{15}N の 2 核種しか測定できないので、核種の拡張を目的としてプローブの開発をも目指す。これらの高度化を実現するため、また、分子研 NMR をコアとした全国研究ネットワークを形成して、外部資金獲得を目指す。

8-3 分子制御レーザー開発研究センター

分子制御レーザー開発研究センターは、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。以降、平成18年度までの10年間、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、小型貸出機器を維持管理し、利用者の便に供してきた。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は技術課の3名の技術職員（うち一名は、後日機器センターに配置換え）が行ってきた。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い、産業界からも注目される成果を挙げてきた。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。

一方、平成18年度には分子研の研究系・施設の組織改編へ向けた議論が活発に行われたが、この中で、本センターのあり方に強く関連する事柄は以下の2点であった。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になった。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や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阻害する要因となっていた。一方、レーザー光源を用いた研究グループは、17年度から始まった「エクストリーム・フォトリクス」のプログラムにより、既に当時、組織横断的なつながりを持つ機会が増えていた。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たのである。第二の点は機器センターの設置であった。本研究所には以前、同センターが設置されていたが、その後、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、しかも後者は分子スケールナノサイエンスセンターへと改組された。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とになった。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大幅に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。これら2点はどちらも本センターが分子研における光分子科学の開発研究の中心として活動するための環境を整えるものとなった。

このような背景を考慮すると、組織改編後の本センターは、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分野の将来像を大局的に展望したときに、今後世界をリードして行く上で重要になって来ると思われる方向の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。

このような理念のもとに、本センターは19年度より、光分子科学研究領域との連携のもとに、光分子科学の新分野を切り拓くための装置、方法論の開発研究を行なう開発研究施設として生まれ変わった。新たに開発される装置や方法論は、所内外の分子科学者との先端的な共同研究を遂行するためのリソースとして提供することが好ましい。新センターは以下の3つの研究部門より成り立っている。

- (1) 先端レーザー開発研究部門；平等拓範（専任）、加藤政博（UVSORより併任）
- (2) 超高速コヒーレント制御研究部門；菱川明栄、大森賢治（以上、光分子科学研究領域より併任）
- (3) 極限精密光計測研究部門；岡本裕巳、大島康裕（以上、光分子科学研究領域より併任）、

松本吉泰（京都大学大学院理学研究科より兼任）

それぞれの部門の任務は、(1) テラヘルツから軟X線にいたる先端光源の開発；(2) 主に高出力超短パルスレーザーを用いた量子制御法の開発；(3) 高空間分解および高エネルギー分解分光法の開発などである。すなわち、レーザー光源の開発から新たなスペクトロスコーピー、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ことを目的としている。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。そのためには、現在1名しかいない専任の准教授数を、各部門1名の体制にする事が強く望まれる。また、技術職員が積極的にこれらの研究開発に参加することによって、新たに開発された方法論をセンターに蓄積していくための原動力として活躍する事も重要である。その意味では、現在2名である技術職員が少なくとも部門数と等しい3名以上に増員されることが強く望まれる。一方、先端レーザー開発研究部門における加藤教授の参加は、レーザーセンターとUVSORとの連携による新しい研究分野の創出を目指すものであり、今後、益々先鋭化する先端レーザー光源を用いた観測制御技術と放射光を用いた研究との連携がさらに進められる。将来的には、レーザーセンターとUVSORを包括した、光分子科学研究センター（仮称）の設立も視野に入れ検討を重ねるべきであろう。この試みは、分子研の光科学分野における研究環境の個性を対外的にアピールする為にも必要であると考ええる。

8-4 機器センター

8-4-1 機器センターの現状と将来

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汎用機器を統合して、平成 19 年 4 月より機器センターが新たに発足した。機器センターでは化学分析機器、物性測定機器、分光計測機器、液体窒素・ヘリウム等の寒剤供給装置と、大別して 4 種類の機器の維持・管理を行っている。また、いくつかの機器を化学系研究設備有効活用ネットワークに公開しつつ、この事業の実務的な支援を行っている。機器センターの業務を円滑に運営するために、センター長（併任）のほかに 7 名の専任技術職員（化学分析機器 2 名、物性測定機器 1 名、分光計測機器 1 名、寒剤装置 2 名、化学系ネットワーク 1 名）と 2 名の非常勤事務職員（機器センター 1 名、化学系設備ネットワーク 1 名）を配置している。平成 20 年度からは分子スケールナノサイエンスセンターの透過型高分解能電子顕微鏡の維持管理を主とする技術職員が機器センターに配置される。化学分析機器は山手地区の NMR、質量分析装置、元素分析装置、X 線回折装置などで、物質合成を行う上で最低限なくてはならない装置である。物性測定装置は明大寺地区の ESR、SQUID 磁束計、X 線回折装置、超伝導磁石付希釈冷凍機、走査型電子顕微鏡、熱分析装置など、新たに開発した物質の物性を評価する上で必要な汎用装置である。分光計測装置は三種のレーザーシステムの他、蛍光分光装置、紫外可視近赤外分光装置、円二色性分光装置などの汎用機器を保有している。機器センターの役割は研究所内外の共同利用の支援である。技術職員が担当する機器は厳密に分担が分けられているわけではなく、化学系設備ネットワークの支援にも参加し、分子スケールナノサイエンスセンターの保有する機器の保守にも参加している。共同利用の形態は施設利用であるが、現状では化学分析機器と寒剤は所内の利用者が主であり、所外の利用者は主として物性測定機器を施設利用している。平成 19 年度の所外施設利用件数は 57 件であった。

機器センターの役割は汎用機器の維持管理と技術支援であり、研究系で開発しているような特殊な装置を保有しているわけではない。昨今のように膨大な予算を駆使できる研究グループが増えて、機器も人も自前で調達できるようになると、機器センターは必要ないようにもみえる。しかし、そのような研究グループが研究者コミュニティに占める割合は極僅かである。独創的な研究はむしろ研究費が必ずしも潤沢ではない少人数のグループから生まれることが多い。独創的な研究成果が世に認められれば、研究グループも予算も大きくなり、機器センターのような施設を必要としなくなるかもしれないが、機器センターはそれら大きくなる前の研究グループを下支えし、飛躍を手助けする役割を担っている。この役割は所内利用者に対しても所外利用者に対しても同じような意味合いを持っている。

機器センターの予算は現有の装置類を保守するためのものであり、老朽化に伴う機器の更新を定期的に行う予算はない。高額な化学分析機器や汎用性の高い物性測定装置などは特定の研究グループに予算措置するのではなく機器センターに予算を投入して、最高性能の機器を常に使用できる状態を構築する必要がある。機器センターはパルス ESR のような特殊装置も保有しており、共同利用を通して特色ある研究を展開している。化学系設備ネットワークを支援しつつ、特色ある最高性能の機器も整備してゆく努力が必要である。

上のような精神で機器センターを運営すべきであると考えるが、機器センターは発足後ようやく一年を経過しようとしている段階であり、目のいくつかの事項を解決してゆかなければならない。

(1) 緊急に立ち上げる必要のあるのは機器センターの事務室の整備である。現在、機器センターは事務室をもっていないため、とくに明大寺地区の職員は極低温棟、レーザー棟、化学試料棟、研究棟に分散して仕事をしている。月二回の会合以外には全員が顔を合わせる機会もないために、緊急の場合、お互いの連絡に齟齬をきたすことも生じている。化学試料棟を改修して平成 19 年度までに化学系設備ネットワーク用の事務室の整備を整えつつあるが、20 年度の早い段階に機器センター全体の事務室の整備を完成させる必要がある。

- (2) 現在、分子科学研究所の明大寺地区では平成元年に導入した神戸製鋼所の全自動液体ヘリウム液化装置を用いて、年間約4万リットルの液体ヘリウムを供給している。この設備は導入後20年近くの時間が経過しようとしている。この装置が使用不能になるとき山手地区のヘリウム液化機から液体ヘリウムを供給することが計画されているが、この計画を実行に移すためには明大寺地区で回収したヘリウムガスを山手地区へ移送するための地下埋設配管が必要である。この配管工事は事務的手続きを含めて長時間を要するため、液化機が使用不能になる前に工事を行っておく必要がある。ヘリウムは全地球的に貴重な資源であるが、現在は全面的に米国に頼っている。米国でも資源保護の動きが出ており、この状況がいつまでも続くとは限らない。限られた資源をリサイクルするシステムを維持することは極めて重要であり、早急な対策が望まれる。
- (3) 機器センターは15テスラーの超伝導磁石を付属した希釈冷凍機を所有している。この装置は分子磁性や分子導体など分子科学の分野で有用な装置であるが、汎用装置とは言い難い特殊な装置の部類に入る。現在、この装置を使用する所内利用者がいないので、客員教授あるいは准教授として専門家を招聘して、冷凍機を用いた極低温における比熱や磁化などの測定装置の立ち上げを行う必要がある。
- (4) 現在、西グループが使用しているピコ秒パルスレーザーシステムを将来機器センターに移管することの可能性を検討している。維持のための予算や技術職員の配置などいくつかの問題を抱えているが、平成20年度中には目途をつける。
- (5) 所外施設利用者を対象に機器センターについてアンケート調査を行ったところ、機器センターに対する期待は大きく、機器の充実と旅費の増額に対する希望が多かった。所外施設利用者には半期に一件あたり2泊3日1回の旅費が支給されるが、一回で目的が達成されるような実験は非常に少ない。半期の間に7,8回利用しているヘビーユーザーに対しては旅費の支給を2回に増やすなどの方策が必要である。

8-5 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事と日常の実験研究に必要な部品および機器の設計・製作に迅速に対応するという2つの役割を担っている。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。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、装置開発室の重要な業務である新しい装置・技術の開発と日常の実験研究に対する技術支援との両方に技術職員が取り組んでいる。

8-5-1 独自技術の開発

機械技術では、平成18年度から「脆性材料の超精密加工」として、国立天文台の先端技術センター設置の超精密加工機を利用して、赤外光用の光学材料である硫化亜鉛（ZnS）結晶を用いた回折格子の試作を行ってきた。これらは名古屋大学及び国立天文台との共同開発として実施した。この共同開発は赤外天文観測用の光学素子製作を課題としてきたが、平成20年度は加工対象の材料をマイクロミキサー、バイオセンサー、レーザー用光学部品等に利用できる石英ガラス、単結晶シリコン、銅タングステン、ハステロイなどの脆性材料（または超精密加工が困難とされる材料）について進める計画である。

もう一つの「小径工具を用いたマイクロ加工」についての取り組みも3年経過し、100 μ m以下の工具を使うノウハウが蓄積されてきた。平成19年度はサブミクロン駆動のXYZステージを導入し、微小切り込みや精密位置決めなど新しい加工法を応用しマイクロ部品の製作対応を進めつつある。これらは今後、多方面からの研究支援に利用できるもので、さらに技術開発を行っていく。

電子回路技術では、高速化や多機能化が進む電子回路の需要に対応するために、これまでCPLDやFPGAなど、プログラマブル論理回路素子を用いたカスタムICの設計・製作を行ってきたが、新たにアナログ回路を集積化する要求に応えるための回路設計技術の導入を計画している。具体的にはバイオセンサーに用いる微小電流・電圧変換回路のマルチチャンネル化を目的としたカスタムLSIの設計・製作・評価を行う。昨年度は東京大学大規模集積システム設計教育センター（VDEC）を利用して、VLSI設計支援用シミュレータによる増幅回路の集積回路設計に取り組み始めた。

8-5-2 設備

装置開発室の加工、計測評価などの設備は、老朽化、性能不足、精度低下などが進み、分子研の新しい展開を担う研究支援に影響するため、毎年、重要事項として対策の検討を進めている。平成16年度から中村所長の配慮で、計測評価のための機器の一部が新規導入および更新され、先端技術から取り残される事態から踏みとどまっているが、加工に関してはまだ十分とは言えない。今後さらに研究所の方針に合わせた設備計画を運営委員会等で検討していく事とする。

高度な加工設備は機械本体そのものも高価であり、また設置環境を整え、維持管理など付帯経費も必要であることから、導入はなかなか困難であるが、他機関、他大学または民間企業を含め、すでに設備されている機器を利用する方法も検討していきたい。現在 国立天文台が所有している超精密加工機の利用を行っている事例もあるが、これらは、年度毎に共同開発として利用申請書を提出し採択される必要があり、研究支援や速やかな対応には向かない面もある。また、新規な材料等を加工する場合には、加工条件の探索から始まるので、長期に亘っての使用、共同利用の場合の研究内容との整合性、更には、利用料や派遣経費などの問題がある。これらを踏まえ、研究支援に効果的な加工機器活用を調査・検討していく。

8-5-3 外部評価

装置開発室は平成 16 年度より、専任の教育職員を置かない技術職員だけで構成された施設として運営されてきた。今年度はその新しい体制から 3 年が経過したことで、施設としての現状について点検・評価ならびに今後の運営方針を検討するために、外部から下記の評価委員を招き外部評価を実施した。

所外評価委員：田原 譲（名古屋大学、教授）

山田省二（北陸先端科学技術大学院大学、教授）

以下に、各委員からの報告を掲載する。

委員 A

分子科学研究所装置開発室外部評価委員会（インタビュー）報告

2007 年 9 月 14 日

文責：山田省二（北陸先端科学技術大学院大学ナノマテリアルテクノロジーセンター教授）

(1) 外部評価委員会開催日時及び場所

日時：2007 年 8 月 27 日（月）13:00–18:00

場所：分子科学研究所研究棟 201 会議室

スケジュール：

- | | |
|-------------|--|
| 13:00–13:20 | 宇理須教授挨拶、分子研・装置開発室概要説明（鈴木出席） |
| 13:20–15:00 | 電子回路グループ 3 名（吉田、内山、豊田） ガラス加工 1 名（永田）業務報告 |
| 15:00–17:00 | 機械グループ 5 名（鈴木、近藤、水谷、矢野、青山）業務報告 |
| 17:00–17:30 | 施設設備見学 |
| 17:30–18:00 | 講評、意見交換 |

(2) 外部評価委員会での評価要望事項（装置開発室長より事前に提示）

装置開発室の（果たすべき？）役割（所内、日本全体の観点から）。現状はその役割を果たしているか？

分子科学研究における装置開発室の重要度。

装置開発室の技術職員の技術レベルは？ 機械，電気，ガラス。

装置開発室が抱える問題。技術的（技術レベル？），組織的，将来的

の諸問題解決のためのアドバイスなど

分子研（全体）に対する建設的批判提言。

(3) 評価レポート

以下、(2) の諸事項を参考に、委員会での業務報告に対する諸評価を項目別にまとめて記述する。

1) 全体の印象

インタビューが、発表者と評価委員 2 名というほぼクローズした雰囲気、かつ比較的なじみのある場所で行われたせいか、発表はおおむね良くまとまっており短い時間にそれぞれの業務のエッセンスが簡潔に紹介された。また、発表態度からは、各自の業務に控えめではあるがそれなりの興味とプライドを持って取り組んでいる様子が推測され

好ましい印象を持った。ただ、装置開発室の業務の全体の支援業務の中での位置づけ、あるいは他の技術職員グループとの比較のような話が余りなく、分子研全体の中での役割分担などもあまりよくわからなかった気がする（「分子研レポート」には概要の構成員の項、及び技術室の項大体の説明はあるものの詳細な記述は無かったようである）。「構成員」の記述から類推すると、技術課1,2班を併せて装置開発室と称しているように感じられる。

昨今の国立大学等の独立法人化に伴い、「競争」と「評価」が横行し技術職員でさえも様々な事務作業をこなすことが多く、ややもすると労働強化に繋がりがねない事態が散見されるようであるが、インタビューで聞き取った限りでは、依頼業務を含む通常業務は所定の勤務時間内でほぼこなせている現状が確認された。このことは、日常的業務で手一杯になること無く将来に向けた各々の基礎力・技術力の涵養にも一定の日常的時間が割ける余裕があることを意味し極めて重要である。また健康上の観点からもこのような仕事の平均的ペースを将来にわたって維持することの重要さは今後もっと意識されても良いのではないかと考えられる。

2) 装置開発室の現状等

2-1) 装置開発室の分子科学研究における重要度、果たすべき役割、現状など

いうまでもなく装置開発（室）の分子科学研究における重要度は一般的にはさらに増大しつつあると考えられる。ただ当該分野における関連装置は、その種類は広く多岐にわたり、装置1台の規模は大きくなると同時にその複雑さはさらに増しつつあると考えられる。そのような装置をたとえ小規模な物を中心とするにしても限られた人数と時間ですべてをカバーするのは事実上不可能である。したがって、修理などのルーチン的な仕事以外に取り組む創造的な業務としては当然ある技術分野にフォーカスせざるを得ない。その分野を取捨選択する基準は、恐らく分子研全体の運営方針に基づく中期計画に沿った研究開発計画に沿ったものになるであろう。分子研として発展させるべき研究分野を支援する業務が人員的にも予算的にも優先されることになるのではないかとと思われる。

既にインタビューの中で、いくつかの具体的な方針、

- a) 超精密機械加工 / 研磨
- b) マイクロ微細加工
- c) NMR プローブ
- d) NMR 関連各種回路
- e) 各種極低温用測定セル

などが紹介されていたがこれらは恐らく分子研全体の研究体制整備、レベルアップの方向と一致しているのではないかという印象を持った。今後全体計画との関連をさらに意識した具体的な装置開発方針の提案と推進が内部的にも外部的にもより望ましいのではないかと考えられるし、この種の具体的な方針が「分子研の装置開発室」としての特徴を発揮することに繋がり、より外部にもアピールするものになると考えられる。

2-2) 現在の装置開発室の技術レベル

ガラス工作に関しては良くわからないが、回路と機械工作に関しては、長年（技術室発足から30年）の蓄積を反映し、かなり高いレベルにあるように思われた。今後このレベルの引き継ぎ、維持、発展が要請されているわけであるが、人的リソースの増強が特にない場合は、成るべく特化すべき領域を広げずその分野での技術の最先端の進歩に追従すべく日々レベルアップを図ることに集中すべきであろう。この際特に参考になるのは、外部、特に最先端の研究を推進している大学、研究機関、企業との共同研究、交流を意識的に維持継続し、常に技術レベルの客観的なチェックを進めることである。常によりフレッシュされ維持された高い技術レベルこそがひいては内部からの要求にもより高いレベルで答えることを可能にするものである。

3) 問題点と解決策

3-1) 組織的観点

機械加工や回路試作に関する依頼件数と人手に関しては、現在の所ほぼバランスが取れているようであるが、今後外部の依頼等も積極的に引き受ける、或は外部からの依頼が急増するような事態に立ち至ったときどのように組織的に対応するかはあらかじめ考えておく必要があるかもしれない。特に組織を変更しないで対処するには、例えば機械加工で既に実施しているような非常勤職員の活用を臨機応変に進める方策も有効であろう。但しこの際技術職員と年齢に近い若年労働者でなく熟年労働者の雇用を優先する配慮が良いかも知れない。

3-2) 技術的観点

一般的に見て装置開発室の現在の技術レベルは、分子研の研究に密接に関連する分野を中心にかなり高いと考えられる。今後これを維持発展させるためには、新技術職員の採用（増員？）や現技術職員の日常的な業務の重要な一環として学習と研修を継続することが必要である。技術室全体での長期人員計画の策定と学習・研修のための時間を現技術職員に組織的に保証していくことがますます重要になってくると考えられる。

3-3) 将来的観点

分子研中期計画等組織全体の長期計画と連動して、各グループが中期目標、或は中期重点取り組み項目等を設定し、その達成目標と計画をそれぞれのメンバーが共有してその実現に協力して取り組むこと等が好ましいと考えられる。現在の機械加工グループの当面の目標である「マイクロ機械加工技術（の開拓？）」に関しても、組織的裏付けと長期的計画の中での位置付けがより明確にされることが望ましいのではないか。

3-4) 提言など

技術室、及び装置開発室の業務の内外の先端的研究との関連やそれらの研究への貢献をより組織的公式的に明らかにする仕組み（研究者が執筆する論文における貢献の明示、謝辞の徹底と貢献内容のデータベース作り及びその公開等）を作ることが重要である。これにより技術職員が自らの仕事の意義を再認識するのみならず高いプライドをもって将来業務に取り組むことが可能となり、担当業務を意欲的に推進するための大きなモチベーションとなりうるものである。

また「分子研レポート」によるとこれまで 149 名の技術職員が在籍し、111 名が転出している。この流動性の高さは技術職員としては他の日本国内の諸機関と比較しても特筆すべきレベルであると思われるが、異動等が比較的困難と言われる装置開発室の職員に関しても流動性を高める工夫が日常的になされるべきであろう。この点に関しても具体的な方向と達成目標等が議論されて良いと思われる。

委員 B

2007.9.21

分子科学研究所・装置開発室の評価（open letter）

名古屋大学・エコトピア科学研究所

田原 譲

貴研究所より外部評価の依頼を受け、8月27日に装置開発室の現状、各技術職員の活動について説明を受け、また職場視察を行ったので、ここにその所見を報告します。

現状では研究に役立つ装置開発に対してよく貢献されているように思いますが、装置開発室の今後の方向性に対しては職員各自ができるだけ明確なビジョンを持つよう努力されるとよいように感じました。

(1) 活動状況

電子回路グループ3名、ガラス加工1名、機械グループ5名の各構成員が研究者への技術支援という本務については、積極的にかつ誇りを持って取り組んでおられることを感じました。小さな組織でありながら、研究者の特殊な技術要求に対して様々なアイデアを出して設計、試作、製作を行っている様子がよくわかりました。その成果はここで作った装置をもとに行われた研究で、所内の研究者が研究賞を受けていることなどでも明らかと思われます。また柱となる技術支援の他にも、工作実習の実施・技術研究会の実施・所長奨励研究の実施など間接的な技術支援や、独自技術の開発を含めた自己研鑽が行われており、積極的な活動の様子がうかがわれます。

(2) 組織と運営

評価者が所属する大学には研究室に密着した形での仕事をする技術職員と、共通施設の技術職員という2種類の形態がまだ残っているのに対し、分子研装置開発室では後者の性格の職員の集合体であり、少人数の組織としては明確な役割分担と効率的な仕事の進め方のできる組織として確立しているように感じられます。しかしその分研究者との密度の高い交流がもたらす研究・技術両側面のレベルの向上という側面が少し弱められているのかもしれない、ということを感じました。ただし評価者が所属する大学との間では、技術職員どうしの相互交流によりお互いの技術レベルの向上を図っており評価できます。

(3) 設備の状況

機械加工に関連した必要最小限の設備は揃っていますが老朽化した装置も目立ちます。現在の高度化した技術の時代に汎用精密機械加工装置の導入は予算的に厳しいものがありますが、ある程度の投資は継続的に行われるべきと思われます。その際この装置開発室の技術の特徴をより明確にしていくことが重要でしょう。またこれに関連し一見ハイテクの対極にあるような古くさい加工装置を使いながら、研究の鍵となるような技術が生み出される可能性をなくさないために、熟練技術者の経験(例えばガラス加工など)を知的財産として残す努力をぜひお願いしたいと思います。

(4) 情報発信と社会貢献

業務報告集は分かりやすくよくまとめられており、技術情報の発信として十分レベルに達していると思われますが、欲を言えばこの組織の特徴を強調して示すような工夫や、技術検索で所内外の研究者が成果を使えるような工夫(設計・製作・計測などのノウハウのデータベース化、例えば用いた要求仕様・解決策・失敗例・成功理由なども加えて、キーワード検索で過去の経験が新しい装置開発に活かせるようなもの)もぜひ考えてほしいと思います。社会貢献としては研究所の一般公開がその一端であり技術職員の方も十分貢献されているように感じました。

8-6 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、2007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、特に設備の運用とセンターの将来構想の検討の必要性について述べる。

2008年2月現在の計算機システムの概要を図と表に示す。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システムであり、超高速分子シミュレータと高性能分子シミュレータからなる。前者は2006年7月に導入し明大寺地区に設置され、後者は今年度2008年2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。

「超高速分子シミュレータ」、「高性能分子シミュレータ」は、いずれも量子化学、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クラスターでは不可能な大規模計算を実行できる性能を有する。

まず、「超高速分子シミュレータ」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。

一方、2008年3月に導入された「高性能分子シミュレータ」は、演算サーバ、ファイルサーバ、フロントエンドサーバおよびネットワーク装置から構成される。演算サーバは、日立製作所製のSR11000後継機であり、1 CPUコアあたり18.8 Gflopsの演算性能を持ち、1ノードが32 CPUコアと256 GByteメモリを有する共有メモリ型スカラー計算機である。理論総演算性能は5.4 Tflops、総メモリ容量は2.3 TByteであり、一時作業領域として23 TByteのディスクを装備している。本演算サーバは、浮動点少数演算量が多い分子科学計算はもちろんのこと、高クロック周波数CPUの強みを生かし、従来性能が出しにくかった整数演算や論理演算を多用するプログラムも性能を発揮することが期待される。ファイルサーバは、共同利用システム全体のホームディレクトリ等のサービスを行い、128 TByteのディスクを装備している。またバックアップ領域として60 TByteのディスクも装備している。

共同利用に関しては、2007年度も144の研究グループにより、総数589名にもおよぶ利用者がこれらのシステムを日常的に利用しているが、システムの運用にあたり、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、特に大規模ユーザのために施設利用Sを設定している。これに従い、審査により、平成19年

度は4件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。

さらに、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ディスク装置を装備している。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、活動を展開している。

この中で、昨年度は計算科学研究センターの前身である分子科学研究所電子計算機センター設立30周年にあたり、2007年2月に開催された設立30周年記念スーパーコンピュータワークショップにおいては、基調講演、パネルディスカッション等を通して理論・計算分子科学研究コミュニティから計算科学研究センターに対する将来にわたる期待が寄せられた。これを受けて、計算科学研究センターを事務局としてセンターユーザーをはじめとした理論・計算分子科学研究コミュニティの主だった先生方により懇談会が組織され、次世代スーパーコンピュータへの関わりを中心に計算科学研究センターの位置づけ、果たすべき役割等について検討がなされた。そこでの議論は、次世代スーパーコンピュータへの提言として意見書の形にまとめられ、文部科学省へ提出される予定となっている。

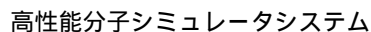
その中で計算科学研究センターに期待されている重要なアクティビティの大筋は以下の通りである。

(1) 神戸に設置される次世代スーパーコンピュータの共用に際して、理論・計算分子科学領域を含め、計算科学研究センターがナノサイエンス分野、分子科学分野の分野拠点として機能していくこと、つまり神戸センターが計算機の運用に対して責任を持つ一方で、分子研は分野の研究に対して責任を持ち、研究をリードし、取りまとめを行っていくこと。

(2) このため、分子科学研究所に理論・計算ナノサイエンス特別研究センターを設置し、計算科学研究に加えてソフト開発を含めたライブラリの整備や研究支援活動を行っていくこと。

このような提言を受け、計算科学研究センターではこれらを実施していくための体制や事業計画等、具体的な方策を検討するために運営委員会に外部の先生も含めた将来構想委員会を設置し、議論を開始しようとしているところである。

システム構成図

研究施設の現状と将来計画 343

超高速分子シミュレータシステム

蜜結合演算サーバサブシステム	
	型番：富士通 PRIMEQUEST
	OS：Linux
	CPUCore 数：640 (64CPUCore × 10 ノード)
	総理論性能：4.096TFLOPS (409.6GFLOPS × 10 ノード)
	総メモリ容量：2.56TB (256GB × 10 ノード)
	ディスク容量：800GB × 10 ノード (/work)
	：8TB (/week)
高速 I/O サーバサブシステム	
	型番：SGI Altix4700
	OS：Linux
	CPUCore 数：640 (128CPUCore + 512CPUCore)
	総理論性能：4.096TFLOPS (819.2GFLOPS + 3276.9GFLOPS) (6.4GFLOPS/CPUCore)
	総メモリ容量：8TB (2TB + 6TB)
	ディスク容量：114TB (/work)
高速ネットワーク装置	
	型番：Catalyst 6504

9 . 平成 20 年度計画

9-1 大学共同利用機関法人自然科学研究機構年度計画（平成 20 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以自己点検を行う。

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。また、次世代観測装置の開発研究、特に主焦点広視野カメラ Hyper Suprime-Cam の開発及びそれに対応する望遠鏡改修の検討を進める。

野辺山宇宙電波観測所においては、45m ミリ波望遠鏡と ASTE10m サブミリ波望遠鏡を連携して用いて、遠方銀河探査や近傍銀河の広域観測、星形成・惑星系形成領域の広域サーベイ、更には分子輝線サーベイを強力に推進する。

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、関連器及び受信機の製作等並びに部分運用を引き続き行う。

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運用を進め、国内外の研究者と連携しながら提供データや機能充実を図ると共に利用者拡大に努める。

宇宙航空研究開発機構と協力して太陽観測衛星「ひので」及び月探査衛星「かぐや」の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とともに、次期太陽観測衛星計画の検討を開始する。

北海道大学、茨城大学、筑波大学、岐阜大学、大阪府立大学、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。

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。

国際協力により、すばる望遠鏡の次世代観測装置開発を行うとともに、ハワイ観測所の将来計画として次世代超大型光赤外線望遠鏡の建設構想の検討を推進する。また、京都大学、名古屋大学、東京大学などと連携して、すばる望遠鏡の次期観測装置開発、次世代超大型光赤外線望遠鏡の実現に向けた分割鏡制作方式の開発、並びに同望遠鏡用の観測装置開発を行う。

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、将来の炉の経済的指標となるベータ値(プラズマと磁場の圧力の比)が大きいプラズマ、平均電荷数の小さい高イオン温度プラズマ等を実現し、核融合炉心プラズマを見通せる LHD プラズマの高性能化を目指す。また、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. 磁場電源を整備し、プラズマの位置を時間的に制御することによって、LHD プラズマの更なる高性能化を目指す。

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各センターが持つ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更なる活性化を図る。
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. 更に、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、平成 19 年度に創設したシミュレーション科学研究部において、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. コア流体プラズマモデル、コア運動論プラズマモデル、及び周辺プラズマモデルとして大別される、基本物理過程の解明を探索する階層拡張シミュレーション研究を進める。実験に対応した現象の全時間変化を解析する階

層統合シミュレーションを発展させる。前者の知見を後者へと取り込む階層繰り込みモデルの開発を進める。

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、及び高精度化を進展させる。

3. 磁気再結合に関連したミクロとマクロをつなぐ階層繰り込みモデルを発展させ、様々な系への応用を目指した開発を行う。

4. グラファイトへの水素同位体照射シミュレーションを発展させる。

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るとともに，所内及び国内の連携を強化する。

1. 特に先進ブランケット概念の確立を目標とする共同研究を強化し，核融合炉工学ネットワークにおいて評価を実施する。また，それぞれの分野において研究成果の集約を図り，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通じ，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・評価等を行い，公開のための活動を促進する。

（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更に強化発展し，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。

導入した波長可変レーザーの最適化を行う。メダカのバイオリソースの中核機関として国内外の利用者に提供を始めると同時に，飼育施設の高度化を行う。

実験生物学者，理論生物学者の集うシステム生物学の国際会議を開催することにより共同研究を推進する。

モデル水生動物のバイオリソース開発を推進するため，飼育育成施設の高度化を行う。

バイオイメージング研究推進担当部門を中心に，各種顕微鏡の特性を生かした生物現象観察のための新技術開発を行う。

（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，世界的に高水準な研究基盤を発展強化するとともに，共同研究等により全国の関連研究者との連携を一層強化する。

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，霊長類の高次脳機能の発達や機能代償に関わる研究及びヒトの社会的認知能力（social cognition）の発達過程に関わる研究を進める。遺伝子改変動物を用いた行動・代謝機能の研究を進める。

位相差電子顕微鏡等の超分子機能解析技術の向上を図る。バイオ分子センサー等の超分子的メカニズムの研究を推進する。

生体恒常性維持のメカニズム及びその発達，破綻による病態等の分子・細胞メカニズムに関する基盤的研究を進める。

大脳皮質，大脳基底核，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。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，電子状態の理論，液体統計力学理論と蛋白質計算，光誘起相転移現象などの研究を更に展開していく。

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し，動的過程を制御する基礎的な実験手法の展開と利用を更に進める。また，各種の蛋白質の機能とフォールディング機構の解明，バイオセンサー開発への展開を行う。水中での機能性固定化触媒の開発やエネルギー変換のための反応系構築をも行う。

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，波長域，パルス性，エネルギー等において特徴ある光源の開発を引き続き進める。また，分子のコヒーレンス及びダイナミクスの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引き続き進める。

物質分子科学研究領域を中心に，高変換効率有機太陽電池の開発，新規有機半導体の開発，分子性電荷秩序相における電子強誘電性の解明，高感度・高分解能新規固体 NMR 測定法の開発，超高速ナノ磁性ダイナミクス観測法の開発，含ヘテロ元素非平面共役化合物の合成法の確立，機能性革新的炭素ナノ構造体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超並列計算アルゴリズムや計算プログラムの開発等，これまで不可能であった巨大計算を実現するためのソフトウェアの高度化を更に推し進め，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

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及び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，更なる活動の強化を図る。

知的財産室及び知的財産委員会において，知的財産の創出・取得・管理・活用を積極的に行う。

各研究所等は，引き続き自己点検，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。

各分野間の連携を目指して，岡崎統合バイオサイエンスセンターでは，膜蛋白質研究，環境物質研究，バイオイメー

ジング手法開発などを中心に統合バイオサイエンス研究を発展させ、各研究所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。

国立天文台の国際外部評価を実施する。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、平成 19 年度に創設したシミュレーション科学研究部などの組織において更なる研究体制の充実を図る。

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。特に私立大学との連携協力体制の強化を図る。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継続する。
- 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推進し、FIREX-I 計画での使用を確実にする。

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）

研究グループ間の自由な発想から生まれる共同研究を促進するため、所員交流室を設置する。

平成 19 年度に実施した外部評価を受けて、推進すべき研究領域とされた部門に対し、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、共同研究を推進する。

「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。計画共同研究として、新たに「位

相差低温電子顕微鏡の医学・生物学応用」,「多光子励起法を用いた細胞機能・形態の可視化解析」を開始する。「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。

改組により脳機能計測・支援センターと情報処理・発信センターを設置する。脳科学推進のための多次元共同脳科学推進センターを新たに設置する。行動・代謝分子解析センターの充実を継続して行う。

(分子科学研究所)

専任的客員部門として運用した先導分子科学研究部門における NMR 利用研究は,岡崎統合バイオサイエンスセンターで引き続き実行する。今後の専任的客員部門の運用については,各研究領域でその可能性を探る。

各研究領域内での協力体制と領域間の連携体制の強化を進める。特に計算分子科学と分子理論の融合研究や,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引き続き推進する。超高磁場 NMR の高度化に向けた開発研究,生物物理化学上の諸問題を解明するための計算分子科学,分子科学研究推進のための様々な装置開発等において,施設の利用促進を行う。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。

引き続き,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は,外部委員を含む委員会で検証し,今後の運用に反映させる。

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(国立天文台の研究連携室など)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,国際協力活動を更に強化する。

共同利用等の実施,募集,成果等について,ホームページ,大学その他研究機関への通知等により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。更に,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引き続き行う。また,それを運用する管理システムの改善を進める。

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更に推進する。

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。

「ひので」衛星により取得された太陽観測データを共同利用に供して，太陽物理学における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。

ハワイ観測所では，研究者に対し多様な観測機能を提供するために，マウナケア山の他の観測所と望遠鏡利用権の部分的交換を行う。

（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（一つの学際分野としてのシミュレーション科学）を推進するため，以下の事項を推進する。

- 1．磁場閉じ込め関連の共同研究・共同利用を一層推進するため，共同研究者が利用できる MHD シミュレーションコードを作成する。
- 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ため，シンポジウム等を開催する。
- 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に，ベンチマーク用プログラムセットの実施結果を公表し核融合シミュレーションの計算機環境に関する指標を作成する。

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。

総合工学実験棟の整備を進め、先進ブランケットに関する共同研究推進を目的とする流動ループ等設備拡充を図る。また、大学等の基礎研究設備の拡充と有効活用、中性子照射基盤の維持拡大に努め、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を用いた共同研究公募に向けて準備を進める。

生物学の新領域の開拓を目指して、引き続き OBC（Okazaki Biology Conference）を開催する。

平成 19 年度に設置した施設協議会による組織体制の再編案をもとに研究支援施設の再構築を図る。

（生理学研究所）

動物実験の更なる適正化を図るために、動物実験管理の体制を整備する。

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継続して行う。

ニホンザルのナショナルバイオリソースプロジェクト（NBR）事業を更に強力に推進するために、NBR 推進室の体制強化を図る。

NBR 事業においてニホンザルの供給を本格化させるとともに、ニホンザル供給有償化に関する問題点の検討を行う。

（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、これまでの実行可能性の検討を踏まえ、先端的な光源開発によって、その特徴を生かした新たな利用研究を更に推進する。

- 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継続して進める。
- 2．世界最高水準の真空紫外光電子分光装置、赤外・テラヘルツ分光装置、軟X線発光分光装置等を利用した固体物性等の研究を推進する。

「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用——ナノ分野グランドチャレンジ研究——」の研究開発を引き続き推進する。また、計算科学研究センターに導入した高性能分子シミュレータ並びに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力に推し進める。

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．「化学系研究設備有効活用ネットワーク」において、現在試行中の大学間相互利用システムソフトウェアの大幅なアップグレードを行い、設備管理者毎の各種設定や利用受付、課金処理などを実行可能とするとともに、各大学内利用システムと連結可能な総合システムを構築し、利便性を大幅に向上させる。また、各地で緊急に修理・アップグレードが必要な装置に対する最小限度の経費措置を行う。これによって相互利用可能な機器の増加を図る。
- 2．多様化する材料の微細加工要素技術のより高度化に向けて加工設備の整備を行う。また、エレクトロニクスの高密度集積回路の設計・製作・評価技術を確立し、先端的な分子科学研究共同利用を技術支援する体制を構築する。

(2) 共同利用等の実施体制等に関する目標を達成するための措置

本機構全体として、活発な共同利用等の実施体制に関して以下のような措置をする。

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、引き続き学術雑誌、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、その評価結果を、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。また、自然科学研究機構技術研究会の充実を図る。

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引き続き進める。

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、大学院教育に関する検討会において、大学院教育を一層充実させるための検討を行う。

8専攻の教員約330名が学生約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、京都大学大学院理学研究科、富山大学大学院理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20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）

大学院生を含む若手研究者の育成のため、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。

国立天文台では、国連で制定された世界天文年（IYA2009）事業の支援を行う。

知的財産室、知的財産委員会及び利益相反委員会において、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。また、核融合科学研究所では、機関リポジトリを構築し、公開する。

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

るなレベル・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、広報活動を積極的に行うとともに、生活環境の整備及び安全対策の充実を図る。また、受入れ担当者向けマニュアルを充実させる。

(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、本機構と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一層の充実を図る。

分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所では教授会議を毎月1回（8月を除く）定例で開催する。

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りつつ、積極的な参加を促す。

特に、国立天文台ハワイ観測所での実務研修も含めた、国際共同研究支援職員研修を実施する。

内部監査計画を元に、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を図るとともに、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。

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とともに、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。

テレビ会議システムを活用し、会議や業務打合せ等の効率化を図るとともに、事務の電子化について、引き続き取り組む。

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。

知的財産室、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とともに、より一層の経費節減について検討する。

引き続き、適切な室温管理等を行うとともに、省エネルギー型機器への更新等により、省エネルギー化及び経費抑制を推進する。

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

引き続き、外部専門家の意見を聞き、積極的な資産活用を図る。

引き続き、資産の有効活用・管理を図るため計画的に現物実査を行う。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 評価の充実に関する目標を達成するための措置

自己点検及び外部評価の結果に対する経営協議会、教育研究評議会の意見を踏まえて、機構会議及び運営会議において具体的施策を検討する。

機構会議等において、中期計画等の見直しについて検討する。

また、引き続き、次期中期目標、中期計画について、役員会・機構会議で検討を行う。

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。

国立天文台では、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、天文情報センター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、高度な知識を持つ人材を育成する。4次元デジタル宇宙ドームシアターの公開を実施する。

核融合科学研究所では、市民への学術情報発信活動を拡大するため、キッズエネルギー科学館（仮称）の開設準備を行う。

生理学研究所では、広報展開推進室を中心として、学術情報発信活動を充実させ、「人体のしくみ」等に関する理科教員や国民への窓口活動を継続する。

本機構の諸活動について情報発信するためのホームページや広報誌等を更に充実させる。ホームページのアクセス数は、機構全体で年間9000万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引き続き作成し、本機構の活動実績について、ホームページ等を活用し、公表する。

職員の倫理、セクシュアルハラスメント、機器調達契約等の守るべきガイドラインを一層周知徹底し、必要に応じて改定する。

各研究所等は、研究成果及び活動実績について年次報告を作成し、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の実施し、積極的な広報を行うとともに、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。

各研究所等でアーカイブ室等を中心として、研究所アーカイブス又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。

引き続き、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。

省エネルギー対策、再生資源の活用、空気汚染物質対策等を推進する。

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。

引き続き、危機管理体制の充実を図る。また、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行うとともに、英訳版を整備する。

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。

10 . 資料

10-1 評議員 (1976 ~ 1981)

氏名・所属 (当時)	1976.1.10 ~ 1978.1.9	1978.1.10 ~ 1980.1.9	1980.1.10 ~ 1981.4.13
小谷 正雄 東京理科大学長	○	○	○
長倉 三郎 東京大物性研教授	○	○	○
石塚 直隆 名古屋大学長	○	○	○
梅棹 忠夫 国立民族学博物館長	○	○	○
岡村 総吾 東京大工教授	○	○	○ (日本学術振興会理事)
ハインツ・ゲリシャー マックス・プランク財団 フリッツ・ハーバー研究所長	○	○	
柴田 承二 東京大薬教授	○	○ (東京大名誉教授)	○
関 集三 大阪大理教授	○		
田島弥太郎 国立遺伝学研究所長	○	○	○
田中 信行 東北大理教授	○		
福井 謙一 京都大工教授	○	○	○
伏見 康治 名古屋大名誉教授	○	○ (日本学術会議会長)	○
ゲルハルト・ヘルツベルグ カナダ国立研究所 ヘルツベルグ天体物理学研究所長	○		
森野 米三 相模中央化学研究所長	○	○	○ (相模中央化学研究所 最高顧問理事)
山下 次郎 東京大物性研究所長	○		
湯川 泰秀 大阪大産業科学研教授	○	○ (大阪大名誉教授)	○ (大阪女子大学長)
渡辺 格 慶應義塾大医教授	○	○	○
植村 泰忠 東京大理教授		○	○
メルビン・カルビン カリフォルニア大学ケミカル・ ヴィオダイナミックス研究所長		○	○
神田 慶也 九州大理学部長		○	○ (九州大学長)
齋藤 一夫 東北大理教授		○	○
ジョージ・ポーター 英国王立研究所教授化学部長			○

10-2 評議員 (1981 ~ 2004)

氏 名	所 属	第 1 期 '81.6.1 ~ '83.5.31	第 2 期 '83.6.1 ~ '85.5.31	第 3 期 '85.6.1 ~ '87.5.31	第 4 期 '87.6.1 ~ '89.5.31	第 5 期 '89.6.1 ~ '91.5.31	第 6 期 '91.6.1 ~ '93.5.31	第 7 期 '93.6.1 ~ '95.5.31	第 8 期 '95.6.1 ~ '97.5.31	第 9 期 '97.6.1 ~ '99.5.31	第 10 期 '99.6.1 ~ '01.5.31	第 11 期 '01.6.1 ~ '03.5.31	第 12 期 '03.6.1 ~ '04.3.31
赤松 秀雄	東大名誉教授， 分子研名誉教授	○	○	○	○ '88.1.8 死亡								
石川 忠雄	慶應大学長	○											
石塚 直隆	名大学長	○ ~'81.7.22											
飯島 宗一	名大学長	○ '81.9.1~	○	○	○ ~'87.7.21								
植村 泰忠	東大理教授， 東京理大教授	○	○	○									
神田 慶也	九大学長	○											
小谷 正雄	東京理科大学長	○											
小松 登	豊田中研所長	○	○										
齋藤 一夫	東北大理教授， 国際基督教大教授	○	○ ~'84.5.15			○	○	○					
榊 米一郎	豊橋技科大学長	○	○ ~'84.3.31										
島村 修	相模中央研最高顧問 理事	○	○										
田島弥太郎	遺伝研所長	○											
馬場 宏明	北大応電研所長	○	○	○	○								
福井 謙一	京大工教授， 京都工繊大学長， 基礎化学研究所長	○	○	○	○	○	○						
藤巻 正生	お茶女大家政教授， お茶女大学長	○	○	○									
向坊 隆	東大名誉教授	○											
森 大吉郎	宇宙研所長	○	○ '83.11.25 死亡										
亀谷 哲治	星薬科大学長		○	○									
角戸 正夫	姫路工大学長		○	○									
本多 波雄	豊橋技科大学長		○ '84.4.16~	○	○	○							

氏名	所属	第1期 '81.6.1 ~ '83.5.31	第2期 '83.6.1 ~ '85.5.31	第3期 '85.6.1 ~ '87.5.31	第4期 '87.6.1 ~ '89.5.31	第5期 '89.6.1 ~ '91.5.31	第6期 '91.6.1 ~ '93.5.31	第7期 '93.6.1 ~ '95.5.31	第8期 '95.6.1 ~ '97.5.31	第9期 '97.6.1 ~ '99.5.31	第10期 '99.6.1 ~ '01.5.31	第11期 '01.6.1 ~ '03.5.31	第12期 '03.6.1 ~ '04.3.31
田中 郁三	東工大理工学部学部長， 学長，学位授与機構長	○	○	○	○	○	○						
中嶋 貞雄	東大物性研所長	○											
小田 稔	宇宙研所長	○	'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， 徳島文理大薬教授			○	○	○							
鈴木 進	東北大金材研所長			○									
豊沢 豊	東大物性研所長， 中央大理工教授			○	○	○	○						
平野 龍一	東大名誉教授			○	○								
藤田 栄一	大阪薬科大学長， 京大名誉教授				○	○	○						
西原 春夫	早稲田大学総長				○	○							
倉田 道夫	三菱瓦斯化学(株) 顧問				○	○							
朽津 耕三	長岡技科大教授， 城西大理教授				○	○	○	○					
田丸 謙二	東京理科大理工教授				○	○	○						
早川 幸男	名大学長				○	'87.7.22~	○	'92.2.5 死亡					
千原 秀昭	阪大理教授，(社)化学 情報協会専務理事				○	○	○	○					
米澤貞次郎	近畿大理工学総合研教 授，近畿大理工教授				○	○	○	○					
赤池 弘次	統計数理研究所長					○	○	○					
三ヶ月 章	日本学術振興会学術相 談役，東大名誉教授					○	○	○					
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 (株)常任顧問						○	○	○				
佐野 博敏	東京都立大学長						○	○					
櫻井 英樹	東北大理学部長， 東北大理教授						○	○					
松永 義夫	神奈川大理教授						○	○					
秋本 俊一	学士院会員						○	○					

氏名	所属	第1期 '81.6.1 ~ '83.5.31	第2期 '83.6.1 ~ '85.5.31	第3期 '85.6.1 ~ '87.5.31	第4期 '87.6.1 ~ '89.5.31	第5期 '89.6.1 ~ '91.5.31	第6期 '91.6.1 ~ '93.5.31	第7期 '93.6.1 ~ '95.5.31	第8期 '95.6.1 ~ '97.5.31	第9期 '97.6.1 ~ '99.5.31	第10期 '99.6.1 ~ '01.5.31	第11期 '01.6.1 ~ '03.5.31	第12期 '03.6.1 ~ '04.3.31
岩村 秀	九大有機化学基礎研究センター教授							○	○				
加藤 延夫	名大総長							○	○	○			
黒田 晴雄	東京理科大総合研教授							○	○	○			
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 '81.6.1 ~ '83.5.31	第2期 '83.6.1 ~ '85.5.31	第3期 '85.6.1 ~ '87.5.31	第4期 '87.6.1 ~ '89.5.31	第5期 '89.6.1 ~ '91.5.31	第6期 '91.6.1 ~ '93.5.31	第7期 '93.6.1 ~ '95.5.31	第8期 '95.6.1 ~ '97.5.31	第9期 '97.6.1 ~ '99.5.31	第10期 '99.6.1 ~ '01.5.31	第11期 '01.6.1 ~ '03.5.31	第12期 '03.6.1 ~ '04.3.31
本多 健一	東京工芸大学長									○			
安岡 弘志	東大物性研所長									○			
山崎 敏光	理化学研 RI ビーム科学研究室協力員									○		○	
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												○

10-3 運営顧問（2004～）

氏名・所属（当時）	2004. 5.19 ~ 2006.3.31	2006. 4.1 ~ 2008.3.31
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 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	○	
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		○

10-4 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

10-5 外国人運営顧問（2004～）

氏名・所属（当時）	2004. 5.19 ~ 2005.3.31	2005. 4. 1 ~ 2007.3.31
FLEMING, Graham R. 米国カリフォルニア大学バークレー校教授	○	
JORTNER, Joshua イスラエルテルアビブ大学教授	○	
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		○

10-6 運営に関する委員会委員（1975～1981）

氏 名・所 属（当 時）	'75.7.15 ~ '77.3.31	'77.4.1 ~ '78.3.31	'78.4.1 ~ '79.3.31	'79.4.1 ~ '80.3.31	'80.4.1 ~ '81.3.31
浅原 照三 芝浦工大工教授	○	○			
伊藤 光男 東北大理教授	○				
井口 洋夫 分子研教授	○	○	○	○	○
大野 公男 北大理教授	○	○	○	○	○
角戸 正夫 阪大蛋白研所長	○	○	○		
神田 慶也 九大理教授	○	○ （理学部長）	○ （～'78.11.7）		
朽津 耕三 東大理教授	○			○	
田中 郁三 東工大理学部長	○			○ （教授）	
坪村 宏 阪大基礎工教授	○				
豊沢 豊 東大物性研教授	○	○			
長倉 三郎 東大物性研教授	○	○	○	○	
中島 威 東北大理教授	○	○	○		
細矢 治夫 お茶水大理助教授	○			○	○
又賀 昇 阪大基礎工教授	○			○	
村田 好正 学習院大理教授	○	○ （東大物性研 助教授）	○	○	
山寺 秀雄 名大理教授	○				
吉田 善一 京大工教授	○				
和田 昭充 東大理教授	○	○			
廣田 榮治 分子研教授		○ （委員長）	○ （委員長）	○ （委員長）	○ （委員長）
伊東 椒 東北大理教授		○	○		
大木 道則 東大理教授		○	○		
大瀧 仁志 東工大総合工研教授		○	○		
馬場 宏明 北大応用電研教授		○	○		
福井 謙一 京大工教授		○	○	○	
齋藤 喜彦 東大理教授		○		○	○
諸熊 奎治 分子研教授		○	○	○	
吉原經太郎 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					○

10-7 運営協議員 (1981 ~ 2004)

会長 (議長) 人・人事選考部会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

氏名	所 属	第1期 '81.5.1 ~ '83.4.30	第2期 '83.5.1 ~ '85.4.30	第3期 '85.5.1 ~ '87.4.30	第4期 '87.5.1 ~ '89.4.30	第5期 '89.5.1 ~ '91.4.30	第6期 '91.5.1 ~ '93.4.30	第7期 '93.5.1 ~ '95.4.30	第8期 '95.5.1 ~ '97.4.30	第9期 '97.5.1 ~ '99.4.30	第10期 '99.5.1 ~ '01.4.30	第11期 '01.5.1 ~ '03.4.30	第12期 '03.5.1 ~ '04.3.31
伊藤 憲昭	名大工教授	○ 共											
大野 公男	北大理教授	○ 人	○										
角 正 夫	阪大蛋白研所長	○ (副)											
朽津 耕三	東大理教授	○ 人	○ 人										
鈴木 洋	上智大理工教授	○											
千原 秀昭	阪大理教授	○ 人	○										
土屋 莊次	東大教育学教授	○ 共 (共~'82.4.30)		○									
豊 沢	東大物性研教授	○ 人		○ 人	○ (副) 人								
廣田 襄	京大理教授	○ 人 (人~'82.3.31)											
米澤貞次郎	京大工教授	○ 共 (共'82.5.1~)											
井口 洋夫	分子研教授	人	人	○ 人	○ ~'87.5.31								
岩村 秀	分子研教授	○ 人・共	○ 人	○ 人・共	○ 人・共	○ 人・共 ('90.1.29~ '92.3.31)	○ 人・共	○ 人・共					
木村 克美	分子研教授	○ 共	○ 共	○	○	○ 共	○ 人・共	○ 人・共					
花崎 一郎	分子研教授	○	○	○	○	○ 共		○ 人・共					
廣田 榮治	分子研教授	○ 人	○ 人	○ 人	○	○ ~'90.1.16)							
藤山 常毅	分子研教授	○ ('82.4.30死亡)											
諸熊 奎治	分子研教授	○ 人・共 (共~'82.4.30)	○ 人	○ 人	○ 共	○ 人	○ 人 (~'92.2.14)						
吉原經太郎	分子研教授	○ 人・共	○ 人・共	○ 人・共		○ 人		○ 人					
田中 郁三	分子研教授(客員) (東工大理教授)	○											
笛野 高之	分子研教授(客員) (阪大基礎工教授)	○	○ 人										

氏 名	所 属	第1期 '81.5.1 ~ '83.4.30	第2期 '83.5.1 ~ '85.4.30	第3期 '85.5.1 ~ '87.4.30	第4期 '87.5.1 ~ '89.4.30	第5期 '89.5.1 ~ '91.4.30	第6期 '91.5.1 ~ '93.4.30	第7期 '93.5.1 ~ '95.4.30	第8期 '95.5.1 ~ '97.4.30	第9期 '97.5.1 ~ '99.4.30	第10期 '99.5.1 ~ '01.4.30	第11期 '01.5.1 ~ '03.4.30	第12期 '03.5.1 ~ '04.3.31
山寺 秀雄	分子研教授(客員) (名大理教授)	○											
田仲 二郎	名大理教授	○	○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) (お茶女大理教授)	○(共'82.5.1~)	○	○	○	○人	○人						
山本 明夫	分子研教授(客員) (東工大名誉教授)	○	○		○	○							
茅 幸二	慶應大理工教授			○共	○共	○共							
菅野 暁	東大物性研教授			○	○								
坪村 宏	阪大基礎工教授			○人									
細矢 治夫	お茶女子理教授			○人	○人								
又賀 昌男	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 究科長				○								
安積 徹	東北大理教授				○人	○人							
原田 義也	東大養学教授				○人	○(副)人							
松尾 拓	九大工教授				○共								
丸山 和博	分子研教授(客員) (京大理教授)			○	○'88.6.1~								
大瀧 仁志	分子研教授				○'88.4.1~	○	○共	○人	○共	○共	○共	○人	○人
薬師 久彌	分子研教授				○'88.9.1~	○共	○人						

氏 名	所 属	第1期 '81.5.1 ~ '83.4.30	第2期 '83.5.1 ~ '85.4.30	第3期 '85.5.1 ~ '87.4.30	第4期 '87.5.1 ~ '89.4.30	第5期 '89.5.1 ~ '91.4.30	第6期 '91.5.1 ~ '93.4.30	第7期 '93.5.1 ~ '95.4.30	第8期 '95.5.1 ~ '97.4.30	第9期 '97.5.1 ~ '99.4.30	第10期 '99.5.1 ~ '01.4.30	第11期 '01.5.1 ~ '03.4.30	第12期 '03.5.1 ~ '04.3.31
木田 茂夫	分子研教授				○ ~'88.3.31	○ 人	○ 人	○ '94.4.1~	○ 人	○ 人	○ ~'00.3.31		
岩田 末廣	分子研教授					○ 人	○ 人						
志田 忠正	京大理教授					○ 人	○						
田隅 三生	東大理教授					○ 人	○						
仁科雄一郎	東北大金材研教授					○ 共	○						
村田 好正	東大物性研教授					○	○ (副)	○ 人					
中筋 一弘	分子研教授					○	○ 人	(~'94.3.31)					
飯島 孝夫	学習院大理教授						○ 人	○ (副)					
伊藤 公一	大阪市立大理教授						○ 人	○ 人					
小川禎一郎	九大総合理工教授						○ 人	○ 共					
小尾 欣一	東工大理教授						○ 共	○					
京極 好正	阪大蛋白研教授						○ 人	○ 人	○ 人	○ 人	○ 共	○ 共	
田中 晃二	分子研教授						○	○ 共	○ 共	○ 共			
齋藤 修二	分子研教授						○ ~'92.4.1	○ 共	○ 人				
川崎 昌博	北大電子科学研教授							○ 人	○ (副)人				
近藤 保	東大理教授							○ 人	○				
斎藤 軍治	京大理教授							○ 共	○ 共				
塚田 捷	東大理教授							○ 人	○ 人				
山口 兆	阪大理教授							○ 人	○ 共	○ 共	○	○ 共	
宇理須恆雄	分子研教授							('94.5.1~)	○ 共				
中村 晃	分子研教授							○	○ 人	○ 人	○ 共	○ 人	
小杉 信博	分子研教授								○ 共	○ 共	○ 人	○ ~'02.3.31	
渡辺 芳人	分子研教授								○	○ 共	○ 人		
大澤 映二	豊橋技科大工教授								○	○ 共			
生越 久靖	福井高専校長								○	○			
小谷 正博	学習院大理教授								○ 人	○ 人	○ 人	○ 共	
西 信之	分子研教授								○ 人	○ 人	○ 共	○ 共	
三上 直彦	東北大院理教授								○ 共	○ 人	○ 共	○ 共	
岡田 正	阪大院基礎工教授									○ 共	○ 人		
加藤 重樹	京大院理教授									○ 人	○ 人		

氏 名	所 属	第1期 '81.5.1 ~ '83.4.30	第2期 '83.5.1 ~ '85.4.30	第3期 '85.5.1 ~ '87.4.30	第4期 '87.5.1 ~ '89.4.30	第5期 '89.5.1 ~ '91.4.30	第6期 '91.5.1 ~ '93.4.30	第7期 '93.5.1 ~ '95.4.30	第8期 '95.5.1 ~ '97.4.30	第9期 '97.5.1 ~ '99.4.30	第10期 '99.5.1 ~ '01.4.30	第11期 '01.5.1 ~ '03.4.30	第12期 '03.5.1 ~ '04.3.31
小谷野猪之助 関 一彦	姫路工業大理教授 名大物質科学国際研 究会教授									○ 共 ○ 人	○ 共 ○ 人		
田中 武彦	九大院理教授									○ 人	○ 人		
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 (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	○ 人 (~'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											○	○
宇田川康夫	東北大多元研教授											○ (副) 人	○ (副) 人
太田 信廣	北大電子科学研教授											○ 人	○ 人
川合 眞紀	理化学研主任研究員											○	
榊 茂好	九大有機化学基礎 教授											○ 人	○ 人
菅原 正	東大院総合文化教授											○ 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												○

10-8 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 2004. 4. 1 ~ 2006. 3. 31	第2期 2006. 4. 1 ~ 2008. 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	○ 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	○(副)人
寺嶋 正秀 京大院理教授	○ 人	○ 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	○ 共
小川 琢治 分子研教授	○	○ ~'07.9.30
北川 禎三 分子研教授(岡崎統合バイオ)	○ ~'05.3.31	
岡本 裕巳 分子研教授	○ '05.4.1~	○ 人
小杉 信博 分子研教授	○ 人	○
小林 速男 分子研教授	共	○ 共 ~'07.3.31
大森 賢治 分子研教授		○ '07.4.1~
田中 晃二 分子研教授	○ 人・共	○ 人・共
永瀬 茂 分子研教授	○ 人	○ 人
西 信之 分子研教授	○ 共	○ 人・共
平田 文男 分子研教授	○	○
松本 吉泰 分子研教授	○ 人	○ 人 ~'07.3.31
横山 利彦 分子研教授		○ 人 '07.4.1~
薬師 久彌 分子研教授	○ 人	共 '07.4.1~
榎 敏明 東工大院理工教授		○ 人
加藤 昌子 北大院理教授		○ 共
関谷 博 九大院理教授		○
中嶋 敦 慶應大理工教授		○
山下 晃一 東大院工教授		○ 人

10-9 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任期更新に関する事項は、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。

附則

- 1 この規則は、平成 19 年 4 月 1 日から施行する。
- 2 この規則の施行の日の前日に任期を定めて雇用されている助手が施行の日に助教に配置換えされた場合の任期は、その者のこの規則の施行日における残任期間とする。

別表（第 2 条関係）

法第 4 条第 1 項第 1 号に掲げる 教育研究組織に該当する組織	該当する職	分子研規則 による種別	任 期	任期更新に関する事項	
				可 否	任 期
分子科学研究所に置かれる研究 領域及び研究施設	助教	5 年に満たない 任期を残す者	分子研規則に よる残任期間	可	任期を 定めず に採用
		5 年を越える 任期を残す者	5 年		

10-10 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。

10-11 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 研究所の准教授数名
- 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。

附則

この規則は、平成 19 年 4 月 1 日から施行する。