

「分子研リポート 2008」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	2008 年度の実施状況	38
3-3-3	共同利用研究実施件数一覧	51
3-4	国際交流と国際共同研究	52
3-4-1	外国人客員部門等及び国際交流	52
3-4-2	岡崎コンファレンス	55

3-4-3	分子科学研究所国際共同研究.....	57
3-4-4	日韓共同研究.....	58
3-4-5	東アジア多国間共同研究.....	59
3-4-6	その他.....	59
3-5	大学院教育.....	61
3-5-1	特別共同利用研究員.....	61
3-5-2	総合研究大学院大学二専攻.....	62
3-5-3	オープンキャンパス・分子研シンポジウム.....	66
3-5-4	夏の体験入学.....	66
3-5-5	総研大アジア冬の学校.....	68
4	研究支援等	71
4-1	技術課.....	72
4-1-1	技術研究会.....	72
4-1-2	技術研修.....	74
4-1-3	人事.....	75
4-1-4	受賞.....	76
4-2	安全衛生管理室.....	77
4-3	広報室.....	78
4-4	史料編纂室.....	81
4-5	社会との交流.....	83
4-5-1	自然科学研究機構シンポジウム.....	83
4-5-2	分子科学フォーラム.....	84
4-5-3	岡崎市民大学講座.....	85
4-5-4	その他.....	85
4-6	理科教育への協力.....	87
4-6-1	スーパーサイエンスハイスクール.....	87
4-6-2	コスモサイエンスコース.....	87
4-6-3	サイエンスパートナーシッププロジェクト.....	87
4-6-4	国研セミナー.....	88
4-6-5	小中学校での出前授業.....	89
4-6-6	職場体験学習.....	90
4-6-7	その他.....	90
4-7	一般公開.....	92
4-8	見学者受け入れ.....	93
5	各種事業	95
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).....	96
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).....	97
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).....	99
5-3-1	概要.....	99
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.....	99
5-3-3	イメージング・サイエンス.....	100
5-3-4	自然科学における階層と全体.....	101
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).....	103

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).....	105
5-5-1	概要.....	105
5-5-2	2008年度採択課題一覧(分子科学研究所担当分).....	107
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).....	109
5-7	最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム(文部科学省).....	113
5-8	光・量子科学研究拠点形成に向けた基盤技術開発 「量子ビーム基盤技術開発プログラム」(文部科学省).....	114
5-9	若手研究者交流支援事業～東アジア首脳会議参加国からの招へい～(日本学術振興会).....	115
5-9-1	全体趣旨.....	115
5-9-2	分子研主催プロジェクト課題について.....	115
5-9-3	実施状況.....	115
6	研究領域の現状.....	117
6-1	論文発表状況.....	117
6-2	理論・計算分子科学研究領域.....	118
	理論分子科学第一研究部門.....	118
	理論分子科学第二研究部門.....	130
	計算分子科学研究部門.....	137
6-3	光分子科学研究領域.....	149
	光分子科学第一研究部門.....	149
	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).....	175
	光化学測定器開発研究部門(極端紫外光研究施設).....	180
	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).....	183
	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).....	190
6-4	物質分子科学研究領域.....	193
	電子構造研究部門.....	193
	電子物性研究部門.....	208
	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
	安全衛生管理室.....	235
6-5	生命・錯体分子科学研究領域.....	237
	生体分子機能研究部門.....	237
	生体分子情報研究部門.....	252
	錯体触媒研究部門.....	260
	錯体物性研究部門.....	264
7	点検評価と課題.....	269
7-1	外国人運営顧問による点検評価.....	270
7-1-1	William H. Miller 外国人運営顧問.....	270
7-1-2	Alfred Laubereau 外国人運営顧問.....	273

7-2	国立大学法人評価委員会による評価結果	285
7-2-1	大学共同利用機関法人自然科学研究機構の中期目標期間に係る業務の 実績に関する評価結果（関係するところのみ抜粋）	285
7-2-2	学部・研究科等の研究に関する現況分析結果：自然科学研究機構分子科学研究所	290
8	研究施設の現状と将来計画	293
8-1	極端紫外光研究施設（UVSOR）	294
8-2	分子スケールナノサイエンスセンター	295
8-3	分子制御レーザー開発研究センター	297
8-4	機器センター	299
8-5	装置開発室	302
8-6	計算科学研究センター	303
9	平成 21 年度計画	307
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 21 年度）	307
10	資料	321
10-1	評議員（1976～1981）	321
10-2	評議員（1981～2004）	322
10-3	運営顧問（2004～）	326
10-4	外国人評議員（1976～2004）	327
10-5	外国人運営顧問（2004～）	328
10-6	運営に関する委員会委員（1975～1981）	329
10-7	運営協議員（1981～2004）	330
10-8	運営会議委員（2004～）	334
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	335
10-10	自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則	336
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	339

1. 序 言

いよいよ第一期中期計画の最後の年を迎えようとしています。暫定評価ではそれなりに高い評価を受けることが出来ましたが、21年度年度計画の作成と同時に第一期の最終取りまとめがまだ行われています。それと共に、第二期中期目標・中期計画の作成作業も始まっています。青天の霹靂の金融危機の影響で研究環境も厳しい状況となっておりますが、一日も早い回復を祈るばかりです。一方、毎年言っていることですが、法人化後の学術政策の状況には厳しいものがあります。学問の本質を見据えた「学術と文化」の発展の視点が重視されること、及び、過度な評価作業のための「評価疲れ」現象が解消されることを祈っています。

以前より所内で議論を重ねてきましたが、平成21年度から予算制度を若干改め、IMSフェローの待遇を改善すると共に、新たに、「分子研特別研究員」制度を開始することにしました。更に、「分子科学若手育成基金」を設立し、日本のみならず世界から優秀な博士課程の学生を集める努力を始めました。広く分子科学コミュニティの方々にもご協力をお願い致したいと思えます。

国の「光・量子科学研究拠点形成に向けた基盤技術開発」事業の一環として、平成20年度途中から開始された「量子ビーム基盤技術開発プログラム」と「最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム」に分子研が加わっています。前者は、分子研が中心となって名大及び京大との協力で進める5年計画、後者は、阪大、京大、及び、日本原子力研究開発機構関西光科学研究所とコンソーシアムを組んで10年計画で進められることになっています。国家基幹事業としての次世代スパコン開発事業はハードウェアの建設が順調に進行しており、分子研が責任を持って進めてい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も新しい次元に入っています。一方、「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」は金融危機の影響もあり、予算は依然として十分には付いていませんが、文科省も有効なシステムとして認識されており育成していただくものと信じています。

本分子研レポートは、何時もながら、研究所の現状と評価、及び、将来計画の議論がまとめられ、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すべく「真・善・美」と更にはその上にあるという「妙」の意識を目指して、独自の哲学を持って臥薪嘗胆、研鑽に励まねばなりません。各方面の皆様方のなお一層のご支援と叱咤激励を心より御願ひ申し上げます。

平成21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。

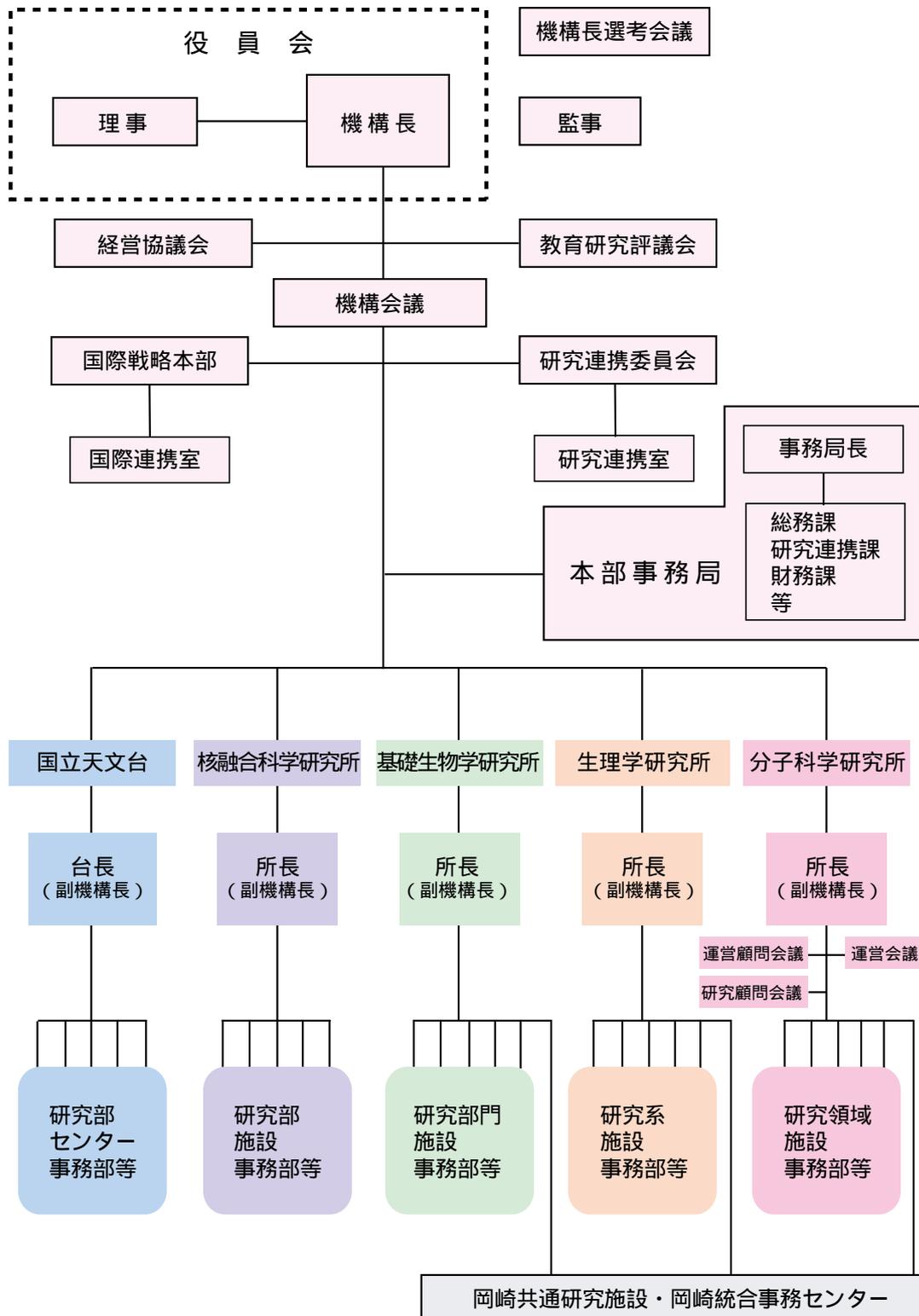
1965. 12.1 日本学会会議は、「分子科学研究所」(仮称)の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
197. 10. 1 学術審議会は、「分子科学研究所」(仮称)を緊急に設立することが適当である旨、文部大臣に報告した。
1974. 4.11 文部大臣裁定により、東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室(室長:井口洋夫前東京大学物性研究所教授,定員3名)及び分子科学研究所創設準備会議(座長:山下次郎前東京大学物性研究所長,学識経験者35人により構成)が設置された。
1974. 7. 6 分子科学研究所創設準備会議において、研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
1975. 4.22 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. 0 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. . 7 分子科学研究所研究棟(2,752 m²)が竣工した。
1978. .11 装置開発棟(1,260 m²),機器センター棟(1,05 m²),化学試料棟(1,06 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. . 1 電子計算機センター棟(1,429 m²)が竣工した。
1979. .24 実験棟第2期工事(,742 m²),極低温センター棟(1,444 m²)が竣工した。

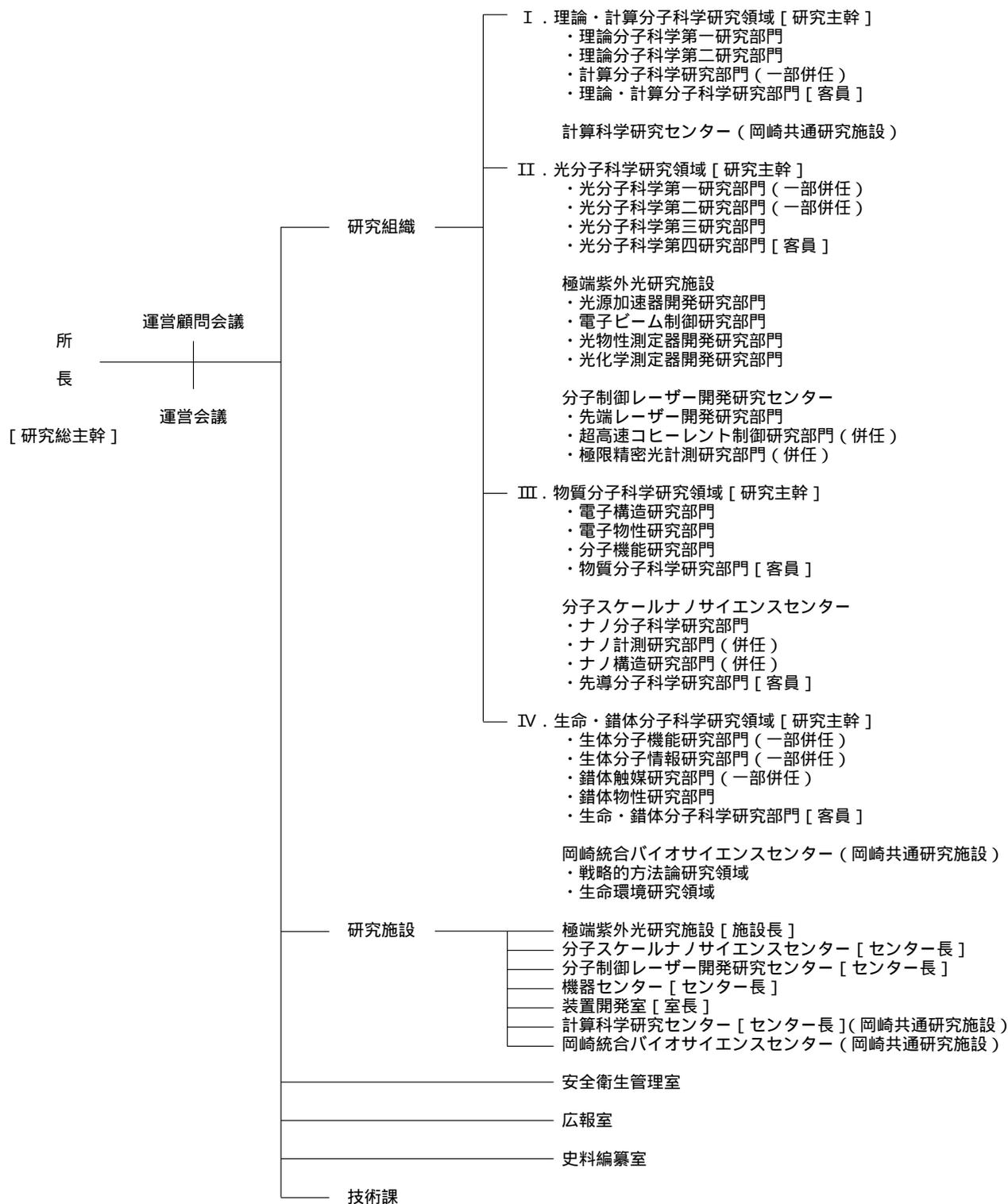
1979. 4. 1 分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され、管理局が総務部（庶務課，人事課，国際研究協力課），経理部（主計課，経理課，建築課，設備課），技術課に改組された。
1979. 11. 8 分子科学研究所創設披露式が挙行された。
1981. 4. 1 第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4.14 国立学校設置法の一部を改正する法律により，分子科学研究所と生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所，生理学研究所）は総合化され，岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され，管理局が岡崎国立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. 0 極端紫外光実験棟第1期工事（1,281 m²）が竣工した。
198. . 0 極端紫外光実験棟第2期工事（1,46 m²）が竣工した。
198. 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。
198. 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（,9 5 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. .27 極端紫外光実験棟（増築）（28 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。
199. 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. 1 電子計算機センター棟（増築）（951 m²）が竣工した。
1995. . 1 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. .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。
200. 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）（,81 m²）が竣工した。

2004. . 1 山手 5 号館 (NMR)(664 m²) が竣工した。
2004. . 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、運営顧問は4名であり、その内2名は教育研究評議会評議員と経営協議会委員のどちらかを兼ねている。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名となっている。

運営顧問（2008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
時任 宣博	京都大学化学研究所長
野口 宏（2008.7まで）	中日新聞編集局文化部長
田中 宏明（2008.8から）	中日新聞編集局文化部長

外国人運営顧問（2008年度）

MILLER, William H.	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共同研究について審議する。所長候補者の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 2008.4-2010. ）（ ；議長 ；副議長）

榎 敏 明	東京工業大学大学院理工学研究科教授
江 幡 孝 之	広島大学大学院理学研究科教授
加 藤 昌 子	北海道大学大学院理学研究科教授
篠 原 久 典	名古屋大学大学院理学研究科教授
関 谷 博	九州大学大学院理学研究科教授
中 嶋 敦	慶應義塾大学工学部教授
富 宅 喜代一	神戸大学大学院理学研究科教授
山 下 晃 一	東京大学大学院工学系研究科教授
山 下 正 廣	東北大学大学院理学研究科教授
渡 辺 芳 人	名古屋大学物質科学国際研究センター教授
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
岡 本 裕 巳	光分子科学研究領域教授
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

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（2008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
入 江 正 浩	立教大学教授

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（2008年度）（：部会長）

榎 敏 明（東工大教授）	岡 本 裕 巳（分子研教授）
江 幡 孝 之（広大教授）	小 杉 信 博（分子研教授）
富 宅 喜代一（神大教授）	西 信 之（分子研教授）
山 下 晃 一（東大教授）	平 田 文 男（分子研教授）
山 下 正 廣（東北大教授）	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（2008年度）（：委員長）

岩 佐 義 宏（東北大教授）	西 信 之（分子研教授）
関 谷 博（九大教授）	薬 師 久 彌（分子研教授）
中 原 勝（京大教授）	櫻 井 英 博（分子研准教授）
藤 井 正 明（東工大教授）	見 附 孝 一 郎（分子研准教授）
宇理須 恆 雄（分子研教授）	米 満 賢 治（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（2008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領域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	2009.2.9~2.10, .2~3.
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	主幹会議で検討準備
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		2009. .18
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	委員会規則	2008.11.19
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	2008.7. 1 2009.2.10
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		2009. .1
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	安全衛生委 管理規則	2008.10.28
図書委員会	購入図書の選定。他	施設から必要数		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		2008.8.29
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		2008.4.1, 5.19, 7. 0, 10.9, 12.12, 12.1 , 12.24, .25
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		随時メール で対応

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	2008.4.24, 6.16, 8.1, 10.15, 12.22
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	2008.4.2, 5.20, 6.17, 7.11, 9.16, 10.21, 11.18, 12.16, 2009.1.20, 1.22, 2.17, .17
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	2008.8.12, 9.11
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	2009.2.25
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	2008.5.21, 7.16, 9.17, 11.12, 2009.1.21, .18
岡崎共同利用研究者宿泊施設委員会	宿泊施設（ロジ）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	2008.8.18
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	2009. .16
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審議する。	安全衛生統括代表者 1 安全衛生管理者 2 職員 2	委員会規則	2008.4.2, 5.20, 6.17, 7.8, 8.20, 9.16, 10.21, 11.18, 12.16, 2009.1.20, 2.17, .17

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，教授 1 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	2008.11.7
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	2008.7.28, 2009.1.19, .5
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	2008.6.4, 2009.2.25
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	2008.8.12, 2009. .16
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	2008.7.17, 2009. .17
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	2008.6.25
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	2008.4.21, 6.6, 12.24
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	2008.6.25, 10.29, 2009.1.21
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		2008.6.17, 9. 0
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	2008.5.28
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	2008.5.28
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	2008.5.14, 12.17, 2009.1.8, .14
施設整備委員会	岡崎 3 機関各地区の施設整備，エネルギー及び環境保全等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	2008.7.1
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	2008.6.20, 10. 0

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	研究總主幹(併)
長 倉 三 郎	特別顧問, 名譽教授
井 口 洋 夫	特別顧問, 名譽教授
伊 藤 光 男	特別顧問, 名譽教授
茅 幸 二	特別顧問, 名譽教授
岩 田 末 廣	名譽教授
岩 村 秀	名譽教授
北 川 禎 三	名譽教授
木 村 克 美	名譽教授
小 林 速 男	名譽教授
齋 藤 修 二	名譽教授
花 崎 一 郎	名譽教授
廣 田 榮 治	名譽教授
丸 山 有 成	名譽教授
諸 熊 奎 治	名譽教授
吉 原 經太郎	名譽教授

理論・計算分子科学研究領域 研究主幹(併) 永 瀬 茂

理論分子科学第一研究部門

永 瀬 茂	教 授
大 塚 勇 起	助 教
JANG, Joonkyung	外国人研究職員(釜山国立大学 准教授) '08.7.1 ~ 8. 1 '09.1.1 ~ 2.28
田 中 雅 人	研究員
WANG, Lu	研究員
河東田 道 夫	専門研究職員
GAO, Xingfa	専門研究職員
GUO, Jingdong	専門研究職員
三 宅 敏 子	専門研究職員
WON, Jongok	特別訪問研究員
信 定 克 幸	准教授
安 池 智 一	助 教
野 田 真 史	研究員
岩 佐 豪	学振特別研究員
久保田 陽 二	専門研究職員
柳 井 毅	准教授
倉 重 佑 輝	助 教

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
DAS, Sankar Prasad	外国人研究職員(Jawaharlal Nehru University) '09. .1 ~ '10.2.28
丸 山 豊	専門研究職員
宮 田 竜 彦	専門研究職員

石塚良介	専門研究職員
PHONGPHANPHANEE, Saree	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
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(委嘱)(名大院工)
齊藤真司	教授
金鋼	助教
矢ヶ崎琢磨	研究員
炭竈享司	研究員
小林千草	専門研究職員
千葉真人	専門研究職員
石田干城	助教
江原正博	教授(兼)

理論・計算分子科学研究部門(客員研究部門)

相田美砂子	教授(広大院理)
西野正理	准教授(物材機構計算科学セ)
北尾彰朗	准教授(東大分子細胞生物学研)

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
原田洋介	研究員
大島康裕	教授
長谷川宗良	助教
BAEK, Dae Yul	研究員
PAVLOV, Lubomir	学振外国人招へい研究者 '07.5. 1 ~ '08.4.2

光分子科学第二研究部門

大森賢治	教授
香月浩之	助教
武井宣幸	助教
VESHAPIDZE, Giorgi	学振外国人特別研究員 '08.11.18 ~ '10.11.17
島田紘行	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
長坂将成	助教
山根宏之	助教
KIMBERG, Victor	学振外国人特別研究員 '06.8.6 ~ '08.8.5 研究員 '08.8.16 ~
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
KAFLE, Bhim Prasad	研究員
中島 弘 一	特別訪問研究員
菱川 明 栄	准教授
伏谷 瑞 穂	助 教
TSENG, Chien-Ming	研究員

光分子科学第四研究部門（客員研究部門）

緑川 克 美	教 授（理研基幹研）
富永 圭 介	教 授（神大分子フォトサイエンス研究セ）
岡田 和 正	准教授（広大院理）
雨宮 健 太	准教授（高工ネ機構物質構造科学研）

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
横山 利 彦	教 授
中川 剛 志	助 教
高木 康 多	助 教
山本 勇	研究員
唯 美津木	准教授
楊 勇	特別訪問研究員
翁 志 煥	特別訪問研究員

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 '06.10.24 ~ '08.10.2
中野 千賀子	特別協力研究員
中村 敏 和	准教授
古川 貢	助 教
岩瀬 文 達	研究員

分子機能研究部門

江 東 林	准教授
石塚 智 也	助 教
GUO, Jia	学振外国人特別研究員 '07.10.1 ~ '09.9. 0
西村 勝 之	准教授
飯島 隆 広	助 教
上釜 奈緒子	研究員

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）
阿波賀 邦 夫	教 授（名大物質科学国際研究セ）
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)
眞 壁 幸 樹	助 教(兼)(岡崎統合バイオサイエンスセンター)
加 藤 晃 一	教 授(兼)(岡崎統合バイオサイエンスセンター)
山 口 拓 実	助 教
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
YANG, Dah-Yen	外国人研究職員(台湾中央研究院 研究員) '09.2.1 ~ '10.1. 1
浅 野 豪 文	学振特別研究員

錯体触媒研究部門

魚 住 泰 広	教 授
大 迫 隆 男	助 教
松 浦 豊	研究員
浜 坂 剛	研究員
平 井 義 則	共同研究員
太 田 英 俊	特別訪問研究員
山 田 陽 一	特別訪問研究員
陳 青 根	特別訪問研究員
永 田 央	准教授(併)
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
PENG, Shie-Ming	外国人研究職員(台湾大学 教授) '08.9. ~ 12.24
小 澤 弘 宜	研究員
福 嶋 貴	研究員
滝川(越山)圭美	学振特別研究員
佐 藤 俊 介	共同研究員

生命・錯体分子科学研究部門(客員研究部門)

伊 東 忍	教 授(阪大院工)
長谷川 美 貴	准教授(青学大理工)
高 橋 聡	准教授(阪大蛋白研)

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
阿 達 正 浩	助 教

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
寺嶋健成	学振特別研究員
IM, Hojun	特別訪問研究員
恒川雅典	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
CADATAL, Marilou	学振特別研究員

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)
平本昌宏	教授
嘉治寿彦	助教
池滝何以	研究員
鈴木敏泰	准教授
阪元洋一	助教
永田央	准教授
今宏樹	研究員
河尾真宏	学振特別研究員
櫻井英博	准教授
東林修平	助教
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)
加藤晃一	教授(併)

先導分子科学研究部門(客員研究部門)

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
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
片平知里	共同研究員
小川幸慈	共同研究員
鈴木剛	共同研究員
齋川次郎	特別訪問研究員
大石裕	特別訪問研究員

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)

極限精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) 田中晃二
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
眞壁幸樹	助教
CHAUDHURI, K. Tapan	外国人研究職員(インド科学技術研究所 准教授) '07.7. 0 ~ '08.7.27
向山厚	研究員
VOLETY, Srinivas	学振外国人招へい研究者 '07.7.1 ~ '08.4.16
中村敬	専門研究職員
藤井浩	准教授
倉橋拓也	助教(兼)
野中大輔	研究員

生命環境研究領域

加藤晃一	教授
山口拓実	助教(兼)
神谷由紀子	研究員
SERVE, Olivier Pierre André	研究員
杉原隆広	特別訪問研究員

計算科学研究センター センター長(併) 平 田 文 男

岡 崎 進	教 授(兼)
齊 藤 真 司	教 授(兼)
金 鋼	助 教(兼)
江 原 正 博	教 授
石 田 干 城	助 教(兼)
大 野 人 侍	助 教
松 田 成 信	専 門 研 究 職 員
山 田 清 志	専 門 研 究 職 員
石 谷 隆 広	専 門 研 究 職 員
米 澤 東 夫	専 門 研 究 職 員
倉 本 圭	共 同 研 究 員

技術課 課 長 鈴 井 光 一

機器開発技術班 班 長

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

齊 藤 碧 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

澤 昌 孝 技術職員

計算科学技術二係

岩 橋 建 輔 技術職員

長 屋 貴 量 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

賣 市 幹 大 技術職員

原 田 美 幸 技術職員

南 野 智 技術職員

* 整理日付は2008年12月1日現在。ただし、外国人研究者で2008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会に委ねられている。さらに、厳密な選考を経て採用された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（2009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）

区分 \ 職名	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	44	7	241	151	198
転出者数	5	29	58	201	115	184
現員	1	15()	15	40	6	14

() は委嘱で外数。

客員研究部門

区分 \ 職名	教授	准教授
就任者数	124	16
現員	6	7

外国人客員研究部門

区分 \ 職名	分子エネルギー変換研究部門*		極端紫外光研究部門*		外国人客員**
	教授	助教授	教授	助教授	教授
就任者数	4	29	4	22	5

* 外国人客員研究部門は、2007年3月31日限りをもって廃止。

** 2007年度以降の就任者数。

2-6 財 政

2-6-1 現員

2008.12.1

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		()	(2)	8	14(5)		14(5)
光分子科学研究領域		4(2)	2()	9	15(5)		15(5)
物質分子科学研究領域		(2)	4(1)	8	15()		15()
生命・錯体分子科学研究領域		(4)	0(5)	6(1)	9(10)		9(10)
研究施設		2(1)	6(2)	9	17(15)		17(15)
技術課						6	6
小計	1	15(24)	15(1)	40(1)	71(8)	6	107(8)
岡崎統合バイオサイエンスセンター			1	1()	5()		5()
計算科学研究センター		1(1)		(2)	1()		1()
合計	1	19(25)	16(1)	41(6)	77(44)	6	11 (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	2004 年度	2005 年度	2006 年度	2007 年度	2008 年度
人件費	1,264,647	1,298, 82	1,295,705	1,2 0,465	1,187,815
運営費，設備費	2, 74, 88	2,011,607	1,859,207	1,99 ,108	2,200,6 4
施設整備費	5,577	1,618, 2	0	7,140	0
合計	,644,612	4,928, 21	,154,912	,2 0,71	, 88,449

寄付金

区 分	2004 年度	2005 年度	2006 年度	2007 年度	2008 年度
件数 (件)	21	21	15	10	62
金額 (千円)	21,469	7,647	20,155	9,700	16,455

共通研究施設を除く

科学研究費補助金

区 分	2004 年度	2005 年度	2006 年度	2007 年度	2008 年度
件数 (件)	59	61	74	75	7
金額 (千円)	249,900	275,910	76,148	4,257	00,147

岡崎共通研究施設を除く
間接経費を含む

2008 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		1	0	1
特別推進研究		1	0	1
新学術領域研究	領域	2	2	4
新学術領域研究	課題	0	0	0
特定領域研究		16	4	20
萌芽研究			0	
若手研究	(S)	0	0	0
若手研究	(A)	4	0	4
若手研究	(B)	16	0	16
基盤研究	(S)	1	0	1
基盤研究	(A)	5	0	5
基盤研究	(B)	11	2	13
基盤研究	(C)	4	0	4
特別研究員奨励費			1	1
特別研究員奨励費	外国人	4	0	4
若手研究 (スタートアップ)		1	1	2
奨励研究		1	0	1
合計		7	10	17

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		5,000	0	5,000
特別推進研究		6,800	0	6,800
新学術領域研究	領域	11,200	29,800	41,000
新学術領域研究	課題	0	0	0
特定領域研究		55,702	1,289	68,991
萌芽研究		6,800	0	6,800
若手研究	(S)	0	0	0
若手研究	(A)	12,921	0	12,921
若手研究	(B)	22,000	0	22,000
基盤研究	(S)	1,864	0	1,864
基盤研究	(A)	28,97	0	28,97
基盤研究	(B)	52,550	9,900	62,450
基盤研究	(C)	5,600	0	5,600
特別研究員奨励費		2,800	1,100	,900
特別研究員奨励費	外国人	2,600	0	2,600
若手研究(スタートアップ)		1,50	1,40	2,690
奨励研究		510	0	510
合計		246,670	55,429	02,099

* 間接経費を除く。

共同研究

(単位：千円)

区分	2004年度	2005年度	2006年度	2007年度	2008年度
件数(件)	1	17	16	1	18
金額(千円)	14,740	9,4	40,82	25,571	49,220

2008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	2004年度	2005年度	2006年度	2007年度	2008年度
戦略的創造研究推進事業 (JST)	7	10	12	11	11
	21,827	24,115	2,500	87,9	78,455
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))	2			4	4
	916,847	584,12	496,297	590,576	621,02
その他	6	6		4	7
	16,792	64,907	1,75	0,758	92,94
合計	15	19	18	19	22
	1,102,466	67,4	560,172	708,67	792,151

(岡崎共通研究施設を含む)
2008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。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有機・無機材料（触媒、炭素系ナノ構造体、レーザー用セラミックなど）の創成、バイオセンサーの開発、原子分子ビームの運動量測定法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19年度の発明件数は、個人有としたもの1件、機構有としたもの6件（実出願6件）、20年度は、個人有0件、機構有6件（実出願4件）であった（20年12月18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（2008.12）岡崎情報図書館は雑誌1,476種（和28、洋1,19），単行本95,88冊（和14,597、洋80,791）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11,000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2,86 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200余名が参加可能な大会議室，120名の中会議室，100名の小会議室などが設けられている。中・小会議室はそれぞれ会議等の目的に応じて2分割して使用することもできる。

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と分子構造，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
 - 4 ,高精度多参照理論の手法開発と計算

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 ,生体高分子の溶媒和構造および分子認識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 ,光誘起非線型現象，秩序形成および融解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電子状態，物性，ダイナミクスに関する理論・計算科学的研究

- 研究課題
- 1 ,高精度電子状態理論の開発と理論精密分光・光物性科学への応用
 - 2 ,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

理論・計算分子科学研究部門（客員）

研究目的

- 1 ,分子集積の仕組みとその性質についての理論・計算科学的研究
- 2 ,分子集合体における外場に誘起される協力現象の理論的研究
- 3 ,生体超分子系の構造形成と機能ダイナミクスの理論的・計算科学的研究

- 研究課題
- 1 ,水分子クラスターのトポロジータンな解析
 - 2 ,生体分子間の特異的認識についての理論シミュレーション
 - 3 ,光誘起相転移現象の理論的研究
 - 4 ,分子集合体の磁気物性の理論的研究
 - 5 ,生体超分子系の構造形成機構
 - 6 ,生体超分子系の機能ダイナミクス

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グラフィの研究
 - 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
3 ,高効率分子変換を実現する新規触媒表面の設計と触媒作用の解明

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 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おして，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 ,配位子設計に基づく金属錯体の反応制御
 - 2 ,金属錯体による小分子の活性化
 - 3 ,二酸化炭素の6電子還元反応
 - 4 ,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装置，汎用化学分析装置，汎用分光計測装置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・ナノ加工技術の高度化，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6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) 若手研究会等：院生が主体的に企画する分子科学に関連する研究会等。
- (5) 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。
- (6) 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 2008 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	
溶質 - 溶媒系における高次モーメントのエネルギー緩和過程	島根大学教育学部	西山 桂
分子動力学計算による液体の相分離ダイナミクス	東北大学大学院理学研究科	梶本 真司
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
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
金属ナノキャビティー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
立体規則性ポリ(3_アルキルチオフェン) ナノファイバーの顕微分光学的研究	埼玉大学大学院理工学研究科	坂本 章
高分解能レーザー分光による励起分子の構造とダイナミクスの研究	京都大学大学院理学研究科	馬場 正昭
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
多層カーボンナノチューブ固化体の結合様式	東北大学大学院環境科学研究科	佐藤 義倫
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
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
溶液中クラスタのラマンスペクトル	福岡教育大学教育学部	小杉健太郎
(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
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
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
フラストレート磁性体のスピンドイナミクス研究	福井大学大学院工学研究科	菊池 彦光
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
フェロセン系電荷移動錯体の電子状態評価・相転移探索	神戸大学大学院理学研究科	持田 智行
軟X線による無機透明物質のアブレーション	筑波大学大学院数理工学物質科学研究科	牧村 哲也
固体表面への細胞接着における界面制御	横浜国立大学大学院工学研究院	荻野 俊郎
神経毒性A 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
実験および分子動力学法による生体膜への分子付着過程の研究	自然科学研究機構核融合研究所	田中 基彦
低温プラズマによる生体高分子パターンニング	大阪大学大学院工学研究科	浜口 智志
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	名古屋大学大学院工学研究科	高嶋 圭史
次世代自動車用リチウムイオン二次電池の正極活物質の表面分析	(独)産業技術総合研究所関西センター	鹿野 昌弘
高分解能光電子分光による1次元金属ナノカーボンの低温電子物性研究	東京工業大学原子炉工学研究所	尾上 順
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
環境調和型固体担持金属触媒の創成	琉球大学理学部	鈴鹿 俊雅
エネルギー獲得戦略としての表面修飾型酸化反応触媒の構築	中央大学理工学部	芳賀 正明
光増感部位を連結した酸化反応触媒の開発とその電極表面固定化	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
熱輸送の現れる非平衡系での量子効果の研究	横浜国立大学大学院工学研究院	白崎 良演
半導体フォトリソグラフィ結晶の基礎研究	福井大学大学院工学研究科	勝山 俊夫
イオン液体中における金属ナノクラスターの創製	愛知教育大学教育学部	日野 和之
新しいポリマー修飾金ナノ粒子の合成	京都大学化学研究所	山子 茂
二核マンガン錯体の水の酸化触媒活性に及ぼす電子構造効果の解明	新潟大学教育研究院人文社会・教育科学系	八木 政行
希土類強磁性半導体薄膜の電子状態の研究	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
環状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
ナノギャップを有する電極作製	大阪大学大学院理学研究科	田中 啓文
アザフラレンの合成に関する研究	大阪大学大学院工学研究科	南方 聖司
ずれ応力によるクロミズムに関する研究	山口東京理科大学基礎工学部	井口 眞
RISM理論を用いたタンパク質の水和構造についての研究	慶應義塾大学理工学部	光武 亜代理
直截的分子変換法を利用した 共役多置換芳香族化合物の合成と利用	慶応義塾大学理工学部	垣内 史敏

課 題 名 (後期)	代 表 者	
RISM理論を用いたタンパク質の水和構造についての研究	慶應義塾大学理工学部	光武 亜代理
分子動力学計算による液体の相分離ダイナミクス	東北大学大学院理学研究科	梶本 真司
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
天然らせん状高分子 / 機能性ナノ材料複合体の近接場観察	京都府立大学大学院生命環境科学研究科	沼田 宗典
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
高分解能レーザー分光による励起分子の構造とダイナミクスの研究	京都大学大学院理学研究科	馬場 正昭
分子デバイス研究のための有機薄膜における内部電子状態観測	東京大学大学院新領域創成科学研究科	川合 真紀
イオン液体中における金属ナノクラスターの創製	愛知教育大学教育学部	日野 和之
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
2成分混合溶液系の低振動数ラマンスペクトル	福岡教育大学教育学部	小杉健太郎
(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
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
(Me ₆ EDO-TTF) ₂ PF ₆ の相転移現象の分光学的研究	京都大学物質 - 細胞統合システム拠点	村田 剛志
水素結合を持つ分子伝導体の分光学的研究	大阪大学大学院理学研究科	山本 貴
ずれ応力によるクロミズムに関する研究	山口東京理科大学基礎工学部	井口 眞
光化学系 II 複合体の多周波 ESR 研究	東北大学物質科学研究所	松岡 秀人
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
神経毒性 A 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
実験および分子動力学法による生体膜への分子付着過程の研究	自然科学研究機構核融合研究所	田中 基彦
低温プラズマによる生体高分子パターンニング	大阪大学大学院工学研究科	浜口 智志
ナノギャップを有する電極作製	大阪大学大学院理学研究科	田中 啓文
原子間力顕微鏡を用いたパターン化モデル生体膜の構造・物性評価	(独)産業技術総合研究所	森垣 憲一
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	中央大学理工学部	庄司 一郎
マイクロチップレーザーのモードロック化に関する研究	静岡大学工学部	杉田 篤史
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
3原子分子に関する多価イオン分子状態の安定性解明	新潟大学理学部	副島 浩一
アルカリドープ1次元ピナツツ型ナノカーボンの in situ 高分解能光電子分光	東京工業大学原子炉工学研究所	尾上 順
電子ドープ希土類強磁性半導体薄膜の電子状態の研究	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
高次元希土類ナノ構造体の開発と構造ゆらぎに伴う光物性測定	島根大学教育学部	西山 桂
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
新しいポリマー修飾金ナノ粒子の合成	京都大学化学研究所	山子 茂
水溶性高分子を用いたブーメラン型触媒の開発	大阪工業大学工学部	大高 敦

環境調和型固体担持金属触媒の創成	琉球大学理学部	鈴鹿 俊雅
レドックスに駆動される錯体分子内メタラサイクル形成反応	福島大学共生システム理工学類	大山 大
エネルギー獲得戦略としての表面修飾型酸化反応触媒の構築	中央大学理工学部	芳賀 正明
光増感部位を連結した酸化反応触媒の開発とその電極表面固定化	東京理科大学理学部	宮里 裕二
プテリンジチオレンモリブデン錯体の合成と電子状態の解明	大阪市立大学大学院理学研究科	杉本 秀樹
球状蛋白質のフォールディング機構についての研究 (2)	名古屋大学大学院理学研究科	榎 互介
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 敏男
固定化イリジウムダイマーの表面構造と触媒反応特性の解明	東京大学大学院理学系研究科	岩澤 康裕
パーフルオロシクロブタンの多価イオン化と解離	広島大学大学院理学研究科	田林 清彦
高精度量子化学計算によるポリエン分子の π - π^* 励起状態の理論的研究	広島大学大学院総合科学研究科	伊藤 隆夫

(3) 研究会

物質系と生体系での自己組織化——異分野融合的研究の新展開に向けて——
2008年8月7日(木)～8日(金) 岡崎コンファレンスセンター

8月7日(木)

13:00- 開会の挨拶

座長 吉沢道人

13:10- 白井健悟(理研・OSC)
「天然タンパク質を利用した自己組織化分子ブロック開発」

13:40- 阿部 洋(理研・基幹研)
「機能性人工核酸の創製」

14:20- 藪 浩(東北大多元研)
「自己組織化による高分子材料の創成と機能化」

14:50- 岡本 茂(名工大院工)
「超高分子量ブロック共重合体を用いたフォトニック結晶の自己組織化的創製」

座長 太田 薫

15:40- 永山國昭(岡崎統合バイオ)
「位相差電顕の開発と応用」

16:40- ポスター発表(中会議室)

19:00- 懇親会

8月8日(金)

座長 佐藤宗太

9:00- 高谷 光(京大化研)
「メタル化ペプチドを用いる金属の精密集積制御」

9:40- 吉沢道人(東工大資源研)
「自己組織化による芳香環多重構造体の構築と機能発現」

10:10- 田代健太郎(物材機構)
「材料を指向した 電子化合物の自己組織化」

座長 佐野健一

11:00- 米倉功治(理研・米倉生体機構)
「低温電顕微鏡法による生体超分子構造の解析」

11:30- 加納英明(東大院理)
「白色レーザーを用いた多光子分光イメージング」

座長 高岡 裕

13:00- 佐野健一(理研・基幹研)
「人工ペプチドの分子認識能はデバイス開発にどこまで使えるのか？」

13:30- 村上達也(藤田保健衛生大)
「生体適合性ナノ粒子の作製と薬理的機能解析」

14:00- 濱田格雄(阪大院理)
「多角体を用いた細胞増殖・分化制御に向けた取り組み」

14:30- 櫻井英博(分子研)
「おわん型共役化合物『バッキーボウル』の化学」

15:10- 閉会の挨拶

配位子場制御に基づく機能性錯体の創成と応用～生体から触媒およびデバイスまで～
2008年7月18日(金)～19日(土) 岡崎コンファレンスセンター

7月18日(金)

9:10- 伊東 忍

開会：趣旨説明

座長 渡辺芳人(名大物質国際センター)

9:20- 齋藤正男(東北大多元研)

X線結晶構造解析によるヘムオキシゲナーゼ反応の可視化

10:00- 城 宜嗣(理研播磨)

呼吸酵素の分子進化：一酸化窒素から酸素へ

座長 青野重利(岡崎統合バイオ)

10:40- 林 高史(阪大院工)

ヘムタンパク質超分子集合体構築

11:20- 上野隆史(名大院理)

部品タンパク質が拓く生体分子配位化学

座長 船橋靖博(名工大院工)

13:20- 成田吉徳(九大先導研)

化学モデルを用いたヘムにおける酸素活性化とチトクロムc酸化酵素酸素代謝機構

14:00- 小寺政人(同志社大理工)

Bis-TPA型二核化配位子を用いたトリオキシニ鉄(IV)錯体

14:40- 古館英樹(金沢大院自然科学)

酸素活性種を含む単核鉄錯体の合成と機能制御

座長 小野田 晃(阪大院工)

15:40- 人見 穰(同志社大理工)

アミド配位を有する単核鉄錯体による過酸化水素の活性化
——ヒドロペルオキシド基の酸素酸素開裂様式の制御を目指して——

16:20- 小坂田耕太郎(東工大資源研)

含遷移金属ロタキサン——固体状態及び溶液中の集合挙動と機能

17:00- 田中晃二(分子研)

アクア-オキシラジカル変換を経由する水の4電子酸化反応

18:00- 懇親会

7月19日(土)

座長 多喜正泰(京大院人間環境)

9:00- 西原 寛(東大院理)

新しい多重機能を有するフォトクロミック錯体

9:40- 菊地和也(阪大院工)

錯体化学を応用した緩和時間変化型機能性MRIプローブ

座長 荘司長三(名大院理)

10:20- 樋口恒彦(名市大院薬)

ヘム-ペルオキシドの化学におけるチオレート軸配位子の機能：シトクロムp450との関連

11:00- 鍋島達弥(筑波大院数理物質)

配位構造の形成および構造制御による応答性機能の発現

座長 倉橋拓也(岡崎統合バイオ)

13:00- 増田秀樹(名工大院工)

Nitrile hydratase 活性中心の構造活性相関の生物無機化学的アプローチとの関連

13:40- 川口博之(東工大院理工)

遷移金属ヒドリド錯体による小分子活性化——配位子の効果——

座長 伊東 忍(阪市大院理)

14:20- 久枝良雄(九大院工)

生体関連環状テトラピロール系金属錯体の反応特性と触媒機能

15:00- 杉本秀樹(阪市大院理)

6属金属酵素活性中心における末端カルコゲノイドと酸化還

15:40- 巽 和行(名大院理)

鉄硫黄クラスターの新規合成法——還元系金属酵素の活性部位モデル構築への挑戦

16:20- 青野重利

閉会の挨拶

プラズモニック物質と分子科学研究
2009年1月23日(金) 分子科学研究所 研究棟201号室

- 9:20- 開会：趣旨説明
9:30-10:00 上野貢生(北大電子研)
「プラズモン増強を利用した非線形光化学反応場の創成」
10:00-10:30 辻 剛志(九大先端研)
「光でナノ粒子の形状を操ることは可能か？」
10:30-11:00 田丸博晴(東大先端研)
「巨視的な表面構造周辺の電磁場に関する考察」
11:00-11:30 古部昭広(産総研)
「プラズモン誘起界面電子移動の超高速ダイナミクス」
11:30-12:00 早澤紀彦(理研)
「プラズモニック近接場顕微鏡によるナノスケール分光」

13:30-14:00 中島龍也(東北大院理)
「グリーン関数法による局在電磁場の研究」
14:00-14:30 松田一成(京大化研)
「半導体量子ナノ構造におけるプラズモン共鳴を用いた蛍光増強と制御」
14:30-15:00 金原正幸(筑波大院数理物質)
「金ナノ粒子の粒径制御」
15:00-15:30 飯田琢也(大阪府大院工)
「デザインされた局在光場による分子系光応答制御の理論」

16:00-16:30 久保 敦(筑波大院数理物質)
「表面プラズモンポラリトンの超高速ダイナミクス」
16:30-17:00 伊藤民武(産総研)
「表面増強ラマン散乱におけるプラズモンと分子双極子との強い電磁相互作用の定量評価」
17:00-17:30 岡崎健一(名大院工)
「銀ナノキューブへの位置選択的電気化学析出による金ナノフレーム構造体の作製」
17:30-18:00 井村考平(分子研)
「近接場分光法によるプラズモン波動関数の研究」
18:00- 閉会挨拶
18:30-20:00 懇親会

ピラジカル化学とその展望
2009年3月5日(木)～6日(金) 分子科学研究所 山手3号館大会議室

- 3月5日(木)
12:30～ 受付
13:00～13:10 開会(趣旨説明) 井上克也(広島大院理)
座長：井上克也
13:10～13:40 阿波賀邦夫(名大物質科学国際研究センター)
「有機ラジカルエレクトロニクスへの展開」
13:40～14:10 森田 靖(阪大院理)
「電子拡張型フェナレニルラジカルの新展開」
14:10～14:40 久保 孝史(阪大院理)
「非局在型一重項ピラジカルにおける不対電子間相互作用の実験的考察」
座長：久保孝史
15:00～15:30 大塚 雄一(兵県大物質理)
「拡張ハバード模型による1重項ピラジカル電子状態の解析」
15:30～16:00 中野 雅由(阪大基礎工)
「開殻分子系の非線形光学効果の理論」
16:00～16:30 奥村 光隆(阪大院理)
「p-NPNN 分子結晶の磁気的相互作用の理論的研究」
16:30～17:00 山口 兆(阪大極限量子科学研究センター)
「化学反応における軌道対称性の破れの理論」
中筋 一弘(福井工大)総括・コメント(1)
18:00～ 懇親会

3月6日(金)

座長: 松田健児

9:00 ~ 9:30

鈴木 修一(阪市大院理)

「シングレットジラジカルカチオン: 2位電子ドナー置換ピレンジ(ラジカルカチオン)種の基底状態について」

9:30 ~ 10:00

忍久保 洋(名大院工)

「コロール二量体のピラジカル性」

10:00 ~ 10:30

星野 由雅(長崎大教育)

「ポリイン系スパーサーを有する金属錯体とシングレットピラジカル」

座長: 森田 靖

10:45 ~ 11:15

平井 克幸(三重大生命科学支援センター)

「長寿命三重項ジアリアルカルペンの発生と反応」

11:15 ~ 11:45

松田 健児(京大院工)

「結合の組み換えとシングレットピラジカル」

11:45 ~ 12:15

阿部 二郎(青学大理工)

「非局在一重項ピラジカルの電子構造」

座長: 阿部 二郎

13:30 ~ 14:00

稲垣 都士(岐阜大院工)

「軌道位相理論とピラジカルの設計」

14:00 ~ 14:30

安倍 学(広島大院理)

「局在化ピラジカルのスピン多重度制御に基づくポリラジカルのスピン整列」

14:30 ~ 15:00

久新莊一郎(群馬大院工)

「14族元素-14族元素 単結合の結合長制御」

座長: 安倍 学

15:15 ~ 15:45

岩本 武明(東北大院理)

「1,3-ジメタラビシクロブタン長結合異性体の合成, 構造と性質」

15:45 ~ 16:15

伊藤 繁和(東工大院理工)

「安定なリン複素環-重項ピラジカルオリゴマーの合成と特異な分子内相互作用」

16:15 ~ 16:45

池田 浩(阪府大院工)

「励起ピラジカルを用いた新規発光素子(有機ラジカルEL)——ダブルレットラジカルカチオンとシングレットおよびトリプレットピラジカルの物質変換——」

岩村 秀(日大院総科) 総括・コメント(2)

(4) 若手研究会等

課 題 名

提案代表者

分子科学夏の学校の講義内容検討会

東京工業大学大学院総合理工学研究科

武田 朗宏

(5) UVSOR 施設利用

(前期)

X線照射により生成する欠陥の発光測定

名古屋大学大学院工学研究科

吉田 朋子

Mo L殻 XANESによるメタン脱水素芳香族化のためのMo触媒機能因子の検証
オリビン型リン酸塩のXANES観察

埼玉工業大学工学部

有谷 博文

関西大学化学生命工学部

荒地 良典

XAFS法を用いた各種リン酸化合物中のリンの状態分析

福岡大学理学部

栗崎 敏

次世代自動車用リチウムイオン電池のAl及びP含有表面皮膜成分の分析

(独)産業技術総合研究所関西センター

鹿野 昌弘

生体親和性の高い代替関節用MgO添加ZrO₂のMg局所構造解明

大阪府立大学大学院工学研究科

中平 敦

蛍光体材料中における添加元素(Na, Mg, Al, Si)の局所環境解析

早稲田大学理工学術院

山本 知之

ワイドバンドギャップを有する無機・有機絶縁材料の吸収・発光および寿命測定

早稲田大学理工学術院

大木 義路

極端紫外光照射による無機蛍光体の励起現象(4)

新潟大学工学部

太田 雅壽

パイロクロア型モリブデン酸化物の真空紫外分光

東京大学大学院工学系研究科

十倉 好紀

モリブデン酸塩の異方性反射スペクトル及び励起・発光スペクトルの測定

信州大学工学部

伊藤 稔

高速シンチレータ材料の発光特性解析と発光機構の解明

東北大学大学院工学研究科

越水 正典

真空紫外光蛍光体の発光・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

希土類イオンを添加したイオン結晶の真空紫外分光

岐阜大学工学部

山家 光男

長残光性物質における光励起過程の系統的研究

福井工業高等専門学校

北浦 守

真空紫外励起スペクトル測定による酸化物中Pr³⁺, Ce³⁺, Tb³⁺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

Orbital moment and magnetic anisotropy in tetragonally distorted Fe_{1-x}Co_x films grown on Pd(001), Ir(001) and Rh(001)

分子科学研究所

横山 利彦

遷移金属を置換したLi₂MnO₃の酸化・還元に伴う電子構造変化

関西大学化学生命工学部

荒地 良典

アモルファス半導体の光照射による内殻吸収変化の観察	岐阜大学工学部	林 浩司
「水の窓」域軟X線超格子ミラーの反射率測定	大阪市立大学大学院工学研究科	熊谷 寛
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
飛翔体搭載に向けた極端紫外光検出器の開発	東京大学大学院理学系研究科	吉川 一朗
アミノ酸、DNA塩基のVUV-SX吸収スペクトルとTRK総和則の検証	神戸大学大学院人間発達環境学研究所	中川 和道
定在波分光用反射多層膜の反射率測定	東北大学多元物質科学研究所	羽多野 忠
希薄磁性半導体 GaGdN における磁性元素 Gd の 4f 軌道エネルギー位置の探索	大阪大学産業科学研究所	江村 修一
Fe 基ホイスラー合金系および Co 酸化物系熱電材料の角度分解光電子分光	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
有機分子表面修飾 Si ナノ粒子の表面化学	神戸大学大学院工学研究科	保田 英洋
酸化イウロピウム単結晶薄膜の光電子分光	分子科学研究所	木村 真一
定在波光電子分光による Fe 磁性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 文雄
金属超薄膜表面上の 2 元合金相のラッシュバ効果	東京大学物性研究所	松田 巖
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
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
Ce 4f electronic structure in a dilute Kondo system	分子科学研究所	IM, Hojun
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
BL6B の整備	分子科学研究所	木村 真一
強相関電子系の圧力下テラヘルツ分光	分子科学研究所	木村 真一
超伝導を示す半導体の電子・格子構造の遠赤外分光	東海大学情報理工学部	大島 喬
InN 薄膜の顕微近～遠赤外反射 (II)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
鉛フリー圧電体の遠赤外スペクトル	名古屋工業大学	柿本 健一
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
アミノ酸、DNA塩基のVUV吸収スペクトルとTRK総和則の検証	神戸大学大学院人間発達環境学研究所	中川 和道
反応性スパッタリング法により作製した酸化物薄膜のUVUスペクトルの測定	明治大学理工学部	松本 皓永
110-50 nm 領域における広帯域反射多層膜の性能評価	東北大学多元物質科学研究所	柳原 美広
新奇パイロクロ化合物 $\text{Sm}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ と $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ の可視 - 真空紫外反射スペクトル	神戸大学大学院理学研究科	難波 孝夫
強相関 f 電子系の VUV 反射スペクトル	神戸大学大学院理学研究科	岡村 英一
III-V 窒化物半導体の発光・励起と時間分解測定	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
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
湿式有機太陽電池のエネルギー変換効率と光電変換効率の測定	分子科学研究所	見附孝一郎
極低エネルギー励起光電子分光とそのバルク敏感性の検証	大阪大学大学院基礎工学研究科	関山 明
銅酸化物高温超電導体の低エネルギー角度分解光電子分光	東北大学大学院理学研究科	高橋 隆
層状 Co 酸化物におけるコヒーレント伝導とインコヒーレント伝導の電子物性への影響の解析	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
ARPES studies of the cuprate superconductor $\text{Bi}_2\text{Sr}_{2-x}\text{Ln}_x\text{CuO}_6$ (Ln = Eu, La)	分子科学研究所	木村 真一
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
擬一次元有機導体におけるラッテンジャー面の系統的研究：低励起エネルギー角度分解光電子分光	分子科学研究所	伊藤 孝寛
Orbital-dependent hybridization strength in a heavy-fermion system	分子科学研究所	IM, Hojun
遷移金属を置換した Li_2MnO_3 の酸化・還元に伴う電子構造変化	関西大学化学生命工学部	荒地 良典
XAFS 法を用いたリチウム含有鉱物中のリチウムの状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
次世代自動車用リチウムイオン電池の Li 及び F 含有表面皮膜成分の分析	(独)産業技術総合研究所関西センター	鹿野 昌弘
機能性炭素系薄膜の局所構造解析	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所	神田 一浩
有機分子の吸着による貴金属 (111) 面の表面電子状態への影響の研究	名古屋大学物質科学国際研究センター	金井 要
機能性有機薄膜 / MoO_3 薄膜界面の構造、及び電子構造の解明	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
角度分解紫外光電子分光法による 共役系高分子膜の分子配向評価	千葉大学大学院融合科学研究所	奥平 幸司
光触媒における酸化還元機構の解明 (2)	新潟大学工学部	太田 雅壽
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
PD-BQ 系電荷移動錯体の光電子スペクトル	愛媛大学工学部	宮崎 隆文
単結晶上の金属錯体分子薄膜からの光電子放出強度の定量的解析	千葉大学大学院融合科学研究所	解良 聡
光電子分光法による有機半導体単結晶および薄膜における界面電子構造の観察	千葉大学先進科学センター	中山 泰生
角度分解光電子分光法による有機配向膜における 1/2-filled 電子系のバンド構造	千葉大学先進科学センター	西 龍彦
VUV 発光分光ライン化に向けた整備	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
原子核乾板を用いた放射線モニターの開始	名古屋大学大学院理学研究科	中村 光廣

(後期)

X線照射により生成する欠陥の発光測定	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
Mo L 殻 XANES によるメタン脱水素芳香族化のための Mo 触媒機能因子の検討	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
オリビン型リン酸塩の XANES 観察	関西大学化学生命工学部	荒地 良典
XAFS 法を用いた各種リン酸化合物中のリンの状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
次世代自動車用リチウムイオン電池の Al 及び P 含有表面皮膜成分の分析	(独)産業技術総合研究所関西センター	鹿野 昌弘
生体親和性の高い代替関節用 MgO 添加 ZrO ₂ の Mg 局所構造解明	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
蛍光体材料中における添加元素 (Na, Mg, Al, Si) の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
ワイドバンドギャップを有する無機・有機絶縁材料の吸収・発光および寿命測定	早稲田大学理工学術院	大木 義路
極端紫外光照射による無機蛍光体の励起現象 (4)	新潟大学工学部	太田 雅壽
モリブデン酸塩の異方性反射スペクトル及び励起・発光スペクトルの測定	信州大学工学部	伊藤 稔
真空紫外光蛍光体の発光・励起スペクトル	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
希土類イオンを添加したイオン結晶の真空紫外分光	岐阜大学工学部	山家 光男
Orbital moment and magnetic anisotropy in tetragonally distorted Fe _{1-x} Co _x films grown on Pd(001), Ir(001) and Rh(001)	分子科学研究所	横山 利彦
遷移金属を置換した Li ₂ MnO ₃ の酸化・還元に伴う電子構造変化	関西大学化学生命工学部	荒地 良典
アモルファス半導体の光照射による内殻吸収変化の観察	岐阜大学工学部	林 浩司
「水の窓」域軟 X 線超格子ミラーの反射率測定	大阪市立大学大学院工学研究科	熊谷 寛
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
飛翔体搭載に向けた極端紫外光検出器の開発	東京大学大学院理学系研究科	吉川 一朗
アミノ酸, DNA 塩基の VUV-SX 吸収スペクトルと TRK 総和則の検証	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
定在波分光用反射多層膜の反射率測定	東北大学多元物質科学研究所	羽多野 忠
希薄磁性半導体 GaGdN における磁性元素 Gd の 4f 軌道エネルギー位置の探索	大阪大学産業科学研究所	江村 修一
Fe 基ボイスラー合金系および Co 酸化物系熱電材料の角度分解光電子分光	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
有機分子表面修飾 Si ナノ粒子の表面化学	神戸大学大学院工学研究科	保田 英洋
酸化イウロピウム単結晶薄膜の光電子分光	分子科学研究所	木村 真一
定在波光電子分光による Fe 磁性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
金属超薄膜表面上の 2 元合金相のラッシュバ効果	東京大学物性研究所	松田 巖
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
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
Kondo resonance in a geometrically frustrated triangle lattice Pr ₅ Ni ₂ Si ₃	分子科学研究所	IM, Hojun
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
BL6B の整備	分子科学研究所	木村 真一
強相関電子系の圧力下テラヘルツ分光	分子科学研究所	木村 真一
超伝導を示す半導体の電子・格子構造の遠赤外分光	東海大学情報理工学部	犬島 喬
InN 薄膜の顕微鏡 ~ 遠赤外反射 (II)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
鉛フリー圧電体の遠赤外スペクトル	名古屋工業大学	柿本 健一
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
アミノ酸, DNA 塩基の VUV 吸収スペクトルと TRK 総和則の検証	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
III-V 窒化物半導体の発光・励起と時間分解測定	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
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
極低エネルギー励起光電子分光とそのバルク敏感性の検証	大阪大学大学院基礎工学研究科	関山 明
銅酸化物高温超電導体の低エネルギー角度分解光電子分光	東北大学大学院理学研究科	高橋 隆
層状 Co 酸化物におけるコヒーレント伝導とインコヒーレント伝導の電子物性への影響の解明	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
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
擬一次元有機導体におけるラッテンジャー面の系統的研究: 低励起エネルギー角度分解光電子分光	分子科学研究所	伊藤 孝寛
遷移金属を置換した Li ₂ MnO ₃ の酸化・還元に伴う電子構造変化	関西大学化学生命工学部	荒地 良典
XAFS 法を用いたリチウム含有鉱物中のリチウムの状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
次世代自動車用リチウムイオン電池の Li 及び F 含有表面皮膜成分の分析	(独)産業技術総合研究所関西センター	鹿野 昌弘
機能性炭素系薄膜の局所構造解析	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所	神田 一浩
有機分子の吸着による貴金属 (111) 面の表面電子状態への影響の研究	名古屋大学物質科学国際研究センター	金井 要
機能性有機薄膜 / MoO ₃ 薄膜界面の構造, 及び電子構造の解明	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
角度分解紫外光電子分光法による 共役系高分子膜の分子配向評価	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
光触媒における酸化還元機構の解明 (2)	新潟大学工学部	太田 雅壽

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
PD-BQ 系電荷移動錯体の光電子スペクトル	愛媛大学大学院理工学研究科	宮崎 隆文
単結晶上の金属錯体分子薄膜からの光電子放出強度の定量的解析	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
角度分解光電子分光法による有機配向膜における 1/2-filled 電子系のバンド構造	千葉大学先進科学センター	西 龍彦
VUV 発光分光ライン化に向けた整備	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
ZnMgTe 系半導体材料の構造解析に関する研究	佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター	田中 徹
Fe 担持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
XAFS 法によるプロトン伝導性アモルファス $Al_xSi_{1-x}O_x$ 薄膜の局所構造解析	北海道大学大学院工学研究科	青木 芳尚
アミノ酸, DNA 塩基の X 線吸収スペクトルと TRK 総和則の検証	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
真空紫外分光による薄膜 EL 蛍光体中希土類イオンの二次励起過程の追跡	福井工業高等専門学校	北浦 守
真空紫外領域における TiO_2 粉末の発光・励起スペクトルの測定	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
高速シンチレータ材料の発光特性解析と発光機構の解明	東北大学大学院工学研究科	越水 正典
水・イオン液体表面での光イオン化と光反応	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 Y 複合酸化物中希土類イオンの 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
次世代自動車用リチウムイオン二次電池の正極活物質の表面分析	(独)産業技術総合研究所関西センター	鹿野 昌弘
巨大トンネル磁気抵抗効果を示す C_{60} -Co 共蒸着薄膜の磁気円二色性実験	(独)日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター	松本 吉弘
希釈窒化物半導体 (Ga,In)(N,As) の窒素周辺原子配列の XAFS 法による評価	大阪大学大学院工学研究科	石川史太郎
希土類酸化物強磁性半導体の内殻磁気円二色性	分子科学研究所	木村 真一
蛋白質の立体構造と 30cm^{-1} 付近のテラヘルツピークとの関係	関西医科大学	木原 裕
赤外顕微分光による新奇パイロクロア型 Ir 酸化物 $Nd_2Ir_2O_7$ の電子状態	神戸大学大学院理学研究科	難波 孝夫
湿式有機太陽電池のエネルギー変換効率と光電変換効率の測定	分子科学研究所	見附孝一郎
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
High-resolution bulk-sensitive photoemission study of c-f hybridization mechanism in heavy-fermion systems	分子科学研究所	IM, Hojun
高温超伝導体 $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ の低エネルギー励起光電子分光	分子科学研究所	寺嶋 健成
有機単結晶・有機および金属薄膜界面電子構造の光電子分光法による研究	千葉大学先進科学センター	中山 泰生
有機薄膜太陽電池関連物質の表面・界面電子状態の測定	島根大学総合科学研究支援センター	田中 仙君
フェムト秒電子パルスの時間構造に関するビーム力学的研究	高エネルギー加速器研究機構	島田 美帆
原子核乾板を用いた放射線モニターの開発	名古屋大学大学院理学研究科	中村 光廣
強相関セリウム化合物の電子状態	分子科学研究所	木村 真一

(6) 施設利用

機器センター

(前期)

Rh 錯体とオリゴヌクレオチドとの立体特異的な認識機構の解明	豊橋技術科学大学	藤澤 郁英
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
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	小野 克彦
希土類薄膜磁石の垂直磁気異方性	名古屋工業大学	安達 信泰
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
TTP (テトラチアベンタレン) 系有機伝導体の結晶構造解明	愛媛大学大学院理工学研究科	御崎 洋二
有機分子の 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
コバルト酸化物の磁性に関する研究	名古屋大学大学院理学研究科	高見 剛
高分子・クレイナノコンポジットのナノ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
長鎖アルキル鎖を有するコバルト (II) 錯体の新規磁気挙動の解明	広島大学大学院理学研究科	速水 真也
フッ化物を用いた光学素子開発に関する研究	名古屋工業大学	小野 晋吾
ランタン型ルテニウム (II)(III) 二核錯体とコロシアジン錯体の磁気物性	島根大学総合理工学部	池上 崇久
III-V 窒化物半導体の中性欠陥の探索 (II)	福井大学工学部	福井 一俊
新規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
ナノカーボン化合物の構造と磁気特性	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	平郡 諭
1/1 近似結晶 Zn-M-Sc (M = Fe 族元素) における 3d 遍歴電子の磁性	北海道大学大学院工学研究科	柏本 史郎
電子スピン共鳴による有機磁性体の磁気相互作用に関する研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	細越 裕子
核酸化学修飾法の開発	生理学研究所	片岡 正典

金属錯体分子性ガラスの構造と性質	奈良女子大学大学院人間文化研究科	飯田 雅康
準安定結晶・微小結晶の迅速結晶構造解析	東京大学物性研究所	高橋 一志
酸化チタン微粒子のナノ構造制御に関する検討	秋田工業高等専門学校	丸山 耕一
フェライト薄膜の磁気特性に関する検討	秋田工業高等専門学校	丸山 耕一
クラスター遷移金属錯体を含む有機-無機複合材料の交流磁化率測定	東京理科大学理学部	秋津 貴城
セルロース固体表面に存在するブロック共重合鎖の分子運動性	静岡県立大学環境科学研究所	坂口 真人
パルスレーザーと超音速ジェットを用いたナフタレン分子のレーザー分光	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	笠原 俊二
Atg3のアミノ末端の構造解析	基礎生物学研究所	花田 孝雄
サイト選択元素置換による RE 系溶融バルク超伝導体の臨界電流特性向上	名古屋大学大学院工学研究科	織田 将成

(後期)

遷移金属錯体を含む高分子膜状の有機-無機複合材料の磁性測定	東京理科大学理学部	秋津 貴城
層状遷移金属化合物の磁性に関する研究	名古屋大学大学院理学研究科	高見 剛
高共役 電子系化合物の合成と構造	愛媛大学総合科学研究支援センター	宇野 英満
ナノカーボン化合物の構造と物性	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	平郡 諭
Atg3のアミノ末端の構造変化	基礎生物学研究所	花田 孝雄
薄膜磁性体の面内および垂直磁気異方性に関する研究	名古屋工業大学	安達 信泰
アーク放電法により作製したカーボンナノチューブの可視紫外領域の透過率測定	名城大学理工学部	丸山 隆浩
重合誘起相分離による相分離ナノ構造解析	名古屋工業大学大学院工学研究科	山本 勝宏
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
サイト選択元素置換による RE 系溶融バルク超伝導体の臨界電流特性向上	名古屋大学大学院工学研究科	織田 将成
スピララベル化アゾポリマーの可視光照射効果とその分子運動性相関について	静岡県立大学環境科学研究所	坂口 真人
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	小野 克彦
高次倍音振動の観測による高振動励起状態における分子間相互作用に関する研究	関西学院大学大学院理工学研究科	土肥 敦之
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
複合機能性鉄(III)スピנקロスオーバー錯体の結晶構造解析	東京大学物性研究所	高橋 一志
核酸化学修飾法の開発	生理学研究所	片岡 正典
拡張型 TTF ドナーおよびそれらを用いた分子性導体の構造と物性に関する研究	愛媛大学大学院理工学研究科	御崎 洋二
フェノチアジンカチオンラジカルオリゴマー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
螺旋骨格をもつ新規金属錯体の合成と性質	静岡大学機器分析センター	近藤 満
スタフィロコッカル・ヌクレアーゼ変異体を用いた蛋白質フォールディング機構の研究	名古屋大学大学院理学研究科	横 互介
準結晶の構造完全性と磁気秩序	北海道大学大学院工学研究科	柏本 史郎
有機分子の 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
希釈した磁性体を有する半導体のスピンドイナミックスの研究	大阪大谷大学薬学部	谷本 能文
パルスレーザーと超音速ジェットを用いたベンゼンおよびナフタレン分子のレーザー分光	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	笠原 俊二
新規な有機半導体分子の X 線構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	芦沢 実

装置開発室

(前期)

カーボンナノチューブ付操作プローブ顕微鏡探針の作製	大阪大学大学院理学研究科	田中 啓文
USB2.0 を用いた高速データロガーの製作	北海道大学大学院理学研究科	河本 充司
新しい機能性を持つ分子性導体の作製	東京大学物性研究所	高橋 一志
酸化チタン光誘起超親水化反応の機構の解明, そのための装置作製	東京大学先端科学技術研究センター	橋本 和仁
衛星搭載または気球搭載用 Ge:Ga 圧縮型赤外線検出器の開発 耐熱材料インコネル 600 のワイヤー放電加工による精密加工及び小径エンドミルによる微細加工	名古屋大学全学技術センター	鈴木 和司

(後期)

衛星搭載または気球搭載用 Ge:Ga 圧縮型赤外線検出器の開発 耐熱材料インコネル 600 のワイヤー放電加工による精密加工及び小径エンドミルによる微細加工	名古屋大学全学技術センター	鈴木 和司
高輝度反射集光鏡の製作	京都大学大学院理学研究科	馬場 正昭

4 回反射型 X 線望遠鏡の開発 紫外線立体投影露光における照射光学系およびアライメントステージの開発	名古屋大学エコトピア科学研究所 (独)産業技術総合研究所	田原 讓 銘苅 春隆
--	---------------------------------	---------------

計算機利用

相対論的モデル内殻ポテンシャルと FMO 法の運動による重元素含有ナノ・バイオ系のリアルシミュレーション 遷移金属錯体の構造・磁性・反応機構に関する理論的研究	お茶の水女子大学アカデミック・プロダクション お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科 お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科	森 寛敏 福田 豊 鷹野 景子
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	基礎生物学研究所	野中 茂紀
デジタルスキャン光シート顕微鏡で取得した画像データシーケンスのデコンボリューションと 3 次元像構築 イオントラップを用いた分子イオンの分光 有機化学反応のさまざまな選択性の解析 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反応性および選択性発現の解明 化学反応の ab initio 計算による研究 環境中および生体内の有機化学反応機構の解明 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 多成分分子理論の開発および水素結合系への応用 蛋白質の動的構造と機能の解析 マルチドメインタンパク質のダイナミクス解析 非経験的分子軌道法によるクラスターの構造について 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 キラル分子触媒の立体選択性に関する理論研究 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 分子動力学法, 及び ab initio 法による分子間相互作用の精密モデリング 高分子系の熱拡散現象に関する非平衡シミュレーション 5d 金属原子を含むランタン型複核錯体の電子状態 化学反応の分類および分子設計に関する理論的研究 分子, 生物, 表面の量子化学: 励起状態と化学反応 複合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 生体分子・芳香族分子など複雑な分子の関与する分子の性質・化学反応の理論的研究 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 機能性有機材料の電子物性解析に関する理論的研究 電子状態計算によるタンパク質・低分子間相互作用解析 Rigged QED 理論に基づく局所量に関する研究 数値シミュレーションによる分光スペクトルの計算 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 高分子と生体分子のシミュレーション 芳香族化合物の構造最適化および励起エネルギー計算 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 分子の電子状態と反応動力学に関する理論的研究 アモルファス性有機半導体材料の分子構造計算 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 機能設計のための巨大系の量子化学計算 半導体薄膜・界面の電子状態並びに輸送特性の第一原理的研究 励起状態とその緩和過程に関する理論的研究 拡張アンサンブルシミュレーションによる高分子系の研究 分子シミュレーションによるヒト ガラクトシダーゼ - NOEV 複合体の結合自由エネルギー予測 生体分子の構造と機能に関する理論的研究 熱化学反応及び光化学反応に関する理論的研究 分子動力学シミュレーションに基づく自由エネルギー計算による蛋白質と核酸の機能と物性の物理化学的研究 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	富山大学理学部 奈良先端科学技術大学院大学 愛知教育大学教育学部 愛媛大学理学部 茨城大学理学部 横浜国立大学工学部 横浜市立大学大学院国際総合科学研究科 横浜市立大学大学院国際総合科学研究科 岡崎統合バイオサイエンスセンター 岡山理科大学理学研究科 海洋研究開発機構 岐阜大学工学部 岐阜大学地域科学部 岐阜大学人獣感染防御研究センター 岐阜大学工学部 岐阜大学工学部 岐阜大学工学部 京都大学大学院工学研究科 京都大学福井謙一記念研究センター 京都大学福井謙一記念研究センター 京都大学大学院工学研究科 京都大学大学院工学研究科 京都大学大学院薬学研究科 京都大学大学院工学研究科 京都大学大学院理学研究科 金沢大学大学院自然科学研究科 金沢大学理工研究域 金沢大学大学院自然科学研究科 金沢大学大学院自然科学研究科 九州大学情報基盤研究開発センター 九州大学未来科学創造センター 九州大学大学院総合理工学研究院 九州大学大学院総合理工学研究院 慶應義塾大学理工学部 慶應義塾大学理工学部 慶應義塾大学理工学部 慶應義塾大学理工学部 慶應義塾大学理工学部 広島大学大学院理学研究科 広島大学大学院理学研究科 弘前大学大学院理工学研究科 高エネルギー加速器研究機構	森脇 善紀 中村 建介 赤倉松次郎 長岡 伸一 森 聖治 千住 孝俊 立川 仁典 木寺 詔紀 神谷由紀子 中川 幸子 数納 広哉 安藤 香織 橋本 智裕 桑田 一夫 寺尾 貴道 海老原昌弘 酒井 章吾 江原 正博 諸熊 奎治 石田 俊正 榎 茂好 田中 一義 村田 克美 立花 明知 谷村 吉隆 小田 竜樹 高須 昌子 徳村 邦弘 斎藤 峯雄 南部 伸孝 横山 大輔 三好 永作 青木百合子 山内 淳 藪下 聡 光武亜代理 柚木 克之 相田美砂子 田林 清彦 斎藤 稔 岩野 薫

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
計算科学的アプローチによる半導体ナノ構造の形状と物性の解明	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	山形大学地域教育文化学部	野々山信二
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	北尾 修
ガラス系の遅い動力学の基礎研究	首都大学東京大学院理工学研究科	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	首都大学東京大学院理工学研究科	波田 雅彦
量子化学文献データベース	首都大学東京大学院理工学研究科	橋本 健朗
ポルフィリン多量体の電子状態解析	首都大学東京大学院理工学研究科	杉浦 健一
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
水溶液中におけるセロトニンの電子状態とその構造	湘北短期大学	小田井 圭
励起状態を生成するペニングイオン化の生成過程	新潟大学理学部	徳江 郁雄
凝縮系における分子ダイナミクス	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
分子動力学計算を用いた蛋白質-RNA 複合体の induced-fit 機構の研究	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
軌道相互作用に基づく化学反応系の解析	星薬科大学薬学部	坂田 健
液体・生体分子および関連分子系の構造・ダイナミクス・分子間相互作用と振動スペクトル	静岡大学教育学部	鳥居 肇
金属錯体に関する理論的研究	静岡理工科大学理工学部	関山 秀雄
生体分子の機能発現反応に関する理論的研究	千葉大学大学院薬学研究科	星野 忠次
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	千葉大学大学院理学研究科	太田 幸則
ナノマテリアル及び生体分子の機能・物性・反応性に関する理論的研究	早稲田大学理工学術院	中井 浩巳
ペプチドナノリングの金属イオン捕捉過程とペプチドナノチューブのイオンチャンネル機能に関する研究	早稲田大学理工学部	武田京三郎
第一原理力定数を基にした機能的及び巨大有機化合物のテラ周波数振動モデリング	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	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	大阪大学大学院理学研究科	奥村 光隆
大規模系に対する量子分子動力学法の開発	大阪大学大学院基礎工学研究科	川野 聡恭
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
凍結環境下における固体高分子型燃料電池の触媒層イオノマーの酸素輸送メカニズムに関する分子動力学シミュレーション解析	大同工業大学燃料電池研究センター	鈴木 昭也
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
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	筑波大学大学院数理物質科学研究科	岡田 晋
ハロゲン架橋金属錯体の電子状態シミュレーション	筑波大学大学院数理物質科学研究科	前島 展也
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
2- ハロ酸脱ハロゲン化酵素と耐熱性システイン合成酵素の反応機構解析	長浜バイオ大学バイオサイエンス学部	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における分子配座と分子間相互作用の関係	鳥取大学工学部	早瀬 修一
分子軌道法および密度汎関数法を用いた生体関連分子およびその溶媒和クラスターの安定構造の研究	東京工業大学資源科学研究所	宮崎 充彦
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	東京工業大学大学院理工学研究科	斎藤 晋
前周期遷移金属錯体の分子設計及び構造, 反応に関する理論的研究	東京工業大学大学院理工学研究科	石田 豊
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	東京大学医科学研究所	藤田 直也
ナノ・バイオ物質の電子状態・構造・機能の相関	東京大学大学院工学系研究科	押山 淳
低原子価ホウ素化合物の化学: ポリルアニオンとポリレン	東京大学大学院工学系研究科	山下 誠
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	東京大学大学院工学系研究科	常田 貴夫
化学反応の量子ダイナミクスに関する理論的研究	東京大学大学院工学系研究科	山下 晃一
電子・負イオンのミクロ溶媒和による安定化メカニズム	東京大学大学院総合文化研究科	永田 敬
分子配座と安定性・反応性に関する理論研究	東京大学大学院総合文化研究科	友田 修司
分子軌道計算による有機反応設計および分子構造設計のための電子構造予測	東京大学大学院薬学系研究科	大和田智彦
分子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	東京大学大学院理学系研究科	中村 栄一

ホスフィンスルホン酸/パラジウム触媒系を用いた極性オレフィンの重合反応機構の解析	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
金属酸化物上の化学吸着と触媒の ab initio および DFT による理論的研究	東北大学大学院理学研究科	Zhanpeisov, Nurbosyn
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	東北大学大学院理学研究科	山北 佳宏
界面非線形分光の理論	東北大学大学院理学研究科	森田 明弘
芳香族置換反応における反応中間体クラスターの構造解析	東北大学大学院理学研究科	水瀬 賢太
分子動力学計算による液体の相分離ダイナミクス	東北大学大学院理学研究科	梶本 真司
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	東北薬科大学薬学部	小田 彰史
ホタルの生物発光における励起状態生成機構への酵素ルシフェラーゼの触媒作用の理論的解析	東洋大学大学院生命科学研究所	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	奈良県立医科大学医学部	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	姫路獨協大学薬学部	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	福岡大学薬学部	新矢 時寛
磁性金属錯体の電子状態計算	物質・材料研究機構	西野 正理
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
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
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
凝縮系のダイナミクスと化学反応の理論研究	分子科学研究所	斉藤 真司
3D-RISM/MD 法による溶液中での自己組織化のシミュレーション	分子科学研究所	平田 文男
導電性有機物質の構造と物性の研究	分子科学研究所	葉師 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
ナノサイズ分子の分子理論と量子化学計算	分子科学研究所	永瀬 茂
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
水中における脂質分子集団系の構造形成と機能	分子科学研究所	岡崎 進
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
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物質理学研究科	島 信幸
タンパク質機能中心における固有な異方性の量子論に基づく解析	兵庫県立大学大学院生命理学研究科	神谷 克政
金属クラスターへの分子吸着過程および吸着分子の反応過程の解明	豊田工業大学クラスター研究室	近藤 保
分子の励起状態とその動的挙動の研究	豊田理化学研究所	岩田 末廣
高分子濃厚系における高分子鎖の動的性質	防衛大学校応用物理学科	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
インフルエンザウィルス HA 構造を利用した抗原変異解析	名古屋市立大学大学院医学研究科	尾曲 克己
穴のあいたフラレンの構造および分子包接特性に関する理論的研究	名古屋大学大学院環境学研究科	岩松 将一
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
半導体結晶中の不純物原子周辺局所構造と電子状態に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	田淵 雅夫
分子の電子状態と化学反応のポテンシャル面の理論的研究	名古屋大学大学院情報科学研究科	古賀 申明
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
溶液内化学反応の理論研究	名古屋大学大学院理学研究科	大峰 巖
バクテリオロドプシンの光サイクルの分子動力学	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	名古屋文理大学情報文化学部	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	明治学院大学法学部	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分子触媒の設計と開発	立教大学理学部	山中 正浩
蛋白質の構造機能相関計算	立命館大学生命科学部	高橋 卓也
計算科学の超精密化と巨大化	量子化学研究協会	福田 良一
非線形量子系におけるソリトンとカオス	鈴鹿国際大学国際学部	大野 稔彦

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 ~ '01		'02		'03		'04		'05		'06		'07		'08		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	88	675	5	36	5	70	3	26	1	13	1	8	2	29	2	20	人数： 登録人数
協力研究	3,138	3,825	125	253	101	246	100	263	96	232	84	208	91	219	89	187	"
招へい 協力研究	193	195	1	1	1	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
所長 招へい	2,820	2,820	313	313	308	308	160	160	100	100	162	162	132	132	147	147	人数： 旅費支給者
研究会	255	3,750	11	332	8	229	13	304	11	206	13	310	9	198	4	58	"
施設利用 I	1,524	3,369	63	188	54	150	55	154	53	106	47	86	59	120	62	149	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)	3,762	11,820	134	558	120	525	154	587	132	510	142	538	145	595	146	621	"
合計	11,780	26,454	652	1,681	597	1,529	485	1,494	393	1,167	449	1,312	438	1,293	450	1,182	
経費	476,414		37,986		30,794		-		-		-		-		-		千円

* 施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用

('08 年度の数値は, 2008.12 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 ~ '01		'02		'03		'04		'05		'06		'07		'08		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	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
施設長 招へい	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	14	14	0	0	人数： 旅費支給者
研究会	31	477	0	0	1	51	1	16	1	59	3	37	2	55	2	18	"
施設利用	1,874	9,192	160	805	129	715	128	582	126	643	113	494	145	678	156	689	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	2,327	11,273	160	805	130	766	129	598	127	702	116	531	161	747	158	707	
経費	200,813		15,780		13,884		-		-		-		-		-		千円

('08 年度の数値は, 2008.12 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
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
07	4	6	27	7	131	175
合計	130	95	293	508	799	1,825

* 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
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
07	27	9	12	16	25	38	5	43	175
合計	320	100	143	134	250	231	81	566	1,825

表3 海外からの研究者（2008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. 分子科学研究所外国人研究職員			
CHAUDHURI, K. Tapan	インド	インド科学技術研究所	19. 7.30-20. 7.27
PENG, Shie-Ming	台湾	国立台湾大学	20. 9. 3-20.12.24
YANG, Dah-Yen	台湾	原子分子科学研究所	21. 2. 1-22. 1.31
JANG, Joonkyung	韓国	釜山国立大学	20. 7. 1-20. 8.31
			21. 1. 1-21. 2.28
DAS, Sankar	インド	Jawaharlal Nehru University	21. 3. 1-22. 2.28
3. 日本学術振興会招へい外国人研究者等			
PAVLOV, Lubomir	ブルガリア	ブルガリア科学アカデミー	19. 5.31-20. 4. 2
VOLETY, Srinivas	インド	Center for Cellular and Molecular Biology	19. 7. 1-20. 4.16
KIMBERG, Victor	ロシア	王立工科大学生物工学科	18. 8. 6-20. 8. 5
KOWALSKA, Aneta	ポーランド	ウヅィ工科大学	18.10.24-20.10.23
GUO, Jia	中国	復旦大学	19.10. 1-21. 9.30
VESHAPIDZE, Giorgi	グルジア	Kansas State University	20.11.18-22.11.17
4. 国際共同研究			
AKA, Gerard Philippe	フランス	Ecole Nationale Supérieure de Chimie Paris 教授	20. 4.10-20. 4.30
LOISEAU, Pascal	フランス	Ecole Nationale Supérieure de Chimie Paris 准教授	20. 4.10-20. 4.30
KIM, Seongyong	韓国	ソウル国立大学大学院生	20. 7. 1-20. 7.27
JEONG, Dae Hong	韓国	ソウル国立大学准教授	20. 7. 2-20. 7. 9
KWON, Yong Seung	韓国	成均館大学教授	20. 7.21-20. 8. 4
OH, Hyunjin	韓国	MASAN COLLEGE 教授	20. 7.27-20. 8. 4
ELAND, John Hugh David	イギリス	University of Oxford 教授	20. 8.24-20. 9. 7
藤田 恵津子	アメリカ	Brookhaven National Laboratory 研究員	20. 9.15-20. 9.25
FLESCHE, Roman	ドイツ	Freie Universität Berlin 大学院生	20. 9.28-20.10.12
SERDAROGLU, Ertugrul	ドイツ	Freie Universität Berlin 大学院生	20. 9.30-20.10.12
RUEHL, Eckart Gunther Adolf	ドイツ	Freie Universität Berlin 教授	20.10. 4-20.10.12
5. 所長招へい協力研究員			
朱 超原	台湾	台湾・国立交通大学教授	20. 6.12-20. 6.15
HAN, Woong Yeom	韓国	Yonsei University 准教授	20. 7.22-20. 7.23
6. 特別訪問研究員			
IM, Hojun	韓国	成均館大学校	20. 4. 1-20. 9.30
陳 青根	韓国	理化学研究所基幹研究所	20. 8. 1-21. 3.31
WON, Jongok	韓国	Sejong University	20.10. 6-21. 3.12
楊 勇	中国	東京大学大学院	20.10. 1-21. 3.31
翁 志煥	中国	東京大学大学院	20.10. 1-21. 3.31
7. 招へい研究員			
KIM, Su Il	韓国	韓国科学技術院大学院生	20. 5.29-20. 6.19
GILLAN, Michael J.	イギリス	University College London 教授	20. 6. 1-20. 6. 6
ASSAAD, Fakhre F.	ドイツ	Universität Würzburg 教授	20. 6. 1-20. 6. 7
LAIO, Alessandro	イタリア	International School for Advanced Studies 教授	20. 6. 1-20. 6. 7
GROSS, Eberhard K. U.	ドイツ	Freie Universität Berlin 教授	20. 6. 1-20. 6. 8
KOVALWINKO, Andriy	カナダ	University of Alberta 教授	20. 6. 1-20. 6.14
SCHMIDT, Michael W.	アメリカ	Iowa State University 教授	20. 6. 1-20. 6.29
林 倫年	台湾	国立台湾大学副研究員	20. 7.28-20. 7.31
MAO, Yanli	中国	河南大学准教授	20. 8.18-20. 8.24
WANG, Changshun	中国	Changhai Jiao Tong University 教授	20. 8.24-20. 9.10
HE, Ting-Chao	中国	上海交通大学大学院生	20. 8.24-20.10.31

YILDIZ, Fikret	ドイツ	Max-Planck-Institut ポスドク研究員	20. 8.28–20. 9.20
CINA, Jeffrey A.	アメリカ	University of Oregon 教授	20. 8.31–20. 9. 3
PRZYBYLSKI, Marek	ドイツ	Max-Planck-Institut 教授	20. 9. 1–20. 9.20
LI, Junjun	中国	Fudan University 大学院生	20. 9. 6–20. 2.12
LABLANQUIE, Pascal	フランス	Universit Pierre et Marie Curie 准教授	20.10.20–20.11. 3
PUSPENDU, Kumar Das	インド	Indian Institute of Science 教授	20.10.21–20.10.23
HE, Ting-Chao	中国	上海交通大学大学院生	20.11. 1–20.12.31
DOYLE, John	アメリカ	Harvard University 教授	20.11. 5–20.11.12
IBRAHIM, Heide Nadda	ドイツ	Freien Universitat Berlin ポスドク研究員	20.11. 8–20.11.18
NI, Kang-Kuen	アメリカ	University of Colorado JILA 大学院生	20.11. 9–20.11.12
SHAPIRO, Moshe	カナダ	University of British Colombia 教授	20.11. 9–20.11.15
VELKOV, Yasen	スウェーデン	Royal Institute of Technology 大学院生	20.11.22–20.11.30
GELMUKHANOV, Faris	スウェーデン	Royal Institute of Technology 教授	20.11.22–20.11.30
MUCKERMAN, James	アメリカ	Brookhaven National Laboratory 主任研究員	20.11.22–20.12.26
BAUMERT, Thomas	ドイツ	The University of Kassel 教授	20.12. 1–20.12. 2
EVAIN, Clement	フランス	Universite des Sciences et Technologies de Lill 大学院生	20.12. 4–20.12.28
SZWAJ, Christophe	フランス	Universite des Sciences et Technologies de Lill 講師	20.12. 5–20.12.28
BIELAWSKI, Serge	フランス	Universite des Sciences et Technologies de Lill 教授	20.12. 5–20.12.28
RUNGROTMONGKOL, Thanyada	タイ	Chulalongkorn University 博士研究員	20.12. 8–20.12.13
YAO, Yao	中国	Fudan University 大学院生	20.12. 9–20.12.13
ZHU, Weipu	中国	Zhejiang University 准教授	20.12. 9–20.12.13
CHEN, Hui-Min	中国	Fudan University 大学院生	20.12. 9–20.12.13
CHOWDHURY, Aref	イギリス	アルカテル・ルーセント社シニアマネージャー	20.12.23–21. 1.28

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こととなり、大学共同利用機関として行う公募型の「岡崎コンファレンス」は、予算的には新しく認定されるようになったCOE各機関がそれぞれ行う独自企画の中規模の国際シンポジウムの予算に切り替わった。これに伴い、分子科学研究所主催で「岡崎COEコンファレンス」を開催することになった。一方、所外の分子科学研究者は分子科学研究所に申請するのではなく、所属している各COE機関から文部省に申請することになった。しかし、「岡崎コンファレンス」では可能であった助手クラスを含む若手研究者からは事実上提案できなくなるなど、各COE機関が行う中規模国際研究集会は小規模国際研究集会「岡崎コンファレンス」が果たしてきた役割を発展的に解消するものにはなり得なかった。その後、COEは認定機関だけのものではないなどの考えからいろいろなCOE予算枠が生み出され、その中で国際研究集会は、2004年からの法人化に伴い日本学術振興会において一本化され、全国的に募集・選考が行われることになった。ただし、この枠はシリーズになっている大規模国際会議を日本に誘致したりする際にも申請できるなど、公募内容がかなり異なっている。一方、法人化後、各法人で小~中規模の国際研究集会が独自の判断で開催できるようになり、分子科学研究所が属する自然科学研究機構や総合研究大学院大学でその枠が整備されつつある。ただし、所属している複数の機関がお互い連携して開催するのが主たる目的となっている。

以上のように、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年度からは公募方式によって課題を募集し、毎年1件を採択して開催している。平成20年度は下記の第68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68回岡崎コンファレンス

“From Aromatic Molecules to Graphene; Chemistry, Physics and Device Applications”

期間：2009年2月21日~23日

場所：岡崎コンファレンスセンター

組織委員：榎 敏明(東工大院理, 提案代表者), 横山利彦(分子研, 所内対応者), 塚越一仁(物材機構), 久保孝史(阪大院理), 草部浩一(阪大院理)

内容：

一枚のグラファイトシート(グラフェン)を簡単に作製できるという2004年のNovoselov, Geimらの衝撃的な発見によって、フラーレン、炭素ナノチューブを中心に発展してきたナノ炭素の研究が、新たな展開を見せている。一方、グラフェンの発見に遡る1990年代から申請者ら日本のグループを中心に発展してきたナノサイズのグラフェン(ナ

ノグラフェン)の研究はその特異な電子・磁気特性とデバイス応用の可能性の視点から大きな興味を持たれ、グラフェン、ナノグラフェンの研究が最もホットな課題として世界的に急速に進展している。グラフェンはDiracフェルミオンの物理で記述され、伝統的な固体物理とは異質な新たな問題を提供するとともに、その電子デバイスへの発展は大きな関心となっている。また、ナノグラフェンは端が存在する結果として非結合電子状態を持ち、これはDiracフェルミオンの対称性の破れとして理解されるとともに、構造化学の問題としては、芳香族分子のアロマティシティの問題としても理解される。その意味で、非Kekulé構造をもつ芳香族中性ラジカルの問題とも密接な関連を持つ。本コンファレンスは、芳香族小分子、ナノグラフェン、グラフェンを構造有機化学、固体物理、デバイス開拓の視点から包括的に議論することを目的とする。本コンファレンスの包括的な議論はグラフェン研究の学際的な視点での展開を大いに刺激するものとなることが期待される。

本岡崎コンファレンスでは、以下に示すような合計38件の招待講演からなるオーラルセッションにより、上記トピックスについて討論を行った。参加者は登録数のみで90名、所内聴講者を含めると100名以上であった。

February 21

Toshiaki Enoki (Tokyo Institute of Technology)

Opening Address

Hiroki Nakamura (Institute for Molecular Science)

Opening Address

Walt A. de Heer (Georgia Institute of Technology)

Epitaxial Graphene: Designing a New Electronics Material

Satoru Tanaka (Kyushu University)

Graphene Formation on Vicinal SiC Surfaces

Katsuaki Sugawara (Tohoku University)

Electronic Structure of Graphene and Related Materials Studied by High-Resolution ARPES

Kostya S. Novoselov (University of Manchester)

Graphene: The Magic of Flat Carbon

Riichiro Saito (Tohoku University)

Edge States and Raman Spectra of Graphene and Carbon Nanotubes

Toshiaki Enoki (Tokyo Institute of Technology)

Unconventional Electronic and Magnetic Properties of Nanographene

Kikuo Harigaya (AIST)

Magnetic and Electronic Properties in Nanographene Systems

Hiroshi Fukuyama (University of Tokyo)

Landau Levels in Graphene Studied by Scanning Tunneling Spectroscopy

Kazuyuki Takai (Tokyo Institute of Technology)

Electronic Properties of Nanographene and Its Chemical Modification—Tuning Its Topology and Spin-Orbit Coupling—

Katsunori Wakabayashi (Hiroshima University)

Electronic Transport Properties of Graphene Nanoribbons

Kouichi Kusakabe (Osaka University)

Theoretical Design of Graphene Device Structure with Embedded Edge States

Kurt Stokbro (QuantumWise A/S)

New developments for ab initio and Semi-empirical Modeling of Quantum Transport in Electronic Devices

Toshihiko Yokoyama (Institute for Molecular Science)

Novel Magnetic Nanoscope Based on Ultraviolet Magnetic Circular Dichroism Photoelectron Emission Microscopy

February 22

Tsuneya Ando (Tokyo Institute of Technology)

Physics of Graphene and Its Multilayers: Zero-Mode Anomalies, Symmetry Crossover, and Electron-Phonon Interaction

Hideo Aoki (University of Tokyo)

Novel Optical Properties Predicted for Graphene: Landau-Level Laser and Photovoltaic Hall Effect

Steven G. Louie (University of California, Berkeley)

Physics of Graphene Nanoribbons and Superlattices

Robert C. Haddon (University of California at Riverside)

Advances in the Chemistry and Application of Carbon Nanomaterials

Michikazu Hara (Tokyo Institute of Technology)

Hydrolysis of Cellulose into Glucose by Amorphous Carbon Consisting of Nano-Graphene Bearing SO₃H, COOH and OH Groups

Takanori Fukushima (RIKEN)
Carbon-Rich Nanotubes Formed by Self-Assembly of a Small Graphene Fragment
Takashi Kubo (Osaka University)
Theoretical and Experimental Studies on Anti-Ferromagnetic (Open-Shell Singlet) Ground State of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons
Yoshito Tobe (Osaka University)
Ordering Two-Dimensional Arrangement of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Surface-Confined Molecular Networks
Kazuo Takimiya (Hiroshima University)
Organic Semiconductors for Stable, High-Performance Thin-Film Transistors
Yasushi Morita (Osaka University)
Material Challenges for Air-Stable Neutral Radicals with Polynuclear Benzenoid Structures
Koichi Ohno (Tohoku University)
Computational Studies on Electronic and Vibrational States of Giant Polybenzenoid Hydrocarbons and Carbon Networks
Hidehiro Sakurai (Institute for Molecular Science)
Asymmetric Synthesis of a Chiral Buckybowl
Takeshi Kawase (University of Hyogo)
Synthetic Exploration of Nonplanar Conjugated Systems
Masahiko Iyoda (Tokyo Metropolitan University)
Supramolecular Structures and Nanoassemblies of Cyclic Oligophenylenes
Hiroo Inokuchi (JAXA)
A Memory of Third Conference on Carbon (1957): From Benzene to Graphite and to Diamond

February 23

Francisco Guinea (Instituto de Materiales de Madrid, CSIC)
Electronic Properties and Structural Deformations of Graphene
Susumu Okada (University of Tsukuba)
Energetics of Nanographite Ribbons
Nobuyuki Nishi (Institute for Molecular Science)
Functions and Structure of Graphene-Walled Mesoporous Carbon Nano Dendrite
Pablo Esquinazi (University of Leipzig)
Multigraphene: Differences and Similarities to Graphene
Tomoki Machida (University of Tokyo)
Magnetotransport in Single-Layer Graphene
Akinobu Kanda (University of Tsukuba)
Spin and Cooper-Pair Transport in Multilayer Graphene
Masashi Shiraishi (Osaka University)
Spin Transport Properties in Graphene-Based Spin Valves
Ajay K. Sood (Indian Institute of Science)
Top Gated Single and Bilayer Graphene Transistor: Phonon renormalization
Alberto Morpurgo (University of Geneva)
One, Two, Three,...Infinity: The Bottom-up Road to Graphite
Kanji Yoh (Hokkaido University)
Fabrication and Characterization of Graphene Transistors Grown on SiC
Kazuhito Tsukagoshi (NIMS, AIST)
Conduction Control of Graphene by Gate-Electric Field
Toshiaki Enoki (Tokyo Institute of Technology)
Closing Remark

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，19年度10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。一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。

2008年度実施状況

代表者	研究課題名
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
宇理須恒雄	神経細胞分子情報伝達システムの構築と分子科学新分野開拓
木村 真一	強相関系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
小杉 信博	軟X線共鳴分光に関する国際共同研究（UVSOR BL3U）
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
加藤 政博	自由電子レーザー発振のビーム力学的研究
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
繁政 英治	電子分光法による内殻励起分子の脱励起ダイナミクスに関する研究
岡本 裕巳	金属ナノ微粒子系におけるプラズモン誘起電場増強の近接場分光

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，この覚え書きの内，日韓合同シンポジウムに関して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。合同シンポジウムは，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（化学におけるダイナミクス研究をテーマとする予定）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 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20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、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（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、ナノ構造体における光学応答理論（台湾との共同研究）に関する研究が進展した。

(2) セミナー

「韓日生体分子科学セミナー——実験とシミュレーション」(ソウル)、「中日機能性超分子構築シンポジウム」(北京)、「ナノケミカルバイオロジーアジアコアシンポジウム」(岡崎)、「次世代触媒創製を目指した機能物質シンポジウム」(韓国・デジョン)、「元素の特性に基づいた分子機能に関する日中シンポジウム」(北京)、「物質・光・理論分子科学のフロンティア」冬の学校（台北）などが開催された。

3-4-6 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付属加速器研究所、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。

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 ~ 98	99	00	01	02	03	04	05	06	07	08
北海道大学	10						1	1			
室蘭工業大学	2										
東北大学	12	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	2	1		1	1						
東京大学	31									2	4
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	5	3	2								
信州大学	3			1							
岐阜大学	2										
名古屋大学	67	1	2	6	2	2			3	4	6
愛知教育大学									1		
名古屋工業大学	7	4	3	1			2				
豊橋技術科学大学	30					7	2				1
三重大学	6	1									
京都大学	34	1	3	1	1			2	1	1	1
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	24		1	1							1
神戸大学	2	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	37	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	4	
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	6			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	9			1	1	1	1					
明治大学									1			
名城大学	4											
岡山理科大学								1				
* その他											3	
計	455	19	27	31	28	26	17	14	16	17	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（2008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	10	9	20
計	20	16	40

在籍学生数（2008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	2008年度	計	定員
構造分子科学専攻	5年一貫	0	0	0	0	2	1	3	2
	博士後期	0	0	4	8	6	4	22	3
機能分子科学専攻	5年一貫	0	0	0	0	2	2	4	2
	博士後期	1	1	0	2	3	3	10	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	1991～98	99	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	45(8)	7(2)	8(1)	3	11	6	3	7	5	5	1	101(11)
機能分子科学専攻	42(5)	6(1)	6	5	5(4)	1	5(4)	4	5	1(1)	3	83(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	1989～98	99	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008
構造分子科学専攻	77	5	8	5	3	7	7	8	11(1)	9(3)	5(1)
機能分子科学専攻	70	6	0	7	6	6	6	7	4	4(1)	5(2)

()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		
	1989-2006年度	2007年度	2008年度	1989-2006年度	2007年度	2008年度
中国	15	1		4		
フランス				1		
ロシア				1		
バングラディッシュ	6			2		
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 ~ '06	'07年度	'08年度	'89 ~ '06	'07年度	'08年度	
北海道大学	2			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			3			8
東京大学	7			8		1	16
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		1			1	6
三重大学	1						1
京都大学	9	2		14	1	1	27
京都工芸繊維大学	1			1			2
大阪大学	5			4			9
神戸大学	3		1				4
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				2	1		3
名古屋市立大学				2	1		3
大阪市立大学	1		1				2
大阪府立大学	2			2			4
兵庫県立大学	1	1	1			1	4
姫路工業大学	1			1			2
石巻専修大学	1						1
青山学院大学				1			1
学習院大学	4			2			6
北里大学	1						1
慶應義塾大学	1			4		1	6
国際基督教大学				1			1
中央大学	1			1			2
東海大学			1				1
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	26	1		15			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 オープンキャンパス・分子研シンポジウム

2008年6月13日(金)午後～14日(土)午前まで分子研シンポジウム2008を開催し、引き続き14日(土)午後分子研オープンハウスを開催した。本事業は全国の大学院生、学部学生および若手研究者を対象に、分子研で行なわれている研究内容を分かり易く解説することにより、共同研究の機会を拡大するとともに、総合研究大学院大学の物理化学研究科を担う教育機関であることも、外部の方々に広く認識して頂くことを目的としている。オープンハウスとしては本年度で18回目の開催となるが、広報室の発案でその名称が“オープンハウス”から“オープンキャンパス”へと変更された。3月からホームページで告知を始め、化学雑誌、学会誌等への広告掲載、および広報を通してポスターを大学関係者に送付し、掲示を依頼した。分子研シンポジウムは昨年度からスタートし、本年度が2回目になる。分子研OB、総研大OBを中心に4研究領域から推薦された7名の先生方に講演をお願いした。参加登録者数は、所外53名、所内45名の計98名であった。未登録の所内参加者もあったようで、一時はコンファレンスセンター小会議室がいっぱいになった。

一方、オープンキャンパスでの参加登録者数は47名、キャンセルが2名で、南は鹿児島から北は北海道まで、学部学生15名、修士課程20名、博士課程4名、その他名の方々6名の、総勢45名の参加となった。シンポジウム、オープンキャンパスの双方への参加者は28名であった。

参加者数まとめ

	学部学生	修士課程	博士課程	その他	合計
北海道・東北	0	0, 1, (1)	0	3, 0, (0)	4, 1, (1)
関東	14, 14, (13)	6, 6, (5)	0, 2, (0)	5, 1, (0)	28, 23, (18)
信越・北陸	0	0	0	1, 1, (1)	1, 1, (1)
東海	0	1, 3, (0)	0, 1, (0)	0, 1, (0)	5, 5, (0)
関西	0	8, 7, (5)	2, 0, (0)	3, 3, (2)	13, 10, (7)
中国	0	0, 3, (0)	0	0	0, 3, (0)
四国	0	0	1, 1, (1)	0	1, 1, (1)
九州・沖縄	0, 1, (0)	0	0	0	0, 1, (0)
国外	0	0	0	1, 0, (0)	1, 0, (0)
合計	14, 15, (13)	16, 20, (11)	3, 4, (1)	13, 6, (3)	53, 45, (28)

* 分子研シンポジウム、オープンキャンパス2008、双方への同時参加者数の順で表示

3-5-4 夏の体験入学

2008年8月5日から8日にかけて、「分子科学研究所夏の体験入学」を行った。この事業の目的は、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を体験し、研究所を基盤とする大学院の特色を知ってもらうことである。総研大の新生入確保のための広報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5回目の開催になった。予算申請・広報活動等を物理科学研究科に属する国立天文台・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。今回の参加学生数は19名であった。

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。

8月5日(火): 体験プログラム紹介, 所内施設(放射光施設, 計算科学研究センター)見学, 集合写真撮影, 歓迎会

8月6日(水): 研究体験, 若手懇親会

8月7日(木): 研究体験

8月8日(金): 体験内容紹介・感想および討論会, 閉会式

参加者の内訳, 体験内容, 対応教員は以下のとおりである。

	所属	学年	体験内容	対応教員
1	東邦大学	学部4年	計算機を使って分子の動きをみる	斉藤教授
2	徳島文理大学	修士1年	二酸化炭素の還元反応に関する研究を体験	田中教授
3	徳島文理大学	修士1年	水中での触媒的有機分子変換	魚住教授
4	京都大学	学部5年	金属酵素モデルを用いた酵素研究の体験	藤井准教授
5	大阪市立大学	学部1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
6	お茶の水女子大学	修士1年	有機半導体セキシチオフェンの合成	鈴木准教授
7	大阪大学	学部3年	二酸化炭素の還元反応に関する研究を体験	田中教授
8	お茶の水女子大学	修士2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
9	お茶の水女子大学	修士1年	『スピン転移物質の合成』に関する体験入学プログラム	江准教授
10	名古屋大学	学部3年	光で分子を回してみよう!	大島教授
11	University of Bath	学部4年	NMR を用いてタンパク質のかたちと動きを実感する	加藤(晃)教授
12	東京工業大学	学部4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
13	東京大学	修士2年	有機 EL 素子の作製と発光測定	平本教授
14	京都大学	修士1年	量子論におけるダイナミクスとは何であるかを紙と鉛筆・計算機を駆使して体感しよう!	信定准教授
15	東京大学	学部3年	金属酵素モデルを用いた酵素研究の体験	藤井准教授
16	八戸工業高等専門学校	学部3年	計算化学のハッキング体験学習	柳井准教授
17	神戸大学	学部3年	光合成モデル化合物の合成	永田准教授
18	名市大	学部3年	NMR を用いてタンパク質のかたちと動きを実感する	加藤(晃)教授
19	長崎大学	学部卒業	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

3-5-5 総研大アジア冬の学校

総研大の特別教育研究経費によって、2008年12月9日(火)～12日(金)に岡崎コンファレンスセンターで「総研大アジア冬の学校」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院生および若手研究者の育成に広く供するために、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200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。

外国からの応募は46名あり26名を受け入れた。国籍別の内訳は、中国14名、タイ5名、韓国3名、イラン3名、バングラデシュ1名である。国内からの参加者は16名、うち総研大生は5名、国籍は日本、中国、フィリピン、タイ、ロシアである。冬の学校では10件の講義、37件のポスター発表(外国からは24件、国内からは13件、理論研究が13件、実験研究が24件)があった。希望者による8研究室への訪問があった。

開催より充分前からウェブページを通して、講義やポスターの概要と分子研全グループの最近の活動報告を参加者に伝えておいた。参加者が十分な予習をしていたためか、非常に活発な議論がなされ、かなり高度な質問が多かった。なお、プログラムの詳細は下記のとおりである。

SOKENDAI Asian Winter School “Molecular Sciences on Different Space-Time Scales”

Tuesday, December 9

14:00- Arrival & Registration
18:00-20:00 Reception

Wednesday, December 10

8:30- 8:50 Breakfast & Registration
8:55- 9:00 Opening
9:00-10:30 Prof. Kenji Yonemitsu (IMS)
“Photoinduced phase transitions and dynamics in organic conductors”
10:30-10:40 Break
10:40-12:10 Prof. Kenji Yonemitsu (IMS)
“Wave-particle dual nature and phase diagram of organic conductors”
Lunch
14:00-15:30 Prof. Masahiro Hiramoto (IMS)
“Organic thin-film solar cells”
15:30-15:40 Break
15:40-17:10 Prof. Toshihiko Yokoyama (IMS)
“Magnetism of metal thin films and their spectroscopic characterization”
17:30-20:00 Poster Session

Thursday, December 11

8:30- 9:00 Breakfast & Registration
9:00-10:30 Prof. Kunihiko Kuwajima (IMS)
“Molecular mechanism of protein folding”
10:30-10:40 Break
10:40-12:10 Prof. Shinji Saito (IMS)
“Dynamics and nonlinear spectroscopies of liquid: theoretical and computational approaches”
Lunch
14:00-15:30 Prof. Kenji Ohmori (IMS)
“Quantum ripples in molecules; observation and control”
15:30-15:40 Break
15:40-17:10 Prof. Katsuyuki Nobusada (IMS)
“Time-dependent density functional theory in real time and real space: Application to electron dynamics in laser fields”

Friday, December 12

8:30- 9:00	Breakfast & Registration
9:00-10:30	Prof. Shigetoshi Aono (IMS) “Metalloproteins responsible for signal transduction in biological system”
10:30-10:40	Break
10:40-12:10	Prof. Hidehiro Sakurai (IMS) “Chemistry of buckybowls: Bowl-shaped π -aromatic compounds”
	Closing
	Visit to Labs/Free

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。特に法人となつてからは、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、また事業内容を紹介する動画の制作も行い見学者らに公開している。

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、2008年4月1日の構成員は、7班15系の総勢36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、研究教育職員からの依頼業務や研究設備・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、分子科学を支える技術開発ならびに研究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・計測する分野としては、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機関の安全衛生管理者として活動している。分子研に於いては、安全衛生管理室に所属（併任）し、専任助教に加えて4名の技術職員（安全衛生管理者）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、それぞれの専門技術を生かし、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。

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にこれ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	
昭和 55	分子科学研究所	昭和 55 年 2 月	機械, 回路, 電子計算機	
	高エネルギー物理学研究所	昭和 55 年 10 月 24 日	機械	
昭和 56	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
	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
平成 20	愛媛大学	平成 20 年 9 月 25-26 日	機器・分析	
	京都大学	平成 21 年 3 月 9-10 日	機械・ガラス工作, 装置, 回路・計測・制御, 低温, 情報ネットワーク, 生態・農林水産, 医学・実験動物, 分析・物性, 実験・実習・地域貢献, 建築・土木, 環境・安全	

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の整備が整っていないことと, 受け入れ側の負担や, 新しい技術の獲得には寄与していないため, 実施件数は少なくなってきた。そこで, 2008 年度はセミナー形式で外部より講師を招き, 併せて他機関の技術職員も交えて「技術課セミナー」を行った。2008 年度は, 「超精密加工技術」に関連した 3 名の講師を大学および民間からお願いし, 技術講演と共に技術職員の研修を行った。また従来の受け入れ研修も小規模ながら続いている。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
平成 19 年度	6

表3 技術研修受入状況(2008.4.1～2009.3.31)

氏名	所属	受入期間	備考
熊谷 宜久	神戸大学	平成20年11月18日-11月19日	理化学ガラス実験機器製作研修
鈴木 教和	名古屋大学	平成21年2月25日	技術課セミナー「超精密加工技術」講師
桐野 宙治	(株)クリスタル光学	平成21年2月25日-2月26日	技術課セミナー「超精密加工技術」講師
所 仁志	(株)ナノオプトニクス研究所	平成21年2月25日-2月26日	技術課セミナー「超精密加工技術」講師
中坪 俊一	北海道大学	平成21年2月25日-2月26日	技術課セミナー「超精密加工技術」
谷田貝悦男	東京大学	平成21年2月25日-2月26日	技術課セミナー「超精密加工技術」
岡田 則夫	国立天文台	平成21年2月25日-2月26日	技術課セミナー「超精密加工技術」
三ツ井健司	国立天文台	平成21年2月25日-2月26日	技術課セミナー「超精密加工技術」
安島 泰雄	高エネルギー加速器研究機構	平成21年2月25日-2月26日	技術課セミナー「超精密加工技術」
渡辺 勇一	高エネルギー加速器研究機構	平成21年2月25日-2月26日	技術課セミナー「超精密加工技術」
杉戸 正治	核融合科学研究所	平成21年2月25日	技術課セミナー「超精密加工技術」
鈴木 雅也	ものづくり大学	平成21年2月25日-2月26日	技術課セミナー「超精密加工技術」
吉田 久展	慶應義塾大学	平成21年2月25日-2月26日	技術課セミナー「超精密加工技術」
高野 朋幸	慶應義塾大学	平成21年2月25日-2月26日	技術課セミナー「超精密加工技術」
野口与四郎	日産自動車(株)	平成21年2月25日-2月26日	技術課セミナー「超精密加工技術」
増田 忠志	名古屋大学	平成21年2月25日	技術課セミナー「超精密加工技術」
石川 秀蔵	名古屋大学	平成21年2月25日	技術課セミナー「超精密加工技術」
鈴木 和司	名古屋大学	平成21年2月25日	技術課セミナー「超精密加工技術」
鳥居 龍晴	名古屋大学	平成21年2月25日	技術課セミナー「超精密加工技術」
松下 幸司	名古屋大学	平成21年2月25日	技術課セミナー「超精密加工技術」
立花 健二	名古屋大学	平成21年2月25日	技術課セミナー「超精密加工技術」
山本 浩治	名古屋大学	平成21年2月25日	技術課セミナー「超精密加工技術」
白木 尚康	名古屋大学	平成21年2月25日	技術課セミナー「超精密加工技術」
立花 一志	名古屋大学	平成21年2月25日	技術課セミナー「超精密加工技術」
熊谷 宜久	神戸大学	平成21年3月10日-3月11日	理化学ガラス実験機器製作研修

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
2008年4月1日	採用(公募選考)	機器利用技術班	
2008年4月1日	採用	計算科学技術班	
2009年2月1日	採用	機器開発技術班	

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)
- 鈴木光一 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)
- 水谷文保 日本化学会化学技術有功賞(2009)

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

「アカウントビリティ」という言葉が喧伝される昨今、研究者コミュニティばかりでなく、老若男女を問わず広く一般の方々に、分子研の研究活動や役割を分かり易く伝えることの重要性が益々増加している。このような広報活動を進める組織として、分子研には広報室が設置されている。現時点のメンバー構成は、広報室長ならびに副室長として研究教育職員2名、技術職員1名、技術支援員1名である。広報室では、この数年来、広報活動のより一層の充実を目指して、以下のような様々な改革を進めている。

- (1) ホームページの改善と全面改訂
- (2) Annual Review 誌の全面改訂
- (3) プレスリリースの支援と強化
- (4) 分子科学フォーラムの充実
- (5) 紹介ビデオの作成
- (6) 日本科学未来館との連携

以下、各項目に関して簡単に報告する。

4-3-1 ホームページの改善と全面改訂

現在のホームページは平成17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、依然、いくつかの問題が存在していた。そのひとつは「トピックス欄」の更新頻度が低く、新鮮な情報を供給できていなかったこと、さらに、専門外の読者には内容が難しすぎることであった。この問題を解決するため、各研究領域から積極的に原稿を投稿するよう依頼し、また、原稿内容は広報室担当教員がチェックして執筆者に改訂を求めるようにした。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り、ホットな研究成果を平易に紹介する記事が掲載されるようになった。もうひとつの問題は、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ていた。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改訂を行なった。また、「4年目広報Womanが綴る分子ウォッチング」という欄も、試験的に開設している。これは、分子研内の人々や日々の活動を技術職員がブログ形式で紹介するもので、一般の方々の「分子研って、いったいどんなところなの？」という疑問に少しでもお答えできることを期待している。

以上のように、広報室では様々な改善を行ってきたが、依然「継ぎはぎ」的な感を否めず、他の先進的な大学や研究機関に匹敵する「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、「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た。「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した。この改訂では、研究面でのアクティビティはもとより、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」画面となることを最重要視している。改訂後の新ホームページは、平成21年度当初より運用を開始している。

4-3-2 Annual Review 誌の全面改訂

Annual Review 誌は分子科学研究所の研究活動を外国に発信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、これまで Annual Review は論文要旨を単に寄せ集めたような体裁になっていて、分量が多いにも関わらず内容に統一感がなく、読みにく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致命的な欠陥であるという認識に至った。このため、平成 19 年度 Annual Review 誌の全面改訂を行なった。内容としては、各研究グループの 1 年間の研究業績を、図などを含めてトピック的に見開き 2 ページに分かり易くまとめた。また、研究者や研究スタッフの写真を載せ、全てのページをカラー刷りとして親しみやすい紙面を目指した。

4-3-3 プレスリリースの支援と強化

新聞、テレビなど報道機関を通じて「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を目指して、プレスリリースを支援・奨励するための体制整備に取り組んでいる。こちらから積極的に情報を発信するという見地から、岡崎市役所内にある市の記者クラブに研究者が出向いて、新聞・テレビ各社の記者を前にプレスリリースを行なうこととした。その際、カラフルな模式図などを多用して平易に研究成果を説明したリーフレットを配布している。この新規体制に移行した平成 19 年末より、これまでに既に 5 件のプレスリリースを行なっている。幸いなことに、その全てについて新聞に紹介記事が掲載された。プレスリリースを行なった研究者も、発表の準備や記者との質疑応答を通して、自身の研究内容を一般の方々に分かり易く伝えることの重要性や楽しさ、さらに難しさを実感したようであり、このような体験が、以後の研究の進展と深化に少なからぬ貢献を与えることは確実といえる。このように「アカウンタビリティ」を外的な圧力としてではなく、他者との双方向的なコミュニケーションを通じての自己啓発として位置づけることが極めて重要だと考える。所内研究者のより一層積極的な参画が期待される。

4-3-4 分子科学フォーラムの充実

分子科学フォーラムは、分子科学の内容を他の分野の方々や一般市民に紹介し、また、分子研の研究者がより広範な科学の内容に触れて自身の研究展開に資することを目的として、1996 年より実施されている講演会である。豊田理化学研究所と共催で、これまで毎年 6 回開催されてきた。所内のコロキウム委員（研究教育職員 2 名）が運営を担当してきたが、少数で対応せざるを得ないことから、講演内容や開催時期の選択という面で、効果的な運営が困難となる場合が増えてきた。そこで、平成 20 年度からは、一般市民の方々に科学の面白さ・楽しさを広く知っていただく「市民公開講座」として位置づけし直し、広報室を中心とした広報委員会が運営する体制に改訂することとした。その際に、社会人や中高生学生などターゲットをできるだけ明確にして企画を立案した。平成 21 年度からは、更なる内容の充実を目指して、開催数を年 4 回に絞って実施する予定である。

4-3-5 紹介ビデオの作成

所外の見学者が研究所を訪問される際などにお見せする目的で、研究所の紹介ビデオの作成も行なった。分子研の 4 研究領域（理論・計算分子科学、光分子科学、物質分子科学、生命・錯体分子科学）から各 2 名の研究者が出演し、研究風景を交えながら各自の研究について紹介する内容になっている。専門業者に製作を依頼したが、できるだけ正確に研究内容を紹介するように努めるとともに映像作品としても見ごたえのあるものとなるよう、各研究者と十分な打ち合わせを行った上でカメラアングルやライティングにまでこだわった撮影や分子の動画 CG 作成を行なった。

4-3-6 日本科学未来館との連携

東京お台場にある日本科学未来館は、最先端の科学技術に関する情報の発信と人の交流のための拠点として、館内での展示やイベント、セミナーに力を注ぐばかりでなく、研究者・技術者、メディア、行政、学校、産業界などのネットワークを築くことにも務めており、ともに活動することによって先端科学技術と一般市民をつないでいくことを目指している。館長の毛利衛氏は、かねてより分子研を含む岡崎3研究機関に少なからぬ興味を持たれておられたとのことであるが、平成20年11月7日に未来館職員3名の方々とともに岡崎を訪問され、3研究所を見学されるとともに、研究所長との懇談、ならびに広報担当者との意見交換を行なわれた。これを契機として、日本科学未来館と岡崎3研究機関とにおいて、学術研究交流の推進と一般を対象にした科学コミュニケーション活動の推進に資する活動を図ることを目的として、相互協力に関する協定を締結することとした。具体的な相互交流としては、例えば、科学コミュニケーション手法開発に関する協力、講演会・シンポジウム・イベント等の共同開催・協力・後援、展示物等の共同開発、3機関による最新研究動向に関する未来館の研修への協力、3機関のアウトリーチ活動に関する未来館の協力などが挙げられる。分子研としても、一般社会への広報・アウトリーチ活動の更なる展開に、本連携を積極的に活用するべきと考えられる。

4-4 史料編纂室

4-4-1 はじめに

分子研は昭和 50 年に基礎研究を目指した大学共同利用機関として設立され、平成 17 年に創設三十周年を迎えた。その翌年に史料編纂室が設けられ（平成 18 年 1 月）、アーカイブズ活動を進めている。分子研創設に至る経緯には約 15 年間の長い歴史がある（表 1）。史料編纂室では、分子研がどのような経緯で創設に至ったか、また分子科学がどのような経緯で発展したか、特に創設第一期（最初の十年間）の状況はどうだったかなど、歴史的な資料（史料）の収集に努めている。さらにそれらの史料を調査・整理し、目録を作成して史料室に保管するというアーカイブズの作業を進めている。

これまで収集された分子研に関する史料は、創設に至る歴史（表 1）に従って分類され、詳しい目録が作成されている（分子研レポート 2006，分子研レポート 2007）。大別すると、次のように分類される。1)日本化学会将来計画委員会の議事録など、2)日本学術会議による分子研設立の勧告、3)分子研小委員会の議事録（大学附置研の構想）、4)学園紛争後の小委員会の議事録（全国共同利用研の構想）、5)「分子科学」特定研究、6)分子研準備室時代、7)分子研の設立と第一期（十年）など。

表 1 分子研創設に至る経緯

昭 36	「分子科学」総合研究（代表小谷正雄）
昭 38-40	日本化学会・将来計画委員会（6 研究所）
昭 40	日本学術会議からの勧告（総理大臣へ）
昭 41	分子研小委員会の発足（「大学附置研」構想）
昭 45	同委員会の委員交替（「全国共同利用研」構想）
昭 46-47	「分子科学」特定研究
昭 48	学術審議会からの報告（内閣総理大臣へ）
昭 49	創設準備室
昭 50	分子研創設

4-4-2 最近収集された史料

1. 「分子研前史」長倉三郎（分子研レターズ 57, 平成 20 年 5 月号, p.8-11）
2. 中村宏樹（20.3.17 提供）分子科学サーキュラー（No. 5, 7, 13 を除く全て）
3. 小谷野猪之助（20.3.27 提供）(a) 分子科学若手グループ会報（昭 42-47）,(b) 分子科学若手グループの関連資料（昭 43-45）,(c) 分子研の設立に向けての資料（昭 43-44）,(d) 分子科学会会報（昭 42-45）,(e) 分子科学研究会に関する資料（昭 42-44）,(f) 分子研関係の冊子（昭 44）,(g) 新聞記事（素粒子研）（昭 43-44）
4. 井口洋夫（平 20.5.15 提供）(a) 「我が国学術体制に新しい流れを吹込む」（日本工業新聞, 昭 60.9.30）,(b) 「極端紫外光実験施設——分子の新しい機能開発」（科学新聞 昭 59.6.22）,(c) 「分子科学研究所の挑戦——新しい化学を追って」（ニュートン, 昭 58.6 号）,(d) 分子研関係の冊子 (1) 分子科学研究所（24 頁）,(2) 1979 分子研要覧（32 頁）,(3) 1976-1988 岡崎コンファレンス（8 頁）,(4) UVSOR（10 頁）
5. 井口洋夫（平 20.5.27 提供）(a) 「分子研の設立」推進委員会（赤松・長倉・井口, 昭 48.10.24）,(b) 「特定研究・分子科学」経過報告（昭 48）,(c) 「分子研（仮称）設立要望書ならびに設立案」（日本学術会議・化研連・分子科学小委員会, 昭 40.10）,(d) 「分子研概算要求第二次試案（創設費, 部門関係, 共通施設, 機器センター）」,(e) 「分子研概算要求第二次試案（大型研究関係, 部門通常経費, 大型研究経費, その他）」,(f) 「総合研究 B・分子科学」

経費，内訳：17項目（昭49.2.28），(g) 科研費補助金・総合B「分子科学」，昭48年度実績報告書-2，(h)「分子科学シンポジウム」案内（昭49.1.19，東大理学部化学），(i)「分子研小委員会報告」案内（昭49.1.15，赤松秀雄），(j)「分子研創設準備室の発足の予定」について（小委員会宛書簡，赤松秀雄），(k) 総合研究B「分子性結晶」に参加のお願い（研究分担者宛書簡，赤松秀雄），(l)「分子科学シンポジウム」案内（総合研究B班員宛，赤松秀雄，昭48.12.18），(m)「分子科学シンポジウム」案内（総合研究B班員宛，赤松秀雄，昭49.1.16），(n) 研究成果の報文別刷3部提出のお願い（特定研究班長宛，赤松秀雄），(o) その他。

6. 井口洋夫（平20.6.9提供）「分子研一般公開」ポスター（昭63）
7. 赤松康江（平20.7.8提供）(a) 写真アルバム3冊（分子研創設時代の写真および赤松秀雄初代所長送別会の写真など），(b) 英文書籍2冊。
8. 井口洋夫（平20.7.18提供）(a) 日英協力事業「分子科学」，(b) 日英協力事業「分子科学」資料，(c) 高橋重敏氏，吉川英治文化賞，(d) H. C. WOLF，(e) 分子研諸規定，(f) おかざき寺子屋教室，(g) 分子研コロキウムコロキウム，(h) 分子科学研究所の教授会議議事録，(i) 化学研究推進機構(案)，(j) 分子研リーフレット No.3（1976.10）
9. 井口洋夫（平20.10.10提供）(a) 岡崎コンファレンス関連の資料（58件），(b) 分子研シンポジウム，マリケン教授来所記念など（6件），(c) 分子研関係の新聞記事-1（38件），(d) 分子研関係の新聞記事-2（14件），(e) 諸規程（約25件），(f) 分子研創設十周年記念式典（昭60.5.10）式典資料10件。
10. 技術課（平20.5.8提供）(a) ビデオテープ13本，(b) 写真アルバム14冊。

4-4-3 総研大プロジェクトに参加したアーカイブズ研究会

アーカイブズに関する総研大プロジェクトの一環として基盤研究機関等において開催された種々の研究会や講演会に参加し，アーカイブズについての有益な情報が得られた。（括弧内の氏名は分子研の発表者）(a) 核融合研アーカイブズ全体会（平20.2.14，木村克美），(b) 総研大アーカイブズ全体会（東京，平20.6.11，木村克美），総研大アーカイブズ講演会（核融合研，平20.7.15），(c) 慶応大アーカイブズ講演会（慶応大，平20.7.25），(d) 研究会「公文書の扱い」（東大，平20.9.21），(e) 総研大アーカイブズ史料共有化研究会（核融合研，平20.11.5-6），(f) 総研大アーカイブズ研究会（国立天文台，平20.10.9），(g) 総研大アーカイブズ研究会（極地研，平20.10.16，木村克美），(h) 総研大アーカイブズ研究会（国文研，平20.10.30），(i) 総研大アーカイブズ研究会（宇宙科学研，平成20.11.13），(j) 慶応大アーカイブズワークショップ（慶応大，平20.11.18），(k) 総研大アーカイブズ研究会（生理研，平21.1.8，鈴木さとみ）

4-4-4 今後の方針

今後も引続いて，分子研に関する史料を収集し，オリジナル史料の複写およびデジタル化（PDF）を行うと同時に，総研大の基盤研究機関のアーカイブズと連携して，史料データ共有化（EAD化）の作業を進めていく予定である。また，分子研アーカイブズのホームページを開設する準備を進めたい。

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6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たくあるのか」, 東京国際フォーラム, 2007年9月23日。

第5回：「解き明かされる脳の不思議」, 東京国際フォーラム, 2008年3月20日。

第6回：「宇宙究極の謎」, 東京国際フォーラム, 2008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、2007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きている。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。特に、本年度9月に開催された第6回では、新規に作成した分子研の紹介ビデオを放映した効果もあり、今までよりも多数の訪問者があり、質問も活発であった。

本シンポジウムも第6回を迎え、自然科学研究機構の各機関（分子研・核融合研・基生研・生理研・天文台）が主体となった企画も一巡した。今後は、複数の研究機関が協力して学際的なテーマを取り上げるなど、新たな取り組みが検討されている。次回は2009年3月20日に開催され、これまでとは少し傾向を変えて「研究への思いを研究者自らが熱く語る」プログラムとなる予定である。

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、2008年12月で819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下に、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78回開催されている。今年行われた講演の中では、サントリー水科学研究所長の樋口直樹さんとチーフブレンドの輿水精一さんによる水とアルコールについてのお話（第75回）に、250名を超える市民の方々が参加されて会場が満席になり、多くの活発な議論が行われた。講演の前にはウイスキーの試飲会が開かれ、市民と研究者の交流の場となった。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
72	2008. 2.13	星空に巡らす化学の夢	山本 智 (東京大学大学院理学系研究科教授)
73	2008. 2.20	分子が拓く物性革命	高橋 利宏 (学習院大学理学部教授)
74	2008. 3.12	冷却原子で観る量子論の不思議	久我 隆弘 (東京大学大学院総合文化研究科教授)
75	2008. 5.21	特別企画「水とアルコールと人生と」	樋口 直樹(サントリー水科学研究所長) 輿水 精一(サントリーチーフブレンド)
76	2008. 6.11	カーボンナノチューブの世界によろこ	齋藤理一郎 (東北大学大学院理学研究科教授)
77	2008.10.29	暮らしを変えた化合物たち	佐藤健太郎 (サイエンスライター)
78	2008.12.17	見るって何だろう ——光は眺めるだけなのか——	腰原 伸也 (東京工業大学フロンティア研究センター教授)

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	畠田 博一 助教授
2003. 7.19	レーザー入門～光の基礎からレーザー研究の最前線まで～	平等 拓範 助教授

安城市シルバーカレッジ

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

(2) 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、平成19年度から行っている。これらは主に機器開発班と電子機器・ガラス機器開発班が中心となって対応した。毎回、市内の中小企業から10社ほど来所し、各社の持っている得意分野の技術紹介を受けた後、分子科学の分野で必要なものづくり技術や、技術開発の取り組みについて説明し、意見交換を行った。平成20年度は交流会の開催は行わなかったが、この交流会を機にスタートした協力体制は継続して進んでいる。

(3) コミュニティサテライトオフィス講演会

岡崎大学懇話会（市内4大学で構成）・岡崎商工会議所が運営するコミュニティサテライトオフィスにおいて、地域社会や地域産業の活性化に還元する主旨で一般市民及び企業関係者を対象としている。

開催日	テーマ	講師
2009. 1.15	分子を活用する近未来技術～分子科学研究所が関与するエネルギー問題や環境問題等への取り組み～	西 信之 教授

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

岡崎高校は平成 19 年度より始まる SSH 継続事業に応募し、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。本年度は以下の 3 課題の活動に協力した。

(1) スーパーサイエンス部活動（化学班）の支援

- ・「三層系を用いた光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（指導者：永田准教授）。本年度は目立った活動は行なっていないが、昨年度指導した生徒（新家和真君）が「全国高校化学グランプリ」で金賞を受賞。
- ・「色素増感太陽電池の研究」（指導者：見附准教授）。三つの研究発表会で成果を発表。（第 17 回東海地区高等学校化学研究発表会，高等学校文化連盟自然科学部研究発表会，第 50 回日本植物生理学会「高校生生物研究会」）

(2) スーパーサイエンス部活動（物理班）の支援

- ・「超伝導体 YBCO ($YB_2Cu_3O_{7-x}$) の作成と高温超伝導実験」など（指導者：中村准教授）。本年度は目立った活動を行なっていない。

(3) 2 年生進路オリエンテーションでの講演

開催場所：岡崎コンファレンスセンター

分子研講演者：平田文男

タイトル：「化学（分子科学）は地球環境・エネルギー危機の『救世主』となり得るか？」

平成 21 年 1 月 26 日（月）午後 13:00-15:00

4-6-2 コスモサイエンスコース

分子科学研究所では、平成 20 年度に愛知県立岡崎北高等学校が国際的に活躍できる科学技術者の育成を目的に新たに設置した、コスモサイエンスコースへの協力を、岡崎市にある基礎生物学研究所、生理学研究所とともに開始した。

(1) 「第 2 回コスモサイエンス・ゼミ」に講師を派遣

開催場所：岡崎北高校

分子研講演者：田中晃二教授

タイトル：「二酸化炭素の科学を楽しんでいます」

平成 20 年 6 月 21 日（土）13:30-16:00

(2) 「第 7 回コスモサイエンス・ゼミ」

目的：各研究所の施設を見学することで、実際の研究現場の雰囲気を経験し、科学に対する興味、関心を高める

参加人数：コスモサイエンスコース 1 年生 約 40 名

分子研見学場所：電子顕微鏡（実験棟地下 1F）、UVSOR

平成 20 年 12 月 26 日（金）13:30-16:00

4-6-3 サイエンスパートナーシッププロジェクト

この事業は個人応募型のプロジェクトで高校の理科の先生が大学や研究機関の教育・研究者の支援を得て、応募するという趣旨のものであり、岡崎西高校の山本幸子教諭の提案がこのプロジェクトに採択された。分子研からは宇理須教授が協力することとなった。「イオンチャンネルバイオセンサーの製作を通して細胞の情報伝達の仕組みを学ぶ」という講座を開講することとし、2、3 年生の理系で希望した生徒 20 名がこのプロジェクトに参加した。

(1) 実習 1 日目 (平成 20 年 7 月 19 日午後)

参加生徒 20 人 (3 年生男子 10 名, 3 年生女子 6 名, 2 年生男子 4 名) を 4 人ずつの 5 グループに分け, この日は各グループから 1 ~ 2 名の代表生徒のみを引率した。イオンチャンネルバイオセンサーの製作に使用する神経細胞 PC12 の扱いについての操作法を学び, 実際にクリーンベンチでの培養操作を実習し, 細胞を継代して, 23 日の実験に使用するために細胞を増殖させた。

(2) 実習 2 日目 (平成 20 年 7 月 23 日午後)

イオンチャンネルバイオセンサーに用いる神経細胞をニューロンとして成長させるコーティング剤の効果を調べるため, 4 種類の細胞培養用ディッシュを準備した。グループの 2 人が細胞外マトリックスであるラミニンやポリリジンを用いて, ピペットマンを使ってクリーンベンチ内でそれぞれディッシュにコーティングした。それ以外に無処理のディッシュと培養用の市販のディッシュの計 4 枚をグループ毎に用意した。

(3) 実習 3 日目 (平成 20 年 7 月 26 日全日)

4 種類のディッシュで分化した細胞を顕微鏡で比較し, どのディッシュが最もニューロンとしての分化を促進したか比較した。また, 実際の研究に使用するイオンチャンネルバイオセンサーでの細胞のネットワークの様子を画像で見せ, 研究方法の説明を行った。一連の実験終了後, 細胞の情報伝達はどのようにしておこなうのか, またバイオセンサーを利用してどのような研究ができるのかについて, 約 1 時間の講義を行った。生徒たちは難病の原因究明や治療法の発見のためにこのような基礎研究が役立ち, さらに様々な分野の技術の連携によって研究が成り立っていることを学んだ。

4-6-4 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
93	2008. 6.17	宇宙の光を地上で作る——シンクロトロン光源——	加藤 政博 教授

4-6-5 小中学校での出前授業

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

分子科学研究所が担当したものは以下のとおりである。

岡崎市教育委員会（出前授業）

対象校	開催日	テーマ	講師
六ツ美北中東海中	2002. 1. 25	光学異性体とその活用	魚住 泰広 教授
東海中	2003. 2. 18	計算機を使って分子を見る	谷村 吉隆 助教授
常磐南小	2005. 2. 7	光の不思議	岡本 裕巳 教授
東海中	2006. 2. 8	モルフォ蝶とナノ化粧品秘密	小川 琢治 教授
美川中	2007. 2. 26	生物から学ぶ光と色	小澤 岳昌 助教授
矢作西小	2007.12. 4	原子の世界	櫻井 英博 准教授
六ツ美北部小	2008.10. 10	ミクロの世界の不思議	平本 昌宏 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

4-6-6 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，職職場体験学習として中・高生の受け入れに協力している。

年度	受入件数	参加者数	見学受入機関名
2007	5	10	岡崎市立甲山中学校，愛知県立豊田西高等学校，岡崎市立竜海中学校，豊橋市立中部中学校，岡崎市立竜南中学校
2008	4	12	岡崎市立甲山中学校，豊川市立音羽中学校，岡崎市立六ツ美中学校，岡崎市立竜南中学校

4-6-7 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，小学生に科学に対する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	めざそう理科博士
2	1996.10.26（土） 12:30-15:00	岡崎商工会議所中ホール	鹿野田一司 助教授	低温物理学実験
5	1999.10.23（土） 13:30-16:00	岡崎コンファレンスセンター 分子科学研究所	谷村 吉隆 助教授	目指せ！ 科学者
8	2002.10.19（土） 14:00-16:30	分子科学研究所	魚住 泰広 教授	僕も私も名探偵
11	2005.5.29（日） 14:00-16:30	山手3号館大会議室	宇理須恆雄 教授	アトム誕生 —ナノテクノロジーの世界—

備考

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

岡崎市教育委員会の要請により、岡崎市小中学校理科作品展に岡崎にある3研究所が輪番（原則として3年に1回）で体験型のブースを出展している。最近では分子科学研究所が2007年に担当し、パネル展示のほか、子どもたち自らが色素増感太陽電池の作製や酸化チタンカラフル塗装を体験できるブースを出展した。次回の出展は、2010年が予定される。

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ため、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 明治大学付属中野中学・高等学校理科教員 ほか
1997	9	436	(財)科学技術交流財団 慶応義塾大学理工学部化学科学生 ほか
1998	6	184	東京地方裁判所司法修習生 開成高等学校 ほか
1999	8	206	愛知県商工部 愛知県高等学校視聴覚教育研究協議会 ほか
2000	12	225	(財)衛星通信教育振興協会 東京農工大留学生 ほか
2001	8	196	中部経済産業局統計調査員協会 愛知県立豊田西高等学校 ほか
2002	5	118	関西工業教育協会 静岡県立浜松西高等学校 ほか
2003	8	146	中部経済連合会 一宮高等学校 ほか
2004	11	198	中部電力(株) 立命館高等学校 ほか
2005	10	317	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	9	349	(社)電気学会 安城南高等学校 ほか
2008	14	300	自動車技術会中部支部, 愛知教育大学, 私学協会三河支部, (株)高木化学研究所, 東海大学高輪台高等学校, 豊田西高 等学校, 理化研究会中濃地区部会, 岐阜大学大学院, 千葉 大学, 鹿児島工業高等専門学校, (財)計算科学振興財団, 海陽学園中学校, 大府市理科研究部, 岡崎北高等学校

(2003年度から2006年度までの見学者数には、職場体験の参加者数を含む。
'08年度の数値は、2008.12月末現在。)

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、昨年度より「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8月には、予約課金と設備管理を行うシステム的大幅な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設備管理者及びユーザーにフレンドリーなソフトウェアに進化した。このような大規模なネットワーク相互利用システムは初めてのものであり、大学内の相互利用にも取り入れられつつある。設備のネットワーク相互利用には61機関が設備を供出し、195台の装置が運用されている。平成20年9月の登録研究室数は1161研究室であり登録利用者数は5579名に上っている。現在は、このシステムを利用した大学内の学部を越えた設備の相互利用が加速されているが、大学間の相互利用は全利用数の1割弱である。これは、特殊な設備や、学内の装置にトラブルが発生した場合、或は、学内設備のマシンタイムが一杯である場合に他大学の装置が使われていると判断される。今後、より高機能の設備やより特徴のある設備を整え、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年度予算は1億円、21年度はその1%減に止まり、多くの研究者の望みを針金でつなぐ状況となっている。今後の一層の充実に向けての努力が必要であろう。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ニクス」(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・フォトニクス」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。20年度は、5月に理化学研究所にて「イメージング」をテーマに第7回シンポジウムを開催した。ここでは、超高速分子イメージング；生体分子イメージング；テラヘルツイメージングについて議論した。さらに、11月には「Ultrafast meets ultracold」を主題とした第8回シンポジウムを行い、超高速コヒーレント制御や極低温分子の生成、およびそれらの融合が生み

出す新しい科学に関する研究成果と将来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、昨年度の国際会議開催に続き、第4回シンポジウムを蒲郡のホテル竹島で開催した。実験（観測）と理論（シミュレーション）の双方から様々な発表がなされたが、統合的な課題として「ミクロとマクロを繋ぐ階層連結のシミュレーション科学」の重要性が認識され、今後これを中心とした活動の検討を進めることが合意された。

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、分子科学、核融合科学、生命科学、天文学の異なる自然科学階層に属する各分野の異なる方法論を共有・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し、それぞれの分野の方法論に新機軸をもたらす、学際的新分野を形成することも目指している。

2008年度、連携研究、ワークショップ、人材育成等について以下の活動を行っている。

(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（岡崎*、江原、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（15課題）

- ・分子の励起状態と化学反応に関する理論的研究（分子研・江原）
- ・分子動力学計算に基づく凝縮系ダイナミクス（分子研・斉藤）
- ・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）
- ・量子化学の先進的分子モデリング手法開発と多参照電子状態の解明（分子研・柳井）
- ・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）
- ・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）
- ・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）
- ・ミトコンドリアのenergetics simulation（生理研・永山）
- ・輻射輸送計算を用いた星間化学進化の研究（天文台・富阪）

- ・界面和周波発生分光の理論計算手法の開発（東北大・森田）
- ・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）
- ・両親媒性分子水溶液の大規模分子動力学計算（名大・岡崎）

(2) ワークショップ

- ・第5回連携シンポジウム 2月16日
- ・分子・物質シミュレーション中核拠点セミナー 第30回～第34回
- ・討論会，学会の共催
理論化学討論会，分子シミュレーション討論会，理論化学シンポジウム

(3) 人材育成

- ・第4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22日-25日

(4) 実施体制

- ・機構内11グループ 理論・計算分子科学研究領域，天文台，核融合研，生理研，基生研
- ・機構外4グループ 東北大，産総研，東大，名大

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。平成20年度には，岡崎統合バイオサイエンスセンター（生理研）の永山教授を中心に再編された小委員会が招集され，国立天文台に設置された一般市民向け立体視動画シアター「4D2U」（4-dimensional to you）を利用した，広報コンテンツ作成に関する検討が開始された。5研究機関がもつイメージングデータを元に，機構の研究成果を一般市民向けに解説する立体動画集の制作を目論んでいる。同時に，イメージングを中心とした機構内連携の新たな展開について議論を行っている。

(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年度にクパプロから出版された。

平成18年12月5日-8日には、第16回国際土岐コンファレンス（核融合科学を中心とする国際研究集会）が核融合研究所主催で土岐市において開催された。この会議ではサブテーマが“Advanced Imaging and Plasma Diagnostics”とされ、プラズマ科学に限らず、天文学、生物学、原子・分子科学を含む広い分野におけるイメージング一般に関するシンポジウムとポスターセッションが企画された。分子科学研究所からも、数名が参加し、講演及びポスター発表を行った。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。平成20年11月10日-13日には、第39回生理研国際シンポジウムとして、“Frontiers of Biological Imaging—Synergy of the Advanced Techniques”が開催され、機構内のイメージングに関わる研究者も数名（分子研1名）が講演を行った。

5-3-4 自然科学における階層と全体

自然科学における5分野を包括する自然科学研究機構として、その学際領域研究の可能性を探る「階層と全体」プロジェクトがスタートして4年目を迎えた。5研究所の研究内容の理解から始まり、それぞれの専門分野における最先端の研究を理解しようという過程を経て、徐々に「自然科学における階層と全体」を考え、新分野としての可能性を探るという段階に至った。本年度は、第4回目のシンポジウムを開催し、内外の研究者14名の講演があった。

生理学研究所の重本教授は、「分子動態とシナプス形態から行動変化まで——記憶の長期定着に関わる階層と全体」という講演の中で、小脳の運動学習のメカニズムと機能不全に対する脳の他部位による補償回路の存在を指摘され、機能発現においても階層を越えた相互連結機構が存在する事を示した。望月教授は、遺伝子発現の定常状態数の上限の決定問題において、ウニの初期発生に関わる遺伝子ネットワークの解析から、重要な少数の遺伝子が抽出されることを紹介し、遺伝子の相互作用において細胞毎に異なる遺伝子活性状態が形成されることを指摘した。慶応大学の中

迫雅由教授は、個体の中の細胞活動とその素過程を担う蛋白質などの集合体間の階層連携について述べ、現在は蛋白質分子の高解像度可視化が可能となり、ミクロレベルにおける環境媒体と分子との関わりとマクロレベルにおける分子集団の離合集散との階層関係が明らかになってきた状況を紹介した。分子研の平田教授は、RISM/3D-RISMによる蛋白質中の空孔に束縛された水分子の「検出」の例に見られる「分子認識」研究が、蛋白質による選択的イオン結合、酵素反応、アクアポリン水チャンネルなどへと展開するという構想を紹介し、「生命階層」と「物質階層」の境界で本質的な役割を担う「分子認識」研究の重要性を説いた。東工大の木賀教授は、天文学的な遺伝子情報の組み合わせから偶然と必然問題を議論し、人工遺伝子暗号の構築・設計を紹介し、「生命のサブシステムを組み合わせる階層を登る」というストーリーを述べた。北大低温化学研究所の山本教授は、自然の階層性問題研究の歴史を Glashow, Anderson, 坂田昌一, エンゲルスの議論を例に紹介し、現代の科学の多様化と専門(おたく)化を指摘、全体像把握の困難というジレンマに陥った現状打破の必要性を説いた。また、ダストから惑星形成への進化過程の総合的描像の確立へのアプローチを紹介した。三重大学の阿部教授は、地震活動に於ける aftershock 即ち余震の理解が、臨界現象における長距離相関との類似性を有することを指摘し、本震とそれに付随する余震の時間発展が地震複雑ネットワーク表現によって初めて理解可能な事、この複雑系の科学において階層構造と全体との関係を捉える重要性を強調した。

2日目は、シミュレーション科学を中心とした講演が主体であった。核融合科学研究所の宇佐見教授は、階層横断現象として理解される磁気リコネクション問題を、連結階層モデルを用いて領域分割法によるインターフェース領域挿入条件を議論し、この連結階層モデルによる磁気リコネクション理解の検証と今後の展開を紹介した。国立天文台の桜井教授は、太陽コロナの発生が表面のガスの対流運動に起因するという波動説に対し、微小フレア爆発の連結集合の結果がコロナであるとする self-organized critically モデルを対比させた。これは、コロナという大きなスケールの現象が微小フレアという小さなスケールの現象との連結の解析によって理解されることを紹介した。京都大学の松岡教授は、心臓の心筋細胞収縮は血液を全身に送る重要な現象であるが、これは、複雑な蛋白相互作用によって調節される。これを、システムとしての心筋細胞制御機能を理解する為、コンピューター上に心筋細胞の機能の包括的シミュレーションを行う「Kyoto Model」を構築し、これが細胞内イオン濃度変化収縮、細胞容積調節、ミトコンドリア ATP 産生と ATPase による消費、受容体シグナル伝達系、等々の各過程を包括的に再現するものであり、心臓という大きなシステムの主要活動を理論的に再現する先進的取り扱いであることを示した。海洋研究開発機構 地球シミュレータセンターの廣瀬グループリーダーは、「摩擦動力学の連結階層シミュレーション」について雲の発生、燃焼流体、プラズマ、あるいは摩擦破壊の取り扱いにおいて、ミクロとマクロを結合するインターフェース問題が重要であり、原子間相互作用をマクロな系の連続体力学シミュレーションに反映させる方法論について議論した。一方、核融合プラズマ現象は時間的空間的な多段階のスケールにおける非線形相互作用を含む極めて複雑なシステムであるが、核融合科学研究所の Šchorič 教授は、この multiscale plasma simulation への projective integration method の導入を紹介した。この後、昼食をとりながら、個別にこのプロジェクトの今後の展開等について議論し、最後の総括的議論に備えた。午後に入って、東京大学の増田教授は、「複雑なネットワークの構造・機能」という題名で、ネットワークのデータ構造が、スケールフリー性、階層性、隣接点間の相関といった特性を有し、データが属する分野に依存しないことを指摘した後、複雑ネットワークの医学、脳科学、生物学への応用についての研究事例を紹介した。最後の講演は中央大学の松下教授による「複雑系の構造、統計、ダイナミクス」についてであった。地球環境を例とした、要素間の複雑な相互作用のみの理解からは予測出来ない多様な特性の自己組織的発現について紹介した。

最後に、本プロジェクトの今後の展開についての総括的議論が行われ、今回のシンポジウムの中で、新分野創成に繋がるテーマとして自然科学の階層を繋ぐ理論的理解の必要性とこれを前進させるための「階層連結のシミュレーション科学」が浮上して来た事が認識され、最終年度にはこの問題に絞ったシンポジウムの開催が提案された。

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20年度までの3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、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、ナノ構造体における光学応答理論（以上、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）、「第2回物質・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。

20年度は、「韓日生体分子科学セミナー—実験とシミュレーション」（韓国・ソウル）、「中日機能性超分子構築シンポジウム」（中国・北京）、「ナノケミカルバイオロジーアジアコアシンポジウム」（日本・岡崎）、「次世代触媒創製

を目指した機能物質シンポジウム(韓国・デジョン)、「元素の特性に基づいた分子機能に関する日中シンポジウム(中国・北京)」、「第3回物質・光・理論分子科学のフロンティア」冬の学校(台湾・台北)、「第3回全体会議」(中国・北京)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。今年度は協力研究 48 件、施設利用 29 件（1月26日現在）を採択し、うち協力研究 28 件、施設利用 18 件は実施した（来所予定確定分を含む）。所内利用も 40 件に上っている（1月16日現在）。

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 20 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 μm 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
有機半導体デバイス・評価支援	有機半導体を用いたデバイスや有機太陽電池の作製・評価を支援。結晶析出昇華精製装置, 真空蒸着装置によるデバイス作製, 擬似太陽光源を用いた太陽電池特性評価, SPM, XPS/UPS, SEM, ミクロトーム等による有機半導体薄膜のナノ空間・電子構造の評価が可能。	平本昌宏教授	分子スケールナノサイエンスセンター
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, 極低温真空ブローパー, 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。横山教授, 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 2008 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
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
ポルフィリンオリゴマーの立体構造と電子状態の解明	有機材料	愛媛大学総合科学研究支援センター 宇野 英満
静電的相互作用を用いた異種金属ナノワイヤーの電気特性	分子素子	北里大学理学部 堀 顕子
SiC(000-1) 表面分解カーボンナノチューブ生成における雰囲気ガス効果の研究	ESCA	名城大学理工学部 丸山 隆浩
ガスソース法によるカーボンナノチューブ成長と触媒粒子状態との関係	TEM	名城大学理工学部 丸山 隆浩
刺激応答性星型ポリマーを用いた金属ナノ粒子の創製	有機材料	大阪大学大学院理学研究科 青島 貞人
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
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 藤原 尚
920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いたタンパク質複合体の構造解析	NMR	名古屋市立大学大学院薬学研究科 栗本 英治
高周期 14 続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 雅一
単層カーボンナノチューブの選択的化学反应系の構築	量子計算	東京学芸大学教育学部 前田 優
カルベン付加反応を用いた金属内包フラレンの化学修飾	量子計算	筑波大学先端学際領域研究センター 赤阪 健
金属内包フラレンと有機ドナー分子に基づく可逆電子移動系の構築	量子計算	筑波大学先端学際領域研究センター 土屋 敬広
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科 小林 淳一
金属ナノ微粒子配列における局在光物性とラマン散乱	SNOM	防衛大学校応用物理学科 北島 正弘
複合糖質の超高磁場 NMR 装置による構造解析	NMR	独立行政法人理化学研究所 山口 芳樹
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	名古屋工業大学大学院工学研究科 南後 守
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
超高磁場 NMR を用いたラセン高分子の動的構造解析	NMR	北海道大学大学院工学研究科 平沖 敏文
空気酸化金属ナノクラスター触媒の創製と構造解析	TEM	北海道大学触媒化学研究センター 佃 達哉
半導体微粒子の合成と評価	分子素子	名古屋大学大学院工学研究科 小澤 寛晃
高密度金属ナノ粒子内包ナノ材料を利用する新規高効率触媒の開発	有機材料	大阪大学大学院工学研究科 関 修平
有機薄膜太陽電池の研究	有機半導体	立命館大学理工学部 服藤 憲司
超分子集合体の透過電子顕微鏡観察	TEM	名古屋大学大学院工学研究科 小澤 寛晃
920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いた自己集合体錯体の構造解析	NMR	東京大学大学院工学系研究科 佐藤 宗太
超高磁場 NMR を利用した多糖 / 高分子複合体の構造解析	NMR	京都府立大学大学院生命環境科学研究科 沼田 宗典
課 題 名（後期）	支援装置	代 表 者
高密度金属ナノ粒子内包ナノ材料を利用する新規高効率触媒の開発	有機材料	大阪大学大学院工学研究科 関 修平
ポルフィリンオリゴマーの立体構造と電子状態の解明	有機材料	愛媛大学総合科学研究支援センター 宇野 英満
高周期典型元素を骨格に有する特異な電子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 雅一
近接場分光イメージング装置による立体規則性ポリ(3_アルキルチオフェン)ナノファイバーの顕微分光学的研究	SNOM	埼玉大学大学院理工学研究科 坂本 章
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
SiC 表面の水素処理効果と表面分解カーボンナノチューブ生成への影響に関する研究	ESCA	名城大学理工学部 丸山 隆浩
カーボンナノチューブ低温成長および窒素ドーピングに関する研究	TEM	名城大学理工学部 丸山 隆浩
金属ナノ微粒子低次元配列における局在光物性と局所配列構造の相関解明	SNOM	立教大学理学部 島田 透
920MHz 超高磁場 NMR によるアミロイド ペプチドの重合開始機構の構造生物学的基盤の解明	NMR	国立長寿医療センター研究所 柳澤 勝彦
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
920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いたタンパク質複合体の構造解析	NMR	名古屋市立大学大学院薬学研究科 栗本 英治
超高磁場 NMR を利用した多糖 / 高分子複合体の構造解析	NMR	京都府立大学大学院生命環境科学研究科 沼田 宗典
複合糖質の超高磁場 NMR 装置による構造解析	NMR	(独)理化学研究所 山口 芳樹
有機薄膜太陽電池の研究	有機半導体	立命館大学理工学部 服藤 憲司
Si(111) 上の MnSi ナノ薄膜の磁性評価	磁気光学	九州大学総合理工学研究院 栃原 浩
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	SNOM	京都大学化学研究所 時任 宣博
半導体微粒子の合成と評価	分子素子	名古屋大学大学院工学研究科 小澤 寛晃

半導体微粒子の合成と評価	有機材料	名古屋大学大学院工学研究科	小澤 寛晃
Missing metallofullerene の抽出と構造	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と有機ドナー分子に基づく可逆電子移動の機構解明	量子計算	筑波大学先端学際領域研究センター	土屋 敬広
ナノサイズ分子キャピ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
単層カーボンナノチューブの有機溶媒への分散と電気特性の評価	量子計算	東京学芸大学教育学部	前田 優

(2) 施設利用

課 題 名 (前期)	支援装置	代 表 者
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	住友ゴム工業(株)研究開発本部 小林 将俊
フッ化物を用いた光学素子開発に関する研究	SEM/FIB	名古屋工業大学大学院工学研究科 小野 晋吾
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 幸田テック
様々な金属のナノ構造制御	SEM/FIB	大阪大学大学院理学研究科 小川 琢治
電気化学的プロセスにおけるフタロシアニン類縁体薄膜の表面分析	ESCA	名古屋大学大学院理学研究科 吉川 浩史
Pt 細線加工と観察	SEM/FIB	テラベース(株) 伊藤 俊幸
金属多点ラベル化オリゴヌクレオチドおよび一本鎖修飾 DNA-カーボンナノチューブの構造解析	TEM	岡崎統合バイオサイエンスセンター 永山 國昭
非環状型 共役系素子を基盤とした超分子集合体の形成	SEM/FIB	立命館大学総合理工学院 前田 大光
金属多点ラベル化オリゴヌクレオチドおよび一本鎖修飾 DNA-カーボンナノチューブの構造解析	TEM	テラベース(株) 新田 浩二
ゼオライト触媒の 1 次元 ²⁷ Al NMR, および ²⁷ Al MQMAS 測定	NMR	旭化成(株)基盤技術研究所 橋本 康博
光電子分光法による有機半導体デバイス表面および界面の評価	有機半導体	名古屋工業大学工学研究科 林 靖彦
有機太陽電池の作製と評価技術の習得と新有機薄膜太陽電池への展開	有機半導体	(株)クラレ新事業開発本部くらしき研究所 藤田 明士
課 題 名 (後期)	支援装置	代 表 者
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	住友ゴム工業(株)研究開発本部 小林 将俊
非環状型 共役系素子を基盤とした超分子集合体の形成	SEM/FIB	立命館大学総合理工学院 前田 大光
超高磁場固体 NMR によるラセン高分子の動的構造解析	NMR	北海道大学大学院工学研究科 平沖 敏文
有機太陽電池の作製と評価技術の習得と新有機薄膜太陽電池への展開	有機半導体	(株)クラレ新事業開発本部くらしき研究所 藤田 明士
金属多点ラベル化オリゴヌクレオチドおよび一本鎖修飾 DNA-カーボンナノチューブの構造解析	TEM	岡崎統合バイオサイエンスセンター 永山 國昭
Pt 細線加工と観察	SEM/FIB	テラベース(株) 伊藤 俊幸
ナノ分子機械を用いた物質変換反応の制御	NMR	東北大学多元物質科学研究所 金原 数
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 幸田テック
様々な金属のナノ構造制御	SEM/FIB	大阪大学大学院理学研究科 小川 琢治
コアシェル型金属クラスターの高分解能電子顕微鏡観測	TEM	東京理科大学理学部 根岸 雄一
ゼオライト触媒の 1 次元 ²⁷ Al NMR, および ²⁷ Al MQMAS 測定	NMR	旭化成(株)基盤技術研究所 橋本 康博
固体電気化学プロセスにおける有機半導体薄膜の表面分析	ESCA	名古屋大学大学院理学研究科 吉川 浩史
磁気記録用パターン媒体の研究	SEM/FIB	名古屋大学工学研究科 加藤 剛志
超高磁場 NMR によるポリ(オリゴメチレンシクロペンタン)の立体構造解析	NMR	東京工業大学資源化学研究所 竹内 大介
酸化物材料のナノ構造化によるセンシング機能・創成に関する研究	SEM/FIB	名古屋工業大学大学院工学研究科 市川 洋
金属含有シリコンナノワイヤーの構造解析	TEM	大阪大学基礎工学研究科 畠田 博一

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

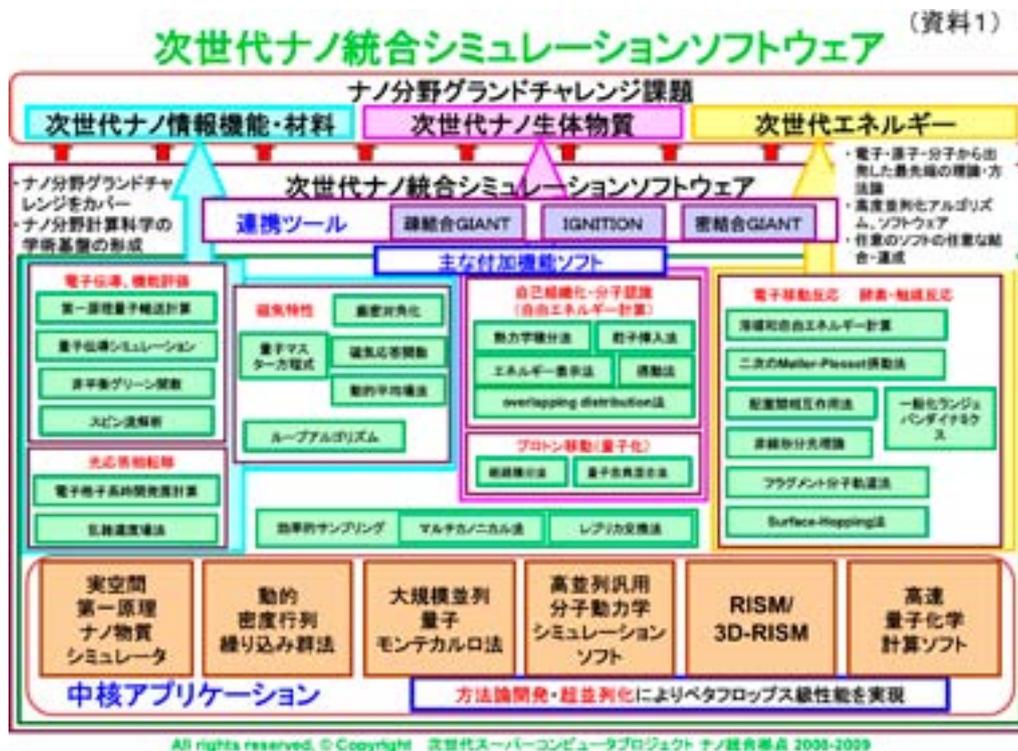
(文部科学省)

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。我々は「次世代スパコン」プロジェクトの一環として、わが国の近未来の学術、産業、医療の発展に決定的なブレークスルーをもたらす可能性をもつ三つのグランドチャレンジ課題を設定し、その解決を目指して、理論・方法論およびプログラムの開発を進めてきた。

- (1) 次世代ナノ情報機能・材料
- (2) 次世代ナノ生体物質
- (3) 次世代エネルギー

これらのグランドチャレンジ課題はいずれも従来の物理・化学の理論・方法論の「枠組み」あるいは「守備範囲」をはるかに超えた問題を含んでおり、ただ、単に計算機の性能が飛躍的に向上すれば解決するという種類の問題ではなく、物理・化学における新しい理論・方法論の創出を要求している。さらに、構築が予定されている「次世代マシン」は従来の常識をはるかに超えるノード数からなる超パラレルプロセッサであり、プログラムの高並列化を始めとする「計算機科学」上のイノベーションをも要求している。

上記の三つのグランドチャレンジ課題を解決するために「ナノ統合拠点」は必要な理論・方法論およびプログラムの開発を進めてきた。(資料1)



その中で、「ハードナノ」および「ソフトナノ」分野における基本的な理論・方法論に関わる6本のアプリケーションを「中核アプリ」として設定し、その「高度化」を行うとともに、それらを統合して実行するためのツール群を含

む「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア」の開発を進めてきた。

2008年度はプロジェクトの中間年度にあたり、文部科学省に設置された「外部評価委員会(委員長:魚崎浩平先生)」による中間評価を受けるとともに、評価委員会で指摘されたいくつかの課題を解決する取り組みを行ってきた。

中間評価の結果とその後の取り組み

外部評価委員会によるヒアリングは2008年2月と5月の2回に渡って行なわれ、グランドチャレンジ課題の設定と、中核アプリの高度化に関する取り組みなどプロジェクトの骨格部分に関しては、下記のような高い評価をいただいた。

「本プロジェクトにおいては、次世代スパコンにおける計算機能力の飛躍的向上を最大限活用し、計算科学を質的に発展させ、ナノサイエンスのルネッサンスを先導する意義深いプロジェクトである。ナノサイエンスのブレークスルーを通して我が国の国際競争力を強化する正しく時代に適切なものであり、オールジャパン体制で取り組むべき重要な課題である。このプロジェクトを契機として、実験と理論に次ぐ第三の研究の方法論としてのシミュレーションをはじめとする計算科学をしっかりと確立して行くことが強く期待される。研究開発計画は概ね適切なものであり、また順調に進捗している。今後とも、分子科学研究所を拠点とした推進体制の下、実験研究者や産業との連携を強化するという観点から委員会体制等の一部改善を図りつつ、また若手育成に注力しながらより一層強力に推進していくことが妥当である。」

一方、プロジェクトの広報活動(「シンボリック」な課題設定など)、全日本的(All Japan)な取組みの強化について課題を指摘された。

「外部評価」報告およびその後の「ナノ統合拠点」運営委員会での議論を踏まえて、これまでの研究開発を実際の成果に結実させるために拠点に課せられた要請は次の3点にまとめられる。ひとつは「中核アプリ」を中心に主要な「付加機能ソフト」およびそれらの「連携技術」を含めて我々がこれまで開発してきたプログラムを実際に「次世代スパコン」で性能を引き出すところまで「高度化」を進めること。第二の要請はこれまで開発してきた方法論およびプログラムが実験研究や企業研究の現場で有効であることを実証すること。また、この取り組みを通じて、実験家、企業研究者を含むさらに全日本的な開発体制を構築する。第三の要請はこれまで開発したプログラムを「ナノ統合シミュレーションソフトウェア」に結実させ、できるだけ広汎に利用していただくための「枠組み」を整備していくことである。

まず、プログラムの超高並列化については、現在、「中核アプリ高度化ワーキンググループ(主査:岡崎教授)」を中心に作業を進めており、いくつかの中核アプリに関して、「ペタフロップス」級の性能が、実際に、期待できる状況になっている。この作業過程で重要な教訓が生まれている。(資料2)それはこのような可能性が物理・化学分野における計算科学者と情報科学分野の研究者(計算機科学者)との共同研究によって作り出されたことである。その具体例のひとつは、実空間密度汎関数(HP-RSDFT)であり、他のひとつは3D-RISMのプログラムである。いずれも筑波大学の計算センター(センター長:佐藤教授)との共同で進めているが、特に、3D-RISMについてはこのプログラムで多用する3D-FFTの並列化が難しいことから、プロジェクト当初、理研開発チームから「高並列化は不可能」とレッテルを貼られたプログラムであり、このプログラムの高並列化の目処が出たことは「計算科学者」と「計算機科学者」との連携が極めて有効であることを示している。この教訓を活かして、並列化が困難といわれてきたもうひとつの中核アプリである「分子軌道法」関連プログラムの高並列化(巨大行列の対角化を含む)が期待されている。

中核アプリ高度化

(資料2)

中核アプリ名	責任者	開発内容
真空間第一原理ナノ物質シミュレータ	押山	(1) MPIによる、実空間セル並列とノード並列の多層並列の有効性の検討と、対応プログラム開発。 (2) Open MPによるノード内スレッド間並列の有効性検討。
動的密度緩和込み群法	遠山	(1)線形応答感受率プログラムチューニング (2)その他・最適化
大規模並列量子モンテカルロ法	藤堂	アプリケーションの逐次処理部、ループ認識処理部の並列化効率の改善
高並列汎用分子動力学シミュレーションソフトmodylas	岡崎	(1)単体性演算部のチューニング ・条件分岐の除去、・配列データの並び替え、・演算量の削減 (2)高並列化のチューニング ・通信量の削減、・3次元隣接通信の採用
RISM/3D-RISM	平田	(1)3次元FFTの2次元分割対応3D-RISMコード開発 (実装位置グループとの共同開発) (2)細部のチューニング(メモリ分散、IOの見直しなど) (3)IT2Kによる大規模スパコンでの運用テスト
高速量子化学計算ソフト	永瀬 北清	(1)データ転送量の削減 ・電子密度行列の転送量を削減するための改良 ・T2Kによる性能測定 (2)細部のチューニング
中核アプリの大規模並列化支援	佐藤	中核アプリ6本に対し、並列性および性能の詳細な解析を行い、必要に応じてモデルや数値計算アルゴリズムの改善などの支援。具体的には既存の大規模システムでプログラムを実行し、定量的な評価とアルゴリズムの検討・改善の支援を進める。なお、具体的なプログラムへの変更については担当のメーカと打ち合わせをしつつ進める。また、同時にマルチコアプロセッサの利用等の次世代スパコン利用に必要な並列化の方法についても検討する。

All rights reserved. © Copyright 次世代開発環境(ET2)コーポレーション ナノ統合拠点 2008-2009

上に述べた第二の要請は、「ナノサイエンス」分野の実験研究者および企業研究者との共同研究の推進であるが、これは本プロジェクトで開発したプログラムの有効性を実証する「実証研究」として位置づけられる。我々のプロジェクトの第一義的なミッションはナノ分野のグランドチャレンジ課題の解決に向けて理論・方法論を開発し、「次世代スパコン」上で最大限の性能を発揮するようなプログラムを開発することにあるが、それは現在「ナノ分野」の実験研究者や生産の現場にいる企業研究者が抱えている課題と無関係ではない。むしろそれらの問題を解決する努力の過程で方法論が鍛えられ、新しい「計算科学」が生み出されてくる可能性が高まると考えられる。この面でもすでにいくつかの先駆的な取り組みが行われているが、「ナノ統合拠点」では文部科学省「ナノテクノロジー・材料開発推進室」との連携の下に、より系統的な取り組みを進めつつある。すなわち、文科省「ナノテクノロジー・材料委員会」を中心として実験研究者、企業研究者、およびナノ統合拠点で活動している計算科学者が研究テーマ毎に小規模の「連続研究会」を開催し、計算科学者と実験研究者の共同研究を育てていくという取り組みである。これは「ナノ統合拠点」で開発された計算科学の方法論が実際の実験研究や企業で有効であることを示すだけでなく、「次世代スパコン」に対する必要性和モチベーションを社会に喚起する上でも極めて重要な取り組みであると考えている。(資料3)

本プロジェクトの目的を成功裏に達成するための三つ目の要請は「ナノ統合拠点」で開発したソフトウェアを社会に還元し、アカデミズムの研究はもとより、「もの造り」や医療の現場に如何に有効に活用していくかという問題である。自明のことであるが本プロジェクトは「科研費」とは異なり、国家から委託を受けたプロジェクトである。「科研費」の場合、助成を受けた研究者は自らが提案した研究を遂行し、その成果を論文として公表することにより、その責任を果すことになる。一方、我々のプロジェクトはナノ分野の「アプリケーション」を開発することが重要なミッションのひとつであり、それを「公開」して初めてプロジェクトの目的を達成したことになる。もちろん、「プログラムの公開」といっても、それは必ずしも不特定多数のユーザーを対象にしたもの(例えば、GAUSSIANのような商業ソフト)であることを意味しない。化学や物理のバックグラウンドをもつ実験研究者や企業内の計算科学者などが

一定のトレーニングを受けて使えるレベルのプログラム「公開」を意味している。しかしながら、公開のレベルをこのように限定しても、非常に困難な問題が残されている。それは「知的財産権」や「著作権」が関わる問題である。「ナノ統合拠点」で開発しているプログラムは本プロジェクト内で開発されたものだけではなく、その多くは過去に多数の研究者（学生を含む）や大学・機関が関与したものであり、その「著作権」や「知財権」が極めて複雑な状況にある。「ナノ統合拠点」では、現在、この分野を専門に活躍されている辻巻弁護士の指導の下に、合理的な「公開」の方策を検討しているところである。

連続研究会(1/2)

(資料3-1)

No.	日程	場所	テーマ	担当教
1	2008年11月 21日(金) 13:30~	東京・秋葉原コンベンションセンター	薄電子を用いた 半導体材料の評価	石橋 幸司教授(グループ長(産総研)) 上殿 朝良准教授(筑波大)
2	2008年12月 10日(水) 9:00~	岡崎・分子科学研究所	光電結合・ナノクラスター (合同開催)	柳 茂樹教授(京大) 永瀬 茂教授(分子研) 飯定 高幸准教授(分子研) 中嶋 清人准教授(東大)
3	2008年12月 12日(金) 10:30~	仙台・東北大学金属材料研究所	新しい概念に基づく(新)電材料とその物性	小椋八重 純氏(理研CNRG) 遠山 貴也教授(京大基礎) 野川 誠通教授(東北大学研)
4	2008年12月 27日(土)~28日(日) 16:00~	熊本・グリーンピア南阿蘇	抗がん剤を使わない癌治療法:ハイブリッドリポソーム	平田 文男教授(分子研) 岡崎 道教授(名大) 上野 隆一教授(筑波大)
5	2008年1月 8日(火) 13:00~	東京・東京大学本郷キャンパス	ウイルスの分子科学	岡崎 道教授(名大) 北尾 彰郎准教授(東大) 野本 明秀教授(東大) 青坂 文雄准教授(京工大)
6	2008年1月 29日(木) 9:00~	岡崎・分子科学研究所	超分子、分子素子、分子発光・バイオマス (合同開催)	柳 茂樹教授(京大) 中野 謙教授(京大) 永瀬 茂教授(分子研) 江原 正博教授(分子研)
7	2008年1月 29日(木) 9:00~	東京・東京女子医科大学阿田町キャンパス	DOXナノキャリアー (脂質体、タンパク質複合体、高分子ミセルを中心として)	岡崎 道教授(名大) 松林 伸幸准教授(京大)
8	2008年1月 30日(金) 9:00~	岡崎・分子科学研究所	分子エレクトロニクス、光エネルギー変換の化学	山下 晃一教授(東大) 中井 浩巳教授(早大) 中野 豊由教授(京大)

All rights reserved. © Copyright 次世代スーパーコンピュータプロジェクト ナノ統合拠点 2008-2009

連続研究会(2/2)

(資料3-2)

No.	日程	場所	テーマ	担当教
9	2008年2月 10日(火) 13:30~	京都・ホテル法華クラブ京都	膜、ミセル (ソフト凝縮系の分子科学)	松林 伸幸准教授(京大) 岡崎 道教授(名大)
10	2008年2月 16日(月) 13:00~ 17日(火)	岡崎・自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター	タンパク質機能(イオンチャネル)	平田 文男教授(分子研) 老本 成昭教授(福井大)
11	2008年3月 9日(月) 13:30~	北海道大学・理学部6号館低層棟1階 6-103室	燃料電池 -物性科学WGとの合同開催	高橋 志明氏(豊田中研) 平田 文男教授(分子研) 岡崎 道教授(名大) 山下 晃一教授(東大)
12	2008年3月 13日(金) 13:20~ 14日(土)	三重・湯の山「希望荘」2F会議室・稲 倉車	エタノール製造、 バイオマス(酵素反応)	平田 文男教授(分子研) 高田 修一准教授(京工大)
13	2008年3月 18日(水) 10:30~	東京・キャンパスイノベーションセン ター東京 3F 309教室	TDOFT: 光応答計算の基礎、応用と展開	矢野 一浩教授(筑波大) 青森 康成氏(住友化学)
14	2008年3月 30日(月)	東京・東京医科歯科大学 共同研究 棟2階セミナー室	タンパク質機能(フォールディング)	岡本 祐幸教授(名大) 平田 文男教授(分子研)
	(調整中)		表面ナノ構造の自己形成	実行 真司教授(東大) 小森 文夫教授(物性研)
	(調整中)		ナノ構造体の電気伝導	小林 伸幸准教授(筑波大) 広瀬 賢二氏(MEC)

問合せ先 米沢東夫 0564-55-7464

<http://nanogc.ims.ac.jp/nanogc/>

All rights reserved. © Copyright 次世代スーパーコンピュータプロジェクト ナノ統合拠点 2008-2009

5-7 最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム (文部科学省)

文部科学省は、平成 20 年度より新たな拠点形成事業として、「最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム」(以下、光拠点事業)を開始した。本事業は「ナノテクノロジー・材料、ライフサイエンス等の重点科学技術分野を先導し、イノベーション創出に不可欠なキーテクノロジーである光科学技術の中で、特に、今後求められる新たな発想による最先端の光源や計測手法等の研究開発を進めると同時に、このような最先端の研究開発の実施やその利用を行い得る若手人材等の育成を図ることを目的として(文科省ホームページより抜粋：http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/20/07/08072808.htm)」実施される。具体的には、光科学や光技術開発を推進する複数の研究機関が相補的に連結されたネットワーク研究拠点を構築し、この拠点を中心にして(1)光源・計測法の開発;(2)若手人材育成;(3)ユーザー研究者の開拓・養成を3本柱とする事業を展開する。

この光拠点事業の公募に対して、分子科学研究所は、大阪大学、京都大学、独立行政法人日本原子力研究開発機構とともに、「融合光新創生ネットワーク」と題したネットワーク拠点を申請し、採択された(http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/20/07/08072808/003.htm)。今後、この拠点を舞台に、世界の光科学を牽引する多くの素晴らしい研究成果や人材が生み出されるものと期待される。なお、この他にもう1件、東京大学、理化学研究所、電気通信大学、慶応義塾大学、東京工業大学によって構成される「先端光量子アライアンス」と題されたネットワーク拠点が採択されており、これら二つの異なる拠点間の交流による新たな展開も楽しみである。

今年度の分子科学研究所における活動内容を以下にまとめる。

(1) 光源要素技術の開発

マイクロドメイン制御に基づく超小型高輝度高品位レーザーの開発、およびこれを励起源とする極短パルス光源の要素技術開発に着手した。サブ mJ 級の数サイクル 2.1 ミクロン光の発生を目指し、これに必要な大口径・高アスペクト比を備えた非線形光学デバイス、特に PPMgLN の基礎検討を行った。

(2) 供用技術の開発

超高精度量子制御技術では、分子内の振動波束干渉の時空間模様をピコメートル精度で多彩にデザインする技術を確立した。また、分子の回転運動を実験室系で右回りあるいは左回りに選択制御することに成功した。さらに、サブ 10 フェムト秒幅の極短高強度レーザーパルスによる芳香族分子の段階的なクーロン爆発の様子を明らかにした。時空間分解顕微分光では、20 フェムト秒の時間分解能を実現する為の基礎技術を開発した。また、本ネットワークにおける供用研究の推進に寄与する各種研究会の開催については、「擬似位相整合非線形光学波長変換の現状と展望」をテーマにした研究会を、平成 20 年 11 月 20 日に分子科学研究所にて開催した。

(3) 人材育成体制の強化

他の参加機関との議論を通じて、次年度以降の教員や学生の具体的な交流方法を検討した。

5-8 光・量子科学研究拠点形成に向けた基盤技術開発

「量子ビーム基盤技術開発プログラム」(文部科学省)

量子ビーム技術は、ビーム発生・制御技術の高度化に伴って近年大きく発展してきており、基礎から応用に至るまでの幅広い分野で活用されてきている。量子ビームの研究開発を戦略的・積極的に推進するとともに、次世代の量子ビーム技術を担う若手研究者の育成を図ることを目的として、今年度より「量子ビーム基盤技術開発プログラム」が開始された。本事業では、基盤技術としての量子ビーム技術の発展と普及に資するべく、汎用性・革新性と応用性が広い研究テーマについて、ネットワーク研究体制を構築しながら研究開発を行うことを目的としている。

本研究所からは、極端紫外光研究施設を利用した「リング型光源とレーザーを用いた光発生とその応用」という課題名で提案を行い、採択された。本研究所を中核とし、名古屋大学、京都大学の参画を得て、5年計画で実施する。UVSOR-II 電子蓄積リングの改造、ビームラインの建設などを含む計画であり、レーザーを用いることで特色あるシンクロトロン光を作り出し、その利用法の開拓を行おうとしている。

5-9 若手研究者交流支援事業～東アジア首脳会議参加国からの招へい～ (日本学術振興会)

5-9-1 全体趣旨

本事業は、安倍晋三内閣が第2回東アジア首脳会議(2007)の時に提唱した、EAS参加国から今後5年間、毎年6,000人程度の青少年を日本に招へいする交流計画(JENESYSプログラム)に基づいたJSPSの事業である。次世代を担う若手研究者の計画的な交流により、アジアを中心とした国々との研究者間のネットワークの形成・強化、当該地域における高度人材育成及び科学技術コミュニティの形成等が期待される。対象国はASEAN加盟国(インドネシア、カンボジア、シンガポール、タイ、フィリピン、ブルネイ、ベトナム、マレーシア、ミャンマー、ラオス)であるが、全体の30%以内であれば、オーストラリア、ニュージーランド、インドを含めることが可能である。今年度は8件が採択され、そのうち化学分野は、分子研の主催する下記プロジェクト1件であった。

5-9-2 分子研主催プロジェクト課題について

プロジェクト課題名は「『環境・エネルギー』基礎研究基盤の確立」である。

現代自然科学が解決すべき問題のひとつである環境・エネルギー問題において、東アジア諸国における自国での研究開発を可能にするための基礎研究基盤の確立は極めて重要である。本交流事業においては、環境・エネルギー問題に関わる基礎科学に関して、主として学位取得前後の若手研究者を広く招へいし、また本交流事業後のフォローアップとしての共同研究体制を確立し、自国における基礎研究の継続を力強くサポートすることで、基礎科学の定着を推進することを目的とする。

分子科学研究所は、国際交流の重要性に鑑み、かねてより様々なチャネルを通じて国際共同研究、研究支援、教育事業を推進してきた。本交流事業は、教育事業に特化した「アジア冬の学校」を研究者養成事業へと発展し、最終的には、既に基盤研究機関が充実している極東アジア諸国間で形成している研究教育拠点ネットワークを東アジア諸国へ伸展させる、橋渡しの事業となることが期待される。

5-9-3 実施状況

13研究室(うち分子研10, 所外3)を受入研究室として指定し、公募を原則とした募集を行った。各候補者に対し、research proposal および帰国後のfuture planの提出を求め、その妥当性や将来性等に関して審査することにより決定した。

実際の募集は、

- (1) 受入教員の直接推薦
- (2) 指定交流相手機関からの推薦(学内公募を原則)
- (3) ホームページを利用した公募

の順で行った。指定交流相手機関は以下の通りである：チュラロンコーン大学(タイ)、マラヤ大学(マレーシア)南洋工科大学、シンガポール国立大学(シンガポール)ベトナム科学技術アカデミー(ベトナム)、インド国立化学技術大学(インド)。

その結果、直接推薦より3名、指定交流機関からの推薦5名、公募3名、計11名と、比較的バランスのとれた採択となった。実際の志望者は指定交流期間内公募を含めて、把握しているだけで数十名にも及んでおり、本プロジェクトに対する大きな関心が伺いしれる。国別ではインドネシア1名、シンガポール1名、タイ5名、ベトナム2名、

インド2名と、若干今回はタイに偏った結果となった。その理由は、タイ国内において積極的に本事業に対して周知がされたのも一因であるが、本事業の原則として研究者の国籍で採否が決まるため、シンガポール国内の大学で学ぶ多くの中国国籍などの対象外地域の研究者が採択できなかった影響も大きい。またキャリアの内訳は、博士研究員7名、博士課程学生4名となった。

実際の招へいは2009年1月末より順次行われており、各研究者に応じて、30～60日の期間での研究プログラムが組まれた。本執筆段階ではまだその成果については明らかではないものの、帰国後の研究計画についても最終報告において提出を求めており、将来の広くアジア圏全体への分子科学ネットワーク形成へ向けてのひとつのチャンネルとして機能していくことが期待される。

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
2007.9. ~ 2008.8.	2008	214	30

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：

- 分子のサイズと形状を利用した分子設計と反応
- 元素の特性を利用した分子設計と反応
- 量子化学計算の高速化と高精度化

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- 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化学修飾による内包金属の位置と運動の制御と機能化、常磁性金属内包フラーレンのラジカルカップリング反応、フラーレン化学で確立された孤立5員環則を満足しない金属内包フラーレンの電子特性と特異な反応、化学修飾による金属性カーボンナノチューブの選択的分離、カーボンナノチューブへのカチオンやドナー分子の選択的吸着とサイズ効果、ナノグラフェンの端構造に由来する電子特性とバンドギャップ制御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ナノグラフェンのバンドギャップ制御は *Chem. Commun.* (2008年2月号) と *J. Phys. Chem. C* (2008年8月号) の表紙としてもそれぞれ紹介された。
- 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、極めてかさ高い二つの置換基で立体保護されたケイ素-ケイ素三重結合化合物の構造、ベンゼンの骨格炭素をケイ素で置換したシラベンゼンの電子特性と反応性、スズとリチウム間に新規な結合をもつトリリチオスタナンンの構造、 $(\text{ZnO})_n$ クラスターのかご構造とチューブ構造、BN ナノグラフェンの電子特性、金属内包フラーレンのシリル化、NADH チトクロム B5 還元酵素の安定性と反応性等を理論と計算あるいは実験と共同して明らかにした。
- 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、タンパク質の立体構造などでは非共有結合相互作用が本質的な役割をする。この非共有結合相互作用を上手く取り扱って大きな分子にも適用できる MP2 (second-order Møller Plesset perturbation) 法の並列高速化を昨年に引き続いて行って最高速のプログラムを作成した。分子のサイズが大きくなると、計算に必要となるメモリ量とディスク量が急激に増大する。このために、RI (resolution-of-identity)-MP2 法の高速化と超並列化を行い、基底関数の数が4千からなる分子の計算を汎用的な PC クラスターでも可能にした。次世代の計算化学では、高速化ばかりでなく高精度化が求められる。すなわち、Schrödinger 方程式の近似的な解ではなく正確な解が望まれる。量子拡散モンテカルロ法は、精度の高い計算法として知られているばかりでなく、その高い並列化効率から注目されている。しかし、この方法では電子を古典的な粒子として扱うために、計算の精度は試行関数のノードが如何に正確かに大きく依存する。また、試行関数の精度を上げて、計算結果が必ずしも改善されない。このために、電子配置をウォーカーとするとするプロジェクトモンテカルロ (PMC-CSF) 法を考案して、full CI 解 (与えられた基底関数に関する正確な解) を得るための高速並

列アルゴリズムの開発と汎用的プログラムの作成に着手している。PMC-CSF 法では、伝統的な CI 法とは異なり、行列の対角化が不必要なばかりでなく重要な電子配置も自動的に選択できるので大きな分子でも高精度な計算が実行できる。

B-1) 学術論文

T. TSUCHIYA, R. KUMASHIRO, K. TANIGAKI, Y. MATSUNAGA, M. O. ISHITUKA, T. WAKAHARA, Y. MAEDA, Y. TAKANO, M. AOYAGI, T. AKASAKA, M. T. H. LIU, T. KATO, K. SUENAGA, J. S. JEONG, S. IIJIMA, F. KIMURA, T. KIMURA and S. NAGASE, “Nanorods of Endohedral Metallofullerene Derivative,” *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 450–451 (2008).

B. GAO, H. NIKAWA, T. NAKAHODO, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, T. AKASAKA, H. SAWA, Z. SLANINA, N. MIZOROGI and S. NAGASE, “Addition of Adamantylidene to $\text{La}_2@C_{78}$: Isolation and Single-Crystal X-Ray Structural Determination of the Monoadducts,” *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 983–989 (2008).

M. YAMADA, C. SOMEYA, T. WAKAHARA, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, T. AKASAKA, K. YOZA, E. HORN, M. T. H. LIU, N. MIZOROGI and S. NAGASE, “Metal Atoms Collinear with the Spiro Carbon of 6,6-Open Adducts, $\text{M}_2@C_{80}$ (Ad) (M = La and Ce, Ad = Adamantylidene),” *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 1171–1176 (2008).

M. YAMADA, T. WAKAHARA, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, M. KAKO, T. AKASAKA, K. YOZA, E. HORN, N. MIZOROGI and S. NAGASE, “Location of the Metal Atoms in $\text{Ce}_2@C_{78}$ and Its Bis-Silylated Derivative,” *Chem. Commun.* 558–560 (2008).

T. NAKAHODO, M. OKADA, H. MORITA, T. YOSHIMURA, M. O. ISHITSUKA, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, H. FUJIHARA, T. AKASAKA, X. GAO and S. NAGASE, “[2+1] Cycloaddition of Nitrene onto C_{60} Revisited: Interconversion between an Aziridinofullerene and an Azafulleroid,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **47**, 1298–1300 (2008).

T. AKASAKA, T. KONO, Y. MATSUNAGA, T. WAKAHARA, T. NAKAHODO, M. O. ISHITSUKA, Y. MAEDA, T. TSUCHIYA, T. KATO, M. T. H. LIU, N. MIZOROGI, Z. SLANINA and S. NAGASE, “Isolation and Characterization of Carbene Derivatives of $\text{La}@C_{82}(C_3)$,” *J. Phys. Chem. A* **112**, 1294–1297 (2008).

A. D. KULKARNI, S. R. GADRE and S. NAGASE, “Quantum Chemical and Electrostatic Studies of Anionic Water Clusters, $(\text{H}_2\text{O})_n^-$,” *THEOCHEM* **851**, 213–219 (2008).

T. NAKAHODO, K. TAKAHASHI, M. O. ISHITSUKA, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, H. FUJIHARA, S. NAGASE and T. AKASAKA, “Synthesis of Selenyfullerene with Selenium-Containing Dibenzo[*b,g*]cyclooctane Moiety,” *Tetrahedron Lett.* **49**, 2302–2305 (2008).

B. WANG, X. WANG, G. CHEN, S. NAGASE and J. ZHAO, “Cage and Tube Structures of Medium-Sized Zinc Oxide Clusters $(\text{ZnO})_n$ ($n = 24, 28, 36, \text{ and } 48$),” *J. Chem. Phys.* **128**, 144710 (6 pages) (2008).

K. ISHIMURA and S. NAGASE, “A New Algorithm of Two-Electron Repulsion Integral Calculations: A Combination of Pople-Hehre and McMurchie-Davidson Methods,” *Theor. Chem. Acc.* **120**, 185–189 (2008).

T. ASADA, S. NAGASE, K. NISHIMOTO and S. KOSEKI, “Molecular Dynamics Simulation Study on Stabilities and Reactivities of NADH Cytochrome B5 Reductase,” *J. Phys. Chem. B* **112**, 5718–5727 (2008).

Z. SLANINA, F. UHLIK, S.-L. LEE, L. ADAMOWICZ and S. NAGASE, “Computational Screening of Metallofullerenes for Nanoscience: $\text{Sr}@C_{74}$,” *Mol. Sim.* **34**, 17–21 (2008).

N. TOKITOH, K. WAKITA, T. MATSUMOTO, T. SASAMORI, R. OKAZAKI, N. TAKAGI, M. KIMURA and S. NAGASE, "The Chemistry of Stable Silabenzenes," *J. Chin. Chem. Soc.* **55**, 487–507 (2008).

X. LU, H. NIKAWA, T. NAKAHODO, T. TSUCHIYA, M. O. ISHITSUKA, Y. MAEDA, T. AKASAKA, M. TOKI, H. SAWA, Z. SLANINA, N. MIZOROGI and S. NAGASE, "Chemical Understanding of a Non-IPR Metallofullerene: Stabilization of Encaged Metals on Fused-Pentagon Bonds in $\text{La}_2@C_{72}$," *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 9129–9136 (2008).

X. GAO, Z. ZHOU, Y. ZHAO, S. NAGASE, S. B. ZHANG and Z. CHEN, "Comparative Study of Carbon and BN Nanographenes: Ground Electronic States and Energy Gap Engineering," *J. Phys. Chem. C* **112**, 12677–12682 (2008).

M. YAMADA, T. WAKAHARA, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, T. AKASAKA, N. MIZOROGI and S. NAGASE, "Spectroscopic and Theoretical Study of Endohedral Metallofullerene having Non-IPR Fullerene Cage: $\text{Ce}_2@C_{72}$," *J. Phys. Chem. A* **112**, 7627–7631 (2008).

Y. MAEDA, Y. TAKANO, A. SAGARA, M. HASHIMOTO, M. KANDA, S. -I. KIMURA, Y. LIAN, T. NAKAHODO, T. TSUCHIYA, T. WAKAHARA, T. AKASAKA, T. HASEGAWA, S. KAZAOUI, N. MINAMI, J. LU and S. NAGASE, "Simple Purification and Selective Enrichment of Metallic SWCNTs Produced Using the Arc-Discharge Method," *Carbon* **46**, 1563–1569 (2008).

Z. SLANINA, F. UHLIK, S. -L. LEE, L. ADAMOWICZ and S. NAGASE, "Computations on Three Isomers of $\text{La}@C_{74}$," *Int. J. Quantum. Chem.* **106**, 2636–2640 (2008).

Y. MAEDA, M. HASHIMOTO, S. KANEKO, M. KANDA, T. HASEGAWA, T. TSUCHIYA, T. AKASAKA, Y. NAITOH, T. SHIMIZU, H. TOKUMOTO, J. LU and S. NAGASE, "Preparation of Transparent and Conductive Thin Films of Metallic Single-Walled Carbon Nanotubes," *J. Mater. Chem.* **18**, 4189–4192 (2008).

Z. SLANINA, F. UHLIK, S. -L. LEE, L. ADAMOWICZ and S. NAGASE, "MPWB1K Calculations of Stepwise Encapsulations: Li_xC_{60} ," *Chem. Phys. Lett.* **463**, 121–123 (2008).

Y. YAMAZAKI, K. NAKAJIMA, T. WAKAHARA, T. TSUCHIYA, M. O. ISHITSUKA, Y. MAEDA, T. AKASAKA, M. WAELCHLI, N. MIZOROGI and S. NAGASE, "Observation of ^{13}C NMR Chemical Shifts of Metal Carbides Encapsulated in Fullerenes: $\text{Sc}_2\text{C}_2@C_{82}$, $\text{Sc}_2\text{C}_2@C_{84}$ and $\text{Sc}_3\text{C}_2@C_{80}$," *Angew. Chem., Int. Ed.* **47**, 7905–7908 (2008).

Y. OHTSUKA and S. NAGASE, "Projector Monte Carlo Method Based on Configuration State Functions. Test Applications to the H_4 System and Dissociation to LiH ," *Chem. Phys. Lett.* **463**, 431–434 (2008).

T. AKASAKA, T. KONO, Y. TAKEMATSU, H. NIKAWA, T. NAKAHODO, T. WAKAHARA, M. O. ISHITSUKA, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, M. T. H. LIU, K. YOZA, T. KATO, K. YAMAMOTO, N. MIZOROGI, Z. SLANINA and S. NAGASE, "Does $\text{Gd}@C_{82}$ have an Anomalous Endohedral Structure? Synthesis and Single Crystal X-Ray Structure of the Carbene Adduct," *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 12840–12841 (2008).

D. WANG, J. LU, J. ZHOU, L. LAI, L. WANG, G. LUO, Z. GAO, G. LI, W. N. MEI, S. NAGASE, Y. MAEDA, T. AKASAKA and Y. ZHOU, "Selective Adsorption of Cations on Single-Walled Carbon Nanotubes: A Density Functional Theory Study," *Comput. Mater. Sci.* **43**, 886–891 (2008).

T. SASAMORI, K. HIRONAKA, Y. SUGIYAMA, N. TAKAGI, S. NAGASE, Y. HOSOI, Y. FURUKAWA and N. TOKITOH, "Synthesis and Reactions of a Stable 1,2-Diaryl-1,2-Dibromodisilene: A Precursor for Substituted Disilenes and a 1,2-Diaryldisilyne," *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 13856–13857 (2008).

F. UHLIK, Z. SLANINA and S. NAGASE, “Computational Treatment of Alkaline Earth Encapsulations in C_{74} : Relative Thermodynamic Production Abundances,” *Fullerenes, Nanotubes, Carbon Nanostruct.* **16**, 507–516 (2008).

X. LU, H. NIKAWA, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, M. O. ISHITSUKA, T. AKASAKA, M. TOKI, H. SAWA, Z. SLANINA, N. MIZOROGI and S. NAGASE, “Bis-Carbene Adducts of Non-IPR $La_2@C_{72}$: Localization of High Reactivity around Fused Pentagons and Electrochemical Properties,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **47**, 8642–8645 (2008).

Z. SLANINA, F. UHLIK, S. -L. LEE, L. ADAMOWICZ and S. NAGASE, “ Li_xC_{60} : Calculations of the Encapsulation Energetics and Thermodynamics,” *Int. J. Mol. Sci.* **9**, 1841–1850 (2008).

Y. TAKANO, A. YOMOGIDA, H. NIKAWA, M. YAMADA, T. WAKAHARA, T. TSUCHIYA, M. O. ISHITSUKA, Y. MAEDA, T. AKASAKA, T. KATO, Z. SLANINA, N. MIZOROGI and S. NAGASE, “Radical Coupling Reaction of Paramagnetic Endohedral Metallofullerene $La@C_{82}$,” *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 16224–16230 (2008).

N. TAJIMA, M. IKEDA, M. SAITO, K. ISHIMURA and S. NAGASE, “Synthesis, Structure and Reactions of a Trianion Equivalent, Trilithiostannane,” *Chem. Commun.* 6495–6497 (2008).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Z. SLANINA, F. UHLIK and S. NAGASE, “Computations on $Li_x@C_{60}$,” 2008 NSTI Nanotech Conference and Trade Show- NSTI Nanotech 2008, Technical Proceedings, Nano Science and Technology Institute, Cambridge, MA, pp. 689–692 (2008).

B-3) 総説, 著書

前田 優, 長谷川正, 赤阪 健, 永瀬 茂, 「金属性単層カーボンナノチューブの分離法の開拓」*ケミカルエンジニアリング 化学工業社*, Vol. 53, 35–41 (2008).

Z. SLANINA, F. UHLIK, S. -L. LEE and S. NAGASE, “Fullerenic Structures: Computational Concepts of Their Stability,” in *DFT Calculations on Fullerenes and Carbon Nanotubes*, V. A. Basiuk and S. Irle, Eds., Research Signpost, Trivandrum; India, pp. 1–29 (2008).

B-4) 招待講演

S. NAGASE, “The Important Interplay between Theoretical Calculations and Experiment,” The 8th International Congress of World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC), Sydney (Australia), September 2008.

永瀬 茂, 「分子の設計と合成: 理論計算と実験」近畿化学協会コンピュータ化学部会発足20周年記念公開セミナー(第73回例会)大阪, 2008年10月.

永瀬 茂, 「計算と実験のインタープレイ」岐阜大学工学部セミナー, 岐阜, 2008年12月.

Y. OHTSUKA, “Projector Monte Carlo Method Using Configuration State Functions,” アジア国際シンポジウム(日本化学会第88春季年会)東京, 2008年3月.

Y. OHTSUKA, “Projector Monte Carlo Method based on Slater Determinants,” International Symposium on Frontiers of Computational Science 2008, 名古屋, 2008年11月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

国際分子量子科学アカデミー会員 (2008–).

WATOC (World Association of Theoretically Oriented Chemists) Scientific Board (1999–).

APACTCC (Asian Pacific Conference on Theoretical & Computational Chemistry) Scientific Board (2004–).

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.

学会の組織委員等

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.

第3回分子科学討論実行委員長.

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

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

総合研究大学院大学物理科学研究科, 集中講義「構造分子基礎理論」2008年7月22–24日.

城西大学大学院, 集中講義「有機物質設計特論」2008年7月28–29日.

岐阜大学大学院, 集中講義「応用化学特論IV」2008年12月2–3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–.

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

B-10) 競争的資金

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

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考慮に入れた電子状態理論の開発
- b) 半導体ナノ構造における励起子ダイナミクスの理論
- c) 電気化学反応の理論

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 表面吸着系の電子物性や電子・核ダイナミクスを分子レベルで理解するためには，吸着種と表面の間で起こる電子エネルギーの散逸を正しく記述することが必須である。従来の表面吸着系に対する一般的な計算方法としては，表面を有限個の原子から構成されるクラスターで近似するクラスターモデル計算が良く知られている。しかしこのクラスターモデル (CCM) では，本来半無限系である表面を有限個の孤立クラスターで近似してしまうため，実際の表面には存在し得ないクラスターの端 (もしくは境界) が存在してしまう。この人工的な端の存在が波動関数に非物理的な境界条件を課してしまい，間違った結果を導き出す可能性を含むという致命的な問題を抱えている。そこで我々は，吸着原子と金属表面との間で起こる電子エネルギーの散逸を考慮に入れた新しいクラスターモデル (OCM) 理論を開発し，貴金属表面吸着種の光誘起振動励起過程の核波束ダイナミクスの計算を行った。OCM 理論に基づいて表面吸着モデル系に対する断熱ポテンシャル曲線を描くと，吸着種由来の電子状態と表面電子状態が透熱的に分離しており，少数の透熱ポテンシャル曲線が系のダイナミクスを支配していることが分かった。実際に少数の透熱ポテンシャルを抜き出し，そのポテンシャル曲線上で核波束ダイナミクスの計算を行い，表面吸着種の光誘起振動励起メカニズムの解明を行った。特に光励起後に引き起こされる吸着種のコヒーレントな振動運動の詳細な解析を行った。
- b) 量子ドット列におけるエネルギー散逸を伴う励起子移動の理論的研究を行った。量子ドット列の各サイト間のエネルギー移動を議論する場合，しばしば個々のサイトの固有状態を基にしたサイト基底表現が用いられる。しかし，厳密には量子ドット列全系のハミルトニアンを対角化した固有値基底表現を使わなければならない。過去の学術論文等で頻繁に使われているサイト基底表現は，固有値基底表現を基に低次の摂動展開の結果導き出されることを解析的に示すことができた。また，サイト基底表現では熱平衡状態が実現しない等の物理的に奇異な結果を導き出す恐れがあることも分かった。
- c) 電気化学反応を分子レベルで理解するためには，電気化学的環境下に存在する分子の電子状態を明らかにすることが必須である。しかしながらその目的のためには，反応分子と電極や溶媒との相互作用の微視的記述，電極と溶液の間に形成される電気二重層の分子レベルでの取り扱い，更には化学ポテンシャルを与えた時の電子状態を計算するための方法論の開発等，分子科学における主要かつ困難な問題を解決しなければならない。我々は，これらの問題の中でも化学ポテンシャルを与えた時の電子状態を計算するための方法論の開発が特に遅れていることに注目し，その計算手法の開発を行い，実際の電気化学反応に適用した。

B-1) 学術論文

K. SHIRATORI and K. NOBUSADA, “Development of a Finite-Temperature Density Functional Approach to Electrochemical Reactions,” *J. Phys. Chem. A* **112**, 10681–10688 (2008).

Y. KUBOTA and K. NOBUSADA, “Exciton Transfer in Quantum Dot Arrays: Comparison of Eigenbasis and Site Basis Representations,” *J. Chem. Phys.* **129**, 094704 (7 pages) (2008).

T. YASUIKE and K. NOBUSADA, “Properties of Adsorbates as Open Quantum Systems,” *Surf. Sci.* **602**, 3144–3147 (2008).

T. YASUIKE and K. NOBUSADA, “Quasi-Adiabatic Decoupling of Born-Oppenheimer Potential Energy Curves for Adsorbate-Metal Surface Systems,” *Chem. Phys. Lett.* **457**, 241–245 (2008).

K. SHIRATORI and K. NOBUSADA, “Finite-Temperature Density Functional Calculation with Polarizable Continuum Model in Electrochemical Environment,” *Chem. Phys. Lett.* **451**, 158–162 (2008).

B-4) 招待講演

K. NOBUSADA, “Vertex-Sharing Oligomeric Gold Clusters,” International Symposium on Monolayer-Protected Clusters, Jyväskylä (Finland), September 2008.

K. NOBUSADA, “Photoinduced Vibrational Coherent Excitation in Adsorbate-Metal Surface Systems: An Open-Boundary Cluster Model Approach,” The 2nd International Symposium on “Molecular Theory for Real Systems,” Okazaki (Japan), August 2008.

K. NOBUSADA, “Electronic structure and electron–nuclear dynamics of molecules in contact with an electron reservoir: Adsorbate-surface system and electrochemical system,” The 2008 Asian-core Symposium and Annual Meeting, Daejeon (Korea), March 2008.

信定克幸, 「金属表面吸着種の光誘起コヒーレント振動の核波束ダイナミクス」第4回励起ナノプロセス研究会, 和歌山, 2008年11月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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 (2006–2008).

学会の組織委員等

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 (2006–2008).

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－.

Sokendai Asian Winter School “Molecular Sciences on Different Space-Time Scales,” “Time-dependent density functional theory in real time and real space: Application to electron dynamics in laser fields,” 2008年12月9日－12日.

B-9) 学位授与

白鳥和矢，「Finite-Temperature Density Functional Approach to Electrochemical Reaction」2008年3月，博士(理学)

B-10) 競争的資金

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 Grant，「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

最近の実験的手法の著しい進歩により，化学組成や構造を特定した1ナノメートル程度のナノ構造体を生成・単離更には大量合成することも可能になってきたが，未だそれらナノ構造体の電子物性や電子・核ダイナミクスの詳細は十分に理解されていない。ましてやナノ構造体を利用した量子デバイスや機能性材料開発等の応用科学的研究への展開には大きな障壁が存在する。物質自体がナノメートルサイズになってしまうことから生じる数値計算上の問題だけではなく，そもそもナノメートルサイズの実在系ナノ構造体の量子ダイナミクス(特に光学応答)を取り扱うための理論がほとんど開発されていないためである。また，ナノ構造体が周りの環境と一切相互作用せずに孤立物質として存在することは通常有り得ず，常に環境との間でエネルギーの散逸が起こっている。実在系ナノ構造体の量子散逸の理論も同様にほとんど開発されていない。そこで我々の研究グループでは，基礎理学的理解を目標として，理論解析・数値解析両方の観点から，量子散逸を含むナノ構造体の電子・核ダイナミクスの研究を行っている。ここ最近の我々の研究に基づくと，表面と吸着種の間で起こるエネルギー散逸は厄介者ではなく，多彩な表面ダイナミクスを引き起こす重要な現象であると言える。また，ナノ構造体特有の局所的な構造と光との相互作用を理解するために，特に近接場光励起による電子・核ダイナミクスの理論的解明を予定している。

柳 井 毅 (准教授) (2007年1月1日着任)

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
- b) 高スケーラブル電子相関理論の開発

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，その説明は大変興味を持たれている一方で，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。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，原子間スケールで擬縮退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良い。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た。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 計算を実現できた。配置数では 10^{20-30} 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) 大規模の分子系を含むリアル系の量子化学計算をターゲットとして，分子サイズに対して適応範囲の広い，高スケーラブルな新規電子相関計算法を開発した。本研究の着想は，従来の電子相関計算の計算負荷的なボトルネックは，原子基底 (AO) 関数から分子軌道 (MO) 基底への「積分変換」にあるという着眼点に基づく。本手法では，この変換計算に対して，局在化分子軌道を変換基底として利用し，基底空間を区分けし，各区分けで小さな積分変換を行う。そして区分け同士の相互作用も低次まで考慮する積分変換を行う。分割ハミルトニアン期待値をとることで，エネルギー分割表現に射影できる。この分割スキームを，「局所ハミルトニアン法」と呼ぶ。局所ハミルトニアンは，局在化軌道の描像に基づいた分割ハミルトニアンの和であり，全系のハミルトニアン近似描像としては物理的に理にかなっており，良好な近似表現であると期待される。また局在化軌道表現の相互作用は低い次数で打ち切りやすく，高いスケーラビリティが望める。局所ハミルトニアン法の基礎理論を計算機上に実装し，その性能を評価した。(LiH)_n鎖をテスト分子として，局所ハミルトニアン法による積分変換計算の計算コスト (総 flop 数) を見積もった。長鎖の

(LiH)_n に対して、総 flops 数は、鎖長に対して良好な低次スケーリングを示し、ほぼ linear scaling な計算コストであった。従来の $O(N^6)$ の計算コストである計算法と比較して、局所ハミルトニアン法の計算は、 $n = 15\sim 20$ 程度ですでに効率よい計算であることを示した。開発で得られた、局在化分子軌道ベースの打ち切り近似ハミルトニアンを利用することで、Pulay, Werner らの局所電子相関法 LMP2 法を実装し、DNA Base-Pair をテスト分子として、Base-Pair の相互作用エネルギーを LMP2 により求め、分割の様式に依存せず MP2 エネルギーを算出できることを示した。

B-1) 学術論文

D. GHOSH, J. HACHMANN, T. YANAIU and G. K-L. CHAN, “Orbital Optimization in Density Matrix Renormalization Group, with Applications to Polyenes and β -Carotene,” *J. Chem. Phys.* **128**, 144117 (14 pages) (2008).

H. SEKINO, Y. MAEDA, T. YANAI and R. J. HARRISON, “Basis Set Limit Hartree-Fock and Density Functional Theory Response Property Evaluation by Multiresolution Multiwavelet Basis,” *J. Chem. Phys.* **129**, 034111 (6 pages) (2008).

B-3) 総説, 著書

G. K-L. CHAN, J. J. DORANDO, D. GHOSH, J. HACHMANN, E. NEUSCAMMAN, H. WANG and T. YANAI, “An Introduction to the Density Matrix Renormalization Group Ansatz in Quantum Chemistry,” in *Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Vol. 18*, S. Wilson *et al.*, Eds., Springer, pp. 49–64 (2008).

B-4) 招待講演

T. YANAI, “Renormalization Group and Canonical Transformation for Multireference Electronic Structure Problems,” The 1st Center for Space-Time Molecular Dynamics (CMD) International Conference—Chemical Computations, Seoul National Univ., Seoul (Korea), May 2008.

柳井 毅, 「量子化学サブプレクチャー」第14回理論化学シンポジウム「次世代理論・実験化学者からの提言」沼津, 2008年7月.

T. YANAI, “Canonical Transformation for An Efficient Multireference Electronic Structure Method,” (Oral Communication), Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC), Sydney (Australia), September 2008.

柳井 毅, 「高精度電子相関理論の開発による金属・有機分子の大規模電子状態計算」特定領域研究「実在系の分子理論」平成20年度成果報告会, 北海道大学, 札幌, 2008年12月.

B-6) 受賞, 表彰

T. YANAI, *Chemical Physics Letters* Most Cited Paper 2003-2007 Award.

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」2008年前期.

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

“Computational and molecular modeling with quantum chemistry,” 2008年1月24日-26日.

B-10) 競争的資金

戦略的創造研究推進事業・CREST, 「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」柳井 毅, 研究分担 (2008年度-2009年度).

特定領域研究(公募研究)「実在系の分子理論」柳井 毅 (2008年度-2009年度).

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，理論的な取り扱いに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（3D-RISM/RISM 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，およびその中の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，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。分子認識過程には二つの物理化学的要素が伴う。ひとつは蛋白質とリガンドの複合体の熱力学的安定性であり，この過程を律するのは複合体形成前後の自由エネルギー変化である。もうひとつの要素は蛋白質の「構造揺らぎ」である。蛋白質内に基質分子を取り込む過程（分子認識）は単に「鍵と鍵孔」のような機械的な適合過程ではなく，多くの場合，蛋白質の構造揺らぎを伴う。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。

- a) アクアポリン（水チャンネル）のプロトン排除機構の解明：アクアポリンは4個の分子チャンネルからなる複合蛋白質であるが，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。このチャンネル蛋白質は水を非常に良く透過する一方，それよりも小さなプロトンは全く透さないことが知られている。我々は内径が異なる二つのアクアポリンファミリー（AQP1 と GlpF）を例とし，そのチャンネル内部における水およびヒドロニウムイオン（ H_3O^+ ）の分布を3次元 RISM 理論により求め，これらのチャンネルがプロトンを透過しない物理的理由を考察した。この解析の結果，AQP1 ではチャンネル内部のアミノ酸残基がつくる正の静電ポテンシャルによってプロトン（正の電荷をもつ）が静電的な反撥力を受け，チャンネル内部の広い領域から排除されることが分かった。一方，GlpF では静電的な反発力が AQP1 ほど大きくないため，チャンネル内部のいわゆる選択フィルター領域を除く大部分の領域にヒドロニウムイオンの分布が認められた。このことはいわゆるプロトンジャンプ機構（Grotthuss mechanism）によるプロトン透過の余地を残すことを意味する。しかしながら，チャンネル内部の水分子の配向に関する詳細な解析から，チャンネル内部の水分子が二つのアミノ酸残基との間でいわゆる「二極配位」を行い，その結果，プロトンジャンプ機構に不可欠な水分子間の水素結合配置を阻害することが示された。[*J. Am. Chem. Soc. (Communications)* **130**, 1540–1541 (2008) に既報]
- b) 自由エネルギー曲面上での生体分子のダイナミクスを記述する理論：生体分子のダイナミクスを記述する理論には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自由エネルギー曲面上での安定構造を探索することが重要である。我々は3D-RISM 理論と分子動力学法を組み合わせ自由エネルギー曲面上での疑似ダイナミクス（Ginzberg-Landau ダイナミクス）を行う方法を提案した。溶液分子の配置の緩和が生体分子の瞬間的構造に完全に

追随する極限では、蛋白質原子に働く溶媒からの駆動力はその自由エネルギー曲面の原子座標に関する微分によって得られ、3次元 RISM 理論から次の表現が得られる。[*J. Comput. Chem.* **27**, 453–462 (2006)]

$$\frac{\partial \Delta \mu_s}{\partial \mathbf{R}_a} = \sum_{\gamma} \rho_{\gamma} \int d\mathbf{r} \frac{\partial u_{\gamma}^{uv}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{R}_a} g_{\gamma}^{uv}(\mathbf{r})$$

上式中、 $\Delta \mu_s$ は溶媒和自由エネルギー、 \mathbf{R}_a は蛋白原子の座標、 $u_{\gamma}^{uv}(\mathbf{r})$ は蛋白質 - 溶媒原子間相互作用、 $g_{\gamma}^{uv}(\mathbf{r})$ は蛋白質の周りの溶媒の分布関数（統計的重み）である。この理論の応用例として、水中でのアセチルアセトンの構造異性化ダイナミクスを検討した。[*J. Comput. Chem.* **29**, 872–882 (2007) に既報]

B-1) 学術論文

R. ISHIZUKA, S. -H. CHONG and F. HIRATA, “An Intergral Equation Theory for Inhomogeneous Molecular Fluids: The Reference Interaction Site Model Approach,” *J. Chem. Phys.* **128**, 34504–34513 (2008).

S. PHONPHANPHANEE, N. YOSHIDA and F. HIRATA, “On the Proton Exclusion of Aquaporins: A Statistical Mechanics Study,” *J. Am. Chem. Soc. (Communications)* **130**, 1540–1541 (2008).

N. YOSHIDA, T. ISHIDA and F. HIRATA, “Theoretical Study of Temperature and Solvent Dependence of the Free Energy Surface of the Intramolecular Electron Transfer Based on the RISM-SCF Theory; Application to 1,3-Dinitrobenzene Radical Anion in Acetonitrile and Methanol,” *J. Phys. Chem. (Hynes issue)* **112**, 433–440 (2008).

B. KIM, S. -H. CHONG, R. ISHIZUKA and F. HIRATA, “An Attempt toward the Generalized Langevin Dynamics Simulation,” *Cond. Matt. Phys.* **11**, 179–190 (2008).

Y. IKUTA, S. KARITA, Y. KITAGO, N. WATANABE and F. HIRATA, “Detecting Reaction Intermediate in Enzymatic Reaction of Cel44A, GH Family 44 Endoglucanase with 3D-RISM Theory,” *Chem. Phys. Lett.* **465**, 279–284 (2008).

Y. YONETANI, Y. MARUYAMA, F. HIRATA and H. KONO, “Comparison of DNA Hydration Patterns Obtained Using Two Distinct Computational Methods, Molecular Dynamics Simulation and Three-Dimensional Reference Interaction Site Model Theory,” *J. Chem. Phys.* **128**, 185102 (9 pages) (2008).

S. -H. CHONG, “Connections of Activated Hopping Processes with the Breakdown of the Stokes-Einstein Relation and with Aspects of Dynamical Heterogeneities,” *Phys. Rev. E* **78**, 041501 (2008).

B-4) 招待講演

F. HIRATA, “Statistical theory of molecular recognition, and its application to aquaporin,” The 5th Open Workshop on “Chemistry of Biological Processes Created by Water and Biomolecules,” Nara (Japan), January 2008.

平田文男, 「分子認識の統計力学と生命現象への応用」, 金沢大学, 2008年5月.

F. HIRATA, “A grand challenge application for the next-generation supercomputer in the nano-science (Plenary),” The grand challenge to Next Generation Integrated Nano-science, Tokyo (Japan), June 2008.

F. HIRATA, “Theory of molecular recognition and its application to the enzymatic reaction,” The grand challenge to Next Generation Integrated Nano-science, Tokyo (Japan), June 2008.

F. HIRATA, “Why ions are not permeated through aquaporins?” International Symposium on Structure and Reaction Dynamics of Ionic Liquids, Kanazawa (Japan), September 2008.

平田文男, 「炭素細孔内の溶液構造と相転移」, 第61回コロイドおよび界面化学討論会, 九州大学, 2008年9月.

F. HIRATA, “Molecular Recognition Realized by the Statistical Mechanics Theory of Liquids,” Theory and Applications of Computational Chemistry(TACC), Shanghai (China), September 2008.

F. HIRATA, “Molecular Recognition in Life Phenomena Probed with the Statistical Mechanics of Liquids,” The 8th KIAS-Yonsei Conference on Protein Structure and Function, Seoul (Korea), October 2008.

F. HIRATA, “Statistical-mechanics theory of molecular recognition: water and other molecules recognized by protein,” Water in Biological System, A French-Japanese Workshop, Kyoto November 2008.

平田文男, 「化学(分子科学)は地球環境・エネルギー危機の『救世主』となり得るか?」第一回総研大合同フォーラム「未来ある人類社会の構築」葉山, 2008年12月.

F. HIRATA, “Molecular Recognition in Life Phenomena Probed with the Statistical Mechanics of Liquids,” IMA Annual Program Tear Workshop “Solvation,” Minneapolis (U.S.A.), December 2008.

平田文男, 「生命階層と物質階層の境界: 分子認識」自然科学研究機構「自然科学における階層と全体」シンポジウム, 蒲郡, 2008年12月.

平田文男, 「生体分子および溶媒の構造揺らぎと共役した機能発現過程の理論的解明」新学術領域「揺らぎと生体機能」第一回公開シンポジウム, 京都, 2009年1月.

Y. MARUYAMA and N. YOSHIDA, “A Grand Challenge Application for the Next-generation Super-computer: Soft-Nano Phenomena Explored by the 3D-RISM Theory,” Second French-Japanese Workshop Petascale Applications, Algorithms and Programing, Toulouse (France), June 2008.

Y. MARUYAMA, “Selective ion-binding by human lysozyme studied by the statistical mechanical integral equation theory,” Scientific Impacts and Opportunities in High Performance Computing, Young Investigators Symposium, Oak Ridge (U.S.A.), October 2008.

宮田竜彦, 「液体論を取り入れた分子動力学シミュレーション: ミセルのモデル化へ向けて」広域物性研究会広島シンポジウム2008, 広島大学, 2008年10月.

宮田竜彦, 「3次元RISM理論に基づく溶媒効果を取り入れた分子動力学シミュレーション: ミセルのモデル化へ向けて」IBM天城HPCセミナー2008, IBM天城ホームステッド, 2008年12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

学協会役員等

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

金沢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-25日.

B-10) 競争的資金

重点領域研究(公募研究)「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(公募研究)「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).

新学術領域(計画)「生体分子および溶媒の構造揺らぎと共役した機能発現過程の理論的解明」平田文男 (2008年-2013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取り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した。

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) 量子常誘電 - 強誘電相転移の臨界点近傍のコヒーレントな光誘起ダイナミクス
- b) 型および 型有機塩 (BEDT-TTF)₂X の電荷秩序の異なる光誘起融解ダイナミクス
- c) 光励起された強相関電子系から格子系への速いエネルギー移動を可能にする相互作用
- d) 金属モット絶縁体界面を通じた集団的電荷輸送の非平衡グリーン関数による解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 交互積層型電荷移動錯体の DM-TTF-QBr_nCl_{4-n} では常誘電中性相 - 反強誘電イオン性相の転移温度が n の増大とともに下がり, $n = 2$ で絶対零度付近となる。中性相では量子常誘電相に特有な誘電率の温度変化を示すことが知られている。この量子相転移付近の中性相で光照射すると, 電荷移動量に敏感な反射率成分が大振幅でコヒーレント振動することが最近報告された。そのメカニズムを, サイトあたり 3 状態をとる統計模型に量子トンネル項を加えて解析した。多体波動関数に対して時間依存シュレディンガー方程式を解いたところ, 量子臨界点近傍で振動の振幅が増大することがわかった。しかしダイナミクスに非線型性は現れず, 相転移を誘起しない実験事実と矛盾しない。
- b) 2次元 1/4 フィリング系の有機導体で全く同様な水平型電荷秩序をもつ 型および 型の (BEDT-TTF)₂X は, 全く異なる光誘起融解挙動を示すことが知られている。これらの塩の電荷秩序に対して, これまで格子歪みによる安定化の度合いが大きく異なることを, 厳密対角化, 強結合摂動論, 平均場近似で示してきた。これを基に光誘起融解挙動を時間依存シュレディンガー方程式により求めると, 大きな相違が再現できた。格子の安定化度合いが大きい 型塩では, 分子の回転に由来する格子歪みが弱励起で生き残るが, これは一価に近い分子列と中性に近い分子列を交互に生むものの, 光励起による電荷移動では容易に消失しないからである。
- c) 光誘起相転移では分子密度に比べてずっと低い密度の光子で, 電子状態が巨視的に変わるので, 光スイッチなどへの応用が期待されている。そのためには絶縁体を光照射して生成した金属状態が高速に緩和することが期待され, 強相関電子系では実現している。そこで格子振動の重要性を考えて, 異なる型の電子格子相互作用を持つ強相関電子系で, 光励起された電子系から格子系へのエネルギー移動率を厳密な多電子波動関数により調べた。通常の電子格子相互作用は電子状態の対称性に関わる点では重要だが, エネルギー移動率は対称性によって大きく異なる。電子間斥力を変調する型の相互作用は平衡状態の性質には効かないが, 対称性によらずエネルギー移動に大きく関与する。
- d) 一般に異種物質は異なる仕事関数をもつため, 金属絶縁体界面にはショットキー障壁ができる。電位差の向きによって障壁の高さが変わるために, 電流の大きさも変わり, 通常の金属バンド絶縁体界面では整流作用が現れる。しかし金属モット絶縁体界面では電子相関のために整流作用が抑制されることを, 時間依存シュレディンガー方程式の数値解や有機結晶を用いたデバイスの実験から示してきた。定常状態を理論的に扱うために, 新たに非平衡グリーン関数を用いて輸送特性を計算し, 整流作用の抑制を再現するとともに, 電荷分布の計算からそのメカニズムを解明した。モット絶縁体に流入する電子や正孔は, 絶縁体内に非局在化し, 電子の集団運動を可能にしていた。

B-1) 学術論文

Y. TANAKA and K. YONEMITSU, “Charge Order with Structural Distortion in Organic Conductors: Comparison between θ -(ET)₂RbZn(SCN)₄ and α -(ET)₂I₃,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 034708 (9 pages) (2008).

N. MAESHIMA and K. YONEMITSU, “Polaronic States with Spin-Charge-Coupled Excitation in a One-Dimensional Dimerized Mott Insulator K-TCNQ,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 074713 (6 pages) (2008).

K. YONEMITSU and K. NASU, “Theory of Photoinduced Phase Transitions in Itinerant Electron Systems,” *Phys. Rep.* **465**, 1–60 (2008).

K. ONDA, S. OGIHARA, K. YONEMITSU, N. MAESHIMA, T. ISHIKAWA, Y. OKIMOTO, X. SHAO, Y. NAKANO, H. YAMOCHI, G. SAITO and S. KOSHIHARA, “Photoinduced Change in the Charge Ordering Pattern in the Quarter-Filled Organic Conductor (EDO-TTF)₂PF₆ with a Strong Electron-Phonon Interaction,” *Phys. Rev. Lett.* **101**, 067403 (4 pages) (2008).

S. MIYASHITA and K. YONEMITSU, “Spin and Charge Fluctuations and Lattice Effects on Charge Ordering in α -(BEDT-TTF)₂I₃,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 094712 (6 pages) (2008).

K. YONEMITSU, “Enhanced Coherent Dynamics near a Transition between Neutral Quantum-Paraelectric and Ionic Ferroelectric Phases in the Quantum Blume-Emery-Griffiths Model,” *Phys. Rev. B* **78**, 205102 (5 pages) (2008).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. YAMASHITA and K. YONEMITSU, “Modified Barrett Formula near the Neutral-Ionic Quantum Phase Transition,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **132**, 012019 (5 pages) (2008).

B-3) 総説, 著書

米満賢治, 「光誘起相転移の理論——コヒーレント振動と過渡状態——」*レーザー研究 (The Review of Laser Engineering)* **36**, No. 6, pp. 343–348 (2008).

B-4) 招待講演

米満賢治, 前島展也, 「擬1次元電荷格子秩序系の光誘起相転移と緩和過程」学術創成研究会「金属錯体の固体物性科学最前線——錯体化学と固体物性物理の新奇融合領域創成をめざして——」東北大学, 2008年3月.

K. YONEMITSU, N. MAESHIMA and Y. YAMASHITA, “Photoinduced Charge Dynamics in Organic Conductors and Coherent Neutral-Ionic/Polarization Dynamics in Quantum Paraelectrics,” International Symposium on Molecular Conductors 2008 “Novel Functions of Molecular Conductors under Extreme Conditions,” Okazaki (Japan), July 2008.

K. YONEMITSU, N. MAESHIMA, Y. TANAKA and S. MIYASHITA, “Photoinduced Melting and Charge Order in Quarter-Filled Organic Conductors: Itinerant Electron Systems with Competing Interactions,” Yamada Conference LXIII, 3rd International Conference on “Photoinduced Phase Transitions and Cooperative Phenomena,” Osaka (Japan), November 2008.

米満賢治, 「金属絶縁体界面を通じた輸送の特性: 電子相関と界面障壁」第2回研究会「金属錯体の固体物性科学最前線——錯体化学と固体物性物理の新奇融合領域創成をめざして——」東北大学, 2008年12月.

K. YONEMITSU, “Photoinduced Phase Transitions and Dynamics: Nonlinear Cooperative Phenomena Caused by Competing Interactions in Correlated Electron Systems,” NIMS Seminar, Tsukuba (Japan), December 2008.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会産学協力研究委員会「分子系の複合電子機能第181委員会」委員 (2008–).

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-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, 「分子集団動力学」2008年1月15日–2月19日.

横浜国立大学大学院工学府, 「固体物性理工学」2008年11月20日–22日.

B-10) 競争的資金

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

強相関電子系としての分子性導体における光誘起相転移のダイナミクスを実験研究との協力の下で進めてきた。多数の電子がかかわる超高速な時間変化について、実験と理論の発展によって、よい時間分解能での観測および計算による解釈が可能になってきた。これまで計算の制約上あまり扱えなかったが、これから必要になるものとして、平衡状態の電子格子物性には関与しない分子軌道にいる電子や分子内振動に対応するフォノンの、光励起直後の運動である。これらを通じて理解が深まれば、近い将来に可能になるであろう、電子励起の直接観測やコヒーレンスを再現でき、光による電子物性制御に道が開けるだろう。これらと並行し、絶縁体金属界面を通した電荷輸送における、界面障壁と電子相関に由来するデバイス特性を、実験研究との協力の下で進めてきた。量子的時間変化の直接計算のほかに、非平衡グリーン関数による定常状態の計算も可能になり、現象の解釈が容易になった。電位差以外の外場や電流以外の流れにも拡張でき、これまでと異なる視点での共同研究を計画している。

計算分子科学研究部門

岡 崎 進 (教授) (2001年10月1日 ~ 2008年3月31日)*)

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を行った。
- b) 量子 - 古典混合系近似に基づいて，水溶液中における分子内プロトン移動の量子力学シミュレーションによる検討を進めている。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，分子内プロトン移動と分子間プロトン移動の2つの代表的な実在系について検討を開始した。
- 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な高並列汎用 MD 計算プログラムの開発を行ってきた。今年度は特に，両親媒性分子が水溶液中に生成する球状ミセルに対して熱力学的積分法に基づいたシミュレーションを行い，ミセルの疎水核中への分子の取り込みについて検討を継続して行った。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るとともに，実際の細胞膜組成における計算を開始した。

B-1) 学術論文

A. YAMADA and S. OKAZAKI, "A Quantum Equation of Motion for Chemical Reaction Systems on an Adiabatic Double-Well Potential Surface in Solution Based on the Framework of Mixed Quantum-Classical Molecular Dynamics," *J. Chem. Phys.* **128**, 044507 (8 pages) (2008).

I. NAKAI, Y. MATSUMOTO, N. TAKAGI and S. OKAZAKI, "Structure and Thermal Fluctuation of One-Dimensional AgO Chains on Ag(110) Surface Studied with Density Functional Theory and Monte Carlo Simulations," *J. Chem. Phys.* **129**, 154709 (8 pages) (2008).

B-4) 招待講演

S. OKAZAKI, "Molecular dynamics study of micelle formation in water and solubilization of solute molecules by it," International Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials, Tokyo, June 2008.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会第 139 委員会委員 (2000-).

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

新潟大学大学院自然科学研究科, 「特別講義」

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。

*) 2008 年 4 月 1 日名古屋大学大学院工学研究科教授, 分子科学研究所教授兼任

齊藤真司(教授)(2005年10月1日着任)

A-1) 専門領域：理論化学

A-2) 研究課題：

- a) 過冷却水のダイナミクス，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。過冷却液体は，様々な興味深い性質を示す。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，等圧比熱の特異的温度依存性を与える時空ダイナミクスを明らかにした。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。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，再びガラス相に転移す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，細胞増殖に関わるタンパク質である。我々は，GTP 加水分解反応前後の揺らぎや構造変化が，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。GTP 結合型 Ras において，標的タンパク質との結合が抑制される状態 1 と活性状態である状態 2 が混在している事が最近の実験研究で明らかとなった。我々は，これらの状態においてスイッチ領域での構造や揺らぎの違いについて分子動力学法を用いて解析を行い，状態 1 ではスイッチ領域の配位が変化し，標的タンパク質の結合部位が構造変化を起こす事，そのため構造揺らぎも大きくなっていることを明らかとした。
- 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 100 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。また，パンププローブ分光法，異方性減衰の理論解析から，水中の衡振運動のエネルギー緩和機構を明らかにした。

B-1) 学術論文

T. YAGASAKI and S. SAITO, "Ultrafast Intermolecular Dynamics of Liquid Water: A Theoretical Study on Two-Dimensional Infrared Spectroscopy," *J. Chem. Phys.* **128**, 154521 (2008).

R. YAMAMOTO, K. KIM, Y. NAKAYAMA, K. MIYAZAKI and D. R. REICHMAN, "On the Role of Hydrodynamic Interactions in Colloidal Gelation," *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 084804 (2008).

Y. NAKAYAMA, K. KIM and R. YAMAMOTO, "Simulating (Electro) Hydrodynamic Effects in Colloidal Dispersions: Smoothed Profile Method," *Eur. Phys. J. E* **26**, 361–368 (2008).

Y. NAKAYAMA, K. KIM and R. YAMAMOTO, "Smoothed Profile Method for Direct Simulation of Flowing (Charged) Colloids in Solvents," *AES Tech. Rev. Int. J. Nano Adv. Eng. Mat.* **1**, 21–28 (2008).

B-4) 招待講演

S. SAITO, "Ultrafast Intermolecular Dynamics of Water," 4th conference on Coherent Multi-Dimensional Spectroscopy, Kyoto, August 2008.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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-).

分子科学会幹事 (2008-).

B-8) 大学での講義, 客員

名古屋大学理学部, 「物理化学基礎」2008年前期.

東京大学大学院総合文化研究科, 相関基礎科学特別講義I「溶液の分子論的ダイナミクスと分光解析」2008年11月5日-7日.

東京大学大学院総合文化研究科, 客員教授, 2005年4月-.

B-10) 競争的資金

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).

若手研究(B)「密度揺らぎの多体相関関数による過冷却液体ダイナミクスの解析」, 金 鋼(2007年度-2008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).

B-11) 産学連携

日本電信電話(株)マイクロシステムインテグレーション研究所, 「テラヘルツ分光スペクトル解析に関する研究」, 斉藤真司(2008年度-2009年度).

C) 研究活動の課題と展望

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。密度揺らぎによるポテンシャルエネルギーの変化を明らかにし, この結果をもとに, 液体構造変化に由来する遅い揺らぎの解析へと展開させていく。また, 空間的異方性をもつ系の構造・ダイナミクスへの展開していきたい。

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, どのように引き起こされるのかを明らかにしていきたい。

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, また分子内振動の解析へと展開し, 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。

イオン水溶液の結晶化過程を明らかにし、どのような構造乱れ・揺らぎがイオンをトラップした氷のテラヘルツ分光に寄与しているかを明らかにする。

江 原 正 博 (教 授) (2008 年 6 月 1 日 着 任)

A-1) 専門領域：量子化学，光物性科学，理論精密分光

A-2) 研究課題：

- a) 高精度電子状態理論の開発
- b) 内殻電子過程の理論精密分光
- c) 光機能分子の電子過程の解析と理論設計
- d) 表面光化学と表面触媒化学

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 分子の励起状態には複雑な電子構造をもつ状態が存在し，励起状態の理論研究ではこれらを正確に記述することが重要である。我々は高精度電子状態理論の開発を行ってきたが，その中で Active space 法は開殻系の励起状態を効率的かつ高精度に記述する理論である。SAC-CI 法に基づく Active space 法を開発し，多電子過程で表現される三原子分子の励起状態に応用した。ラジカル分子の励起状態では多電子過程で表される状態が多く存在するが，Active space 法はこれらの状態に対して高精度であることを示した。また，最低励起状態は CR-CC (Complete Renormalized Coupled Cluster) 法によっても精度よく記述できることを示した。
- b) 分子分光法の発展により，内殻電子過程では様々な新しい現象が観測されており，それらの解明には理論の正確な情報は極めて重要となる。N₂O 分子の O1s 内殻励起スペクトルの温度効果を，精密な理論によるポテンシャル曲線と電子雲の広がり $\langle r^2 \rangle$ に基づいて明らかにした。また，内殻励起状態における構造変化を解析し，構造変化のメカニズムと励起状態の振動構造を解明した。また価電子励起では，環境科学で重要である八口エチレンの励起状態の精密な解析や励起状態と分子構造の相関を明らかにした。
- c) 発光材料では分子の励起状態が鍵であり，励起状態の精密な理論研究によってその光物性の詳細を明らかにすることができる。有機 EL 分子である Ir 錯体の発光に関わる励起状態における構造変化を研究し，発光過程を明らかにした。また，バイオセンサーの光誘起電子移動過程の電子的メカニズムを明らかにし，溶媒効果と構造変化が重要であることを示した。
- d) 表面反応は無限系と有限系の接点の現象であり，理論的にも興味深い研究対象である。表面 - 分子系では固体表面と吸着分子の相互作用が本質であり，その理論モデルが鍵となる。直接メタノール燃料電池の反応として重要であるメタノール酸化反応について研究し，O-H 解離に引き続きメチル基の H が解離するメカニズムを提案した。また，銀表面についても検討を行い，アルデヒドの生成に有効である事を示した。

B-1) 学術論文

S. ARULMOZHIRAJA, M. EHARA and H. NAKATSUJI, "Electronic Transitions in *cis*- and *trans*- Dichloroethylenes and in Tetrachloroethylene," *J. Chem. Phys.* **129**, 174506 (8 pages) (2008).

M. EHARA and H. NAKATSUJI, "Geometry Relaxation after Inner-Shell Electronic Excitations and Ionizations," *Collect. Czech. Chem. Commun.* **73**, 771–785 (2008).

Y. ABE, K. KURAMOTO, M. EHARA, H. NAKATSUJI, M. SUGINOME, M. MURAKAMI and Y. ITO, “Mechanism of the Palladium-Catalyzed Regioselective Silaboration of Allene: Theoretical Study,” *Organometallics* **27**, 1736–1742 (2008).

T. TANAKA, M. HOSHINO, H. KATO, M. EHARA, N. YAMADA, R. FUKUDA, H. NAKATSUJI, Y. TAMENORI, J.R. HARRIES, G. PRUEMPER, H. TANAKA and K. UEDA, “Vibration-Induced Suppression of Valence-Rydberg Mixing in the O 1s \rightarrow ns σ Rydberg Series in N₂O,” *Phys. Rev. A* **77**, 012709 (4 pages) (2008).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

M. EHARA and H. NAKATSUJI, “Photochemistry of Biological Chemosensors, Organic Light-Emitting Diodes, and Inner-shell Electronic Processes,” *AIP Conf. Proc.* **995**, Proceedings of the Workshop on Nuclei and Mesoscopic Physics (WNMP 2007), 145–151 (2008).

B-3) 総説, 著書

江原正博, 「高精度電子状態理論の開発と応用」*化学と工業* Vol. **61** (6), pp. 576–578 (2008).

B-4) 招待講演

江原正博, 「高精度電子状態理論の開発と応用——理論精密分光と光物性科学への展開」, 第6回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム, 京都, 2008年12月.

M. EHARA, “Photochemistry of Biological Chemosensor, Organic Light-Emitting Diodes, and Inner-shell Electronic Processes,” The 13th International Workshop Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-XIII), Michigan (U.S.A.), July 2008.

M. EHARA, “Theoretical spectroscopy of the inner-shell electronic processes: SAC-CI study,” The International Workshop on Photoionization (IWP) 2008, Uppsala (Sweden), June 2008.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

近畿化学協会幹事 (2007–).

学会の組織委員等

XIIth International Congress of Quantum Chemistry, Kyoto, Japan, Local Committee Member (2006).

B-8) 大学での講義, 客員

京都大学工学研究科, 「物理化学II」, 2008年前期.

京都大学工学研究科, 「化学数学I」, 2008年後期.

金沢大学理学研究科, 「理論化学特論(理論精密分光: 光機能分子から内殻電子過程まで)」, 2008年1月29日–30日.

大阪大学大学院工学研究科, 「計算機化学」, 2008年4月17日–18日.

B-10) 競争的資金

基盤研究(C),「生物と機能性材料におけるMCDスペクトル」, 江原正博 (2001年-2002年).

特定領域研究,「高精度電子状態理論の開発と励起状態化学への展開」, 江原正博 (2006年-2009年).

JST シーズ発掘試験研究,「光機能分子における励起ダイナミクスの精密解析と理論テクノロジー」, 江原正博 (2007年).

C) 研究活動の課題と展望

我々は、高精度電子状態理論を基盤として光の関わる化学現象を研究し、新しい化学概念を構築することを目的として研究を進めている。近年、電子状態理論では大規模化が進展し、ナノ材料やバイオ系への応用が展開している。しかし、複雑な励起状態に対して信頼性のある情報を提供できる理論は限定されており、さらに高めていく必要がある。また、ダイナミクスや統計力学も化学現象を解明するために重要である。これらの理論化学によって、化学現象の本質を研究することを目指している。現在、そのレベルに到達するために、電子状態理論の開発を進め、実験で興味をもたれる化学現象を研究している。当面の課題は、高機能化と大規模化の観点から我々の方法を発展させ、化学現象に応用することである。理論精密分光では、内殻励起状態の研究を進めると共に、多電子イオン化状態を研究するための方法を開発する。オージェ過程など電子と核の運動が同じ時間スケールの現象について量子ダイナミクスを導入した方法に基づいて研究する。また、光機能性分子の電子過程の研究では、主に励起状態における構造緩和について検討する。表面-分子系の励起状態を適切に表現できる方法を確立し、光電子スペクトルの解析を行い、電子状態や吸着構造を理論的に解析する。

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
- c) 界面での物質移動の理論
- d) 溶液内光励起反応過程の理論研究
- e) 分子動力学法に基づくイオン液体の研究

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，界界面の振動分光として近年幅広い分野で用いられるようになった。とくに液体界面を詳細に観測する手法として他に類例がなく有力である。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世界に先駆けて開発してきた。これまでの計算では主に電解質水溶液界面での構造を研究対象としてきたが，本年はさらに実験グループとの共同研究によって，硫酸水溶液表面における局所的なイオンの解離平衡を明らかにする成果を得た。硫酸水溶液界面は，硫酸エアロゾル表面で起こる種々の不均質反応の場として大気化学で重要な系であるが，界面での硫酸の酸解離の状況が不明であるため構造を同定することが困難であった。本研究では和周波実験と理論計算を直接比較することによって，界面での局所的な酸解離平衡がバルク中と殆ど変わらないことを実証した。これに基づく分子シミュレーションによって，硫酸水溶液表面でのイオンの分布を明らかにした。
- b) 電子分極の効果は，分子シミュレーションにおける分子力場において重要であるが，上記の和周波発生のような物質の光学的な性質を表現するうえでも必要である。分子間相互作用と分子の光学的性質を同時に表現する分子モデリング手法の開発は，上記の研究においても鍵となる課題であり，本研究グループが開発した charge response kernel (CRK) 理論に基づいて，一般的な電子分極を表す分子モデリング手法を開発した。
- c) 界面における物質移動は，複数の相を含む不均質系での化学反応において一般的な重要性をもっている。そのなかにはバルク相での輸送現象と真の界面現象が同時に含まれており，時間・空間スケールの異なる現象が混在している。本研究では流体拡散シミュレーションを援用してバルク相での拡散輸送を分離し，界面での分子のダイナミックスを分子シミュレーションで取り扱う計算手法を開発した。
- d) 短パルスレーザーによる分光実験データ等により指摘されてきているような，励起後特に約 100 フェムト秒前後で起こっているとされている光励起反応プロセスや溶媒和過程の解析を可能にするため，溶媒分子の並進及び回転運動の効果をも取り入れた形での溶質分子周辺の溶媒分子の分布関数を時間依存形式として定式化することを可能にした。これらの拡張された方法論と，時間依存 RISM-SCF 法を用いることにより，溶質分子の電子状態に関する時間依存変化を記述する方法とを組み合わせ，溶質分子としての色素分子の光励起反応プロセスの研究に応用した。その結果より，提案した方法論は溶液内光励起後の分子内電子移動反応過程の詳細な記述に有用であることがわかった。
- e) イオン液体は陽イオンと陰イオンのペアで構成される通常の溶融塩とは異なる液体で，イオンのペアを変えて違う種類のイオン液体を合成することが容易にできるため，イオン分子間の相互作用の特性を分子レベルで理解すること

が最重要課題の一つであると考えられる。特に、イオン液体中でのダイナミクスなどを実験観測する際には異なるイオン種間の相互作用や分子内自由度の効果が顕著に表れることが期待されるが、実験データからこのような効果について直接分子レベルでの解釈を試みることは困難であり、コンピュータ・シミュレーションによる研究が有用である。従って、分子動力学シミュレーションの手法を用いてイオン液体中における陽イオン、および陰イオンの挙動に関して解析を行い、さらに実験観測との共同研究をととしてイオン間相互作用の特性についての研究を行った。研究結果より、イオン間相互作用の違いが超高速ダイナミクスの測定実験による観測スペクトルの強度の違いに大きく表れていることを見出した。またこれらの結果はイオン液体中の陽・陰イオンの大きさの違いがイオン間相互作用ポテンシャルの違いに表れていることを暗に示していることも明らかになった。

B-1) 学術論文

A. MORITA and T. ISHIYAMA, “Recent Progress in Theoretical Analysis of Vibrational Sum Frequency Generation Spectroscopy,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10**, 5801–5816 (2008).

A. MORITA and B. C. GARRETT, “Molecular Theory of Mass Transfer Kinetics and Dynamics at Gas/Water Interface,” *Fluid. Dyn. Res.* **40**, 459–473 (2008).

T. MIYAMAE, A. MORITA and Y. OUCHI, “First Acid Dissociation at an Aqueous H₂SO₄ Interface with Sum Frequency Generation Spectroscopy,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10**, 2010–2013 (2008).

N. YOSHIDA, T. ISHIDA and F. HIRATA, “Theoretical Study of Temperature and Solvent Dependence of the Free-Energy Surface of the Intramolecular Electron-Transfer Based on the RISM-SCF Theory: Application to the 1,3-Dinitrobenzene Radical Anion in Acetonitrile and Methanol,” *J. Phys. Chem. B* **112**, 433–440 (2008).

T. ISHIDA, “Optimal Charge and Charge Response Determination through Conformational Space: Global Fitting Scheme for Representative Charge and Charge Response Kernel,” *J. Phys. Chem. A* **112**, 7035–7046 (2008).

T. ISHIDA and P. J. ROSSKY, “Consequences of Strong Coupling between Solvation and Electronic Structure in the Excited State of a Betaine Dye,” *J. Phys. Chem. B* **112**, 11353–11360 (2008).

B-3) 総説, 著書

森田明弘, 「界面和周波分光の分子シミュレーション」 *アンサンブル* **10/4**, 21–24 (2008).

B-4) 招待講演

A. MORITA, “Molecular Dynamics Analysis of Vibrational SFG Spectroscopy,” Telluride Science Research Conference on Nonlinear Optics at Interfaces, Telluride (U.S.A.), June 2008.

A. MORITA, “Interface Structure of Electrolyte Aqueous Solutions Studied by a Combination of Sum Frequency Generation Spectroscopy and Molecular Simulation,” Telluride Science Research Conference on Liquid and Solid Aqueous Surfaces and Interfaces, Telluride (U.S.A.), August 2008.

森田明弘, 「分子シミュレーションに基づく和周波分光の理論の深化」 特定研究高次分子系第2回公開シンポジウム, 吹田, 2008年11月.

T. ISHIDA, “Theoretical Investigation of Time-Dependent Phenomena and Polarization Effects in Solution Systems,” Asian International Symposium, The 88th Spring Meeting of The Chemical Society of Japan, Tokyo (Japan), March 2008.

T. ISHIDA, "Theoretical Study of Ionic Liquids : How can Many-Body Interactions Play a Role in it ?" International Symposium on Structure and Reaction Dynamics of Ionic Liquids, Kanazawa (Japan), September 2008.

石田干城, 「Theoretical Investigation of Time-Dependent Phenomena in Solution Systems」スーパーコンピュータワークショップ2008, 計算科学研究センター, 岡崎, 2008年2月.

石田干城, 「溶液内光励起反応過程における溶媒効果の時間依存解析」特定領域研究「実在系の分子理論」成果報告会, 岡山大学, 2008年3月.

B-6) 受賞, 表彰

森田明弘, 平成18年度分子科学奨励森野基金 (2006).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

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).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

文部科学省科学技術・学術審議会学術分科会専門委員 (2007-2008).

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-).

競争的資金等の領域長等

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」(公募研究) 代表者 (2007).

特定領域研究「高次分子系」(公募研究) 代表者 (2008-).

特定領域研究「実在系の分子理論」(公募研究) 代表者 (2007-). (石田干城)

特定領域研究「イオン液体の科学」(公募研究) 代表者 (2008-). (石田干城)

B-8) 大学での講義, 客員

新潟大学大学院自然科学研究科, 「分子の電子分極の理論とモデリング」2008年11月25日-26日.

B-10) 競争的資金

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).

特定領域研究, 「実験と理論計算の連携による溶液界面構造の微視的解明」森田明弘 (2008年-2009年).

特定領域研究,「分子シミュレーションに基づく和周波発生の理論の深化」森田明弘 (2008年-2009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).

特定領域研究,「溶液内光励起反応プロセスと溶媒効果」石田干城 (2007年).

特定領域研究,「溶液内光励起反応プロセスと溶媒和ダイナミクス」石田干城 (2008年-2009年).

特定領域研究,「分子動力学法によるイオン液体の理論的研究」石田干城 (2008年-2009年).

C) 研究活動の課題と展望

昨年度に東北大学に転任となり,本年度は分子研の兼任として研究活動を行った。界面和周波分光の理論計算は,分子研在職中に大きく具体化することができた。分子研での数年間は,私にとって界面の研究を展開する上での基盤をつくる機会となったことを感謝している。今後はその理論をもとに実験との共同研究を広げ,界面の詳細な構造を明らかにするとともに,その構造の知見をもとに界面での化学反応や物質移動など,従来分子レベルの理解が遅れていた不均質系の化学の解明に向けて研究の領域を広げてゆきたい。(森田)

本年度は溶液内光励起反応の解析に必要な方法論に関する研究と,イオン液体中におけるイオン間ダイナミクスの分子動力学法による解析の2つを中心にして研究活動を計画し,行った。溶液内光励起反応の研究においては理論的方法についての改良の結果,計算効率が悪化され,色素分子のような比較的大きな分子を対象とした研究に適用することが可能となり,多くの知見と進展を得られた。今後はさらに生体分子系へと展開していきたい。また,イオン液体の研究についてはこれまでではおぼろげであったその対象となる系の本質を探究するための方法と理論研究としての着眼点が次第に明らかになってきたように思われる。実験研究との共同研究をも通してさらに発展させ,研究を進めていきたい。(石田)

*) 2007年4月1日東北大学大学院理学研究科教授,2007年4月1日-2008年3月31日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およびポルフィリン系化合物，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。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，多光子重合反応を分光学的に検討中である。ポルフィリン LB 膜ではモルフォロジーに対応する光学的性質の差を検出すべく実験を開始した。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分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，プラズモン共鳴の特性の解明と制御を目指した研究を行い，特徴的なプラズモンモードが観察されている。また超高速測定とその解析から，光励起後の電子温度上昇がプラズモンモードを変形させることを見いだした。
- d) 貴金属微粒子を凝集・配列した試料の近接場領域での光学的性質に関する研究を，所外との共同研究で行っている。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・サイズと凝集体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-1) 学術論文

M. K. HOSSAIN, T. SHIMADA, M. KITAJIMA, K. IMURA and H. OKAMOTO, “Raman and Near-Field Spectroscopic Study on Localized Surface Plasmon Excitation from the 2D Nanostructure of Gold Nanoparticles,” *J. Microsc.* **229**, 327–330 (2008).

K. IMURA and H. OKAMOTO, “Ultrafast Photoinduced Changes of Eigenfunctions of Localized Plasmon Modes in Gold Nanorods,” *Phys. Rev. B* **77**, 041401(R) (4 pages) (2008).

T. SHIMADA, K. IMURA, M. K. HOSSAIN, H. OKAMOTO and M. KITAJIMA, “Near-Field Study on Correlation of Localized Electric Field and Nanostructures in Monolayer Assembly of Gold Nanoparticles,” *J. Phys. Chem. C* **112**, 4033–4035 (2008).

M. K. HOSSAIN, T. SHIMADA, M. KITAJIMA, K. IMURA and H. OKAMOTO, “Near-Field Raman Imaging and Electromagnetic Field Confinement in the Self-Assembled Monolayer Array of Gold Nanoparticles,” *Langmuir* **24**, 9241–9244 (2008).

N. N. HORIMOTO, K. IMURA and H. OKAMOTO, “Dye Fluorescence Enhancement and Quenching by Gold Nanoparticles: Direct Near-Field Microscopic Observation of Shape Dependence,” *Chem. Phys. Lett.* **467**, 105–109 (2008).

B-3) 総説, 著書

井村考平, 岡本裕巳, 「近接場顕微分光イメージングによる貴金属微粒子のプラズモンモードの研究」*表面科学* **29**, 336–343 (2008).

K. IMURA and H. OKAMOTO, “Development of Novel Near-Field Microspectroscopy and Imaging of Local Excitations and Wavefunctions of Nanomaterials,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **81**, 659–675 (2008).

H. OKAMOTO and K. IMURA, “Near-Field Optical Imaging of Nanoscale Optical Fields and Plasmon Waves,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **47**, 6055–6062 (2008).

岡本裕巳, 「ナノの世界まで光で見えてしまう近接場光学」*「自然科学研究機構シンポジウム講演収録集1 見えてきた! 宇宙の謎。生命の謎。脳の謎。」*立花 隆編, 自然科学研究機構監修,(株)クパプロ, pp. 157–170 (2008).

B-4) 招待講演

岡本裕巳, 井村考平, 「近接場による金ナノ微粒子上のプラズモンの可視化」*東京工業大学応用セラミックス研究所&物質材料研究機構ナノ計測センター合同研究シンポジウム「凝縮系の超高速現象とコヒーレント制御」*東京, 2008年2月.

H. OKAMOTO and K. IMURA, “Near-field imaging of enhanced optical fields and plasmon waves,” The OSA Topical Conference on Nanophotonics 2008, Nanjing (China), May 2008.

H. OKAMOTO, “Potentiality of Scanning Near-Field Optical Microscopy,” 39th NIPS International Symposium & 7th OIB Symposium “Frontiers of Biological Imaging—Synergy of the Advanced Techniques,” Okazaki (Japan), November 2008.

井村考平, 岡本裕巳, 「貴金属ナノ構造体の近接場顕微分光研究」*日本分光学会 高感度表面・界面分光部会 第一回シンポジウム*, 筑波, 2008年12月.

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

学協会役員等員

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 (2006-2008).

学会の組織委員等

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).

The 12th Korea-Japan Joint Symposium on Frontiers of Molecular Science (Jeju), Co-chair (2007).

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, 「精密構造化学」2008年6月9日-11日.

北海道大学大学院共通講義, 「ナノテクノロジー・ナノサイエンス概論(ナノテクノロジー・ナノサイエンスと光科学)」, 2008年12月15日.

B-10) 競争的資金

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-).

池谷科学技術振興財団研究助成,「固体表面・界面歪みの利用を目的とした2次元高精度歪み検出系開発」成島哲也(2007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-).

住友財団基礎科学研究助成,「開口散乱型近接場光学顕微鏡の開発」井村考平(2007年-2008年).

科学技術振興機構さきがけ研究,「プラズモニク物質の波動関数の光制御とその応用」井村考平(2008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を引き出すこと、微小空間での反応の誘起等が可能になっており、今後もこのような方向を一つの軸として行く。そのための新たな手法の開発も行う予定である。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つつある。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目指しており、今少しの努力で20 fs程度の時間分解能が可能な段階に来ている。また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、波動関数の空間特性に関する新たな可能性を見いだしつつあり、それらを発展させる方向も継続して積極的に進める。

大 島 康 裕 (教 授) (2004 年 9 月 1 日 着 任)

A-1) 専門領域：分子分光学，化学反応動力学

A-2) 研究課題：

- a) 非断熱相互作用による量子固有状態分布移動の実現
- b) 非断熱励起によって生成する量子波束の実験的特定
- c) 大振幅な構造変形運動に関する量子波束の生成と観測
- d) 右 / 左方向に回転する量子波束の生成と観測
- e) 高分解能非線形コヒーレント分光の開発
- f) 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) 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なってきた。特に非共鳴光によるインパルスラマン励起と状態選択的プローブを組み合わせた実験手法を独自に開発し、回転運動に関する非断熱励起の実現と励起プロセスの詳細な追跡に利用してきた。これまでの2原子分子に関する研究に加えて、多原子分子の典型例としてベンゼンについて重点的に研究を行なっている。初期回転状態によって励起経路が顕著に変化することが理論的に予想されており、現在、ダブルパルス励起を用いた実験的検証を進めている。
- b) 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。そこで、ダブルパルス励起後の状態選択的プローブに基づいた新規決定法を提案し、さらに、ベンゼンを対象として実験を行なうことにより、回転量子波束の振幅および位相情報を初めて決定した。
- c) 上記 a) の非断熱励起は分子の分極に起因する現象であるため振動に関しても実現可能であり、特に、分子間振動のような低波数の振動モードの励起に有効と考えられる。このような発想に基づいて、ベンゼンクラスターを対象として実験を行い、分子間振動状態分布の非断熱移動を初めて実現した。さらに、振動量子波束の干渉を実時間領域のスペクトルとして直接観測することにも成功した。特に、通常のポンプ - プローブ法ではイオン化後の解離によって中性クラスターのサイズ選別が困難であるのに対して、状態選択的プローブの利点を活用することにより、2量体と3量体のスペクトルを明確に分離して測定することができた。
- d) 通常の非断熱励起では、古典的な右もしくは左回転に対応する量子波束の生成は不可能である。チャープした円偏光パルスを用いる手法が提案されているが、実験的な検証例はない。今回始めて、直線偏光を利用して適切にタイミングと偏光面を調節すれば、右 / 左方向回転の量子波束が生成できることを理論的に明らかにした。さらに、提案したスキームに則って回転励起した後に円偏光プローブによってスペクトルを観測することにより、空間的な orientation が実現されていることを実験的に検証した。
- e) 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た高分解能非線形コヒーレント分光用光源として、半導体レーザー出力をシード光とするパラメトリック発振レーザーの製作を行なってきた。光学系に様々な改良を加えることにより、 ~ 7 mJ/pulse という十分な出力のもとに安定に単一縦モード発振するシステムを完成した。

- f) 強レーザー場中における分子のトンネルイオン化過程について、分光学的手法を活用して解明する研究を行っており、イオン化の影響によって回転状態分布が有意に変化することを実験的に明らかにした。

B-1) 学術論文

H. HASEGAWA and Y. OHSHIMA, “Nonadiabatic Rotational Excitation of Benzene by Nonresonant Intense Femtosecond Laser Fields,” *Chem. Phys. Lett.* **454**, 148–152 (2008).

H. HASEGAWA and Y. OHSHIMA, “Quantum State Reconstruction of a Rotational Wave Packet Created by a Nonresonant Intense Femtosecond Laser Field,” *Phys. Rev. Lett.* **101**, 053002 (4 pages) (2008).

P. ANTOINE, E. FOUMOUO, B. PIRAUX, T. SHIMIZU, H. HASEGAWA, Y. NABEKAWA and K. MIDORIKAWA, “Two-Photon Double Ionization of Helium: An Experimental Lower Bound of the Total Cross Section,” *Phys. Rev. A* **78**, 023415 (11 pages) (2008).

B-4) 招待講演

Y. OHSHIMA, “Quantum-state manipulation of molecular motions with intense coherent light pulses,” The 2008 Asian-Core Symposium and Annual Meeting, Biomedical Research Center, KAIST, Deajeon (Korea), March 2008.

Y. OHSHIMA, “Coherent rotational dynamics of molecules in intense laser field,” The 15th International School on Quantum Electronics “Laser Physics and Applications,” Bourgas (Bulgaria), September 2008.

Y. OHSHIMA, “Coherent rotational/vibrational dynamics of molecules induced by intense ultrafast laser fields,” 8th Symposium on Extreme Photonics, Gamagori (Japan), November 2008.

Y. OHSHIMA, “Coherent rotational/vibrational dynamics of molecules induced by intense ultrafast laser fields,” 8th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics, Perth (Australia), November 2008.

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

学協会役員等

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–).

分子科学会幹事 (2008–).

日本分光学会先端レーザー分光部会幹事 (2006–).

学会の組織委員等

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).

分子科学討論会実行委員 (2008–2009).

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

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「精密構造化学」2007年7月9日–10日.

東京大学教養学部, 大学院総合文化研究科「基礎科学特別講義XIII, 関連基礎科学特殊講義VIII(光と分子のコヒーレントダイナミクス)」2008年7月15日–17日.

横浜市立大学理学専攻, 「基盤科学序説(レーザー光で分子の運動を制御する)」2008年11月17日.

B-10) 競争的資金

三菱油化学研究奨励基金, 「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(公募研究)「強光子場分子制御」「強光子場による分子配列・変形の分光学的キャラクタリゼーション」, 大島康裕 (2003年–2005年).

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

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

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

萌芽研究, 「マルチカラー同時発振レーザーの開発とコヒーレント分子科学への展開」, 大島康裕 (2008年–2009年).

特定領域研究(公募研究)「高次系分子科学」「非線形コヒーレント分光による分子間相互作用の精密決定」, 大島康裕 (2008年–2009年).

C) 研究活動の課題と展望

非共鳴な高強度極短パルス光との非断熱相互作用によって、振動自由度に関する量子状態分布や量子波束の操作を実現できたことは、極めて大きな前進であったと言える。当研究グループ独自の的方法論は、多様な分子系への適用の可能性を有しており、特に、サイズを明確に規定した分子クラスターにおける分子間振動の実時間ダイナミックスの研究に威力を発揮すると期待される。ベンゼンを含むヘテロクラスターへと対象を広げ、汎用性を実際に検証したい。また、回転励起の場合同様に、多段階のラマン過程が関与した量子波束生成も可能のはずである。光強度の制御や多重パルス励起の利用などによって実際に多段階励起を実現し、高振動励起分子の生成や構造異性化の誘起などへ繋げたい。また、右 / 左方向回転の量子波束を生成する方法論は実験的にも確立したので、イオンイメージング技術と結合することによって量子力学的な「右もしくは左回転」の画像化に取り組む。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たので、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する。

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を照射すると、「振動波束」と呼ばれる局在波が結合軸上を行ったり来たりするような状態を造り出す事ができる。波束の発生に際して、数フェムト秒からアト秒のサイクルで振動する光電場の位相は波束を構成する各々の振動固有状態の量子位相として分子内に保存されるので、光学サイクルを凌駕する精度で光の位相を操作すれば波束の量子位相を操作することができる。我々はこの考えに基づき、独自に開発したアト秒位相変調器 (APM) を用いて、二つのフェムト秒レーザーパルス間の相対位相をアト秒精度で操作するとともに、このパルス対によって分子内に発生した二つの波束の相対位相を同様の精度で操作する事に成功した。さらに、これらの高度に制御された波束干渉の様子を、ピコメートルレベルの空間分解能とフェムト秒レベルの時間分解能で観測する事に成功した。
- b) APM を用いて、分子内の 2 個の波束の量子干渉を自在に制御する事に成功した。また、この高精度量子干渉を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) 光電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、光電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-2) 総説, 著書

K. OHMORI, "Development of Ultrahigh-Precision Coherent Control and Its Applications," *Proc. Jpn. Acad. Ser. B* **84**, 167–175 (2008).

大森賢治, 「コヒーレンスの極限と制御～量子のさざ波を光で制御する～」*化学と工業* **61**, 108–111 (2008).

香月浩之, 大森賢治, 「アト秒精度の波束干渉制御」*レーザー研究* **36**, 31–36 (2008).

B-4) 招待講演

大森賢治, 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御」平成20年度(社)日本分光学会年次講演会, 仙台, 2008年11月.

K. OHMORI, "Ultrafast Coherent Control of Picometric Quantum Ripples in Molecules," 8th Symposium on Extreme Photonics "Ultrafast Meets Ultracold," Gamagori (Japan), November 2008.

大森賢治, 「Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules」第四回量子情報未来テーマ開拓研究会, 南城, 2008年9月.

大森賢治, 「量子さざ波をアト秒精度で制御する」2008年秋季第69回応用物理学会, 春日井, 2008年9月.

大森賢治, 「量子さざ波: 量子の波を光で制御する」池上研究会(先端科学セミナー)名古屋, 2008年8月.

大森賢治, 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御」ERATO 上田マクロ量子プロジェクト研究戦略セミナー, 東京, 2008年7月.

大森賢治, 「量子さざ波; 量子の波を光で制御する」名古屋大学グローバルCOE プログラム「分子性機能物質科学の国際教育研究拠点形成」講義「化学系セミナー」名古屋, 2008年6月.

大森賢治, 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御」第2回分子科学会シンポジウム, 大阪, 2008年5月.

K. OHMORI, "Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules," Norman Hascoe Distinguished Lecture Series, University of Connecticut, Storrs (U.S.A.), March 2008.

大森賢治, 「分子の中のピコメートルスケールの量子さざ波を可視化して制御する」物質・材料研究機構ナノ計測センター——東京工業大学応用セラミックス研究所シンポジウム「凝縮系の超高速現象とコヒーレント制御」東京, 2008年2月.

K. OHMORI, "Ultrafast Coherent Control of Picometric Quantum Ripples in Molecules," The 6th Asia Pacific Laser Symposium, Nagoya (Japan), January 2008.

K. OHMORI, "Quantum Coherence in Molecules; Observation and Control," COAST/CORAL Winter School on Advanced Laser Science, Echigo Yuzawa (Japan), January 2008.

K. OHMORI, "Tailoring Picometric Quantum Carpets by Controlling Ultrafast Wave-Packet Interference," 38th Winter Colloquium on The Physics of Quantum Electronics, Snowbird (U.S.A.), January 2008.

H. KATSUKI, "Influence of Strong Laser Pulses on the Amplitudes and Phases of Vibrational Wave Packets; Model Study of Decoherence," 5th Asian Conference on Ultrafast Phenomena, National university of Singapore (Singapore), January 2008.

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

学協会役員等

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 (2006–2008).

原子衝突研究協会運営委員 (2006–2008).

学会の組織委員等

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

名古屋大学グローバルCOEプログラム「分子性機能物質科学の国際教育研究拠点形成」講義, 「化学系セミナー(量子さざ波; 量子の波を光で制御する)」, 2008年6月10日.

Sokendai Asian Winter School “Molecular Sciences on Different Space-Time Scales,” “Quantum Ripples in Molecules; Observation and Control,” 2008年12月11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) 競争的資金

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量子制御」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。さらに, 単一分子の操作を目指して, 冷却分子の生成を試みる。

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，液体・溶液（溶質，溶媒）分子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る。現在，有機デバイス材料の評価に利用を開始した。
- 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 を引き続き開発・整備している。

B-1) 学術論文

B. WINTER, E. F. AZIZ, N. OTTOSSON, M. FAUBEL, N. KOSUGI and I. V. HERTEL, "Electron Dynamics in Charge-Transfer-to-Solvent States of Aqueous Chloride Revealed by Cl^- 2p Resonant Auger-Electron Spectroscopy," *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 7130–7138 (2008).

M. YAMAZAKI, J. ADACHI, Y. KIMURA, A. YAGISHITA, M. STENER, P. DECLEVA, N. KOSUGI, H. IWAYAMA, K. NAGAYA and M. YAO, "Decay Channel Dependence of the Photoelectron Angular Distributions in Core-Level Ionization of Ne Dimers," *Phys. Rev. Lett.* **101**, 043004 (4 pages) (2008).

A. LINDGREN, N. KOSUGI, M. GISSELBRECHT, A. KIVIMÄKI, F. BURMEISTER, A. NAVES de BRITO and S. L. SORENSEN, "Core Localization and σ^* Delocalization in the O 1s Core-Excited Sulfur Dioxide Molecule," *J. Chem. Phys.* **128**, 114311 (10 pages) (2008).

I. L. BRADEANU, N. KOSUGI, R. FLESCH and E. RÜHL, "Site-Dependent Spectral Shifts in Core-to- π^* Excitations of Pyridine Clusters," *J. Phys. Chem. A* **112**, 9192–9199 (2008).

M. NAGASAKA, T. HATSUI and N. KOSUGI, "Exchange Interaction in Kr 3d Excitations of Small Krypton Clusters," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **166-167**, 16–20 (2008).

M. NAGASAKA, H. KONDOH, K. AMEMIYA, T. OHTA and Y. IWASAWA, "Proton Transfer in a Two-Dimensional Hydrogen-Bonding Network: Water and Hydroxyl on a Pt(111) Surface," *Phys. Rev. Lett.* **100**, 106101 (4 pages) (2008).

B-4) 招待講演

N. KOSUGI, "Resonant Auger spectra of Kr clusters and aqueous chlorides," 21th International Conference on X-ray and Inner-shell Processes X'08 Paris (France), June 2008.

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

学協会役員等

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

学会の組織委員等

VUV 真空紫外光物理国際会議国際諮問委員 (2004–2008).

X線物理及び内殻過程の国際会議国際諮問委員 (2006–2008).

VUVX 真空紫外光物理及びX線物理国際会議国際諮問委員 (2008–2012).

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

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, 2009).

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, 国際プログラム委員長 (2007–2009).

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, 2008).

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, 大学共同利用機関等の委員等

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 (2003-2004).

日本学術振興会国際科学協力事業委員会委員 (2002-2003), 科学研究費委員会専門委員 (2007-2008).

科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業(さきがけ)領域アドバイザー (2008-).

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), 物質構造科学研究所運営協議員会委員 (2001-2003), 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-), 登録機関利用活動評価委員会委員 (2008).

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), 放射光研究施設評価分科会委員 (2001-2002), 放射光戦略ワーキンググループ会議委員 (2007-), 放射光科学国際諮問委員会電子物性分科会委員 (2008).

台湾放射光科学国際諮問委員会委員(2008-).

B-8) 大学等での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 共通専門基礎科目「基礎光化学」2008年12月.

Université Pierre et Marie Curie, Laboratoire de Chimie Physique-Matière et Rayonnement, 客員教授, 2008年-2009年.

B-10) 競争的資金

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).

基盤研究(B), 「軟X線内殻分光による分子間相互作用系の局所電子構造研究」小杉信博 (2008年-2010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

昨年度まで4年ほど掛けた方法論の開発研究もほぼ終了し,測定を順次,開始している。測定対象の現象としてはこれまでの内殻励起過程から脱励起過程に研究の重点をシフトし,測定対象の物質系としてはこれまでの孤立分子系や分子固体を中心とした研究からクラスターや液体・溶液の研究に重点をシフトしつつある。そのため,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・励起状態の研究を液体・溶液のようにこれまで困難とされてきた系に展開すべく実験装置と理論計算コードを整備した。内殻励起状態を中間状態とする二次光学過程では,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,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。現在,完全に入れ替わった新しい研究室メンバーによって,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展開している。

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）。最近は気相及び凝縮相の 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，通常の分子では前例のない特異な単分子解離現象を見出した。解離遷移状態のポテンシャルエネルギー曲面の情報を得るための画像観測装置を製作し，第一段階として C_{60} 分子線の 3 次元速度分布画像を直接測定し解析・評価した（特許出願中）。
- 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. YANG, Y. Y. LI, L. X. WEI, C. HUANG, J. WANG, Z. Y. TIAN, R. YANG, L. S. SHENG, Y. W. ZHANG and F. QI, "An Experimental Study of the Premixed Benzene/Oxygen/Argon Flame with Tunable Synchrotron Photoionization," *Proc. Combust. Inst.* **31**, 555–563 (2007).

B. P. KAFLE, H. KATAYANAGI, MD. S. I. PRODHAN, H. YAGI, C. HUANG and K. MITSUKE, "Absolute Total Photoionization Cross Section of C_{60} in the Range of 25–120eV: Revisited," *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 014302 (5 pages) (2008).

H. KATAYANAGI, B. P. KAFLE, J. KOU, T. MORI, K. MITSUKE, Y. TAKABAYASHI, E. KUWAHARA and Y. KUBOZONO, "The $4d \rightarrow 4f$ Dipole Resonance of the Pr Atom in an Endohedral Metallofullerene, $Pr@C_{82}$," *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **109**, 1590–1598 (2008).

M. HASHIMOTO, T. YOSHIDA, H. YAGI, M. TAKIZAWA, A. FUJIMORI, M. KUBOTA, K. ONO, K. TANAKA, D. H. LU, Z. -X. SHEN, S. ONO and Y. ANDO, "Doping Evolution of the Electronic Structure in the Single-Layer Cuprate $Bi_2Sr_{2-x}La_xCuO_{6+\delta}$: Comparison with Other Single-Layer Cuprates," *Phys. Rev. B* **77**, 094516 (9 pages) (2008).

B-4) 招待講演

見附孝一郎, 「フラーレンの運動量画像分光——装置の設計, 製作と所期性能」理研シンポジウム 原子衝突から生体分子分析までに広がる化学反応研究の最前線, 理化学研究所, 和光, 2008年1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20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, 2008年6月及び11月.

見附孝一郎, 「色素増感太陽電池の基本原理解」講演と実習指導, 東海北陸地区国立大学等法人技術職員研修, 分子科学研究所, 岡崎, 2008年9月.

B-5) 特許出願

特願 2008-113645, 「原子 / 分子ビームの3次元速度分布測定方法及び装置」見附孝一郎, 片柳英樹(自然科学研究機構) 2008年.

B-6) 受賞, 表彰

見附孝一郎, 日本化学会欧文誌BCSJ賞(2001).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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(2004–2008).

学会の組織委員等

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).

第3回分子科学討論会実行委員 (2008–).

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

The Winter School of Sokendai/Asian Core Program “Frontiers of Material, Photo-, and Theoretical Molecular Sciences,” “Electronic structures and electron dynamics of free molecules,” 2008年1月24日–26日.

B-9) 学位授与

Bhim P. Kafle, “Study of Photoionization and Dissociation Dynamics of the Fullerene C₆₀,” 2008年3月, 博士(理学)

B-10) 競争的資金

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).

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).

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).

若手研究(B), 「放射光を用いた“イオン液体”の液体および気体状態での光電子分光」片柳英樹 (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).

特定領域研究, 「放射光を用いたイオン液体のドメイン構造の検証と磁性イオン液体の構造解析」片柳英樹, 見附孝一郎 (2006年-2007年).

基盤研究(C), 「フラーレンの光解離で生成する中性フラグメント散乱分布の状態選択的画像観測」片柳英樹 (2008年-2010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: フラーレンの波長掃引光電子分光と高励起フラーレ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, 有機太陽電池の発電メカニズム解明とエネルギー変換効率の向上。

菱川 明 栄 (准教授) (2003年4月1日着任)

A-1) 専門領域：強レーザー場科学

A-2) 研究課題：

- a) 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) 強レーザー場における分子の核および電子ダイナミクスを明らかにするために下記の研究を行った。
 - (i) 強レーザー場 (8×10^{14} W/cm²) におけるアセチレン (C₂H₂) の異性化反応 HCCH → CCH₂ を、3体クーロン爆発過程, C₂H₂³⁺ → H⁺ + C⁺ + CH⁺, に着目して調べた。レーザーパルス幅が 9 fs と極めて短い場合はアセチレン型構造がほぼ保たれているのに対して、パルス幅を 35 fs とした場合にはピニリデン型への構造変形が誘起されることが見いだされ、この異性化反応が極めて短い時間でおこることを明らかにした。
 - (ii) 9 fs 強レーザー場 (1×10^{15} W/cm²) によって生成した C₆D₆³⁺ からの3体解離が、すべて C₄D₄²⁺ 等の生成を経由した段階的な過程によること、RRKM 理論による統計的な予想には従わない特異な過程であることを見いだした。
 - (iii) 新たに電子 - イオンコインシデンス運動量画像計測系の構築を行った。親イオン CS₂⁺ の光電子画像には多光子吸収を反映した同心円状の分布が観測されたのに対して、解離性イオン化によって生成した S⁺ および CS⁺ イオンとのコインシデンス光電子画像は、明瞭な構造のないブロードな分布を示すことを見だし、強レーザー場における解離性イオン化過程が 従来考えられてきたような親分子イオン CS₂⁺ の光吸収によるものではないことを初めて示した。
- b) 希ガス非線形媒質 (Ne) 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。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。これによって得られた単一次数 (59 次) 高調波を用いて、Xe および CH₃I からの内殻光電子およびオージェ電子の観測に成功した。

B-1) 学術論文

A. HISHIKAWA, A. MATSUDA, M. FUSHITANI and E. J. TAKAHASHI, "Acetylene-Vinylidene Isomerization in Ultrashort Intense Laser Fields Studied by Triple-Ion Coincidence Momentum Imaging," *J. Chem. Phys.* **128**, 084302 (5 pages) (2008).

B-3) 総説, 著書

菱川明栄, 「アト秒ダイナミクス」, *パリティ* vol. 23, No. 01, pp. 13-15 (2008).

菱川明栄 松田晃孝 伏谷瑞穂 高橋栄治, 「クーロン爆発イメージングによる分子内水素移動反応の実時間可視化」, *レーザー加工学会誌* **15**, 46-49 (2008).

B-4) 招待講演

A. HISHIKAWA, “Visualizing Chemical Reactions by Few-cycle Intense Laser Pulses,” 11th International Conference on Multiphoton Processes, Heidelberg (Germany), September 2008.

M. FUSHITANI, A. MATSUDA, E. J. TAKAHASHI and A. HISHIKAWA, “Time-resolved Reaction Imaging by using Intense Few-cycle Laser Pulses and Laser High Order Harmonics,” 8th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics, Perth (Australia), November 2008.

菱川明栄, 「極短パルス強レーザー場における分子過程」東京工業大学応用セラミックス研究所&物質材料研究機構ナノ計測センター合同シンポジウム「凝縮系の超高速現象とコヒーレント制御」東京工業大学, 大岡山, 2008年2月.

菱川明栄, 「サブ10フェムト秒クーロン爆発イメージングでみる超高速分子過程」理研・分子研合同シンポジウム「エクストリームフォトニクス研究」理化学研究所, 和光, 2008年5月.

菱川明栄, 「高強度極短レーザーパルスによる実時間反応イメージング」応用物理学会シンポジウム「アト秒量子ダイナミクス」中部大学, 春日井市, 2008年9月.

伏谷瑞穂, 「レーザー高次高調波を用いた超高速反応イメージング法の開発」日本分光学会先端レーザー分光部会, 第4回先端的レーザー分光の若手シンポジウム, 理化学研究所, 和光市, 2008年12月.

菱川明栄, 「極短パルス強レーザー場における分子過程」分光学会中部支部平成20年度講演会, 名古屋大学, 名古屋, 2008年12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

学協会役員等

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, 2006–2007).

分子科学研究会委員 (2002–2006).

日本分光学会中部支部幹事 (2003–2008).

強光子場科学懇談会企画委員 (2004–2007).

日本化学会東海支部代議員 (2007–2008).

強光子場科学懇談会幹事 (2007–).

学会の組織委員等

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).

東京工業大学応用セラミクス研究所&物質材料研究機構ナノ計測センター合同シンポジウム「凝縮系の超高速現象とコヒーレント制御」主催者 (2008).

B-8) 大学での講義，客員

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

B-10) 競争的資金

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(公募研究)「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) 非共鳴強レーザー場中分子における電子励起過程を明らかにするため，解離性イオン化過程に着目し，電子 - イオン多重相関計測からその理解を進める。特に繁政グループと共同で進めている多重電子 - イオン同時計測は，これまでにない新しいアプローチを提案するものと期待している。
- 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1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加速器の研究
- 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年度の大規模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を進めている。ハードウェアの整備はほぼ完了し、試験的なトップアップ運転を開始した。入射効率，放射線遮蔽，放射光利用実験への影響低減などの課題に取り組んでいる。
- 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進めている。これまでに TiSa の三倍波の発生に成功し，さらに円偏光高調波の発生にも成功した。
- 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様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

S. BIELAWSKI, C. EVAIN, T. HARA, M. HOSAKA, M. KATOH, S. KIMURA, A. MOCHIIHASHI, M. SHIMADA, C. SZWAJ, T. TAKAHASHI and Y. TAKASHIMA, "Tunable Narrowband Terahertz Emission from Mastered Laser-Electron Beam Interaction," *Nat. Phys.* **4**, 390–393 (2008).

M. LABAT, G. LAMBERT, M. E. COUPRIE, M. SHIMADA, M. KATOH, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, T. HARA and A. MOCHIIHASHI, "Coherent Harmonic Generation Experiments on UVSOR-II Storage Ring," *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A* **593**, 1–5 (2008).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

M. LABAT, C. BRUNI, G. LAMBERT, M. E. COUPRIE, A. MOCHIIHASHI, M. SHIMADA, M. KATOH, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA and T. HARA, "Electron Beam Dynamics under Coherent Harmonic Generation Operation at UVSOR-II," *Proc. 29th Internat. Free Electron Laser Conf.* 236–239 (2007).

M. LABAT, G. KHALILI, M. E. COUPRIE, A. MOCHIHASHI, M. SHIMADA, M. KATOH, M. HOSAKA and N. YAMAMOTO, "Operation of the UVSOR-II CHG FEL in Helical Configuration," *Proc. 11th Euro. Particle Accel. Conf.* 106–108 (2008).

N. YAMAMOTO, M. KATOH, M. ADACHI, M. SHIMADA, S. KIMURA, A. MOCHIHASHI, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, S. BIELAWSKI, C. SZWAJ, C. EVAIN, T. HARA and T. TAKAHASHI, "Microfabrication of Relativistic Electron Beam by Laser and Its Application to Thz Coherent Synchrotron Radiation," *Proc. 11th Euro. Particle Accel. Conf.* 163–165 (2008).

M. ADACHI, M. KATOH, A. MOCHIHASHI, M. SHIMADA, J. YAMAZAKI, K. HAYASHI, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA and N. YAMAMOTO, "Status of UVSOR-II and Light Source Developments," *Proc. 11th Euro. Particle Accel. Conf.*, 2046–2048 (2008).

B-3) 総説，著書

加藤政博，島田美帆，持箸 晃，安達正浩，保坂将人，高嶋圭史，山本尚人，「UVSOR-IIにおけるコヒーレントシンクロトロン光の研究」，*放射光(Journal of Japanese Society for Synchrotron Radiation Research)* **21**, No.5, 262–268 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

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–).

日本加速器学会評議員 (2008–).

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).

競争的資金等の領域長等

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 (2005–2007).

科学研究費補助金基盤研究(B) 代表者 (2008–).

その他

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).

佐賀県シンクロトロン光応用研究施設・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).

理化学研究所X線自由電子レーザー安全性評価委員会委員 (2006–).

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) 競争的資金

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-2007年).

基盤研究(B),「電子ビームのレーザー微細加工によるコヒーレント光発生」加藤政博(2008年-).

文部科学省光・量子科学研究拠点形成に向けた基盤技術開発プロジェクト 量子ビーム基盤技術開発プログラム, 高度化ビーム技術開発課題,「リング型光源とレーザーを用いた光発生とその応用」, 加藤政博(2008年-).

C) 研究活動の課題と展望

UVSOR は2003年度の大規模な改造を中心とする一連の高度化により, 低エネルギーのシンクロトロン光源としては世界的にも最高レベルの性能を有するに至った。現在, 高度化された加速器群の性能を最大限引き出す努力を継続している。ビーム寿命の問題を究極的に解決するためのトップアップ運転の導入に向けて, シンクロトロンのフルエネルギー化を実現, 現在は, 試験運転を通じて, 入射効率の向上, 漏洩放射線の低減, 放射光利用実験への影響の低減に関する技術開発に取り組んでいる。

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。これまでに 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。この研究テーマは, 量子ビーム基盤技術開発プログラムに採択され, 2008年度から5年間の予定で委託研究として実施されることが決まった。電子蓄積リングの一部改造を含むシステムの増強により, 大強度化, 安定化, 利用法の開拓を進めていく予定である。

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。

巨大磁気抵抗物質電子ドーピング EuO 単結晶薄膜の育成と電子状態の評価

低温・高圧下テラヘルツ分光による SmS の excitonic instability による絶縁体金属転移

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

強相関系 YbIr₂Si₂，Yb₁₄MnSb₁₁，Ba₈Ga₁₆Ge₃₀ 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。新しいアイデアで開発してきた 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 $h\nu = 6 \sim 40$ eV のエネルギー範囲で 実用分解能では世界トップレベルの性能が得られ 昨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，今後予定されている 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

H. J. IM, T. ITO, H. -D. KIM, S. KIMURA, K. E. LEE, J. B. HONG, Y. S. KWON, A. YASUI and H. YAMAGAMI, "Direct Observation of Dispersive Kondo Resonance Peaks in a Heavy-Fermion System," *Phys. Rev. Lett.* **100**, 176402 (4 pages) (2008).

T. MIZUNO, T. IIZUKA, S. KIMURA, K. MATSUBAYASHI, K. IMURA, H. S. SUZUKI and N. K. SATO, "Excitonic Instability in the Transition from the Black Phase to the Golden Phase of SmS under Pressure Investigated by Infrared Spectroscopy," *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 113704 (4 pages) (2008).

S. KIMURA, T. ITO, H. MIYAZAKI, T. MIZUNO, T. IIZUKA and T. TAKAHASHI, "Electronic Inhomogeneity EuO: Possibility of Magnetic Polaron States," *Phys. Rev. B* **78**, 052409 (4 pages) (2008).

S. BIELAWSKI, C. EVAIN, T. HARA, M. HOSAKA, M. KATOH, S. KIMURA, A. MOCHIHASHI, M. SHIMADA, C. SZWAJ, T. TAKAHASHI and Y. TAKASHIMA, "Tunable Narrowband Terahertz Emission from Mastered Laser-Electron Beam Interaction," *Nat. Phys.* **4**, 390–393 (2008).

J. ONOE, T. ITO and S. KIMURA, "Time Dependence of the Electronic Structure of an Electron-Beam-Irradiated C₆₀ Film," *J. Appl. Phys.* **104**, 103706 (3 pages) (2008).

K. E. LEE, C. I. LEE, H. J. OH, M. A. JUNG, B. H. MIN, H. J. IM, T. IIZUKA, Y. S. LEE, S. KIMURA and Y. S. KWON, "Optical Properties of the Charge-Density-Wave Compound CeTe₂," *Phys. Rev. B* **78**, 134408 (5 pages) (2008).

K. E. LEE, C. I. LEE, H. J. OH, H. J. IM, T. PARK, S. KIMURA and Y. S. KWON, "Optical Evidence for a Change in the Heavy Electron Fermi Surface at a Magnetic Quantum Critical Point of CeNi_{1-x}Co_xGe₂," *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 285202 (5 pages) (2008).

G. FUNABASHI, H. FUJIWARA, A. SEKIYAMA, M. HASUMOTO, T. ITO, S. KIMURA, P. BALTZER and S. SUGA, "Ultrahigh-Resolution Vacuum Ultraviolet Light Source System for Extremely Low Energy Photoelectron Spectroscopy," *Jpn. J. Appl. Phys.* **47**, 2265–2269 (2008).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

S. KIMURA, H. OKAMURA, T. NANBA and H. KIMURA, "Preface," *Infrared Phys. Tech.* **51**, 361–362 (2008).

T. YAJI, Y. YAMAMOTO, T. OHTA and S. KIMURA, "A New Beamline for Infrared Microscopy in the SR Center of Ritsumeikan University," *Infrared Phys. Tech.* **51**, 397–399 (2008).

Y. Y. SONG, K. E. LEE, J. B. HONG, H. J. IM, S. KIMURA and Y. S. KWON, "Dramatic Change of Optical Properties at a Quantum Critical Point in the Heavy Fermion System CeNi_{1-x}Co_xGe₂," *Infrared Phys. Tech.* **51**, 485–487 (2008).

C. I. LEE, K. E. LEE, Y. Y. SONG, H. J. IM, S. KIMURA and Y. S. KWON, "Hybridization Gap-Open in CeIn₃," *Infrared Phys. Tech.* **51**, 488–490 (2008).

S. KIMURA, T. MIZUNO, K. MATSUBAYASHI, K. IMURA, H. S. SUZUKI and N. K. SATO, "Infrared Study on the Electronic Structure of SmS in the Black Phase," *Physica B* **403**, 805–807 (2008).

H. MIYAZAKI, T. ITO, S. OTA, M. KATO, S. YAGI, K. SODA, H. J. IM and S. KIMURA, "Angle-Resolved Photoemission Study on the Ferromagnetic Ordering of EuO Thin Films," *Physica B* **403**, 917–918 (2008).

J. SICHELSCHMIDT, S. KIMURA, C. KRELLNER, C. GEIBEL and F. STEGLICH, "Optical Properties of YbRh₂Si₂ and YbIr₂Si₂: A Comparison," *Physica B* **403**, 775–777 (2008).

B-4) 招待講演

S. KIMURA, "Infrared Synchrotron Radiation," India-Japan Workshop on Quantum Beam Science, Kolkata (India), March 2008.

S. KIMURA, "Optical and photoelectrical studies on the electronic structure of Ce-compounds," The First Nagoya Summer School on Science of Molecular Assembly and Biomolecular Systems, Okazaki (Japan), August 2008.

S. KIMURA, "Origin of Middle-Infrared Peaks in Cerium-Compounds," Joint Workshop on Heavy Fermion Systems 2008, Suwon (Korea), October 2008.

S. KIMURA, “Optical and photoelectrical studies on the electronic structure of rare-earth compounds across the quantum critical point,” JAEA Actinide Network 1st International Workshop on Synchrotron Radiation Light Source for Actinide Research, Tokai (Japan), October 2008.

木村真一, 「大強度THz光源への期待」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, 草津, 2008年1月.

木村真一, 「強相関電子系の量子臨界点近傍の電子状態」名古屋大学物理教室セミナー, 名古屋市, 2008年5月.

木村真一, 高橋俊晴, 「相対論的電子ビームからの大強度THzコヒーレント放射光」第69回応用物理学会学術講演会, THz電磁波技術研究会企画「高強度テラヘルツ波光源開発の最先端」愛知県春日井市, 2008年9月.

木村真一, 「赤外放射光の利用」電気学会「量子ビームによるナノバイオエレクトロニクス技術調査専門委員会」愛知県岡崎市, 2008年11月.

木村真一, 「重い電子系の角度分解光電子分光」PF研究会「高分解能角度分解光電子分光研究と将来展望」つくば市, 2008年12月.

T. ITO, “Evidence of Three-Dimensional Charge-Density-Wave Formation on CeTe₂: VUV Three-Dimensional Angle-Resolved Photoemission Study,” Joint Workshop on Heavy Fermion Systems 2008, Suwon (Korea), October 2008.

伊藤孝寛, 「光電子分光によるf電子系の電子物性」平成19年度東工大原子炉研・COE-INESワークショップ「f電子系の化学と物理」東京, 2008年1月.

伊藤孝寛, 「放射光を用いた光物性実験による強相関電子系の電子状態」エクストリームフォトニクスセミナー, 和光, 2008年7月.

H. J. IM, “Variation of Bulk Ce 4f-Fermi Surface in Heavy Fermion Systems,” Joint Workshop on Heavy Fermion Systems 2008, Suwon (Korea), October 2008.

寺嶋健成, “Autocorrelation Analyses of Photoemission Data and FT-STs Experiments,” 日本物理学会2008年秋季大会, 盛岡市, 2008年9月.

T. IIZUKA, “Infrared Spectroscopy on CeIn₃ under Pressure,” Joint Workshop on Heavy Fermion Systems 2008, Suwon (Korea), October 2008.

B-6) 受賞, 表彰

木村真一, 平成20年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 科学技術賞(研究部門)(2008).

木村真一, 平成20年度森田記念賞(2008).

木村真一, 日本放射光学会・第5回若手奨励賞(2001).

宮崎秀俊, 第17回学生による材料フォーラム奨励賞(2007).

宮崎秀俊, 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学生会員口頭発表賞(2008).

宮崎秀俊, 第18回学生による材料フォーラム奨励賞(2008).

宮崎秀俊, PF研究会「高分解能角度分解光電子分光研究と将来展望」優秀ポスター賞(2008).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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, 2007–2010).
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, 2008–2010).
UVSOR 利用者懇談会世話人 (2000–2001).

学会の組織委員等

11th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure, Member of International Program Committee (Nara, Japan, October 2009).

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

3rd Asia Oceania Forum for Synchrotron Radiation Research, Member of Program Advisory Committee, (Melbourne, Australia, December 2008).

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).

UVSOR Workshop on Terahertz Coherent Synchrotron Radiation, Co-Chair (Okazaki, 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, 大学共同利用機関等の委員等

(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 (2003–2008).

(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 (2003–2008).

学会誌編集委員

真空誌編集委員 (2007–2009).

Proceedings of 4th International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator-Based Sources, Special Issue of Infrared Science and Technology **Vol. 51**, Elsevier, Editor (2008).

B-8) 大学での講義，客員

名古屋大学物理教室学生向けセミナー，「シンクロトロン光を用いた固体電子物性」2008年5月23日。

名古屋大学大学院理学研究科，客員准教授，2008年4月-2009年3月。

立命館大学グローバル・イノベーション研究機構，特別招聘准教授，2008年4月-2009年3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) 競争的資金

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(公募研究)「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・さきかけ研究21，「赤外磁気光学イメージング分光による局所電子構造」木村真一(1999年-2002年)。

日本原子力研究所・黎明研究，「赤外・テラヘルツ磁気光学素子としての低密度キャリアf電子系の基礎研究」木村真一(1999年)。

(財)稲森財団・助成金，「テラヘルツ磁気光学材料としての少数キャリア強相関伝導系の研究」木村真一(1999年)。

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

(財)寅吉奨学会・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)，「マイクロ機能イメージングによる強相関電子系のフェルミオロジー」伊藤孝寛(2008年-2009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)。

特別研究員奨励費，「低エネルギー高輝度放射光励起光電子分光による高温超伝導体電子・ホール対称性の研究」寺嶋健成(2008年-2010年)。

C) 研究活動の課題と展望

2006年から建設してき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)が稼働しはじめ，これまでに立ち上げ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)を使った研究の場が整備され，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)の研究が順調に進んでいる。また，機能性薄膜試料を育成し，そのままの状態での電子状態を評価する手法(in-situ光電子，X線磁気円二色性)も確立しつつある。これらの方法を用いて，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。2008年夏，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の建設を行い，現在，ビームラインの調整作業を進めている。BL6U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いる。分光器は，UVSORでは初めての導入となる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複雑な脱励起過程が明らかにされた。これらの実験研究は，現在，SPring-8のBL27SUで行っているが，これをBL6Uがカバーする低エネルギー領域に拡張し，新たな国際共同研究を実施するべく，高分解能電子エネルギー分析装置の開発を開始した。
- c) 国際共同研究の一つの柱として，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研究を継続している。一つの光子の吸収により内殻電子と価電子が同時に放出される過程，或いは光二重電離過程における段階的過程の検出，更には，内殻電子が二つ放出される過程や価電子の三重光電離過程の観測にも成功した。これらの実験研究は，KEK-PFやドイツの放射光施設 BESSYで行われてきたが，2007年度に同様の磁気ボトル型分析器をUVSORに整備し，テスト実験を行ってきた。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継続して行っている。

B-1) 学術論文

Y. HIKOSAKA, P. LABLANQUIE, E. SHIGEMASA, T. AOTO and K. ITO, "Sub-Natural Linewidth Spectroscopy on Core-Valence Doubly Ionized States of OCS," *J. Phys. B* **41**, 025103 (4 pages) (2008).

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, E. SHIGEMASA, P. LABLANQUIE, F. PENENT and K. ITO, "Auger Decays of 1s Shake-Up and Shake-Off States in N₂ Molecules," *J. Phys. B* **41**, 135101 (6 pages) (2008).

Y. HIKOSAKA, Y. VELKOV, E. SHIGEMASA, T. KANEYASU, Y. TAMENORI, J. LIU and F. GEL'MUKHANOV, "X-Ray Absorption Measured in the Resonant Auger Scattering Mode," *Phys. Rev. Lett.* **101**, 073001 (4 pages) (2008).

Y. HIKOSAKA, T. AOTO, K. ITO, Y. TERASAKA, R. HIRAYAMA and E. MIYOSHI, “Threshold Photoelectron Spectroscopy on Inner-Valence States of NO,” *J. Chem. Phys.* **128**, 044320 (6 pages) (2008).

Y. VELKOV, Y. HIKOSAKA, E. SHIGEMASA, S. GAVRILYUK and F. GEL’MUKHANOV, “X-Ray Absorption Spectroscopy Measured in Resonant X-Ray Scattering Mode: How Unnatural Is the Resolution beyond the Natural Width?” *Chem. Phys. Lett.* **465**, 153–156 (2008).

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, P. LABLANQUIE, F. PENENT, L. ANDRIC, G. GAMBLIN, J. H. D. ELAND, Y. TAMENORI, T. MATSUSHITA and E. SHIGEMASA, “Mechanisms of Spontaneous Two-Electron Emission from Core-Excited States of Molecular CO,” *Phys. Rev. Lett.* **101**, 183003 (4 pages) (2008).

Y. HIKOSAKA, T. KANEYASU and E. SHIGEMASA, “Formation of Metastable Fragments around the Cl 2p Ionization Thresholds of HCl,” *J. Korean Phys. Soc.* **53**, 3798–3801 (2008).

B-4) 招待講演

彦坂泰正, 「多電子同時計測による原子分子の多重イオン化の研究」理研シンポジウム「原子衝突から生体分子分析まで広がる化学反応研究の最前線」理化学研究所, 2008年1月.

彦坂泰正, 「PF シングルバンチ運転を利用した原子多重光電離ダイナミクスの研究」第25回PF シンポジウム, 高エネルギー加速器研究機構, 2008年3月.

彦坂泰正, 「多電子同時計測による原子分子の多重イオン化の研究」日本物理学会第63回年次大会, 第2回(2008年)日本物理学会若手奨励賞受賞講演, 近畿大学, 2008年3月.

彦坂泰正, 「磁気ボトル型電子エネルギー分析による原子分子の多重電離の研究」PF 研究会「PF リングのトップアップ・シングルバンチ運転利用研究と今後の発展について」高エネルギー加速器研究機構, 2008年11月.

Y. HIKOSAKA, “Electron coincidence study on multiple photoionization dynamics in atoms,” The International Workshop on Photoionization (IWP) 2008, SättraBrunn (Sweden), June 2008.

B-6) 受賞, 表彰

彦坂泰正, 日本物理学会若手奨励賞 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会渉外委員 (2005–2006).

日本放射光学会評議員 (2006–2008).

日本放射光学会渉外幹事 (2007–).

学会の組織委員等

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).
- 日本放射光学会学会誌編集委員 (2008-). (彦坂泰正)

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

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

B-10) 競争的資金

- 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二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).
- 島津財団研究開発助成, 「超高効率・高分解能電子エネルギー分析器の開発研究」 彦坂泰正 (2008年).

C) 研究活動の課題と展望

我々の専用ビームラインとして建設計画を立案した新しいアンジュレータライン, BL6Uは, 当初の予定通り, 2008年の夏期シャットダウン中に, 全てのビームライン構成要素の設置作業が終了した。その後, 光学素子のインストール, 真空系の立ち上げ, 及びインターロック・ビームライン制御系の構築におけるUVSOR 技術職員の献身的な努力の結果, 2008年最後のユーザー利用の週に, 最初のアンジュレータ放射をビームラインに導入することが出来た。今後, 光学系の調整作業を進めながら, 制御系の不具合の洗い出しや, 計測システム及びビームライン全体の整備を進めて行く予定である。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電子分光法によって解明することを計画している。そのために必要となる実験システムの構築を行っている。これにより, SPring-8で行っている300 eV以上の光エネルギー領域での電子分光実験を, 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, 高励起一価分子イオンや二価分子イオンの分光情報を取得する実験手法の開発も併せて行う予定である。

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

近年のマイクロ固体フォトニクスの進展 [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) パルク擬似位相整合 (QPM) 素子: 大口径周期分極反転 MgO:LiNbO₃ (PPMgLN)] を先導すると共に, 固体レーザー, 非線形光学波長変換に関し最も権威ある *Advanced Solid-State Photonics* (OSA のトピカルミーティング) を初めてアジアに誘致し, 奈良で開催することで研究室の成果を世界に紹介すると共に日本の当該分野における先進性を世界に示した。

- a) マイクロドメイン構造, 界面 (粒界面, 結晶界面, さらに自発分極界面) を微細に制御する固相反応制御法の研究であり, 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/cm³), 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, 光強度: ~16 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 2 サイクル中赤外光からのコヒーレント軟 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ー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

R. BHUSHAN, H. YOSHIDA, K. TSUBAKIMOTO, H. FUJITA, M. NAKATSUKA, N. MIYANAGA, Y. IZAWA, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, "Generation of High Efficiency 2μm Laser Pulse from a Periodically Poled 5 mol% MgO-Doped LiNbO₃ Optical Parametric Oscillator," *Appl. Phys. Express* **1**, 022007 (3 pages) (2008).

R. BHUSHAN, H. YOSHIDA, K. TSUBAKIMOTO, H. FUJITA, M. NAKATSUKA, N. MIYANAGA, Y. IZAWA, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “High Efficiency and High Energy Parametric Wavelength Conversion Using a Large Aperture Periodically Poled MgO:LiNbO₃,” *Opt. Commun.* **281**, 3902–3905 (2008).

J. SAIKAWA, M. MIYAZAKI, M. FUJII, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “High-Energy, Broadly Tunable, Narrow-Bandwidth Mid-Infrared Optical Parametric System Pumped by Quasi-Phase-Matched Devices,” *Opt. Lett.* **33**, 1699–1701 (2008).

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Mg-Doped Congruent LiTaO₃ Crystal for Large-Aperture Quasi-Phase Matching Device,” *Opt. Express* **16**, 16963–16970 (2008).

K. XU, P. LOISEAU, G. AKA, R. MAILLARD, A. MAILLARD and T. TAIRA, “Nonlinear Optical Properties of Ca₅(BO₃)₃F Crystal,” *Opt. Express* **16**, 17735–17744 (2008).

H. SAKAI, H. KAN and T. TAIRA, “>1 MW Peak Power Single-Mode High-Brightness Passively Q-Switched Nd³⁺:YAG Microchip Laser,” *Opt. Express* **16**, 19891–19899 (2008).

Y. SATO, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Novel Model of Thermal Conductivity for Optical Materials,” *Rev. Laser Eng. Supplemental Volume 2008*, **36**, 1081–1084 (2008).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

M. TSUNEKANE, T. INOHARA, A. ANDO, K. KANEHARA and T. TAIRA, “High Peak Power, Passively Q-Switched Cr:YAG/Nd:YAG Micro-Laser for Ignition of Engines,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, MB4 (2008).

Y. OISHI, T. DASCALU, K. MIDORIKAWA and T. TAIRA, “Thermal-Birefringence-Induced Local Depolarization in Thin YAG Ceramics,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, MC15 (2008).

K. YAMAOKA, M. SASAKI, R. KOSEKI and T. TAIRA, “AO Q-Switching Operation in Edge-Pumped Composite All-Ceramic Yb:YAG Microchip Laser,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, MC17 (2008).

R. BHUSHAN, H. YOSHIDA, K. TSUBAKIMOTO, H. FUJITA, M. NAKATSUKA, N. MIYANAGA, Y. IZAWA, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Efficient Wavelength Conversion Based on Periodically Poled MgO:LiNbO₃ Optical Parametric Oscillator,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, MC27 (2008).

S. HAYASHI, T. SHIBUYA, H. SAKAI, H. KAN, T. TAIRA, Y. OGAWA, C. OTANI and K. KAWASE, “Tunable Terahertz-Wave Parametric Generation Pumped by Microchip Nd:YAG Laser,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, MC30 (2008).

J. SAIKAWA, M. MIYAZAKI, M. FUJII, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Tunable, Narrow-Bandwidth Mid-IR Generation in ZnGeP₂ Crystals Pumped by a Large Aperture Periodically Poled Mg Doped LiNbO₃ Optical Parametric System,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, MC46 (2008).

X. GU, G. MARCUS, Y. DENG, N. ISHII, T. FUJI, M. SCHULTZE, T. TAIRA, R. HARTMANN, S. ROITHER, M. KITZLER, A. BALTUSKA, R. KIENBERGER and F. KRAUSZ, “A Few-Cycle Sub-Millijoule Infrared OPCPA System and its Application in High-Harmonic Generation,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, TuA4 (2008).

T. SUZUDO, M. HIROI, Y. HIGASHI, Y. SATOH, Y. SATO, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and Y. FURUKAWA, “9.6-W CW Green Output from Diode Edge-Pumped Composite Vanadate Microchip Laser with Small Packaged Volume,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, WD4 (2008).

- K. XU, P. LOISEAU, G. AKA and T. TAIRA**, “A Promising NLO Crystal for UV Light Generation: $\text{Ca}_5(\text{BO}_3)_3\text{F}$,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, WD5 (2008).
- T. FUJIKAWA, K. AKIHAMA, M. EBINA and T. TAIRA**, “Laser-Induced Breakdown of Air with Double-Pulse Excitation,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, WE1 (2008).
- Y. SATO, H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “A Study of a Thermal Conductivity: a General Model for Optical Materials,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, WE19 (2008).
- K. TOJO, N. ISHIGAKI, A. KADOYA, K. WATANABE, Y. IDO and T. TAIRA**, “Intra-Cavity Frequency Tripling in Actively Q-Switched Miniature Nd:YVO₄ Laser for MALDI/TOFMS,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, WE35 (2008).
- H. SAKAI, A. SONE, H. KAN and T. TAIRA**, “High Brightness Diode-Pumped Passively Q-Switched Nd:YAG Microchip Laser with Amplifier,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics*, WE38 (2008).
- Y. SATO, H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Novel Model of Thermal Conductivity for Optical Materials,” *The 6th Asia Pacific Laser Symposium (APLS 2008)*, 31Bp8 (2008).
- J. SAIKAWA, M. MIYAZAKI, M. FUJII, H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Tunable, Narrow-Bandwidth Difference Frequency Generation in ZnGeP₂ Crystals Pumped by a Large Aperture Periodically Poled Mg Doped LiNbO₃ Optical Parametric System,” *ILLMC2008*, 23-TP1-3 (2008).
- M. TSUNEKANE, T. INOHARA, A. ANDO, K. KANEHARA and T. TAIRA**, “Compact, High Peak Power, Passively Q-Switched Micro-Laser for Ignition of Engines,” *CLEO 2008*, CFJ4 (2008).
- Y. SATOH, Y. HIGASHI, M. HIROI, T. SUZUDO, H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Over 10W Single-Pass Second Harmonic Green Light Generation with Periodically Poled MgO Doped Congruent LiNbO₃,” *CLEO 2008*, CFK2 (2008).
- Y. PETIT, B. BOULANGER, P. SEGONDS, P. BRAND, C. FELIX, B. MENAERT, H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Angular Quasi-Phase-Matching in MgO:PPLN,” *CLEO 2008*, CFK7 (2008).
- Y. OISHI, T. DASCALU, K. MIDORIKAWA and T. TAIRA**, “Thermally Induced Local-Depolarization in Thin YAG Ceramics for High-Power Lasers,” *CLEO 2008*, CFQ5 (2008).
- K. TOJO, N. ISHIGAKI, A. KADOYA, K. WATANABE, K. TOKUDA and T. TAIRA**, “Intra-Cavity Frequency Tripling in Actively Q-Switched Ceramic Nd:YAG Micro-Laser,” *CLEO 2008*, CThX3 (2008).
- S. HAYASHI, T. SHIBUYA, H. SAKAI, T. TAIRA, C. OTANI, Y. OGAWA and K. KAWASE**, “Palmtop Terahertz-Wave Parametric Generator with Wide Tunability,” *CLEO 2008*, CTuHH7 (2008).
- J. SAIKAWA, M. MIYAZAKI, M. FUJII, H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Narrow-Bandwidth Mid-IR Generation Based on a Large Aperture Periodically Poled Mg-Doped LiNbO₃ Optical Parametric Pump System,” *CLEO 2008*, CTuII4 (2008).
- Y. SATO, J. AKIYAMA and T. TAIRA**, “Novel Model on Thermal Conductivity in Laser Media: Dependence on Rare-Earth Concentration,” *CLEO 2008*, CTuQ7 (2008).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Mg-Doped Congruent LiTaO₃ Crystal for Large-Aperture Quasi-Phase Matching Device,” *CLEO 2008*, CWG1 (2008).
- K. XU, P. LOISEAU, G. AKA, R. MAILLARD, A. MAILLARD and T. TAIRA**, “Nonlinear Optical Properties of $\text{Ca}_5(\text{BO}_3)_3\text{F}$,” *3rd EPS-QEOD Europhoton Conference*, tup.11 (2008).

Y. PETIT, B. BOULANGER, P. SEGONDS, P. BRAND, C. FELIX, B. MENAERT, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Angular Quasi-Phase-Matching : A New Concept,” *3rd EPS-QEOD Europhoton Conference*, thp.20 (2008).

M. TSUNEKANE, T. INOHARA, A. ANDO, K. KANEHARA and T. TAIRA, “Compact and High-Brightness Passively Q-Switched Cr:YAG/Nd:YAG Laser for Ignition of Engines,” *3rd EPS-QEOD Europhoton Conference*, frob.2 (2008).

B-3) 総説，著書

T. TAIRA and Y. SATO, “Thermal Conductivity Model of Optical Materials,” *SPIE Defense & Security 2008*, 6952-13 (2008).

T. TAIRA, “Giant Micro Photonics,” *Rev. Laser Eng.* **36**, 109 (2008).

T. TAIRA and Y. SATO, “A General Model of a Thermal Conductivity for Optical Materials,” *Proc. SPIE*, **6952**, E-1~3 (2008).

平等拓範, 「光シンセサイザーをてのひらに——マイクロ固体フォトニクスの新展開——」 「自然科学研究機構シンポジウム収録集 爆発する光科学の世界——量子から生命体まで——」 (株)クパプロ, pp. 35-66 (2007).

R. WON, “Ceramic Future,” *Nat. Photonics* **2**, 216-217 (2008).

D. G. ROWE, “Lasers for Engine Ignition,” *Nat. Photonics* **2**, 515-517 (2008).

B-4) 招待講演

T. TAIRA, “Micro Solid-State Photonics for Brightness and Wavelength Converters,” Max-Planck-Institut fuer Quantenoptik, Munich (Germany), October 2007.

T. TAIRA, “Ceramic Microchip Lasers,” University of Applied Science, Munster (Germany), February 2008.

T. TAIRA and Y. SATO, “Thermal Conductivity Model of Optical Materials,” SPIE Defense & Security 2008, Orland (U.S.A.), March 2008.

T. TAIRA, “The Promise of Giant Micro-Photonics,” NIPS-JST International Workshop, Okazaki (Japan) April 2008.

T. TAIRA, “Ceramic Lasers and Ceramic-Crystal Lasers,” 4th International Workshop on Crystal Growth Technology (IWCGT-4), Beatenberg (Switzerland), May 2008.

T. TAIRA, “Ceramic Microchip Lasers,” 17th International Laser Physics Workshop (LPHYS’08), NTNU, Trondheim (Norway), June-July 2008.

T. TAIRA, “High Brightness Ceramic Microchip Laser and its Application,” 4th Laser Ceramics Symposium (2008LCS), Shanghai (China), November 2008.

T. TAIRA, “Ceramic Lasers,” The 110th Microoptics Meeting, Microoptics News 26, Tokyo (Japan), December 2008.

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).
秋山 順, 愛知県若手研究者奨励事業第2回「わかしゃち奨励賞(優秀賞)」(2008).
平等拓範, 第24回光産業技術振興協会櫻井健二郎氏記念賞 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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).
レーザー学会研究会委員 (1999-).
電気学会高機能全固体レーザーと産業応用調査専門委員会幹事 (1998-2002).
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).
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).
レーザー学会評議員 (2005-).
レーザー学会「マイクロ固体フォトンクス」専門委員会主査 (2006-2009).

学会の組織委員等

OSA, Advanced Solid-State Photonics (ASSP 2008), 国際会議プログラム委員会共同議長 (2007-2008).
OSA, Nonlinear Optics (NLO 2009), 国際会議プログラム委員会共同議長 (2008-2009).
CLEO/PacificRim 2009, 国際会議分科委員会共同議長 (2008-2009).
OSA, Advanced Solid-State Photonics (ASSP 2009), 国際会議プログラム委員会共同統括議長 (2008-2009).
LASERS 2001, 国際会議プログラム委員 (2001).
レーザー学会学術講演会プログラム委員 (2001, 2004, 2006).
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 (2006-).
OSA, Nonlinear Optics, 国際会議プログラム委員 (2006-), グループ議長 (2008-).
3rd International Laser Ceramics Symposium, プログラム委員 (2006-2007).
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).
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).
International Workshop on Holographic Memories (IWHM) 2008, プログラム委員会委員 (2008).
OECC2008「CLEO Focus: Frontiers in Photonics」プログラム分科委員会委員 (2008).

応用物理学会日本光学会レーザーディスプレイ技術研究グループ 顧問 (2008-).

4th Laser Ceramics Symposium: International Symposium on Transparent Ceramics for Laser, 国際会議諮問委員 (2008-).

Int. Conf. " Micro- to Nano-Photonics II —ROMOPT 2009," プログラム委員 (2008-2009).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員及び国際事業委員会書面審査員 (2008-2009).

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-), 幹事 (2008-).

その他

愛知県産業労働部愛知県若手奨励賞審査員 (2007-).

日本原子力研究開発機構研究業績評価委員会委員 (2008).

B-8) 大学での講義, 客員

豊橋技術科学大学先端フォトニック情報メモリリサーチセンター, 客員教授, 2008年.

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, 2008年.

B-10) 競争的資金

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).

科学技術振興機構福井県地域結集型共同事業, 「光ビームによる機能性材料加工創成技術開発」サブグループ研究代表 平等拓範 (2000年-2005年).

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

地域新生コンソーシアム, 「ヒートシンク一体型 Yb:YAG マイクロチップデバイスの開発」平等拓範 (2004年-2005年).

NEDO, 「カラーリライタブルプリンタ用高効率小型可視光光源 "Tri Color Laser" の研究開発」再委託 (研究代表 リコー) (2004年-2006年).

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).

科学技術振興機構先端計測分析技術・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-).

若手研究(B), 「マグネシウム添加タンタル酸リチウムを用いた高効率・高出力中赤外レーザー発生」石月秀貴 (2007年-2008年).

科学技術振興機構産学共同シーズイノベーション化事業，育成ステージ，「車載型マイクロレーザ点火エンジンの低燃費・高出力特性の実証研究」研究リーダー，平等拓範(シーズ育成プロデューサー (株)日本自動車部品総合研究所)(2008年-)。

B-11) 産学連携

(株)鳥津製作所，「小型高輝度UV光源の研究」平等拓範(2008年)。

(株)ロンボン研究所，「マイクロ固体フォトニクス基礎研究」平等拓範(2008年)。

浜松ホトニクス(株)「マイクロチップレーザの光増幅に関する研究」平等拓範(2008年)。

(株)リコー，「側面励起型小型高出力レーザ光源の研究」平等拓範(2008年)。

共栄社化学(株)「超短パルスレーザを使ったホログラム記録」平等拓範(2008年)。

(株)日本自動車部品総合研究所，「中赤外4.3 μ mCWレーザの研究」平等拓範(2008年)。

三菱電機(株)情報技術研究所，「導波路型レーザ用固体レーザ材料の研究」平等拓範(2008年)。

C) 研究活動の課題と展望

先端的レーザ光源の中で，特にビーム高品質化(空間特性制御)ならびに短パルス化(時間特性制御)などの高輝度化，そしてスペクトルの高純度化を広い波長領域(スペクトル特性制御)でコンパクト化と同時に実現することは，極めて重要な課題である。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) 和周波顕微分光による埋もれた界面の構造とダイナミックスの研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 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る金属表面上に吸着した原子の振動核波束のダイナミックスの研究の一環として、本年度はCu(111)表面におけるアルカリ金属吸着系（Na, K, Cs）について系統的な測定を行った。特に，K/Cu(111)吸着系について詳しい実験を行った。この系では被覆率増大に伴って六方晶形の超構造が圧縮され，基本的には下地とは整合しない構造をとっているため，Na/Cu(111)とは異なり吸着サイトはさまざまである。このような不均一な吸着サイトにもかかわらず，観測されたK-Cu伸縮振動モードはほとんどCuのバルクフォノンと結合せず，また，その位相緩和はNaに比べて遅いことが判明した。この結果，K-Cu伸縮振動が下地のモードと非常に弱く結合してい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鎖がCOとの反応において鎖端の反応効率が著しく高いという実験結果の原因を明らかにするために，AgO鎖の鎖端の構造とAgO鎖の鎖長分布の温度依存性について密度汎関数法とモンテカルロシミュレーションを用いて研究を行った。その結果，鎖端はO末端である可能性が高く，また，鎖間の遠距離反発力が鎖長分布と表面でのAgO鎖の配置にとって重要な役割を果たしていることがわかった。
- 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である。本年度は，ペンタセンを用いた有機電界効果トランジスターにおける有機半導体・誘電体界面における和周波分光を行った。その結果，ゲート電圧を印可することにより和周波発生が著しく増強されることを見だし，これが注入されたキャリアの局所電場に由来するものであることを明らかにした。

B-1) 学術論文

I. NAKAI, Y. MATSUMOTO, N. TAKAGI and S. OKAZAKI, "Structure and Thermal Fluctuation of One-Dimensional AgO Chains on Ag(110) Surfaces Studied with Density Functional Theory and Monte Carlo Simulations," *J. Chem. Phys.* **129**, 154709 (8 pages) (2008).

B-4) 招待講演

松本吉泰, 「超高速非線形分光による吸着種振動ダイナミックスの観測」, レーザー学会第28回年次大会, 名古屋, 2008年1月.
松本吉泰, 「非線形分光で観る表面・界面の分子の構造とダイナミックス」, マイクロ化学懇話会, 京都, 2008年6月.

Y. MATSUMOTO, "Excitation mechanism and decay dynamics of coherent phonons at metal surfaces adsorbed by alkali-metal atoms," The 6th Conference on Ultrafast Surface Dynamics, Kloster Banz (Germany), July 2008.

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

学協会役員等

日本化学会東海支部代議員 (1993–1994).

日本化学会近畿支部代議員 (2008–).

学会の組織委員等

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51回岡崎コンファレンス組織委員 (1994).

IMS International Conference 組織委員 (1997).

Ninth International Conference on Vibrations at Surfaces 組織委員 (1997).

2000環太平洋国際化学会議組織委員 (2000).

第2回表面エレクトロニクス研究会実行委員長 (2000).

第2回分子科学研究会シンポジウム組織委員 (2003).

10th International Workshop on Desorption Induced Electronic Transition プログラム委員 (2004).

分子構造総合討論会運営委員会幹事 (2004–2006).

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).

表面・界面スペクトロスコープ2008幹事 (2008).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

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–).

競争的資金等の領域長等

総合研究大学院大学グループ研究「光科学の新展開」研究代表 (1997–1999).

その他

総合研究大学院大学光科学専攻長 (1999–2001).

総合研究大学院大学先導科学研究科科長 (2001–2005).

B-10) 競争的資金

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).

特定領域研究(A),「表面反応ダイナミクスにおける電子 - 格子相互作用の役割の解明」松本吉泰 (2008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、表面第2高調波発生、赤外・可視和周波発生分光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、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コピーの手法を新たに開発したので、これを埋もれた界面に応用し、従来では観測が困難であった埋もれた界面における分子構造や電荷ダイナミクスを明らかにする。

*) 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 (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) アセチリド錯体を用いた分子性磁性体・ナノ磁性体の開発
- 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) 金属アセチリドを用いて，芳香族2次元縮合シートであるグラフェンで出来たナノセル積層体を1段階の反応で合成する事は，基礎科学的にも応用の面に於いても極めて重要な課題であった。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した。即ち，銀アセチリドを超音波を用いた合成法によって，サブミリの大きさのナノ樹状結晶として析出させ，急激な加熱刺激によってこの樹状形状を保ったまま内部の銀を突沸噴出させ，銀蒸気にふれた炭素は膨れ広がって化学的に安定な最薄のグラフェン壁となり，メソ多孔性炭素ナノ樹状体 (MCND) を生成させることに成功した。これは，BET 表面積が 1600 ~ 1760 m²/g，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。ラマンスペクトルはナノサイズの単層グラフェンと一致した。最も重要なことは，これが数百マイクロンの範囲で1体であり電導性が高く，大電流を流しても発熱が少なく電気容量が極めて少ないことである。これは，これまで例がなかった革新的新物質であり，無数のグラフェン壁を持った空孔中に様々な金属や合金のナノ結晶を成長させると大表面の金属反応サイトが反応や電子移動の場として出現する。スーパーキャパシタとしての性能は，これまでのものより各段に優れた性能を発揮している。現在，様々な機能を発現する金属内包 MCND の開発とその物性研究を展開している。一方，炭素被覆銅ナノケーブルから合成されるアモルファス炭素 / 銅ハイブリッドナノ構造体は，数重量%の水素吸蔵能力がある事が判って来た。現在，水素吸蔵機構の解明によって更にこの性能を向上させる研究が進行している。
- 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し，このワイヤーに光を照射すると銀原子が粒子状に析出して疑似1次元銀ドット列を簡便に作成することが出来るが，ラマン分光によって銀ナノ粒子の表面が電気二重層構造になっている事，マトリックスの脱水素化が進行し炭素物質に変化し，一層電気伝導度が高くなっている事が明らかになった。
- c) [Mn₂(Saloph)₂($\langle m \rangle\text{-OH}$)] [Ni(bdt)₂](CH₃CN)₂ という新規強磁性体を合成し，[Ni(bdt)₂]- アニオン間の強磁性相互作用が平面上垂直的配置に起因していることを明らかにした。

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。Ag⁺(NH₃)_n (n = 3–8) の分子線赤外光励起光解離スペクトルをクラスターサイズを選別して測定したところ、銀イオンは4個のアンモニア分子を第1配位圏に等価に配置した四面体構造を取り、これがより多くのアンモニア分子を第2配位圏以降に付加する骨格錯体として共通の構造となる事が明らかになった。a) の課題において銀アセチリドをアンモニア水溶液中の銀イオンから合成するが、この中に於いても銀イオンは同様の骨格錯体構造をとって安定となるが、アセチレン分子が陰イオンの状態となってアセチリドが生成すると結論される。

B-1) 学術論文

K. JUDAI, S. NUMAO, A. FURUYA, J. NISHIJO and N. NISHI, “Increased Electric Conductance through Physisorbed Oxygen on Copper Nanocables Sheathed in Carbon,” *J. Am. Chem. Soc. (Communication)* **130**, 1142–1143 (2008).

B. -H. BOO, S. -J. KIM, M. -H. LEE and N. NISHI, “Molecular Structures and Energies of Low-Lying Li_xSi_x (x = 1–4) Clusters: Comparison with Li_xC_x (x = 1, 2, 4) Clusters,” *Chem. Phys. Lett.* **453**, 150–154 (2008).

K. YAMAMOTO, S. IWAI, S. BOYKO, A. KASHIWAZAKI, F. HIRAMATSU, C. OKABE, N. NISHI and K. YAKUSHI, “Strong Optical Nonlinearity and its Ultrafast Response Associated with Electron Ferroelectricity in an Organic Conductor,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 074709 (6 pages) (2008).

K. HINO, R. SHINGAI, T. MORITA, K. TOKU, T. KITANO, H. YOSHIKAWA, H. NAKANO and N. NISHI, “Size Distribution of Gold Nanoparticles Covered with Thiol-Terminated Cyanobiphenyltype Liquid Crystal Molecules Studied with Small-Angle X-Ray Scattering and TEM,” *Chem. Phys. Lett.* **460**, 173–177 (2008).

K. INOUE, K. OHASHI, T. IINO, J. SASAKI, K. JUDAI, N. NISHI and H. SEKIYA, “Coordination Structures of the Silver Ion: Infrared Photodissociation Spectroscopy of Ag⁺(NH₃)_n (n = 3–8),” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10**, 3052–3062 (2008).

B-4) 招待講演

西 信之, “Structure and Functions of Nanomaterials produced from Metal Acetylides: NanoCrystals, NanoWires, NanoSheets, NanoSponge, and Carbon NanoDendrites,” The 9th RIES-Hokudai International Symposium, Sapporo, 2008年1月.

西 信之, 「水溶液系に於ける会合性分子のマイクロな相分離について：混合と分離の原則」サントリー水科学研究所, 2008年2月.

西 信之, 「金属アセチリドを用いた機能性ナノ構造体の創成」新日鉄化学総合研究所, 2008年7月.

B-5) 特許出願

特願 2008-120233, 「炭素ナノ構造体を用いたキャパシタ」西 信之, 沼尾茂悟, 水内和彦, 2008年.

特願 2008-281741, 「水素吸蔵ナノワイヤ, 及び水素吸蔵ナノワイヤの製造方法」西 信之, 十代 健, 水内和彦, 2008年.

特願 PCT/JP2008/072330, 「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, 炭素ナノ構造体の作製方法, 及びキャパシタ」西 信之, 沼尾茂悟, 十代 健, 西條純一, 水内和彦, 2008年.

B-6) 受賞, 表彰

西 信之, 井上學術賞 (1991).

西 信之, 日本化学会学術賞 (1997).
西條純一, 日本化学会優秀講演賞 (2007).
十代 健, ナノ学会第6回大会若手優秀発表賞 (2008).
沼尾茂悟, ナノ学会第6回大会若手優秀発表賞 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

九州大学理学部運営諮問委員 (2007.4–2009.3).

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委員 (2008–2009).

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.

「元素戦略プロジェクト」における審査検討会委員 (2008–2009).

学会誌編集委員

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

競争的資金等の領域長等

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-10) 競争的資金

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).

若手研究(B), 「銅アセチリド分子の自己組織化を用いたナノワイヤー合成法の確立と応用展開」十代 健 (2005年–2007年).

基盤研究(B), 「新規な金属原子単層担持グラファイト性多孔質ナノカーボンの創成」西 信之 (2008年–2010年).

若手研究(B), 「アセチリド錯体を用いた分子性磁性体・ナノ磁性体の開発」西條純一 (2008年–2010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, グラフェン壁で出来た炭素ナノ樹状構造体(MCND)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各種2次電池, 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。このグラフェン壁で出来たナノセルの中で, 金属ナノ粒子を小さな入り口からは脱出出来なくなるまで成長させると, 全てのナノ結晶表面を安定に露出させ, 気相ガス分子や溶媒中のイオン種や反応性分子と相互作用出来るようになる。即ち, MCNDの持つ膨大な表面積に近い表面が活性となり, 且つ, 樹状体の持つ気体や液体の高い透過性を最大限に活かした高効率の反応場, 電極電荷移動・蓄積場を構築出来る。これは, 水素や酸素吸蔵体ばかりでなく, イオン2次電池や金属空気電池等の高出力電極としても極めて有用であると期待される。更に, 膨大な表面で発現される金

属素子としての新しい物性機能を開拓して行きたい。

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。特に、電導性や磁性に焦点を当てて、この分子から生成する金属ナノ粒子配列系の研究を進めて行きたい。

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) 一光子・二光子紫外光電子磁気円二色性および光電子顕微鏡法の方法論開発

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 を用いた高磁場極低温 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，Cu(001) 表面上にエピタキシャル成長させた強磁性 FeN 薄膜の STM，LEED/IV による構造評価と XMCD による磁気特性評価など共同研究も含めて多彩に検討を進めた。
- b) 一昨年度に我々が発見した，光エネルギーを仕事関数しきい値付近に合わせることで紫外磁気円二色性感度が 10% [試料は 12 原子層 Ni/Cu(001) 垂直磁化膜] にも達するという現象に基づいて，紫外磁気円二色性光電子顕微鏡を開発してきた。昨年度末に納入された深紫外レーザー (Ti:sapphire レーザー 3,4 倍波，210–310 nm) を用いることでほぼ完成した。今年度はこれまで全く検討されていない二光子紫外光電子磁気円二色性法の検討を行った。やはり仕事関数近傍で同じ試料に対し 7% もの大きな円二色性が観測でき，さらには入射角 45° 程度では 28% にも達した。垂直磁化膜において斜入射で磁気円二色性感度が向上することは大変興味深く，また光電子顕微鏡観測にも非常に好都合な現象であり，今後の発展がおおいに期待できる成果であった。

B-1) 学術論文

T. NAKAGAWA, Y. TAKAGI, Y. MATSUMOTO and T. YOKOYAMA, "Enhancements of Spin and Orbital Magnetic Moments of Submonolayer Co on Cu(001) Studied by X-Ray Magnetic Circular Dichroism Using a Superconducting Magnet and a Liquid He Cryostat," *Jpn. J. Appl. Phys.* **47**, 2132–2136 (2008).

D. MATSUMURA, T. NAKAGAWA, H. WATANABE, H. ABE, K. AMEMIYA, T. OHTA and T. YOKOYAMA, "Magnetization Process of Co/Pd(111) Thin Films: Chemisorption-Induced Spin Reorientation Transition," *Surf. Sci.* **602**, 1999–2003 (2008).

Y. ITO, A. MIYAZAKI, K. FUKUI, S. V. VEETIL, T. YOKOYAMA and T. ENOKI, "Pd Nanoparticle Embedded with Only One Co Atom Behaves as a Single-Particle Magnet," *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 103701 (4 pages) (2008).

X. D. MA, T. NAKAGAWA, Y. TAKAGI, M. PRZYBYLSKI, F. M. LEIBSLE and T. YOKOYAMA, "Magnetic Properties of Self-Assembled Co Nanorods Grown on Cu(110)-(2×3)N," *Phys. Rev. B* **78**, 104420 (9 pages) (2008).

Y. TAKAGI, K. HANAI, H. HOSOKAWA, H. ISHIBASHI, T. ISHIKAWA, A. SAITO, Y. KUWAHARA and Y. TAGUCHI, "Roughening Surface of Layered Manganite $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$ by Scanning Tunneling Microscopy," *Jpn. J. Appl. Phys.* **47**, 6456–6458 (2008).

Y. TAKAGI, K. NAKATSUJI, Y. YOSHIMOTO, T. IIMORI, K. YAJI, K. TOMATSU, Y. HARADA, T. TAKEUCHI, T. TOKUSHIMA, Y. TAKATA, S. SHIN, T. ISHIKAWA and F. KOMORI, “Soft X-Ray Emission Spectroscopy of Co Nanoislands on a Nitrogen-Adsorbed Cu(001) Surface,” *Surf. Sci.* **602**, L65–L68 (2008).

A. SAITO, Y. TAKAGI, K. TAKAHASHI, H. HOSOKAWA, K. HANAI, T. TANAKA, M. AKAI-KASAYA, Y. TANAKA, S. SHIN, T. ISHIKAWA, Y. KUWAHARA and M. AONO, “Nanoscale Elemental Identification by Synchrotron-Radiation Based Scanning Tunneling Microscopy,” *Surf. Interface Anal.* **40**, 1033–1036 (2008).

K. NAKATSUJI, Y. YOSHIMOTO, D. SEKIBA, S. DOI, T. IIMORI, K. YAGYU, Y. TAKAGI, S. OHNO, H. MIYAOKA, M. YAMADA and F. KOMORI, “Electron Correlation Effects in Co Nanoscale Islands on a Nitrogen-Covered Cu(001) Surface,” *Phys. Rev. B* **77**, 235436 (8 pages) (2008).

K. NAKATSUJI, T. IIMORI, Y. TAKAGI, D. SEKIBA, S. DOI, M. YAMADA, T. OKUDA, A. HARASAWA, T. KINOSHITA and F. KOMORI, “Surface Restructuring Process on a Ag/Ge(001) Surface Studied by Photoelectron Spectroscopy,” *Appl. Surf. Sci.* **254**, 7638–7641 (2008).

I. YAMAMOTO, M. MIKAMORI, R. YAMAMOTO, T. YAMADA, K. MIYAKUBO, N. UENO and T. MUNAKATA, “Resonant Two-Photon Photoemission Study of Electronically Excited States at the Lead Phthalocyanine/Graphite Interface,” *Phys. Rev. B* **77**, 115404 (6 pages) (2008).

I. YAMAMOTO, N. MATSUURA, M. MIKAMORI, R. YAMAMOTO, T. YAMADA, K. MIYAKUBO, N. UENO and T. MUNAKATA, “Imaging of Electronic Structure of Lead Phthalocyanine Films Studied by Combined Use of PEEM and Micro-UPS,” *Surf. Sci.* **602**, 2232–2237 (2008).

B-3) 総説，著書

T. YOKOYAMA, T. NAKAGAWA and Y. TAKAGI, “Magnetic Circular Dichroism for Surface and Thin Film Magnetism: Measurement Techniques and Surface Chemical Applications,” *Int. Rev. Phys. Chem.* **27**, 449–505 (2008).

B-4) 招待講演

中川剛志, 「レーザー誘起光電子による磁気二色性とドメイン観察」日本物理学会第63回年次大会シンポジウム「反転対称性の破れた表面におけるスピンと軌道」大阪, 2008年3月.

高木康多, 「走査トンネル顕微鏡を用いたキャリア注入によるGe(001)表面構造変化の研究」日本物理学会第63回年次大会若手奨励賞受賞記念講演, 大阪, 2008年3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).

高木康多, 日本物理学会 第2回若手奨励賞受賞 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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).

日本学術振興会科学研究補助金学術創成研究費評価委員 (2008).

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).

学会の組織委員等

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 (1998-2008).

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).

競争的資金等の領域長等

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

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-10) 競争的資金

萌芽研究, 「レーザー誘起磁気円二色性STMの開発」横山利彦 (2008年-2009年).

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).

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。磁性薄膜・ナノワイヤ・ナノドットの磁氣的性質,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目指し,超高真空表面磁気光学 Kerr 効果法,高磁場(7 T)極低温(5 K)X線磁気円二色性法(UVSOR 利用),磁氣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の手法を展開している。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 さらにはこれまで全く研究されていなかった二光子光電子磁気円二色性法の初観測に成功し,極めて有効な手法として今後の発展が期待できることが示せた。

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 , クラスタ化学

A-2) 研究課題 :

- a) 有機保護金クラスターの触媒機能の探索・解明
- b) 有機保護金属クラスターの精密合成と構造評価

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 気相金属クラスターの構造と反応過程の相関を念頭におきながら , 合理的な指針に基づいた高活性金属クラスター触媒の開発を目指している。ポリビニルピロリドン (PVP) 保護金クラスターの電子状態とアルコールの空気酸化に対する触媒活性の相関を調べた。その結果 , PVP からの電子供与によって微小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。マイクロミキサーを利用して粒径 1 nm 程度の単分散金クラスター触媒を合成し , これが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。サイズ規定された配位子保護金クラスターを前駆体とする担持金触媒の合成法を開発した。
- b) 化学組成が厳密に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。チオラート保護金クラスターの組み立て原理を解明することを目指して , $Au_{38}(SC_{12}H_{25})_{24}$ や $Au_{144}(SC_{12}H_{25})_{59}$ などの幾何構造を X 線回折法を用いて調べた。

B-1) 学術論文

Y. MURASE, T. KITAGAWA, M. IMAMURA, A. TANAKA, H. YASUDA, Y. NEGISHI, T. TSUKUDA, S. UEDA, Y. YAMASHITA, H. YOSHIKAWA and K. KOBAYASHI, “Electronic Structure of Dendrimer-Au Hybrid Nanoparticle: Hard X-Ray Photoemission Study,” *Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.* **33**, 169–172 (2008).

N. K. CHAKI, Y. NEGISHI, H. TSUNOYAMA, Y. SHICHIBU and T. TSUKUDA, “Ubiquitous 8 and 29 kDa Gold: Alkanethiolate Cluster Compounds: Mass-Spectrometric Determination of Molecular Formulas and Structural Implications,” *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 8608–8610 (2008).

E. S. SHIBU, M. A. HABEEB MUHAMMED, T. TSUKUDA and T. PRADEEP, “Ligand Exchange of $Au_{25}SG_{18}$ Leading to Functionalized Gold Clusters: Spectroscopy, Kinetics and Luminescence,” *J. Phys. Chem. C* **112**, 12168–12176 (2008).

F. S. HAN, M. HIGUCHI, T. IKEDA, Y. NEGISHI, T. TSUKUDA and D. G. KURTH, “Luminescence Properties of Metallo-Supramolecular Coordination Polymers Assembled from Pyridine Ring Functionalized Ditopic Bis-Terpyridine and Ru(II) Ion,” *J. Mater. Chem.* **18**, 4555–4560 (2008).

H. TSUNOYAMA, N. ICHIKUNI and T. TSUKUDA, “Microfluidic Synthesis and Catalytic Application of PVP-Stabilized, ~1 nm Gold Clusters,” *Langmuir* **24**, 11327–11330 (2008).

B-3) 総説 , 著書

佃 達哉 , 「原子数を制御した金属ナノ粒子・クラスター」 「ナノ粒子の創製と応用展開」 米澤徹編 , フロンティア出版 , pp. 110–117 (2008).

角山寛規, 佃 達哉, 「ポリマー保護金クラスターのサイズ選択合成と水中触媒作用」, ナノ学会会報 6, 61-66 (2008).

佃 達哉, 「チオレートによる金クラスターの安定化のメカニズム: staple (ホッチキス針型) 界面の形成」, 化学と工業 61, 868-869 (2008).

佃 達哉, 「金属ナノクラスターのキラリティー」, 化学 63, 72-73 (2008).

B-4) 招待講演

佃 達哉, 「有機保護金クラスターのサイズ選択合成と触媒作用」, PF 研究会「時間分解 XAFS 研究の動向と展望」, つくば, 2008年3月.

佃 達哉, 「魔法組成配位子保護金クラスターの合成と構造・物性」, 2008年春季第55回応用物理学会, 船橋, 2008年3月.

T. TSUKUDA, "In Search of Magic Au:SR Cluster Compounds," ISMPC, Jyväskylä (Finland), September 2008.

T. TSUKUDA, "Ligand-Protected Gold Clusters—Synthesis, Structures, and Stabilities—," ISSPIC 14, Valladolid (Spain), September 2008.

佃 達哉, 「ポリマー保護金クラスターの空気酸化触媒活性——サイズ依存性とその起源」, 第102回触媒討論会, 名古屋, 2008年9月.

T. TSUKUDA, "Ligand-Protected Gold Clusters—Synthesis, Structures, and Stabilities—," FACSS 2008, Reno (U.S.A.), September 2008.

佃 達哉, 「有機保護金クラスターの合成と触媒への展開」, ナノ統合拠点分子科学WG 連続研究会「元素戦略・ナノクラスター連続研究会」, 岡崎, 2008年12月.

佃 達哉, 「有機保護金クラスターの構造と安定性」, 放射光 / 表面電子顕微鏡とナノ精密材料科学シンポジウム・第4回放射光表面部会シンポジウム, 札幌, 2008年12月.

B-6) 受賞, 表彰

佃 達哉, 第11回井上研究奨励賞 (1995).

角山寛規, 第16回日本 MRS 学術シンポジウム奨励賞 (2005).

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).

根岸雄一, 第57回日本化学会進歩賞 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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).

学会の組織委員等

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, 大学共同利用機関等の委員等

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).

Chemistry Letters, Associate Editor (2008–).

B-10) 競争的資金

特定領域研究, 「元素相乗系化合物の化学(領域代表: 宮浦憲夫)」, 「配位子保護金属クラスターの組成制御と機能探索」, 佃 達哉 (2006年–2009年).

若手研究(B), 「金属サブナノクラスターにおける触媒機能のサイズ依存性と機能発現機構の解明」, 根岸雄一 (2006年–2008年).
第7回貴金属に関わる研究助成金制度 MMS 賞, 「金サブナノクラスターの湿式調製法の開発および水中触媒への応用」, 佃 達哉 (2005年).

第7回井上フェロー採用, 「機能性有機分子と金クラスター複合化によるナノ反応場の精密構築」, 佃 達哉 (2005年–2007年).
基盤研究(C)(2), 「単分子膜保護金属サブナノクラスターの電子状態と発光メカニズム」, 佃 達哉 (2004年–2005年).

住友財団研究助成, 「有機・金ナノクラスター複合体の精密合成と触媒機能の探索」, 佃 達哉 (2004年).

総研大共同研究, 「有機・無機ナノ粒子複合体の構造と機能」, 佃 達哉 (2002年–2004年).

若手研究(B), 「化合物半導体クラスターにおける量子現象の解明——単分散したクラスターの合成法の利用」, 根岸雄一 (2002年–2004年).

奨励研究(A), 「分子クラスター負イオンの電子構造と化学反応過程」, 佃 達哉 (1998年–1999年).

奨励研究(A), 「分子クラスター表面における光誘起反応のダイナミクスに関する研究」, 佃 達哉 (1997年).

C) 研究活動の課題と展望

高分子保護金クラスターの電子構造と酸化触媒活性の相関を調べていくなかで, 気相金クラスターの場合と多くの類似点があることを実感した。今後は, 金属クラスター自体の性質を理解し, その特質を生かすための合理的な設計指針に基づいて触媒を開発することによって, モデル系と実在系のギャップを埋めていきたい。

*) 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

唯 美津木 (准教授) (2008 年 10 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：触媒化学，物理化学，錯体化学

A-2) 研究課題：

- a) 触媒反応の選択制御を意図した新規高活性構造の創出
- b) ゼオライト担持 Re 触媒によるベンゼンと酸素からのフェノール一段合成
- c) 時間分解 XAFS による触媒反応過程の動的構造解析による構造速度論の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 酸化物固体表面に金属錯体や有機官能基を固定化し，触媒活性構造へと選択的に変換することで，表面特異的な高活性構造を分子レベルで作り分けることに成功した。特に，シリカ表面に固定化した Ru 単核錯体の配位子を紫外光照射によって選択的に脱離させ触媒活性構造を作り出す新しい活性構造形成法を見出し，生成した配位不飽和活性種が酸素を酸化剤としたアルカン類の選択酸化に触媒活性を有することを明らかにした。
- b) ベンゼンと酸素からのフェノール一段合成に世界最高の触媒性能を示す HZSM-5 ゼオライト担持 Re 触媒の触媒活性構造を各種分光法，及び in-situ XAFS 測定により決定した。実用レベルに到達する触媒活性の向上を実現するために第二金属の添加効果を検討し，HZSM-5 担持 Re-Pt 触媒がベンゼン転化率 30%，フェノール選択性 90% という驚異的な触媒性能を示すことを見出した。
- c) 燃料電池作動過程における Pt ナノ粒子の in-situ 時間分解 XAFS 測定を実現し，電極反応進行時の Pt ナノ触媒の構造変化をリアルタイム計測することに成功し，カソード電極表面の反応機構を明らかにした。また，担持バナジウム酸化物触媒のアルコール酸化反応過程の in-situ 時間分解 DXAFS 測定を行い，アルコールによるバナジウムの還元過程，酸素による酸化過程におけるバナジウム種の構造変化の速度定数を算出することに成功した。

B-1) 学術論文

T. SASAKI, M. TADA, C. ZHONG, T. KUME and Y. IWASAWA, "Immobilized Metal Ion-Containing Ionic Liquids: Preparation, Structure and Catalytic Performances in Kharasch Addition Reaction and Suzuki Cross-Coupling Reactions," *J. Mol. Catal. A: Chem.* **279**, 200–209 (2008).

K. MOTOKURA, M. TOMITA, M. TADA and Y. IWASAWA, "Acid-Base Bifunctional Catalysis of Silica-Alumina-Supported Organic Amines for Carbon–Carbon Bond-Forming Reactions," *Chem. Eur. J.* **14**, 4017–4027 (2008).

M. L. KANTAM, U. PAL, B. SREEDHAR, S. BHARGAVA, Y. IWASAWA, M. TADA and B. M. CHOUDARY, "Aerobic Alcohol Oxidation by Ruthenium Species Stabilized on Nanocrystalline Magnesium Oxide by Basic Ionic Liquids," *Adv. Synth. Catal.* **350**, 1225–1229 (2008).

M. TADA, K. MOTOKURA and Y. IWASAWA, "Conceptual Integration of Homogeneous and Heterogeneous Catalyses," *Top. Catal.* **48**, 32–40 (2008).

K. MOTOKURA, M. TADA and Y. IWASAWA, "Acid-Base Bifunctional Catalytic Surfaces for Nucleophilic Addition Reaction," *Chem.–Asian J.* **3**, 1230–1236 (2008).

K. MOTOKURA, M. TADA and Y. IWASAWA, “Cooperative Catalysis of Primary and Tertiary Amines Immobilized on Oxide Surface for One-Pot C–C Bond Forming Reactions,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **47**, 9230–9235 (2008).

M. TADA, Y. AKATSUKA, Y. YANG, T. SASAKI, M. KINOSHITA, K. MOTOKURA and Y. IWASAWA, “Photoinduced Reversible Structural Transformation and Selective Oxidation Catalysis of Unsaturated Ruthenium Complexes Supported on SiO₂,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **47**, 9252–9255 (2008).

B-3) 総説, 著書

唯美津木, 「固定化触媒の調製法」, 「触媒便覧」講談社サイエンティフィック, pp. 287–290 (2008).

唯美津木, 岩澤康裕, 「金属錯体を用いた表面上の3次元活性構造の構築と触媒作用」, *表面* **33**, 267–283 (2008).

唯美津木, 「サイズと形の違うPtナノ粒子を作り分ける」, *化学* **63**, 63–64 (2008).

T. E. MUELLER, K. HULTZSCH, M. YU, F. FOUBELO and M. TADA, “Hydroamination: Direct Addition of Amines to Alkenes and Alkynes,” *Chem. Rev.* **108**, 3795–3892 (2008).

B-4) 招待講演

唯美津木, 「表面の精密設計による触媒機能創出と動的構造解析」, 第101回半導体表面化学セミナー, 東京, 2008年1月.

M. TADA, “Advanced Catalyst Design and In-situ Characterization of Metal-Complex Catalysts at Oxide Surfaces,” GCOE Lectureship, Utrecht University, Utrecht (Netherlands), February 2008.

M. TADA, “Advanced Catalyst Design and In-situ Characterization of Metal-Complex Catalysts at Oxide Surfaces,” GCOE Lectureship, Eindhoven University of Technology, Eindhoven (Netherlands), February 2008.

M. TADA, “Advanced Catalyst Design and In-situ Characterization of Metal-Complex Catalysts at Oxide Surfaces,” GCOE Lectureship, Technische Universität München, München (Germany), February 2008.

M. TADA, “Advanced Catalyst Design and In-situ Characterization of Metal-Complex Catalysts at Oxide Surfaces,” GCOE Lectureship, CNRS-CPE Lyon, Lyon (France), February 2008.

M. TADA, “Advanced Catalyst Design and In-situ Characterization of Metal-Complex Catalysts at Oxide Surfaces,” GCOE Lectureship, Paris University 6 Pierre & Marie Curie, Paris (France), February 2008.

唯美津木, 「表面を媒体とした高活性金属錯体触媒設計と反応機構解明」, 第2期菅野シンポジウム(第4回)東京, 2008年3月.

唯美津木, 「In-situ 時間分解 XAFS による実高活性触媒のダイナミック構造解析」, 第25回PFシンポジウム, つくば, 2008年3月.

唯美津木, 「ダイナミック XAFS による燃料電池触媒のリアルタイム解析」, 第63回日本物理学会年次大会, 大阪, 2008年3月.

唯美津木, 「選択触媒機能創出を目指した表面を媒体とする高活性金属錯体の構築と反応機構解明」, 第88回日本化学会春季年会(日本化学会進歩賞受賞講演)東京, 2008年3月.

M. TADA, “Reaction Mechanism of Direct Phenol Synthesis from Benzene and Molecular Oxygen on Re₁₀N₂-Cluster/HZSM-5 Catalysts,” 235th ACS National Meeting, New Orleans (U.S.A.), April 2008.

M. TADA, “Direct Phenol Synthesis from Benzene and O₂ on a Novel Supported Re Catalyst,” ULP-JSPS Joint Forum on Frontiers in Biology/Chemistry/Physics, Strasbourg (France), May 2008.

M. TADA, “Novel Molecularly-Organized Materials for O₂ Activation in Catalysis,” 2008 Gordon Research Conference on Catalysis, New London (U.S.A.), June 2008.

M. TADA, “In-situ Time-resolved XAFS Study on Reaction Dynamics of Pt/C Cathode Catalysts in Fuel Cell,” International Symposium on Creation and Control of Advanced Selective Catalysis as the Celebration of 50th Anniversary of the Catalysis Society of Japan (ICC 14 Pre-Symposium), Kyoto, July 2008.

M. TADA, “Active Structure and Dynamic Mechanism for Direct Phenol Synthesis from Benzene and O₂ on a Novel Re₁₀(N)₂-Cluster/HZSM-5 Catalyst,” 14th International Congress on Catalysis, Seoul (Korea), July 2008.

唯美津木, 「In-situ 時間分解 XAFS による触媒活性構造の動的解析」第11回 XAFS 討論会, 姫路, 2008年8月.

唯美津木, 「担持 Re 触媒によるベンゼンからのフェノール直接合成」第102回触媒討論会, 名古屋, 2008年9月.

M. TADA, “SiO₂-Supported Coordinatively-Unsaturated Ru-Complex Catalysts Highly Active for Selective Oxidation Using O₂,” 7th China-Japan Joint Symposium on Metal Cluster Compounds, Sapporo, October 2008.

唯美津木, 「触媒表面反応の動的解析」第28回表面科学講演大会, 東京, 2008年11月.

B-5) 特許出願

特願 2008-098460, 「ベンゼンの直接酸化によるフェノールの製造方法」岩澤康裕, 唯美津木, 王林勝, 及川隆(国立大学法人東京大学, 三井化学(株)) 2008年.

B-6) 受賞, 表彰

M. TADA, 3rd International Workshop on Oxide Surface Best Poster Award (2003).

M. TADA, 18th North American Catalysis Society Meeting Kokes Travel Award (2003).

唯美津木, 日本化学会学生講演賞 (2004).

M. TADA, 5th World Congress on Oxidation Catalysis Best Oral Presentation Award (2005).

唯美津木, 井上研究奨励賞 (2007).

M. TADA, PCCP Prize (2007).

唯美津木, 日本化学会優秀講演賞 (2007).

唯美津木, 東京大学グローバルCOE 若手海外レクチャーシップ賞 (2008).

唯美津木, 日本化学会進歩賞 (2008).

唯美津木, 東海化学工業会賞技術賞 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

触媒学会関東地区幹事 (2005).

触媒学会代議員 (2006).

触媒学会若手会代表幹事 (2006).

触媒学会有機金属研究会世話人 (2007-).

学会の組織委員等

International COE Symposium for Young Scientists on Frontiers of Molecular Science 組織委員会委員 (2006).

第22回日本放射光学会年会実行委員会委員 (2007-2008).

B-10) 競争的資金

特別研究員奨励費, 「表面分子インプリンティング法による不斉金属錯体触媒の構築と不斉触媒作用」 唯美津木 (2003年-2004年).

若手研究(B), 「分子インプリンティングマンガン錯体触媒の表面設計と不斉光酸化反応の制御」 唯美津木 (2005年-2006年).

特定領域研究(公募研究) 「配位空間の化学」 「固定化金属錯体の不斉自己組織化を利用した多機能不斉触媒空間の構築と触媒反応制御」 唯美津木 (2006年-2007年).

特定領域研究(計画研究) 「協奏機能触媒」 「表面を媒体とする選択酸化触媒機能の創出と高度反応制御に関する研究」 唯美津木 (2006年-2009年).

若手研究(A), 「ベンゼン及び炭化水素類の高選択酸化反応を実現する担持レニウムクラスター触媒の開発」 唯美津木 (2008年-2011年).

B-11) 産学連携

日産自動車(株) 総合研究所, 「XAFS法を用いた白金触媒表面の電子状態・構造解析」 唯美津木 (2008年).

三井化学(株) 触媒科学研究所, 「炭化水素類の選択酸化触媒の開発研究」 岩澤康裕, 唯美津木 (2006年-2008年).

C) 研究活動の課題と展望

環境有害な副産物を作らず目的の有用物質のみを効率良く合成できる, 優れた固体触媒の合理的設計法の確立が望まれているが, 選択触媒反応制御を意図した固体触媒表面の分子レベル設計は依然として確立されていない。金属錯体の表面固定化, 孤立化, 表面化学修飾, 表面分子インプリンティング等の触媒表面の設計手法を駆使し, 固体表面上に電子的, 立体的に制御された触媒活性構造とその上の選択的触媒反応空間を同時構築する新しい触媒表面の設計法を提案し, 選択酸化反応や不均一系不斉触媒等の高難度触媒反応の制御を実現することを目指している。

更に, 放射光硬X線を用いた時間分解XAFS法の開発, 改良に取り組み, 触媒反応が進行するその場(in-situ)で実高活性金属触媒や燃料電池ナノ粒子触媒の働きをリアルタイム計測し, 触媒自身の構造速度論を明らかにすることで, 次世代の触媒開発に通じる分子レベルでの触媒構造情報を引き出したい。

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と隣接する電子相の研究
- b) 分子導体における電子強誘電性の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

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。我々はこの境界領域に位置する物質の多彩な電子状態を主に振動分光法を用いて研究している。

- a) これまでの数年間蓄積してきた β' -type BEDT-TTF 塩のデータを整理して、電荷不均化率と超伝導発現との関係を局在モデルを用いて精査した。分子配列に由来する不均一なクーロン力によって基底状態近傍に複数の電子配置が発生するが、これらの非等価な電子配置が不均化の原因であると解釈した。この考えによると、僅かなエネルギー差の電子配置間を時間的にゆらいでいる状態が小さな不均化率をもたらす、この小さな（しかしゼロではない）不均化率をもつ状態が超伝導相に隣接していることを見出した。また、本年度より α -型の BEDT-TTF 塩の電子状態を系統的に調べる研究を開始した。まずバンド幅の狭い α' -(BEDT-TTF)₂IBr₂ の相転移の研究を行い、この物質の低温相が電荷秩序相であることを明らかにした。この他、多数の超伝導体を有する BDA-TTP 錯体の研究も新たに開始し、まず、この分子の基準振動解析を行い、電荷鋭敏モードの帰属を行った。
- b) 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。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て第二高調波の観測や対向分極した分域の観測などの研究を行ってきた。本年度は自作した SHG 顕微鏡を用いて新たに α -(BEDT-TTF)₂I₂Br と α' -(BEDT-TTF)₂I₂Br₂ において自発分極の観測に成功した。前者の物質は α -(BEDT-TTF)₂I₃ に類似しているが、後者の物質では電気抵抗が跳ぶ温度よりかなり低い温度で不均一な強誘電相を示すなど異常な結果が得られた。

B-1) 学術論文

M. TANAKA, K. YAMAMOTO, M. URUICHI, T. YAMAMOTO, K. YAKUSHI, S. KIMURA and H. MORI, "Charge-Ordering Phase Transition in β -(DMBEDT-TTF)₂PF₆ Neighboring on a Superconducting State," *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 024714 (8 pages) (2008).

S. IWAI, K. YAMAMOTO, F. HIRAMATSU, H. NAKAYA, Y. KAWAKAMI and K. YAKUSHI, "Hydrostatic Pressure Effect on Photoinduced Insulator-to-Metal Transition in Layered Organic Salt α -(BEDT-TTF)₂I₃," *Phys. Rev. B* **77**, 125131 (5 pages) (2008).

T. YAMAMOTO, H. M. YAMAMOTO, R. KATO, M. URUICHI, K. YAKUSHI, H. AKUTSU, A. SATO-AKUTSU, A. KAWAMOTO, S. S. TURNER and P. DAY, “Inhomogeneous Site-Charges at the Boundary between the Insulating, Superconducting, and Metallic Phases of β' -Type ET Molecular Charge-Transfer Salts, (ET = bisethylene-dithiatetrafulvalene),” *Phys. Rev. B* **77**, 205120 (14 pages) (2008).

H. NAKAYA, F. HIRAMATSU, Y. KAWAKAMI, S. IWAI, K. YAMAMOTO and K. YAKUSHI, “30 fs Infrared Spectroscopy of Photo-Induced Phase Transition in 1/4 Filling Organic Salt,” *J. Luminescence* **128**, 1065–1068 (2008).

K. YAMAMOTO, S. IWATI, S. BOYKO, A. KASHIWAZAKI, F. HIRAMATSU, C. OKABE, N. NISHI and K. YAKUSHI, “Strong Optical Nonlinearity and Its Ultrafast Response Associated with Electron Ferroelectricity in an Organic Conductor,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 074709 (6 pages) (2008).

T. MURATA, G. SAITO, Y. ENOMOTO, G. HONDA, Y. SHIMIZU, S. MATSUI, M. SAKATA, O. DROZDOVA and K. YAKUSHI, “Complex Formation between a Nucleobase and Tetracyanoquinodimethane Derivatives: Crystal Structures and Transport Properties of Charge-Transfer Solids of Cytosine,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **81**, 331–344 (2008).

K. KUBO, A. NAKAO, Y. ISHII, T. YAMAMOTO, M. TAMURA, R. KATO, K. YAKUSHI and G. MATSUBAYASHI, “Electrical Properties and Electronic States of Molecular Conductors Based on Unsymmetrical Organometallic-Dithiolene Gold(III) Complexes,” *Inorg. Chem.* **47**, 5495–5502 (2008).

M. URUICHI, C. NAKANO, M. TANAKA, K. YAKUSHI, T. KAIHATSU and J. YAMADA, “Infrared and Raman Spectroscopic Study of BDA-TTP [1,5-bis(1,3-dithian-2-ylidene)-1,3,4,6-tetrathiapentalene] and Its Charge-Transfer Salts,” *Solid State Commun.* **47**, 484–489 (2008).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

I. SHIROTANI, J. HAYASHI, K. TAKEDA, H. KAWAMURA, M. INOKUCHI, K. YAKUSHI and H. INOKUCHI, “Effects of Pressure and Shear Stress on the Absorption Spectra of Thin Films of Pentacene,” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **461**, 111–122 (2007).

Y. NAKANO, H. YAMOCHI, G. SAITO, M. URUICHI and K. YAKUSHI, “Isotope Effect on Metal–Insulator Transition of (EDO-TTF)₂XF₆ (X = P, As) with Multi-Instability of Metallic State,” *Solid State Sci.* **10**, 1780–1785 (2008).

Y. YUE, C. NAKANO, K. YAMAMOTO, M. URUICHI, K. YAKUSHI and A. KAWAMOTO, “Charge-Ordering Phase Transition in α' -(BEDT-TTF)₂IBr₂,” *J. Phys.: Conf. Series* **132**, 012007 (7 pages) (2008).

A. A. KOWALSKA, K. YAMAMOTO and K. YAKUSHI, “Ferroelectric Polarization in α -(ET)₂I₂Br Studied by Second-Harmonic Generation Microscopy,” *J. Phys.: Conf. Series* **132**, 012006 (5 pages) (2008).

B-4) 招待講演

薬師久弥, 「赤外・ラマン分光法でみた分子導体の電荷秩序状態」分子研ナノフォーラム, 岡崎, 2008年3月.

K. YAKUSHI, “Infrared and Raman studies of α -type BEDT-TTF salts,” International Symposium of Molecular Conductors ISMC2008, Okazaki, July 2008.

山本 薫, 「電子の結晶化で分極する有機強誘電体: その光学非線形性と超高速光応答」分子研コロキウム, 2008年10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

学協会役員等

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).

学会の組織委員等

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, 大学共同利用機関等の委員等

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, 2007-2008).

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-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, 「物性化学」2008年10月14日-11月25日.

B-10) 競争的資金

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

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

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

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

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

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」薬師久弥 (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」薬師久弥 (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

電荷秩序相に隣接する電子相で重要な課題は電荷密度ゆらぎと超伝導の関係で、これまでに我々の研究を含めて超伝導相に電荷密度ゆらぎの発達した電子状態が隣接しているとの研究が発表されているが、まだ電荷密度ゆらぎを直接観測した例はない。ゆらぎを直接観測するにはより局在性の強い物質が有利である。今後は α -型BEDT-TTF 塩における電荷密度ゆらぎと超伝導との関係を調べる方向へ向かう。局在性の強い α' -(BEDT-TTF)₂IBr₂の遠赤外領域の反射率は広い温度範囲での相転移のゆらぎ現象を示唆している。 θ -型BEDT-TTF 塩その他の物質の高温相で発生する遅いゆらぎと共通の現象である。このような物質で温度変調反射率の測定を試み、可視領域で十分な反射率変化を確認した後、ゆらぎを観測する手段として動的光散乱法を適用することを計画している。

電荷秩序相の電子状態で残された課題は強誘電相である。現在強誘電相の確定しているのは α -(BEDT-TTF)₂I₃ だけであるので、できるだけ多くの物質で強誘電相を見出すことが重要であるとの視点で研究を進めている。本年度 α -(BEDT-TTF)₂I₂Br において強誘電相を発見できたのは有意義であった。ただし、この物質のその他の物性については何も分かっていない。電気、磁気、熱などの基本的な物性を明らかにすべきである。また、同型ではないが類似の構造をもつ α' -(BEDT-TTF)₂IBr₂ において不均一な強誘電相を発見した。巨視的な分極が発生する温度がこの物質の電気抵抗に現れる相転移温度よりかなり低いなど、この物質についてはさらに詳しい研究が必要である。

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) NMR 法による有機導体・低次元スピン系の電子状態理解
- b) 導電性・磁性非晶性分子性物質の電子状態研究
- 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、高圧力下の測定ならびに新規の塩を作成し、電荷秩序相および基底状態に対する研究を行っている。この他、二次元電荷秩序系やディラック粒子系に対しても研究を行っている。
- b) 上記の結晶性分子性固体研究のほかに、種々の導電性・磁性自己組織化系に対する研究も行っている。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により調べている。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、同グループが開発したヘリカル磁性体や、分子研江グループが開発した自己組織化 Cu, Ni 錯体の磁性研究も行っている。
- 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ダイナミクス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. MAEDA, T. HARA, K. FURUKAWA and T. NAKAMURA, "Multi-Frequency ESR Studies on Low-Dimensional Antiferromagnets, ζ -(BEDT-TTF) $_2$ PF $_6$ (THF) and γ -(BEDT-TTF) $_2$ PF $_6$," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **81**, 84–90 (2008).

H. M. YAMAMOTO, Y. KOSAKA, R. MAEDA, J. YAMAURA, A. NAKAO, T. NAKAMURA and R. KATO, "Supramolecular Insulating Networks Sheathing Conducting Nanowires Based on Organic Radical Cations," *ACS Nano* **2**, 143–155 (2008).

M. ITOI, C. ARAKI, M. HEDO, Y. UWATOKO and T. NAKAMURA, "Anomalously Wide Superconducting Phase of One-Dimensional Organic Conductor (TMTTF) $_2$ SbF $_6$," *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 023701 (4 pages) (2008).

T. HARA, K. FURUKAWA, T. NAKAMURA, Y. YAMAMOTO, A. KOSAKA, W. JIN, T. FUKUSHIMA and T. AIDA, "Possible One-Dimensional Helical Conductor: Hexa-*peri*-hexabenzocoronene Nanotube," *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 034710 (6 pages) (2008).

R. CHIBA, K. HIRAKI, T. TAKAHASHI, H. M. YAMAMOTO and T. NAKAMURA, "Charge Disproportionation and Dynamics in θ -(BEDT-TTF)₂CsZn(SCN)₄," *Phys. Rev. B* **77**, 115113 (10 pages) (2008).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

F. IWASE, K. SUGIURA, K. FURUKAWA and T. NAKAMURA, "¹³C NMR Study of the Chemical Pressure Effect in (TMTTF)₂[(AsF₆)_x(SbF₆)_{1-x}] ($x \sim 0.5$)," *J. Phys.: Conf. Series B* **132**, 012015 (4 pages) (2008).

B-3) 総説, 著書

古川 貢, 中村敏和, 「W-band ESR による分子性固体の物性研究」*日本赤外線学会誌* **16**, No.2特集「ミリ波, テラヘルツ, 赤外分光の物性応用」40-44 (2007).

中村敏和, 古川 貢, 「光誘起相転移・光誘起現象の観点から迫る分子性固体」*レーザー研究* **36**, No.6特集「光誘起相転移とその計測技術」339-342 (2008).

荒木千恵子, 上床美也, 糸井充穂, 辺土正人, 中村敏和, 「超高压下における(TMTTF)₂SbF₆の異常超伝導—擬一次元有機導体の新規な相図の提案—」*固体物理* **43**, No.7, 409-418 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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 (2004-2008).

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).

学会の組織委員等

Asia-Pacific EPR/ESR Symposium 2006, Novosibirsk, Russia, International Organizing Committee (2006).

分子構造総合討論会2006 (静岡) プログラム委員 (2006).

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 (2007).

Asia Pacific EPR Society—EPR Symposium 2008, Cairns, Queensland, Australia, International Advisory Committee (2008).

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

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」2008年12月15日-17日.

B-10) 競争的資金

基盤研究(B)，「低次元系の特異な電子相を利用したデバイス創製ならびにスピンドYNAMIX研究」中村敏和 (2008年-2011年).

特定領域研究「100テスラ領域の強磁場スピン科学」公募班「シアロバクテリア由来光化学II複合体の高磁場ESRによる研究」中村敏和 (2008年-2009年).

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).

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：有機化学，高分子科学

A-2) 研究課題：

- a) 電子系共役多核金属集積体の創製と電子機能の開拓
- b) 電子系シート状高分子および共有結合性有機骨格構造の創製と機能開拓

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 本研究では、 π 電子系で連結した新規な共役多核遷移金属錯体を設計し、 π - π 相互作用を活用することにより金属錯体の空間配置が精密に制御された集積体の構築に成功した。この場合、金属サイトは互いに共役しているため、分子内の磁氣的・電子的な相互作用に加え、集積化することにより、 π 共役系を介した長距離分子間相互作用が期待できる。二核金属錯体は軸比の極めて高いベルトを与えることを見いだした。この場合、反強磁性相互作用が観察され、二つの金属は互いに逆のスピンの向きを保つことが分かった。興味深いことに、ベルトは電子伝導とホール伝導を持ち合わせるという特異な伝導機能を示した。これまでに、有機反強磁性半導体材料は有機半導体と磁性金属塩の共結晶のみに実現されている。この分子のバージョンアップとして、周囲に両親媒性ユニットを導入した。この場合、異種金属イオンを位置選択的に搭載できるという著しい特徴を持つ。特に、金属種を種ごとに整理して並ぶことで、これまでに困難であった異方性の持った金属集積体の構築が可能となった。興味深いことに、常磁性金属を用いた場合、温度に依存しない Pauli 常磁性が観察された。さらに、PCI-AFM 法を用いて検討したところ、中性分子にもかかわらず、伝導性を示すというユニーク現象を見いだした。これは、中性有機分子の集積体で伝導を示す例として、注目されている。以上とは関連して、共役三核金属錯体は二次元シートを形成し、光励起エネルギーを運搬でき、光伝導であることを見いだした。
- b) 共有結合性有機骨格はメゾやマイクロサイズの細孔を有する結晶性高分子である。重縮合反応により合成され、細孔サイズが骨格により一義的に規定されるため、ガス吸着・貯蔵ための多孔性物質として注目されている。これに対して、本研究では、共有結合性有機骨格が提供する規則正しい配列構造に着目し、 π 電子系シート状高分子を設計し、光、電子、ホールなどの相互作用を通じて、世界に先駆けて光・電子機能性共有結合性有機骨格構造の創出に成功した。具体的に、拡張 π 共役分子であるトリフェニレンやピレン誘導体をモノマーとして用い、重縮合反応により新規な π 電子系共有結合性高分子骨格構造を合成した。この場合、シート状ポリマーを形成し、 π - π スタックにより厚さが約百ナノ、長さが数ミクロンという軸比の極めて高いベルトを与える。紫外線や可視光を用いてトリフェニレンやピレンユニットを励起すると、いずれも強い青色蛍光を放すことが分かった。励起スペクトル測定からユニット間のエネルギー移動が示唆された。また、励起子は特定のユニットに局在することなく、骨格を移動していることが分かった。すなわち、有機骨格構造体は紫外から可視光まで幅広い領域の光を捕集し、青色発光に効率的に変換できることを実証した。さらに、電気伝導を示し、p 型半導体であることを見いだした。『光・電子機能性有機骨格構造体』の初めての例として注目されている (*Angew. Chem., Int. Ed.* の VIP およびアメリカ化学会会員誌 *C&EN* にハイライト)。

B-1) 学術論文

S. WAN, J. GUO, J. KIM, H. IHEE and D. JIANG, “A Belt-Shaped, Blue Luminescent and Semiconducting Covalent Organic Framework,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **47**, 8826–8830 (2008).

D. YANG, G. GUO, J. HU, C. WANG and D. JIANG, “Hydrothermal Treatment to Prepare Hydroxyl Group Modified Multi-Walled Carbon Nanotubes,” *J. Mater. Chem.* **18**, 350–354 (2008).

B-4) 招待講演

D. JIANG, “Supramolecular Approach to Spin Functional Materials,” China-Japan Joint Symposium on the π -Conjugated Molecules towards Functional Materials, Beijing (China), February 2008.

D. JIANG, “Macromolecular and Supramolecular Approaches to Photo and Spin Functional Materials,” The 2008 Asian-Core Symposium and Annual Meeting, KAIST, Deajeon (Korea), March 2008.

D. JIANG, “Macromolecular and Supramolecular Approaches to Photofunctional Nanomaterials,” The Second CAS Symposium on Applied Chemistry, Changchun (China), September 2008.

D. JIANG, “Macromolecular and Supramolecular Approaches to Photo and Spin Functional Nanomaterials,” 5th International Symposium on High-Tech Polymer Materials (HTPM-V), Beijing (China), October 2008.

D. JIANG, “Macromolecular and Supramolecular Approaches to Photofunctional Nanomaterials,” 2008 National Symposium on Solar Energy Photochemistry and Photocatalysis, Shanghai (China), November 2008.

D. JIANG, “Topological Design of Sheet-Shaped Macromolecules and Organic Frameworks,” China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Beijing (China), December 2008.

B-6) 受賞, 表彰

江 東林, 2000年度日本化学会年次大会講演賞 (2000).

江 東林, 2005年度日本化学会若手特別講演賞 (2005).

江 東林, 2006年度高分子学会 Wiley 賞 (2006).

江 東林, 2006年度科学技術分野文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2006).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第二回デンドリマー国際会議実行委員 (2000).

Winter School of JSPS Asian Core Program on Frontiers of Materials, Photo and Theoretical Molecular Science, Beijing, December 5–8, Organizer (2006).

China-Japan Joint Symposium on the π -Conjugated Molecules towards Functional Materials, Beijing, February 24–25, Organizer (2008).

Sokendai Asian Winter School “Molecular Sciences on Different Space-Time Scales,” Okazaki, December 9–12, Co-Organizer (2008).

China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Beijing, December 20–21, Organizer (2008).

B-10) 競争的資金

奨励研究,「デンドリマー組織を用いた高反応性金属ポルフィリン錯体の空間的孤立化と新反応の開拓」江 東林 (1997年–1998年).

日本科学協会笹川科学研究,「デンドリマーを用いた金属ポルフィリン錯体の孤立化」江 東林 (1997年).

特定領域研究(A),「デンドリマーで被覆した分子ワイヤーの合成と機能」江 東林 (1999年).

若手奨励研究(A),「赤外線を用いた人工光合成系の構築」江 東林 (1999年–2000年).

科学技術振興機構さきがけ研究「構造制御と機能領域」,「樹木状金属集積体を用いたスピン空間の構築と機能開拓」江 東林 (2005年–2008年).

基盤研究(B),「光・磁気スイッチング配位高分子の設計と機能」江 東林 (2008年–2010年).

C) 研究活動の課題と展望

分子研に着任して4年目になりますが,『ゼロ』からの設計と合成をもとに出発しました。今頃やっと芽がすこし見えてきています。これから大きな木になれるように育てていきます。

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) 膜表面性タンパク質フォスホリパーゼ C- $\delta 1$ PH ドメインの膜曲率依存性構造・機能変化に関する固体 NMR による研究
- b) 固体 NMR 研究のための膜表面性タンパク質結合自発磁場配向脂質膜試料調製法の開発
- c) 静止試料を対象とした新規固体 NMR 分極移動法の開発
- d) Spin-1 核の高感度固体 NMR 測定法の開発
- e) 920MHz 超高磁場固体 NMR 用試料温度調節機能付き MAS プロープの開発
- f) 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) 細胞内情報伝達に關与する膜表面性タンパク質フォスホリパーゼ C(PLC)- $\delta 1$ は基質である IP_3 に特異的に結合する脂質結合ドメインであるプレクストリンホモロジー (PH) ドメインを有する。PH ドメインはまた、非特異的に脂質膜表面に結合するアンカー部位が存在することが発見されている。本研究では、これらの脂質結合部位が脂質膜表面の曲率によって構造変化することを見出し、当該タンパク質への構造的影響について固体 NMR を用いて解析を行った。
- b) バイセルは一般に飽和脂質からなり、含有脂質が液晶相となる温度域において静磁場下で円盤状の平面膜を形成して自発的磁場配向する。本研究では適切な割合で不飽和脂質を添加することにより、脂質膜厚を調整すると共に、室温付近で自発磁場配向するバイセル試料の調製法開発を行った。さらに、低水和条件下で凝集し易い膜表面性タンパク質が低水和条件を経ずに本研究で開発したバイセル表面に結合させる試料調製法を開発した。上述の PLC- $\delta 1$ PH ドメイン - バイセル試料の ^{31}P -NMR を観測し、自発磁場配向を確認した。
- c) 配向試料を対象とした新規の異種核間分極移動法を開発した。本測定法では、既存の測定法に対して、双方の核種でラジオ波の搬送周波数への依存性を著しく改善し、定量的な信号強度が得られることを、液晶試料を用いて検証した。
- d) 重水素核 (2H) や窒素核 (^{14}N) など核スピン $I=1$ 四極子核の固体 NMR において、シフト項が存在する場合にもスペクトルの感度を向上させ得る手法を開発した。本手法は微量試料で測定が可能であり、高温や極低温等での測定にも適用できる。本手法の有用性を、モデル化合物の 2H NMR で実証した。
- e) 共同利用に供する試料温度調節が可能な 920MHz 超高磁場固体 NMR 用の MAS プロープの開発を日本電子社と共同で開始した。既存の 920MHz 用 MAS プロープのベアリングガスのラインに真空ガラス二重管デュアーを導入して断熱し、ベアリングガスをデュアー内部に設置したヒーターの発熱調節により試料温度を調節する方式を用いた。本機構の導入により 0 ~ 80 °C まで試料温度を精密に調節することを目標にしている。現在、接合部位周辺の断熱性の改善のため設計変更を行っており、来年度の完成、運用を目指している。
- f) 誘電損失の大きい含水生体試料に有効な静止プロープの開発を行っている。これに試料状態を変調する機構を組み込み、年度内の完成を目指す。また、無機材料の観測を目的として、既存の市販プロープを小径コイル仕様に改造し、強いラジオ波の照射と温度可変測定を可能なプロープを作成した。

B-4) 招待講演

西村勝之,「固体NMRの基礎」第20回高分子学会NMR講座,東京工業大学,2008年10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).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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) 競争的資金

萌芽研究,「試料状態変調型固体NMRプローブ開発とその適用」西村勝之(2008年-2009年).

若手研究(B),「揺動磁場下の固体高分解能NMR——二次元展開と高速化——」飯島隆広(2008年-2009年).

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)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

当グループで研究対象としている膜表面性タンパク質の検出感度が著しく低いいため,多次元固体NMR測定を行うことができない状況にあった。本年度は検出感度改善を目的に試料調製法の開発に多くの時間を費やした。今後,これまで開発した測定法を膜表面性タンパク質に適用して本格的な解析を行いたいと考えている。また,この試料調製により試料感度の改善に加え,当該試料に必要な測定条件での磁場配向能も確立しつつある。今後は当該タンパク質の配向条件下での構造解析に備え,それに向けた配向試料を対象とした新規測定法の開発を行っていく予定である。また,その過程で得られたアイデアに基づき,分子材料等を対象とした測定法開発も行いたい。

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）

平本 昌宏（教授）（2008年4月1日着任）

A-1) 専門領域：有機半導体，有機太陽電池，有機エレクトロニクスデバイス

A-2) 研究課題：

- a) 超高純度化有機半導体を用いた有機薄膜太陽電池
- b) 有機薄膜太陽電池の長期動作試験
- c) 近赤外域に感度を有する有機薄膜太陽電池

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機半導体もシリコンと同じ半導体であるので，その真の性質，機能を見だして実用デバイスに利用するには，精製によって，シリコンと言われるイレブンナイン（11N）並みに，超高純度化する技術が欠かせない。我々のグループでは，有機半導体を1気圧の窒素気流中で昇華精製することで，大きな有機単結晶の形で取り出し，精製効率を格段に向上させることに成功した。例えば， C_{60} の場合，数ミリ角の単結晶が得られ，純度はセブンナイン（99.99999%，7N）以上であることを確認した。7N- C_{60} と5N- H_2Pc （無金属フタロシアニン）の共蒸着i層を有する，p-i-n接合セル [Ag/NTCDA(透明n層：600 nm)/ C_{60} : H_2Pc (共蒸着i層：1ミクロン)/ H_2Pc (p層：30 nm)]において，曲線因子（FF）の値は，共蒸着i層膜厚1ミクロンという驚くべき厚さでも低下せず，セルは黒茶色で，可視域の太陽光をほぼ100%吸収利用できたため，シリコン太陽電池とほぼ同等の，20 mA/cm²近い短絡光電流（ J_{sc} ），世界最高の変換効率5.3%を観測した。なお，低純度 C_{60} を用いたp-i-nセルでは，共蒸着i層を130 nmを越えて厚くすると，セルの内部抵抗が増大して，深刻なFF， J_{sc} の低下が起きるため，可視光すべてを吸収利用できず， J_{sc} は10 mA/cm²どまりで高効率は得られない。以上の結果は，有機半導体の電子材料レベルの高純度化が，セル性能の本質的な向上にいかに重要であるかを示している。
- b) 有機薄膜太陽電池の実用化のためには，長期動作を実証する必要がある。今回は，p-i-n接合セルを，透明電子輸送層として働く，AlドープZnO（AZO）で被覆し，長期動作試験を行った。セル構造は，[Ag(100 nm)/AZO(50 nm)/In(20 nm)/ C_{60} (50 nm)/ H_2Pc : C_{60} 共蒸着i層(100 nm)/ H_2Pc (15 nm)/ITO]である。AZOは，空気導入下（ 10^{-4} Torr），基板温度+50 °Cにおいて，電子ビーム蒸着によって有機薄膜上に堆積した。伝導度は 3.7×10^3 Scm⁻¹で，ITOに匹敵する値が得られた。AZOは，シヨート防止層として非常に有効で，面積1 cm²のセルを歩留まり良く作製できた。高真空（ $< 10^{-7}$ Torr），短絡状態光照射下での，1000時間（42日）動作テストを行ったところ，42日（1000時間）後も，効率低下は5%内におさまっており，ほぼ安定動作を実証できた。
- c) シリコン太陽電池は1100 nmまでの近赤外まで感度を持っているが，有機太陽電池は，これまで700 nmまでの可視域にしか感度を持っていなかった。今回，我々のグループでは，鉛フタロシアニンと C_{60} の共蒸着による活性層によって，700 nmから1000 nmの近赤外域に感度を持つ有機太陽電池を初めて作製することに成功した。外部量子収率は900 nmで約50%に達した。可視域に感度を持つセル（結果(a)）と，本セルを組み合わせることで，20 mA/cm²を越える短絡光電流（ J_{sc} ）の実現も可能と考えている。

B-1) 学術論文

K. SAKAI and M. HIRAMOTO, “Efficient Organic p-i-n Solar Cells Having Very Thick Codeposited i-Layer Consisting of Highly Purified Organic Semiconductors,” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **491**, 284–289 (2008).

H. SHIOKAWA and M. HIRAMOTO, “Nanostructure Control by Interlaminated Fullerene/Phthalocyanine Ultrathin Films in p-i-n Organic Solar Cells,” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **491**, 277–283 (2008).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

M. HIRAMOTO, “Efficient Organic p-i-n Solar Cells Having Very Thick Codeposited i-Layer Composed of Highly Purified Organic Semiconductors,” *Proc. SPIE Vol. 7052*, Organic photovoltaics IX, 70520H-1–6 (2008).

B-3) 総説, 著書

平本昌宏, 「有機太陽電池」*応用物理(基礎講座)* **77**(5), 539–544 (2008).

平本昌宏, 「超高純度有機半導体を用いた高効率有機薄膜太陽電池」*機能材料(特集企画「有機薄膜太陽電池の最新動向」)* シーエムシー出版, **28**(6), 25–32 (2008).

平本昌宏, 「実用化に向けた有機薄膜太陽電池技術動向」*ディスプレイ(特集「燃料電池・太陽電池」)* **14**(10), 34–38 (2008).

平本昌宏, 「低分子系有機固体太陽電池の開発」*化学工業* **59**(10), 776–781 (2008).

平本昌宏, 「有機薄膜太陽電池の現状と将来」*未来材料(特集: エネルギー化学材料・デバイスの現状と将来)* **8**(12), 25–30 (2008).

平本昌宏, 「有機半導体の超高純度化による高効率有機薄膜太陽電池」*Molecular Electronics & Bioelectronics*, **19**(4), 221–230 (2008).

平本昌宏, 「有機太陽電池」*「プリンタブル有機エレクトロニクスの最新技術」* 第7章第6節, シーエムシー出版(株) pp. 220–230 (2008).

平本昌宏, 「分子袋小路の概念と有機増幅型光センサー」*「有機薄膜形成とデバイス応用展開」* 第2章ドライプロセスによる薄膜形成技術とデバイス応用 第7節, シーエムシー出版(株) pp. 70–79 (2008).

平本昌宏, 「有機太陽電池の高効率化と耐久性評価」*「新世代(プリンタブル)太陽電池——印刷プロセスと材料技術」* 第3章第5節色素増感太陽電池, 有機太陽電池, シーエムシー出版(株) pp. 220–230 (2008).

B-4) 招待講演

M. HIRAMOTO, “Efficient organic p-i-n solar cells having very thick codeposited i-layer composed of highly purified organic semiconductors,” *SPIE Vol. 7052*, Organic photovoltaics IX, San Diego (U.S.A.), August 2008.

M. HIRAMOTO, “Efficient Organic p-i-n Solar Cells Having Very Thick Codeposited i-Layer Using Seven-Nine Purified Fullerene,” 8th International Conference on Nano-Molecular Electronics, Kobe Portpia Hotel, Kobe (Japan), December 2008.

平本昌宏, 「有機太陽電池の界面制御技術と実用化への課題」*JCII 界面制御による化学と電子工学の融合研究会(第2回)——電子材料の極限構造制御と超機能発現——「次世代有機電子デバイス・材料開発」実用化への期待(財)化学技術戦略推進機構(JCII)* 東京, 2008年3月.

平本昌宏,「実用化に向けた有機薄膜太陽電池技術動向」オルガテクノプレセミナー「フィルム型太陽電池技術動向——有機薄膜太陽電池の現状と未来」お茶の水「総評会館」東京,2008年4月.

平本昌宏,「低分子系有機薄膜太陽電池の現状と動向」電子ジャーナル193回技術セミナー:有機薄膜太陽電池徹底解説,お茶の水「総評会館」東京,2008年6月.

平本昌宏,「わかりやすく解説:有機薄膜系太陽電池」プレスジャーナル太陽電池入門セミナー,学士会館,東京,2008年6月.

平本昌宏,「Efficient organic p-i-n solar cells having very thick codeposited i-interlayer consisting of highly purified organic semiconductors」第5回「次世代の太陽光発電システム——薄膜太陽電池のイノベーションと地域連携——」宮崎市民プラザ,2008年6月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の現状技術と将来」自然順応型ネオマテリアル創成研究会新エネルギー技術創成研究会第1回合同研究会——新エネルギー分野での材料資源枯渇対策(減量・代替技術)——,大阪リバーサイドホテル,2008年7月.

平本昌宏,「超高純度有機半導体を用いた高効率有機薄膜太陽電池」第4回有機太陽電池シンポジウム——ハイブリッドソーラーセルへの展開——,京大会館,2008年7月.

平本昌宏,「超高純度有機半導体を用いた低分子系有機薄膜太陽電池」日本学術振興会合同研究会情報科学用有機材料第142委員会,東京理科大学森戸記念館,2008年7月.

平本昌宏,「有機半導体高純度化技術の太陽電池への応用」第69回応用物理学会シンポジウム「有機結晶はどこまで進化するか?(有機結晶成長の最新動向と光機能の発現)」,中部大学,2008年9月.

平本昌宏,「低分子系薄膜有機太陽電池の開発」出光興産(株)先進技術研究所,2008年9月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の高効率化,耐久性,将来展望」技術情報協会セミナー「有機薄膜太陽電池の高変換効率化・高耐久化と最適構造制御」ゆうぼうと,五反田,東京,2008年9月.

平本昌宏,「有機ヘテロ太陽電池」第35回アモルファスセミナー「薄膜太陽電池の現状と新展開」京都ガーデンパレス,2008年10月.

平本昌宏,「低分子有機太陽電池の基礎と将来展望」オルガテクノ2008有機ビジネステクニカルセミナー B2有機薄膜太陽電池技術展望,東京ビッグサイト,2008年10月.

M. HIRAMOTO, “Development of organic p-i-n solar cells,” Prof. Ching Tang Lab.seminar, University of Rochester, Chemical Engineering, Rochester (U.S.A.), November 2008.

平本昌宏,「有機太陽電池の最前線」平成20年度日本化学会東北支部講演会「次世代有機エレクトロニクスデバイス・材料の最前線」東北大学青葉記念会館,2008年11月.

平本昌宏,「有機太陽電池における有機半導体の基礎科学——特徴・作動メカニズムと高性能化へのアプローチ——」情報機構セミナー,大田区産業プラザ,東京,2008年11月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池に関する最近の技術動向」(社)電子情報技術産業協会薄膜系太陽電池技術調査分科会セミナー,千代田ファーストビル南館,東京,2008年11月.

平本昌宏,「有機系太陽電池実用化開発の現状」第5回集積光デバイス技術研究会——集積光デバイス技術のコンシューマ展開——,大阪大学銀杏会館,2008年11月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の実用化に向けて」第3回「太陽電池実用化技術研究会」名古屋桜華会館,2008年12月.

平本昌宏,「高純度有機半導体を用いた有機薄膜太陽電池」日本画像学会シンポジウム「電子写真相材料の新展開」東京発明会館,東京,2008年12月.

平本昌宏,「有機半導体の超高純度化技術と有機太陽電池への応用」故関一彦先生追悼シンポジウム「有機エレクトロニクス関連薄膜・界面の電子構造と電子過程」名古屋大学野依記念学術交流館, 2008年 12月.

平本昌宏,「有機材料の純度と精製方法,物性への影響」大阪大学有機エレクトロニクス研究会 Winter School「有機エレクトロニクスにおける物性値の意味と評価法」神戸しあわせの村, 2008年 12月.

平本昌宏,「有機半導体高純度化技術の有機太陽電池への応用」放射光/表面電子顕微鏡とナノ精密材料科学シンポジウム(第4回放射光表面科学部会シンポジウム)北海道大学, 2008年 12月.

B-5) 特許出願

韓国特許出願 10-2008-0022605,“ Organic photoelectric conversion film and photoelectric conversion device having the same,” 平本昌宏, Kim, 2008年.

韓国特許出願 10-2008-0049678,“ Organic photoelectric conversion film, and photoelectric conversion device and image sensor having the same,”平本昌宏, Kim, 2008年.

韓国特許出願 10-2008-0108509,“ Photoelectric conversion film, photoelectric conversion device and color image sensor having the photoelectric conversion film,”平本昌宏, Kim, 2008年.

B-6) 受賞,表彰

平本昌宏,国立大学法人大阪大学教育・研究貢献賞 (2006).

平本昌宏,応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会論文賞 (2006).

平本昌宏, JJAP(Japanese Journal of Applied Physics) 編集貢献賞 (2004).

平本昌宏,電子写真学会研究奨励賞 (1996).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

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 (1997-1998, 2001-2002).

応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会年会講演プログラム委員 (2002-2003).

Korea-Japan Joint Forum (KJF)—Organic Materials for Electronics and Photonics, Organization Committee Member (2003-).

「有機固体における伝導性・光伝導性および関連する現象」に関する日中合同シンポジウム組織委員 (2007-).

応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会年会講演プログラム委員長 (2008-2009).

学会誌編集委員

Japanese Journal of Applied Physics (JJAP) 誌 編集委員 (2001-2002, 2004-2007).

Japanese Journal of Applied Physics (JJAP) 誌 ゲストエディター (2005).

競争的資金等の領域長等

東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究「有機半導体デバイスの基礎と応用」研究代表者 (2003-2005).

B-10) 競争的資金

基盤研究(C)(2),「高効率有機3層接合型固体太陽電池の開発」平本昌宏(2006年-2007年).

基盤研究(C)(2),「垂直接合型有機固体太陽電池の開発」平本昌宏(2004年-2005年).

基盤研究(C)(2),「分子結晶におけるステップ構造制御と増幅型光センシングデバイス」平本昌宏(2002年-2003年).

基盤研究(B)(2),「有機/金属界面のナノレベル構造制御と光電流増倍デバイス」平本昌宏(1977年-1998年).

特許補完研究プログラム,「光電流増倍現象等を利用したガス検知方法及びガスセンサー」平本昌宏(2003年).

シーズ育成試験,「p-i-n接合型有機固体太陽電池」平本昌宏(2005年).

科学技術振興機構産学共同シーズイノベーション化事業顕在化ステージ,「高効率有機固体太陽電池の実用化試験」平本昌宏(2006年-2007年).

科学技術戦略推進機構アカデミアショーケース研究助成,「p-i-n有機太陽電池の開発」平本昌宏(2006年).

(財)関西エネルギー研究基金(KRF)助成,「有機半導体のpn制御とp-i-n有機固体太陽電池の開発」平本昌宏(2008年).

B-11) 産学連携

共同研究(三洋電機)「高純度新規電子供与性材料による高効率有機薄膜太陽電池の作製」平本昌宏(2008年).

共同研究(新日本石油)「有機薄膜太陽電池の研究開発」平本昌宏(2008年).

C) 研究活動の課題と展望

2008年4月に分子研に着任したため,本年度は,有機半導体の超高純度化と有機太陽電池への応用のテーマに集中し,有機薄膜太陽電池研究の立ち上げを最優先とした。有機太陽電池については,以下の予定を考えている。有機半導体を単結晶析出によってイレブンナインまで超高純度化する技術,および,その純度を精確に評価する技術を確立し,多種多様な有機半導体に応用する。近赤外域に吸収を持つ有機半導体に超高純度化技術を応用し,また,3元共蒸着層によって,可視,近赤外域すべてをカバーすることで,短絡光電流(J_{sc})=20-30 mA/cm²を得る。1V程度の大きな開放端電圧(V_{oc})を示す,ドナー/アクセプター有機半導体の組み合わせの系に,超高純度化技術を適用して, J_{sc} を飛躍的に向上させ, V_{oc} が1V程度,かつ, J_{sc} が20 mA/cm²程度のセルを実現する。金属/有機界面をオーミック接合化する技術を確立し,曲線因子(FF)を0.8程度まで増大させる。可視光領域と近赤外領域にそれぞれ感度を持つ2つのセルを積層連結した,波長分割タンデムセルを作製する。

以上の研究とは別に,現在パーコレーションに頼っている共蒸着i層ナノ構造作製を,完全に人工的に自由自在に行うために,ナノインプリントと真空蒸着を融合したナノ構造設計方法を確立し,理想ナノ構造である直立超格子ナノ構造を組み込んだ有機太陽電池の実現を目指す。また,STMを用いた弾道電子放出顕微鏡(BEEM)による,有機/金属界面ナノエネルギー構造の解明を行う。

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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) オリゴフルオレンはオリゴフェニレンより平面性が高く、共役がより有効なため、電子親和力が高くなることが期待される。今回、オリゴフルオレンを完全フッ素化し、4量体まで合成した。予想通り電子親和力が非常に高く、薄膜では既存の材料より高い電子移動度と優れたアモルファス性を示した。有機 EL の電子輸送材料、あるいは燐光 EL のホール・エキシトンブロック材料としての応用が今後期待される。
- b) p 型有機半導体であるアントラセン 2 量体は、高いイオン化ポテンシャル (5.6 eV) を有するため、酸化劣化に対する耐性が高い。今回、ゲート絶縁膜表面処理 (オクチルトリクロロシラン:OTS) およびコンタクト抵抗低減 (MoO_x/Au) を施すことにより FET 特性を大幅に改善することができた。これによって素子の移動度は $0.25 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ から $1.0 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ へ向上した。

B-1) 学術論文

K. OHKUBO, Y. SAKAMOTO, T. SUZUKI, T. TSUZUKI, D. KUMAKI and S. TOKITO, "Synthesis, Structure, and Transport Property of Perfluorinated Oligofluorenes," *Chem. Eur. J.* **14**, 4472–4474 (2008).

N. KOCH, A. GERLACH, S. DUHM, H. GLOWATZKI, G. HEIMEL, A. VOLLMER, Y. SAKAMOTO, T. SUZUKI, J. ZEGENHAGEN, J. P. RABE and F. SCHREIBER, "Adsorption-Induced Intramolecular Dipole: Correlating Molecular Conformation and Interface Electronic Structure," *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 7300–7304 (2008).

I. SALZMANN, S. DUHM, G. HEIMEL, J. P. RABE, N. KOCH, M. OEHZELT, Y. SAKAMOTO and T. SUZUKI, "Structural Order in Perfluoropentacene Thin Films and Heterostructures with Pentacene," *Langmuir* **24**, 7294–7298 (2008).

D. KUMAKI, T. UMEDA, T. SUZUKI and S. TOKITO, "High-Mobility Bottom-Contact Thin-Film Transistor Based on Anthracene Oligomer," *Org. Electron.* **9**, 921–924 (2008).

B-9) 学位授与

大久保公敬, 「Synthesis, Characterization, and Transport Property of Perfluorinated Oligofluorenes」2008年9月, 博士(理学)

B-10) 競争的資金

基盤研究(C), 「有機 EL 素子のためアモルファス性有機電子輸送材料の開発」鈴木敏泰 (1999年–2000年).

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

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 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、ウエ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) ビピリジン・ターピリジンの二成分結合型配位子を新たに開発し，コバルト(II)錯体の合成を行った。この研究の目的は，ポルフィリン・コバルト錯体結合化合物の光励起電子移動系を構築するにあたって，コバルト錯体の酸化数が増加しても構造を保持できるキレート型配位子を開発することである。このため，二成分を結合するのみならず，第三の成分を結合する官能基も導入した。メチレン鎖の長さの異なる化合物と，それぞれのコバルト(II)錯体を合成し，期待通り二成分が同じコバルトイオンに配位した単核錯体が得られた。また，電気化学測定から，メチレン鎖の長さによって酸化還元挙動が異なることが示唆された。
- b) 植物の光化学系IIタンパク質複合体の酸素発生部位に合成マンガン錯体を結合する実験を行った。植物から抽出したタンパク質からマンガンイオンを取り除き，合成マンガン錯体を結合させたところ，前年度に開発したトリアリールメシチレントリカルボン酸配位子のマンガン(III)錯体について，高い酸素発生活性が見られた。錯体が結合した際に起きる構造変化を検出するため，配位子にフッ素原子を導入し，¹⁹F NMRを測定したところ，非常に低濃度であるにも関わらず，配位子由来のシグナルが明瞭に観測された。この方法は，光化学系IIと合成金属錯体の相互作用について研究するための強力な手段となることがわかった。
- c) キノン結合 dendrimer・ポルフィリン・ニトロキソドラジカル(TEMPO)が順に結合した三元系分子を合成した。この研究の目的は，これまで展開してきたキノンプール分子の化学と，TEMPO・ポルフィリン・キノンをを用いたアルコールの光酸化反応を組み合わせることであり，アルコールを電子源としたキノンプールの光化学的還元反応を目指している。Dendrimer部分のアミノ基とポルフィリン部分のカルボキシル基を独立に保護・脱保護してキノン・TEMPOをそれぞれ結合することで，三元系分子の合成に成功した。

B-1) 学術論文

T. NAGATA, S. K. ZHARMUKHAMEDOV, A. A. KHOROBRYKH, V. V. KLIMOV and S. I. ALLAKHVERDIEV, "Reconstitution of the Water-Oxidizing Complex in Manganese-Depleted Photosystem II Preparations Using Synthetic Mn Complexes: A Fluorine-19 NMR Study of the Reconstitution Process," *Photosynth. Res.* **98**, 277–284 (2008).

B-4) 招待講演

T. NAGATA, Y. KIKUZAWA, T. NAGASAWA and S. I. ALLAKHVERDIEV, "Single-Molecular Quinone Pools: An Approach toward Photosynthetic Energy Conversion from Organic Chemistry," *Photosynthesis in the Global Perspective*, Indore (India), November 2008.

T. NAGATA, Y. KIKUZAWA, T. NAGASAWA and S. I. ALLAKHVERDIEV, "Single-Molecular Quinone Pools: A Synthetic Model of Biochemical Energy Transducer," The IUMRS International Conference in Asia 2008, Nagoya, December 2008.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本化学会東海支部代議員 (1999–2000).

学会の組織委員等

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 Acta, "Photosynthesis" Special Issue, Guest Editor (2006).

Photosynthesis Research, "Recent Perspectives of Photosystem II" Special Issue, Guest Editor (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, 「化学エネルギー変換論」2008年7月.

B-10) 競争的資金

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), 「人工キノール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(c)が本グループの独自の成果として認知されつつある。光合成の人工モデル系の研究は多いが、キノールを対象としたものは類例がない。還元体キノール(ヒドロキノール)は物質・エネルギー変換の中間生成物として鍵となる化合物であり、この化学を追究することで新しいエネルギー変換の形が見えてくるものと考えられる。

一方、現状の化合物は、 dendrimer の構造に依存しており、キノールを間にはさんだ多段階のレドックス反応を駆動するには適していない。異なるレドックス反応を同時進行させるためには、これらが空間的に離れていて間にキノールが存在しているという構造が実現されなくてはならない。このためには、キノールの骨格自体を見直す必要がある。この点については現在鋭意検討中である。

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、昨年度に開発した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法を基に、エナンチオマー過剰率を確定し、またキラルカラムを用いた光学分割法についても確立することができた。これらの知見により、様々なホモキラルバッキーボウルの調製が可能となった。また、本合成法を応用することで、様々なタイプの C_3 対称ホモキラル有機化合物を合成し、ホモキラル空間を有するかご状分子や、螺旋状分子の構築へと展開している。
- 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、ベンジルケトン類の自動酸化型反応や、 α -ヒドロキシ化反応が、金クラスター触媒存在下、穏やかかつ短時間の反応条件で速やかに進行し、またこれらの2形式の反応が、条件を変化することにより選択的に進行することを見いだした。本反応では共酸化剤は空気中の酸素だけであり、従来の反応と比べても環境調和的である。さらに、溶媒として用いるジメチルスルホキシドが効果的な犠牲還元剤として働くことも明らかにした。今後クラスター触媒とスルホキシド類との組み合わせによる酸化システムは、一般的な方法論になることが期待される。

B-1) 学術論文

R. C. S. WONG, M. -L. OOI, H. SAKURAI and S. -W. NG, "Tris[2-(deuteriomethylsulfanyl)phenyl]phosphinedeuteriochloroform 0.125-Solvate," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **64**, o898 (2008).

S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI, "Asymmetric Synthesis of a Chiral Buckybowl, Trimethylsumanene," *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 8592–8593 (2008).

B-4) 招待講演

櫻井英博, 「おわん型共役化合物「バッキーボウル」の合成戦略」第13回精密合成化学セミナー, 札幌, 2008年1月.

H. SAKURAI, "Synthesis of Homochiral Buckybowl," China-Japan Joint Symposium on Functional Materials toward Future Catalysts, Beijing (China), January 2008.

櫻井英博, 「バッキーボウルの合成戦略と展望」グローバルCOE 有機若手ワークショップ, 京都, 2008年2月.

櫻井英博,「金ナノクラスターの特異な反応性:精密合成触媒への模索」九州大学理学府院生企画シンポジウム,福岡,2008年3月.

H. SAKURAI, “Small Gold is Green—Au Nanoclusters as a Catalyst under Aqueous and Ambient Conditions—,” Department Seminar, Chulalongkorn University, Bangkok (Thailand), May 2008.

H. SAKURAI, “Small Gold for Green Catalyst,” Chemical Congress-2008, Kathmandu (Nepal), May 2008.

櫻井英博,「有機合成における金属ナノクラスター触媒」第237回触媒化学研究センター談話会,札幌,2008年7月.

櫻井英博,「有機合成におけるメタルナノクラスター触媒」第39回触媒サマーセミナー,箱根,2008年8月.

櫻井英博,「おわん型共役化合物「バッキーボウル」の合成戦略」福井大学大学院工学研究科セミナー,福井,2008年9月.

H. SAKURAI, “Gold Nanoclusters Stabilized with Hydrophilic/Micellar Polymers as *quasi*-Homogeneous Catalyst for Aerobic Oxidation of Alcohols,” China-Japan Joint Symposium on the Element-Based Molecular Functions, Beijing (China), October 2008.

H. SAKURAI, “Gold Nanoclusters as a *quasi*-Homogeneous Catalyst in Organic Synthesis,” Department Seminar, Shanghai Institute of Organic Chemistry, Shanghai (China), October 2008.

H. SAKURAI, “Asymmetric Synthesis of a Chiral Buckybowl,” 18th International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers and 4th IUPAC International Symposium on Novel Materials and their Synthesis, Zhenjiang (China), October 2008.

櫻井英博,「有機合成が拓く「バッキーボウル」の科学」東京大学大学院総合文化研究科物性化学ゼミ,東京,2008年10月.

H. SAKURAI, “Synthetic Method for C_3 -Symmetric Homochiral Compounds and its Application to the Preparation of Chiral Buckybowls,” Korea-Japan Joint Symposium on Functional Materials toward Future Catalysts: Chemistry Showcase, Daejeon (Korea), November 2008.

H. SAKURAI, “Small Gold is Green—Au Nanoclusters as a Catalyst under Aqueous and Ambient Conditions—,” Department Seminar, Institute of Chemistry, Vietnamese Academy of Science and Technology, Hanoi (Vietnam), November 2008.

H. SAKURAI, “Synthetic strategy to construct C_3 -symmetric buckybowls, bowl-shaped aromatic compounds,” Department Seminar, The Chinese University of Hong Kong, Hong Kong, November 2008.

H. SAKURAI, “Gold Nanoclusters as a *quasi*-Homogeneous Catalyst in Organic Synthesis,” Department Seminar, Anna University, Tiruchirappalli (India), December 2008.

H. SAKURAI, “Gold Nanoclusters as a *quasi*-Homogeneous Catalyst in Organic Synthesis,” Department Seminar, Bharathidasan University, Tiruchirappalli (India), December 2008.

H. SAKURAI, “Gold Nanoclusters as a *quasi*-Homogeneous Catalyst in Organic Synthesis,” Department Seminar, National Institute of Interdisciplinary Science and Technology, Trivandrum (India), December 2008.

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

学協会役員等

日本化学会東海支部代議員 (2005–2007).

競争的資金の領域長等

JSPS-INSA 二国間交流事業共同研究 研究代表者 (2008–).

JSPS 若手研究者交流支援事業～東アジア首脳会議参加国からの招へい～ コーディネーター (2008–).

B-8) 大学での講義，客員

総研大アジア冬の学校, 「Chemistry of buckybowls: bowl-shaped aromatic compounds」 2008年12月12日.

B-10) 競争的資金

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).

若手研究(B), 「金属カルベノイドの実用的発生法と精密有機合成への応用」 櫻井英博 (2003年–2004年).

特定領域研究(公募研究) 「動的カルベン錯体の設計と機能」 櫻井英博 (2003年).

特定領域研究(公募研究) 「ボウル型共役配位子を有する金属錯体の動的挙動と機能」 櫻井英博 (2004年–2005年).

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).

基盤研究(B) 「ヘテロフラレン自在合成へのアプローチ」 櫻井英博 (2008年–2010年).

新学術領域研究(研究領域提案型) 「精密有機合成によるカーボン空間の構築」 櫻井英博 (2008年–2012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).

科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業さきかけ研究, 「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ーラーメイド合成」 櫻井英博 (2002年).

徳山科学技術振興財団研究助成, 「ヘテロフラレン合成を指向したボウル型共役化合物合成法の開発」 櫻井英博 (2004年).

石川カーボン研究助成金, 「バッキーボウル分子の一般的合成法の開発と物性評価」 櫻井英博 (2004年).

旭硝子財団研究助成, 「ヘテロフラレン合成を指向したバッキーボウル分子の自在合成」 櫻井英博 (2005年–2006年).

住友財団基礎科学研究助成, 「お椀型共役化合物「バッキーボウル」の自在合成」 櫻井英博 (2005年).

C) 研究活動の課題と展望

バッキーボウルの化学に関しては、いよいよ「通常の」有機合成と「ナノ」サイエンスのギャップ領域に近づいてきた。当然最先端の有機合成化学による成果も要求されつつも、ナノサイエンスへ導く新たな方法論の創出も同時に進めていかななくてはならないであろう。本領域を担当している各研究者の今後の益々の奮闘を期待する。

金属ナノクラスター触媒の化学は、環境調和型触媒としての可能性を追求する研究と、より本質的な反応過程の理解に関する研究に二分しつつある。両者ともに、外部との共同研究を通じて効果的に進めていきたい。

毎年のことではあるが、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と同時に、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) 大型パイ共役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) 「逐次精密合成法に基づく，単一電子トンネル回路素子の単一分子内集積化」について開拓研究を進めている。その第一段階として，1nm 長級から 40nm 長級にわたる汎用鎖状分子構築ブロック群をこの 10 年間に開発した。この構築ブロック群は，「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)」を装備しており，その官能基変換と逐次接合により，1-100nm 長のパイ共役主鎖中の任意の位置にポテンシャル井戸・障壁，光活性部，プロトン・金属配位部等を導入可能である。第二段階として，「基板表面上の単一巨大分子内の単電子移動過程を律する根幹原理」を系統的に探索するため，上記の基本構築ブロック群から様々な仕様の「基礎データ収集用モデル分子群」を作製，単一分子物性計測グループに供給し，次期モデル分子群の設計戦略についてフィードバックを受けている。今年度の成果は，絶縁被覆付きチオフェンオリゴマーの 288 量体までの合成・単離に成功した。そのパイ共役主鎖長は 110 nm である。これにより，重合法に頼らず逐次合成法のみで，パイ共役分子のサイズをトップダウン型微細加工技術が容易に適用可能なサイズ領域 (> 100 nm) にまで拡張可能なことを初めて例証した。共同研究として(阪大・多田/山田G)，各種ブレイクジャンクション法により単一分子鎖の伝導機構の鎖長依存性について系統的に検討した。分子架橋長を(前回は 1-8 nm)を 10 nm まで拡張して行ったところ，トンネル伝導からホッピング伝導への遷移が約 7nm 長で起こることを示す知見を得た。伝導機構をより詳細に解析するため，伝導度の温度変化につて検討中である。京大・田中Gには，分子パーツとして 1-12nm 長級の汎用構築ブロック群を供給した。京大Gにて発光性分子ユニットとの接合を試みた結果，5nm 長級までの発光ユニット含有オリゴマーの合成に成功した。現在，その 20nm 長級のものについて合成が進行中である。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，本年度は 20nm 長級のアンカーポイント付き被覆型オリゴチオフェンを供給した。
- b) 10-100nm 長の非周期的・定序配列型の巨大パイ共役分子を，物性計測ステージの定位置に，正しい配向・配座で設置する技術を確立することは，真実な計測実験を実施するための前提条件である。そのため，分子主鎖に非周期的な凸凹を意図的に導入し，「鍵と鍵穴原理」にて，基板表面上で適材分子が適所に自発的に定序配列化する方法論の開拓を行っている。今年度は，側鎖アルキル鎖の導入により，長方形，及びオフセット付き長方形に形状制御したチオフェン六量体分子群について，銀(110)基板表面上での配列様式を高分解能 STM 観測により検討した(横浜市大・横山Gとの共同研究)。結果，分子形状の長方形からのズレの程度(オフセット比)に応じて，分子集合形態に系統的な変化が生じることが分かった。より大型な分子において凸凹形態制御を行った場合について 現在検討中である。

B-1) 学術論文

R. YAMADA, H. KUMAZAWA, T. NOUTOSHI, S. TANAKA and H. TADA, “Electrical Conductance of Oligothiophene Molecular Wires,” *Nano Lett.* **8**, 1237–1240 (2008).

F. NISHIYAMA, K. OGAWA, S. TANAKA and T. YOKOYAMA, “Direct Conformational Analysis of a 10 nm Long Oligothiophene Wire,” *J. Phys. Chem. B* **112**, 5272–5275 (2008).

T. YOKOYAMA, S. KURATA and S. TANAKA, “Isomeric Discriminating and Indiscriminating Assembly of Adsorbed Oligothiophenes on Ag(110),” *J. Phys. Chem. C* **112**, 12590–12593 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

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) 競争的資金

基盤研究(C), 「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), 「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), 「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

かつては「もっとデカイ分子をつくれよ～」とのプレッシャーが単一分子物性研究軍団からきていたが、現在は状況が反転。「1–100nm 長のパイ共役主鎖中のお望みの位置に、ポテンシャル井戸・障壁、光活性部、プロトン・金属配位部なんかを導入できるけど、どないでっか？」と攻めるフェーズとなっている。重合法では構築不可な非周期的・定序配列型の巨大パイ共役分子の精密合成の進展は、Ni やPd 触媒によるパイ共役系間の精密カップリング技術、MALDI-TOF Mass による巨大分子の迅速構造決定技術の賜物であり、いずれも本邦発の必殺技である。この地場ネタで世界をブッチギる……はずであったが、思わぬ障害に直面した。分子物性研究分野に「規格外の巨大分子」を取り扱うノウハウの蓄積が無いことである。各業界の「典型分子(大抵は、市販分子)」とやらに“徹底的”に特化してしまった分子計測技術は、無差別級の闘いでは対応力不足である。計測研究の若手レスラーには、未知の強豪分子とデスマッチで闘えるよう「腕白でもいい、遅く育って欲しい」ものである。一方、分子開発業界においては「規格外の巨大分子」を必死のバッチで多段階合成するという気風が失われてきた。ウチの技術を移転する先が無いではないか。困った。

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) 弱い分子間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) 新しい機能性電子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) 以前より，クロラニル酸を用いた新しい分子集合体の構築を検討してきたが，今回，クロラニル酸 - 4-クロロピリジン錯体の結晶構造中に分子間 O-H...O，N-H...O，N...Cl 相互作用により形成される二次元格子状分子ネットワーク構造を見出した。また，ピ(チアジアゾロピリジリデン)誘導体とクロラニル酸との錯体では分子間 S...O ヘテロ原子相互作用と O-H...N 水素結合とによって結ばれた無限の一次元分子テープ構造が構築された。ヘテロ原子間相互作用の理論的研究はこれまでほとんど知られていないことから，上述の系やモデル化合物において MP2 法等の電子相関をも考慮した高いレベルの計算方法による S...O 相互作用の理論的解析を行いその本質を探った。
- b) 4,5-ジアザフルオレン，1,3,4-オキサジアゾール，チオフェン，ナフタセンジオン，ペンタセンなどのヘテロ環および芳香環骨格を持つ新しい機能性分子を合成・開発し，その構造ならびに機能性について検討したところ，いずれも有用な知見を得た。1,3,4-オキサジアゾール誘導体は EL 素子の電子輸送材料としてすぐれた特性を示した。また β ,13-ジアリールペンタセン誘導体は光照射により効率良く酸素の付加・脱離反応を行い，有機半導体層作製技術への応用が期待される。

B-1) 学術論文

M. TOMURA, "(E)-2-(2,6-Dichlorophenyl)-2-(phenylimino)acetamide," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **64**, o170–o171 (2008).

M. TOMURA, H. YAMAGUCHI, K. ONO, M. KAIDEN and K. SAITO, "6,11-Dihydroxynaphthacene-5,12-dione," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **64**, o172–o173 (2008).

K. ONO, M. TOMURA and K. SAITO, "Diethyl 2,3-Dihydrothieno[3,4-*b*]-1,4-dioxine-5,7-dicarboxylate," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **64**, o468–o468 (2008).

M. TOMURA and Y. YAMASHITA, "3,8-Bis(4-chlorophenyl)-4,7-dimethyltricyclo[4.2.2.0^{2,5}]deca-3,7-diene," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **64**, o545–o545 (2008).

M. TOMURA and Y. YAMASHITA, "Crystal Structure of 4-Cyanopyridinium Hydrogen Chloranilate," *Anal. Sci.* **24**, x31–x32 (2008).

M. KUJIME, C. IZUMI, M. TOMURA, M. HADA and H. FUJII, "Effect of a Tridentate Ligand on the Structure, Electronic Structure, and Reactivity of the Copper(I) Nitrite Complex: Role of the Conserved Three-Histidine Ligand Environment of the Type-2 Copper Site in Copper-Containing Nitrite Reductases," *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 6088–6098 (2008).

K. ONO, K. TSUKAMOTO, M. TOMURA and K. SAITO, "1,4-Bis[(2,6-dimethoxyphenyl)ethynyl]benzene," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **64**, o1069–o1069 (2008).

K. ONO, H. ITO, A. NAKASHIMA, M. UEMOTO, M. TOMURA and K. SAITO, "Synthesis and Properties of Naphthalene Trimers Linked by 1,3,4-Oxadiazole Spacers," *Tetrahedron Lett.* **49**, 5816–5819 (2008).

K. ONO, T. HIEI, M. TAJIKA, M. TOMURA, K. SAITO, J. NISHIDA and Y. YAMASHITA, "Synthesis of 6,13-Dithienylpentacenes by Photolysis of Their Endoperoxides," *Lett. Org. Chem.* **5**, 522–526 (2008).

M. TOMURA, "Theoretical Study for a Complex of 1,2,5-Thiadiazole with Formic Acid," *THEOCHEM* **868**, 1–5 (2008).

K. ONO, M. TOMURA and K. SAITO, "5,5-Bis(4-methoxyphenyl)-2,8-bis[3-(trifluoromethyl)phenyl]-5H-cyclopenta[2,1-*b*:3,4-*b'*]dipyridine," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **64**, o2183–o2183 (2008).

M. TOMURA, K. ONO and Y. YAMASHITA, "Crystallographic and Theoretical Studies of 4,4'-Dimethyl-7,7'-bi([1,2,5]thiadiazolo[3,4-*b*]pyridylidene)-Chloranilic Acid (1/1) with Intermolecular O–H⋯N Hydrogen Bonds and S⋯O Heteroatom Interactions," *Struct. Chem.* **19**, 967–974 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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⋯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。さらに, 合成された分子の分子配列を決定づけているこれらの分子間相互作用の理論的な精密解析を行い, 得られた情報に基づいてその構造や機能を理解すると共に, これらの構造を再現しうる高速計算手法の開発を通じて, 結晶構造の計算化学的な予測方法を探求することを最終的な目的としたい。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, 「新しい機能性電子ドナーおよびアクセプター分子の開発」の研究課題も続行する。加えて, 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) 酸素センサータンパク質 HemAT の構造と機能に関する研究
- b) 酸素センサードメインを有するジグアニル酸シクラーゼの構造と機能に関する研究
- c) ヘムを活性中心とする新規な脱水酵素の構造と機能に関する研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) HemAT はバクテリアやアーキア(古細菌)の酸素に対する走化性制御系において酸素センサーとして機能するシグナルトランスデューサータンパク質である。HemAT はグロビンドメインを酸素センサードメインとして利用しており、酸素を選択的にセンシングしている。本研究では HemAT による選択的な酸素センシングの分子機構解明を目的とし、光合成細菌 *Rhodospirillum rubrum* および高度好塩性古細菌 *Halobacterium salinarum* 由来の HemAT を対象とし、これら HemAT 中のヘム近傍構造の詳細な解析を行った。
- b) ジグアニル酸シクラーゼは GTP から cyclic di-GMP を合成する反応を触媒する酵素である。本反応による合成される cyclic di-GMP は、バクテリアのセカンドメッセンジャーとして機能し、バイオフィーム形成を始めとする様々な生理機能制御に関与している。本研究では、*Desulfotalea psychrophila* ゲノム中にグロビン型センサードメインとジグアニル酸シクラーゼが融合した、新規なヘム含有型ジグアニル酸シクラーゼ遺伝子を見出した。大腸菌を用いてヘム含有型ジグアニル酸シクラーゼ(HemDGC)を発現、精製し、その酵素化学的性質を調べた。その結果、HemDGC は分子中のヘムに酸素が結合した場合にのみ、cyclic di-GMP 合成活性を示すことが分かった。
- c) アルドキシム脱水酵素はアルドキシムの脱水反応によりニトリルを生成する反応を触媒する新規なヘム含有酵素である。本研究では、*Rhodococcus* sp. N-771 株由来のアルドキシム脱水酵素(OxdRE)の結晶構造解析に成功した。その結果、OxdRE は8本のβストランドから構成されるβバレル構造の両サイドにαヘリックスを有しており、活性中心として機能するヘムはβバレルとαヘリックスに挟まれる位置に存在していることが分かった。

B-1) 学術論文

S. F. EL-MASHTOLY, Y. GU, H. YOSHIMURA, S. YOSHIOKA, S. AONO and T. KITAGAWA, "Protein Conformation Changes of HemAT-Bs upon Ligand Binding Probed by Ultraviolet Resonance Raman Spectroscopy," *J. Biol. Chem.* **283**, 6942–6949 (2008).

S. AONO, "Metal-Containing Sensor Proteins Sensing Diatomic Gas Molecules," *Dalton Trans.* 3137–3146 (2008).

M. NISHIMURA, H. YOSHIMURA, K. OZAWA, S. YOSHIOKA, M. KUBO, T. KITAGAWA and S. AONO, "Hydrogen Bonding Interaction on the Heme-Bound Ligand in the Heme-Based O₂ Sensor Protein," *J. Porphyrins Phthalocyanines* **12**, 142–148 (2008).

B-3) 総説, 著書

青野重利, 「気体分子をスイッチとする生体機能制御」, *化学* 62, 68–69 (2007).

B-4) 招待講演

S. AONO, “Structure and Function of the Heme-Based Sensor Proteins,” International Symposium on Membrane Protein Research—Perspective in Structural Biology of Membrane Proteins and Biological Macromolecules, Osaka (Japan), March 2008.

S. AONO, “The Molecular Mechanism of Functional Regulation of the Heme-Based Sensor Proteins,” 5th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines, Moscow (Russia), July 2008.

青野重利, 「ヘム含有型センサータンパク質によるガス分子センシングとシグナル伝達」, バイオ分子センサー連携研究プロジェクト レクチャーコース, 岡崎, 2008年10月.

S. AONO, “A Novel Globin-Coupled Oxygen Sensor Protein Responsible for the Synthesis of a Bacterial Second Messenger, Cyclic di-GMP,” 4th Asian Biological Inorganic Chemistry Conference, Jeju (Korea), November 2008.

B-6) 受賞, 表彰

澤井仁美, 4th International Conference on Metals and Genetics, Best Poster Prize (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

触媒学会生体関連触媒研究会世話人 (2002–).

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, 大学共同利用機関等の委員等

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).

その他

岡崎市立小豆坂小学校 2007年・親子おもしろ科学教室「身の回りには不思議がいっぱい」

B-8) 大学での講義, 客員

東京工業大学大学院生命理工学研究科, 「生物プロセス特別講義第三」, 2008年2月6日.

B-10) 競争的資金

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),「生体機能制御に関与する気体分子センサータンパク質の構造と機能」青野重利(2004年-2006年).

若手研究(B),「新規な金属中心を有する酸素センサータンパク質の構造とシグナル伝達機構」吉岡資郎(2005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).

若手研究(B),「新規な機能を有する酸素センサータンパク質における機能発現機構の解明」吉岡資郎(2007年-2008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、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、主に分光学的手法と遺伝子工学的手法を組合せて研究を進めてきた。しかしながら、これまでの研究では対象としているセンサータンパク質の分子構造を決定するには至っていない。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、それらの分子構造情報は必要不可欠なものである。そこで今後は、これまで研究対象としていたCOセンサータンパク質CooA,酸素センサータンパク質HemATに加えて、新たに見出した酸素センサータンパク質HemDGCも含め、これらセンサータンパク質の活性型および不活性型における分子構造の決定を目指して研究を進めていきたい。

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) 自己組織化ナノ繊維の形成機構
- e) 大腸菌シャペロニンの機能発現の分子機構

A-3) 研究活動の概要と主な成果

- a) 昨年までの研究で，ヤギ α ラクトアルブミンとイヌ乳リゾチームは，互いに相同で立体構造も類似しているにもかかわらず，フォールディング経路の異なることが明らかになっている。本年は， α ラクトアルブミンとリゾチームの天然三次元構造をもとに，それぞれ全原子 - 全原子間の距離を計算し，相互作用の密度を調べた。その結果， α ラクトアルブミンでは C-ヘリックスと β ドメイン間，リゾチームでは B-ヘリックスと D-ヘリックス間において相互作用密度の高いことが明らかになった。このような天然構造における相互作用密度の違いが α ラクトアルブミンとリゾチームのフォールディング経路の違いをもたらしたと推測される。
- b) 脂肪酸との複合体が腫瘍細胞選択的細胞死活性を持つとして知られる，ヤギ α ラクトアルブミンのモルテン・グロビュール状態の構造解析を，NMR を用いて行っている。モルテン・グロビュール状態にあるヤギ α ラクトアルブミンの三次元 NMR スペクトルを 920 MHz の NMR 装置を用いて測定し，80 個から 90 個の分離したクロスピークが観測され，約 40 残基の主鎖アミドプロトンの帰属が完了した。
- c) 本年は， β_2 ミクログロブリンの複雑な巻き戻り過程を明確に特徴づけるために，数値シミュレーション解析を行い，実験結果をうまく説明できる反応スキームを決定した。また，弱酸性条件下 (pH 4) で形成される平衡論的中間体と巻き戻り過程で観測される速度論的中間体との関係を明らかにするために，ストップフロー CD 法を用いて巻き戻り反応を解析した。その結果，平衡論的中間体はバースト相中間体およびその後形成される速度論的中間体とは異なることがわかった。
- d) ポリペプチドが自己組織化したナノ繊維の形成過程を明らかにするため，単層 β シートを持つモデル蛋白質，OspA のフォールディングを調査した。フォールディング過程は二つの指数関数でよくモデルされ，変性剤変性による滴定実験の結果と一致した。フォールディング過程をトリプトファン蛍光で追跡するため，変異体を数種類作製し，測定に適した変異体を見いだした。この変異体を用いた測定を現在進めている。
- e) シャペロニン GroEL の第二の ATP 結合部位の同定を目的に， γ -azido-ADP 及び azido-ATP による光親和性標識を行い，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した。標識された蛋白質のプロテアーゼ分解後，HPLC によって単離されたペプチド断片のアミノ酸配列分析を行い，標識部位を同定した。標識部位から第二の ATP 結合サイトは GroEL 頂上ドメインに存在することが示された。詳細な結合部位同定のため，頂上ドメイン単独の大腸菌組み換え体発現系を構築し，解析を進めている。また，水素交換標識二次元 NMR を用いて GroEL/ES 複

合体の構造ダイナミクスを解析することを目的に、DMSO 溶液中における GroES の NMR 測定を行った。分子研に設置されている 920MHz NMR 装置を用いることにより、500MHz NMR 装置では分離困難であった HSQC シグナルの分離に成功した。現在、アミドプロトンシグナルの帰属を進めている。

B-1) 学術論文

T. KANZAKI, R. IIZUKA, K. TAKAHASHI, K. MAKI, R. MASUDA, M. SAHLAN, H. YÉBENES, J. M. VALPUESTA, T. OKA, M. FURUTANI, N. ISHII, K. KUWAJIMA and M. YOYODA, “Sequential Action of ATP-Dependent Subunit Conformational Change and Interaction between Helical Protrusions in the Closure of the Built-in Lid of Group II Chaperonins,” *J. Biol. Chem.* **283**, 34773–34784 (2008).

T. ISHII, Y. MURAYAMA, A. KATANO, K. MAKI, K. KUWAJIMA and M. SANO, “Probing Force-Induced Unfolding Intermediates of a Single Staphylococcal Nuclease Molecule and the Effect of Ligand Binding,” *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **375**, 586–591 (2008).

T. INOBE, K. TAKAHASHI, K. MAKI, S. ENOKI, K. KAMAGATA, A. KADOOKA, M. ARAI and K. KUWAJIMA, “Asymmetry of the GroEL-GroES Complex under Physiological Conditions as Revealed by Small-Angle X-Ray Scattering,” *Biophys. J.* **94**, 1392–1402 (2008).

B-3) 総説, 著書

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」 *Milk Science* **56**, 119–122 (2008).

B-4) 招待講演

K. KUWAJIMA, “Experimental and Simulation Studies on the Folding/Unfolding of Goat α -Lactalbumin,” 特定領域研究「水と生体分子」第5回公開ワークショップ, 奈良県新公会堂, 奈良市, 2008年1月.

桑島邦博, 「相同蛋白質のフォールディング機構——イヌ乳リゾチームとヤギ α ラクトアルブミンの比較研究」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開発」第2回公開シンポジウム, 岡崎コンファレンスセンター, 2008年3月.

K. KUWAJIMA, “Folding Mechanism of Homologous Proteins: A Comparative Study of α -Lactalbumin and Lysozyme,” 膜蛋白質研究国際フロンティア国際シンポジウム, 千里ライフサイエンスセンター, 吹田市, 2008年3月.

K. KUWAJIMA, “Folding Mechanisms of Homologous Proteins: A Comparative Study between Lysozyme and α -Lactalbumin,” ACS 236th National Meeting Symposium *Protein Folding Dynamics: Experiment and Theory*, Philadelphia (U.S.A.), August 2008.

K. KUWAJIMA, “Molecular Mechanisms of the Chaperone Function of GroEL,” the 8th KIAS–Yonsei Conference on Protein Structure and Function, Seoul (Korea), October 2008.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本蛋白質科学会副会長 (2008–).

日本蛋白質科学会理事 (2001.4–2005.3).

日本生物物理学会運営委員 (1992–1993, 1999–2000).

The Protein Society, Executive Council (2005.8–2007.7).

日本生化学会評議員 (2005–).

学会の組織委員等

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 Pasific-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, 大学共同利用機関等の委員等

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–).

競争的資金等の領域長等

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

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「分子集合体論」2008年1月–2月.

総研大アジア冬の学校, 「Molecular Mechanism of Protein Folding」2008年12月.

名古屋大学大学院理学研究科, 客員教授.

B-10) 競争的資金

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(公募研究) 「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(公募研究)「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(計画研究(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(計画研究(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).
特定領域研究(成果取りまとめ)「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(2008年).
基盤研究(B)「シャペロニン GroEL の第二の ATP 結合部位とその機能的役割」 桑島邦博(2008年-).
新学術領域(計画研究)「揺らぎと生体機能」 「シャペロニンの構造揺らぎとフォールディング介助機能」 桑島邦博(2008年-).
若手研究(スタートアップ)「蛋白質デザインによる自己組織化ナノ繊維形成過程の解明」 眞壁幸樹(2008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。今年度の研究からモルテン・グロビュール状態にある α ラクトアルブミンの分離観測されたNMRシグナルの約半数を帰属できたので、これをもとにして、HAMLET中のモルテン・グロビュール状態の構造に関する知見を得たい。また、アミロイドなどのナノ繊維は疾病との関わりが強い。このナノ繊維をモデル化したOspA蛋白質のフォールディング解析を詳細に行うことにより、繊維形成における核形成・伸長反応の物理的基盤を明らかにする。

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。本年度の結果から、DMSO中におけるGroESのNMRシグナルの帰属をほぼ完了したので、今後、水素交換標識二次元NMRを用いてGroES単独およびGroEL/GroES複合体の構造のダイナミクス解析を進めていく。

加藤 晃一 (教授) (2008年4月1日着任)

A-1) 専門領域：構造生物学，タンパク質科学，糖鎖生物学，NMR 分光学

A-2) 研究課題：

- a) NMR 分光法をはじめとする物理化学的手法による複合糖質およびタンパク質の構造・ダイナミクス・相互作用の解析
- b) 生化学・分子生物学的アプローチによる複合糖質およびタンパク質の機能解析
- c) ナノテクノロジーと構造生物学の融合による生命分子科学研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) アルツハイマー病の発症に関わるアミロイド β ($A\beta$) は、神経細胞表層に豊富に存在する糖脂質である GM1 ガングリオシドとの相互作用を契機として、アミロイド繊維とよばれる異常な会合体を形成することが知られている。 $A\beta$ の重合初期過程に関する構造情報を得るために、超高磁場 NMR 分光法を利用して、GM1 およびリゾ GM1 から形成されたミセルとアミノ酸 40 残基から $A\beta(1-40)$ の相互作用様式を解析した。飽和移動実験の結果、 $A\beta(1-40)$ はガングリオシドクラスターにおける親水性 / 疎水性領域の境界面に横たわったかたちで、2つの α ヘリックスと C 末端部を疎水的環境に配置し、それ以外の部位を親水的環境に露出したトポロジーを形成していることが明らかとなった。一方、種々の分子シャペロンの構造生物学的研究も大きく進展した。例えば、20S プロテアソームのサブユニット集合に関与するシャペロン PAC3 の結晶構造を解明するとともに、グループ II シャペロニンとプレフォルディンの複合体中に内在されている柔構造を ^{13}C NMR を利用して突きとめた。
- b) 糖タンパク質の細胞内運命 (フォールディング, 輸送, 分解) を決定する機構の分子基盤を明らかにするために、糖鎖ライブラリーを活用したフロンタルアフィニティークロマトグラフィ解析を行なった。これにより分子シャペロン、積荷受容体、ユビキチンリガーゼなどとして機能している一連の細胞内レクチンが高マンノース型糖鎖の異なる部位を特異的に認識しており、小胞体からゴルジ体に至る過程で現れる糖鎖のプロセッシング中間体を捕捉することを通じて担体タンパク質の運命を決めていることを明らかにした。さらに、立体構造情報に基づいた部位特異変異導入実験により、積荷受容体として機能している L 型レクチンが糖鎖の脱グルコシル化や細胞内の pH 環境を感知する部位を糖鎖認識ドメインの中に配していることを示した。一方、多次元 HPLC 法の応用範囲を拡張し、様々な生体組織における N 型糖鎖の発現プロファイルを解明した。特に、モデル生物としてゲノム情報が明らかにされているカタコウレイボヤの組織別の糖鎖プロファイリングを実施し、神経複合体がキシロースを含有する N 型糖鎖を専ら発現していることを報告した。これは、後口動物におけるキシロース含有 N 型糖鎖の存在を初めて示すものである。
- c) 糖鎖は化学構造の微視的不均一性を有する一方で官能基の多様性に乏しく、加えて内部運動の自由度に富むために水溶液中で立体構造は揺らいでいる。このように複雑な糖鎖の精密構造解析を NMR を用いて行なうために、糖鎖の還元末端にランタニドプローブを導入するための化学修飾法を検討し、モデル糖鎖について成功をおさめた。

B-1) 学術論文

Y. KAMIYA, D. KAMIYA, K. YAMAMOTO, B. NYFELER, H. -P. HAURI and K. KATO, "Molecular Basis of Sugar Recognition by the Human L-Type Lectins ERGIC-53, VIPL and VIP36," *J. Biol. Chem.* **283**, 1857–1861 (2008).

H. YAGI, M. NAKAGAWA, N. TAKAHASHI, S. KONDO, M. MATSUBARA and K. KATO, "Neural Complex-Specific Expression of Xylosyl N-Glycan in *Ciona intestinalis*," *Glycobiology* **18**, 145–151 (2008).

- B. NYFELER, Y. KAMIYA, F. BOEHLER, K. YAMAMOTO, K. KATO, P. DE MOERLOOSE, H. -P. HAURI and M. NEERMAN-ARBEZ**, “Deletion of 3 Residues from the C-Terminus of MCFD2 Affects Binding to ERGIC-53 and Causes Combined Factor V and Factor VIII Deficiency,” *Blood* **111**, 1299–1301 (2008).
- E. KURIMOTO, Y. NISHI, Y. YAMAGUCHI, T. ZAKO, R. IIZUKA, N. IDE, M. YOYODA and K. KATO**, “Dynamics of Group II Chaperonin and Prefoldin Probed by ¹³C NMR Spectroscopy,” *Proteins: Struct., Funct., Bioinf.* **70**, 1257–1263 (2008).
- H. YASHIRODA, T. MIZUSHIMA, K. OKAMOTO, T. KAMEYAMA, H. HAYASHI, T. KISHIMOTO, S. NIWA, M. KASAHARA, E. KURIMOTO, E. SAKATA, K. TAKAGI, A. SUZUKI, Y. HIRANO, S. MURATA, K. KATO, T. YAMANE and K. TANAKA**, “Crystal Structure of a Chaperone Complex that Contributes to the Assembly of Yeast 20S Proteasomes,” *Nat. Struct. Mol. Biol.* **15**, 228–236 (2008).
- H. YAGI, N. YASUKAWA, S. -Y. YU, C. -T. GUO, N. TAKAHASHI, T. TAKAHASHI, W. BUKAWA, T. SUZUKI, K. -H. KHOO, Y. SUZUKI and K. KATO**, “The Expression of Sialylated High-Antennary *N*-Glycans in Edible Bird’s Nest,” *Carbohydr. Res.* **343**, 1373–1377 (2008).
- H. YAGI, K. YAMADA, E. OHNO, M. UTSUMI, Y. YAMAGUCHI, E. KURIMOTO, N. TAKAHASHI, S. OKA, T. KAWASAKI and K. KATO**, “Development and Application of High Performance Liquid Chromatography Map of Glucuronyl *N*-Glycans,” *Open Glycoscience* **1**, 8–18 (2008).
- S. MIYAKAWA, Y. NOMURA, T. SAKAMOTO, Y. YAMAGUCHI, K. KATO, S. YAMAZAKI and Y. NAKAMURA**, “Structural and Molecular Basis for Hyperspecificity of RNA Aptamer to Human Immunoglobulin G,” *RNA* **14**, 1154–1163 (2008).
- Y. HIRANO, T. KANEKO, K. OKAMOTO, M. BAI, H. YASHIRODA, K. FURUYAMA, K. KATO, K. TANAKA and S. MURATA**, “Dissecting β -Ring Assembly Pathway of the Mammalian 20S Proteasome,” *EMBO J.* **27**, 2204–2213 (2008).
- M. TAKEDA, N. SUGIMORI, T. TORIZAWA, T. TERAUCHI, A. M. ONO, H. YAGI, Y. YAMAGUCHI, K. KATO, T. IKEYA, J. G. JEE, P. GÜNTERT, D. J. ACETI, J. L. MARKLEY and M. KAINOSHO**, “Structure of the Putative 32 kDa Myrosinase-Binding Protein from *Arabidopsis* (At3g16450.1) Determined by SAIL-NMR,” *FEBS J.* **275**, 5873–5884 (2008).
- E. M. QUAN, Y. KAMIYA, D. KAMIYA, V. DENIC, J. WEIBEZAHN, K. KATO and J. S. WEISSMAN**, “Defining the Glycan Destruction Signal for Endoplasmic Reticulum-Associated Degradation,” *Mol. Cell* **32**, 870–877 (2008).

B-3) 総説，著書

- 坂田絵理，加藤晃一，「Nedd8化修飾によるCullin型E3の活性化機構」*実験医学* **26**, 207–213 (2008).
- K. KATO, H. SASAKAWA, Y. KAMIYA, M. UTSUMI, M. NAKANO, N. TAKAHASHI and Y. YAMAGUCHI**, “920 MHz Ultra-High Field NMR Approaches to Structural Glycobiology,” *Biochim. Biophys. Acta, Gen. Subj.* **1780**, 619–625 (2008).
- 栗本英治，雨宮瑛子，加藤晃一，「味覚修飾タンパク質クルクリンの構造生物学」*Foods & Food Ingredients J. Jpn.* **213**, 645–652 (2008).
- 加藤晃一，「構造糖鎖生物学と糖鎖創薬：オーバービュー」*蛋白質 核酸 酵素* **53**, 1661 (2008).

神谷由紀子, 加藤晃一, 「細胞内レクチンによる糖蛋白質の輸送と品質管理の構造基盤」*蛋白質 核酸 酵素* 53, 1662–1669 (2008).

栗本英治, 岡本健太, 鈴木淳巨, 日影達夫, 山根 隆, 加藤晃一, 「20 Sプロテアソームサブユニットの集合過程に関わる分子シャペロンPAC3のX線結晶構造解析」*名古屋大学X線回折研究のあゆみ* 29, 3–6 (2008).

B-4) 招待講演

加藤晃一, 「NMRで解る糖鎖の働き」文部科学省特定研究領域「糖鎖によるタンパク質と分子複合体の機能調節」研究成果公開発表シンポジウム, 東京, 2008年1月.

K. KATO, “Structure-based biomolecular engineering targeting ‘sweets,’” Pan-Pacific International Partnership Conference on Pharmaceutical and Life Science, Nagoya (Japan), February 2008.

加藤晃一, 「抗体医薬の開発に向けた多次元HPLC法およびNMR法による糖鎖解析技術」技術情報協会講習会「抗体医薬品を始めとしたバイオ医薬品の開発に向けた抗体分析法・バリデーション」東京, 2008年3月および11月.

K. KATO, “Ultra-high field NMR and sugar library approaches for structural glycomics,” BIT Life Sciences’ 1st Annual Protein and Peptide Conference, Shenzhen (China), April 2008.

加藤晃一, 神谷由紀子, 神谷大貴, 西尾美穂, 「糖タンパク質の細胞内運命を司るレクチンの分子認識」生理研研究会「糖鎖機能研究会・・・分子レベルでの解明を目指して」岡崎, 2008年5月.

加藤晃一, 笹川拓明, 神谷由紀子, 中野路子, 杉原隆広, 内海真穂, 山口芳樹, 「超高磁場NMRを利用したタンパク質・複合糖質の構造解析」高分子学会08-1 NMR研究会, 東京, 2008年5月.

加藤晃一, 神谷由紀子, 「糖タンパク質の細胞内運命決定の構造的基盤」第8回日本蛋白質科学会年会, 船堀, 2008年6月.

K. KATO, H. YAGI, M. UTSUMI, N. TAKAHASHI and Y. YAMAGUCHI, “A structural biology approach to sugar recognition at the neural cell surface,” 第31回日本神経科学大会 / Neuroscience 2008, Tokyo (Japan), July 2008.

K. KATO, “Structural views of glycoprotein-fate determination in cells,” 23rd International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems, San Diego (U.S.A.), August 2008.

加藤晃一, 「NMRと糖鎖ライブラリーを利用した構造グライコミクス」日本化学会第2回関東支部大会, 群馬, 2008年9月.

加藤晃一, 「構造グライコミクスの体系的アプローチ——糖鎖プロファイリングから抗体医薬の立体構造解析まで——」第67回日本癌学会学術総会, 名古屋, 2008年10月.

K. KATO, “Medical applications of structural glycobiology: From glycosylation profiling to biomolecular engineering,” BioJapan 2008 ~ World Business Forum ~, Yokohama (Japan), October 2008.

加藤晃一, 「翻訳後に多様化するタンパク質へのNMRアプローチ」タンパク質NMRの最前線 立命館大学理工学研究所シンポジウム, 草津, 2008年11月.

矢木宏和, 加藤晃一, 「O結合型糖鎖の分析法の開発と応用」第2回GFRG研究会公開シンポジウム, 東京, 2008年9月.

栗本英治 雨宮瑛子 加藤晃一, 「味覚修飾タンパク質の構造と機能」バイオ分子センサー連携研究プロジェクト レクチャーコース「センサーの不思議: 分子から個体まで」岡崎, 2008年10月.

B-6) 受賞, 表彰

加藤晃一, 日本薬学会奨励賞 (2000).

神谷由紀子, 特定領域研究「タンパク質の社会」全体班会議ポスター優秀賞 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

- 日本バイオイメージング学会 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-), 理事 (2008-2009).

学会誌編集委員

- Open Glycoscience*, Editorial board member (2008-).

その他

- (株)グライエンス 科学技術顧問 (2004-2005).
- (株)グライエンス 取締役 (2005-).

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, 「機能構造化学」2008年6月3日.
- 名古屋市立大学薬学部, 「構造生物学」 「薬学物理化学Ⅱ」 「物理系実習Ⅱ」 「免疫学」 「バイオインフォマティクス」 「創薬科学」 「知的財産活用論」2008年.
- 名古屋市立大学大学院薬学研究科, 「生命分子構造学特論」2008年.
- お茶の水女子大学, 客員教授, 2006年6月-.
- 名古屋工業大学, 「薬科学特論」非常勤講師.

B-10) 競争的資金

- 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)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)科学技術交流財団, 「糖鎖科学名古屋拠点研究会」, 加藤晃一 (2003年-2004年).

(独)科学技術振興機構(プラザ育成研究調査)「糖鎖ライブラリーを活用したグライコミクス解析システムの開発」, 加藤晃一 (2004年).

経済産業省中部経済産業局(地域新生コンソーシアム研究開発事業)「糖鎖ライブラリーを活用した新規マイクロアレーの開発」, 加藤晃一 (2004年-2005年)

特定非営利活動法人バイオものづくり中部, 「糖鎖分科会」, 加藤晃一 (2005年-2006年).

特定領域研究「グライコミクス」, 「NMRを利用した構造グライコミクス」, 加藤晃一 (2005年-2006年).

萌芽研究, 「味覚修飾タンパク質クルクリンの機能発現メカニズムの解明と応用」, 加藤晃一 (2005年-2006年).

ノバルティス研究奨励金, 「NMR 構造生物学によるパーキンソン病発症メカニズムの解明」, 加藤晃一 (2006年).

基盤研究(B), 「タンパク質分解における糖鎖修飾系とユビキチン修飾系のクロストークの構造的基盤」, 加藤晃一 (2006年-2007年).

新学術領域研究「揺らぎが機能を定める生命分子の科学」, 「NMRを利用したタンパク質および複合糖質の揺らぎの検出とその機能関連の探査」, 加藤晃一 (2008年-).

C) 研究活動の課題と展望

糖鎖が担う生命情報を解読するために、分子レベルの精密構造解析の一層の進展をはかるとともに、細胞・組織・個体レベルでの機能解析を推進する。安定同位体標識を施した高マンノース型糖鎖に常磁性プローブを導入して超高磁場NMR解析を行なうことにより、複雑な多分岐糖鎖の3次元構造をコンフォメーションの揺らぎも含めて解き明かすことを計画している。特に、小胞体とゴルジ体間の糖タンパク質小胞輸送にかかわる糖鎖-タンパク質間相互作用、タンパク質-タンパク質間相互作用を原子レベルで解明し、血液凝固因子欠損症等の細胞内輸送機構の破綻が引き起こす疾患の発症機構の構造基盤を明らかにする。また、糖鎖クラスター上でのA β の分子間相互作用をNMRを利用して捉えることにより、アミロイド形成の初期過程における分子の動的挙動を解明し、最終的に神経変性疾患の分子基盤を理解することを目指す。さらに、キシロース含有糖鎖の神経系における機能解明のために、本糖鎖を生合成する酵素をコードする候補遺伝子をノックアウトしたマウスを作出して行動解析を行なう。このように、神経系における糖鎖機能のマイクロ-マクロの統合的理解を目指す。

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) 酸化反応に關与する金属酵素反応中間体モデル錯体の合成
- 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關与する金属酵素は，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。酸化反応に關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關わりを研究した。オキソ鉄4価ポルフィリン カチオンラジカル錯体を合成し，軸位に配位する配位子の効果を研究した。イミダゾールやフェノレートを軸配位子としてもつ錯体の反応性が従来の錯体の反応性より数百倍増加することを見出した。また，不斉酸化能を有するマンガン3価サレン錯体の反応選択性の機構を研究した。マンガン3価サレン状態では，不斉を誘起するような構造をとらないが，マンガン4価サレン錯体への酸化に伴い不斉を誘起できる構造に変化することを見出した。電子構造との關わりを研究した結果，軸配位子の結合長と側鎖との立体的反発により構造変化が誘起されてい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反応中間体モデル錯体から研究した。イミダゾール基，ピラゾール基，アミンを配位子にもつ銅1価亜硝酸錯体を合成し，反応性に違いを検討した。その結果，酵素と同じ配位子であるイミダゾールが最も反応を加速することを明らかにした。電子構造との關わりを研究した結果，配位子からの電子供与性がプロトン化の速度を制御することを明らかにした。
- 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。ペルオキシダーゼの活性部位の構造と機能の關わりを解明するため，種々のペルオキシダーゼ-シアン体の¹³C, ¹⁵N NMRを測定した。その結果，すべてのペルオキシダーゼが配位した過酸化水素と強い水素結合を作る仕組みをもつこと，軸配位子からの電子供与性が種類により変化し，さらにこの効果が反応中間体の生成速度を制御していることを明らかにした。

B-1) 学術論文

M. KUJIME, C. IZUMI, M. TOMURA, M. HADA and H. FUJII, "Effect of a Tridentate Ligand on the Structure, Electronic Structure, and Reactivity of the Copper(I) Nitrite Complex: Role of the Conserved Three-Histidine Ligand Environment of the Type-2 Copper Site in Copper-Containing Nitrite Reductases," *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 6088–6098 (2008).

T. KURAHASHI and H. FUJII, "Chiral Distortion in Mn^{IV}(salen)(N₃)₂ from Jacobsen's Catalyst as a Conformation Model for Enantioselective Reactions," *Inorg. Chem.* **47**, 7559–7567 (2008).

T. KURAHASHI, A. KIKUCHI, T. TOSHA, Y. SHIRO, T. KITAGAWA and H. FUJII, “Transient Intermediates from Mn(salen) with Sterically-Hindered Mesityl Groups: Interconversion between Mn^{IV}-Phenolate and Mn^{III}-Phenoxy Radical as an Origin for Unique Reactivity,” *Inorg. Chem.* **47**, 1674–1686 (2008).

B-3) 総説, 著書

城 宜嗣, 藤井 浩, 「金属酵素の反応中間体の電子状態・構造解析」*固体物理* **43**(11), 7–18 (2008).

B-4) 招待講演

H. FUJII, “Role of Highly Conserved Three-Histidines Ligand Environment of Type-2 Cu Site in Cu Nitrite Reductases,” The 1st CMD International Symposium, Seoul (Korea), May 2008.

H. FUJII, “Role of Highly Conserved Three-Histidines Ligand Environment of Type-2 Cu Site in Cu Nitrite Reductases,” International Symposium on Picobiology, Hyogo (Japan), March 2008.

B-6) 受賞, 表彰

高橋昭博, 第41回酸化反応討論会ポスター賞 (2008).

B-8) 大学での講義, 客員

兵庫県立大学大学院生命理学研究科, 客員准教授, 2007年2月–.

B-10) 競争的資金

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).

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(公募研究)「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).

重点領域研究(公募研究)「生体金属分子科学」, 「¹⁷O-NMRによる銅-酸素錯体の配位した酸素の電子構造と反応性の研究」藤井 浩 (1999年).

内藤財団科学奨励金, 「ヘムオキシゲナーゼによる位置特異的ヘム代謝機構の解明」藤井 浩 (2000年).

基盤研究(C), 「合成ヘムとミオグロビン変異体による亜硝酸還元酵素モデルの構築と反応機構の研究」藤井 浩 (2000年–2002年).

基盤研究(B), 「単核非ヘム酵素反応中間体としての高酸化オキシ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(公募研究)「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、タンパク質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：電子シンクロトロン放射光光化学反応，ナノバイオエレクトロニクス

A-2) 研究課題：

- a) 放射光エッチングによる PDMS 微細加工と神経細胞ネットワーク素子への応用
- b) 生体材料の AFM, SIMS, 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素子開発と生体情報システムの分子科学

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) Polydimethylsiloxane (PDMS) はマイクロ流路，ソフトリソグラフィー，マイクロコンタクトプリンティングの材料としてバイオセンサー，分析化学，合成化学など幅広い分野で利用されている材料であるが，モールド法による加工が主で，いわゆる除去型の加工は開発が遅れている。機械加工によれば高精度な加工ができるが，せいぜい 0.8 mm くらいが限界である。2007 年度に XeF_2 ガスを反応ガスとする放射光エッチングによりミクロンレベルの除去型の微細加工ができる事を発見したことを受け，2008 年度は，これを現在研究課題 c) として進めている神経細胞ネットワーク素子における神経細胞の設置場所の制御や軸索，シナプスの成長制御のためのマイクロ流路形成に利用することを念頭に置いて，新たにエッチングチャンパーを製作し，この新しい放射光エッチング反応の基本特性の測定を進めた。
- 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。2008 年度は 固体基板表面が人工細胞膜系に及ぼす影響を原子分子レベルで理解することを目的とし， SiO_2/Si 表面上および単原子ステップ TiO_2 単結晶表面上での斜入射照明法による 1 分子追跡法を行った。従来の 1 分子追跡法では，倒立顕微鏡を用い，試料裏面から励起光を全反射条件で入射してエバネッセント照明するため，基板材料の透明度と屈折率に制限があり，ガラスと石英以外の材料表面上では行うことが難しかった。本研究では斜入射照明法により，中性リン脂質であるフォスファチジルコリン (PC) の二重膜中での蛍光色素ラベル脂質の分子拡散を不透明な Si 基板上および高屈折率の TiO_2 基板上でその場観察することに成功した。それぞれの基板上での脂質分子の拡散定数を決定し， TiO_2 基板上での拡散係数が SiO_2 基板上に比べて最大で 30% 程度小さいことを明らかにした。固体 / 水溶液 / 脂質の 3 媒質系について Hamaker 定数を厳密に求めた結果から， TiO_2 上で働く大きなファンデルワールス力によって TiO_2 上の PC 二重膜が SiO_2 上に比べて 20 倍大きな吸着ポテンシャルを持ち，そのために分子拡散が制約を受けていることが示唆された。 $\text{A}\beta_{40}$ のアルツハイマー病発症機構を分子科学の観点から解明する事を目指し，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 SiO_2 表面に形成し， $\text{A}\beta_{40}$ との相互作用を調べた。2007 年度に引き続き，分子動力学による解析を進め，観測される各種ドメインでの脂質分子の構造を決定することに成功した。特に，異常に早く $\text{A}\beta_{40}$ の凝集を媒介する脂質二重膜の局所的分子構造が，interdigitated liquid disordered 構造であること，これがマイカ表面との相互作用により形成されることを明らかにした。アルツハイマー病発症機構解明の観点から GM1 と $\text{A}\beta$ との相互作用を調べた研究は多数あるが，GM1 の詳細な分子構造の重要性を指摘し構造を決定したのは本研究が最初である。
- c) 光受容体イオンチャンネルであるチャンネルロドプシン (ChR2) を発現した C2C12 細胞を東北大学八尾教授より譲り

受け、2007年度に開発した培養型イオンチャンネルバイオセンサーに搭載し光励起によりホールセル電流を計測できることを確認した。これにより、光励起による神経細胞ネットワーク素子製作の必要な技術がほぼそろったこと、そして我々の素子がシナプス部の特性測定に適していること、また、シナプス部に GM1 分子が局在し、エンドサイトーシス、エキソサイトーシスなど神経信号伝達に本質的に重要な関与をしていること、また、このシナプス部にアルツハイマーの初期症状が現れること等から、上記の成果と関連して、本神経細胞ネットワーク素子はシナプス部での GM1 分子などの役割やアルツハイマー発症機構を、神経細胞の信号伝達機能と関連させて、分子科学の立場で調べるのに適しており、新しい学術領域とも言える“生体情報システムの分子科学”を開拓する上での研究ツールと位置づけられるという考えに至った。

B-1) 学術論文

R.Md. A. SAYED, H. UNO, K. HARADA, K. TANAKA, Y. -H. KIM, Y. NAKAOKI, K. OKUMURA, R. TERO and T. URISU, “New Infrared Reflection Absorption Spectroscopy (IRRAS) System for Observation of Solid-Solution Interface Biomaterials,” *Chem. Phys. Lett.* **466**, 235–239 (2008).

R. TERO, T. UJIHARA and T. URISU, “Lipid Bilayer Membrane with Atomic Step Structure: Supported Bilayer on a Step-and-Terrace TiO₂(100) Surface,” *Langmuir* **24**, 11567–11576 (2008).

Y. MAO, R. TERO, Y. IMAI, T. HOSHINO and T. URISU, “The Morphology of GM1_x/SM_{0.6-x}/Chol_{0.4} Planar Bilayers Supported on SiO₂ Surfaces,” *Chem. Phys. Lett.* **460**, 289–294 (2008).

T. URISU, T. ASANO, Z. L. ZHANG, H. UNO, R. TERO, H. JUNKYU, I. HIROKO, Y. ARIMA, H. IWATA, K. SHIBASAKI and M. TOMINAGA, “Incubation Type Si-Based Planer Ion Channel Biosensor,” *Anal. Bioanal. Chem.* **391**, 2703–2709 (2008).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. ASANO, H. UNO, K. SHIBASAKI, M. TOMINAGA and T. URISU, “Development of Cell Culture Type Planar Ion-Channel Biosensor,” *Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.* **33**, 767–770 (2008).

B-3) 総説，著書

宇理須恒雄，編著，「ナノメデイシン——ナノテクの医療応用——」オーム社 (2008).

手老龍吾，宇治原徹，宇理須恒雄，「固体表面物性がサポーティッドメンブレンの形成過程と構造に及ぼす影響」*表面* **46**, 287–299 (2008).

B-4) 招待講演

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」ナノテクバイオ融合シンポジウム，神戸大学，2008年2月.

T. URISU, “Development of Ionchannel Biosensor Considering the Application to Neurodegenerative Diseases,” The Genomics Research Center Academia Sinica, Taiwan, March 2008.

宇理須恒雄，「ナノテクの難病研究・医療への応用」応用物理学会シンポジウム，2008年3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——医療分子科学の開拓——」大阪大学セミナー，2008年6月.

T. URISU, "Development of Ion-Channel Biosensor and Application to Neural Network Analyzer—New Tool of Medical Molecular Science—," Seminar at Forschungszentrum Juelich, Institute of Bio- & Nanosystems, Juelich (Germany), September 2008.

T. URISU, "Medical Molecular Science and Neural Network Analyzer Device," Taiwan-Japan Bilateral Symposium on Research and Education of Nanotechnology, October 2008.

B-5) 特許出願

特願 2008-185167, 「分析装置」中沖優一郎, 宇理須恒雄, 近藤聖彦(自然科学研究機構, アイシン精機(株))2008年.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

レーザー学会評議員(1983-1985).

日本放射光学会評議員(1993-1994, 1997-1998, 2001-2002).

電気学会, 放射光励起プロセス技術調査専門委員会幹事(1992-1994).

電気学会, 放射光による材料加工技術調査専門委員会委員長(1994-1997).

大型放射光施設安全性検討委員会委員(1993-).

東北大学電気通信研究所研究外部評価委員(1995-).

日本工業技術振興協会, 放射光の半導体への応用技術研究委員会顧問委員(1995-2000).

新機能素子研究開発協会, 新世紀素子等製造評価技術の予測委員会 / ハードフォトン技術研究部会委員(1995).

姫路工業大学ニュースパル利用検討委員会委員(1996-1998).

姫路工業大学ニュースパル新素材開発利用専門委員会委員(1999-2000).

近畿通産局, 超次世代原子デバイスの自己形成技術に関する調査委員会委員(1997-1998).

電気学会, 放射光・自由電子レーザープロセス技術調査専門委員会委員(1997-1999).

放射線利用振興協会, 放射線利用技術指導研究員(1997.11.18-20).

日本原子力研究所, 研究嘱託(1998.4-2002.3).

科学技術庁, 「顕微光電子分光法による材料, デバイスの高度分析評価技術に関する調査」調査推進委員会委員(1998-1998).

科学技術庁, 「顕微光電子分光法による材料, デバイスの高度分析評価技術に関する調査」研究推進委員会委員(1999-2000).

日本原子力研究所, 博士研究員研究業績評価委員(1998-1999).

佐賀県シンクロト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・バイオプロセス技術調査専門委員会」アドバイザー (2004.5-).
日本表面科学会評議員 (2003.4-).
日本放射光学会評議員 (2003.4-2006.12).
(財)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).
ナノ学会副会長 (2008.4-).
表面科学会ソフトナノテクノロジー部会会長 (2008.4-).
日本ナノメディシン交流協会会長 (2006.4-).

学会の組織委員等

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).
Pacifichem 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).
International Symposium on Nanomedicine 組織委員長 (2007, 2009).

学会誌編集委員

JJAP 特集論文特別編集委員 (1992-1993).
電気学会, 電子情報システム部門誌特集号編集委員 (1995-1996).
JJAP 特集論文特別編集委員 (1998).
Appl. Surf. Sci., 編集委員 (2001-2003).
e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, Advisory Board (2003).
日本真空協会「真空」誌編集部会委員 (2004-).
日本表面科学会出版委員 (2005.6-).

B-10) 競争的資金

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)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)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年度に,アルツハイマー病発症機構に関係してアミロイドベータ(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,素子内で細胞を培養する機能を付与することを発案し,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,というブレイクスルーがあり,2008年度はこれらの成果をうけて,A β を非常に速い速度で凝集させるGM1の分子構造の決定および,神経細胞ネットワーク解析素子に欠かせない活動電位発生細胞について,光受容体イオンチャンネルであるチャンネルロドプシン(ChR2)を利用する事の手がかりを得た。これらの二つの成果を結びつけ“生体情報システム分子科学”という新しい学術領域の開拓をめざすことを明確にできた。我々の開発している素子はシナプスを伝搬する信号を正確に捉えることができるという特色があるが,シナプス部はエンドサイトーシス,エキソサイトーシスなど信号伝搬に関わる重要な化学反応過程があり,GM1分子も豊富に局在しており,これらの化学反応に密接に関わっていると考えられているが,具体的なことは全く解っておらず,シナプスという生体ナノ空間での化学反応を最先端分析技術を駆使して調べたいと考えている。

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) タンパク質間相互作用の多色発光検出法に関する研究
- b) リン酸化制御を受けるタンパク質間相互作用の発光イメージングに関する研究
- c) 細胞内小分子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) 不透明かつ自家蛍光の強い生物試料中において，多種類のタンパク質間相互作用を検出するためには，多色発光検出法の開発が不可欠である。これまでに発光タンパク質（ルシフェラーゼ）の切断と再構成反応を利用して，生細胞内タンパク質間相互作用のアッセイが可能な発光プローブを開発してきた。この研究を展開し，コメツキムシ由来の赤色ルシフェラーゼ，同由来の緑色ルシフェラーゼ，ホタル由来の橙色ルシフェラーゼを利用して，1細胞内で多種類のタンパク質間相互作用を同時に可視化できる発光プローブを開発した。生細胞内での FK506-binding protein (FKBP) と FKBP-binding domain (FRB) の間の相互作用検出に応用し，薬剤存在下で可逆的に多色発光検出できることを実証した。
- b) タンパク質間相互作用の多色発光検出法を応用して，リン酸化制御を受けるタンパク質間相互作用の発光イメージング法を確立した。マウス個体および動物細胞を用いて，リン酸化シグナルによって調節される Bad と 14-3-3 タンパク質間，および Bad と Bcl2 タンパク質間相互作用を異なる発光波長により可視化することに成功した。また，ツメガエル卵を用いた実験系において，骨形成因子（BMP）情報伝達系のリン酸化によって誘導される Smad1-Smad4 間相互作用をリアルタイムに可視化検出することに成功した。
- c) 植物個体やツメガエル卵で機能する細胞内情報伝達物質 cyclic guanosine monophosphate (cGMP) を，高感度かつ可逆的に可視化検出できる発光プローブを開発した。cGMP プローブを導入した形質転換シロイヌナズナ個体を用いた解析では，塩ストレス / 浸透圧ストレスなどの外界環境変化に応答して，細胞内 cGMP 濃度の上昇が起こることを明らかにした。またツメガエル卵の発生過程における解析では，脳，心臓において cGMP 産生が観測された。さらに神経胚の神経管近傍において有意な発光上昇が検出された。以上結果から，生物個体内における cGMP の産生を時空間解析する優れたプローブとなることを実証した。

B-3) 総説，著書

小澤岳昌，「タンパク質再構成法を用いた細胞内生体分子の解析法」*BIOINDUSTRY* 25, 27-36 (2008).

菅野 憲，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体分子イメージング」*生体の科学* 59, 66-72 (2008).

小澤岳昌，「RNA イメージング法」*実験医学増刊* 26, 59-67 (2008).

小澤岳昌，「クラゲから生まれた GFP 革命」*現代化学* 453, 25-28 (2008).

小澤岳昌，「可視化プローブによる時空間情報を損なわないミトコンドリア RNA の動態観察」*「ナノイメージング」エヌ・ティー・エス*, pp. 199-206 (2008).

小澤岳昌，「生理機能を可視化する新たな分子プローブ」*「ナノメディシン」宇理須恒雄編，オーム社*, pp. 13-24 (2008).

B-4) 招待講演

小澤岳昌,「生きた細胞ではたらく生体分子を観る技術」第2回横幹連合総合シンポジウム, 東京, 2008年12月.

T. OZAWA, “Fluorescence and bioluminescence biomolecular Imaging: From single cells to living subjects,” 11th International Symposium of Spectroscopical Society of Japan, Sendai, 2008年11月.

小澤岳昌,「生体分子の細胞内動態を解析する分子科学」日本コンピューター外科学会, 東京, 2008年10月.

小澤岳昌,「タンパク質再構成法を用いた生体分子イメージング」薬物動態学会23回年会, 熊本, 2008年10月.

T. OZAWA, “Optical Imaging of Biomolecules in Living Cells and Animals Using Split-Reporter Reconstitution Analysis,” 1st Workshop in the Advanced Light Microscopy (DKFZ), Heidelberg (Germany), 2008年10月.

T. OZAWA, “Visualization of Biomolecules Using Split Reporter Reconstitution; From a Single Cell to Living Animals,” International Symposium of Institute for Innovative Cancer Research, Seoul (Korea), 2008年10月.

T. OZAWA, “Optical Imaging of Biomolecules in Living Cells and Animals Using Split-Reporter Reconstitution Analyses,” 3rd International Workshop on Approaches to Single Cell Analysis, Zurich (Switzerland), 2008年9月.

小澤岳昌,「生理機能を可視化するイメージング技術の原理とモデル生物への応用」第1回東工大バイオ計測研究会, 神奈川, 2008年8月.

小澤岳昌,「生体分子イメージングを可能にする光分子プローブの開発」第5回AMO 討論会, 東京, 2008年6月.

T. OZAWA, “Visualization of Biomolecules in Living Cells Using Split-reporter Reconstitution Analysis,” NIPS-JST International Workshop [Advanced Nonlinear Imaging & Fluorescence-based Biosensors], Aichi, 2008年4月.

小澤岳昌,「生細胞内の生理機能を可視化するタンパク質再構成法」日本薬学会第128年会, 横浜, 2008年3月.

小澤岳昌,「生体分子の機能解明を目指すイメージング法の開発」第88回日本化学会春季年会, 東京, 2008年3月.

小澤岳昌,「新規光プローブが拓く生体分子の時空間解析法」第8回分析化学会関東支部懇話会, 東京, 2008年3月.

小澤岳昌,「新規光プローブが拓く生体分子イメージング」第2回北海道大学医学研究科連携研究センターシンポジウム, 札幌, 2008年2月.

B-5) 特許出願

特願 2008-164927,「cyclicGMP 検出方法」小澤岳昌, 竹内雅宜, 三浦研二, 2008年.

特願 2008-000789,「タンパク質間相互作用の検出法」小澤岳昌, ムハンマド アワイス, 三浦研二, 2008年.

PCT 出願 PCT/JP2008/058669,「プロテアーゼ活性化インジケーター」梅澤喜夫, 小澤岳昌, 菅野憲, 2008年.

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

学会の組織委員等

日本化学会春季年回実行委員 (2008-)

日本化学会春季年回講演企画委員 (2007-).

フロンティア生命化学研究会運営委員 (2008-).

日米先端工学シンポジウム実行委員 (2008).
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

日本化学会欧文誌編集委員 (2007-).
日本分析化学会「ぶんせき」編集委員 (2007-).

その他

基礎生物学研究所パイオイメージングアドバイザー委員 (2006-).

B-10) 競争的資金

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).
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).

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).

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).

萌芽研究,「RNA 機能の光制御法に関する研究」小澤岳昌 (2008年-2009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。従来の蛍光イメージングでは困難であった生物個体内の分子機能を可視化するために、今後はルシフェラーゼの発光を利用した新たなイメージング技術を精力的に開発する。さらに生体分子の対象を広げ展開するとともに、ルシフェラーゼイメージングの定量化と精度の向上、また空間解像度の改善が重要課題である。蛍光・発光同時観察のための顕微鏡システムを開発し、動植物組織・個体内に局在する生体分子の機能の可視化から、生命現象の新たな発見を目指す。

*) 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きがけて成功した。
- b) 高分子分散型ナノ粒子金属触媒（有機高分子 - 金属粒子のハイブリッド），メソポーラスシリカ担持分子性遷移金属錯体（無機担体 - 有機金属のハイブリッド），金属架橋高分子の自己集積触媒（架橋構造と触媒機能のハイブリッド）を開発した。マイクロ流路内の層流界面での自己集積錯体触媒膜の創製に成功した。
- c) 新しいピンサー錯体の合成方法論を確立した。新方法論によって従来にない全く新しいピンサー錯体合成が可能となり，その物性，反応性を明らかとしつつある。

B-1) 学術論文

Y. UOZUMI, H. TAKENAKA and T. SUZUKA, "Allylic Substitution of meso-1,4-Diacetoxycycloalkenes in Water with an Amphiphilic Resin-Supported Chiral Palladium Complex," *Synlett* **10**, 1557–1564 (2008).

Y. UOZUMI and T. SUZUKA, "π-Allylic Sulfonylation in Water with Amphiphilic Resin-Supported Palladium-Phosphine Complex," *Synthesis* **12**, 1960–1964 (2008).

Y. OE and Y. UOZUMI, "Highly Efficient Heterogeneous Aqueous Kharasch Reaction with an Amphiphilic Resin-Supported Ruthenium Catalyst," *Adv. Synth. Catal.* **350**, 18771–18775 (2008).

Y. M. A. YAMADA, H. GUO and Y. UOZUMI, "Development of Tightly Convolutated Polymeric Phosphotungstate Catalysts and Their Application to an Oxidative Cyclization of Alkenols and Alkenoic Acids," *Heterocycles* **76**, 645–655 (2008).

T. KIMURA and Y. UOZUMI, "Synthesis of [2,6-Bis(2-oxazoliny)-phenyl] Palladium Complexes via the Ligand Introduction Route," *Organometallics* **27**, 5159–5162 (2008).

Y. UOZUMI, "Heterogeneous Asymmetric Catalysis in Water with Amphiphilic Polymer-Supported Homochiral Palladium Complexes," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **81**, 1183–1195 (2008).

B-3) 総説，著書

魚住泰広, 「グリーン触媒」化学 化学同人, **63**, 44–46 (2008).

Z. WANG, K. DING and Y. UOZUMI, "An Overview of Heterogeneous Asymmetric Catalysis," in *Handbook of Asymmetric Heterogeneous Catalysis* (2008).

Y. UOZUMI, "Heterogeneous Asymmetric Catalysis in Aqueous Media," in *Handbook of Asymmetric Heterogeneous Catalysis* (2008).

B-4) 招待講演

Y. UOZUMI, "Catalyst Immobilization via Molecular Convolution," China-Japan Joint Symposium on Functional Materials toward Future Catalysts, Chinese Academy of Sciences, Beijing (China), January 2008.

魚住泰広, 「Molecular Convolution による固相担持触媒の創製と利用」26th Conference on Combinatorial Chemistry, Japan, 大阪大学, 2008年4月.

Y. UOZUMI, "Heterogeneous Aquacatalysis with Amphiphilic Resin Supported Transition Metal Complexes & Nanoparticles," Yale Chemistry Seminar, Department of Chemistry, Yale University, New Haven (U.S.A.), May 2008.

Y. UOZUMI, "Heterogeneous Aquacatalysis with Amphiphilic Resin Supported Transition Metal Complexes and Nanoparticles," 2nd International Symposium on Green Processing in the Pharmaceutical & Fine Chemical Industries, New Haven (U.S.A.), May 2008.

Y. UOZUMI, "Heterogeneous Aquacatalysis with Amphiphilic Resin Supported Transition Metal Complexes & Nanoparticles," Chemistry Department Seminar, Department of Chemistry, McGill University, Montreal (Canada), June 2008.

魚住泰広, 「Molecular Convolution による固定化触媒の創製とマイクロ反応デバイスへの適用」近畿化学協会フロー・マイクロ合成研究会第19回公開講演会, 大阪科学技術センター, 2008年7月.

魚住泰広, 「Molecular Convolution による高分子錯体触媒の創製」第58回錯体化学討論会, 金沢大学角間キャンパス, 2008年9月.

Y. UOZUMI, "Heterogeneous Aquacatalytic Systems toward Ideal Organic Synthesis," Suzuki Kunio Symposium, Tokyo (Japan), September 2008.

Y. UOZUMI, "Pincer Palladium Complexes: Their preparation and Properties," China-Japan Joint Symposium on the Element-Based Molecular Functions, Beijing (China), October 2008.

Y. UOZUMI, "Catalyst Immobilization via Molecular Convolution: Application to the Development of Microchannel Reaction Devices," 理化学研究所シンポジウム「有機金属化学の最前線」2008年11月.

Y. UOZUMI, "Catalyst Immobilization via Molecular Convolution," Japan-Korea Joint Symposium on Functional Materials toward Future Catalysts: Chemistry Showcase, Daejeon (Korea), November 2008.

魚住泰広, 「両親媒性高分子担持ルテニウム錯体触媒による水中不均一異性化——アルドール縮合反応」協奏機能触媒第5回公開シンポジウム, 大阪大学, 2008年12月.

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).

山田陽一, 文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2008).

山田陽一, Thieme Chemistry Journal Award (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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).

コンピナトリアル・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-).

学会の組織委員等

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, 大学共同利用機関等の委員等

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 (2002-2006).

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 誌編集委員 (2005-).

その他

科学技術振興機構CREST 研究「水中での精密分子変換を実現するナノ遷移金属触媒創製」研究リーダー (2002-2007).

理化学研究所研究チームリーダー (2007-).

経済産業省グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発プロジェクト 研究チームリーダー (2008-).

B-10) 競争的資金

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(公募研究: 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(公募研究: 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(経済産業省・戦略的技術開発)グリーンサステナブルケミカルプロセス基盤技術開発,「高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発」魚住泰広 (2008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-2008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).

B-11) 産学連携

共同研究(株)カネカ「固相担持型Buchwald-Hartwig反応触媒の開発」魚住泰広 (2008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(CREST研究など)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てきた。他の金属種(W, Ru, Rh, Cu)に適用範囲を拡張しつつある。今後さらに基礎科学的論証を重ねる予定である。さらに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。水中機能性固定化触媒に関するCREST研究が2008年3月に終了し、続いてその成果を実践的に発展させるため経済産業省(NEDO)プロジェクトを2008年9月に開始した。また、自己集積錯体触媒研究は理化学研究所フロンティア研究に指名され同研究所に場所を移して展開中である。すなわち、魚住グループの大きな研究の柱はCREST-NEDO, 理研へと発展的に移行している。今後、魚住の本拠地である分子科学研究所に於いては、次の研究の萌芽を見いだし育てるの研究に注力しており、幾つかの新機軸候補課題の中から大きな発展に繋がる新課題を見いだしたいと考えている。現状の環境・活力を維持する上で今こそ従来以上の基礎的学術研究への集中こそが重要である。

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：

- a) 金属錯体を触媒とする二酸化炭素の多電子還元反応
- b) 水およびアミン配位子の酸化的活性化による新規酸化反応活性種の創造
- c) 化学エネルギーと電気エネルギーの相互変換を目指した反応系の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 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。
- b) 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。
- c) 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 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。
- d) 光化学的不斉水素化に成功。

B-1) 学術論文

J. MUCKERMAN, D. POLYANSKY, T. WADA, K. TANAKA and E. FUJITA, "Water Oxidation by a Ruthenium Complex with Non-Innocent Quinone Ligands: Possible Formation of an O-O Bond at a Low Oxidation State of the Metal," *Inorg. Chem.* **47**, 1787-1802 (2008).

D. POLYANSKY, D. CABELLI, J. MUCKERMAN, T. FUKUSHIMA, K. TANAKA and E. FUJITA, "Mechanism of Hydride Donor Generation Using a Ru(II) Complex Containing NAD⁺ Model Ligand: Pulse and Steady-State Radiolysis Studies," *Inorg. Chem.* **47**, 3958-3968 (2008).

K. KIMURA and K. TANAKA, "Synthesis and Electrochemical Reduction of a Ruthenium Complex Bearing an NAD⁺/NADH-Type Redox Site," *Angew. Chem., Int. Ed.* **47**, 9768-9771 (2008).

K. TANAKA, T. WADA, E. FUJITA and J. MUCKERMAN, "Reversible Conversion between Chemical and Electrical Energies Catalyzed by Ru Complexes Aimed to Construct Sustainable Society," *Symp. Am. Chem. Soc. Div. Fuel. Chem.* **53**, 236-237 (2008).

B-4) 招待講演

K. TANAKA, "Oxidation of Alcohols Aimed at Power Generation from Chemical Energy in Homogeneous Reactions," 235th ACS National Meeting, New Orleans (U.S.A.), April 2008.

K. TANAKA, "Generation of Ru-oxyl and -aminyl Radical Complexes Aimed at Energy Converter from Chemical Energy to Electrical One," Kyushu University, March 2008.

K. TANAKA, "Discoveries and Challenges for Innovative Interconversion of Chemical and Electric Energies Using the Rationally Designed Coordination Compounds," Kumamoto Symposium on Design and Applications of Advanced Molecular Materials, Kumamoto University, December 2008.

K. TANAKA, "Water Oxidation through Ru(II)-oxyl Radical Coupling," 7th Japan-China Joint Symposium on Metal Cluster Compounds, Hokkaido University, October 2008.

田中晃二, 「二核ルテニウム錯体による水の4電子酸化反応と酸素 - 酸素結合生成過程について」 KEK 研究会, つくば, 2008年2月.

田中晃二, 「アクア-オキシラジカル変換を経由する水の4電子酸化反応」分子研研究会, 2008年7月.

田中晃二, 「エネルギーサイクルと人工光合成とについて」トヨタ中央研究所, 2008年2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」高等科学研究所, 京都, 2008年1月.

田中晃二, 「持続可能な社会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」第8回「生命金属機能を利用した物質変換システム研究会」桜華会館(名古屋)2008年3月.

田中晃二, 「錯体触媒による二酸化炭素の多電子還元反応を目指して」第21回配位化合物の光化学討論会基調講演, 北里大学, 2008年8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の設計と合成」錯体化学会特別講演, 第58回錯体化学討論会, 金沢大学, 2008年9月.

B-6) 受賞, 表彰

田中晃二, 日本化学会学術賞 (1999).

田中晃二, 錯体化学会賞 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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 (1990-2008).

錯体化学会会長 (2008-).

学会の組織委員等

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, 大学共同利用機関等の委員等

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-).

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).

競争的資金等の領域長等

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」研究代表者 (2000-2005).

文部省重点領域研究「生物無機化学」班長 (1992-1994).

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) 競争的資金

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年度-2008年度).

特別推進研究,「金属錯体触媒による電気エネルギーと化学エネルギーの相互変換反応の開発」田中晃二 (2008年度-2011年度).

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 -CO₂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結合の還元的開裂のためにCOが発生する。したがって、二酸化炭素有機合成のC1源とするためにはCO₂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CO₂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CO₂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に酸化還元活性な配位子を導入し、プロトン解離で生じる負電荷を、その配位子上に収容すると、酸素あるいは窒素原子上に不対スピンを有するオキシルまたはアミニルラジカル金属錯体が生成する。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~2008年3月31日)*)

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。これらの金属錯体による小分子活性化反応に関する研究結果を基に、新しい配位子の設計および合成を行った。
- b) カリックス [4] アレーンを配位子とするヒドリド錯体の合成を行い、二酸化炭素との反応を検討した。

B-1) 学術論文

M. KONDO, S. SUGAHARA, N. YUKIE, M. S. YASUE, K. MAEDA, F. UCHIDA, G. SAKANE and H. KAWAGUCHI, “Self-Assembling Construction of a Novel Nanoscale Heptacobalt Complex with an S-shaped Folding,” *CrystEngComm* **10**, 1516–1519 (2008).

Y. SHIBUYA, K. NABARI, M. KONDO, S. YASUE, K. MAEDA, F. UCHIDA and H. KAWAGUCHI, “The Copper(II) Complex with Two Didentate Schiff Base Ligands. The Unique Rearrangement that Proceeds under Alcohol Vapor in the Solid State to Construct Noninclusion Structure,” *Chem. Lett.* **37**, 78–79 (2008).

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

学協会役員等

錯体化学会理事 (2006–2007).

学会の組織委員等

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) 競争的資金

徳山科学技術振興財団研究助成, 「キュバン型金属 - 硫黄クラスターの高度集積化」川口博之 (2001年).

若手研究(A), 「架橋型フェノキシド配位子をもつ金属錯体による小分子活性化」川口博之 (2002年–2004年).

特定領域研究, 「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, 「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。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いるが,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,小分子活性化機構の解明,新しい反応性の開拓を行う。

*) 2008年4月1日東京工業大学大学院理工学研究科教授

7．点検評価と課題

昨年度（平成 19 年度）に分子研独自の評価を大掛かりに行ったこと、及び、大学評価・学位授与機構による第一期中期目標・中期計画の評価が行われたことから、平成 20 年度には比較的小規模な点検評価を行った。2 名の外国人運営顧問によって研究領域と施設の全体的な評価を行って頂いた。訳文と共に本 7 章 7-1 に掲載してある。研究水準については、大変高いとの評価を頂いたが、お世辞半分（？）と受けとめ奢ることなく更なる研鑽に努める必要がある。また、以下でも触れるが、何時もながら、研究グループサイズが小さいとの指摘を受けている（その割には、テーマを厳選し優れた研究をしているとお褒めを頂いているが）。以上に加え、国立大学法人評価委員会による評価の結果が 7-2 にまとめられている。

昨年度の評価で頂いた色々なご意見を踏まえ、所内でも検討を重ねた結果、IMS フェローの待遇改善、分子研特別研究員制度の導入、及び、共通設備の充実、を実施することとした。については、特任助教の称号を与える週 40 時間勤務の優れた研究員を審査委員会による審査を経て採用する制度を導入した。研究グループへの予算配分制度をも改めて、これら研究員の採用を含めてグループリーダー自身が計画を立てやすい様に改め、平成 21 年度から実施することとした。共通設備については予算の許す範囲内で、充実に努力することとした。早速 20 年度中に 2～3 の設備購入を進めた。研究グループサイズが小さいという課題については、グループ制を維持する限りは（実際維持するつもりであるが）、研究所からの人的支援は限られるので、研究グループリーダーが科研費を中心とする外部資金を獲得する努力を一層進めるべきである。また、優れた大学院学生の獲得も大きな課題である。個人及び企業からの寄附による「分子科学若手育成基金」を設立したが、誠に運悪く未曾有の金融危機のタイミングに合ってしまう苦しいスタートとなってしまった。しかし、これは今後長期戦で続けて行き優秀な若手を国内外から集める努力をしなければならない。

現在、大学附置研等の拠点化の審議が学術審議会の方で進められており、共同利用・共同研究拠点が増えることになる。また、大学共同利用機関のあり方の見直しも改めて学術審議会で行われる予定である。分子科学研究所においても引き続き「大学共同利用機関としてのあり方」を議論しておく必要がある。

いずれにしろ、何と言っても最も大事なことは、教授、准教授が分子科学における新分野を創出し世界において分野をリードする努力を、独自性と気概を持って進めていくことである。皆様のご支援をも御願いするところである。

（中村宏樹）

7-1 外国人運営顧問による点検評価

7-1-1 William H. Miller 外国人運営顧問

原文

To: Hiroki Nakamura, Director-General of IMS

From: William H. Miller, Kenneth S. Pitzer Distinguished Professor of Chemistry, University of California, Berkeley, and Foreign Councillor to IMS

Subject: Report of my review visit to IMS, February 9, 2009

My review visit began with a presentation by the Director-General of IMS giving an overview of the entire structure and mission of IMS. He emphasized the unique role of an “Inter-university Research Institute,” namely to carry out research at the very highest level and also to provide unique state-of-the-art facilities for use by researchers throughout Japan, facilities that would be impractical for any one institution to support. He also reviewed the “Basic Policies of IMS,” new initiatives that are underway, and also the potential problems he sees for the future. I then heard summary presentations from leaders in all four Departments of IMS, and had a brief tour of the major facilities that IMS provides and supports for extramural researchers.

Before commenting on specific programs, let me make a few observations that are relevant to IMS in general:

1. By all measures, IMS has been an enormous success. The faculty do indeed have world class research programs in a wide variety of areas of molecular science, and IMS provides and maintains some of the most outstanding facilities in existence (e.g., the 920 MHz NMR spectrometer) for use by researchers nationwide.

2. IMS has made excellent decisions in its hiring of young faculty, as is evidenced by the success these persons have had in obtaining senior faculty positions at other institutions after their time at IMS. By recruiting the most promising young faculty, who then move on, it allows IMS to always stay at the forefront on new developments in the field. This model is continuing to serve IMS, and Japanese science in general, very effectively.

3. Though I am more familiar with the theoretical programs at IMS, I was impressed by the high quality and originality of the experimental programs, especially given the fact that each principal investigator typically has only 2 or 3 co-workers in his group. Small research groups are typical (and usually no hindrance) for theoretical research programs, but modern sophisticated experimental research usually takes place in considerably larger research groups. As a consequence, it appears that the experimental faculty at IMS do not try to do “everything” but rather to concentrate on highly original and novel projects. This emphasis on “quality over quantity” may actually have more impact in the scientific community over time (and I note that the “quantity” of research, i.e., productivity, is certainly not lacking).

4. I sympathize with the problems that “privatization” has brought to IMS, but am afraid that such trends are a worldwide phenomenon and not going to diminish. Funding sources (i.e., governments) want to see scientific efforts focused on practical societal needs, such as developing new sources of energy that are clean and economically viable. Fortunately, molecular science is better positioned to

deal with these real world problems than most other areas of science, but it does make it more difficult to support work that cannot be clearly identified with these specific goals. Perhaps the best that any of us can do, in each of our countries, is to continue to make the case that developing improved fundamental methodologies, both experimental and theoretical, is crucial to making progress on all of these applied problems of interest.

In light of Professor Laubereau's very thorough discussion of IMS's experimental programs, I will confine my specific remarks to the presentations made regarding the theoretical programs. I reviewed the *Department of Theoretical and Computational Molecular Science* in detail last year, so there is not much to add in that regard.

The new addition to the faculty since my last report, Professor M. Ehara, gave a presentation of his research program: It involves the development of accurate new ways for calculating electronically excited states of molecules, and a variety of applications of these methods to complex molecular systems. Dynamics involving electronically excited states is central to many areas of chemistry, and accurate treatments of these states has been relatively neglected (because of the extra difficulty). This is thus an important direction for research and an excellent example of combining fundamental methodological research with very significant applications.

Professor F. Hirata then gave a presentation describing the "Next Generation Supercomputer Project." I am delighted to see that Japan is pursuing this program and hope it will inspire similar efforts in my country. Science worldwide now relies heavily on computer simulation to guide and interpret all types of experiments, so increased computational power will be welcomed by all. As noted, though, even a 10 petaflop computer will only increase present capabilities by a factor of ~100, so improved theoretical methodologies will still be extremely important for dealing with the complex molecular processes involved in nanomaterials, biomolecular processes, and new sources of clean energy.

Prof. M. Ehara gave an excellent overview of the program of the *Research Center for Computational Science*. It seems that there are two classes of users for which this center is crucial: One is the casual user, e.g., an experimental group that wishes to carry out some electronic structure calculations, using standard program packages, in order to interpret their data; it is not practical for them to have and maintain their own computational facilities for this, and they also often need some guidance in using the theoretical software. The other class of user is typically a theoretical group that wishes to carry out exploratory calculations of the most challenging nature that are only feasible on the most powerful computing facilities in existence, far beyond the facilities they may have available within their own group. Recognizing this, the Center chooses (by review committee) a small number of "S Class" projects for which massive amounts of time and storage are made available for these most challenging calculations. But the bulk of the resources are still made available to "casual" users. I believe this is a wise policy: Using this resource to carry out calculations that could not otherwise be done, while at the same time fulfilling the mission of providing state-of-the-art computational capabilities to the broader community.

Overall, the theoretical program at IMS remains strong, varied, and focused new directions in the field. My only recommendation is to "keep up the good work"!

To: 分子科学研究所 中村宏樹所長

From: William H. Miller (カリフォルニア大学バークレー校化学科 Kenneth S. Pitzer 抜群教授)

Subject: 分子研評価訪問の報告, 2009年2月9日

分子研の評価に当たって、中村所長から研究所の組織と役目の概略の説明がまずなされた。特に、全国共同利用機関としての役割、すなわち、非常に高いレベルの研究の実行と一つの大学等ではもてないあるいは維持ができない研究設備や施設の全国の研究者への提供が強調された。中村所長からは、分子研の基本的なポリシー、現在進行している新しい構想、これから直面する問題等の説明も受けた。これらの説明の後で、四つの研究領域のリーダーからそれぞれの領域の研究概要の紹介があり、主要な研究施設を視察した。

特定のプログラムにコメントする前に、分子研に関する一般的な所見を述べたい。

1. すべての評価を総合して、分子研は素晴らしい成功をおさめている。分子科学の種々さまざまな研究分野において世界一流の研究がなされて、すぐれた研究設備（たとえば、920MHz NMR）が全国の研究者に広く提供されている。
2. 分子研は若い人の採用に関して素晴らしい判断をしている。これは、採用した若い人が分子研での研究後、他の大学や研究所で高いポジションを獲得していることにも示されている。有望な若い人を募集して他の大学や研究所に送り出すことで、分子研が分子科学の新しい進展の最前線にあり続ける。これは、分子研および日本の分子科学に非常に効果的なものとなっている。
3. 私は理論分野により精通している。しかし、2 - 3人から構成される研究グループが分子研の典型とすると、実験分野の高い質の独創性ある研究には感銘した。理論分野では小さい研究グループは通常で、一般的にはあまり障害にならない。しかし、最近の洗練された実験は相当に大きな研究グループによって実行されている。結果として、分子研の実験研究者はすべてのことを試みるのではなく、高い独創性と新規な研究課題に的を絞っているように思われる。この“量より質”という研究姿勢の強調は、分子科学コミュニティーにむしろインパクトを与えているかも知れない（研究の質、すなわち生産力が欠けていないと認識している）。
4. 法人化が分子研にもたらした問題には同情する。この法人化は世界的な傾向で減少しないこと憂慮する。政府等からのこれからの研究費の確保には、社会的ニーズに合う実際的な研究（たとえば、クリーンで経済的に効率の良いエネルギー源を開発する研究）が求められことになる。幸いなことに、分子科学はこれらの問題を他の科学分野よりも上手く取り扱える位置にある。しかし、社会的ニーズに直接に合致するかどうかの見分けが難しい研究の支援がより困難になる。このためには、向上された基礎的な理論および実験の方法論の開発が、興味ある応用研究の進展には不可欠と思われる。

実験分野の綿密な評価は Laubereau 教授によってなされているので、理論分野の説明に関してのみ言及することにします。昨年度、理論・計算分子科学研究領域を詳細に評価したばかりなので、あまり多くを加えることはない。

理論・計算分子科学研究領域の新しいメンバーとなった江原教授から、分子の電子励起状態の正確な計算法の新しい進展と複雑な分子系への様々な応用の研究概要の説明を受けた。電子励起状態を含む動力学研究は化学の多くの分野での中心的課題であるが、正確な取り扱いには様々な難しい問題があるので置き去りにされていた。江原教授はこ

の分野の重要な研究方向ばかりでなく、基礎研究と応用研究を結びつける素晴らしい見本を示している。

平田教授は“次世代スーパーコンピュータプロジェクト”の説明を行った。日本がこのプロジェクトを推進していることを喜んで見ている。この日本での推進が、米国でも類似のプロジェクトの開始を鼓舞することを期待する。様々なタイプの実験のガイドと解釈には、コンピュータシミュレーションに頼ることの重要性が増しているので、コンピュータの性能の進展は大歓迎である。しかし、10ペタフロップス級のスーパーコンピュータでも、現在の計算能力を100倍程度高めるに過ぎない。このために、ナノ物質、バイオ分子、クリーンなエネルギー源などに含まれる複雑な分子過程の取り扱いには、新しい理論の開発は依然としてきわめて重要である。

江原教授は計算科学研究センターの運用の説明を行った。計算センターの利用には大きくわけて二つのタイプのユーザがある。一つは、全国の多くの実験グループは研究室に高速なコンピュータをもっていないので、計算センターのライブラリにある標準的なプログラムを使用して電子状態計算を実行して、実験データを解釈することである。もう一つは、最も高速なコンピュータを用いることにより実現可能な挑戦的な計算を実行したい理論グループである。この後者を実現するために、長時間の計算と大容量の資源の使用が許される特別Sクラス課題を募集して、挑戦的な大規模計算を可能にしている。この特別Sクラス課題は、一般のユーザの使用を制限しないよう運用されている。一般課題と特別課題の設定は賢明な運用法である。これにより、他の所ではできない計算が実行できると同時に、分子科学分野の研究者に広く計算資源を提供するという使命が満足される。

全体として、分子研の理論分野は強力・多彩で新しい研究の方向に焦点を合わせている。私の唯一の推奨は、“良い研究を続ける”ことである。

7-1-2 Alfred Laubereau 外国人運営顧問

原文

Director-General Hiroki Nakamura

Institute for Molecular Science

Okazaki, Japan

Report

of my visit of the Institute for Molecular Science (IMS), March 2–3, 2009

My visit of the Institute for Molecular Science was carried out on March 2–3 and started with an overview given by the Director-General Professor H. Nakamura and further oral contributions of four leading scientists of the Departments. In his presentation the Director-General provided highly interesting information on the National Institutes of Natural Sciences in Japan and the important role of the IMS as an Inter-University Research Institute supporting pioneering research issues, promoting academic research by a domestic joint study program and offering the joint use of large-scale facilities for leading researchers throughout Japan. A discussion of the structure of the IMS followed that consists of four departments and seven research facilities including a technical division. The recent reorganization obviously has improved the collaboration among internal groups of the institute. Prof. Nakamura pointed out the wide-spread research goals of the IMS with special research programs and summarized some highlights achieved by the institute.

The concept of the Inter-University Research Institute as demonstrated by the IMS is convincing and promotes first class research by intensified collaborations. It optimizes the efficient use of the limited resources by facilitating the access to expensive instrumentation like the 920-MHz NMR instrument. The IMS is also well integrated in international research programs. The improved link to universities has a potential to compensate for the relative smallness of the individual groups of the IMS. This point will require further inspection in the future.

Summaries of the research program were outlined in presentations for the following departments:

Photo-molecular Science, Prof. Hiromi Okamoto,

Materials Molecular Science, Prof. Toshihiko Yokoyama,

Life and Coordination-Complex Molecular Science, Prof. Tsuneo Urisu

and the UVSOR Facility, Prof. Masahiro Katoh.

The available time of my visit did not allow me to get into contact with all research groups. My report is focussed on the departments mentioned above and does not comprise the full range of research activities of the IMS. As an experimentalist the visit of the Department of Theoretical and Computational Molecular Science was kept short and does not allow me to give useful comments, although my general impression was extremely positive. In total I had meetings with 12 group leaders supplemented by a workshop with short presentations of four younger researchers of the Department of Photomolecular Science. The informal interviews with the group leaders and the workshop provided detailed insight into first-rank research results and present activities. The discussions also included possible limitations imposed by available space, funds and manpower. I could also see several labs and the UVSOR facility where substantial progress was achieved since my previous visit. An exceptional level of expertise was demonstrated in the discussions and by the quality of the acquired and self-built instrumentation.

Department of Photo-Molecular Science

The department is organized in four divisions, three of which I could visit.

In the Division of Photo-Molecular Science I directed by Prof. H. Okamoto novel optical properties and optical control of nano-structured materials are studied by scanning near-field spectroscopy with femtosecond laser pulses, providing spatial, spectroscopic and temporal resolution. The experimental techniques include conventional near-field microscopy, one- and two-photon induced luminescence, surface-enhanced Raman scattering and ultrafast transmission measurements providing state-of-the-art images of nanoplatelets, -rods and other structures with a spatial resolution of 50 nm and dynamical information on a 100-fs time scale. Inventive studies of the local, temporal and spectral properties were performed in collaboration with Prof. K. Imura for various metal nanoparticle systems and molecular assemblies, providing important information on the spatial coherence of surface excitations allowing to determine the wavefunctions of plasmon resonances of mesoscopic metals. Examples are chemically synthesized gold and silver nanorods and gold nanoplatelets. Near field transmission images were obtained of longitudinal plasmon resonances in excellent agreement with calculated local state densities. The time resolved pump-probe measurements revealed that the electron temperature of the gold nanorods was increased by the near-infrared excitation pulse inducing spectral shifts. The work has been also extended to molecular nanowires observing longitudinal propagation of the optical excitations. The results are excellent and provide a basis for the future development of quantum optical wires and integrated plasmonic systems in the field of quantum computing.

In the Division of Photo-Molecular Science I the group guided by Professor Y. Oshima has been developing methods for the quantum state manipulation of molecules by ultrashort laser. Current activities are focussed on nuclear motions, i.e. rotational and low-frequency vibrational wave packets. In this work non-adiabatic molecular alignment was achieved and the corresponding generation of the distribution of rotational states demonstrated for molecules in the supersonic expansion using resonantly enhanced multiphoton ionization. In collaboration with Prof. H. Hasegawa the method was very recently applied to benzene cooled adiabatically to 0.5 K. Using 150 fs laser pulses at 810 nm at an intensity level of 2.2 TW/cm^2 nonresonant rotational excitation up to $J = 10$ was achieved. Information on the phases of the rotational states of benzene was accomplished by an additional, delayed replica of the laser pulse and measuring the resulting modulation of the state populations. By comparison with numerical simulations the generated rotational wave packets could be reconstructed. An extension of the technique to nonadiabatic vibrational excitation is under the way. The novel investigations pave the way for fully state-resolved measurements of chemical reaction dynamics.

In the Division of Photomolecular Science II high-precision coherent control is investigated as a necessary prerequisite for novel quantum technologies, e.g. for governing the pathways of photochemical reactions. The group of Professor Kenji Ohmori has developed a novel wavepacket interferometry with remarkable results on phase-controlled interferences of vibrational wave-packets in small molecules studied in the supersonic expansion. Attosecond time resolution is achieved using highly reproducible femtosecond laser pulses in combination with a special, ultra-stable Michelson interferometer that generates the phase-controlled linear superposition of two excitation pulses. The well-defined phase relation of the pulse pair is transferred to the vibronic excitation of the molecules generating quantum interferences. An example is iodine, yielding both the amplitude and phase information of the wave function of the molecular ensemble. By the help of an additional probing pulse space-time images of the quantum interferences were achieved by a collaboration of Profs. K. Ohmori and H. Katsuki very recently. Picometer and femtosecond resolutions were demonstrated for the measured vibronic wavepacket motions of I_2 . The interference patterns observed with this new technique were termed “quantum carpets.” By the help of simulations the potential curve of an excited electronic state of the molecule could be reconstructed. The work of the group is particularly significant, e.g. for potential applications in quantum computing and other quantum technologies.

In the Division of Photo-Molecular Science III molecular dynamics in intense laser fields is the headline for the research of Prof. A. Hishikawa, studying atoms and molecules with sub-10-fs laser pulses in the range of 10^{15} W/cm^2 . Under such extreme conditions the external laser field is comparable with the internal Coulomb field of the molecules leading to new phenomena, e.g. Coulomb explosion. The highly charged ions formed in the excitation field separate into fragments, the momenta of which are analyzed so that the initial structure of the molecule can be traced back. The exciting work provides an improved understanding of light-molecule interactions. A novel method termed pump-probe Coulomb explosion imaging was developed in collaboration with Prof. M. Fushitani and demonstrated for the cation $\text{C}_2\text{D}_2^{2+}$ of deuterated acetylene that was prepared by a first laser pulse. By the help of an intense second pulse (9 fs at 800 nm) the di-cation was converted to $\text{C}_2\text{D}_2^{3+}$. The resulting Coulomb explosion was monitored and the ultrafast migration of deuterium visualized. The method was also extended to triple-ion coincidence momentum imaging and applied to the acetylene-vinylidene isomerization in an intense laser field determining again hydrogen migration. Notably different momentum distributions of the fragments were measured when released from the initial species by a 9-fs pulse as compared to those of the product vinylidene obtained with a longer pulse of 35 fs. Hydrogen migration plays a role in various chemical process so that the deeper understanding may provide a clue for the control of the chemical reaction. The research group also applies soft X-ray pulses

to studies of chemical processes, e.g. probing the dissociation of bromine at 41 eV. The generation of attosecond pulses via high-harmonic generation in neon is in progress implementing even higher temporal resolution in these investigations.

Other groups in Photomolecular Science III perform highly sophisticated inner-shell spectroscopy of molecular solids and DNA, using synchrotron radiation. The studies of photo-ionization and -dissociation dynamics in fullerenes by the group of Prof. K. Mitsuke are some of the highlights in the field. Significant progress has been achieved by pump-probe or double resonance experiments combining synchrotron and laser radiation.

Department of Materials Molecular Science

The department directed by Prof. N. Nishi has obtained outstanding results in the field of new molecular systems and higher-order molecular assemblies. Facile generation methods were developed and the molecular systems characterized by their electrical, optical and magnetic properties including catalytic activities and chemical performance. Examples are novel metal-carbon nanosystems with potential applications as gas sensors. Along these lines Cu_2C_2 nanocables were developed for sensing O_2 at room temperature by changes of electric conductivity. The developed expertise for the self-assembly of thin nanowires and nanocables is noteworthy. Further achievements include the fabrication of diameter-controlled nanoparticle arrays, silver-carbon nanosponge structures with high potential of catalytic activity and hollow graphitic polyhedrons with promising applications for gas storage. Most successfully the department also studies the synthesis, structures and magnetic properties of carbon encapsulated nanoparticles. With respect to the large potential for commercial applications it is proposed to give more emphasis to the work and improve the resources of the department.

In the group of Prof. T. Yokoyama magnetic thin films are studied. To this end metal films are modified by chemical treatment of the surfaces e.g. adsorption-induced spin transitions or morphological changes and the magnetic properties determined by various spectroscopic methods including novel techniques. A notably improved measuring system for X-ray magnetic circular dichroism (MCD) was installed in the beamline of the UVSOR-II source equipped with a superconducting magnet for high fields up to 7 T and a liquid helium cryostat. The group recently discovered a surprising enhancement of the photoemission MCD of nickel films when the photon energy is close to the work function threshold. This allows the use of femtosecond laser pulses that provide a superior time resolution as compared to synchrotron radiation. First results of the novel UV MCD photoelectron emission microscopy (PEEM) were obtained with a time resolution of 200 fs for epitaxially grown Ni layers on Cu(001). The method has been also extended to 2-photon induced MCD. Significant enhancement of the orbital magnetic moments of Co on Cu(001) was demonstrated by the pioneering work of the group. The magnetic properties of self-assembled Co nanorods were investigated using the same setup. The low-dimensional magnets possess an interesting potential for future applications as storage media.

Other important research of the department is carried out on organic electronic devices. In the Research Center for Molecular Scale Nanoscience the group of Prof. M. Hiramoto investigates purification, nanostructure design and long-term durability of organic semiconductors. The world-wide most efficient organic solar cells was accomplished for a p-i-n-structure with a 1- μm i-layer of co-deposited fullerene and phthalocyanine. Further highlights among the series of research projects of the IMS with significant application potential to be quoted here are molecular n-type semiconductors with high electron mobility based on perfluorinated oligofluorenes and the modelling of photosynthesis by artificial molecules.

Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science

The role of metalloproteins is crucial for the understanding of regulatory mechanisms in biological systems. In the Division of Biomolecular Functions Prof. S. Aono and coworkers investigate novel proteins with new functions that are important for molecular metabolism and signal transduction. Of particular interest are sensor proteins for diatomic gases like O₂, NO and CO. The relations between the structures of metalloproteins with their functions have been inspected by a wide range of chemical methods including structure analysis by X-ray spectroscopy. Significant progress was achieved as demonstrated by the excellent results on the signal transducer protein HemAT from *Bacillus subtilis*. The mechanism of selective O₂ sensing by the heme was addressed studying the hydrogen bonding interaction by resonance Raman spectroscopy and comparing it with that for other bacteria. Three conformers were found in the O₂-bound form with very similar H-bond patterns. Using the technique in the UV, different conformational changes upon binding of O₂, CO and NO to the heme protein could be recognized. The findings suggest that hydrogen bonding of the heme-bound O₂ gives rise to structural changes that are communicated to the protein moiety.

The group of Prof. K. Kuwajima performs excellent work on the mechanisms of *in vitro* protein folding and molecular chaperone functions. Model globular proteins and molecular chaperones are studied that are known to mediate protein folding in biological cells. The experimental information is supplied by various spectroscopic and biophysical techniques, including circular dichroism and fluorescence spectroscopy, NMR, small-angle X-ray scattering, and the results supported by molecular dynamics simulations. The kinetics of the canine milk lysozyme folding and unfolding were investigated in detail and compared with previous results for α -lact-albumin, revealing different pathways for the two proteins. Unfolding simulations were performed for the authentic and recombinant forms of goat α -lactalbumin. In spite of their structural similarity different unfolding rates were found in the computations while the two forms display a common transition state structure in agreement with experimental data.

More recently the structure of the GroEL-GroES complex was investigated in solution under physiological conditions at different temperatures and nucleotide conditions. The small-angle X-ray scattering patterns were compared with calculated data derived from the known crystallographic structures. The results are necessary for the understanding of the biomolecular kinetics.

The group of Prof. K. Kato in the Division of Biomolecular Functions carries out highly interesting analyses on the microscopic scale of the structures and dynamics of biological macromolecules and their complexes. The exciting work also includes biomolecular machines and glycoproteins in immune systems and is essentially based on isotope-assisted nuclear magnetic resonance spectroscopy with a novel 920 MHz instrument. The superior spectral resolution of the NMR system was demonstrated for intrinsically disordered proteins in liquid solution where more detailed information on interactions, conformations and modifications could be accomplished. A ¹³C NMR analysis of archaeal prefoldin, group II chaperonin and their complex was carried out, concentrating on structural regions not previously addressed by X-ray crystallography. The data revealed that certain terminal segments of protein subunits retain significant internal motion even for the complex in buffer solution.

UVSOR Facility

It is an important function of the IMS to make advanced instrumentation available for guest scientists, in particular synchrotron radiation. At the UVSOR facility 9 beam lines are available for public users and further 4 lines for internal groups. Under the direction by Prof. N. Kosugi and in collaboration with Professor Masahiro Katoh the UVSOR-II storage ring and its injector have been notably

improved and important progress achieved towards more stable operation at higher beam flux. Four undulators are producing highly brilliant radiation in the VUV and soft X-ray region. A free-electron laser was installed with a pulse duration of 10 ps and output level of 1 W, the short-wavelength limit being shifted below 200 nm. In addition, intense THz pulses have been made available by UVSOR II, using a synchronized femtosecond Ti:Sapphire laser. A micro-density structure of the electron bunches in the storage ring is achieved by interaction with injected laser radiation yielding broadband coherent radiation around 0.3 THz. Using amplitude-modulated laser pulses the generation of quasi-monochromatic THz radiation was demonstrated for the first time in a uniform magnetic field.

Density-modulation in the undulator by electron-laser interaction with a period of the laser wavelength can produce coherent harmonics of laser light. Third harmonic generation of a Ti-Sa-Laser was accomplished and the optical properties of the coherent harmonics investigated.

The achievements of UVSOR-II have found a wide range of applications in different fields, i.e. in atomic and molecular science, bio-related research and material science. Numerous high quality investigations have been performed in different divisions of the facility so that a detailed account is beyond the scope of this report. As an example only the interesting studies of inner-shell photoexcitation and photoionization by the group of Prof. E. Shigemasa shall be mentioned. Electronic structures and decay dynamics in core-excited atoms and molecules have been investigated by soft X-ray radiation using Auger electron-ion coincidence spectroscopy and related methods. Thanks to the impressive technological improvements of the synchrotron facility, X-ray absorption was investigated in resonant Raman or Auger scattering that is not limited by lifetime broadening of the core-excited states. Well resolved X-ray absorption profiles were achieved revealing novel features of the molecular excitations.

Conclusions

The scientific interests at the IMS are wide spread and have an important impact on the scientific community. First rank research is carried out at the frontiers of molecular science and the key areas of fundamental research in molecular science are well represented including topics relevant for potential applications. The expertise of the scientists is on the highest level. The scientific output as confirmed by the numerous publications in the leading international journals is significant, in spite of the limitations imposed on the institute by a moderate, if not unsatisfactory financial basis.

One general finding is that the research groups in the institute are amazingly small. Although the limited size may allow for a larger number of groups with different activities, it is felt that the size limits the efficiency of the scientific work. In fact, by comparing with other places in Europe and North America the small number of graduate students and post-docs is evident. Obviously the IMS is fully aware of this problem and has developed special programs for more graduate students and young researchers, e.g. by intensifying the collaboration with universities. It is strongly recommended to continue along these lines. In addition, increased funds are obviously required to attract more young researchers from Japan and abroad and to offer an attractive individual support.

Garching, April 30, 2009

A. Laubereau

日本国岡崎市 分子科学研究所

中村宏樹 所長 殿

分子科学研究所訪問（2009年3月2 - 3日）にかかる報告書

私は3月2 - 3日に分子科学研究所を訪問し、まず中村所長による概要説明から始まり、続いて4研究領域の主な研究者による口頭の説明を受けました。所長の説明により、日本における自然科学研究機構、また分子研の、大学共同利用機関としての重要な役割に関する大変興味深い知識が得られました。即ち、先進的な研究課題を支援すること、国内の協力研究制度により学術共同研究を振興すること、及び日本全国の第一線の研究者たちに大型施設の共同利用の機会を与えることです。続いて分子研の組織についての詳細、即ち4研究領域と、技術課を含めて7つの研究施設からなる構成が紹介されました。最近の組織再編が、研究所内のグループ間の協力関係を改善したことは明らかでしょう。中村教授は、分子研が現在、いくつかの特定研究プログラムによる広範な研究目標をもっていることを示され、また研究所のいくつかの顕著な成果について概要を説明されました。

大学共同利用機関の概念は、分子研が体現しているように、大変説得力のあるものであり、第一級の研究を強力な共同研究により推進するしくみになっています。それは例えば、920 MHz NMR装置のような高価な機器利用を促進することで、限られた資産の効率的な利用を最適化することに寄与しています。分子研はまた、国際的な研究プログラムをうまく取り纏めて運営しています。大学とのリンクを改善することで、分子研内の個々の研究グループの小ささを補うことが可能と思われれます。この点は将来に向けて更なる検討が必要でしょう。

研究内容の概要は、下記の研究領域にかかる報告として説明を受けました：

光分子科学，岡本裕巳教授

物質分子科学，横山利彦教授，

生命錯体分子科学，宇理須恒雄教授，及び

極端紫外光研究施設（UVSOR），加藤政博教授

訪問時間が限られていたため、全ての研究グループと接触することはできませんでした。私のこの報告は上記の研究領域に絞っており、分子研の研究活動の全ての範囲を含むものではありません。私は実験科学者であるため、理論・計算分子科学研究領域の訪問は短時間に留めましたし、また有益なコメントをする立場にもありませんが、全体的には極めて良い印象を持っています。全部で12名のグループリーダーと面談し、加えて光分子科学研究領域の4名の若い研究者による短い発表会に参加しました。インフォーマルなグループリーダーとの面談と上記発表会では、第一線の研究成果と現在の研究活動に関する詳細を知ることができました。一方で、議論を通じて、スペース、予算、マンパワーに関して見込まれる限界も見えてきました。UVSORのいくつかの研究室では前回の訪問時から非常に大きな進展があったことがわかりました。自作、或いは購入した装置の品質に関して、並外れた専門的レベルにあることが、議論を通して明らかになりました。

光分子科学研究領域

この研究領域は4つの部門で組織されており、その内3部門を訪問しました。

光分子科学第一研究部門の岡本教授率いるグループでは、ナノ構造物質の新奇な光学的性質と光制御に関して、空間的、分光学的、時間的な分解能を実現する、フェムト秒レーザーパルスを備えた走査型近接場分光を用いて研究しています。実験手法は、標準的な近接場顕微鏡のほか、1光子及び2光子誘起発光、表面増強ラマン散乱、超高速透過測定を含んでおり、これによりナノプレート、ナノロッドその他の構造体に対して、50 nmの空間分解能、100 fsの時間分解能の最先端のイメージングを可能としています。井村助教の協力により、様々な金属ナノ微粒子や分子集合体の局所的・時間的・分光学的な性質に関する独創的な研究がなされ、空間コヒーレンスや表面励起に関する重要な情報をもたらし、メソスコピックな金属のプラズモン共鳴の波動関数を決定することも可能としています。それは例えば化学合成された金及び銀ナノロッドや金ナノプレートについてなされています。近接場透過イメージが縦モードプラズモン共鳴について得られ、計算された局所状態密度と非常に良く一致しています。時間分解ポンプ-プローブ測定では、近接場パルス励起で金ナノロッドの電子温度が上昇してスペクトルシフトを誘起することを明らかにしています。これらの仕事は分子ワイヤーにおける光学励起の縦伝播の観測にも拡張されています。これらの結果は秀逸なもので、将来の量子コンピューターの研究分野における量子光学ワイヤの開発やプラズモン集積系の発展の基礎を与えるものです。

光分子科学第一研究部門の大島教授のグループでは、超高速レーザーによる分子の量子状態操作法の開発を行っています。現在の研究活動は、核の動き、即ち回転と低波数振動の波束を中心に行っています。この研究では、共鳴多光子イオン化を用いて、超音速噴流中の分子に対する、非断熱的な分子配向、或いはそれに対応する回転分布の生成を実現しています。長谷川助教の協力で、この方法はごく最近、断熱的に0.5 Kまで冷却したベンゼンに適用されました。810 nm、150 fsのレーザーパルスを強度 2.2 TW/cm^2 で用いることで、 $J=10$ までの非共鳴回転励起を可能としました。ベンゼンの回転状態の位相に関する情報を得ることについても、時間的に遅延したレーザーパルスを与えた結果起こる状態分布の変調を測定することにより、成功しています。数値シミュレーションの結果との比較により、回転波束の再構成が可能となっています。この手法の非断熱的振動励起への拡張は現在進行中です。この新しい研究法は、化学反応動力学の完全状態選択的な計測に向けた地ならしとなるものです。

光分子科学第二研究部門では、新しい量子技術、例えば光化学反応経路の制御等で必要条件となる高精度コヒーレント制御が研究されています。大森賢治教授のグループでは新しい波束干渉法を開発し、超音速噴流中の小分子に対して、位相制御された振動波束の干渉の研究で注目すべき結果が得られています。再現性の高いフェムト秒レーザーパルスと特製の超安定マイケルソン干渉計を組み合わせ、アト秒の時間分解能を実現し、それにより二つの励起パルスの位相まで制御された線形な重ね合わせを作り出しています。パルス対の明確な位相関係を分子の振電励起に転写し、量子干渉を発生させています。ヨウ素に適用した例では、分子集団の波動関数の振幅と位相双方の情報が得られています。最近大森教授と香月助教の協力で、プローブパルスを加えることで、量子干渉に関する空間-時間イメージを得ることに成功しています。 I_2 の振電波束運動の計測について、ピコメートル、フェムト秒の分解能が示されています。この新しい方法で得られた干渉パターンは「量子カーペット」と命名されました。シミュレーションを援用することで、分子の電子励起状態のポテンシャル曲線を再構築することも可能です。このグループの仕事は、例えば量子計算やその他の量子技術への応用の可能性において、とりわけ重要なものと言えます。

光分子化学第三研究部門では、強レーザー場における分子の動的挙動が菱川准教授の主要な研究で、サブ 10 fs、 10^{15} W/cm² 領域のレーザーパルス下での原子分子の研究を行っています。このような極限的条件下では、外部からのレーザー場は、分子内部のクーロン場と同程度となり、クーロン爆発等の新たな現象を惹き起します。励起場中では多価イオンが生成してフラグメントに分裂しますが、その運動量を解析して分子の初期構造を逆追跡することが可能です。この大変興味深い研究で、光と分子の相互作用に関する理解が深まるといえるでしょう。伏谷助教との協力により開発されたこの新奇な方法はポンプ - プロブクーロン爆発イメージング法と命名されました。この方法で、アセチレンに関して以下のことを示しています。重水素化アセチレンカチオン $C_2D_2^{2+}$ を第一のレーザーパルスで生成し、高強度の第二のレーザーパルス (9 fs, 800 nm) の照射によって 2 価カチオンは $C_2D_2^{3+}$ に転換されます。その結果起こるクーロン爆発をモニターし、重水素原子が超高速で移動するところを可視化することに成功しました。この方法はさらに三重イオンコインシデンス運動量イメージング法に拡張され、強レーザー場中のアセチレン - ピニリデン異性化反応に適用して、ここでも水素移動が起こることを突き止めました。出発分子種から 9 fs パルスによって生成するフラグメントの運動量は、より長い 35 fs のパルスによって生成するピニリデンの運動量とは大きく異なる分布を示す測定結果が得られています。水素移動は様々な化学過程において重要な役割を担っており、これを深く理解することは、化学反応制御の一つの糸口となることでしょう。研究グループは軟 X 線パルスを化学過程の研究に適用することも行っています。例えば 41 eV での臭素の解離反応の検出などがあります。ネオン中の高次高調波発生によるアト秒パルス発生は現在進行中で、これらの研究のさらに高い時間分解能の実現手段を与えるものになるでしょう。

光分子化学第三研究部門の他のグループでは、極めて洗練された放射光を用いた内殻分光を、分子性固体や DNA について行っています。見附准教授のグループによるフラーレンの光イオン化・解離ダイナミクスの研究は、そうした分野の一つのハイライトです。また放射光とレーザーを組み合わせたポンプ - プロブや二重共鳴の実験で、かなりの進展が実現しています。

物質分子科学研究領域

西教授が率いるこの研究領域では、新分子物質系や高次分子集合体の分野で顕著な成果が得られています。容易な生成法の開発の他、分子系の電子特性、光学特性、磁気特性や触媒活性、化学的特性が調べられています。例えば、ガスセンサーに用いる金属 - 炭素ナノシステムが挙げられます。この路線で、導電率変化によって室温で O_2 センサーに用いられる Cu_2C_2 ナノケーブルが開発されています。細いナノワイヤやナノケーブルを自己組織化する技術開発は注目すべきものです。さらに直径を制御したナノ微粒子列、触媒活性の期待される銀 - 炭素ナノスポンジ構造、気体吸蔵に応用可能な中空多角形グラファイト構造等の作成法でも見るべき成果が得られています。当研究領域では、カーボンに内包したナノ微粒子の合成、構造・磁氣的性質の研究においても、大きな成功をおさめています。広範な工業的応用が考えられるという視点からも、これらの仕事に対して、研究領域の資源配分を改善して重点化することが求められます。

横山教授のグループでは、磁性薄膜の研究がおこなわれています。金属薄膜の表面を化学的に修飾して、例えば吸着誘起のスピン転移や形状変化を起こし、磁氣的性質を新しい方式を含む様々な分光手法により決定しています。従来法より著しく改善された X 線磁気円二色性 (MCD) 計測系が UVSOR-II 光源のビームラインに設置され、これには 7 T までの高磁場超電導磁石と液体ヘリウムクライオスタットも装備されています。当研究グループでは最近、ニッ

ケル薄膜の光電子放出 MCD が、仕事関数の閾値近傍の光子エネルギーで異常に増強することを発見しています。これはフェムト秒レーザーパルスを用いることを可能とし、放射光源と比較して高い時間分解能をもたらすこととなります。この新しい紫外 MCD 光電子顕微鏡 (PEEM) を用いた最初の成果は、Cu(001) 面上にエピタキシャル成長した Ni 層に対して得られ、200 fs の時間分解能が実現されています。この方法は 2 光子誘起 MCD にも拡張されました。Cu(001) 面上の Co の軌道磁気モーメントの著しい増大が、当グループの先駆的な仕事で示されました。自己組織的に生成した Co ナノロッドの磁氣的性質も同じ装置で研究されています。低次元磁石は、将来の記憶媒体への応用で興味深い可能性を有しています。

他にも、当研究領域では、有機電子デバイスで重要な研究がなされています。分子スケールナノサイエンスセンターでは、平本教授が有機半導体の生成、ナノ構造デザイン、長期耐久性に関する研究を行っています。有機太陽電池として世界最高効率で、フラレンとフタロシアニンを同時堆積した 1 μm の i 層をもつ p-i-n 構造によって得られています。分子研の研究プロジェクトの内、応用への高いポテンシャルを持つ一連の研究の中で今一つのハイライトとして、高い電子移動度をもつ n 型分子性半導体である完全フッ素化オリゴフルオレン分子、人工分子による光合成系モデルが挙げられます。

生命錯体分子科学研究領域

生体系の制御機構を理解する上で、金属タンパクの役割は重大なものです。生体分子機能研究部門の青野教授と共同研究者は、分子代謝や信号伝達で重要な新しい機能をもつ蛋白質について研究しています。特に O_2 、NO や CO 等の気体二原子分子のセンサータンパク質には興味を持たれます。金属タンパク質の構造と機能の関係について、X 線分光による構造解析等の手法をも含む様々な化学的方法によって研究がされています。その重要な進展のあった例として、*Bacillus subtilis* の情報伝達タンパク分子 HemAT についての優れた成果があります。ヘムによる O_2 に選択的なセンシングの機構について、共鳴ラマン分光を用いた水素結合の研究により提案がなされ、他の細菌との比較が行われています。 O_2 結合型でよく似た水素結合パターンを有する三つのコンフォマーが見出されています。紫外領域の実験によって、 O_2 、CO と NO のヘムタンパクへの結合におけるコンフォメーション変化の差を認めることができます。これらの発見はヘムに結合した O_2 の水素結合が構造変化を惹き起し、それがタンパク部位に伝わることを示唆するものです。

桑島教授のグループでは、*in vitro* のタンパク質フォールディングのメカニズムと分子シャペロンの機能に関して、秀でた研究を行っています。球状タンパクのモデル系と、生細胞中のタンパク質フォールディングを媒介することで知られている分子シャペロンの研究がなされています。様々な分光法や生物物理学的手法、例えば円二色性、蛍光分光、NMR、X 線小角散乱等の実験手段で情報が得られ、またそれらを分子動力学シミュレーションによってサポートしています。イヌ乳リゾチームのフォールディング・アンフォールディングの速度論的研究が詳細になされ、 α -ラクトアルブミンに関する以前の結果と比較して、これら二つのタンパク質のフォールディング経路の差を明らかにしています。アンフォールディングのシミュレーションを、真正及び遺伝子組換えのヤギ α -ラクトアルブミンについて行っています。それらは構造が類似しているにもかかわらず、アンフォールディングの速度の計算結果に差が見出され、一方で共通な遷移状態の構造を示している、この結果は実験結果との一致を見えています。

ごく最近では、GroEL-GroES 複合体の、生理学的条件下の溶液中の構造について、異なる温度、異なるヌクレオチ

ド条件で調べています。X線小角散乱パターンを、知られている結晶構造データをもとに計算した結果と比較しています。この研究の結果は、生体分子の速度論的挙動を理解するために不可欠のものです。

生体分子機能研究部門の加藤教授のグループでは、生体高分子とその複合体のミクロな構造とダイナミクスに関する大変興味深い解析が行われています。生体分子機械や免疫システムの糖タンパクに関する素晴らしい研究も行われており、それらでは同位体法を援用した核磁気共鳴分光法と 920 MHz NMR の新装置が、本質的な基盤となっています。NMR システムの秀逸な分光分解能は溶液中の無秩序構造タンパク質について示され、コンフォメーション、相互作用、修飾に関するより詳細な情報に到達することに成功しました。古細菌プレフォルディン、グループ II シャペロニン、およびそれらの複合体に対しては、以前の X 線結晶解析では不明であった構造部位を中心に、¹³C NMR 解析が行われました。その結果、あるタンパク質サブユニットの末端部位が、緩衝液中の複合体においても内部運動を維持していることが明らかとなっています。

極端紫外光研究施設 (UVSOR)

分子研の一つの重要な機能として、外部の研究者に対して、先端的な装置、特に放射光施設のような設備を開放することがあります。UVSOR では一般利用者のための 9 本のビームラインに加えて内部のグループのための 4 本のラインがあります。小杉教授の指揮の下、加藤政博教授との協力により、UVSOR-II 蓄積リングと電子注入装置には、より高い安定性とビームフラックスの実現に向けて、注目すべき改善と重要な進展がありました。4 台のアンジュレーターは VUV から軟 X 線における高輝度な放射を可能としています。自由電子レーザーも設置され、パルス幅 10 ps、出力 1 W が出ており、短波長側の限界は 200 nm 以下まで来ています。さらに、同期したフェムト秒 Ti:Sapphire レーザーを用いることで、強力な THz パルスも UVSOR-II で得られるようになってきました。蓄積リング中の電子パンチに、導入されたレーザー光との相互作用により電子密度のミクロ構造を生成し、それによって 0.3 THz 付近のブロードなコヒーレント放射が得られています。レーザーパルスを振幅変調することで、均一磁場中での準単色の THz 光の発生が初めて示されました。

レーザー波長の周期をもった電子 - レーザー相互作用による、アンジュレーター中での電子密度変調は、レーザー光のコヒーレント高調波発生を可能とします。チタンサファイアレーザーの第 3 高調波の発生が現に達成され、コヒーレント高調波の光学的性質が調べられています。

UVSOR-II の成果は広い範囲の研究分野への応用に広がっています。例えば原子分子科学、生物関連研究や物質科学等です。施設の他の部門では数多くの高いレベルの研究が行われており、詳細な説明はこの報告の範囲を超えています。ここでは一つの例として繁政准教授のグループの内殻光励起・光イオン化に関する興味深い研究を挙げるにとどめます。内殻励起原子分子の電子構造や緩和ダイナミクスが、軟 X 線放射光を用いたオージェ電子 - イオンコインシデンス分光法、及び関連した方法によって研究されています。シンクロトロン施設の特筆すべき技術的進展のおかげで、X 線吸収が、内殻励起状態の寿命幅に制限されないオージェ散乱過程や共鳴ラマン過程を用いて研究できるようになっています。よく分解された X 線吸収プロファイルが得られ、分子励起の新奇な特性が明らかにされてきています。

おわりに

分子研における科学的な興味の対象は広範にわたっており、サイエンスのコミュニティに対して大きなインパクトを与えています。分子科学のフロンティアの研究領域で第一線の研究が行われており、それらは分子科学の基礎研究のキーとなる分野に相当し、応用に繋がりうるトピックスも含まれています。研究者の専門的技量は最高レベルです。予算的な裏付けが、不満足ではないにしろ、抑制され限られた状況を強いられているにも拘らず、自然科学における成果は意義深い重要なもので、それは一流の国際誌に多数の論文が掲載されていることから明らかです。

一般的なことで一つ気付いたのは、研究所の研究グループのサイズが驚くほど小さいことです。大きさを抑制することによって異なる研究活動を行うグループ数を多くすることはできますが、小さな研究室のサイズは科学研究の効率を制限してしまうと思われます。実際、ヨーロッパや北米の他の研究機関と比較して、大学院生や博士研究員の数の少なさは明らかです。分子研では勿論このことを十分承知しており、より多くの大学院生と若手研究者を獲得するための特別プログラム、例えば大学との協力関係を強くすること等を進めています。このような試みを継続することを強くお勧めする次第です。付け加えて、多くの日本国内及び海外の若手研究者を引きつけ、魅力ある個人に対する支援を提供するために、予算の増額が必須です。

Garching にて、2009年4月30日

A. Laubereau

7-2 国立大学法人評価委員会による評価結果

平成 16 年度から国立大学，大学共同利用機関は法人化され，それぞれ国立大学法人（1 大学 1 法人），大学共同利用機関法人（16 機関 4 法人）になったことによって，6 年間の教育研究等の質の向上と業務運営や財務内容等の改善等についての中期目標に対する中期計画を立て，それに対して，年度開始直前に年度計画を提出し，年度終了後に年度計画に対する業務の実績に関する報告書と根拠資料を提出し，文部科学省に置かれた大学評価委員会によって評価を受けるという作業が毎年，繰り返されるようになった。その際の評価対象は業務運営や財務内容等の改善等の部分であって，教育研究等の質の向上の部分は参考程度に扱われるだけであった。その具体的な評価は 4 年間を経たところでまとめて行われることになっており，平成 16 年度～平成 19 年度の 4 年間の研究成果をまとめる作業が平成 20 年度に行われた。と同時に，毎年行っている業務運営や財務内容等の改善等の評価も 4 年間分をまとめることになり，両方を併せて第 1 期中期目標期間としての評価と見なされることになった。教育研究等の質の向上に関しては，4 年間での「中期目標の達成状況報告書」，「学部・研究科等の現況調査表」，その根拠として数々の統計データ資料や発表論文に基づく業績説明資料を作成し，大学評価委員会に提出した。「学部・研究科等の現況調査表」は機関別なので，分子科学研究所が評価単位である。「教育」部分は総合研究大学院大学物理科学研究科として評価を受けるため，「研究」部分のみ作成・提出した。なお，教育研究等の質の向上の評価は大学評価委員会の依頼を受けて独立行政法人・大学評価学位授与機構が具体的な評価作業を行うことが決まっていた。以下では，「達成状況報告書」とその根拠資料に基づいて行われた 4 年間の業務の実績に関する評価結果（関係するところのみ抜粋）と「現況調査表」とその根拠資料に基づいて行われた 4 年間の分子科学研究所の研究活動に対する現況分析結果を示す。

7-2-1 大学共同利用機関法人自然科学研究機構の中期目標期間に係る業務の実績に関する評価結果（関係するところのみ抜粋）

平成 21 年 3 月

国立大学法人評価委員会

1 全体評価

自然科学研究機構（以下「機構」という。）は，我が国の天文学，物質科学，エネルギー科学，生命科学その他の自然科学分野の中核的研究拠点としての 5 つの大学共同利用機関（以下「機関」という。）の研究活動に加え，分野間連携による学際的研究拠点及び新分野形成の国際的中核拠点としての活動を展開するために，欧米，アジア諸国などとの連携を進め，自然科学の長期的発展を見通した国際共同研究組織の主体となることを目指し，研究活動を行っている。

中期目標期間の業務実績の状況について，機構の中期目標・中期計画に照らした目標の達成状況は，「研究に関する目標」の項目で非常に優れており，それ以外の項目で良好又はおおむね良好である。また，独立行政法人大学評価・学位授与機構が行った各機関の現況分析の結果，研究水準については，すべての項目で期待される水準を大きく上回る，又は，上回るとの結果になっている。業務実績のうち，主な特記事項は以下のとおりである。

研究については，各機関において，多様な望遠鏡による天体観測，制御核融合の実現に向けての実験，オートファジー等生命高次機能の解明，脳神経系を中心とする生体の機能・病態生理の研究，分子集合体の構造・機能・反応の研究等で，国際的に評価の高い業績を上げ，被引用度の高い論文を数多く発表するとともに，プロジェクト推進のための体制強化や萌芽的研究の発掘と育成も行っていることなどは，優れている。共同利用等については，アルマ計画の推進，

核融合科学における双方向型共同研究の実施や共同利用者のための学術情報ネットワークを用いた遠隔実験の環境整備等、各機関において、取組を一層推進している。

教育については、最先端の研究環境を活用した総合研究大学院大学の大学院生の教育への協力やアジア地域の大学院生を対象とするスクールの実施等に加え、生理学分野等の大規模で高レベルの実習コースにおける若手研究者の養成に貢献している。社会連携・国際交流等については、機構として、一般市民の関心の高いテーマを取り上げて「自然科学研究機構シンポジウム」を開催するなど、社会における科学への理解向上に貢献している。

業務運営については、岡崎地区に事業所内保育所を設置し、仕事と育児が両立できる職場環境を提供するなど進んだ取組を行っている一方で、職員の勤務評価制度の導入については、適切な制度の在り方の検討にとどまっており、中期目標・中期計画の達成に向け、着実な実施が求められる。

財務内容については、研究成果等の広報普及や外部資金の獲得に積極的に努めた結果、民間企業との共同研究や寄附金の受入額等が増加している。また、様々な工夫による経費削減の効果が出てきているが、今後は、教育研究活動の質を維持・向上する上で必要な経費を勘案し、可能な範囲での数値目標の設定を検討することが期待される。機構発足後4年が経過し、異なる領域間の様々な連携の試みを推進しているが、その一方で、機構としての一体的・総合的な取組が十分見えてこないとの印象を受ける。今後、中期目標・中期計画の達成や第二期中期目標期間に向け、機構長の力強いリーダーシップの下、各機関の独自性・独創性を生かしつつも、機構を形成していることの組織的・学術的なメリットがより具体的な形として見えてくるよう、分野間連携の更なる推進や業務運営の一層の改善・効率化を進めることが期待される。

2 項目別評価

1. 教育研究等の質の向上

(1) 研究に関する目標

1. 評価結果及び判断理由

【評価結果】中期目標の達成状況が非常に優れている

2. 各中期目標の達成状況

(1) 研究水準及び研究の成果等に関する目標

[評価結果] 中期目標の達成状況が非常に優れている

(2) 研究実施体制等の整備に関する目標

[評価結果] 中期目標の達成状況が良好である

3. 優れた点、改善を要する点、特色ある点

(優れた点)

中期目標で「宇宙、物質、エネルギー、生命等に関わる自然科学諸分野の学術研究を積極的に推進する」としていることについて、各機関において、多様な望遠鏡による天体観測、制御核融合の実現に向けての実験、オートファジー等生命高次機能の解明、脳神経系を中心とする生体の機能・病態生理の研究、分子集合体の構造・機能・反応の研究等で、国際的に評価の高い業績を上げ、被引用度の高い論文を数多く発表していることは、優れていると判断される。

(II) 共同利用等に関する目標

1. 評価結果及び判断理由

【評価結果】中期目標の達成状況が良好である

2. 各中期目標の達成状況

(1) 共同利用等の内容・水準に関する目標

[評価結果] 中期目標の達成状況が良好である

(2) 共同利用等の実施体制等に関する目標

[評価結果] 中期目標の達成状況が良好である

3. 優れた点, 改善を要する点, 特色ある点

(優れた点)

中期目標で「各専門分野に関して研究活動の充実を図るとともに、国内外の研究者との共同利用・共同研究を一層推進する」としていることについて、国立天文台において、国際協力を積極的に参加して観測時間を共同利用に供し、核融合科学研究所において、学術情報ネットワーク(SINET3)を用いて共同利用者が遠隔実験を行える環境を整備し、基礎生物学研究所において、マウス・メダカ等の形質転換生物実験施設を整備し、生理学研究所において、生理学実験に必要な動物資源の供給体制を整備し、分子科学研究所において、共同利用研究のための実験装置の開発と提供を進めるなど、各機関における共同利用・共同研究の一層の推進に努めていることは、優れていると判断される。

中期目標で「大学共同利用機関として適切な共同利用施設を設置し、研究資源の提供を行い、所内外、国内外の研究者の共同利用に広く供する」としていることについて、国立天文台においてアルマ計画を推進し、核融合科学研究所において、双方向型共同研究を創設し、基礎生物学研究所において、モデル生物の普及に努め、生理学研究所において、20件以上の研究会を開催し、分子科学研究所において、「全国国立大学化学系研究設備有効活用ネットワーク」を取りまとめるなど、これらの事業によって共同利用体制を強化したことは、優れていると判断される。

(III) 教育に関する目標

1. 評価結果及び判断理由

【評価結果】中期目標の達成状況が良好である

2. 各中期目標の達成状況

(1) 大学院への教育協力に関する目標

[評価結果] 中期目標の達成状況が良好である

(2) 人材養成に関する目標

[評価結果] 中期目標の達成状況が良好である

3. 優れた点, 改善を要する点, 特色ある点

(優れた点)

中期目標で「大学における大学院教育に携わり、大学院生に対し、本機構内研究者による高度で先端的な研究指導」を行うとしていることについて、当該機構の優れた研究者が、広く大学院生を受け入れ、最先端の研究環境の下で教育を行い優秀な研究者を育成していることは、優れていると判断される。

(特色ある点)

中期目標で「大学における大学院教育に携わり、大学院生に対し、本機構内研究者による高度で先端的な研究指導」を行うとしていることについて、核融合科学研究所や分子科学研究所のアジア冬の学校等において、アジア地域の大学院生を対象とするスクールを実施したことは、特色ある取組であると判断される。

(IV) その他の目標

(1) 社会との連携、国際交流等に関する目標

1. 評価結果及び判断理由

【評価結果】中期目標の達成状況がおおむね良好である

2. 各中期目標の達成状況

(1) 社会との連携、国際交流等に関する目標

[評価結果] 中期目標の達成状況がおおむね良好である

II. 業務運営・財務内容等の状況

(1) 業務運営の改善及び効率化に関する目標

【評定】中期目標の達成状況がおおむね良好である

平成 16 ~ 19 年度の実績のうち、下記の事項が注目される。

機構に外部有識者からなる「組織運営に関する懇談会」や「自然科学懇話会」を設置し、学術のあり方等についての外部有識者の意見も踏まえ、運営の改善・充実を図っている。

機構に研究連携担当の理事を委員長とする研究連携委員会及び研究連携室を設置して、各機関の特色を活かしながら分野を超えての連携を企画・推進するための体制を整備し、学際的・国際的研究拠点形成に向けた研究プロジェクトの実施や、分野間連携による自然科学研究機構シンポジウムの開催など、分野間連携事業を推進した。

分子科学研究所において、研究教育職員の内部昇格を禁止とする制度を実施したのを始め、各機関において、当該分野に適した任期制を導入している。

給与計算業務、共済組合業務、支払業務等の各機関に共通する業務を機構事務局に一元化・集約化するなどして、事務の効率化・合理化を図っている。

子育て世代の職員に対し、仕事と育児が両立できる職場環境を提供するため、財団法人 21 世紀職業財団から助成金を受けて岡崎地区に事業所内保育所を設置し、平成 18 年 7 月から運用を開始している。

平成 16 ~ 19 年度の実績のうち、下記の事項に課題がある。

【法人による自己評価と評価委員会の評価が異なる事項】

中期計画【15】「技術職員及び事務職員について適切な勤務評価制度を導入する」(実績報告書 27 頁)については、制度の在り方の検討を行っているものの、平成 21 年度に試行を予定するにとどまっております、中期計画を十分には実施していないものと認められる。

(2) 財務内容の改善に関する目標

【評定】中期目標の達成状況が良好である

平成16～19年度の実績のうち、下記の事項が注目される。

「資金管理方針」を策定し、メインバンクや専門家の意見を踏まえ元本の安全性を確保した上で、短期的・長期的な資金の運用を行っており、平成19年度は、前年度に比べて1,900万円の増収を得た。

記者発表や大学見本市「イノベーション・ジャパン」等への参加により、研究成果等の広報普及に積極的に努めるとともに、外部資金の獲得に努めた結果、民間企業との共同研究数や（平成16年度36件4,882万円 平成19年度54件9,858万円）、寄附金収入（平成16年度1億8,360万円 平成19年度2億2,815万円）が大幅に増加している。

業務効率化や内部牽制の確保の観点から、機構内の全ての支払い業務を機構事務局財務課に一元化している。さらに、平成19年度からメインバンクとのオンライン支払いシステムの導入により、支払いの安全性を確保しつつ、業務の効率化を図っている。

施設等の新たな整備手法として、地方公共団体や財団との連携を重視し、国立天文台においては、石垣島天文台の整備に際し、石垣市がインフラ及び道路整備を行い、岡崎3機関においては、愛知県費用による急傾斜地のような壁工事、21世紀職業財団からの助成金による事業所内保育所の設置・運営を行っている。

中期計画における総人件費改革を踏まえた人件費削減目標の達成に向けて、着実に人件費削減が行われている。今後とも、中期目標・中期計画の達成に向け、教育研究の質の確保に配慮しつつ、人件費削減の取組を行うことが期待される。

(3) 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

【評定】中期目標の達成状況が良好である

平成16～19年度の実績のうち、下記の事項が注目される。

機構に評価に関するタスクフォースを設置し、自己点検及び外部評価の在り方について検討を行うとともに、各機関で実施した自己点検及び外部評価の結果を踏まえ、研究組織の改革を推進している。

機構に広報に関するタスクフォースを設置し、機構の活動を社会に発信するための積極的な活動を行っている。具体的には、学術及び基礎科学の重要性を広く一般社会に訴えとともに、大学共同利用機関の役割について理解を深めるため、和英併記のリーフレット「学術研究とは？」と「大学共同利用機関って何？」を作成・配布したほか、一般市民を対象とした自然科学研究機構シンポジウムを開催した。今後は、機構の活動を広く内外にアピールするという観点から、機構として、国内における広報活動はもとより、国際的な広報活動を充実することが期待される。

(4) その他の業務運営に関する重要目標

【評定】中期目標の達成状況が良好である

平成16～19年度の実績のうち、下記の事項が注目される。

平成17年度に策定した「施設マネジメント・ポリシー」に基づき、施設実態調査等を実施した上で、機構におけるキャンパス年次計画を作成し、各機関の研究室スペース等の使用面積見直しを行い、取組状況を公表するとともに、耐震補強年次計画に基づく耐震改修を進めている。

「環境配慮の方針」や「温室効果ガス排出抑制等のための実施計画」等を策定し、省エネルギーに関する全機構職員の意識啓発を図っており、平成 19 年度末において、機構全体で温室効果ガス排出量を平成 17 年度末より 6.2% 削減した。また、国立天文台の研究棟の改修工事における屋上緑化及び雨水の浸水処理、核融合科学研究所及び岡崎地区における苗木の植樹等の取組を行った。

機構として「防災基本計画」、「防災基本規程」、「防火管理規程」を策定するとともに、安全マニュアル、防火・防災マニュアル等を和文・英文により整備・充実し、機構長のリーダーシップにより、危機管理・災害防止対策及び災害発生時における職員の対応法を確立している。

研究費の不正使用や研究活動上の不正行為の防止、抑制等の観点から、機構に「競争的資金等の不正使用防止委員会」、「不正行為防止委員会」を設置するとともに「競争的資金等取扱規程」等を制定している。

7-2-2 学部・研究科等の研究に関する現況分析結果：

自然科学研究機構分子科学研究所

1. 研究水準（分析項目ごとの水準及び判断理由）

1. 研究活動の状況

期待される水準を上回る

[判断理由]

「研究活動の実施状況」のうち、研究の実施状況については、分子科学研究所の研究者がカバーする研究領域は広範囲であり、また、優れた研究機関として分子科学研究所は知られ（平成 19 年度の専任教員数は 78 人）、平成 16 年から平成 19 年間に原著論文数が 1,444 件、総説などが 149 件である。平成 18 年 9 月から平成 19 年 8 月の 1 年間の原著論文数は 267 件で、総説などは 44 件であり、教員一名当たり 3.4 件の原著論文数である。原著論文の機関及び分野別平均引用数は、平成 8 年から平成 18 年の間において、分子科学研究所が担当している化学分野で自然科学研究機構が日本第 1 位である。研究資金の獲得状況については、4 年間で約 40 億（受託研究経費約 24 億、民間等共同研究経費約 1 億、科学研究費補助金約 15 億）である。平成 19 年度科学研究補助金の本務教員当たりの比率は約 96%（約 400 万円）であることなどは優れた成果であることから、期待される水準を上回ると判断される。

「共同利用・共同研究の実施状況」のうち、研究の実施状況については、大学共同利用研究機関として活発な機能を果たしており、共同利用研究はこの 4 年間に、課題研究として 7 件、協力研究として 361 件、研究会として 46 件、極端紫外光研究施設（UVSOR）利用として 514 件、施設利用（研究施設に設置された機器の利用）として 777 件の実績である。文部科学省「ナノテクノロジー総合支援」では 4 年間に協力研究 232 件、施設利用 172 件の実績である。計算機利用では、共同利用のほか「超高速コンピュータ網形成」、「最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトの拠点として活動した。光分子科学では、理化学研究所と連携融合事業を進めレーザー光科学の進展を遂行した。国際共同研究では、平成 16 年度から「分子科学研究所国際共同研究」を開始し、4 年間に 42 課題を実施した。平成 18 年度から日本学術振興会の「アジア研究教育拠点事業」の拠点として「物質・光・理論分子科学のフロンティア」事業を進めているほか、多彩な二国間共同研究、二国間シンポジウム、研究交流を実施しているなど、極めて活発な共同利用・共同研究を展開していることなどは優れた成果であることから、期待される水準を上回ると判断される。

以上の点について、分子科学研究所の目的・特徴を踏まえつつ総合的に勘案した結果、研究活動の状況は、分子科学研究所が想定している関係者の「期待される水準を上回る」と判断される。

2. 研究成果の状況

期待される水準を上回る

[判断理由]

「研究成果の状況」について、学術面では、理論・計算分子科学における大型計算機使用による大規模分子系の理論解析や大規模計算による物質機能・構造の研究、光分子科学におけるレーザー光源開発や多重極限下での赤外反射分光開発、また、UVSORでの小型放射光源開発及びコヒーレント分子制御、生命・錯体分子科学における1光子2電子還元反応系分子性触媒の開発やたんぱく分子の構造生物学的研究における時間分解分光装置開発等に顕著な成果が生まれている。これらの多彩なかつ広範囲の研究成果により、これまでに日本化学会の学会賞1件、学術賞2件、進歩賞2件、化学技術有功賞3件のほか、文部科学大臣賞4件、学術振興会賞・学士院学術奨励賞1件等多くの受賞・表彰がある。また、多数の研究者が国際会議に招待されているなど、世界トップクラスの研究成果、最先端の分子科学装置の開発と装備、世界クラスの研究者群により卓越した共同研究機関が形成されている。なお、提出された研究業績説明書のほとんどは優れた業績と認められた。社会、経済、文化面では、基礎科学の側面から材料・環境・医学等に波及効果の大きな成果を上げている。特に、920 MHz NMRによるたんぱく分子の構造解明、環境調和型社会への分子性触媒の開発、生体内分子のダイナミクス研究等は社会的に有用で高度な研究成果であることなどは、優れた成果である。

以上の点について、分子科学研究所の目的・特徴を踏まえつつ総合的に勘案した結果、研究成果の状況は、分子科学研究所が想定している関係者の「期待される水準を上回る」と判断される。

II. 質の向上度

1. 質の向上度

大きく改善、向上している、または、高い質（水準）を維持している

当該組織から示された事例は7件であり、そのすべてが、「大きく改善、向上している、または、高い質（水準）を維持している」と判断された。

8 . 研究施設の現状と将来計画

日本の学術研究行政は依然として憂うべき状況にあると考えられる。研究活動等の評価は当然行われなければならないが、現在の状況は、「評価疲れ」と言う言葉に表されている通り行き過ぎた状態であり、今後の改善が強く望まれる。

昨年度報告したとおり、平成 19 年度から分子研の組織は大幅に改編され、研究系と施設を大きく 4 研究領域にまとめた。それぞれの領域内の連携が深まったものと思っている。また、各施設は、大学共同利用機関の施設として分野コミュニティに対して極めて大事な役割を担っており、そのあり方について常に議論がなされている。各施設の現状、改善の努力、及び、将来計画の議論等が本節にまとめられている。

詳細については各施設における議論を参照願いたいだが、常に問題となるのが設備の高度化、購入、拡充の必要性である。所内の研究者と技術職員による高度化と改良の努力、及び、予算の工面による共通設備の購入等を実施しているが、まだほんの一部に限られている。施設の拡充は、分子科学コミュニティ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出来ないことである。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ことである。

序言で述べたが、国の「光・量子科学研究拠点形成に向けた基盤技術開発」事業の一環として、平成 20 年度後半から「量子ビーム基盤技術開発プログラム」を極端紫外光研究施設が、また「最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム」を分子制御レーザー開発研究センターが責任を持って遂行している。しかも、前者のプログラムでは、両施設が緊密に協力することによって強力なコヒーレント放射光の開発が進められようとしている。

国の基幹事業として進められている「次世代スーパーコンピューター開発」に関して、分子研は、ナノサイエンスに係るアプリケーションソフト開発の中核的役割を果たしてきている。次世代スーパーコンピューター完成後に、これら開発されたソフトを基盤として分子スケールナノサイエンスを更に発展させるために、分子科学研究所が同分野の拠点となるべく、理論・計算分子科学研究コミュニティの方々と協力して検討が進められている。

(中村宏樹)

8-1 極端紫外光研究施設 (UVSOR)

UVSOR-II 光源加速器は 2003 年の高度化（低エミッタンス化，直線部増強）とそれに引き続くアンジュレータの整備などにより，1 GeV 以下の低エネルギー放射光リングとしては世界的にも最高レベルの輝度を誇る光源となった。トップアップ運転導入に向けての整備も順調に進み，2008 年 10 月より試験運転を開始している。今後さらに調整を進めて，トップアップ運転での定常的な共同利用の実現を目指している。

今後の施設の将来像については，

- (a) 既存施設の更なる高度化
- (b) 新しい施設の建設

の 2 つの方向で考える必要があると考えている。

まず，(a) については，蓄積リングで唯一手つかずの偏向電磁石をビーム収束作用を持つ複合機能型に交換することでさらにエミッタンスを 15 nm-rad 程度まで下げられる可能性がある。また，入射点を移動することで長さ 4 m の直線部を新たに創出できる可能性がある。特に後者については今年度から 5 年計画で始まった量子ビーム基盤技術開発プログラムの中で実現されることが既に決定している。このプログラムでは，新たに創出される直線部にアンジュレータ 2 台を直列に設置し，外部レーザーを用いたコヒーレント放射光など特長ある光を発生する技術の開発とその利用法の開拓を目標としている。専用ビームラインの建設も計画に盛り込まれている。このためにビームラインの移設や高度化も実施される予定である。この量子ビームプログラムを推進しつつ，以下で述べる新施設建設の可能性も探りながら，状況によって，偏向磁石の更新による低エミッタンス化を実施するのが現実的と思われる。

次に (b) については，

- i) 1.5–2.5 GeV 級新第 3 世代リング
- ii) 1 GeV 級超低エミッタンスリング
- iii) ライナックによる軟 X 線自由電子レーザー
- iv) 小型エネルギー回収型ライナック

など様々な可能性が考えられる。それぞれの検討を進めながら，他施設の動向なども考慮しつつ，計画を練ることになる。i) は比較的低エネルギーで汎用性の高い高輝度光源の実現を目指すものであり，SPring-8 では十分に対応しきれない VUV 軟 X 線領域での高輝度光源を実現することで，我が国では SPring-8 以外に真に第 3 世代光源と呼べる光源がない状況を打破しようとするものである。現施設の更新になるが，規模は大きくなるため，新たに土地が必要になる。また，日本全体として考える必要がある。ii) は光源性能をより重視し VUV 領域での超高輝度光源を実現しようとするものである。現施設の更新として現敷地内に収めることも可能であるが，一旦，更地にしてから建設する必要がある。iii) は高輝度ライナックによる軟 X 線領域でのシングルパス型自由電子レーザーの実現を目指すものである。リング型光源と相補的な光源となるので，現施設に併設することになる。収容場所を考える必要がある。iv) はリング型光源の限界を打ち破る光源性能を実現し，且つ，リング型光源の汎用性も有する施設の実現を目指すものである。超電導加速技術などの高度な加速器技術が必要となるため，今後の加速器技術開発の進捗を慎重に見守る必要がある。現施設の更新になるが，規模は大きくなるため，新たに土地が必要になる。

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務めている。ナノ分子科学研究部門の小川琢治教授が平成19年9月に大阪大学大学院理学研究科教授として転出（現在当センター兼任教授）、その後任として、平成20年4月に平本昌宏教授（前所属は大阪大学大学院理学研究科、准教授）が着任した。これ以外の専任教員は、鈴木敏泰准教授、永田央准教授、櫻井英博准教授の3名である。

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いる。これを遂行するため、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、加藤晃一教授、永瀬茂教授が併任し、ナノネットプロジェクト業務を実施している。また、920 MHz NMRでのプローブ開発として、西村勝之准教授が併任している。ナノセンターが管理する共通機器は、920 MHz 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、専任併任教授・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。20年度外部委員は、冨田博一大阪大学大学院基礎工学研究科教授、山口芳樹理化学研究所チームリーダー、馬場嘉信名古屋大学大学院工学研究科教授、隅山兼治名古屋工業大学大学院物質工学専攻教授、榊裕之豊田工業大学副学長（電子情報分野教授）であった。超高磁場NMRに関する現状と将来、ナノネットプロジェクトに関して評価や提言をいただいた。

超高磁場NMRは平成18年度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、タンパク（中でも膜タンパク糖タンパクのような難結晶性複合タンパク）、固体ナノ触媒、有機-無機複合コンポジット、CNT及びフラレン類縁体の精密構造研究、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。本年度は、新たに西村准教授が温度可変固体プローブの開発を進めることになった。また、平成20年4月に岡崎統合バイオサイエンスセンター教授として着任した加藤晃一教授を中心として、精力的に本装置を活用したタンパク質構造解析研究を遂行している。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。

昨年度の分子研レポートで短期的事業計画として掲げた目標のうち、温度可変プローブ開発は来年度中にも共同利用の実現が可能となった。また、ニュースレター・パンフレットの発行に関しては、まずアクティビティレポートの発行という形で行い、今後さらに検討する。

ナノネットにおける共同利用機器のうち、UVSOR-II を利用する超伝導磁石高磁場極低温 X 線磁気円二色性測定装置（電子構造研究部門所有）に関しては、利用者数が多くなったため、UVSOR-II BL4B のビームタイムのうち一定時間をナノセンターが利用し、その中で利用者支援を行うという体制を整えた。今後、機器をナノセンターに移管してさらに共同利用の利便性を高めるなどを検討する。

中期・長期的な事業展開として、第一に NMR 高度化をさらに推進する。このため、まずは予備測定を実施する 600MHz クラスの固体測定に対応できる中規模 NMR 装置の導入を実現する。920 MHz 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を開発する。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（うち二名は、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・エネルギー学研究中心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・フォトニクス」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）、准教授1名（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プ、マイクロスコープ、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ねばならない。そのためには、現在、先端レーザー開発研究部門にしかない専任准教授のポストを、他の2部門にも設けることが強く望まれる。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名分しかない技術職員のポスト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られる。

8-4 機器センター

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、2年の歳月が経とうとしている。機器センターの役割は汎用機器の維持・管理・運用と所内外の施設利用者への技術支援である。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つ機器の維持・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側面を支援している。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（兼任）のほかに8名の専任技術職員（化学分析機器2名、物性測定機器2名、分光計測機器1名、寒剤装置2名、化学系設備ネットワーク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21年度からは分光計測機器担当の技術職員1名が新たに配置される予定になっている。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運用システムの支援にも参加し、分子スケールナノサイエンスセンターの保有する920 MHz NMR や高分解能電子顕微鏡の維持管理にも参加している。この2年間で機器センターの姿が整いつつあるが、平成20年度は新機器センター事務室の化学試料棟への設置、化学系設備ネットワーク予約課金システムの改善、新装置の導入、明大寺地区から山手地区への機器の移動、所内利用者への利用料の見直し、施設利用者向けの広報誌「機器センターたより」の発行などを行った。

8-4-1 設備

化学分析機器は山手地区にNMR、質量分析装置、元素分析装置、X線回折装置、円二色性分光装置など、物質合成を行う上で最低限なくてはならない装置が配置してある。このうち、円二色性分光装置は山手地区の利用者が多いため、平成20年度に明大寺地区から山手地区へ移設した。物性測定装置は明大寺地区にESR、SQUID磁束計、X線回折装置、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須の汎用装置を配置している。分光計測装置は三種のパルスレーザーシステム、蛍光分光装置、紫外可視近赤外分光装置などの汎用機器を明大寺地区に配置している。蛍光分光装置は近赤外領域の蛍光を測定できるという特徴を持っているが、平成20年度は高感度光電子増倍管を導入して近赤外領域の蛍光感度を大幅に増強させた。

研究所の予算を長期的な視野に立って計画的に運用するために、汎用性の高い装置は特定の研究グループではなく機器センターに予算措置する。このことによって、機器の稼働率を高めるとともに、機器の最高性能を維持する。このような考えに基づいて平成20年度は中村宏樹所長よりいくつかの新しい汎用装置を購入するための予算が機器センターに投入された。山手地区には生体試料用世界最高感度の示差走査型カロリメータと等温滴定型カロリメータを設置した。平成21年度に所内公開し、平成22年度より所外にも公開する予定である。明大寺地区には蛍光X線分析装置を新たに設置し、平成21年度より所内・所外に公開することを予定している。また、マイクロ単結晶X線回折装置の試料冷却装置とESR（Bruker E500）用デュアルモード共振器を新たに導入し、実験環境の向上を図った。さらに、老朽化したパルスレーザーシステムを補うために高パルスエネルギー型エキシマーレーザーを更新した。

機器センターの所有する機器は汎用機器が主であるが、高周波ESR（Bruker E680）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。この装置は購入後10年を経過して制御用コンピューターの老朽化が著しいため、平成20年度に制御用コンピューターの更新を行った。このような特殊装置に平成21年度より波長可変ピコ秒レーザーシステムが加わる予定になっている。この装置はピコ秒時間分解ラマン分光測定などの実験が可能で、電子構造研究部門西グループより機器センターに移管され、平成21年度より所内・所外に公開の予定である。

新しく機器センターに配属される技術職員がこの装置を担当する。機器センターは分子集団動力学部門の旧小林グループより移管された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体や分子導体などを研究する上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。平成21年度より大阪大学理系大学院の中澤康浩教授を物質分子科学領域の客員教授として招聘し、高磁場・極低温下における比熱測定装置の立ち上げを予定している。

8-4-2 利用状況

機器センターの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X線回折装置や物性測定機器を施設利用している。平成20年度の所外施設利用件数は61件で、平成19年度の51件^{*}に比べてやや増加した。施設利用の実態を把握し施設利用者と機器センターとの交流を図ることを目的として、機器センターの施設利用者向けの広報誌「機器センターたより」を発行した。施設利用者の利用状況の統計を調べた結果、機器の利用頻度や頻りに利用している所外施設利用者の実態も明らかになった。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。年間30回も利用しているヘビーユーザーもあり、このような頻りに施設利用者に対しては旅費の支給を2回に増やすなどの方策が望まれる。また機器センターの保有する機器、特に新しく配置された機器の特徴をホームページよりも詳しく説明する欄を設けた。また、所内利用者と所外利用者一名ずつに、施設利用を通して得られた研究成果について執筆を依頼した。「機器センターたより」は新たな施設利用者を発掘することができると考えており、毎年一回発行することを計画している。

8-4-3 今後の課題

- (1) 平成20年度に化学試料棟に機器センターの事務室を整備したのであるが、諸般の事情で平成21年度より南実験棟一階へ移動することになった。平成20年度中に化学設備ネットワークの業務を主とする事務室が完成する予定である。明大寺地区の機器センター職員を全員収容できる事務室を整備するためにはもう一部屋必要であるが、実験棟改修に伴ってスペースが確保できない状況になった。実験棟改修の終了する平成23年度には是非とも完成させたい。
- (2) 現在、機器センターは極低温棟二階にインターネットその他が利用できる共同利用者控え室を用意している。この控え室は極低温棟とレーザー棟にある機器を利用する施設利用者によって有効に利用されている。南実験棟の地下にある機器を利用する施設利用者にとって極低温棟はあまりにも離れすぎているので、実験棟改修が終了した後は、南実験棟にも同様の共同利用者控え室を用意する必要がある。山手地区は所外施設利用者が少ないこともあって共同利用者控え室が設置されていない。空き室はないので、部屋の再編が必要となるが、共同利用者控え室を作る努力をしなければならない。
- (3) 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。平成20年度は施設課に依頼して配管工事費用の見積りを行った。その結果、明大寺地区のヘリウム液化機を更新する費用の約3分の一程度の費用がかかることが分かった。このほか、実際に埋設工事を行うためには道路や研究所外の土地を通す必要があり、そのための許可や交渉が必要であり、時間がかかることが予想される。まずは、明大寺地区の

液化機の更新を最優先させるべきであると考え。長期的な計画としては明大寺地区のヘリウム液化を更新した後に、山手地区と明大寺地区を結ぶ回収ラインを敷設するのが最良の方策である。このような態勢をとっておけば、山手・明大寺どちらの液化機が故障しても、その間、稼働している液化機で液体ヘリウムを両地区に供給する態勢を整えることができる。

(4) 山手地区の 500 MHz NMR は平成 7 年に導入された稼働率の高い機器であるが、すでに 13 年が経過している。制御用コンピューターは、ハードウェアの補修部品の調達が困難になっているのみならず、オペレーティングシステム (OS) を含めたソフトウェアの保守が受けられない状況になっている。今後、トラブルが発生した場合、復旧が不可能であり、共同研究の推進に重大な支障をきたすことになる。この装置は化学設備ネットワークの更新機器に指定されているので、予算がつけば更新可能であるが、このほかの手立ても考えておく必要がある。この他、マトリックス支援イオン化 - 飛行時間型質量分析計も高い稼働率で使用されているが、購入後 9 年経過しており、更新を計画しておく必要がある。

* 分子研リポート 2007 には平成 19 年度の施設利用数 57 件と記載してあるが、装置開発室の施設利用が含まれていることが後になって判明した。

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、平成17年度からは共同利用機関の活動の一環として所外研究者からの製作依頼も受け付けるように体制を整えた。これにより、装置開発室固有の技術の維持と向上に研究者と技術者が一体となって取り組んでいる。また、日常の実験研究で必要な工作依頼や緊急性を要する依頼に対して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いる。これ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ている。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、その他に平成20年度は、レーザー用の光学結晶を冷却するヒートシンクの素材に用いる銅タングステン（CuW）のテスト加工を行った。平成21年度はこの材料とZnSの最適な加工条件を探索する計画である。

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4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を行った。平成20年度はオンマシン計測が可能なCNCフライス装置の開発を開始した。今後はこのマイクロ加工装置を完成させ、多方面からの研究支援に対応する計画である。

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、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の開発を行っている。また、平成18年度より、東京大学大規模集積システム設計教育センター（VDEC）を利用したアナログ集積回路の開発技術の導入に向け、バイオセンサーに用いるCMOS集積回路の試作設計を中部大学の協力を得て進めている。今後は、LSIの設計・製作・評価のためのノウハウを蓄積しユーザーの要求に迅速に対応できる体制を整える計画である。

8-5-2 設備

装置開発室の設備は、創設から30年以上経過し老朽化、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、加工設備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。

8-6 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、2008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。

2009年2月現在の共同利用サービスを行っている計算機システムの概要を図と表に示す。本システムは、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構成されている。前者は2006年7月に導入し明大寺地区に設置され、後者は2008年2月に更新されて山手地区に設置されている。「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、2008年度も151の研究グループにより、総数646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20年度は5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。

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ワークショップとして、分子科学、物性科学、計算機科学の分野の研究者が集まり、「次世代理論化学の新展開と超並列計算への挑戦」をテーマとしたワークショップを開催した。また、次世代スーパーコンピュータについては、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設立準備委員会が組織され、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（仮称）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。

平成 20 年度 システム構成

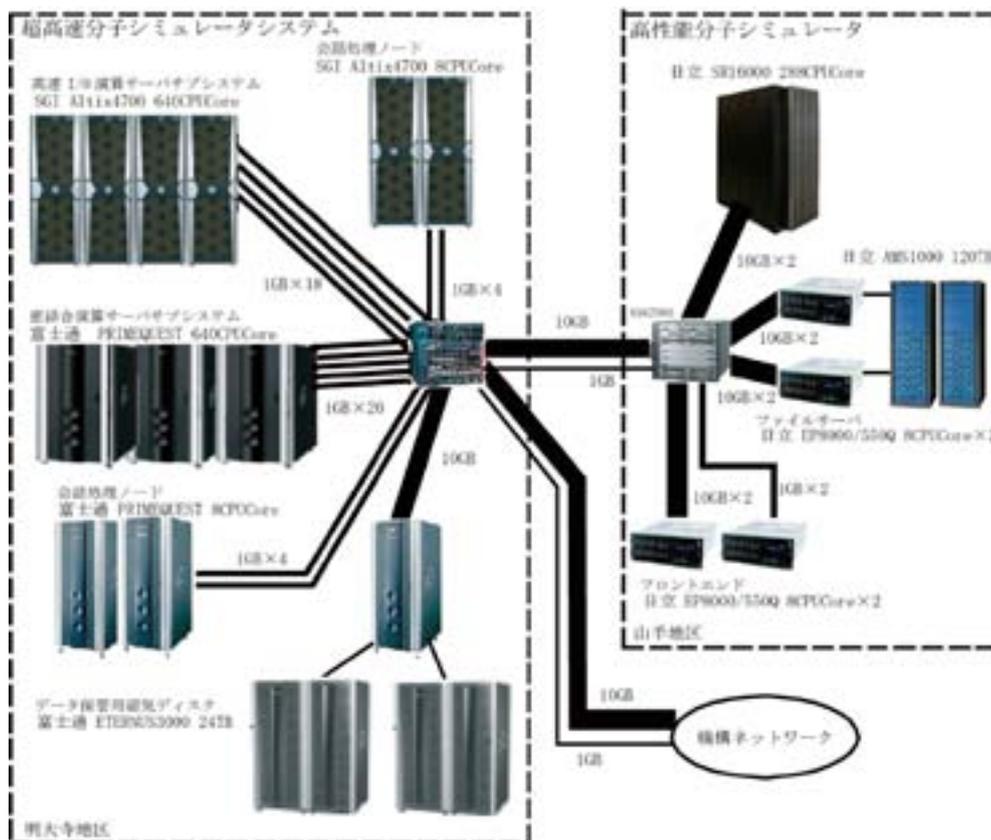
高性能分子シミュレータシステム

演算サーバシステム	
	型番：HITACHI SR11000 次世代モデル
	OS：AIX
	CPUCore 数：288 (32CPUCore × 9 ノード)
	総理論性能：5.4TFLOPS
	総メモリ容量：2.3TB (256GB × 9 ノード)
	ディスク容量：23TB (/work)
ファイルサーバシステム	
	型番：HITACHI EP8000/550Q (2 ノード)
	OS：AIX
	総メモリ容量：64GB (32GB × 2 ノード)
	ディスク容量：120TB (/home (37.4TB), /week (20.0TB), /save (37.4TB))
	60TB (バックアップ用)
フロントエンドサーバ	
	型番：HITACHI EP8000/550Q (2 ノード)
	OS：AIX
	総メモリ容量：64GB (32GB × 2 ノード)
高速ネットワーク装置	
	型番：Alaxala AX6708S

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

システム構成図



9 . 平成 21 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 21 年度）

（VI 以降を省略）

I 研究機構の教育研究等の質の向上に関する目標を達成するためにとるべき措置

1 研究に関する目標を達成するための措置

(1) 研究水準及び研究の成果等に関する目標を達成するための措置

大学共同利用機関法人自然科学研究機構（以下「本機構」という。）は、天文学、物質科学、エネルギー科学、生命科学等（以下「各分野」という。）自然科学分野における研究所等（本機構が設置する大学共同利用機関をいう。以下同じ。）の役割と機能を一層充実させる。また、各分野間の連携を積極的に行い、学際的・国際的研究拠点形成を目指す。

研究所等に置かれた運営会議は、共同研究計画に関する事項、研究者人事等に関する事項、組織の改編に関する事項及びその他研究所等に関する重要事項で研究所長等が必要とする事項について諮問を受け、答申する。

各分野において研究の進展、公表の状況、研究者等の大学や研究機関との交流の状況等をまとめ、研究水準・成果の検証を行うため、外部委員を含む委員会で自己点検を行う。

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。

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。

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。また、アルマ東アジア地域センターの整備を行う。

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、バーチャル天文台を利用した研究を進める。同時に、国内外の研究者と連携しながら提供データや機能の充実を図るとともに、講習会等を通じて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、及び対応する地上観測システム、観測運用システムなどの検討を進める。次期太陽観測衛星計画については具体的な検討を進める。また、将来の位置

天文衛星，太陽系外惑星探査衛星，月探査衛星等の実現に向けて検討を進めるとともに，先端技術センターにおいて将来のスペースプロジェクトへ向けた基礎開発研究を開始する。

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（日本・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ともに，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。

岩手大学，東北大学，東京大学，会津大学，千葉工業大学，宇宙航空研究開発機構，情報通信研究機構と共同して，次期月探査，惑星探査計画の検討，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，昨年度に引き続き，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。

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更に強固にするため，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のプロジェクト研究体制を基に、特に次の研究を実施する。

1. 高エネルギー粒子駆動型不安定性に起因する帯状流の形成、及び巨視的 MHD 不安定性と微視的乱流の相互作用を解明する。LHD プラズマの二流体平衡と線形安定性を解析するとともに、高波数圧力駆動型不安定性の役割、プラズモイドの挙動を解明する。LHD 実験により即した条件を扱えるように、ジャイロ運動論的シミュレーションコードの拡張を進める。境界層プラズマと壁との相互作用を取り入れた周辺プラズマの総合的モデルの構築を行う。第一世代階層統合コードを LHD 実験データ解析に適用することにより、理論モデルの妥当性の検証、数値モデルの検証・改良・拡張を進める。
2. コーン付ターゲットを用いた高速点火実験 FIREX-I におけるターゲットの基礎的な特性評価及び実験結果の解析を、連携研究として推進する。
3. 階層緑り込みモデルを地球磁気圏及び核融合プラズマでのリコネクション現象に応用するための様々な物理検討を実施する。
4. グラファイトへの水素照射シミュレーションを拡張し、適用できる空間スケールの拡大を目指す。

ヘリカル炉設計、炉材料、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、システム統合に向けて幅広い所内及び国内の連携を強化する。

1. 特にブランケットの長寿命化と効率化に関わる共同研究を強化し、総合性能試験施設の実現に向けた要素研究を進めるとともに、各要素分野における研究成果の集約を図り、学術的体系化を進める。また超伝導マグネットシステム開発での分野間連携を強化し、定量的な理解の発展に貢献する。
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。

プラズマ物理学及び材料科学の基礎を含む核融合に関連した学際的研究領域の拡充を図るとともに、研究成果の社会への還元を推進する。

(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。

波長可変レーザー照射システムの試用を開始する。メダカバイオリソースの中核機関として、飼育施設の高度化を進めるとともに、実験技術の講習会を企画する。

研究所主催の国際会議等において、実験生物学と理論生物学の交流・融合を促進する。

水生動物バイオリソースの運用を進めるとともに、植物バイオリソースの充実を図る。

デジタル走査式平面照射顕微鏡 (DSLIM) を多様な試料に適用しながら整備を進めるとともに、共同利用に供するための準備を進める。

(生理学研究所)

分子生物学、細胞生理学、生物物理学、神経解剖学、神経生理学、神経発生学、感覚情報生理学、認知行動学、病態生理学等広範な生理学分野及び関連分野において、ヒト及び動物の生体の機能とメカニズムを解明するため、世界

的に高水準な研究を展開し、その基盤を強化するとともに、全国の関連研究者との共同研究等により研究拠点としての機能を一層強化する。

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）や言語習得に関わる研究を進める。霊長類遺伝子改変技術の開発を進める。

位相差電子顕微鏡の高度化として、蛋白質、オルガネラ等の立体構造解析を可能とする位相差低温トモグラフィーを開発する。バイオ分子センサー等の生体分子の機能及びそれらの脂質等による修飾に関する研究を進める。

生体恒常性維持機能及びその発達、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、脳幹、脊髄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、大脳基底核疾患、大脳皮質損傷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、量子化学計算の高速化と高精度化による機能性分子の開発、散逸系量子ダイナミクス、凝縮系のダイナミクスの解析、電子状態の理論、液体統計力学理論と蛋白質計算、光誘起非平衡協力現象などの研究を更に展開していく。また、3D-RISM/RISM 理論と一般化ランジェヴァン理論を組み合わせて、溶媒の揺らぎに相関した蛋白質の構造ダイナミクスを記述する理論構築に着手する。

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状態の性質と機能を解明・制御する基礎的実験手法の高度化と利用を進める。また、金属蛋白質を含む各種蛋白質の機能と構造との相関の解明、バイオセンサーの効率化を目指した研究を行う。

光分子科学研究領域を中心として、分子制御レーザー開発研究センター、極端紫外光研究施設と連携し、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や高分解能光電子分光法の様々な分子系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、生命・錯体分子科学研究領域を中心に、有機半導体太陽電池の一層の効率化、新規な機能性有機構造体及び有機強誘電体の開発、光合成モデル分子の光反応効率化、新規な金属/炭素ナノ構造体を用いた機能性材料の開発、水中特異的有機合成反応の開発、物質変換に伴って起こるエネルギー変換反応の開発を目指した錯体触媒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、量子化学、分子動力学法、RISM 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、引き続き活動の強化を図る。

引き続き、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。分子科学研究所では、新たなポストドクトラル・フェロー制度の運用を開始する。

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、生体分子研究、生体発生研究、神経系研究などを中心に統合バイオサイエンスを発展させるとともに、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。

機構内外の研究者コミュニティの連携と協力により、新分野の創成を図るため、新分野創成センターを設置し、ブレインサイエンス研究分野、及びイメージングサイエンス研究分野の研究連携を強化する。

各分野の特記事項を以下に示す。

(国立天文台)

プロジェクト研究の推進に関して適切な責任と計画性を発揮できる体制としての、プロジェクト室等の充実を図る。

プロジェクト室等の外部評価を実施する。具体的には、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ともに、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、炉工学研究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。インドその他の発展途上国との研究者交流など、新しい国際連携を目指した活動を開始する。

(基礎生物学研究所)

研究グループ間の交流を促進するため、所内のセミナーと連動した交流会を開催する等、所員交流室(インターラクショナルルーム)を効果的に運用する。

著しい進展が期待される研究部門に対し、所長のリーダーシップにより、非常勤研究員の配置や傾斜的な経費・研究スペースの配分を行うなど、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。

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開催並びにEMBL及び総合研究大学大学院所属の大学院生間の交流を行う。

（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。顕著な成果を上げた若手研究者に、研究推進のための支援を行う。多次元共同脳科学推進センターにおいて世界の研究動向を調査するとともに、他分野との連携によるブレインマシンインターフェースの基礎的研究及び霊長類遺伝子改変技術の開発を行う。

発展が期待される研究テーマを、広く公募して一般共同研究として設定するとともに、重要と考えられる領域には計画共同研究を設定する。「バイオ分子センサー」事業を強力に推進し、その成果を発信する。

客員部門を活用してサパティカル制度等を利用する研究者を受け入れる体制を整備する。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）

特定の客員研究部門に限らず、いずれの部門においても、必要に応じて長期滞在型の共同研究に対応できるように、共同研究費、スペース等の配分を可能とする体制を整備する。

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一層進める。特に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 の高度化に向けた装置開発研究、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とともに、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に、必要に応じて本機構研究者を派遣する等、引き続き双方向性のある研究体制の整備を進め、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、国際協力活動を引き続き強化する。

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、引き続き新たな利用者や研究者の発掘に努め、利用者の便宜を図る。

引き続き、情報ネットワーク等インフラストラクチャーの改善を行い、共同利用等の環境整備を行う。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い、新しい運用管理システムの更なる改善と一層の普及を図る。

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立案及び研究課題の抽出を行う。

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等に供して、太陽物理学関連分野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。

次世代の口径 30m クラス超大型光学赤外線望遠鏡に関する国際協力について、ELT 推進室を中心に検討を進める。

(核融合科学研究所)

LHD などの実験装置を用いた共同利用等を推進するために、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て、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. 階層統合コードの共同研究・共同利用促進を図るために、第一世代階層統合コードの共同研究者への公開と、入力パラメータの設定、実行スクリプトの作成等を支援するグラフィカルユーザインターフェース（GUI）を備えたアプリケーションの開発を行う。
2. シミュレーション科学を共同研究を母体として組織的に発展させるため、シンポジウムを開催して国内外の研究者と研究戦略について検討を行い、次年度の研究計画に結びついた議論を展開する。
3. 大規模シミュレーションの共同研究成果の情報交換を促進するために、計算結果の可視化のためのバーチャル・リアリティ方式の研究開発を推進する。

実験・理論双方を取り込んで充実した基礎プラズマ科学の研究推進母体を中心となって、共同研究委員会の下に組織される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継続し、長時間熱クリープ試験、長時間腐食試験など、先進ブランケットの長寿命化に関する共同研究などを推進するための設備拡充を図る。また、大学等の基礎研究設備の拡充と有効活用、中性子照射基盤整備の維持拡大に努め、超伝導マグネットシステムの合理的設計に向けて、共同利用機能の一層の活性化を図る。

（基礎生物学研究所）

共同利用等の実施を目指して、波長可変レーザー照射システムの試用を開始する。

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。

研究支援施設の整備・再構築を進め、同施設を利用した研究・技術開発を推進する。

（生理学研究所）

動物実験施設の整備を継続して行う。

計画共同研究の一環としてトランスジェニックラット、遺伝子ノックアウトマウスを作製する。新しい遺伝子改変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し、より高品質のサルの供給を目指すとともに、長期的な供給に向けて体制を整備する。

（分子科学研究所）

分子制御レーザー開発センターと極端紫外光研究施設において、先端的な光源開発を進めることで、利用研究分野を拡大する。

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・フォトニクス」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. 放射光分子科学において、放射光源のトップアップ運転（常時入射により放射光強度を一定にする運転）を定常化するための測定技術を確認するとともに、世界最高水準の真空紫外・軟X線光電子分光装置、赤外・テラヘルツ分光装置等を利用した国内外の共同利用等を推進する。

「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及び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共同利用等を強力に押し進める。

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」による相互利用を一層推進するとともに、修理・更新を必要に応じて行う。また、「ナノテクノロジーネットワーク」を通して、先端機器分析や新規分子物質合成などの共同利用等を行う。希釈冷凍高磁場極低温比熱測定装置、温度可変高磁場固体核磁気共鳴プローブ等の開発を行う。
2. 切削・研磨加工の高精度化を行うとともに、加工材料の多様化に対応できるようにする。更に、高密度集積回路の製作と回路評価装置の整備も行い、装置開発の共同利用等を推進する。

(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・技術交流等の充実を図る。また、自然科学研究機構技術研究会を引き続き実施する。

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)

共同利用等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、共同利用等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等に対応する。

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、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ため、大学院教育を実施する。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。

総合研究大学院大学の5年一貫性大学院教育等においては、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、富山大学大学院理工学教育部、東邦大学大学院理学研究科、広島大学大学院理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21年度は、100名程度)

約170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。

「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。

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。多面的な知識を有する脳科学研究者を育成するために、レクチャーコースの開講に向けて準備を進める。

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，機関リポジトリの運用により，研究所の知的生産物を電子的形態で収集，蓄積，保存し，ホームページを通じて公開する。

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一層の充実を図る。また，受入れ担当者向けマニュアルを充実させるほか，セミナー等を実施して情報の共有や業務の効率化を図る。

(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，適切に機構運営を行う。

教育研究評議会，機構会議，研究連携委員会，研究連携室会議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等の体制を一層充実する。

分子科学研究所，基礎生物学研究所，生理学研究所では，教授会議をほぼ毎月開催する。

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。

内部監査計画に基づき，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，内部監査機能を一層充実する。また，内部監査，監事監査及び監査法人監査の結果を踏まえ，適切な運営を引き続き行う。

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等の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、運営会議等、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、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ついて、適切な勤務評価制度を導入する。

「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、事務の情報化について、引き続き取り組む。

III 財務内容の改善に関する目標を達成するためにとるべき措置

1 外部研究資金その他の自己収入の増加に関する目標を達成するための措置

引き続き、講演会の開催等により研究成果等の広報普及に努める。外部資金獲得のための情報収集に努めるとともに説明会を実施する。

知的財産委員会及び利益相反委員会を中心に、各研究所等において、知的財産及び利益相反に関する知識・ルールの徹底を図る。

2 経費の抑制に関する目標を達成するための措置

引き続き、電子ファイル、電子メール等を活用し、ペーパーレス化を促進を図るほか、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、一層の経費節減を図る。

引き続き、省エネルギー化を推進するなど、適切、効率的な運営を図り経費の抑制に努める。

3 資産の運用管理の改善に関する目標を達成するための措置

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。また、資産運用管理部署を設置する。

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。また、資産の有効活用について検討を行い、必要に応じて見直しを行う。

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にとるべき措置

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。

引き続き、次期中期計画等を作成する上で、理念・目標等の見直しについても、役員会・機構会議等で検討を行う。

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。また、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とともに、地元自治体や関連大学とともに科学映像祭や科学フェスティバルの開催を支援する。

核融合科学研究所では、広報室、評価情報室、アーカイブ室、キッズ・エネルギー科学館など社会活動の中核的組織の整備を図る。

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。ホームページの総アクセス件数は、機構全体で年間1億件を目指す。

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努める。

一般市民向け公開講演会を積極的に実施して学術研究の理解を深める活動に努める。また、科学館等において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し、公開する。

V その他業務運営に関する重要目標を達成するためにとるべき措置

1 施設設備の整備等に関する目標を達成するための措置

引き続き、施設マネジメント・ポリシーに基づき施設実態調査を行い、施設の有効活用を推進する。

施設・設備の定期的な点検を実施し、緊急度の高いものから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

各研究所等において安全衛生委員会を開催するとともに、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。また、安全衛生連絡会議を開催し、情報の共有等を図る。

引き続き、危機管理体制の充実を図るとともに、各機関において安全管理に関する対応マニュアル（日本語版・英語版）について、必要に応じて見直す。

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 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			(九州大学長)

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	~'81.7.22											
石塚 直隆	名大学長	'81.9.1~			~'87.7.21								
飯島 宗一	名大学長												
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, 国際基督敎大教授		~'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	北大芯電研所長												
福井 謙一	京大工教授, 京都市織大学長, 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 '83.5.31 ~ '83.6.1	第2期 '85.5.31 ~ '83.6.1	第3期 '87.5.31 ~ '85.6.1	第4期 '89.5.31 ~ '87.6.1	第5期 '91.5.31 ~ '89.6.1	第6期 '93.5.31 ~ '91.6.1	第7期 '95.5.31 ~ '93.6.1	第8期 '97.5.31 ~ '95.6.1	第9期 '99.5.31 ~ '97.6.1	第10期 '01.5.31 ~ '99.6.1	第11期 '03.5.31 ~ '01.6.1	第12期 '04.3.31 ~ '03.6.1
田中 郁三	東工大理工学部学部長， 学位授与機構長												
中嶋 貞雄	東大物性研所長		'84.2.16~										
小田 稔	宇宙研所長												
斎藤 喜彦	慶應大理工教授												
森田 正俊	豊田中研代表取締役												
伊東 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	(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)産業技術総合研フエロ一												
京極 好正	(独)産業技術総合研生物情報解析研センター長												
後藤 圭司	豊橋技科大学長												
高橋 理一	(株)豊田中央研代表取締役所長												
中西 敦男	学術著作権協会常務理事												
細矢 治夫	お茶水女子大理教授												

氏名	所属	第1期 '81.6.1 ~ '83.5.31	第2期 '83.6.1 ~ '85.5.31	第3期 '85.6.1 ~ '87.5.31	第4期 '87.6.1 ~ '89.5.31	第5期 '89.6.1 ~ '91.5.31	第6期 '91.6.1 ~ '93.5.31	第7期 '93.6.1 ~ '95.5.31	第8期 '95.6.1 ~ '97.5.31	第9期 '97.6.1 ~ '99.5.31	第10期 '99.6.1 ~ '01.5.31	第11期 '01.6.1 ~ '03.5.31	第12期 '03.6.1 ~ '04.3.31
本多 健一	東京工芸大学長												
安岡 弘志	東大物性研所長												
山崎 敏光	理化学研 RI ビーム科 学研究室研究協力員												
荻野 博	放送大学宮城学習セン ター所長												
木原 元央	高エネルギー加速器研究 機構加速器研究施設長												
近藤 保	豊田工業大客員教授												
佐原 眞	国立歴史民俗博物館長												
廣田 襄	京大名誉教授												
福山 秀敏	東大物性研所長												
松尾 稔	名大総長												
山村 庄亮	慶應大名誉教授												
蟻川 芳子	日本女子大理教授												
飯吉 厚夫	中部大学長												
石谷 炯	(財)神奈川科学技術ア カデミー専務理事												
海部 宣男	国立天文台長												
木村 嘉孝	高エネルギー加速器研 究機構物質構造科学研 究所長												
北川源四郎	統計数理研究所長												
木下 實	東大名誉教授												
小間 篤	高エネルギー加速器研 究機構物質構造科学研 究所長												

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	2008. 4.1 ~ 2010.3.31
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			(~2008.7.31)
時任 宣博 京都大学化学研究所長			
田中 宏明 中日新聞編集局文化部長			(2008.8.1~)

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	2007. 4. 1 ~ 2009.3.31
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			
MILLER, William H. 米国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			

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											
角戸 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	東大教養学教授	共 (共~'82.4.30)											
豊沢 豊	東大物性研教授	人											
廣田 襄	京大理教授	人 (人~'82.3.31)		人	(副)人								
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	人								
岩村 秀	分子研教授	人・共	人	人	人・共 ~'87.5.31								
木村 克美	分子研教授	共	共	人・共	人・共	('90.1.29~ 共	('90.1.29~ 人・共	人・共					
花崎 一郎	分子研教授			人		('90.1.29~ 共	('90.1.29~ 人・共	人・共					
廣田 榮治	分子研教授	人	人	人	人	('90.1.29~ 共	('90.1.29~ 人・共	人・共					
藤山 常毅	分子研教授												
諸熊 奎治	分子研教授	('82.4.30死亡)	人	人	共	人	人 (~'92.2.14)	人					
吉原經太郎	分子研教授	人・共 (共~'82.4.30)	人	人	共	人	人 (~'92.2.14)	人					
田中 郁三	分子研教授(客員) (東大理教授)	人・共	人・共	人・共	人	人		人					
笛野 高之	分子研教授(客員) (阪大基礎工教授)		人	人	人	人		人					

氏名	所属	第1期 '83.4.30 ~ '83.5.1	第2期 '85.4.30 ~ '85.5.1	第3期 '87.4.30 ~ '87.5.1	第4期 '89.4.30 ~ '89.5.1	第5期 '91.4.30 ~ '91.5.1	第6期 '93.4.30 ~ '93.5.1	第7期 '95.4.30 ~ '95.5.1	第8期 '97.4.30 ~ '97.5.1	第9期 '99.4.30 ~ '99.5.1	第10期 '01.4.30 ~ '01.5.1	第11期 '03.4.30 ~ '03.5.1	第12期 '04.3.31 ~ '04.3.31
木田茂夫	分子研教授					人	人	'94.4.1~	人	人			
岩田末廣	分子研教授					人	人						
志田忠正	京大理教授					人	人						
田隅三生	東大理教授					人	人						
仁科雄一郎	東北大金属材料研教授					共							
村田好正	東大物性研教授					(副)							
中筋一弘	分子研教授					人	人	(~'94.3.31)					
飯島孝夫	学習院大理教授					人	人	(副)					
伊藤公一	大阪市立大理教授					人	人	人					
小川禎一郎	九大総合理工教授					共	共	共					
小尾欣一	東工大理教授					共	共	共					
京極好正	阪大蛋白研教授					人	人	人					
田中晃二	分子研教授					人	人	人					
齋藤修二	分子研教授					~'92.4.1							
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	共				
斎藤軍治	京大理教授							共	人				
塚田捷	東大理教授							人	共				
山口兆	阪大理教授							人	共				
宇理須恆雄	分子研教授							共	共				
								(~'94.5.1~)					
中村晃	分子研教授								人	共			
小杉信博	分子研教授								人	共			
渡辺芳人	分子研教授								共	共			
大澤映二	豊橋技術科大工教授								人	共			
生越久靖	福井高専校長								人	共			
小谷正博	学習院大理教授								人	共			
西信之	分子研教授								人	共			
三上直彦	東北大院理教授								人	共			
岡田正	阪大院基礎工教授								人	共			
加藤重樹	京大院理教授								人	共			

氏名	所属	第1期 '81.5.1 ~ '83.4.30	第2期 '83.5.1 ~ '85.4.30	第3期 '85.5.1 ~ '87.4.30	第4期 '87.5.1 ~ '89.4.30	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	共 人	
篠野嘉彦	九大院総合理工教授									人	(副) 人		
小林速男	分子研教授									人	人	共 人	
阿知波洋次	東京都立大院理教授											人共 (人'02.4.1~)	人
北原和夫	国際基督教大教養教授											人	
山口宏夫	東大院理教授									人	人	人	
松本和子	早稲田大理工教授									人	人	人 (~'02.3.31)	人
平田文男	分子研教授									人	人	人	
藤井正明	分子研教授									人	人	人	
阿久津秀雄	阪大蛋白研教授											(副)人	(副)人
宇田川康夫	東北大多元研教授											人	人
太田信廣	北大電子科学研教授											人	
川台眞紀	理化学研主任研究員											人	
榊茂好	九大有機化学基礎七 教授											人	人
菅原正	東大院総合文化教授											人	人
魚住泰広	分子研教授											共 人	共 人
西川惠子	千葉大院自然科学教授											共 人	共 人
岡本裕巳	分子研教授											共 人	共 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	第3期 2008.4.1 ~ 2010.3.31
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	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	人
小杉 信博 分子研教授	人		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	共
永瀬 茂 分子研教授	人	人	
西 信之 分子研教授	共	人・共	人・共
平田 文男 分子研教授			人
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~	人
薬師 久彌 分子研教授	人	共 '07.4.1~	共
榎 敏明 東工大大院理工教授		人	人
加藤 昌子 北大院理教授		共	
関谷 博 九大院理教授			共
中嶋 敦 慶應大理工教授			
山下 晃一 東大院工教授		人	人
江幡 孝之 広大院理教授			人
篠原 久典 名大院理教授			
富宅喜代一 神戸大院理教授			(副)人
山下 正廣 東北大院理教授			人
渡辺 芳人 名大物質科学国際研究セ教授			

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る者

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して認められた事項については、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。）が必要と認めたる者

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。