

「分子研リポート 2010」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	8
2-4-2	研究顧問	8
2-4-3	運営会議	9
2-4-4	運営会議人事選考部会	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	各種委員会等	11
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	岡崎共通施設	27
2-7-1	岡崎情報図書館	27
2-7-2	岡崎コンファレンスセンター	27
2-7-3	岡崎共同利用研究者宿泊施設	27
2-7-4	職員会館	27
2-8	その他	28
2-8-1	知的財産	28
2-8-2	実験棟改修	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	2010 年度の実施状況	38
3-3-3	共同利用研究実施件数一覧	54
3-4	国際交流と国際共同研究	55
3-4-1	外国人客員部門等及び国際交流	55
3-4-2	岡崎コンファレンス	58

3-4-3	分子科学研究所国際共同研究.....	62
3-4-4	日韓共同研究.....	62
3-4-5	東アジア多国間共同研究.....	63
3-5	大学院教育.....	65
3-5-1	特別共同利用研究員.....	65
3-5-2	総合研究大学院大学二専攻.....	66
3-5-3	オープンキャンパス・分子研シンポジウム.....	70
3-5-4	夏の体験入学.....	70
3-5-5	総研大 / アジアコア共催「冬の学校」.....	72
3-5-6	組織的な大学院教育改革推進プログラム.....	73
4	研究支援等.....	75
4-1	技術課.....	76
4-1-1	技術研究会.....	76
4-1-2	技術研修.....	78
4-1-3	人事.....	79
4-1-4	受賞.....	80
4-2	安全衛生管理室.....	81
4-3	広報室.....	82
4-4	史料編纂室.....	84
4-5	社会との交流.....	86
4-5-1	自然科学研究機構シンポジウム.....	86
4-5-2	分子科学フォーラム.....	86
4-5-3	岡崎市民大学講座.....	87
4-5-4	その他.....	88
4-6	理科教育への協力.....	89
4-6-1	スーパーサイエンスハイスクール.....	89
4-6-2	コスモサイエンスコース.....	89
4-6-3	サイエンスパートナーシッププロジェクト.....	89
4-6-4	あいち科学技術教育推進協議会.....	89
4-6-5	国研セミナー.....	90
4-6-6	小中学校での出前授業.....	91
4-6-7	職場体験学習.....	92
4-6-8	その他.....	92
4-7	一般公開.....	93
4-8	見学者受け入れ.....	94
5	各種事業.....	97
5-1	大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用と共同研究の促進（文部科学省）.....	99
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）.....	100
5-3	分野間連携（自然科学研究機構）.....	102
5-3-1	概要.....	102
5-3-2	イメージング・サイエンス.....	102
5-3-3	シミュレーションによる「自然科学における階層と全体」に関する新たな学術分野の開拓.....	104

5-4	アジア研究教育拠点事業「物質・光・理論分子科学のフロンティア」(日本学術振興会)	105
5-5	ナノテクノロジーネットワーク事業「中部地区ナノテク総合支援」(文部科学省)	107
5-5-1	概要	107
5-5-2	平成22年度採択課題一覧(分子科学研究所担当分)	109
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)	111
5-6-1	中核アプリを中心とする「次世代ナノ統合ソフトウェア」開発	111
5-6-2	「アプリケーション実証研究」および「連続研究会」	113
5-6-3	プログラム公開に向けた取り組み	114
5-6-4	今後の課題と取り組み	114
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)	116
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)	118
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)	119
5-9-1	全体趣旨	119
5-9-2	分子研主催プロジェクト課題について	119
5-9-3	実施状況	119
6	研究領域の現状	121
6-1	論文発表状況	121
6-2	理論・計算分子科学研究領域	122
	理論分子科学第一研究部門	122
	理論分子科学第二研究部門	134
	計算分子科学研究部門	143
6-3	光分子科学研究領域	155
	光分子科学第一研究部門	155
	光分子科学第二研究部門	163
	光分子科学第三研究部門	168
	光源加速器開発研究部門(極端紫外光研究施設)	179
	光物性測定器開発研究部門(極端紫外光研究施設)	183
	光化学測定器開発研究部門(極端紫外光研究施設)	189
	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)	192
6-4	物質分子科学研究領域	203
	電子構造研究部門	203
	電子物性研究部門	215
	分子機能研究部門	223
	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)	228
	安全衛生管理室	244
6-5	生命・錯体分子科学研究領域	246
	生体分子機能研究部門	246
	生体分子情報研究部門	265
	錯体触媒研究部門	273
	錯体物性研究部門	277

7 . 点検評価と課題	281
7-1 外国人運営顧問による点検評価	282
7-1-1 Anthony John Stace 外国人運営顧問	282
7-1-2 Jean-Pierre Sauvage 外国人運営顧問	286
8 . 研究施設の現状と将来計画	291
8-1 極端紫外光研究施設 (UVSOR)	292
8-2 分子スケールナノサイエンスセンター	293
8-3 分子制御レーザー開発研究センター	295
8-4 機器センター	297
8-5 装置開発室	299
8-6 計算科学研究センター	302
8-7 岡崎統合バイオサイエンスセンター	305
9 . 資料	307
9-1 評議員 (1976 ~ 1981)	307
9-2 評議員 (1981 ~ 2004)	308
9-3 運営顧問 (2004 ~)	312
9-4 外国人評議員 (1976 ~ 2004)	313
9-5 外国人運営顧問 (2004 ~)	314
9-6 運営に関する委員会委員 (1975 ~ 1981)	315
9-7 運営協議員 (1981 ~ 2004)	316
9-8 運営会議委員 (2004 ~)	320
9-9 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	321
9-10 自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則	322
9-11 自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則	325
9-12 大学共同利用機関法人自然科学研究機構年度計画 (平成 23 年度)	326

1 . 序 言

分子科学研究所は、分子科学の研究の中核拠点として実験的研究および理論的研究を行うとともに、広く研究者の共同利用に供することを目的として1975年に設立された大学共同利用機関です。現在、理論・計算分子科学、光分子科学、物質分子科学、生命・錯体分子科学の4つの研究領域と、極端紫外光研究施設を始めとする7つの研究施設を擁し、分子の構造と反応と機能についての先鋭的な基礎研究を進め、分子の新たな可能性を探っています。

このレポートには、平成22年における各研究グループ（現在37名のPIがいます）と、研究所全体の活動状況が述べてあります。また、研究所全体の特別プロジェクトとして（1）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（2）ナノテクノロジーネットワークプログラム（3）理研と共同しエクストリーム研究の推進、（4）物材研等と共同での分子・物質シミュレーション中核拠点形成、（5）量子ビーム基盤技術開発プログラム、（6）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」等が進行中です。

また、国際的事業として特にアジア関係の2つのプログラム、すなわち（1）アジア研究教育拠点事業（アジアコア；日本学術振興会）と（2）21世紀東アジア青少年大交流計画（JENESYS Program；日本国際協力センター）、を遂行しています。前者は、アジア諸国の研究教育拠点機関をつなぎ、物質・光・理論分子科学のフロンティア分野における研究教育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する事業であり、後者は、東アジアの学生、若い研究者の招聘、教育、研究の実施、また現地との交流などを行っています。JENESYS Programは、平成22年10月からプログラムが（一時的に）終了し、現在は分子研独自のプログラムEXODASS（post-JENESYS）として新たな展開を計っています。

分子科学研究所は、現在大きな転換期にあります。分子の構造、その変化、反応過程の理解が進み、また、高次の構造性と反応性に富む分子を創れるようになってきています。更に現在、反応のダイナミクス、電子の位相の自由なコントロールに迫りつつあります。また、これからの新しい研究の方向として、多種の分子が調和して創り出す反応の流れ、そこにおける分子間のコミュニケーションの仕方など、生命を成り立たせている分子の働きの解明、高次分子システムによる完全にグリーンな反応過程の構築、高効率な分子によるエネルギー変換・イオン伝導の原理の解明など、ミクロとマクロの領域をつなぐ分子科学が重要になってきています。このような階層性の高い分子機能の発現機構をさぐる「ポストナノ」分子科学を、これから分子科学研究所の研究の重要な柱の一つとしていきたいと考えています。同時に分子系の超精密制御（超短時間制御）や超微細構造分子計測、分子のエクストリームな状態などに関する研究は、分子科学研究所が長年培ってきた誇るべきものであり、「ポストナノ」の研究とともに大きく発展させていきたいと思えます。人事面では、光分子科学第三研究部門の菱川明栄准教授が名古屋大学理学研究科（化学）の教授に転出しました。一方、理研の研究員であった藤貴夫氏が先端レーザー開発研究部門の准教授に就任しています。ここ2年間余に分子研の教授18名のうち7名が定年を迎えるという、大きな転換期にあります。人事面のみならず研究システム、すなわち研究ユニットのあり方、独立した若い人をプロモートするシステムなど、の改革を行っていききたいと考えています。

この様な変革期にあって、カルフォルニア大学バークレイ校の副学長（研究担当）の Graham Fleming 教授と大阪大学の柳田敏雄特任教授に研究顧問をお願いしました。Fleming 教授には、昨年末 5 日間に渡り各研究グループの研究のヒヤリング評価、さらに研究所のシステム、プロジェクト研究の進め方、研究の将来構想などに提言を頂きました。また、外国人運営顧問である、英国ノッティンガム大学の Anthony J. Stace 教授、フランスのストラスブルグ大学の Jean-Pierre Sauvage 教授にも同様の評価とアドバイスを頂いております。

この岡崎から次世代の核となる学問を生みだし、世界のトップインスティテュートとして輝いていくべき新たな出発点に分子科学研究所はいま立っています。皆様のご支援とご協力をお願いいたします。

平成 23 年 3 月
自然科学研究機構
分子科学研究所 所長
大峯 巖

2．分子科学研究所の概要

2-1 研究所の目的

分子科学研究所は、物質の基礎である分子の構造とその機能に関する実験的研究並びに理論的研究を行うとともに、化学と物理学の境界から生命科学にまでわたる分子科学の研究を推進するための中核として、広く研究者の共同利用に供することを目的として設立された大学共同利用機関である。物質観・自然観の基礎を培う研究機関として、広く物質科学の諸分野に共通の知識と方法論を提供することを意図している。

限られた資源のなかで、生産と消費の上に成り立つ物質文明が健全に保持されるためには、諸物質の機能を深く理解し、その正しい利用を図るのみでなく、さらに進んで物質循環の原理を取り入れなければならない。生体分子をも含む広範な分子の形成と変化に関する原理、分子と光の相互作用、分子を通じて行われるエネルギー変換の機構等に関する研究は、いずれも物質循環の原理に立つ新しい科学・技術の開発に貢献するものである。

2-2 沿革

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

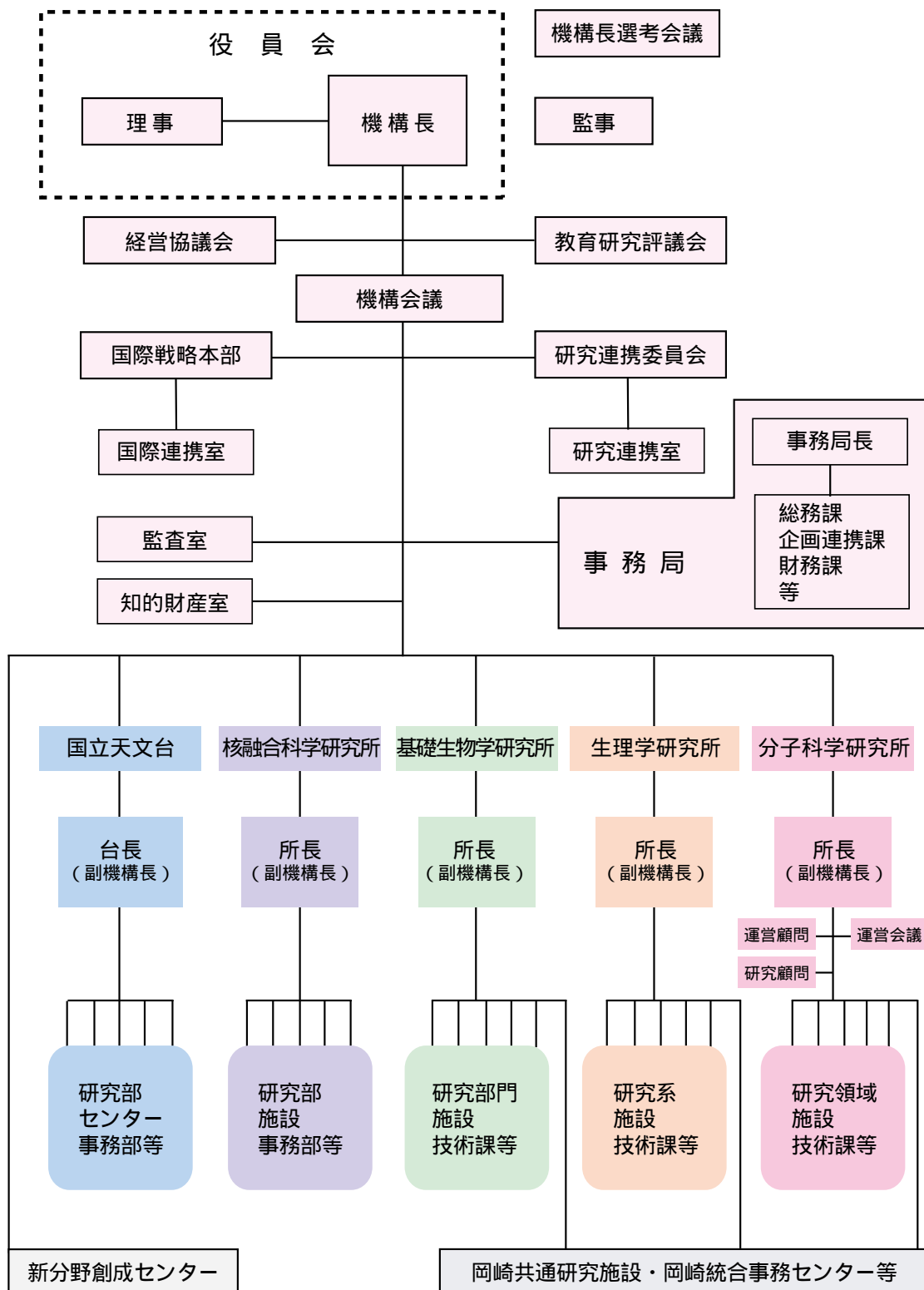
- 1965. 12.13 日本学術会議は、「分子科学研究所」(仮称)の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
- 1973. 10.31 学術審議会は「分子科学研究所」(仮称)を緊急に設立することが適当である旨 文部大臣に報告した。
- 1974. 4.11 文部大臣裁定により、東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室(室長:井口洋夫前東京大学物性研究所教授,定員3名)及び分子科学研究所創設準備会議(座長:山下次郎前東京大学物性研究所長,学識経験者35人により構成)が設置された。
- 1974. 7. 6 分子科学研究所創設準備会議において、研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
- 1975.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

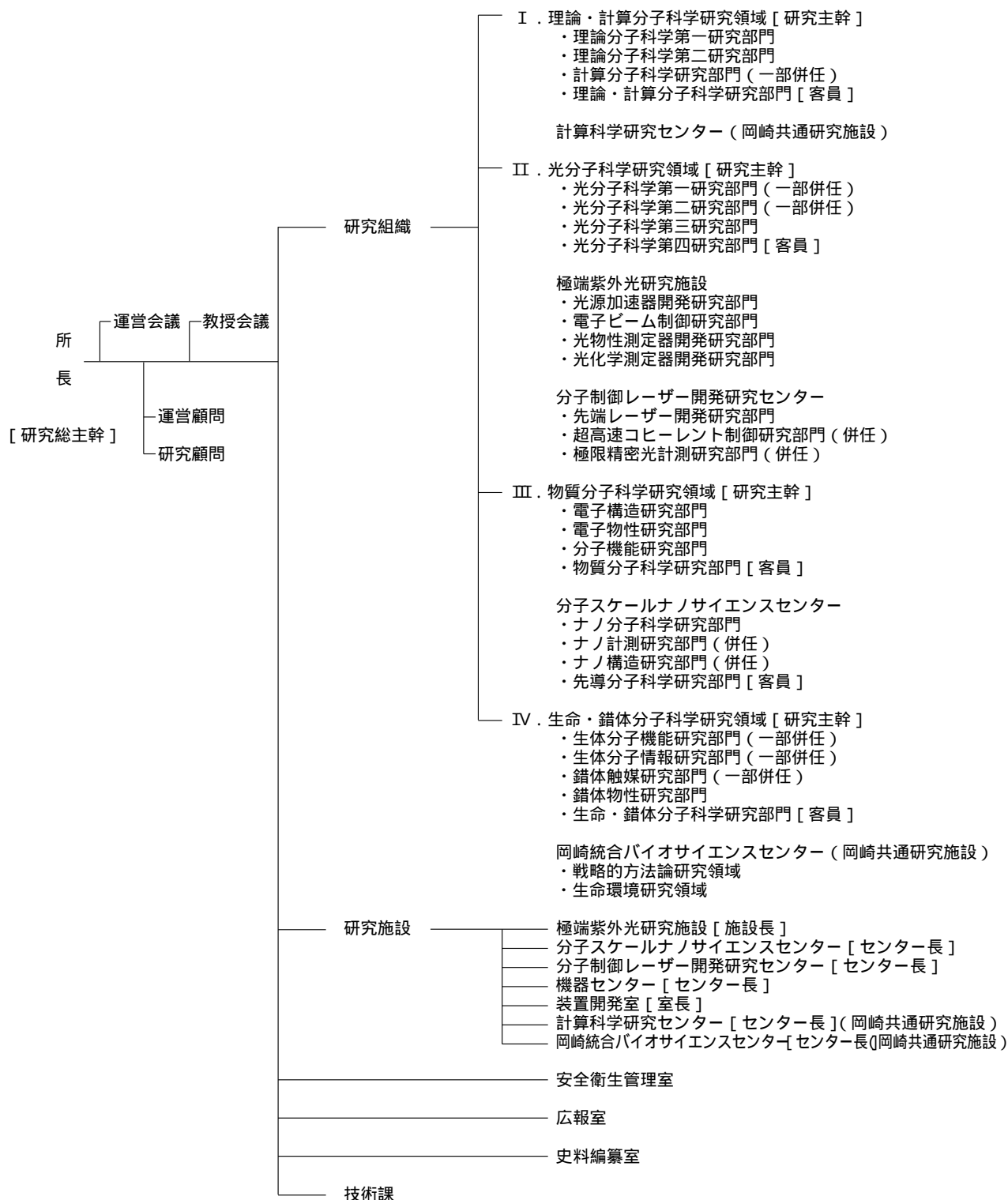
1979. 4. 1 分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され、管理局が総務部（庶務課，人事課，国際研究協力課），経理部（主計課，経理課，建築課，設備課），技術課に改組された。
1979. 11. 8 分子科学研究所創設披露式が挙行された。
1981. 4. 1 第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4.14 国立学校設置法の一部を改正する法律により，分子科学研究所と生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所，生理学研究所）は総合化され，岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され，管理局が岡崎国立共同研究機構管理局となり，技術課が研究所所属となった。
1982. 4. 1 研究施設として極端紫外光実験施設（UVSOR）が設置された。
1982. 6.30 極端紫外光実験棟第1期工事（1,281 m²）が竣工した。
1983. 3.30 極端紫外光実験棟第2期工事（1,463 m²）が竣工した。
1983. 4. 1 電子構造研究系に分子エネルギー変換研究部門が，分子集団研究系に分子集団動力学研究部門，極端紫外光研究部門が設置された。
1983. 11.10 極端紫外光実験施設ストレージリング装置に電子貯蔵が成功した。
1984. 2.28 極端紫外光実験施設の披露が行われた。
1984. 4.11 研究施設として，錯体化学実験施設（錯体合成研究部門，錯体触媒研究部門）が設置された。流動研究部門制度が発足し錯体化学実験施設に錯体合成研究部門が設置された。
1985. 5.10 分子科学研究所創設10周年記念式典が挙行された。
1987. 4. 1 第三代研究所長に井口洋夫分子科学研究所教授が任命された。
1989. 2.28 分子科学研究所南実験棟（3,935 m²）が竣工した。
1989. 5.28 分子集団研究系に界面分子科学研究部門が，関連領域研究系に有機構造活性研究部門（共に流動研究部門）が設置された。
1991. 3.27 極端紫外光実験棟（増築）（283 m²）が竣工した。
1991. 4.11 極端紫外光科学研究系（反応動力学研究部門）が設置された。基礎光科学，界面分子科学，極端紫外光の各研究部門は分子集団研究系から極端紫外光科学研究系へ振替された。
1993. 4. 1 第四代研究所長に伊藤光男前東北大学教授が任命された。
1994. 1.31 電子計算機センター棟（増築）（951 m²）が竣工した。
1995. 3.31 関連領域研究系有機構造活性研究部門（流動）が廃止された。
1995. 4. 1 理論研究系に分子基礎理論第四研究部門が設置された。
1995. 5.12 分子科学研究所創設20周年記念式典が挙行された。
1996. 5.11 関連領域研究系に分子クラスター研究部門（流動）が設置された。
1997. 4. 1 機器センター，極低温センター，化学試料室が廃止され，分子制御レーザー開発研究センター，分子物質開発研究センターが設置された。
1999. 4. 1 第五代研究所長に茅幸二慶應義塾大学教授が任命された。
2000. 4. 1 電子計算機センター，錯体化学実験施設錯体合成研究部門が廃止され，電子計算機室が設置された。共通研究施設として，統合バイオサイエンスセンター，計算科学研究センター，動物実験センター，アイソトープ実験センターが設置された。
2002. 2.28 山手2号館（統合バイオサイエンスセンター，計算科学研究センター）（5,149 m²）が竣工した。
2002. 3.11 山手1号館A（動物実験センター，アイソトープ実験センター）（4,674 m²）が竣工した。
2002. 4. 1 関連領域研究系分子クラスター研究部門（流動），極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門（流動），分子物質開発研究センターが廃止され，分子スケールナノサイエンスセンター（分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門，ナノ触媒・生命分子素子研究部門，ナノ光計測研究部門，界面分子科学研究部門（流動），分子クラスター研究部門（流動））が設置された。
2003. 8.20 山手4号館（分子科学研究所分子スケールナノサイエンスセンター）（3,813 m²）が竣工した。

2004. 3. 1 山手 5 号館 (NMR)(664 m²) が竣工した。
2004. 3. 8 山手 3 号館 (統合バイオサイエンスセンター)(10,757 m²) が竣工した。
2004. 4. 1 国立大学法人法により，国立天文台，核融合科学研究所，基礎生物学研究所，生理学研究所，分子科学研究所が統合再編され，大学共同利用機関法人自然科学研究機構が創設された。理論研究系が理論分子科学研究系に改組された。計算分子科学研究系（計算分子科学第一研究部門，計算分子科学第二研究部門，計算分子科学第三研究部門）が設置された。分子スケールナノサイエンスセンターに，先導分子科学研究部門が設置され，界面分子科学研究部門，分子クラスター研究部門が廃止された。極端紫外光実験施設が，極端紫外光研究施設に改組された。安全衛生管理室が設置された。岡崎共同研究機構管理局が，大学共同利用機関法人自然科学研究機構岡崎統合事務センターとなり，総務部（総務課，国際研究協力課），財務部（財務課，調達課，施設課）に改組された。第六代研究所長に中村宏樹分子科学研究所教授が任命された。
2005. 5.20 分子科学研究所創設 30 周年記念式典が挙行された。
2007. 4. 1 研究系及び錯体化学実験施設が廃止され，理論・計算分子科学研究領域（理論分子科学第一研究部門，理論分子科学第二研究部門，計算分子科学研究部門，理論・計算分子科学研究部門），光分子科学研究領域（光分子科学第一研究部門，光分子科学第二研究部門，光分子科学第三研究部門，光分子科学第四研究部門），物質分子科学研究領域（電子構造研究部門，電子物性研究部門，分子機能研究部門，物質分子科学研究部門），生命・錯体分子科学研究領域（生体分子機能研究部門，生体分子情報研究部門，錯体触媒研究部門，錯体物性研究部門，生命・錯体分子科学研究部門）の 4 つの研究領域が設置された。極端紫外光科学研究施設に，光加速器開発研究部門，電子ビーム制御研究部門，光物性測定器開発研究部門，光化学測定器開発研究部門が設置（名称変更）された。分子スケールナノサイエンスセンターに，ナノ分子科学研究部門，ナノ計測研究部門，ナノ構造研究部門が設置され，分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門，ナノ触媒・生命分子素子研究部門，ナノ光計測研究部門が廃止された。分子制御レーザー開発研究センターに，先端レーザー開発研究部門，超高速コヒーレント制御研究部門，極限精密光計測研究部門が設置された。機器センターが新たに設置された。広報室及び史料編纂室が設置された。
2010. 3.30 実験棟改修第 1 期工事（耐震及び全面改修）が竣工した。
2010. 4. 1 第七代研究所長に大峯巖京都大学福井謙一記念研究センターリサーチリーダーが任命された。
2011. 3.30 実験棟改修第 2 期工事（耐震及び全面改修）が竣工した。

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

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の方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，新たな組織として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，これらは基本的には法人全体の問題として，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。その委員は教育研究評議会と経営協議会の機構外委員を含め，機構外から機構長によって選ばれる。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（外国人評議員に代わる外国人運営顧問も含む）を発足させた。第一期中期計画期間（2004年度～2009年度）の6年間の運営顧問は国内4名，海外2名で運用してきたが，第二期中期計画期間（2010年度～2015年度）は当面，国際的な研究機関としての運営面を中心に諮問するため，海外2名（任期2年）で運用することになった。

外国人運営顧問（2009年度，2010年度）

STACE, Anthony John	英国ノッティンガム大学教授
SAUVAGE, Jean-Pierre	フランスストラスブール大学教授

2-4-2 研究顧問

分子科学研究所では，法人化の前から所長が研究面を諮問するために研究顧問制度を導入している。第一期中期計画期間では国内3名の研究顧問が，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，所長はその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してきた。第二期中期計画期間は国際的な研究機関としての研究面を中心に諮問することとし，国外委員も追加することとした。現在の研究顧問は以下の通りである。

研究顧問（2010年度）

FLEMING, Graham	カリフォルニア大学バークレー校研究担当副学長
柳 田 敏 雄	大阪大学教授

2-4-3 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 11 名の合計 21 名の組織である。所外委員は、分子科学研究者コミュニティである関連学会から派遣される委員会組織の学会等連絡会議で候補が選出され、所長が決定する。所内委員は、研究主幹、研究施設長を中心として、所長が決定する。運営会議は教授会議と連携をとりながら所長候補、研究教育職員人事、共同研究、その他の重要事項について審議、検討する。所長候補者の検討は、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。研究教育職員人事については、運営会議の中から選ばれた所外委員 5 名、所内 5 名で構成される人事選考部会の審議を運営会議の審議と見なす。一方、共同研究については、まず、運営会議の下に置かれた共同研究専門委員会で作成して、それについて運営会議で審議する。その他、共同研究以外の重要事項について運営会議の下に専門委員会を設定することが可能である。

運営会議委員（任期 2010.4-2012.3）（○：議長　◇：副議長）

上 村 大 輔	慶應義塾大学理工学部教授
江 幡 孝 之	広島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
佃 達 哉	北海道大学触媒化学研究センター教授
○ 富 宅 喜代一	神戸大学名誉教授
森 健 彦	東京工業大学大学院理工学研究科教授
山 縣 ゆり子	熊本大学大学院生命科学研究部教授
山 下 正 廣	東北大学大学院理学研究科教授
山 内 薫	東京大学大学院理学系研究科教授
渡 辺 芳 人	名古屋大学副総長、教授
青 野 重 利	岡崎統合バイオサイエンスセンター教授
魚 住 泰 広	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
齊 藤 真 司	理論・計算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
横 山 利 彦	物質分子科学研究領域教授

2-4-4 運営会議人事選考部会

分子科学研究所における研究教育職員候補者（教授、准教授、助教）は、“短期任用助教”の場合を除いて、専任、客員を問わず、全て公募による自薦、他薦の応募者の中から人事選考部会において選考する。人事選考部会の委員は 2 年ごとに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る。人事選考部会で審議した結果は運営会議の審議結果として取り扱われる。所長はオブザーバーとして人事選考部会に参加する。なお、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所内外から専門委員を加えることができる。また、助教候補者の選考、岡崎統合バイオサイエンスセンター（分子研兼務）教授・准教授候補者の選考に関しては、それぞれ専門委員を含む小委員会、専門委員会を人事選考部会の下に置いている。人事選考部会の審議結果は部会長より所長に答申され、所長は教授会議（後述）でその結果を報告し、可否の投票によって了解を得たうえで、最終決定する。

専任の教授，准教授を任用する場合には，まず教授会議メンバーによる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人事選考部会，教授会議で審議した後，公募に付する。助教から准教授，准教授から教授への内部昇任は原則として認められていない。助教は6年を目途に転出することを推奨されているが，法制化された任期があるわけではない。なお，平成11年1月から法人化直前の平成16年3月までに採用された助教（平成15年4月以前は研究系の助教だけ）には6年の任期（法制化された任期）と3年ごとの再任が規定されたが，法人化による見直しによって，6年の任期を越えて勤務を継続する場合は再任手続きを経たのち，法制化された任期はない助教に移行することとした。

人事選考部会委員（2010年度）（○：部会長）

江 幡 孝 之（広大院教授）	青 野 重 利（統合バイオ教授）
佃 達 哉（北大触媒セ教授）	大 森 賢 治（分子研教授）
富 宅 喜代一（神大名誉教授）	○小 杉 信 博（分子研教授）
森 健 彦（東工大院教授）	齊 藤 真 司（分子研教授）
山 下 正 廣（東北大院教授）	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（2010年度）（○：委員長）

岩 佐 義 宏（東大院教授）	岡 本 裕 巳（分子研教授）
鹿野田 一 司（東大院教授）	小 杉 信 博（分子研教授）
北 川 進（京大特定拠点教授）	唯 美津木（分子研准教授）
篠 原 久 典（名大院教授）	信 定 克 幸（分子研准教授）
○青 野 重 利（統合バイオ教授）	古 谷 祐 詞（分子研准教授）
魚 住 泰 広（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（2010年度）

【所外委員】

（日本化学会推薦）

上 村 大 輔（慶應大教授）

竜 田 邦 明（早大院教授）

戸 部 義 人（阪大院教授）

山 下 晃 一（東大院教授）

（日本物理学会推薦）

奥 田 雄 一（東工大院教授）

谷 村 吉 隆（京大院教授）

（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)

西 原 寛 (東大院教授)

(分子科学会推薦)

榎 敏 明 (東工大教授)

鈴木 俊 法 (京大院教授)

中 嶋 敦 (慶應大教授)

大 内 幸 雄 (名大院准教授)

田 原 太 平 (理化研主任研究員)

藤 井 正 明 (東工大教授)

【所内委員】

岡 本 裕 巳 (分子研教授)

西 信 之 (分子研教授)

見 附 孝一郎 (分子研准教授)

田 中 晃 二 (分子研教授)

平 田 文 男 (分子研教授)

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、教授会議は運営会議での選考経過も考慮しつつ独立に3名の候補者を選出し、運営会議に提案しその審議結果に対し教授会議として了承するかどうかを審議する。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 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	2011.1.5~1.7
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	2010.12.1, 2011.3.1, 3.3
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	2010.10.13 (持ち回り)

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運営に関する重要事項。	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名		2011.3.31
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名	委員会規則	2011.3.22
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	2010.7.29, 2011.1.27
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) 研究施設長 研究教育職員 8 技術職員若干名 所外の研究者及び技術者若干名 技術課長	委員会規則	2010.8.26
分子研安全衛生委員会	安全衛生管理に関する事項。	(原則) 各研究室から各 1 施設から必要数	安全衛生委 管理規則	2010.10.18
図書委員会	購入図書の選定。他			なし
広報委員会	Annual Review, 分子研レターズ等の 研究所出版物作成に関すること。 研究所公式ホームページの管理運営。	関係研究者のうちから 7		なし
分子研ネットワーク委員会	情報ネットワークの維持, 管理運営。	(原則) 各研究領域から各 1 施設から必要数		随時メール で対応
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。	各研究領域教授各 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, 研究領域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	2010.4.20, 8.5, 10.12, 11.17, 2011.2.10, 3.10
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, 研究領域及び研究施設 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	2010.12.17 (持ち回り)
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。	(原則) 各研究主幹, 大学院委員長, 正副専攻長及び正副研究科長		2010.4.2, 5.7, 6.3, 7.2, 9.2, 10.1, 11.5, 12.3, 2011.1.7, 2.3, 3.4
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。	各研究主幹及び各研究領域の 教授又は准教授 1 名	委員会要領	随時持ち回 り審議

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	2010.4.21, 5.18, 6.15, 7.20, 9.21, 10.19, 11.16, 12.21, 2011. 1.18, 2.15, 3.15
岡崎 3 機関職員福利厚生委員会	職員レクリエーションに関する事項及び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	2010.9.8
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	2011.3.16
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 3 室長が必要と認めた者 1	委員会規則	2010.5.19, 7.21, 10.25, 12.22, 2011.1.20
岡崎共同利用研究者宿泊施設委員会	宿泊施設（ロッジ）の運営方針・運営費に関すること。	担当責任所長 教授 1	委員会規則	2010.8.5, 2011.2.1
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	2010.9.3, 11.26, 2011.3.16
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。	館長，教授 1 准教授 1	委員会規則	2011.3.23
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	2010.4.21, 5.18, 6.15, 7.20, 8.23, 9.21, 10.19, 11.16, 12.21, 2011.1.18, 2.15, 3.15
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	2010.10.19
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	2010.5.24, 12.6, 2011.3.7
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	2011.2.16
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	2010.8.26, 2011.3.25
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	2010.7.22, 12.21
アイソトープ実験センター運営委員会	センターの管理運営に関する重要事項を審議するため。	教授又は准教授 2 技術課長	委員会規則	2010.6.30

セクシュアル・ハラスメント防止委員会	セクシュアル・ハラスメントの防止並びにその苦情の申出及び相談に対応するため。	所長が指名する者 3	委員会等規則	-
自然科学研究機構岡崎 3 機関食堂運営委員会	食堂の運営に関する事項を審議。	教授 1 技術課長	委員会規則	-
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		2010.6.8, 6.15, 8.19, 11.30
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	2010.7.12 (持ち回り)
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	-
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	2010.5.12, 7.14, 9.8, 11.10, 2011.1.12, 3.9
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	2010.5.26, 11.12, 2.23
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	2011.2.15 (持ち回り)
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	2010.12.28

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

2-5 構成員

2-5-1 構成員^{*}

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

理論・計算分子科学研究領域 研究主幹(併) 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
榊 茂 好	研究員
田 中 雅 人	専門研究職員
河東田 道 夫	専門研究職員
GUO, Jingdong	専門研究職員
渡 邊 秀 和	専門研究職員
LUO, Guangfu	専門研究職員
GHOSH, Manik Kumer	専門研究職員
信 定 克 幸	准教授
安 池 智 一	助 教
野 田 真 史	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
吉 田 紀 生	助 教
丸 山 豊	専門研究職員
PHONGPHANPHANEE, Saree	専門研究職員
SINDHIKARA, Daniel Jon	専門研究職員
米 満 賢 治	准教授
田 中 康 寛	助 教
西 岡 圭 太	研究員(IMS フェロー)

計算分子科学研究部門

齊 藤 真 司	教 授
金 鋼	助 教
東 雅 大	研究員(IMS フェロー)
矢ヶ崎 琢 磨	研究員
小 林 千 草	専門研究職員
江 原 正 博	教 授(兼)(計算科学研究センター)
福 田 良 一	助 教
田 代 基 慶	専門研究職員(分子科学研究所特別研究員 / 特任助教)
奥 村 久 士	准教授(兼)(計算科学研究センター)
伊 藤 暁	助 教
石 田 干 城	助 教
岡 崎 進	教 授(委嘱)(名大院工)
高 塚 和 夫	教 授(委嘱)(東大院総文)

理論・計算分子科学研究部門 (客員研究部門)

中 井 浩 巳	教 授 (早大先進理工)
谷 村 吉 隆	教 授 (京大院理)
西 山 桂	准教授 (島根大教育)

光分子科学研究領域 研究主幹(併) 大 森 賢 治

光分子科学第一研究部門

岡 本 裕 巳	教 授
成 島 哲 也	助 教
原 田 洋 介	研究員
LIM, Jong Kuk	研究員
大 島 康 裕	教 授
林 雅 人	研究員

光分子科学第二研究部門

大 森 賢 治	教 授
香 月 浩 之	助 教
武 井 宣 幸	助 教
後 藤 悠	研究員
VESHAPIDZE, Giorgi	研究員
IBRAHIM, Heide	学振外国人特別研究員 '09.5.11 ~ '10.8.10
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
見 附 孝一郎	准教授
片 柳 英 樹	助 教
菱 川 明 栄	教 授(委嘱)(名大院理)

光分子科学第四研究部門 (客員研究部門)

兒 玉 了 祐	教 授 (阪大院工)
解 良 聡	准教授 (千葉大院融合化)
上 野 貢 生	准教授 (北大電科研)
高 橋 俊 晴	准教授 (京大原子炉実験)

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
唯 美津木	准教授
邨 次 智	助教
MAITY, Niladri	研究員
ZHANG, Shenghong	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
中村 敏和	准教授
古川 貢	助教

分子機能研究部門

江 東 林	准教授
永井 篤志	助教
LIU, Xiaoming	研究員(IMS フェロー)
KOU, Yan	研究員
GUO, Zhaoqi	研究員
西村 勝之	准教授
飯島 隆広	助教
谷 生 道一	専門研究職員(分子科学研究所特別研究員 / 特任助教)

物質分子科学研究部門(客員研究部門)

中澤 康浩	教授(阪大院理)
関谷 博	教授(九大院理)
太田 信廣	教授(北大電科研)

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
杉原 隆広	特別訪問研究員
矢木 真穂	特別訪問研究員
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
長岡 靖崇	研究員

WANG, Zhihong	研究員
OBULI RAJ, Senthil Kumar	研究員
RAHMAN, MD. Mashiur	研究員
古 谷 祐 詞	准教授
木 村 哲 就	助 教

錯体触媒研究部門

魚 住 泰 広	教 授
大 迫 隆 男	助 教
ZHOU, Haifeng	研究員
浜 坂 剛	専門研究職員
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
皆 川 真 規	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
大 津 英 揮	助 教
小 林 克 彰	専門研究職員(分子科学研究所特別研究員 / 特任助教)
PADHI, Sumanta Kumar	研究員
BAI, Zhengshuai	研究員
宮 地 麻里子	研究員
NI, Yang	研究員

生命・錯体分子科学研究部門(客員研究部門)

西 原 寛	教 授(東大院理)
大 山 大	准教授(福島大共生システム理工)
上 野 隆 史	准教授(京大物質 - 細胞統合システム拠点)

極端紫外光研究施設 施設長(併) 加 藤 政 博

光源加速器開発研究部門

加 藤 政 博	教 授
阿 達 正 浩	助 教
森 龍 也	研究員
BIELAWSKI, Serge	学振外国人招へい研究者 '10.11.26 ~ 12.20

電子ビーム制御研究部門

全 炳 俊	助 教
-------	-----

光物性測定器開発研究部門

木 村 真 一	准教授
松 波 雅 治	助 教
宮 崎 秀 俊	研究員(IMS フェロー)
西 龍 彦	特別訪問研究員
OZKENDIR, Osman Murat	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
岩 山 洋 士	助 教

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

平 本 昌 宏	教 授
嘉 治 寿 彦	助 教
池 滝 何 以	研究員(IMS フェロー)
中 尾 聡	研究員
鈴 木 敏 泰	准教授
阪 元 洋 一	助 教
永 田 央	准教授
河 尾 真 宏	研究員(IMS フェロー)
今 宏 樹	研究員
櫻 井 英 博	准教授
東 林 修 平	助 教
崔 岡 亮 治	研究員(IMS フェロー)
北 原 宏 朗	研究員
YUDHA, S. Salprima	学振外国人招へい研究者 '10.7.3 ~ 9.30
MURUGADOSS, Arumugam	学振外国人特別研究員 '09.11.1 ~ '11.10.31
TAN, Qitao	学振外国人特別研究員 '10.8.5 ~ '12.8.4
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)
加 藤 晃 一	教 授(併)
唯 美津木	准教授(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) 岡 本 裕 巳

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
LOISEAU, Pascal Jerome	外国人研究職員(Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris) '10.6.1 ~ 11.30
石 月 秀 貴	助 教
秋 山 順	専門研究職員(分子科学研究所特別研究員/特任助教)
PAVEL, Nicolaie	研究員
佐 藤 庸 一	専門研究職員
常 包 正 樹	専門研究職員
JOLY, Simon	専門研究職員
BHANDARI, Rakesh	専門研究職員
酒 井 博	共同研究員
松 尾 和 樹	共同研究員
東 康 弘	共同研究員
藤 貴 夫	准教授
野 村 雄 高	助 教

超高速コヒーレント制御研究部門

大 森 賢 治 教 授(併)

極限精密光計測開発研究部門

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 センター長(併) 青 野 重 利

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 専門研究職員(分子科学研究所特別研究員/特任助教)

山 中 優 研究員

桑 島 邦 博 教 授

眞 壁 幸 樹 助 教

中 村 敬 専門研究職員(分子科学研究所特別研究員/特任助教)

CHEN, Jin 専門研究職員(特任助教)

竹 中 健 朗 研究員

藤 井 浩 准教授

倉 橋 拓 也 助 教(兼)

CONG, Zhiqi 研究員(IMS フェロー)

中 川 貴 文 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 専門研究職員(分子科学研究所特別研究員/特任助教)

植 草 義 徳 学振特別研究員

計算科学研究センター センター長(併) 平 田 文 男

齊 藤 真 司 教 授(兼)

金 鋼 助 教(兼)

江 原 正 博 教 授

福 田 良 一 助 教(兼)

奥 村 久 士 准教授

伊 藤 暁 助 教(兼)

石 田 干 城 助 教(兼)

大 野 人 侍 助 教

松 田 成 信	専門研究職員
石 谷 隆 広	専門研究職員

技術課 課 長 鈴 井 光 一

機器開発技術班 班 長 青 山 正 樹

機器開発技術一係

水 谷 伸 雄	係 長
矢 野 隆 行	主 任

機器開発技術二係

近 藤 聖 彦	主 任
高 田 紀 子	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	主 任
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	主 任

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

千 葉 寿	技術職員(委嘱)(岩手大技術部)
岡 野 泰 彬	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	主 任
中 野 路 子	技術職員
上 田 正	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 主 任

南 野 智 技術職員

寺 内 かえで 技術職員

* 整理日付は2010年12月1日現在。ただし、外国人研究者で2010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、本務所属を記載している。

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、助教は分子科学研究所教員の流動性を保つため原則として内部昇任が禁止されている（例外は2件のみ）。教授、准教授の研究グループの研究活動に関しては、毎年教授・准教授全員が所長によるヒアリング、また約3年おきに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、准教授の個人評価は confidential report の形で所長に報告されるなど、所長は教授、准教授の研究グループの活性化と流動性に心がけている。なお、助教が6年を越えて勤務を継続する場合は、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の状況を報告し、同会議で承認された後、教授会議では本人の属するグループの教授または准教授によって同様の手続きを行い、1年延長の承認を得るという手続きをとっている。

(2) 創立以来の人事異動状況（2011年1月1日現在）

専任研究部門等（分子研のみ 岡崎共通研究施設は含まず 休職・休業含む）

職 名 区 分	所 長	教 授	准教授	助 教	技術職員	分子科学研究所特別 研究員 / 特任助教	IMS フェロー
就任者数	7	44	75	252	154	11	205
転出者数	6	29	59	211	116	4	198
現 員	1	15(3)	16	41	38(1)	7	7

（ ）は委嘱で外数。

客員研究部門

職 名 区 分	教 授	准教授
就任者数	132	144
現 員	8	5

外国人客員研究部門

職 名 区 分	分子エネルギー変換研究部門 *		極端紫外光研究部門 *		外国人客員 **
	教 授	助教授	教 授	助教授	教 授
就任者数	34	29	34	22	8

* 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

2010.12.1

区分	所 長	教 授	准教授	助 教	小 計	技術職員	合 計
所長	1				1		1
理論・計算分子科学研究領域		3(5)	3(2)	9	15(7)		15(7)
光分子科学研究領域		4(2)	1(4)	6	11(6)		11(6)
物質分子科学研究領域		3(3)	4	9	16(3)		16(3)
生命・錯体分子科学研究領域		3(4)	1(5)	6(1)	10(10)		10(10)
研究施設		2(10)	7(2)	11	20(12)		20(12)
技術課						38(1)	38(1)
小計	1	15(24)	16(13)	41(1)	73(38)	38(1)	111(39)
岡崎統合バイオサイエンス センター		3	1	1(3)	5(3)		5(3)
計算科学研究センター		1(1)	1	(4)	2(5)		2(5)
合計	1	19(25)	18(13)	42(8)	80(46)	38(1)	118(47)

()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	2006 年度	2007 年度	2008 年度	2009 年度	2010 年度
人件費	1,295,705	1,230,465	1,187,815	1,207,802	1,224,363
運営費，設備費	1,859,207	1,993,108	2,200,634	2,090,047	2,125,872
施設費	0	7,140	0	607,060	575,589
合計	3,154,912	3,230,713	3,388,449	3,904,909	3,925,824

寄付金

区 分	2006 年度	2007 年度	2008 年度	2009 年度	2010 年度
件数（件）	15	10	62	43	4
金額（千円）	20,155	9,700	16,455	26,770	12,870

共通研究施設を除く

科学研究費補助金

区 分	2006 年度	2007 年度	2008 年度	2009 年度	2010 年度
件数（件）	69	71	64	74	66
金額（千円）	382,640	335,610	291,835	334,961	409,193

岡崎共通研究施設を除く
間接経費を含む
分担金を除く，交付決定額で集計

2010 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		0	0	0
特別推進研究		1	0	1
新学術領域研究	領域	9	2	11
新学術領域研究	課題	1	0	1
特定領域研究		6	2	8
挑戦の萌芽研究		2	0	2
若手研究	（ S ）	0	0	0
若手研究	（ A ）	3	0	3
若手研究	（ B ）	11	0	11
基盤研究	（ S ）	1	0	1
基盤研究	（ A ）	6	0	6
基盤研究	（ B ）	12	4	16
基盤研究	（ C ）	7	0	7
特別研究員奨励費		0	1	1
特別研究員奨励費	外国人	3	0	3
若手研究（スタートアップ）		3	1	4
奨励研究		1	0	1
合計		66	10	76

* 分担金受入件数を除く

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		0	0	0
特別推進研究		32,200	0	32,200
新学術領域研究	領域	36,900	26,600	63,500
新学術領域研究	課題	7,400	0	7,400
特定領域研究		22,900	5,300	28,200
挑戦の萌芽研究		1,700	0	1,700
若手研究	(S)	0	0	0
若手研究	(A)	9,800	0	9,800
若手研究	(B)	13,100	0	13,100
基盤研究	(S)	41,500	0	41,500
基盤研究	(A)	101,000	0	101,000
基盤研究	(B)	40,200	18,500	58,700
基盤研究	(C)	8,500	0	8,500
特別研究員奨励費		0	800	800
特別研究員奨励費	外国人	2,200	0	2,200
若手研究 (スタートアップ)		3,110	1,260	4,370
奨励研究		570	0	570
合計		321,080	52,460	373,540

* 間接経費を除く

* 分担金を除く，交付決定額で集計

共同研究

区 分	2006 年度	2007 年度	2008 年度	2009 年度	2010 年度
件数 (件)	16	13	21	15	10
金額 (千円)	40,832	25,571	51,430	33,292	29,982

2010 年 12 月 31 日現在

受託研究

区 分	2006 年度	2007 年度	2008 年度	2009 年度	2010 年度
国	5	4	5	4	4
独立行政法人	13	13	15	20	14
大学等	0	2	3	3	0
民間企業他	0	0	0	0	0
合計件数 (件)	18	19	23	27	18
合計金額 (千円)	560,172	708,673	813,550	755,710	637,819

(岡崎共通研究施設を含む)

2010 年 12 月 31 日現在

2-7 岡崎共通施設

2-7-1 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（2010.12）岡崎情報図書館は雑誌 1,504 種（和 292，洋 1,212），単行本 96,330 冊（和 14,806，洋 81,524）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 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。

2-7-2 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，国内外の学会会議はもとより研究教育活動にかかる各種行事に利用できる岡崎 3 機関の共通施設として平成 9 年 2 月に竣工した。センターは共同利用研究者の宿泊施設である三島ロッジに隣接して建てられている。

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

2-7-3 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及び明大寺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。また，明大寺ロッジでは総合研究大学院大学に所属する留学生用にも 8 室を割り当てている。

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
-------	----------------------

明大寺ロッジ	室数	シングル：14 室	ファミリー：3 室
--------	----	-----------	-----------

2-7-4 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，和室，会議室，トレーニング室等が設けられている。

2-8 その他

2-8-1 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、電極用肺胞状炭素ナノ構造体、神経細胞機能解析素子、マイクロチップレーザを用いたレーザ点火装置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 21 年度の発明件数は、個人有としたもの 0 件、機構有としたものの 7 件（実出願 7 件）、22 年度は、個人有 0 件、機構有 6 件（実出願 6 件）であった（23 年 1 月 31 日現在）。現在、現状に即した知的財産管理方針を整備しつつある状況である。

2-8-2 実験棟改修

創設期に設計された実験棟は、20 年を経た頃から研究所の新しい研究展開と共に様々な問題に直面し、配線配管や循環水システムを初めとする各種インフラの大幅な改修の必要性が生じたため、平成 10 年度より施設整備費補助金に 12 億 9 千万円の予算請求を行ってきたものの、バブルの崩壊に伴う予算の緊縮もあって長年現実のものとはならなかった。実験棟の耐震化という観点からの予算要求に変更し、ようやく 21 年度の概算要求で「卓越した研究拠点形成」に向けた改修ということで工事が認められた。

実験棟改修では耐震補強を行うのみでなく、これまでの実験棟が抱えていた水漏れ、排気、実験室内の異常高温による空調の非効率性等多くの問題を解決すべく工事が行われた。まず、5 階部分及び西側廊下は夏の温度上昇が極めて大きく、冷房コストなどエネルギー的な観点からも大きな問題となっていた。また、窓のサッシは変形がひどく非常時の開閉が出来ない状態であった。この為、今回は 2 重サッシと熱線や可視紫外域の一部を通しにくい特殊な窓ガラスを採用して、余分の太陽光加熱を防ぐようにしている。また、屋上に芝生マットを敷き、植物を通した水の吸収蒸散による建物の温度制御もエネルギー消費の低減の為に導入されている。1 階の南西部分は、磁気共鳴や低温実験に対応した床・天井シールドを施し、高さスペースにも工夫がされている。地下はレーザ実験や電子顕微鏡の利用に特化されている。また、化学合成実験は、5 階及び 4 階の一部に限られているが、排気設備の関係で南側に集中される。特に大きな変更点は、5 階の北東側の 5 スパンを居室部分として改装したことであろう。これまで廊下であった東側部分を居室部分、つまり、眺望の良いデスクスペースとして改造し、オフィスとしても活用される。この為、新しい廊下は建物中央に配置され、廊下との仕切りには磨りガラスを通して自然光が注ぐようになっている。廊下や扉、壁の色も明色系を採用し、ひと味違う雰囲気を作っている。

21 年度が北側、22 年度は南側部分の工事が行われ、ドアの桜色、音声案内エレベーターや人感照明など、全体的に「明るさとほんのりとした温かさ」が感じられる快適な空間が出来上がっている。今後の 30 年間の分野の変遷にも十分対応出来る改修が実施できた。

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へい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。また、分子科学研究所は21世紀東アジア青少年大交流計画（JENESYS; Japan-East Asia Network of Exchange for Students and Youths）に積極的に参画し、毎年、ASEAN諸国の拠点大学および公募で選考された若手研究者と大学院学生を招へいし人材の育成に努めている。

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。総合研究大学院大学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、それぞれ受託大学院生（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者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 ,ナノ構造体における電子・核・電磁場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 ,凝縮重系の新規電子状態の解明とその方法論開発

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 ,光誘起非線形現象，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
3 ,分子動力学シミュレーションにおける新しい手法の開発と生体系への応用

理論・計算分子科学研究部門（客員）

- 研究目的 1 ,大規模・高精度電子状態理論の開発
2 ,複雑液体や分子集合体の構造と緩和ダイナミクスに関する研究
——統計力学理論と実験との融合——
3 ,凝縮相中分子の量子ダイナミクスの基礎理論の展開と非線形分光への応用
- 研究課題 1 ,分割統治（DC）法の開発系への展開
2 ,局所応答分散力（LRD）法の開発系への展開
3 ,溶媒和ダイナミクス及び溶液内分子の発光スペクトルに関する統計力学・量子化学的研究
4 ,溶液中分子の自己組織化に関する理論的記述と，そのナノ材料合成技術への実験的展開

5 ,散逸系の階層型量子運動方程式による量子ダイナミクスの研究

6 ,多次元振動分光シミュレーションの方法論の開発と解析

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 ,超高強度レーザーを用いた高エネルギー密度科学
2 ,有機薄膜や表面界面の光物性

- 3 ,ナノ光リソグラフィ技術による金属ナノパターン作製技術の開発
- 4 ,電子加速器を用いた大強度テラヘルツ放射光の発生とその利用研究

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ーの研究
- 2 ,中赤外から真空紫外まで同時に発生する超広帯域フェムト秒パルス光源の開発
- 3 ,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。更に、高効率分子変換を可能にする触媒システムを開発する。

- 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 ,グラフェン壁を持つ多孔性電気伝導体の開発
 - 3 ,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
 - 4 ,高効率分子変換を実現する新規触媒表面の分子レベル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 ,二次元高分子及び骨格構造の構築と機能開拓

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 ,水素結合クラスターの構造とダイナミクス
 - 2 ,分子素子の基礎研究
 - 3 ,有機電荷移動錯体における電気伝導特性および磁気特性への光照射効果

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
 - 5 ,有機半導体の物性物理学の確立と高効率有機薄膜太陽電池の開発

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 ,高機能表面固定化錯体触媒や燃料電池触媒の創製とその時間／空間分解評価
 - 3 ,超高磁場 NMR 法の生体高分子高次構造解析への応用

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

生命・錯体分子科学研究領域

研究目的 生体系が示す多種多彩な機能の発現が、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。また、生体分子を利用した新たな分子デバイスの開発も行う。中心金属と配位子の組み合わせで金属錯体は多彩な機能を発現する。その特色を生かしてエネルギー・環境問題軽減のための高効率エネルギー変換、水中での有機化合物の分子変換、無機小分子の活性化を行う。

生体分子機能研究部門

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

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

生体分子情報研究部門

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

錯体触媒研究部門

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

錯体物性研究部門

- 研究目的
- 金属錯体を反応場とした化学エネルギーと電気エネルギーの相互変換と小分子の新しい反応性の開拓
- 研究課題
- 1 ,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
- 金属錯体の酸化還元反応を利用した分子デバイスの設計・合成と炭素資源の活用
- 研究課題
- 1 ,新規の1次元高分子錯体によるナノ分子ワイヤー合成と機能創成
 - 2 ,C1 資源としての一酸化炭素および二酸化炭素還元のための分子性触媒の開発

3-2 研究施設

極端紫外光研究施設

- 目 的 極端紫外光研究施設は、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，超高磁場 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 分子制御レーザー開発研究センターは，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リ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 年度に発足し，平成 22 年度より改組された大学連携研究設備ネットワークの実務を担当している。

装置開発室

- 目 的 装置開発室は，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 計算科学研究センターは、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等の研究者に提供し、個々の研究室の計算機等では不可能な大規模計算等に関する共同利用研究を支援するとともに、ワークショップなどを通して研究交流や人材育成の場を提供する。また、分子科学分野の計算に必要なライブラリの整備を進めるとともに、分子科学VO形成等新しいシステム運用技術の開発を行う。さらに、「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」や「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム分野2（新物質・エネルギー創成）」のプロジェクト研究に対し、研究の場・計算機資源を提供する。

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 2010 年度の実施状況

(1) 課題研究

(2) 協力研究

課 題 名 (前期)

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
超臨界流体のゆらぎ構造に関する統計力学的研究
溶液中における動的揺らぎに関する実験と理論の対応

慶應義塾大学理工学部 光武亜代理
国立熊本高等専門学校 松上 優
神戸大学自然科学系先端融合研究環分子 富永 圭介
フォトサイエンス研究センター

分子の低振動ダイナミクスに対するテラヘルツ時間分解分光装置の開発
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
数サイクル強レーザーパルスによるイオンコア - 光電子コヒーレント相関

(独)日本原子力研究開発機構 坪内 雅明
東京大学大学院新領域創成科学研究科 川合 真紀
(独)日本原子力研究開発機構量子ビーム 板倉 隆二
応用研究部門

色素増感太陽電池におけるチタニア膜表面のチタンの酸化状態の影響
色素増感太陽電池の作製プロセスと界面現象の解明
ラマン分光法による液相のクラスター構造に関する研究
赤外光解離分光による溶媒和バナジウムイオンの配位構造の解明
イリジウムダイマー固定化触媒の開発

法政大学文学部 中島 弘一
名古屋大学大学院工学研究科 森 竜雄
福岡教育大学教育学部 小杉健太郎
九州大学大学院理学研究院 大橋 和彦
金沢大学理工研究域 中井 英隆

γ -(ET)₃(ReO₄)₂ の高圧・低温下における電子物性測定
単層カーボンナノチューブの低温成長

東京工芸大学工学部 比江島俊浩
名城大学理工学部 丸山 隆浩

R_sEDO-TTF 系電荷移動錯体の分光学的研究

京都大学低温物質科学研究センター 石川 学

ずれ応力によるクロミズムに関する研究

山口東京理科大学工学部 井口 眞

双安定分子性錯体単結晶の光学的性質と構造解析

東京大学物性研究所 高橋 一志

光化学系 II 複合体の多周波パルス EPR 研究

東北大学多元物質科学研究所 松岡 秀人

CW 及びパルス ESR 法を用いた有機導体のスピンドイナミクス

首都大学東京大学院理工学研究科 溝口 憲治

光機能性部位を有するドナーの微小結晶構造解析と光電変換機能性の解明
量子スピン系の強磁場磁化および ESR 測定

大阪府立大学大学院理学系研究科 藤原 秀紀
神戸大学自然科学系先端融合研究環分子 太田 仁
フォトサイエンス研究センター

磁気的手法によるフェロセン系電荷移動錯体の電子状態研究

神戸大学大学院理学研究科 持田 智行

改変型光受容チャネルの神経細胞培養型イオンチャネルバイオセンサーへの応用

東北大学大学院生命科学研究所 石塚 徹

ナノ構造固体表面と細胞表面との相互作用の研究

横浜国立大学大学院工学研究院 荻野 俊郎

イオン輸送蛋白質の構造・機能相関研究

名古屋工業大学大学院工学研究科 神取 秀樹

フォトクロミックセンサー SRI の構造・機能相関研究

名古屋大学大学院理学研究科 須藤 雄気

常温接合を用いた高効率・高出力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
電子蓄積リングトッパアップ運転による自由電子レーザー大強度化の研究	名古屋大学大学院工学研究科	保坂 将人
テラヘルツコヒーレント放射光の時間領域分光	大阪大学大学院基礎工学研究科	芦田 昌明
3 原子分子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
高分解能電子分光による内殻励起状態の崩壊過程の研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
アルカリドープ 1 次元ピーナツ型ナノカーボンの <i>in situ</i> 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
赤外顕微鏡を用いた多元極限下での固体電子状態の研究	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
高効率有機・無機ハイブリッド太陽電池に関する研究	豊橋技術科学大学生産システム工学系	伊崎 昌伸
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
固体担持バイメタリック触媒の創成	琉球大学理学部	鈴鹿 俊雅
酸化活性スルフィド種の創成と反応機構の解明	大阪大学大学院工学研究科	杉本 秀樹
グループ II 型シャペロニンの構造変化及びタンパク質フォールディングの速度論的解析	東京農工大学大学院共生科学技術研究院	養王田 正文
酵素の構造ダイナミクスと機能相関の研究	広島大学大学院理学研究科	大前 英司
RNA 成熟システム複合体形成の前定常状態解析	愛媛大学大学院理工学研究科	堀 弘幸
質量選別・運動量画像計測法によるパーフルオロシクロブタンの解離	広島大学大学院理学研究科	岡田 和正
光電子分光による和鉄（日本刀）の酸化プロセスのその場観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
金属ナノ構造体を用いたポリジアセチレン LB 膜の近接場光励起光重合反応の検討	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ベンゼン置換体の構造とダイナミクス	京都大学大学院理学研究科	小若 泰之
超高速非線形分光法による水溶液の非調和ダイナミクスに関する理論的研究	京都大学大学院理学研究科	小野 純一
2 次元紫外・可視分光法の理論的研究	早稲田大学理工学術院	中井 浩巳
塩化ナトリウム水溶液の氷化過程とテラヘルツ分光，K ⁺ チャネルのイオン透過とゲーティングの微視的機構	福井大学医学部	炭 竈 享司
球状蛋白質のフォールディング機構についての研究（5）	名古屋大学大学院理学研究科	榎 互介
レーザー誘起ブレイクダウンを用いた着火に関する研究	大阪大学大学院工学研究科	赤松 史光
高温超伝導体コヒーレント制御	東京工業大学応用セラミックス研究所	中村 一隆
NMR 法と MD 計算による GMI-Aβ 系の構造アンサンブルの解析	(独)産業技術総合研究所	亀田 倫史
静電ポテンシャルの揺らぎの非線形性と電極反応	九州大学大学院理学研究院	秋山 良
大気圧低温プラズマによる生体材料表面処理と表面解析	大阪大学大学院工学研究科	浜口 智志
波長変換光源用超小型レーザー励起システムの開発	東京大学工学部	松下 智紀
分子型量子ドットセルオートマトンデバイスの動作解析と理論設計	工学院大学工学部	徳永 健
遷移金属触媒を添加しない Suzuki-Miyaura カップリングプロセスの機構解明	東北大学大学院薬学研究科	土井 隆行
超音波噴霧により生成する巨大クラスターの光電子スペクトル	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	下條 竜夫
高出力 Yb 添加超短パルスレーザー開発の為に結晶接合	電気通信大学レーザー新世代研究センター	戸倉川正樹

課 題 名（後期）

代 表 者

2 次元紫外・可視分光法の理論的研究	早稲田大学理工学術院	中井 浩巳
K ⁺ チャネルのイオン透過とゲーティングの微視的機構	福井大学医学部	炭 竈 享司
アミド水溶液の分子間ダイナミクスに関する理論的研究	京都大学大学院理学研究科	小野 純一
溶液中における動的揺らぎに関する実験と理論の対応	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	富永 圭介
天然及び修飾蛋白質群の溶液中における立体構造と溶媒効果に関する統計力学的検討	信州大学ファイバーナノテク国際若手研究者育成拠点	佐藤 高彰
誘電体結晶におけるインコメンシュレート変調出現の構造的起源～統計力学的解析法を用いて～	山口大学教育学部	重松 宏武
金属ナノ構造体を用いたポリジアセチレン LB 膜の近接場光励起光重合反応の検討	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ベンゼン置換体の構造とダイナミクス	京都大学大学院理学研究科	小若 泰之
分子の低振動ダイナミクスに対するテラヘルツ時間分解分光装置の開発	(独)日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門	坪内 雅明
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	(独)理化学研究所	加藤 浩之
超音波噴霧により生成する巨大クラスターの光電子スペクトル	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	下條 竜夫
ZnO 基板上的単層カーボンナノチューブ成長	名城大学理工学部	丸山 隆浩
数サイクル強レーザーパルスによるイオンコア・光電子コヒーレント相関	(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
色素増感太陽電池の作製プロセスと界面現象の解明	名古屋大学大学院工学研究科	森 竜雄

多環芳香族炭化水素 (PAH) 励起分子のピコ秒ダイナミクス	京都大学大学院理学研究科	馬場 正昭
γ -(ET) ₃ (ReO ₄) ₂ の高圧・低温下における電子物性測定	東京工芸大学工学部	比江島俊浩
R _x EDO-TTF 系電荷移動錯体の分光学的研究	京都大学低温物質科学研究センター	石川 学
ずれ応力によるクロミズムに関する研究	山口東京理科大学工学部	井口 眞
光化学系 II 複合体の多周波パルス EPR 研究	東北大学多元物質科学研究所	松岡 秀人
分子間相互作用ブローブ N@C ₆₀ の電子スピン共鳴測定	京都大学高等教育研究開発推進機構	加藤 立久
環拡張ポルフィリンの金属錯体及びサブポルフィリンラジカルの磁気特性の解明	京都大学大学院理学研究科	小出 太郎
量子スピン系の強磁場磁化および ESR 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
有機導電体とイオン伝導体の磁性における光照射効果	北海道大学電子科学研究所	飯森 俊文
グラフェン表面とタンパク質・細胞表面との相互作用の研究	横浜国立大学大学院工学研究院	荻野 俊郎
大気圧低温プラズマによる生体材料表面処理と表面解析	大阪大学大学院工学研究科	浜口 智志
イオン輸送蛋白質の構造・機能相関研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	神取 秀樹
フォトクロミックセンサー SRI と新規ロドプシンタンパク質の構造・機能相関研究	名古屋大学大学院理学研究科	須藤 雄気
水分子ダイナミクス計測のためのテラヘルツ波光源開発	(独)理化学研究所基幹研究所	南出 泰亜
常温接合を用いた高効率・高出力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
超短パルス光波制御技術のモード同期マイクロチップレーザーへの展開	慶應義塾大学先端研究センター	大石 裕
磁性フォトリソニック結晶を用いたマイクロチップレーザーの開発	豊橋技術科学大学大学院工学研究科	井上 光輝
レーザー誘起ブレイクダウンをを用いた着火に関する研究	大阪大学大学院工学研究科	赤松 史光
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
自由電子レーザーのシーディングに関する基礎的研究	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	保坂 将人
テラヘルツコヒーレント放射光の時間領域分光	大阪大学大学院基礎工学研究科	芦田 昌明
有機分子の光解離反応と同位体分別に及ぼす円偏光紫外線の効果	大阪大学大学院理学研究科	藪田 ひかる
高分解能電子分光による内殻励起状態の崩壊過程の研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
光電子分光による和鉄 (日本刀) の酸化プロセスのその場観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
赤外顕微鏡を用いた多元極限下での固体電子状態の研究	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
高効率有機・無機ハイブリッド太陽電池に関する研究	豊橋技術科学大学大学院工学研究科	伊崎 昌伸
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
混合発光性錯体の構造と物性解明	富山大学大学院理工学研究部	柘植 清志
高分子担持金属ナノ粒子を用いた水中での触媒反応	大阪工業大学工学部	大高 敦
固体担持バイメタリック触媒の創成	琉球大学理学部	鈴鹿 俊雅
複核ルテニウム錯体による水の酸化機構の解明	立教大学理学部	和田 亨
アミノラジカル錯体の生成機構の解明と反応触媒としての応用	早稲田大学創造理工学部	宮里 裕二
酸化活性スルフィド種の創成と反応機構の解明	大阪大学大学院工学研究科	杉本 秀樹
グループ II 型シャペロニンの構造変化及びタンパク質フォールディングの速度論的解析	東京農工大学大学院共生科学技術研究院	養王田正文
RNA 成熟システム複合体形成の前定常状態解析	愛媛大学大学院理工学研究科	堀 弘幸
NMR 法と MD 計算を用いたガングリオシド - アミロイド β 相互作用系における構造アンサンブルの解析	(独)産業技術総合研究所	亀田 倫史
組換え GaussiaLuciferase に於ける SS 結合形成による構造多形成及び「揺らぎ」の NMR 解析	東京農工大学大学院工学研究院	黒田 裕
シリカ担持 SMAP 触媒の反応挙動解析と触媒設計への展開	北海道大学大学院理学研究院	澤村 正也
遷移金属触媒を添加しない Suzuki-Miyaura カップリングプロセスの機構解明	東北大学大学院薬学研究科	土井 隆行
プロトン性電荷移動錯体の電荷秩序状態の解明	東京大学物性研究所	高橋 一志
高温超伝導体のコヒーレント制御	東京工業大学応用セラミックス研究所	中村 一隆
III-V 窒化物半導体 InN の有効質量の決定	千葉大学大学院工学研究科	石谷 義博
分子型量子ドットセルオートマトンデバイスの動作解析と理論設計	工学院大学工学部	徳永 健
Magnetic-field-control of the Rashba splitting in BiTeI	東京大学大学院工学系研究科	LEE, Jong Seok
イオン液体中におけるニトロキシドラジカル回転拡散の高周波 EPR 研究	東京工業大学大学院理工学研究科	河合 明雄
水溶液における溶媒の非線形応答の分子動力学シミュレーション	九州大学大学院理学研究院	久保田陽二
単核鉄 5 価オキソ種の生成とキャラクタリゼーション	同志社大学理工学部	人見 穰
生体分子を扱う分子動力学計算における温度制御手法の解析	(独)産業技術総合研究所ナノシステム研究部門	森下 徹也
金 - シリコンナノスリットポア構造の光学的評価	慶應義塾大学理工学部	斎木 敏治

(3) 研究会

プラズモン増強光電場の分子科学研究への展開

2010年6月18日(金)～19日(土) 岡崎コンファレンスセンター 小会議室

6月18日(金)

- 13:20-13:30 はじめに
- 13:30-13:50 横田幸恵(北大電子研)
「制御されたナノギャップ金構造による表面増強ラマン散乱特性」
- 13:50-14:10 池田勝佳(北大院理)
「構造規制界面におけるプラズモニック光化学の展開」
- 14:10-14:30 菅原美博(富士フィルム(株))
「球形ボイド型プラズモニック結晶の光学特性」
- 14:45-15:05 岡本敏弘(徳島大院)
「金属分割リング構造による増強光電場」
- 15:05-15:25 藤原英樹(北大電子研)
「微小共振器構造を用いた光増強反応場の構築」
- 15:25-15:45 信定克幸(分子研)
「ナノ構造体における局所電子励起と機能性発現の分子論」
- 15:45-16:05 井村考平(早大理工)
「ナノ構造体に励起されるプラズモン波動構造と異常光学特性」
- 16:20-16:40 小野寺恒信(東北大多元研)
「 π 共役系高分子と金属ナノ構造からなる複合体の構造制御」
- 16:40-17:00 鍋谷 悠(首都大都市環境)
「分子系ナノ包接環境における光反応と機能の発現」
- 17:00-17:20 並河英紀(北大院理)
「金属ナノ構造基板を利用した微小場分子拡散制御」

6月19日(土)

- 9:00- 9:20 近藤敏彰(神奈川科学技術アカデミー)
「ナノホールアレーにもとづく金属ナノ構造体の形成と光電場増強場への応用」
- 9:20- 9:40 一井 崇(京大院工)
「走査プローブリソグラフィによる金ナノ構造の精密配置」
- 9:40-10:00 江口美陽(筑波大院)
「金ナノ粒子多量体の形成と表面プラズモン結合モードの直接観察」
- 10:10-10:30 上野貢生(北大電子研)
「プラズモン増強を利用した光化学反応場の創成」
- 10:30-10:50 坂井伸行(東大生産研)
「金属ナノ粒子 - 酸化チタン界面における光誘起電荷分離」
- 10:50-11:10 秋山 毅(滋賀県立大)
「プラズモニック金属ナノ構造電極を用いた光電変換システムの構築と評価」
- 11:10-11:30 齊藤健一(広大院理)
「三原色発光するSiナノ結晶の生成と金ナノ構造体による発光強度増強」
- 11:30-11:50 増尾貞弘(関学大院理工)
「局在プラズモンと相互作用した単一量子ドットの光子アンチバンチング挙動」
- 11:50-12:10 畑中耕治(東大院理)
「金コロイド溶液とフェムト秒レーザーパルスの構造で操るX線発生」
- 12:10-12:20 おわりに

グリーンイノベーションのための表面・界面化学

2010年10月5日(火)～6日(水) 分子科学研究所 研究棟201号室

10月5日(火)

- 10:30-10:50 松本吉泰(京都大学大学院理学研究科)
はじめに
- 10:50-11:20 工藤昭彦(東京理科大学理学部)
「水分解のための光触媒材料の開発」
- 11:20-11:50 堂免一成, 久保田純(東京大学大学院工学系研究科)
「非酸化物系触媒による水の全分解」

11:50-12:20	池田 茂，八木哲郎，中村隆幸，Lee Sun Min，原田隆史，松村道雄（大阪大学太陽エネルギー化学研究センター） 「電気化学法により作製した半導体薄膜による太陽エネルギー変換」
13:30-14:00	寺村謙太郎，穴戸哲也，田中庸裕（京都大学次世代開拓研究ユニット，京都大学大学院工学研究科） 「固体表面上での分子の光活性化～TiO ₂ 上でのNH ₃ の光活性化を例にして～」
14:00-14:30	黒田泰重，板谷篤司，湯村尚史，小林久芳（岡山大学，京都工芸繊維大学） 「銅イオン交換 MFI- 型ゼオライトを用いた小分子の活性化」
14:30-15:00	福岡 淳（北海道大学触媒化学研究センター） 「メソポーラスシリカの触媒応用——CO 選択酸化と重合」
15:00-15:30	唯美津木，邨次 智，串田祐子，石黒 志（分子科学研究所） 「新規固定化 Ir 触媒の表面構造変化と in-situ 構造解析」
15:50-16:20	中村潤児，近藤剛弘（筑波大学数理物質科学研究科） 「界面相互作用による白金触媒の活性制御」
16:20-16:50	大西 洋（神戸大学理学研究科） 「太陽光で動作する光触媒の分光計測」
16:50-17:20	吉信 淳，小坂谷貴典，吉本真也，向井孝三（東京大学物性研究所） 「飽和炭化水素と遷移金属表面の相互作用」
17:20-17:50	山本 達，柿崎明人，松田 巖（東京大学物性研究所） 「時間分解軟 X 線光電子分光法による表面ダイナミクスの研究：気体雰囲気下測定への展開」
18:30-	懇親会

10月6日（水）

9:00- 9:30	田中信夫，吉田健太，齋藤 晃（名古屋大学エコトピア科学研究所，JFCC ナノ構造研究所） 「環境制御型透過電子顕微鏡法を用いた光触媒材料研究」
9:30-10:00	小森文夫（東京大学物性研究所） 「STM を用いた局所反応の電子励起とその観察」
10:00-10:30	奥山 弘，熊谷 崇，八田振一郎，有賀哲也，濱田幾太郎（京都大学大学院理学研究科，東北大学 WPI-AIMR） 「水素結合ダイナミクスの実空間観測」
10:50-11:20	福岡剛士（金沢大学フロンティアサイエンス機構） 「原子間力顕微鏡を用いた固液界面の原子分解能イメージング」
11:20-11:50	宮本良之（NEC グリーンイノベーション研究所） 「光起電現象に関わる第一原理計算」
13:00-13:30	館山佳尚，隅田真人，胡春平（物材研究機構，JST，東京理科大） 「TiO ₂ /H ₂ O 界面における吸着構造，水素結合および酸化還元能」
13:30-14:00	森川良忠（大阪大学大学院工学研究科） 「第一原理シミュレーションによるインテリジェント触媒の自己再生機構の解明」
14:00-14:30	山下晃一，Giacomo Giorgi（東京大学大学院工学系研究科） 「酸化チタン表面における励起状態の理論的研究」
14:50-15:20	宗像利明，山田剛司（大阪大学大学院理学研究科） 「半導体上の吸着分子の電子励起過程」
15:20-15:50	近藤 寛，吉田真明，阿部 仁（慶應義塾大学理工学部化学科） 「表面内殻分光による in-situ 触媒反応解析」
15:50-16:20	久保田純，吉田真明，堂免一成（東京大学大学院工学系研究科） 「赤外分光法を用いた水の全分解のための光触媒の機能の解明」

分光学が係わるクラスター科学および機能性ナノ構造体科学の将来展望 2011年1月7日（金）～8日（土） 岡崎コンファレンスセンター

1月7日（金）

13:00-13:10	Nobuyuki Nishi (IMS) Opening Remarks
13:10-14:00	Prof. Anthony J. Stace (School of Chemistry, Univ. of Nottingham) “From clusters to nanoparticles via a single experiment”
14:00-14:50	Prof. Hisanori Shinohara (Dept. of Chem., Nagoya Univ.) “Quantum Metal–Nanowires in Carbon Nanotubes”
14:50-15:20	Prof. Hiroshi Sekiya (Dept. of Chem., Kyushu Univ.) “Spectroscopic study of proton transfer reactions in hydrogen-bonded networks”

15:35-16:00	Prof. Klaus Muller-Dethlefs (The Photon Science Institute, Univ. of Manchester) “ZEKE molecular spectroscopy to Rydberg plasma”
16:00-16:30	Prof. Asuka Fujii (Dept. of Chem., Tohoku Univ.) “Infrared spectroscopy of large-sized water clusters”
16:30-17:00	Prof. Atsushi Nakajima (Dept. of Chem., Keio Univ.) “Soft- and Reactive-Landing of Organometallic Sandwich Complexes onto a Self-Assembled Monolayer”
17:00-17:30	Prof. Tatsuya Tsukuda (Catalysis Research Center, Hokkaido Univ.) “Size-Specific Catalysis of Gold Clusters”
17:30-18:00	Prof. Masaharu Tsuji (Inst.material for Materials Chem. and Engineering, Kyushu Univ.) “Shape Evolution of Novel Silver Nanostructures in PVP-Assisted DMF Solution”
18:00-18:25	Prof. Kazuo Watanabe (Dept. of Chem., Tokyo Univ. of Science) “Plasmon enhancement of photoreactions of NO dimers on silver nanoparticles on thin alumina films”

1月8日(土)

Part Two: Japanese Session

8:45- 9:15	永田 敬(東京大学総合文化) クラスターは凝縮相を超えられるか——水和電子クラスターを例として——
9:15- 9:45	江幡孝之(広島大学理) 機能性分子のゲスト分子包接機構に関するレーザー分光および理論化学的研究
9:45-10:15	寺崎 亨(九州大学理) イオントラップを用いたサイズ選別クラスターの反応・分光
10:15-10:35	江頭和宏((株)コンボン研究所) フォントラップ分光法による質量選別したクラスターの光吸収の直接測定
10:45-11:10	美斎津文典(東北大学理) サイズおよび異性体を選別したクラスターイオンの化学反応
11:10-11:35	大橋和彦(九州大学理) 気相赤外分光でみた金属イオンの溶媒和構造
11:35-11:55	仁部芳則(福岡大学理) アミノピラジン・水クラスターの赤外吸収スペクトル
11:55-12:15	井口佳哉(広島大学理) 極低温イオントラップを用いた、ホスト・ゲスト錯体の気相分光
12:15-12:35	迫田憲治(九州大学理) 水和ホルムアニリドの赤外分光：エントロピー駆動による水和ネットワークの再配向の観測
13:20-13:45	見附孝一郎(分子研) フラーレンから生成する炭素クラスターイオンの質量分解速度画像観測
13:45-14:10	真船文隆/宮島 謙(東京大学総合文化) クラスターによる触媒設計
14:10-14:40	太田信廣(北海道大学電子科学研究所) 半導体ナノ粒子の吸収，発光への外部電場効果
14:40-15:05	中林孝和(北海道大学電子科学研究所) 蛍光寿命イメージングを用いた単一細胞計測の展開
15:05-15:25	日野和之(愛知教育大学理科教育) 液晶分子が結合した金ナノロッドの外部電場による配列制御
15:35-16:05	脇坂昭彦(産業技術総合研究所環境管理技術) 液体に特有なクラスター形成と液体の物性
16:05-16:25	小杉健太郎(福岡教育大学理科教育) ラマン分光法による液相のクラスター形成に関する研究
16:25-16:45	十代 健(分子研) 銅アセチリドの自己組織的ナノワイヤー生成から応用展開まで
16:45-17:05	西條純一(分子研) アセチリド錯体を用いたナノ構造の作成
17:05-17:30	西 信之(分子研) 総括

金属錯体の機能化の現状と将来展望

2011 年 1 月 8 日 (土) ~ 9 日 (日) 岡崎コンファレンスセンター 小会議室

1 月 8 日 (土)

- 13:00-14:00 Jean-Pierre Sauvage (Universite de Strasbourg):
From Copper-Complexed Interlocking Compounds to Molecular Receptors and Machines
- 14:00-14:30 Shunichi Fukuzumi (Osaka University):
Bioinspired Artificial Photosynthesis
- 14:30-14:55 Takashi Hayashi (Osaka University):
Construction and Characterization of Supramolecular Hemoprotein Polymer
- 14:55-15:25 Kazuyuki Tatsumi (Nagoya University):
Chemistry of Reductases
- 15:40-16:05 Yoshihito Watanabe (Nagoya University):
Molecular Design of Metalloenzymes: Three Approaches for the Introduction of Novel Functions
- 16:05-16:30 Hideki Sugimoto and Shinobu Itoh (Osaka University):
Preparation and Reactivity of Heavy Transition Metal Complexes with Multiply Bonded Chalcogen Atoms
- 16:30-16:55 Mitsuhiro Shionoya (The University of Tokyo):
A New Trend in Coordination-Driven Supramolecular Assemblies
- 16:55-17:20 Ho-Chol Chang (Hokkaido University):
Synchronic Transformation of Molecular States and Macroscopic Phases
- 17:20-17:45 Sota Sato, Makoto Fujita (The University of Tokyo):
Magnetically Aligning Complexes Self-Assembled from Many Building Blocks
- 17:45-18:10 Hiroshi Nishihara (The University of Tokyo):
Surface Coordination Programming of Electro-Functional Molecular Wires
- 18:10-18:40 Masahiro Yamashita (Tohoku University):
Molecular Spintronics Based on Single-Molecule Quantum Magnets

1 月 9 日 (日)

- 9:00- 9:25 Kentaro Tanaka (Nagoya University):
Programmable Arraying of Metal Complexes on Bio-Inspired and Supramolecular Templates
- 9:25- 9:50 Akiko Hori (Kitasato University):
Fluorinated Complexes toward Self-Assembled Materials
- 9:50-10:15 Miki Hasegawa (Aoyama Gakuin University):
Enhanced Polarized Photo-Emission of the Lanthanide LB film
- 10:40-11:00 Yoshio Hisaeda (Kyushu University):
Bioinspired Catalysts with Metalloenzyme Functions
- 11:05-11:30 Ken Sakai (Kyushu University):
Mechanistic Insights into Photoinduced and Thermal Hydrogen Evolution Reactions Catalyzed by Platinum(II)-Based Molecular Systems
- 11:30-12:00 Susumu Kitagawa (Kyoto University):
Coordination Polymers having Soft Porosity
- 13:00-13:25 Koji Tanaka (IMS):
Water Oxidation by Dinuclear Ru Complexes
- 13:25-13:50 Teppei Yamada and Hiroshi Kitagawa (Kyoto University):
Proton Conductivity of Precisely Controlled Hydrogen Bond Networks Constructed in Metal–Organic Frameworks
- 13:50-14:15 Nobuo Kimizuka (Kyushu University):
From Molecular to Macroscopic Self-Assembly of Coordination Polymers
- 14:15-14:40 Hideki Masuda (Nagoya Institute of Technology):
Electro-Chemical Reduction of Dioxygen by Diiron(II) Complex Modified on Gold Electrode in an Aqueous Media
- 15:05-15:30 Takane Imaoka and Kimihisa Yamamoto (Tokyo Institute of Technology):
Potential-Programmed Dendrimers for Controlled Electron Transfer
- 15:30-15:55 Hiroki Oshio (University of Tsukuba):
Metal Complexes with Multi-Bistability

大強度テラヘルツ光の発生と利用研究

2011 年 1 月 13 日（木）～ 14 日（金） 分子科学研究所 研究棟 201 号室

1 月 13 日（木）

- 13:30-13:40 木村真一（UVSOR）
はじめに（趣旨説明）
- 13:40-14:20 G. L. Carr (BNL)
Intense Coherent THz Pulses from the NSLS Source Development Laboratory Photo-injected Linac and Applications in Ultra-fast Material Dynamics
- 14:20-14:40 島田美帆（KEK）
「cERL で期待されるテラヘルツ光源」
- 14:40-15:05 加藤政博（UVSOR）
「電子蓄積リングによるテラヘルツ光発生」
- 15:05-15:30 芦田昌明（阪大基礎工）
「コヒーレントシンクロトロン放射の電場検出とその応用」
- 15:50-16:15 築山光一（理科大 FEL）
「東京理科大学赤外自由電子レーザー研究センターの現状と課題」
- 16:15-16:40 阪部周二（京大化研）
「高強度レーザーとレーザープラズマ放射線科学の発展とテラヘルツ発生」
- 16:40-17:0 服部利明（筑波大数理）
「非線形時間領域 2 次元テラヘルツ分光：実験の提案と理論解析モデル」
- 17:05-17:30 斗内政吉（阪大レーザー研）
「機能性酸化物質電子材料のテラヘルツ分光」
- 17:30-18:00 田中耕一郎（京大理）
Terahertz Nonlinear Spectroscopy in Solids
- 18:30-20:30 懇親会

1 月 14（金）

- 9:00- 9:25 黒田隆之助（産総研）
「S バンド小型電子リニアックを用いた高強度 テラヘルツ光源の開発と応用」
- 9:25- 9:50 磯山悟朗（阪大産研）
「テラヘルツ FEL の開発」
- 9:50-10:10 高橋俊晴（京大原子炉）
「京大炉ライナックのコヒーレント放射を光源としたサブテラヘルツ近接場」
- 10:10-10:35 浜 広幸（東北大電子光センター）
「t-ACTS（test Accelerator as Coherent THz Source）計画」
- 10:55-11:20 萩行正憲（阪大レーザー研）
「テラヘルツ波とメタマテリアル」
- 11:20-11:50 川瀬晃道（名大エコ研）
「新奇テラヘルツ光源とイメージング応用」
- 11:50-12:15 谷 正彦（福井大遠赤センター）
「テラヘルツパルス光を用いたイメージング手法とその応用」
- 13:30-14:00 猿倉信彦（阪大レーザー研）
「テラヘルツ電磁波のパラメトリック増幅 CPA の可能性についての検討」
- 14:00-14:25 島野 亮（東大理）
「カーボンナノチューブ及び低次元有機導体の高強度テラヘルツ波照射効果」
- 14:25-14:50 森 龍也（UVSOR）
「クラスレート化合物における非中心ラットリングフォノンのテラヘルツ時間領域分光」
- 14:50-15:00 まとめ

物理化学・生物物理化学の更なる発展のための提案と方策

2011 年 3 月 1 日（火） 分子科学研究所 研究棟 201 号室

- 13:00-13:15 北川禎三（兵庫県立大特任教授）
「趣旨説明」
- 13:15-13:45 濱口宏夫（東大教授）
「生命を計測し，理解し，保全する化学」
- 13:45-14:15 藤井正明（東工大教授）
「高次分子システム研究のためのバーチャル研究所（高次分子システム研究所）」

14:15-14:45	寺嶋正秀（京大教授） 「融合領域のためのバーチャル研究所：生体分子科学」
14:45-15:15	中嶋 敦（慶応大教授） 「ナノクラスター化学の最前線」
15:45-16:15	岩澤康裕（学術会議第3部部長，日本化学会会長） 「物理化学のプレゼンス：日本の展望（理学・工学），大型計画マスタープラン及び化学の夢・ロードマップを俯瞰して」
16:15-16:45	内丸幸喜（文科省研究振興局基礎基盤研究課長） 「科学技術政策の動向報告」
16:45-17:15	大峯 巖（分子研所長） 「生命現象とポストナノ分子科学：新しい分子科学の方向へ向けての若手育成，融合，そのインパクト」
17:15-18:30	コメンター：井口洋夫（分子研特別顧問）他 自由討論

(4) 若手研究会等

課 題 名	提案代表者
分子科学若手の会夏の学校講義内容検討会	京都大学大学院理学研究科 大滝 大樹

(5) UVSOR 施設利用

（前期）

紫外領域発光材料中の Ge 原子局所構造解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 朋子
ソフトケミカル合成によるハイドロタルサイト系ナノシート構造の解明	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
XANES による Mo 修飾ゼオライト触媒における Mo-担体相互作用の解明	埼玉工業大学工学部生命環境化学科	有谷 博文
XAFS 法を用いたハントタイト中のマグネシウムの状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
内殻励起による AlGaN の可視・紫外発光の発光・励起・時間分解スペクトル測定	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
有機物複合化リン酸カルシウムに添加した Mg 局所構造分析	大阪府立大学大学院工学研究科	小野木 伯薫
プラグインハイブリッド自動車用リチウムイオン電池の有表面皮膜成分の分析	(独)産業技術総合研究所	鹿野 昌弘
固体酸化燃料電池電解質中における希土類元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
局所構造解析によるエトリンサイト生成に及ぼす海水中イオンの影響の解明	東北大学金属材料研究所附属研究施設大阪センター	佐藤 充孝
磁場による行動制御を目的とした Fe 添加リン酸カルシウムの局所構造の解明	東北大学金属材料研究所附属研究施設大阪センター	佐藤 充孝
アミノ酸，DNA 塩基の VUV 励起発光スペクトル測定	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
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
アルカリヨウ化物超微粒子によるシンチレーション機能の向上	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
ソフトケミストリによる生体物質を用いた環境負荷の少ない真空紫外励起蛍光物質の開発	新潟大学工学部	太田 雅壽
酸化物中希土類イオンの真空紫外励起における $4f-5d$ および $4f-4f$ 遷移スペクトルの測定と解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野 正人
TiO ₂ 中に注入された窒素の化学状態解析	名古屋大学エコトピア科学研究所	吉田 朋子
BL4B ビームライン整備	分子科学研究所	繁政 英治
機能性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
強相関系 Mn ペロブスカイト酸化物における Mn の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
プラグインハイブリッド自動車用リチウムイオン電池の正極活物質の表面分析	(独)産業技術総合研究所	鹿野 昌弘
シリコン表面上の Bi ₂ Se ₃ ，Bi ₂ Te ₃ 超薄膜の超高分解能光電子分光測定	東京大学大学院理学系研究科	平原 徹
Fe _{2-y} M _y VAI (M = Co, Rh, Ir) および N-doped TiO ₂ の共鳴光電子分光	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
超高分解能角度分解光電子分光法による EuO 超薄膜の3次元電子構造測定	分子科学研究所	宮崎 秀俊
擬2次元 CDW 系化合物における面内 CDW 長周期構造の直接観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
Angle-resolved photoemission study of the high dielectric perovskite CaCu ₃ Ti ₄ O ₁₂	弘前大学大学院理工学研究科	IM, Hojun
BL5U の整備	分子科学研究所	木村 真一
歪み超格子半導体内に形成されるミンバンド構造における超格子周期性の影響	名古屋大学大学院工学研究科	宇治原 徹
全電子収量によるアモルファス半導体の光劣化評価	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
水星探査衛星に搭載する検出器の開発	東京大学大学院理学系研究科	吉川 一郎
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
鉛フリー圧電体の遠赤外線スペクトル	名古屋工業大学	柿本 健一

BL6B の整備	分子科学研究所	木村 真一
強相関電子系の低温圧力下テラヘルツ分光	分子科学研究所	木村 真一
赤外顕微鏡を用いた固体電子状態の観測	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
InN 系薄膜の赤外反射 (II)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
電界効果 MOCVD による AlN の作成とその結晶性評価	東海大学工学部	犬島 喬
Systematic ARPES studies of quasi-particle dynamics in various topological insulators	分子科学研究所	木村 真一
BL7U 光電子エンドステーションの整備とブランステーション建設	分子科学研究所	木村 真一
鉄ニクタイト及び銅酸化物高温超伝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
不足ドーパ酸化物高温超伝導体の超伝導ギャップ組成依存性の解明	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
局在・非同在競合系の電子状態解明のための低エネルギー光電子分光	立命館大学理工学部	今田 真
鉄系超伝導体における低励起エネルギー 3 次元角度分解光電子分光	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
固体電子状態の赤外～紫外分光を用いた研究	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
分子性イオン結晶 A_2ZnX_4 ($A = K, Rb, Cs$; $X = F, Cl, Br$) のオージェフリー発光と光学スペクトル	山形大学理学部	大西 彰正
機能性有機薄膜の VUV スペクトルの測定	明治大学理工学部	松本 皓永
110–50nm 領域における広帯域反射多層膜の性能評価 (2)	東北大学多元物質科学研究所	柳原 美広
AlGaN の発光・励起・時間分解スペクトル測定	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
太陽ライマン α 光観測用偏光解析装置および分光器の性能評価	国立天文台ひので科学プロジェクト	成影 典之
ワイド・バンドギャップ半導体フォトダイオードの特性評価	(独)産業技術総合研究所計測標準研究部門	齋藤 輝文
電界効果 MOCVD による AlN の作成とその励起子吸収測定	東海大学工学部	犬島 喬
紫外光電子分光法による無機 EL 薄膜蛍光体の励起プロセスの解明	山形大学理学部	北浦 守
キャリアドーパしたピラジカル分子鎖のエネルギーバンド構造の研究	東京理科大学理工学部	金井 要
角度分解紫外光電子分光法による面内異方性を持つ有機薄膜の作製と分子配向評価	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
有機電荷移動錯体の紫外光電子スペクトル	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における分子基板間相互作用と光電子強度分布	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
有機半導体素子を構成するヘテロ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
UVSOR BL8B2 ビームライン及び末端装置の調整	分子科学研究所	木村 真一
光触媒における酸化還元機構の解明 (3)	新潟大学工学部	太田 雅壽
原子核乾板の荷電粒子に対する感度特性の研究	名古屋大学大学院理学研究科	中村 光廣
貴金属陰イオンを含んだ KCl, KBr 結晶の発光特性の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
ワイドバンドギャップ酸化物・フッ化物結晶の真空紫外光学特性評価	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	猿倉 信彦
鉄系化合物の紫外分光	東京大学大学院理学系研究科	内田 慎一
(後期)		
紫外領域発光材料中の Ge 原子局所構造解析	名古屋大学工学研究所	吉田 朋子
ソフトケミカル合成によるハイドロタルサイト系ナノシート構造の解明	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
XANES による Mo 修飾ゼオライト触媒における Mo-担体相互作用の解明	埼玉工業大学工学部生命環境化学科	有谷 博文
XAFS 法を用いたハнтаイト中のマグネシウムの状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
内殻励起による AlGaN の可視・紫外発光の発光・励起・時間分解スペクトル測定	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
プラグインハイブリッド自動車用リチウムイオン電池の有表面皮膜成分の分析	(独)産業技術総合研究所	鹿野 昌弘
固体酸化物燃料電池電解質中における希土類元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
局所構造解析によるエトリンサイト生成に及ぼす海中イオンの影響の解明	東北大学金属材料研究所附属研究施設大阪センター	佐藤 充孝
磁場による行動制御を目的とした Fe 添加リン酸カルシウムの局所構造の解明	東北大学金属材料研究所附属研究施設大阪センター	佐藤 充孝
アミノ酸, DNA 塩基の VUV 励起発光スペクトル測定	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
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
アルカリヨウ化物超微粒子によるシンチレーション機能の向上	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
ソフトケミストリによる生体物質を用いた環境負荷の少ない真空紫外励起蛍光物質の開発	新潟大学工学部	太田 雅壽
TiO ₂ 中に注入された窒素の化学状態解析	名古屋大学エコトピア科学研究所	吉田 朋子
BL4B ビームライン整備	分子科学研究所	繁政 英治
機能性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
強相関系 Mn ペロブスカイト酸化物における Mn の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
プラグインハイブリッド自動車用リチウムイオン電池の正極活物質の表面分析	(独)産業技術総合研究所	鹿野 昌弘

シリコン表面上の Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 超薄膜の超高分解能光電子分光測定	東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	平原 徹
$\text{Fe}_{2-y}\text{M}_y\text{VAI}$ ($\text{M} = \text{Co}, \text{Rh}, \text{Ir}$) および N-doped TiO_2 の共鳴光電子分光	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
高分解能角度分解光電子分光法による EuO 超薄膜の 3 次元電子構造測定	分子科学研究所	宮崎 秀俊
擬 2 次元 CDW 系化合物における面内 CDW 長周期構造の直接観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
Angle-resolved photoemission study of the high dielectric perovskite $\text{CaCu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$	弘前大学大学院理工学研究科	IM, Hojun
BL5U の整備	分子科学研究所	木村 真一
歪み超格子半導体内に形成されるミンバンド構造における超格子周期性の影響	名古屋大学大学院工学研究科	宇治原 徹
全電子収量によるアモルファス半導体の光劣化評価	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
水星探査衛星に搭載する検出器の開発	東京大学大学院理学系研究科	吉川 一郎
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
鉛フリー圧電体の遠赤外線スペクトル	名古屋工業大学	柿本 健一
BL6B の整備	分子科学研究所	木村 真一
強相関電子系の低温圧力下テラヘルツ分光	分子科学研究所	木村 真一
赤外線顕微鏡を用いた固体電子状態の観測	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
InN 系薄膜の赤外反射 (II)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
電界効果 MOCVD による AlN の作成とその結晶性評価	東海大学工学部	犬島 喬
Systematic ARPES studies of quasi-particle dynamics in various topological insulators	分子科学研究所	木村 真一
BL7U 光電子エンドステーションの整備とブランチステーション建設	分子科学研究所	木村 真一
鉄ニクタイト及び銅酸化物高温超伝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
不足ドーパ酸化物高温超伝導体の超伝導ギャップ組成依存性の解明	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
局在・非同在競合系の電子状態解明のための低エネルギー光電子分光	立命館大学理工学部	今田 真
鉄系超伝導体における低励起エネルギー 3 次元角度分解光電子分光	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
固体電子状態の赤外～紫外分光を用いた研究	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
分子性イオン結晶 A_2ZnX_4 ($\text{A} = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}; \text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$) のオージェフリー発光と光学スペクトル	山形大学理学部	大西 彰正
AlGaN の発光・励起・時間分解スペクトル測定	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
太陽ライマン α 光観測用偏光解析装置および分光器の性能評価	国立天文台ひので科学プロジェクト	成影 典之
ワイド・バンドギャップ半導体フォトダイオードの特性評価	産業技術総合研究所計測標準研究部門	齋藤 輝文
電界効果 MOCVD による AlN の作成とその励起子吸収測定	東海大学工学部	犬島 喬
キャリアドーブしたピラジカル分子鎖のエネルギーバンド構造の研究	東京理科大学理工学部	金井 要
角度分解紫外光電子分光法による面内異方性を持つ有機薄膜の作製と分子配向評価	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
有機電荷移動錯体の紫外光電子スペクトル	愛媛大学工学部	宮崎 隆文
単結晶上の金属錯体分子薄膜における分子基板間相互作用と光電子強度分布	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
有機半導体素子を構成するヘテロ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
UVSOR BL8B2 ビームライン及び末端装置の調整	分子科学研究所	木村 真一
光触媒における酸化還元機構の解明 (3)	新潟大学工学部	太田 雅壽
アモルファス酸化物電解質薄膜 /p-d ヘテロ界面における Al および Na 原子の局所構造解析	北海道大学大学院工学研究院	青木 芳尚
SBA 型メソポーラスシリカバルク体の局所構造解析	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
モット転移系タングステン置換バナジウム酸化物における真空紫外分光	東京大学大学院工学系研究科	十倉 好紀
ワイドギャップ半導体の真空紫外・紫外・可視領域での光学特性	岐阜大学工学部	山家 光男
貴金属陰イオンを含んだアルカリハライド結晶の発光特性の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
水・イオン液体表面における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
酸化物中希土類イオンの真空紫外励起における $4f-5d$ および $4f-4f$ 遷移スペクトルの測定と解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野 正人
ヨウ化錫 (IV) 分子の電子構造	愛媛大学大学院理工学研究科	淵崎 員弘
放射光チョッパーを組み合わせた多電子同時計測手法の開発	新潟大学理学部	彦坂 泰正
籠状物質におけるラットリングフォノンの光学伝導度の研究	分子科学研究所	森 龍也
Polarization dependence measurements of iron-based superconductors	分子科学研究所	木村 真一
多 f 電子系の高分解能角度分解光電子分光	分子科学研究所	松波 雅治
低エネルギー光による $\text{Si}(001)$ 表面の高分解能光電子分光	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
ワイドバンドギャップ酸化物・フッ化物結晶の真空紫外光学特性評価	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	清水 俊彦
強相関カゴ状物質の光学伝導度の研究	分子科学研究所	松波 雅治
機能性有機薄膜の VUV スペクトルの測定	明治大学理工学部	松本 皓永

Ce ³⁺ イオンの単一サイト分布を実現した新規珪酸ルテチウム化合物の真空紫外発光分光	山形大学理学部	北浦 守
有機薄膜太陽電池関連物質の光照射下における電子構造変化の観測	島根大学総合理工学部	田中 仙君
イオン液体の価電子帯の構造とイオン化しきい値の精密測定	名古屋大学大学院理学研究科	大内 幸雄
原子核乾板の性能評価	名古屋大学現象解析研究センター	中村 光廣
バッキーボウルの光電子分光	分子科学研究所	櫻井 英博
単一次数高次高調波パルス発生用 EUV フィルターの特性評価	名古屋大学理学部	菱川 明栄
モット絶縁体 Ca ₂ RuO ₄ の金属絶縁体転移近傍の反射スペクトル	名古屋大学大学院理学研究科	岡崎 竜二

(6) 施設利用

機器センター

(前期)

有機色素 - 無機錯体複合材料の構成要素としての金属錯体の磁性測定	東京理科大学理学部	秋津 貴城
新規ナノマテリアルの電子物性研究	法政大学生命科学部	緒方 啓典
希土類イオン付活蛍光体における希土類イオンの価電子状態の特定	新潟大学工学部	太田 雅壽
新規なキャリア輸送材料の合成と電子デバイスへの応用	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 克彦
重合反応誘起相分離による構造形成過程と構造解析に関する研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	山本 勝宏
ベシクル中でのコレステロールの化学反応を利用したミクロ構造（ラフト構造）の変化	富山大学薬学部	岡 芳美
Co/Pd ナノ細線, Co/Pt ナノ粒子の磁性	岐阜大学工学部	嶋 睦宏
希土類磁性薄膜に関する磁気異方性に関する研究	名古屋工業大学	安達 信泰
準周期系物質における Yb の価数揺動	北海道大学大学院工学研究科	柏本 史郎
固相メカノケミカル反応を応用した木質セルロースの高機能化	静岡県立大学環境科学研究所	坂口 真人
新規拡張型電子供与体による機能性有機結晶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	白旗 崇
新規な機能性有機分子の構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	芦沢 実
ピセ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	小林 本忠
チオラート保護二成分複合金属クラスターの構造解析	東京理科大学理学部	根岸 雄一
微小結晶の 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
酸化物磁性体 - ポリマー複合膜の磁気特性に関する検討	秋田工業高等専門学校物質工学科	丸山 耕一
ランタンコバルト化合物の磁気特性に関する検討	秋田工業高等専門学校物質工学科	丸山 耕一
有機ドナーを配位子とする混合原子価銅錯体の結晶構造解析	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	満身 稔
キラル二次元ロジウム (I)- セミキノナト錯体の磁気特性の解明	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	満身 稔
芳香族環状四量体複合体の X 線結晶構造解析	豊橋技術科学大学	藤澤 郁英
相転移を示す Co 錯体の結晶構造解析	九州大学先端物質化学研究所	金川 慎治
コロネン分子の高分解能レーザー分光	京都大学大学院理学研究科	馬場 正昭
有機伝導体の微小結晶の精密構造解析	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	坪 広樹
有機ラジカル磁性体の磁気異方性	大阪市立大学大学院理学研究科	塩見 大輔
Belousov-Zhabotinsky 反応の磁場効果	大阪大谷大学薬学部	谷本 能文
テトラピロール類鉄 (III) 錯体の磁気的性質に関する研究	東邦大学医学部	大胡 恵樹
蛍光タンパク質の発色団のモデル化合物のラマンスペクトル測定	北海道大学電子科学研究所	中林 孝和

(後期)

有機無機複合材料を構成する 3d-4f 金属錯体の磁性測定	東京理科大学理学部	秋津 貴城
芳香族環状四量体複合体の X 線結晶構造解析	豊橋技術科学大学	藤澤 郁英
新規なキャリア輸送材料の合成と電子デバイスへの応用	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 克彦
Co/Pd ナノ細線, Co/Pt ナノ粒子, Ni-Zn フェライト複合材の磁性	岐阜大学工学部	嶋 睦宏
希土類イオン付活蛍光体における希土類イオンの価電子状態の特定	新潟大学工学部	太田 雅壽
新しい非局在化型 π 共役有機ラジカルの開発およびスピン状態の解明	名古屋大学大学院工学研究科	廣戸 聡
希土類磁性薄膜における垂直および面内磁気異方性	名古屋工業大学	安達 信泰
抗炎症剤とそれに結合する因子との相対的親和性の評価に関する研究	東京工業大学ソリューション研究機構	半田 宏
抗多発性骨髄腫薬と催奇形性標的因子との相対的親和性の評価に関する研究	東京工業大学ソリューション研究機構	実近 翔
正 12 角形準結晶および近似結晶の磁気秩序	北海道大学大学院工学研究科	柏本 史郎
Belousov-Zhabotinsky 反応の磁場効果	大阪大谷大学薬学部	谷本 能文
ベシクル中でのコレステロールの化学反応を利用したミクロ構造（ラフト構造）の変化	富山大学大学院医学薬学研究部	岡 芳美
メカノケミカル反応を応用した微結晶セルロースの高機能化について	静岡県立大学環境科学研究所	坂口 真人

アルカリ金属ドーピング化合物のX線回折と磁気特性	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	小林 本忠
LIESST 現象を示す Co 錯体における光誘起準安定状態の結晶構造解析	九州大学先端物質化学研究所	金川 慎治
フッ素系高分子材料の階層構造解析に関する研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	山本 勝宏
新規機能性磁性材料のスピン状態および磁気状態の観測	東京大学大学院理学系研究科	大越 慎一
籠型の配位子内部空間に展開する多核金属中心構造	名古屋工業大学大学院工学研究科	船橋 靖博
新規な機能性有機半導体分子の結晶構造解明	東京工業大学大学院理工学研究科	芦沢 実
分子性磁性物質の構造と磁気相転移に関する研究	首都大学東京大学院理工学研究科	藤田 渉
III-V 窒化物半導体の中性欠陥の解析	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
リボ核タンパク質複合体酵素リボヌクレアーゼ P の蛋白質核酸相互作用の熱力学的解析	九州大学大学院農学研究院	中島 崇
フェライト磁性体 / 誘電体の磁気特性に関する検討	秋田工業高等専門学校物質工学科	丸山 耕一
ランタンコバルト化合物の磁気特性に関する検討	秋田工業高等専門学校物質工学科	丸山 耕一
フッ化物レーザー材料開発に関する研究	名古屋工業大学	小野 晋吾
AAA タンパク質による ATP 加水分解の分子機構の解明	熊本大学発生医学研究所	江崎 雅俊
微生物活性を利用したバイオマスの資源化に向けた基礎検討	農業・食品産業技術研究機構畜産草地研究所	横山 浩
相転移化合物における相転移前後の構造解明	熊本大学大学院自然科学研究科	速水 真也
新規有機 - 無機ハイブリッドキラル磁性体およびマルチフェロイックス物質の磁性	広島大学大学院理学研究科	井上 克也
シナプスタンパク質のフォールディングが精神機能に及ぼす作用の検出	自然科学研究機構生理学研究所	田淵 克彦
ランタン型ルテニウム (II,III) 二核錯体の磁気的挙動	島根大学総合理工学部	池上 崇久
キラル二次元ロジウム (I)- セミキノナト錯体の磁気特性の解明	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	満身 稔

装置開発室

(前期)		
マイクロ波イメージング	核融合科学研究所	長山 好夫
(後期)		
固体表面反応の in-situ 赤外吸収分光のための片持ち梁型試料用ホルダーの製作	東京大学物性研究所	吉 信 淳
リング型アイリス機構の開発および FIB 加工用自動回転機能付きサンプルホルダーの改良	(独)産業技術総合研究所	銘 苺 春隆
ステンレス外装テフロン内装高温反応装置 1 式の製作	東京工業大学大学院理工学研究科	柿本 雅明
走査型トンネル顕微鏡用電流増幅回路の製作	早稲田大学理工学術院	井村 考平
浸透圧センシング機構の解析	基礎生物学研究所	野田 昌晴

計算機利用

バクテリアに特異的に取り込まれる細胞壁前駆体開発のための結合エネルギー評価	お茶の水女子大学アカデミック・プロダクション	貞許 礼子
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	お茶の水女子大学アカデミック・プロダクション	森 寛敏
金属錯体および生体関連分子の構造・反応・励起状態に関する理論的研究	お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科	鷹野 景子
複数の相互作用を考慮した高活性および高選択的有機合成反応の精密開発	愛知教育大学教育学部	赤倉松次郎
エタノアセン架橋ポルフィリン 2 量体及びそのフラレンの包摂錯体の電子状態の考察	愛媛大学大学院理工学研究科	魚山 大樹
化学反応の ab initio 計算による研究	愛媛大学理学部	長岡 伸一
環境中および生体内の有機化学反応機構の解明	茨城大学理学部	森 聖治
グラフェン表面とタンパク質・細胞表面との相互作用の研究	横浜国立大学大学院工学研究院	荻野 俊郎
機能性有機顔料における分子間相互作用の理論的研究	横浜国立大学工学部	千住 孝俊
高エネルギー物質の初期反応過程に関する理論的研究	横浜国立大学大学院工学研究院	河野 雄次
真空及び個体中における分子とナノ構造の電子移動理論	横浜国立大学大学院工学研究院	Hannes Raebiger
量子化学計算を用いたセルロース・糖鎖の構造と機能の研究	横浜国立大学大学院工学研究院	上田 一義
蛋白質の動的構造と機能の解析	横浜市立大学大学院生命ナノシステム科学研究科	木寺 詔紀
M@C ₆₀ クラスターの電子状態計算	岡山理科大学大学院理学研究科	中川 幸子
キラルロジウム 2 核錯体触媒の立体選択性に関する理論研究	岐阜大学工学部	安藤 香織
5d 金属原子を含むランタン型複核錯体の電子状態	岐阜大学工学部	海老原昌弘
化学反応の分類および分子設計に関する理論的研究	岐阜大学工学部	酒井 章吾
分子性液体に関する粗視化シミュレーション解析	岐阜大学工学部	寺尾 貴道

セルロース結晶の溶媒和ダイナミクス挙動と結晶性セルロース結合タンパク質との相互作用	宮崎大学工学部	湯井 敏文
生体分子系の量子化学：励起状態と化学反応	京都大学工学研究科	長谷川 淳也
ソフトマターの複雑流動における多階層連結シミュレーション法の開発	京都大学工学研究科	安田 修悟
量子化学と統計力学に基づく複雑化学系の理論的研究	京都大学工学研究科	佐藤 啓文
機能性有機材料の電子物性解析に関する理論的研究	京都大学大学院工学研究科	田中 一義
Rigged QED 理論に基づく局所量に関する研究	京都大学大学院工学研究科	立花 明知
高分子液体の流動に対するマルチスケールシミュレーション	京都大学大学院工学研究科	村島 隆浩
2次元赤外分光法の理論的研究	京都大学大学院理学研究科	谷村 吉隆
イオン液体中での溶媒和の電子状態計算による検討	京都大学大学院理学研究科	木村 佳文
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	京都大学福井謙一記念研究センター	石田 俊正
複合および非複合理論による複雑分子系の化学反応のシミュレーション	京都大学福井謙一記念研究センター	諸熊 奎治
遷移金属を含む複合電子系の理論化学	京都大学物質・細胞統合システム拠点	榊 茂好
ナノ物質の構造と機能に関する第一原理計算	金沢大学理工研究域	斎藤 峯雄
分子動力学シミュレーションによる球状タンパク質のアンフォールディング過程における溶媒和と自由エネルギー	金沢大学理工研究域	齋藤 大明
金属クラスターの原子構造、磁気構造、および磁気異方性に関する第一原理的研究	金沢大学理工研究域	小田 竜樹
固液気界面の分子動力学解析	九州工業大学大学院工学研究院	長山 暁子
水溶液における溶媒の非線形応答の分子動力学シミュレーション	九州大学大学院理学研究院	久保田陽二
静電ポテンシャルの揺らぎの非線形性と電極反応	九州大学大学院理学研究院	秋山 良
拡張アンサンブルシミュレーションによる高分子系の研究	慶應義塾大学理工学部	光武亜代理
半導体表面界面系における不純物電子状態の第一原理的研究	慶應義塾大学理工学部	山内 淳
励起状態とその緩和過程に関する理論的研究	慶應義塾大学理工学部	藪下 聡
フラーレン C ₆₀ を用いた有機半導体材料の量子化学的設計	工学院大学工学部	徳永 健
生体分子の構造と機能に関する理論的研究	広島大学大学院理学研究科	相田美砂子
熱化学反応及び光化学反応に関する理論的研究	広島大学大学院理学研究科	高橋 修
新規超原子価および低配位典型元素化合物の構造と反応	広島大学大学院理学研究科	山本 陽介
分子動力学シミュレーションに基づく自由エネルギー計算法による蛋白質と核酸の機能と物性の物理化学的研究	弘前大学大学院理工学研究科	斎藤 稔
擬1次元 1/4 充填有機分子性固体 (EDO-TTF) ₂ PF ₆ の光誘起相転移の第1原理計算による解明	高エネルギー加速器研究機構	岩野 薫
分子構造と安定性・反応性に関する理論研究	高知大学大学院総合人間自然科学研究科	金野 大助
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
半導体ナノ構造の形成および電子状態に関する第一原理的研究	三重大学大学院工学研究科	秋山 亨
アモルファス性有機半導体材料の分子構造計算	山形大学大学院理工学研究科	横山 大輔
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
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	首都大学東京理工学研究科	波田 雅彦
微細構造を認識する超分子複合系の構築と構造解析	新潟大学大学院自然科学研究科	岩本 啓
分子の光励起解離過程の理論的研究	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
分子軌道計算を用いた分子構造の算出	神奈川工科大学大学院工学研究科	宇津山太吾
化学反応および分子特性に関する理論研究	神奈川大学理学部	松原 世明
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院	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
サルモネラ由来 AAA ⁺ プロテアーゼによる基質認識機構の原子レベルでの解析	千葉大学薬学研究院	佐藤 慶治
2次元紫外・可視分光の理論的研究	早稲田大学理工学術院	中井 浩巳
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
分子モーターの動作機構のマルチスケールシミュレーション	早稲田大学理工学術院	岡崎 圭一
ベータアミロイドと ganngurioshidoGM1 相互作用の解析	総合研究大学院大学物理科学研究科	Zhiguo Shang
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
ナノ構造の第一原理量子輸送特性シミュレーションと高機能ナノデバイスのデザイン	大阪大学大学院工学研究科	小野 倫也

感染症原因蛋白質の量子化学・分子動力学法による相互作用・薬剤耐性・スペクトル予測の検討	大阪大学大学院薬学研究科	川下理日人
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
金属蛋白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
固体高分子形燃料電池 (PEFC) のアイオノマー中の酸素透過メカニズムの分子論的解明	大同大学燃料電池研究センター	鈴木 昭也
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
シミュレーションを用いた柔らかいコロイド系のガラス転移ダイナミクスの研究	筑波大学数理物質科学研究科	池田 昌司
強相関電子系における光誘起ダイナミクスのシミュレーション	筑波大学大学院数理物質科学研究科	前島 展也
ナノスケールの金属 / 絶縁体界面, 金属 / 半導体界面の電子・スピン状態の理論的研究	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	長浜バイオ大学分子生命科学コース	中村 卓
階層的電子状態計算理論とナノ構造プロセス	鳥取大学大学院工学研究科	星 健夫
有機化合物における分子配座, 分子間相互作用, 及び化学反応機構に対するフッ素置換効果	鳥取大学大学院工学研究科	早瀬 修一
フラグメント分子軌道法を用いた核内受容体の構造変化における相互作用解析	東海大学情報教育センター	渡邊 千鶴
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	東京工業大学資源化学研究所	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	東京工業大学理工学研究科	斎藤 晋
小分子活性化を指向した遷移金属錯体の分子設計及び構造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
新規低原子価ホウ素化合物のデザインとポリルアニオンおよび PBP ピンサー錯体の反応性の解明	東京大学 大学院工学系研究科	山下 誠
分子動力学シミュレーションによるタンパク質の高精度立体構造予測法の開発	東京大学大学院農学生命科学研究科	寺田 透
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
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
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
ホスフィンルホン酸 / 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
新規な気相負イオンの探索とその構造解明	東京大学大学院総合文化研究科	永田 敬
ゼオライト細孔内に捕捉されたホルムアルデヒドの安定化現象およびその反応性に関する理論的研究	東京大学大学院総合文化研究科	尾中 篤
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
ドーピングされたグラフェンの成長とその物性評価	東京大学大学院理学研究科	今村 岳
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
高分子と生体分子のシミュレーション	東京薬科大学生命科学部	高須 昌子
計算化学によるキラルシッフ塩基金属錯体の UV, CD スペクトル帰属	東京理科大学理学部	秋津 貴城
Gaussian & Fourier Transform (GFT) 法に基づいた ab-initio 分子動力学法の研究	東北大学工学研究科	島崎 智実
安定シリレンを支持配位子とする遷移金属錯体の合成と反応性の研究	東北大学大学院理学研究科	渡邊 孝仁
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
化学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
内包 [60] フラーレンおよびその修飾体に関する物理・化学的性質に関する理論計算	東北大学大学院理学研究科	岡田 洋史
コンピュータ支援創薬を指向したタンパク質 - リガンド複合体の分子シミュレーション	東北薬科大学薬学部	小田 彰史
レーザ応用計測技術高度化のためのレーザ光と原子・分子との相互作用に関する研究	徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部	出口 祥啓
超臨界水中の並進拡散および溶媒和殻の緩和に対する水の分子間ポテンシャルの異方性の影響の検討	徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部	吉田 健
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
K ⁺ チャネルにおけるイオン透過とゲーティングの微視的機構の解明	福井大学医学部	老木 成稔
生体内素反応過程および分子複合体形成における多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
大気エアロゾル生成に関する分子シミュレーション	(独)海洋研究開発機構	河野 明男
量子力学的厳密計算による原子少数多体系の研究	(独)海洋研究開発機構	数納 広哉
NMR 法と MD 計算を用いたガングリオシド - アミロイド β 相互作用系における構造アンサンブルの解析	(独)産業技術総合研究所	亀田 倫史
タンパク質・生体関連巨大分子系の量子化学計算に基づくアプローチ	(独)産業技術総合研究所	石田 豊和

色素増感太陽電池に関する理論的研究	(独)産業技術総合研究所	北尾 修
生体高分子系へのレプリカ交換 MD 法の改良・開発	(独)産業技術総合研究所	亀田 倫史
第一原理及び古典分子動力学計算による Si 関連物質の構造形成プロセスと電子物性の解明	(独)産業技術総合研究所	森下 徹也
ab initio MO 法による金属イオン - 抽出剤錯体の構造研究	(独)日本原子力研究開発機構	黒崎 譲
タンパク質 - DNA 複合体形成の自由エネルギープロファイル	(独)日本原子力研究開発機構	河野 秀俊
金属錯体の電子状態解析	(独)物質・材料研究機構	西野 正理
有機金属複合ナノクラスターの電子状態計算による物性機能評価	(独)科学技術振興機構	岩佐 豪
多孔質性電極のモンテカルロ・シミュレーション	(独)産業技術総合研究所	清原 健司
多時間相関関数を用いた凝縮系反応ダイナミクスの理論研究	分子科学研究所	斉藤 真司
導電性有機物質の構造と物性の研究	分子科学研究所	薬師 久弥
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
DFT 計算による酸化物固定化 Ir ダイマー触媒の表面構造と触媒反応機構解明	分子科学研究所	邨 次 智
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
ナノ構造体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
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
ポウル型共役化合物の物性調査	分子科学研究所	櫻井 英博
機能性有機分子物質のスピン・電子状態研究	分子科学研究所	古川 貢
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
軸不斉化合物のラセミ化エネルギーの評価	分子科学研究所	大迫 隆男
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
二次元高分子の構造最適化	分子科学研究所	江 東林
高精度電子状態理論による分子の励起状態と化学反応に関する研究	計算科学研究センター	江原 正博
生体分子の拡張アンサンブル分子動力学シミュレーション	計算科学研究センター	奥村 久士
ナイロン工業副産物分解酵素の分子設計	兵庫県立大学大学院工学研究科	根来 誠司
ホタルルシフェラーゼの発光波長予測	兵庫県立大学大学院工学研究科	加藤 太一郎
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科学研究科	神谷 克政
NO センサー蛋白質 sGC のヘムの低振動解析	兵庫県立大学大学院生命科学研究科	久保 稔
タンパク環境下でのプロトン移動反応	兵庫県立大学大学院生命科学研究科	重田 育照
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科学研究科	島 信幸
密度汎関数法による金属クラスターの物性および反応性発現機構の解明	豊田工業大学クラスター研究室	寺 寄 亨
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
励起状態反応ダイナミクス手法の開発と応用	北海道大学大学院理学院	武次 徹也
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, および金属カチオン - π 系における光誘起反応の量子化学計算	北里大学一般教育部	江川 徹
剛体球系の非平衡輸送と大規模分子動力学シミュレーション	名古屋工業大学大学院工学研究科	磯部 雅晴
インフルエンザウイルス HA と宿主受容体の糖鎖との相互作用解析	名古屋市立大学大学院医学研究科	尾曲 克己
有機超伝導体における一軸性圧縮効果	名古屋大学大学院工学研究科	大成 誠一郎
天然物合成反応の計算による予測	名古屋大学大学院理学研究科	山口 潤一郎
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
水中における脂質分子集団系の構造形成と機能	名古屋大学大学院工学研究科	岡崎 進
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 伸明
タンパク質のアミノ酸間コミュニケーションと情報伝達経路の解析	名古屋大学大学院理学研究科	倭 剛久
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
シクロパラフェニレンの構造と物性研究	名古屋大学物質科学国際研究センター	瀬川 泰知
鉄砒素系高温超伝導体における超伝導発現機構およびギャップ対称性の理論研究	名古屋大学理学部	紺谷 浩
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
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	中辻 博
非線形量子系におけるソリトンとカオス	鈴鹿国際大学国際人間科学部	大野 稔彦
超球面探索法を用いた結晶構造の予測	和歌山大学システム工学部	山門 英雄

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 ~ '03		'04		'05		'06		'07		'08		'09		'10		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	98	781	3	26	1	13	1	8	2	29	2	22	1	15	0	0	人数： 登録人数
協力研究	3,364	4,324	100	263	96	232	84	208	91	219	90	200	118	270	122	320	"
招へい 協力研究	195	197	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
所長 招へい	3,441	3,441	160	160	100	100	162	162	132	132	159	159	139	139	149	149	人数： 旅費支給者
研究会	274	4,311	13	304	11	206	13	310	9	198	4	105	5	45	5	96	"
若手研究会等	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	12	1	10	1	14	"
施設利用 I	1,641	3,707	55	154	53	106	47	86	59	120	72	177	57	168	36	147	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)	4,016	12,903	154	587	132	510	142	538	145	595	147	656	167	673	165	353	"
合計	13,029	29,664	485	1,494	393	1,167	449	1,312	438	1,293	475	1,331	488	1,320	478	1,079	
経費	545,194		-		-		-		-		-		-		-		千円

* 施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用

('10 年度の数値は、2011.1.25 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 ~ '03		'04		'05		'06		'07		'08		'09		'10		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	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	"
施設長 招へい	-	-	-	-	-	-	-	-	14	14	1	1	0	0	0	0	人数： 旅費支給者
研究会	32	528	1	16	1	59	3	37	2	55	2	18	2	44	1	1	"
施設利用	2,163	10,712	128	582	126	643	113	494	145	678	156	708	147	659	139	658	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	2,617	12,844	129	598	127	702	116	531	161	747	159	727	149	703	140	659	
経費	230,477		-		-		-		-		-		-		-		千円

('10 年度の数値は、2011.1.25 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
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
08	7	8	43	7	136	201
09	5	5	65	3	134	212
合計	108	71	374	342	983	1,878

* 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
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
08	33	11	19	14	35	27	2	60	201
09	10	2	9	19	47	51	4	70	212
合計	280	80	138	149	305	284	52	590	1,878

表3 海外からの研究者（2010年度）

1. 外国人運営顧問			
STACE, Anthony John	イギリス	ノッティンガム大学教授	
SAUVAGE, Jean-Pierre	フランス	ストラスブール大学教授	
2. 分子科学研究所外国人研究職員			
LOISEAU, Pascal Jerome	フランス	Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris	22. 6. 1–22.11.30
JEONG, Dae Hong	韓国	Seoul National University	22. 6. 7–22. 8. 6 22.12.23–23. 2.22
3. 日本学術振興会招へい外国人研究者等			
VESHAPIDZE, Giorgi	グルジア	Kansas State University	20.11.18–22.11.15
IBRAHIM, Heide Nadda	ドイツ	The Free University of Berlin	21. 5.11–22. 8.10
MURUGADOSS, Arumugam	インド	自然科学研究機構分子科学研究所	21.11. 1–23.10.31
YUDHA, S. Salprima	インドネシア	ブンクル大学	22. 7. 3–22.10. 2
TAN, Qitao	中国	Shanghai Chempartner Co. Ltd.	22. 8. 5–24. 8. 4
SCHMIDT, Bernd Martin Michael	ドイツ	Freie Universität Berlin	22. 8. 1–22.10.14
BIELAWSKI, Serge	フランス	リール工科大学	22.11.26–22.12.20
4. 国際共同研究			
LABLANQUIE, Pascal	フランス	LCPMR/Université Pierre et Marie Curie 准教授	22. 6.14–22. 6.19 22. 6.28–22. 7. 2 23. 2.28–23. 3.14
HAN, Woong Yeom	韓国	Pohang University of Science and Technology 教授	22. 7.23–22. 7.29
SZWAJ, Christophe	フランス	Université des Sciences et Technologies de Lille 講師	22.11.26–22.12.23
KWON, Yong Seung	韓国	成均館大学教授	22. 1.11–22. 1.29
OH, Hyunjin	韓国	MASAN COLLEGE 教授	22. 1.11–22. 1.18
SIMON, Marc	フランス	LCPMR/Université Pierre et Marie Curie 教授	
GUILLEMIN, Renand	フランス	LCPMR/Université Pierre et Marie Curie 研究員	
5. 所長招へい協力研究員			
DOYLE, John M.		京都大学招へい外国人学者	22.10.15–22.10.15
趙 翔	中国	西安交通大学教授	22. 5.10–22. 5.12
ALVIN, Karlo Garcia Tapia		神戸大学大学院生	22. 6. 4–22. 6. 5
張 峰		神戸大学大学院生	22. 6. 4–22. 6. 5
沈 睿		東京大学大学院生	22. 8.31–22. 9. 1
CHO, Jaeheung	韓国	Ewha Woman University 講師	22.10. 2–22.10. 4
FLEMING, Graham R.	アメリカ	University of California, Berkeley 副学長	22.12. 3–22.12. 9
KIM, Yousoo	韓国	理化学研究所准主任研究員	22.12. 1–22.12. 2
JIMENEZ, Ralph	アメリカ	JILA, National Institute of Standards and Technology and University of Colorado フェロー研究員	23. 1. 8–23. 1.12
6. 特別訪問研究員			
翁 志煥	中国	電気通信大学	22. 4. 1–23. 3.31
陳 青根	中国	理化学研究所	22. 4. 1–23. 3.31
TAPAN, K. Chaudhuri Kumar	インド	Indian Institute of Technology Delhi	22. 5.17–22. 7.16
OZKENDIR, Osman Murat	トルコ	Mersin University	22.12. 1–23. 3.31
7. 特別協力研究員			
PRAJONGTAT, Pongthep	タイ		23. 1.11–23. 3.31
8. 招へい研究員			
VIVIE-RIEDLE, Regina	ドイツ	Ludwig-Maximilians-Universität München 教授	22. 4.10–22. 4.13
ROMAN, Morgunov	ロシア	Institute of Problems of Chemical Physics 教授	22. 4.25–22. 5.15
DEEIVASIGAMANI, Umadevi	インド	Indian Institute of Chemical Technology 大学院生	22. 5. 5–22. 7.30
FENG, Xiao	中国	Beijing Institute of Technology 学部学生	22. 4. 1–22. 4.30 22. 5. 1–22. 6.20 22. 9. 1–22. 9.18

TRAN, Nguyen Lan	ベトナム	Ho Chi Minh City Institute of Physics 大学院生	22. 5.23–22. 5.27
LEE, Min-Woo	韓国	Seoul National University 大学院生	22. 6. 6–22. 8. 7
			23. 1. 3–23. 3. 4
LEE, Jooyoung	韓国	School of Computational Science Korea Institute 教授	22. 6.13–22. 6.19
HAN, Jin Wook	韓国	Hanyang University 准教授	22. 5.17–22. 6.16
			22. 7.21–22. 9.20
SENTHILKUMAR, Obuliraj		島根大学研究員	22. 6.12–22. 6.12
RAHMAN, MD. Mashiur	バングラディシュ	North South University 助教	22. 5.31–22. 7.31
			22. 8. 1–22.10.31
GU, Geun Hoi	韓国	ソウル国立大学博士研究員	22. 7. 8–22. 7. 9
ROSSKY, Peter J.	アメリカ	University of Texas 教授	22. 7.29–22. 7.31
KIM, Keun Su	韓国	Pohang University of Science and Technology 博士研究員	22. 7.23–22. 8.14
KIM, Jinhyung	韓国	Pohang University of Science and Technology 大学院生	22. 7.23–22. 8.14
JUNG, Sung Won	韓国	Pohang University of Science and Technology 大学院生	22. 7.23–22. 8.14
CHIN, Whee Won	韓国	Hanyang University 大学院生	22. 8. 5–22. 8.12
SHIN, Dong Geun	韓国	Hanyang University 大学院生	22. 8. 5–22. 8.12
PARK, Hoon Seo	韓国	Hanyang University 大学院生	22. 8. 5–22. 8.12
YOO, Ho Jung	韓国	Hanyang University 大学院生	22. 7.21–22. 8.12
SHIN, Ah Leum	韓国	Hanyang University 大学院生	22. 7.21–22. 8.12
DUMAN, Elif	トルコ	Bilkent University 大学院生	22. 8. 8–22. 9. 6
RAYMER, Michael	アメリカ	University of Oregon 教授	22. 9.16–22. 9.18
CAMPBELL, Wesley	アメリカ	University of Maryland ポスドク	22. 9. 2–22. 9. 2
MASSIMO, Olivucci	イタリア	Universita di Siena 教授	22.10.13–22.10.14
GAYATRI, Gaddamanugu	インド	Indian Institute of Chemical Technology ポスドク	22. 9.29–22.11.30
LEE, Weontae	韓国	Yonsei University 教授	22. 9.24–22. 9.25
ZIJLSTRA, Eeuwe	ドイツ	Universitaet Kassel 博士研究員	22.10. 9–22.10.14
GARCIA, Martin	ドイツ	Universitaet Kassel 教授	22.10. 9–22.10.14
LI, Chenghui	中国	Nanjing University 准教授	22.10.17–22.10.24
ZHAO, Dahui	中国	Peking University 准教授	22.10.17–22.10.21
QU, Da-Hui	中国	East China University of Science and Technology ポスドク	22.10.17–22.10.22
PATCHARIN, Kaewmati	タイ	Mahidol University 大学院生	22.10.27–22.12.30
LEE, Touk-Kwan		東北大学大学院生	22. 9.13–22. 9.18
KIMBERG, Victor	フランス	Centre de Etudes Nucleairesde Saclay 研究員	22.10.31–22.11.24
SHEN, Zhiquan	中国	Zhejiang University 教授	22.10.21–22.10.23
LU, Jing	中国	北京大学准教授	22.11. 1–22.11. 9
ZHOU, Jing	中国	Peking University 大学院生	22.11. 1–22.11. 9
QIN, Rui	中国	Peking University 大学院生	22.11. 1–22.11. 9
YOON, Jun Ho	韓国	Korean Advanced Institute for Science and Technology 博士研究員	22.11.11–22.12. 9
KIM, Sang Kyu	韓国	Korean Advanced Institute for Science and Technology 教授	22.11.11–22.11.16
AKA, Gerard Philippe	フランス	Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris(ENSCP) 教授	22.10.17–22.11. 6
MURRAY, James	イギリス	Imperial College London 教授	22.12. 2–22.12. 8
RAPPAPORT, Fabrice	フランス	Universite de Paris 教授	22.12. 2–22.12. 8
KNAPP, Ernst-Walter	ドイツ	Freie Universitat Berlin 教授	22.12. 2–22.12. 7
DEBUS, Richard	アメリカ	University of California 教授	22.12. 1–22.12. 8
MESSINGER, Johannes	スウェーデン	Umea University 教授	22.12. 2–22.12. 8
HOLZWARTH, Alfred	ドイツ	Max-Planck-Institut 教授	22.12. 3–22.12. 8
HILLIER, Warwick	オーストラリア	Australian National University 教授	22.12. 2–22.12. 9
MIN, Gyeongim	韓国	Sungkyunkwan University 大学院生	22. 1.11–22. 1.29
MULLER-DETHLEFS, Klaus	イギリス	The University of Manchester 教授	23. 1. 7–23. 1. 7
SHU, Donguk	中国	慶應義塾大学大学院生	22.12.22–22.12.23
BOULANGER, Benoit	フランス	ジョセフ・フーリエ大学教授	23. 1.16–23. 1.28
PARK, Byung Tae	韓国	Chung-Ang University 大学院生	23. 1.12–23. 1.13
KIM, Ha Hyung	韓国	Chung-Ang University 教授	23. 1.12–23. 1.13
PAWEENA, Pongpipatt	タイ	Chulalongkorn University 大学院生	23. 1. 5–23. 3.17
BOBUATONG, Karan	タイ	Kasetsart University ポスドク研究員	23. 1.31–23. 3.31
SEGONDS, Patricia	フランス	Universite Joseph Fourie 准教授	23. 2.20–23. 3. 5

ROTH, Roland	ドイツ	Universitat Erlangen-Nurnberg 教授	23. 3.12–23. 3.22
AREND, G. Dijkstra		京都大学外国人共同研究者	23. 1.25–23. 1.25
KIM, Sang Kyu	韓国	Korean Advanced Institute for Science and Technology 教授	23. 2.21–23. 2.24
ROESCH, Notker	ドイツ	Tu Munchen 教授	23. 3.31–23. 4. 2
PRZYBYLSKI, Marek	ドイツ	Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik 教授	23. 3. 8–23. 3.26
YILDIZ, Fikret	トルコ	Gebze Institute of Technology 助教授	23. 2.27–23. 3.27
DABROWSKI, Maciej	ドイツ	Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik 大学院生	23. 2.23–23. 3.27

表 4 国際交流協定締結一覧

相手方機関名	国名	協定書等名	主な内容	締結年月日	有効期限	相手方署名者	機 構 署名者
中国科学院 化学研究所	中国	分子科学における日・中共同 研究プロジェクト覚書	共同研究（物質分子科学，光 分子科学 理論計算分子科学）	2008. 9.27	2013. 9.26	化学研究所長	所長
韓国高等科学技 術院 自然科学部	韓国	分子科学研究所と韓国高等 科学技術院自然科学部との 分子科学分野における共同 研究に関する覚書	共同研究（情報交換，研究者 交流，セミナー等の開催）	2008. 9.29	2012. 9.28	自然科学部長	所長
韓国化学会 物理化学ディビ ジョン	韓国	分子科学研究所と韓国化学会 物理化学ディビジョンとの日 韓分子科学合同シンポジウム に関する覚書	日韓の分子科学分野の先導 的研究者が集まるシンポジ ウムを定期的に開催し，両国 の分子科学の発展に資する	2010.11.29	2014.11.28	物理化学ディ ビジョン長	所長
ソウル国立大学 BK21 化学・分 子工学部門	韓国	分子科学研究所とソウル国 立大学化学・分子工学部門 （BK21）との日韓協力に関 する覚書	情報交換，協力研究プロジェ クト実施，教員，研究員，学 生の派遣，研究者交流	2007. 6. 4	2011. 6. 3	化学・分子工 学部門長	所長
中央研究院 原子・分子科学 研究所	台湾	分子科学研究所と中央研究 院原子・分子科学研究所との 間の分子科学における協 力に関する覚書	共同研究（物質関連分子科 学，原子，分子との光科学， 理論と計算の分子科学）	2008. 2.15	2011. 2.14	所長	所長
JILA（宇宙物理 学複合研究所）	アメリ カ	自然科学研究機構分子科学 研究所と JILA（宇宙物理学 複合研究所）との科学に関 する共同研究覚書	原子，分子，光学科学分野に 関する情報交換，両機関の 共通研究課題に関する共同 研究の推進，両機関の研究 者及び学生交流	2008.10.22	2013.10.21	議長	所長
フランス国立パ リ高等化学学校	フラン ス	自然科学研究機構分子科学 研究所とフランス国立パリ 高等化学学校との分子科学 分野における共同研究に関 する覚書	学生の受入れと研究者交流， 合同会議等を行い，学術情 報交換と人的な交流を行う	2009.10.23	2014.10.22	学校長	所長

（2010.12.31 現在）

3-4-2 岡崎コンファレンス

分子科学研究所では，1976 年（1975 年研究所創設の翌年）より 2000 年まで全国の分子科学研究者からの申請を受けて小規模国際研究集会「岡崎コンファレンス」を年 2～3 回，合計 65 回開催し，それぞれの分野で世界トップクラスの研究者を数名招へいし，情報を相互に交換することによって分子科学研究所における研究活動を核にした当該分野の研究を国際的に最高レベルに高める努力をしてきた。これは大学共同利用機関としての重要な活動であり，予算的にも文部省から特別に支えられていた。しかし，1997 年以降，COE という考え方が大学共同利用機関以外の国立大学等にも広く適用されるところとなり，大学共同利用機関として行う公募型の「岡崎コンファレンス」は，予算的には新しく認定されるようになった COE 各機関がそれぞれ行う独自企画の中規模の国際シンポジウムの予算に切り替わった。これに伴い，分子科学研究所主催で「岡崎 COE コンファレンス」を開催することになった。一方，所外の分子科学研究者は分子科学研究所に申請するのではなく，所属している各 COE 機関から文部省に申請することになった。しかし，「岡崎コンファレンス」では可能であった助手クラスを含む若手研究者からは事実上提案でき

なくなるなど、各 COE 機関が行う中規模国際研究集会は小規模国際研究集会「岡崎コンファレンス」が果たしてきた役割を発展的に解消するものにはなり得なかった。その後、COE は認定機関だけのものではないなどの考えからいろいろな COE 予算枠が生み出され、その中で国際研究集会は、2004 年からの法人化に伴い日本学術振興会において一本化され、全国的に募集・選考が行われることになった。ただし、この枠はシリーズになっている大規模国際会議を日本に誘致したりする際にも申請できるなど、公募内容がかなり異なっている。一方、法人化後、各法人で小～中規模の国際研究集会が独自の判断で開催できるようになり、分子科学研究所が属する自然科学研究機構や総合研究大学院大学でその枠が整備されつつある。ただし、所属している複数の機関がお互い連携して開催するのが主たる目的となっている。

以上のように、全国の分子科学研究者からの申請に基づく「岡崎コンファレンス」を引き継ぐような小規模国際研究集会の枠組みをこれまで探索してきたが、継続的に開催していくためには分子研独自の事業として運営費交付金を使うしか方策がないことがわかった。その検討結果を受けて、「岡崎コンファレンス」を再開することを決断し、平成 18 年度に 6 年半ぶりに第 66 回岡崎コンファレンスを開催した。また平成 19 年度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 22 年度は下記の第 70 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 70 回岡崎コンファレンス

“Molecular Mechanism of Photosynthetic Energy Conversion: The Present Research and Future Prospects”

(光合成によるエネルギー変換機構の分子レベルでの解明と将来の展望)

期 間：2010 年 12 月 4 日(土)～6 日(月)

場 所：岡崎コンファレンスセンター

組織委員：杉浦美羽(愛媛大、提案代表者)、永田 央(分子研、所内対応者)、石北 央(京大)、加藤祐樹(東大)、三野広幸(名大)

内 容：

光合成は地球上のあらゆる生命にとって重要なプロセスであり、近代化学の誕生以来多くの研究者の関心を惹いてきた。光合成の分子機構に関する研究は、最近 20 年間で著しい進歩を見た。すなわち、中心的なタンパク質(光化学系 I, II, シトクロム b_{6f} など)の構造が X 線結晶解析によって明らかになる一方、それらの動的挙動も種々の分光法などを利用して続々と解明されている。中でも、エネルギー変換の初発反応を担う光化学系 II の構造と機能の関係を分子レベルで理解することは、学術的な価値のみならず、社会への波及効果という点で非常に重要と言える。また、合成化学的な立場から、生命の光合成の分子機構をとらえなおし、人工のエネルギー変換システムへと再構築することは、困難だが価値ある挑戦である。

このような状況を踏まえて、光合成に関連するさまざまな分野の研究者が集い、アイデアを交換することを目的とした岡崎コンファレンスを開催した。以下の 6 つの討論課題について、国内 16 名・海外 9 名の招待講演者によるオーラルセッションと、27 件のポスターセッションを設けて、討論を行った。

(i) 光化学系 II の構造

(ii) 光化学系 II および酸素発生系

- (iii) 光化学系 II のエナジェティックス
- (iv) 光合成研究のための新しいアプローチ
- (v) 合成化合物を用いた人工光合成
- (vi) 人工光合成と応用研究

3 日間のプログラムを以下に示す。事前登録数は 89 名，当日登録を加えて総計 108 名が参加した。

December 4 (Sat.)

- 9:30 - 9:40 **Iwao OHMINE** (*Director-general of Institute for Molecular Science, Japan*)
Opening Address
- 9:40 - 9:50 **Toshi NAGATA** (*Institute for Molecular Science, Japan*)
Objective of the Conference

Session 1: Structure of Photosystem II

Chair: *Alain BOUSSAC*

- 9:50 - 10:25 **Miwa SUGIURA** (*Ehime University, Japan*)
Overview of Photosystem II and Artificial Photosynthesis Research
- 10:25 - 11:00 **Yasuhiro KASHINO** (*Hyogo University, Japan*)
Small Subunit Proteins in Photosystem II Complex
- 11:00 - 11:35 **Tatsuya TOMO** (*Tokyo University of Science, Japan*)
Characterization of Photosystem Complexes in a Chlorophyll *d*-dominated Cyanobacterium
- 11:35 - 13:00 Lunch and Poster Hanging

Session 2: Photosystem II and Water Oxidation

Chairs: *Hiroyuki MINO and Miwa SUGIURA*

- 13:00 - 13:35 **James MURRAY** (*Imperial College London, UK*)
Recent Work on the Structure and Assembly of Photosystem II
- 13:35 - 14:10 **Alain BOUSSAC** (*CEA Saclay, France*)
Spectroscopic Studies of the Mn₄Ca cluster in Photosystem II from *Thermosynechococcus elongatus* in Mutants and upon Exchanges of Br⁻ or I⁻ for Cl⁻ and Sr²⁺ for Ca²⁺
- 14:10 - 14:45 **Johannes MESSINGER** (*Umea University, Sweden*)
New Insight into the Electronic Structure of the Mn₄CaO₅ Cluster in Photosystem II Based on ⁵⁵Mn ENDOR Spectroscopy and Ca/Sr Exchange
- 14:45 - 15:20 **Hiroyuki MINO** (*Nagoya University, Japan*)
The Origin of the EPR Signals around *g* = 2 in Untreated and Ca²⁺-Depleted Photosystem II
- 15:20 - 15:40 Coffee Break
- 15:40 - 16:15 **Richard DEBUS** (*UC Riverside, USA*)
Evidence from FTIR Difference Spectroscopy for a Network of Hydrogen Bonds near the Oxygen-Evolving Mn₄Ca Cluster of Photosystem II
- 16:15 - 16:50 **Takumi NOGUCHI** (*Nagoya University, Japan*)
Infrared Studies of Photosynthetic Oxygen Evolving Reactions
- 16:50 - 17:25 **Jian-Ren SHEN** (*Okayama University, Japan*)
Crystal Structure of Oxygen-Evolving Photosystem II at an Atomic Resolution
- 17:25 - 18:15 **Discussion Session 1&2** (Chairs: *Hiroyuki MINO and Miwa SUGIURA*)
- 18:15 - 20:30 **Poster Session 1**

December 5 (Sun.)

Energetics of Photosystem II

Chairs: *Hiroshi ISHIKITA and Fabrice RAPPAPORT*

- 9:00 - 9:35 **Alfred HOLZWARTH** (*Max-Planck Institute, Germany*)
Switching from Light-Harvesting to Quenching and Back: How Does Photosystem II Do It?

9:35 - 10:10	Ernst-Walter KNAPP (<i>Free University of Berlin, Germany</i>) Computation of Cofactor Redox Potentials in PSII: How Does It Work
10:10 - 10:45	Hiroshi ISHIKITA (<i>Kyoto University, Japan</i>) Oxidation Power of the Chlorophyll Pair P680 in Photosystem II
10:45 - 11:05	Coffee Break
11:05 - 11:40	Yuki KATO (<i>The University of Tokyo, Japan</i>) Energetics within Photosystem II Based on the Redox Potentials of Cofactors on the Acceptor Side Determined by Spectroelectrochemistry
11:40 - 12:15	Fabrice RAPPAPORT (<i>Institut Biologie Physico Chimie, France</i>) The Energetic Picture of Photosystem II: Where Do We Stand?
12:15 - 12:45	Discussion Session 3 (<i>Chairs: Hiroshi ISHIKITA and Fabrice RAPPAPORT</i>)
12:45 - 13:50	Lunch
13:50 - 14:00	Taking Photograph

Session 4: New Approaches for Photosynthesis Research

Chairs: Miwa SUGIURA and Yuki KATO

14:00 - 14:35	Graham FLEMING (<i>UC Berkeley, USA</i>) Design Principles of Natural Light Harvesting—How Hard Is It to Achieve 100% Quantum Efficiency
14:35 - 15:10	Warwick HILLIER (<i>The Australian National University, Australia</i>) Developments in Stable Isotope Mass Spectrometry: Chemical Insights into Catalysis of Water Oxidation
15:10 - 15:45	Shigeichi KUMAZAKI (<i>Kyoto University, Japan</i>) Simultaneous Sensing of Photosynthetic Activity and Thylakoid Morphology Realized by Fluorescence and Absorption Spectral Microscopy
15:45 - 16:05	Coffee Break
16:05 - 16:40	Hiro-o HAMAGUCHI (<i>The University of Tokyo, Japan</i>) Structure/Function Analysis of Photosynthetic Pigments in a Single Living Cyanobacteria Cell by 1064 nm Near-Infrared Excited Raman Microspectroscopy
16:40 - 17:15	Michio MATSUSHITA (<i>Tokyo Institute of Technology, Japan</i>) Single-Molecule Spectroscopy of Bacterial Photosynthetic Antenna Complexes at Liquid Helium Temperature
17:15 - 17:45	Discussion Session 4 (<i>Chairs: Miwa SUGIURA and Yuki KATO</i>)
17:45 - 19:00	Poster Session 2
19:00 - 21:00	Banquet

December 6 (Mon.)

Session 5: Artificial Photosynthesis by Using Synthesized Compounds

Chair: Yutaka AMAO

9:00 - 9:35	Hitoshi TAMIYAKI (<i>Ritsumeikan University, Japan</i>) Photochemistry of Chlorophylls and Their Synthetic Analogs
9:35 - 10:10	Toshi NAGATA (<i>Institute for Molecular Science, Japan</i>) Single-Molecular Quinone Pools: A Synthetic Model of Biochemical Energy Transducer
10:10 - 10:45	Shigeyuki MASAOKA (<i>Kyusyu University, Japan</i>) Molecular Mechanism of Water Splitting into Hydrogen and Oxygen Catalyzed by Metal Complexes
10:45 - 11:05	Coffee Break

Session 6: Artificial Photosynthesis and Application

Chair: Toshi NAGATA

11:05 - 11:40	Yutaka AMAO (<i>Oita University, Japan</i>) Artificial Photosynthesis System for Solar Hydrogen and Fuel Production
11:40 - 12:15	Mamoru NANGO (<i>Osaka City University, Japan</i>) Artificial Photosynthetic Antennas and Development of Nanobiodevices
12:15 - 12:45	Discussion Session 5 (<i>Chairs: Yutaka AMAO and Toshi NAGATA</i>)
12:45 - 12:50	Remarks and Closing (<i>Miwa SUGIURA, Ehime University</i>)

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、平成19年度10件、平成20年度9件、平成21年度12件、本年度13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。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。

2010年度実施状況

代表者	研究課題名	相手国
繁政 英治	高分解能電子分光法で探る内殻励起状態の脱励起ダイナミクス	フランス
加藤 政博	レーザーと電子ビームを用いたコヒーレント光発生	フランス
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	韓国 ドイツ
小杉 信博	軟X線共鳴光電子分光法による弱い分子間相互作用の研究	フランス ドイツ スウェーデン 韓国 台湾
魚住 泰広	新規な高分子担持遷移金属触媒の開発と選択的有機変換反応への適用	韓国
櫻井 英博	新規高分子担持型金クラスター触媒の開発	タイ
櫻井 英博	新奇バッキーボウルの設計：実験／理論両面からのアプローチ	インド
江 東林	二次元高分子の合成に関する研究	中国
平等 拓範	ポッケルス効果を考慮した角度擬位相整合に関する研究	フランス
横山 利彦	異方性多層膜系の磁気異方性と層間相互作用の競合に関する研究	ドイツ
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	バングラデシュ
岡本 裕巳	金属微粒子自己組織ナノ構造体における電場増強	韓国
大島 康裕	高分解能レーザー分光による励起状態ダイナミクスの研究	韓国

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、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。2009年7月には淡路島で第13回目に相当するシンポジウムとして「物質分子科学・生命分子科学における化学ダイナミクス」が開催された。このシンポジウムは、日本学術振興会のアジア研究教育拠点事業のセミナーとしての支援を得て行われ、また（財）井上科学振興財団及び（財）兵庫県国際交流協会の国際研究集会開催助成、また私企業2社からの援助を頂いた。次の日韓分子科学シンポジウムは、2011年に韓国の釜山において“New Visions for Spectroscopy and Computation: Temporal and Spatial Adventures of Molecular Sciences”のテーマで開催する予定である。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-acore/00gaiyou_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、中央研究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22年度の活動の概要を以下にまとめる。

(1) 共同研究

物質分子科学においては、 π 電子系有機分子を基盤とする機能性ナノ構造体の構築と機能開拓、先端ナノバイオエレクトロニクスの研究（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、台湾、香港との共同研究）、バッキーボウルに関する合成・物性研究、アミロイドベータの凝集と脂質二重膜との反応（以上、台湾との共同研究）、新規遷移金属錯体触媒システムの開発（韓国との共同研究）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

よる反応ダイナミックスの解明（台湾との共同研究）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，タンパク質フォールディング病の分子動力学シミュレーション（以上，台湾との共同研究）が進展した。

(2) セミナー

「第3回日韓生体分子科学セミナー—実験とシミュレーション」（韓国・済州島），「中日機能性超分子構築シンポジウム」（中国・長春），「協同機能触媒」（米国・ハワイ），「総研大／アジアコアプログラム冬の学校」（日本・岡崎），「中日触媒的合成化学シンポジウム」（中国・天津），「日韓有機金属化学シンポジウム」（日本・奈良），「第5回全体会議」（日本・岡崎）が開催された。

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 ～ 2000	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10
北海道大学	10				1	1					
室蘭工業大学	2										
東北大学	13										
山形大学	6										
茨城大学											1
筑波大学	2										
宇都宮大学			2	2							
群馬大学	1										
埼玉大学	2										
千葉大学	3	1	1								
東京大学	31							2	4	3	3
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	10	1									
新潟大学	4						1	1			
福井大学	10										
信州大学	3	1								1	1
岐阜大学	2										
静岡大学											2
名古屋大学	70	6	2	2			3	4	6	6	4
愛知教育大学							1				
名古屋工業大学	14	1			2						
豊橋技術科学大学	30			7	2				1		
三重大学	7										
京都大学	38	1	1			2	1	1	1	2	
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	25	1							1		
神戸大学	4		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	34		2	1	1						
山口大学	1										
愛媛大学	3			5	1						
高知大学	2										
九州大学	40	2	2	1							

佐賀大学	13										
長崎大学					2						
熊本大学	6										
宮崎大学	6										
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	4	4
大阪市立大学	4										
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										
中央大学											1
東海大学	1	1	1								
東京理科大学	3	4		1	1						
東邦大学	2	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		1	1
計	501	31	28	26	17	14	16	17	17	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（2010 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	11	9	22
機能分子科学専攻	9	9	19
計	20	18	41

在籍学生数（2010 年 12 月現在） 単位：人

入学年度専攻		2006 年度	2007 年度	2008 年度	2009 年度	2010 年度	計	定 員
構造分子科学専攻	5 年一貫	0	1	1	3	1	6	2
	博士後期	1	2	3	2	4	12	3
機能分子科学専攻	5 年一貫	0	1	2	2	2	7	2
	博士後期	0	0	3	5	2	10	3

学位取得状況 単位：人

（年度別）

専 攻	1991 ～ 2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010 (9 月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	60(11)	3	11	6	3	7	5	5(1)	7	5	1	113(12)
機能分子科学専攻	54(6)	5	5(4)	1	5(4)	4	5	1	4	2(1)	2	88(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 ～ 2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010
構造分子科学専攻	90	5	3	7	7	8	11(1)	8(1)	5(1)	5(3)	5(1)
機能分子科学専攻	76	7	6	6	6	7	4	5(1)	5(2)	7(2)	4(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		
	1989-2008 年度	2009 年度	2010 年度	1989-2008 年度	2009 年度	2010 年度
中 国	16	2	4	4	2	
フランス				1		
ロシア				1		
バングラディッシュ	6			2		
インド	1					1
チェコ				1		

韓国	2					
ナイジェリア				1		
ネパール	1	1			1	2
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 ~ '08 年度	'09 年度	'10 年度	'89 ~ '08 年度	'09 年度	'10 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			9			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			5		1	8
名古屋工業大学	1						1
豊橋技術科学大学	5			1	1		7
三重大学	1						1
京都大学	11	1(1)	1	16			29(1)
京都工芸繊維大学	1			1			2
大阪大学	5			4			9
神戸大学	4						4
奈良女子大学				1			1
鳥取大学	1						1
岡山大学	3			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	1(1)					3(1)
鹿児島大学				1	1(1)		2(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				3			3
名古屋市立大学				3			3

大阪市立大学	2						2
大阪府立大学	2			2			4
兵庫県立大学	2			1			3
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			5			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(1)		2(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	3						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	27	3(1)	4(1)	15	3	3(2)	55(4)

* 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（2008 年 1 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	0	1
准教授	6	8
講 師	3	2
助 教	14	14
大学以外の研究職	10	11
博士研究員等	36	23
企業等（研究職等）	6	11
企業等（研究職以外）	14	4
不 明	9	5

3-5-3 オープンキャンパス・分子研シンポジウム

2010年6月4日（金）午後～5日（土）午前まで分子研シンポジウム2010を開催し、引き続き5日（土）午後に分子研オープンキャンパス2010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科学研究科を担う教育機関であることについても、外部の方々に広く認識して頂くことを目的としている。2008度からその名称をオープンキャンパスへと変更している。4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本年度が4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5名の先生方に講演をお願いした。参加登録者数は、所内は掌握していないが、所外からは52名であった（オープンキャンパス、分子研シンポジウムいずれか一方のみを含む）。参加者構成は、沖縄から宮城まで、学部学生10名、修士課程30名、博士課程3名、助教1名、民間2名であり、あわせて合計52名で昨年度より増加した。所内からも多くの参加を得た。

参加者数まとめ

	学部学生	修士課程	博士課程	教員・その他	合 計
東北	0	3	0	1	4
関東	3	11	2	0	16
信越	0	3	0	1	4
東海	4	2	1	0	7
近畿	1	7	3	0	11
山陰	0	5	0	0	5
沖縄	2	0	0	0	2
民間	0	0	0	3	3
合 計	10	31	6	5	52

3-5-4 夏の体験入学

2010年8月9日～12日にかけて、「分子科学研究所夏の体験入学」（第7回）を行った。この事業は、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や教育活動を実際に体験し、総合研究大学院大学が実施する「研究所を基盤とする大学院教育」の特色を知ってもらうことを趣旨とする。本事業は、総研大本部から「新入生確保のための広報事業」として特定教育研究経費の予算補助を受けて、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7回目の開催となった。予算申請・広報活動などは、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して行った。また、分子研独自にもポスターの配布やウェブサイトの整備などの広報を行い、参加学生を広く募集した。なお、今回は、物理科学研究科の大学院教育改革推進プログラムからも予算補助を受けることができた。

今回は、24名の学生が参加した（留学生2名を含む。男性15名、女性9名）。参加人数が多かったことに加え、全員が参加するオリエンテーションや合同報告会でなるべく多くの研究室に触れてもらうため、21研究室に学生の受入を依頼した。実施スケジュールは以下の通りである。

8月9日(月): オリエンテーション, UVSOR と計算科学研究センターの見学

8月10日(火), 11日(水): 研究体験

8月12日(木): 体験内容報告会

参加者の内訳, 体験内容, 受入研究室は以下の通りである。

	所属	学年	体験内容	対応教員
1	九州工業大学	学部2年	量子化学の基礎にふれ, 実際にプログラムを使ってみよう	永瀬教授
2	京都大学	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
3	早稲田大学	学部3年	身近な物の赤外吸収スペクトルを計測してみよう!	古谷准教授
4	静岡大学	学部3年	光合成モデル化合物の合成	永田准教授
5	日本大学	学部2年	光で分子を回してみよう!	大島教授
6	東北大学	学部2年	光合成モデル化合物の合成	永田准教授
7	静岡大学	学部3年	クラスター触媒を用いた反応の一例を体験	櫻井准教授
8	名古屋大学	学部2年	光を使って分子を制御しよう	大森教授
9	近畿大学	学部2年	緑色蛍光蛋白質の巻き戻りを調べてみよう	桑島教授
10	東京工業大学	学部4年	固体 NMR を用いた生体分子・分子材料の構造研究に関する体験	西村准教授
11	神戸大学	学部3年	ナノの金属ロッドを作って波動関数を見る	岡本教授
12	山形大学	学部3年	有機 EL 素子の作製と発光測定	平本教授
13	神戸大学	学部4年	有属酵素モデルを用いた酵素研究の体験	藤井准教
14	青山学院大学	学部3年	高真空中での磁性超薄膜の作成と in situ 磁化測定	横山教授
15	岐阜薬科大学	学部2年	クラスター触媒を用いた反応の一例を体験	櫻井准教授
16	東京工業大学 大学院	修士1年	分子動力学シミュレーションを学び体験する	奥村准教授
17	慶應義塾大学	学部4年	固体表面電子の相対論効果を見よう!	木村准教授
18	東京大学	学部1年	色素増感太陽電池の製作とフラーレン質量分析装置の体験	見附准教授
19	茨城工業高専	5年	フロンティア軌道理論と現在の理論化学・計算科学	江原教授
20	山形大学	学部4年	有機半導体セキシチオフェンの合成	鈴木准教授
21	新潟大学大学院	修士1年	固体表面電子の相対論効果を見よう!	木村准教授

22	東京大学大学院	修士 1 年	分子性物質の光誘起相転移ダイナミックス	米満准教授
23	新潟大学	学部 3 年	レーザーから発生する光パルスの測定	藤准教授
24	日本大学	学部 3 年	Pt ナノ触媒を用いた水中でのアルコール酸化反応	魚住教授

3-5-5 総研大 / アジアコア共催「冬の学校」

2011 年 2 月 19 日（土）～ 22 日（火）の期間、岡崎コンファレンスセンターにおいて、「アジア冬の学校」が開催された。今回の冬の学校は、総研大と JSPS アジア研究教育拠点（アジアコア）事業との共同主催であった。また、プログラムの一部に、JENESYS 計画に基づく学生交流支援事業で分子研に滞在する学生の口頭及びポスター発表会を含めることにより、参加者間の交流を深めることを企画した。総研大・物理科学研究科では、研究科内の 5 専攻で行っている研究・教育活動をアジア諸国の大学生・大学院生および若手研究者の育成に広く供すべく、2004 年度よりアジア冬の学校を開催してきた。分子研（構造分子科学専攻・機能分子科学専攻）での開催では、これまでの総計で 330 名を超える学生・若手研究者がアジア各国から参加している。一方、分子研での JSPS アジアコア事業として、「物質・光・理論分子科学のフロンティア」と題して、中国・韓国・台湾・日本間での研究教育交流を 2006 年度よりスタートしている。この事業の一環として、2006 年度から冬の学校を開催し、多数の学生・若手研究者が参加している。

本年度は、この 2 つの冬の学校を融合し、更に JENESYS の学生も参加する形で開催し、韓国 18 名、中国から 17 名、タイ 12 名、台湾 7 名、マレーシア 3 名、フィリピン 2 名、ベトナム 2 名、シンガポール 1 名、インドネシア 1 名、インド 1 名、計 64 名の研究者・学生が参加した。国内からは 64 名の参加があり、そのうち総研大生は 28 名であった。当冬の学校では、一般講義と全体講義、及び参加者による口頭・ポスター発表が行われた。参加者による口頭発表のセッションは、若手研究者間の交流をより一層深めることを目的として企画されたものである。活発な議論を促すために、ポスター発表申込の中から 8 件を口頭発表者に選出し、さらに座長にも若手研究者を抜擢した。口頭発表者にもポスター発表を義務付けたため、どちらのセッションも狙い通りの活気あるものとなった。一般講義では、アジアコア事業の拠点 4 機関からの講師 8 名が、分子科学の各領域における最先端のトピックスや関連事項に関する講義を行なった。また、物理科学研究科内の交流事業の一環として、核融合科学専攻及び宇宙科学専攻から派遣された各 1 名の講師が、エネルギー及び生命に関連する研究についての講義を行った。全体講演では、理論及び物質領域から、世界的に活躍している研究者 2 名が、これまでの業績を中心に研究の背景や意義から今後の展望までを紹介した。なお、プログラムの詳細は下記のとおりである。

The Winter School of Sokendai/Asian CORE Program
 “Frontiers of Molecular Science—Life, Material, Energy, and Space”

February 19

14:00-17:30: Registration
 18:00-20:00: Welcome Reception

February 20

9:00-10:00: **Prof. Hiroki Nakamura** (Natl. Chiao Tung University, Taiwan)
 “Future Perspectives of Nonadiabatic Chemical Dynamics—From Comprehension to Control”
 10:00-11:00: **Prof. Jae Ryang Hahn** (Chonbuk National University, Korea)
 “Seeing and Touching Single Molecules at a Time”
 11:00-11:20: Coffee Break

11:20-12:20: **Prof. Katsumi Ida** (NIFS)
“Live Plasma”
 12:20-13:30: Lunch
 13:30-15:30: **Oral Presentation by Participants**
 15:30-15:50: Coffee Break
 15:50-17:50: **Mini-Symposium Organized by JASSO-JENESYS Program**
 18:20-20:00: Dinner

February 21

9:00-10:00: **Prof. Yuji Furutani** (IMS)
“FTIR Studies of Membrane Proteins”
 10:00-11:00: **Prof. Dong Qiu** (ICCAS, China)
“Biomedical Materials by Non-Toxic Sol-Gel Route”
 11:00-11:20: Coffee Break
 11:20-12:20: **Prof. YounJoon Jung** (Seoul National University, Korea)
“Molecular Dynamics Simulation Study on Carbon Nanotubes in Benzene”
 12:20-12:30: Group Photograph
 12:30-15:00: **Poster Session 1** (with light meal)
 15:00-16:00: **Prof. Mei-Yin Chou** (IAMS, Taiwan)
“Electronic and Transport Properties of Graphene Systems”
 16:00-: **Lab Tour**

February 22

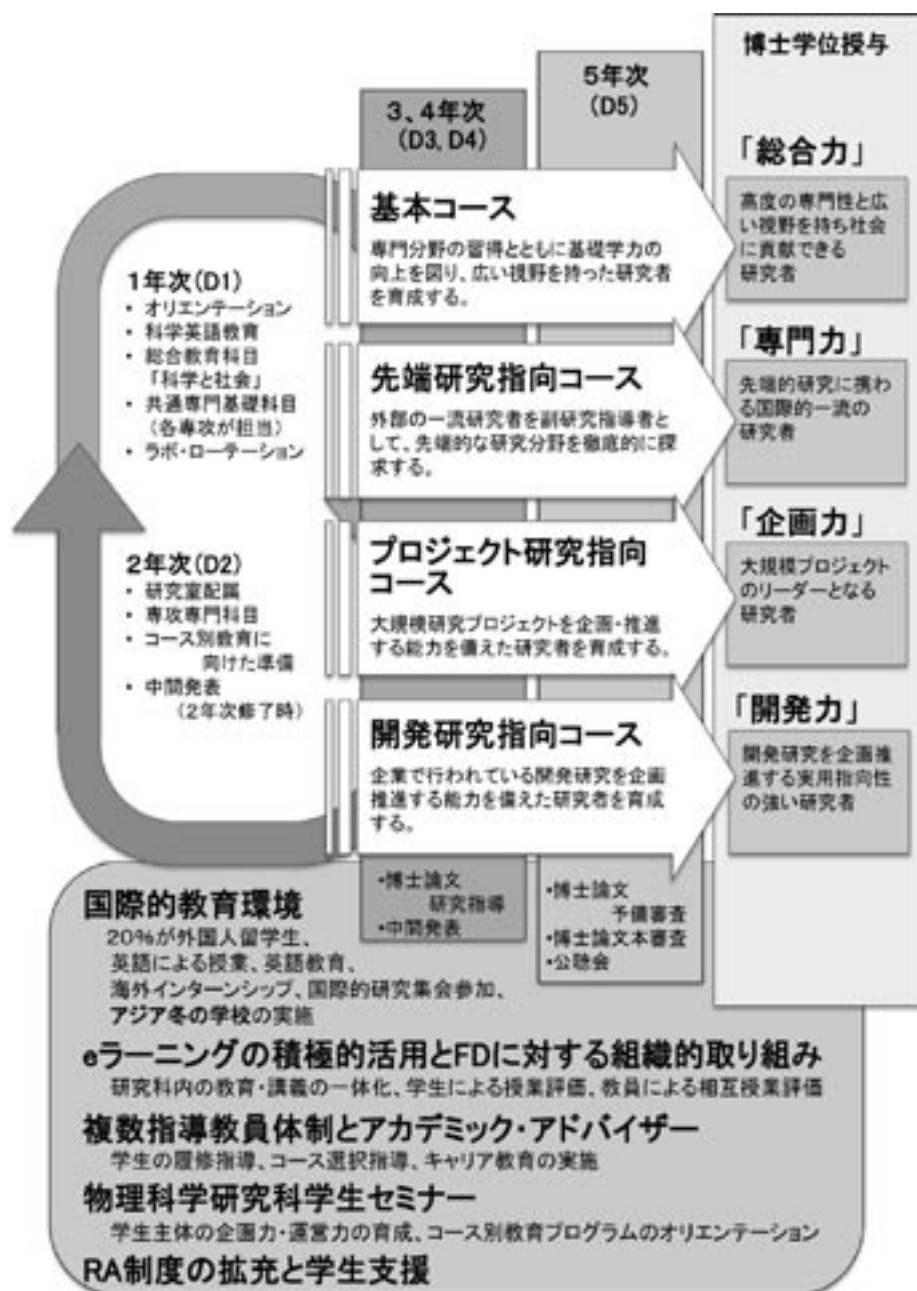
9:00-10:00: **Prof. Mizuki Tada** (IMS)
“Structure and Reactivity of Heterogeneous Catalysts”
 10:00-11:00: **Prof. Yong Sheng Zhao** (ICCAS, China)
“Controlled Synthesis and Photonic Properties of Organic One-Dimensional Nanomaterials”
 11:00-11:20: Coffee Break
 11:20-12:20: **Prof. Noriaki Ishioka** (JAXA)
“Biomedical Research in Space”
 12:30-15:00: **Poster Session 2** (with light meal)
 15:00-16:20: **Prof. Biman Bagchi** (Indian Institute of Science, India)
“Single Molecular View of Fundamental Biological Processes”
 16:20-16:40: Coffee Break
 16:40-18:00: **Prof. Toshiaki Enoki** (Tokyo Institute of Technology)
“Physical Chemistry on Nanographene and Graphene Edges”
 18:30-20:30: Dinner Party

3-5-6 組織的な大学院教育改革推進プログラム

総合研究大学院大学物理科学研究科の大学院教育改革推進プログラム「研究力と適性を磨くコース別教育プログラム」が採択され、平成21年秋から実施されている。3年間のプログラムとして、平成23年度まで続く予定である。

物理科学研究科では、物理科学の学問分野において高度の専門的資質とともに幅広い視野と国際的通用性を備えた、社会のニーズに答えることのできる研究者の育成を目指した教育が行われている。本プログラムでは、本研究科のこのような教育の課程をさらに実質化し、学生の研究力と適性を磨き、研究者として必要とされる総合力、専門力、企画力、開発力、国際性などを身に付けさせることを目的としている。そのため、博士課程前期における大学院基礎教育の充実とともに、博士課程後期におけるコース別教育プログラムを実施している。本研究科の大学院教育が行われている各基盤研究機関では、国際的に最先端の研究プロジェクト、大規模研究プロジェクト、企業との開発研究プロジェクトなどが数多く推進されており、本プログラムは、このような優れた研究的環境を最大限に生かした教育の実質化を目指している。また、eラーニングの積極的活用により、学生の成績評価、学生による授業評価、教員のファ

カルティ・ディベロップメント（FD）に関する組織的取り組みを行う。現在既に、この大学院教育改革推進プログラムに伴う履修規定の改定、共通専門基礎科目のeラーニング化、学生が主体で企画運営する研究科学生セミナーなどに向けた積極的な取り組みが行われている。



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、法人化後、技術課に所属する技術職員を公募で選考採用したり、研究室配属の技術職員を研究施設に配置転換したりすることによって、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。担当職員は、安全衛生を維持するのに必要な資格を全て取得し任務にあたっている。

広報室は、法人化と共に設置した部門であり、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研究教育職員が分担で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。例えば、分子研ウェブサイトでは、より一般に親しめるコンテンツ制作に努め、事業内容を紹介する動画の制作や展示室を設置し、見学者に公開している。また、分子研における研究トピックの発信やプレスリリースを積極的に行うために、広報室は研究部門との連携をより強めて活動している。

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。分子研設立の経緯と共に、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整理・記録し、今後は広報室と協力しながら公開することを目指している。

4-1 技術課

技術課は、所長に直属した技術職員の組織で、2010年4月1日の構成員は、7班15系の総勢38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、研究教育職員と協力し、先端的かつ独創的な研究を技術面から支え、大学共同利用機関の使命を果たすために努力している。各施設に配属された技術職員の対応する技術分野は広範囲に渡っている。機械、電気、電子、光学、情報、といった工学知識や各要素技術の技能を基に支援業務として実験機器の開発、システム開発等を行い、物理・化学・生命科学を基に物質の構造解析や化学分析等を支援している。この様に技術職員の持っているスキルを活用し、UVSOR やスパコン、レーザーシステム、X線解析装置、電子顕微鏡、ESR、SQUID、NMR など大型設備から汎用機器の維持管理、施設の管理・運用も技術職員の役割としている。さらに、科学の知識を基に研究所のアウトリーチ活動も職務として担い、広報に関する業務、出版物の作成も行っている。所内の共通業務としてネットワークの管理・運用、安全衛生管理も技術課の業務として行っている。安全衛生管理では、研究所の性質から毒劇物、危険物など薬品知識や低温寒剤の知識、放射線管理、その他技術的な側面から、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。

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に対して行うことができるようになり、強力な研究支援体制ができあがった。支援体制の横のつながりを利用し、岡崎3機関の岡崎統合事務センターと技術課が協力して最良の研究環境を研究者に提供することを目標に業務を推進している。しかし、事務組織とは違って、分子研の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と比較すると、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）で持ち回り開催を始めた。その後さらに全国の大学及び研究機関に所属する技官（技術職員）に呼びかけ新たな技術分野として機器分析技術研究会も発足させた。現在ではさらに多くの分科会で構成された総合技術研究会が大学で開催され、さらなる発展を遂げつつある。表1に今までの技術研究会開催場所及び経緯を示す。

表1 技術研究会開催機関

年度	開催機関	開催日	分科会	備考
昭和50	分子科学研究所	昭和50年2月26日	機械	名大(理)(工)のみ
昭和51	分子科学研究所	昭和50年7月20日	機械	学習院大など参加
		昭和51年2月	機械,(回路)	名大(工)回路技術
昭和52	分子科学研究所	昭和52年7月	機械	都城工専など参加
		昭和53年2月	機械,(回路)	名大プラ研回路技術

昭和 53	分子科学研究所	昭和 53 年 6 月 2 日	機械，回路	技術研究会について討論会 分科会形式始める
	高エネルギー物理学研究所	昭和 53 年 10 月 27 日	機械技術	
昭和 54	分子科学研究所	昭和 54 年 7 月	機械，回路，電子計算機	電子計算機関連の分科会を創設
	高エネルギー物理学研究所	昭和 54 年 10 月 19 日	機械	
	分子科学研究所	昭和 55 年 2 月	機械，回路，電子計算機	
昭和 55	高エネルギー物理学研究所	昭和 55 年 10 月 24 日	機械	
	分子科学研究所	昭和 56 年 1 月 30 日	機械，回路，電子計算機，低温	低温分科会を創設 技術課長 内田 章
昭和 56	分子科学研究所	昭和 56 年 7 月	機械，回路，電子計算機，低温	
	高エネルギー物理学研究所	昭和 56 年 1 月 30 日	機械	
昭和 57	高エネルギー物理学研究所	昭和 58 年 3 月 17-18 日	機械，回路，電子計算機，低温	技術部長 馬場 斉 3 研究機関持ち回り開催が始まる
昭和 58	分子科学研究所	昭和 59 年 3 月 2-3 日	機械，回路，電子計算機，低温	
昭和 59	名古屋大学プラズマ研究所	昭和 59 年 11 月 15-16 日	機械，ガラス，セラミック，低温回路，電 子計算機，装置技術	実行委員長 藤若 節也
昭和 60	高エネルギー物理学研究所	昭和 61 年 3 月 19-20 日	機械，計測制御，低温，電子計算機，装置 技術	技術部長 山口 博司
昭和 61	分子科学研究所	昭和 62 年 3 月 19-20 日	機械，回路，電子計算機，低温	
昭和 62	名古屋大学プラズマ研究所	昭和 63 年 3 月 29-30 日	機械，回路，低温，電子計算機，装置技術	
昭和 63	高エネルギー物理学研究所	平成元年 3 月 23-24 日	機械，計測制御，低温，電子計算機，装置 技術	技術部長 阿部 實
平成元	分子科学研究所	平成 2 年 3 月 19-20 日	機械，回路，低温，電子計算機，総合技術	2 ヶ所で懇談会
平成 2	核融合科学研究所	平成 3 年 3 月 19-20 日	機械，低温，計測制御，電子計算機，装置 技術	
平成 3	高エネルギー物理学研究所	平成 4 年 2 月 6-7 日	機械，低温，計測制御，電子計算機，装置 技術	
平成 4	分子科学研究所	平成 5 年 3 月 11-12 日	装置Ⅰ，装置Ⅱ，低温，電子計算機	実行委員長 酒井 楠雄 3 研究機関代表者会議
平成 5	核融合科学研究所	平成 6 年 3 月 23-24 日	機械，低温，計測制御，電子計算機，装置 技術	技術部長 村井 勝治 研究所間討論会
平成 6	高エネルギー物理学研究所	平成 7 年 2 月 16-17 日	機械，低温，計測制御，電子計算機，装置 技術	技術部長 三国 晃 研究所間討論会
平成 7	分子科学研究所	平成 8 年 3 月 18-19 日	機械，回路，計測制御，電子計算機，化学 分析	技術課長 酒井 楠雄 研究所間懇談会 化学分析を創設
平成 8	国立天文台・電気通信大学共催	平成 8 年 9 月 19-20 日	計測・制御，装置・回路計算機・データ処 理	初めての分散開催
	大阪大学産業科学研究所	平成 8 年 11 月 14-15 日	機器分析	
	名古屋大学理学部	平成 9 年 2 月 6-7 日	装置開発 A,B，ガラス工作	
	北海道大学理学部	平成 9 年 2 月 27-28 日	低温	
平成 9	核融合科学研究所	平成 9 年 9 月 11-12 日	機械，回路，低温，電子計算機，装置技術	
	静岡大学	平成 9 年 11 月 27-28 日	機器分析	工学部，情報学部，電子工学研究所 各技術部の共催
平成 10	名古屋工業大学	平成 10 年 11 月 26-27 日	機器・分析	
	高エネルギー加速器研究機構	平成 11 年 3 月 4-5 日	工作，低温，回路・制御，装置，計算機	インターネット討論会
平成 11	東北大学	平成 11 年 11 月 11 日	機器・分析	
	分子科学研究所	平成 12 年 3 月 2-3 日	装置，回路，極低温，電子計算機，ガラス 工作	インターネット技術討論会
平成 12	福井大学	平成 12 年 9 月 28-29 日	機器・分析	
	東北大学	平成 13 年 3 月 1-2 日	工作，装置，回路，極低温，情報・ネット ワーク，材料・物性開発，地球物理観測	
平成 13	大阪大学	平成 13 年 11 月 15-16 日	機器・分析	
	核融合科学研究所	平成 14 年 3 月 14-15 日	工作，装置，計測・制御，低温，計算機・デー タ処理	技術部長 大竹 勲
平成 14	東京大学	平成 15 年 3 月 6-7 日	工作，装置，回路，極低温，情報・ネット ワーク，生物科学，機器・分析，地球物理 観測，文化財保存，教育実験・実習	
平成 15	三重大学	平成 15 年 11 月 20-21 日	機器・分析	
	高エネルギー加速器研究機構	平成 16 年 2 月 26-27 日	工作，低温，回路・制御，装置，計算機	技術部長 三国 晃

平成 16	佐賀大学	平成 16 年 9 月 16-17 日	機器分析を主とし全分野	
	大阪大学	平成 17 年 3 月 3-4 日	工作, 装置, 回路・計測制御, 低温, 情報ネットワーク, 生物科学, 教育実験・演習・実習	
平成 17	岩手大学	平成 17 年 9 月 15-16 日	機器・分析	
	分子科学研究所	平成 18 年 3 月 2-3 日	機械・ガラス工作, 回路, 低温, 計算機, 装置	技術課長 加藤 清則
平成 18	広島大学	平成 18 年 9 月 14-15 日	安全衛生, 計測制御, 機器・分析など全分野	
	名古屋大学	平成 19 年 3 月 1-2 日	機械・ガラス工作, 装置技術, 回路・計測・制御, 低温, 情報ネットワーク, 生物, 分析・環境, 実験・実習	
平成 19	富山大学	平成 19 年 8 月 23-24 日	機器・分析	
	核融合科学研究所	平成 20 年 3 月 10-11 日	工作・低温, 装置, 計測・制御, 計算機・データ処理	技術部長 山内 健治
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	
平成 21	琉球大学	平成 22 年 3 月 4-5 日	機器分析, 実験・実習, 地域貢献, 安全衛生	
	高エネルギー加速器研究機構	平成 22 年 3 月 18-19 日	機械, 低温, 計測・制御・回路, 装置, 情報・ネットワーク	
平成 22	東京工業大学	平成 22 年 9 月 2-3 日	機器分析, 実験・実習, 地域貢献, 安全衛生	
	熊本大学	平成 23 年 3 月 17-18 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, 分子研の附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現在も続いている。法人化後は, 受け入れ側の負担や新しい技術の獲得には大きく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, 2007 年度から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」を行っている。この「技術課セミナー」は今後, 様々な技術分野のトピックを中心に定期的開催する予定である。2010 年度は外部より 5 名の講師 (民間 3 名) を招き開催した。また, 従来の受け入れ研修も小規模ながら続けている。

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
平成 20 年度	25
平成 21 年度	40

表 3 技術研修受入状況 (2009.4.1 ~ 2010.3.31)

氏 名	所 属	受入期間	備 考
岡田 則夫	国立天文台	23.2.21-2.22	超精密加工技術研修
松井 真二	兵庫県立大学	23.3.23	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」講師
庄子 習一	早稲田大学	23.3.23	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」講師
大原 淳士	(株)デンソー基礎研究所	23.3.23	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」講師
廣瀬 智博	(株)不二越	23.3.23-3.24	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」講師
小畠 一志	(株)アライドマテリアル	23.3.23	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」講師
吉野 一郎	(株)不二越	23.3.23-3.24	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」
沖田 喜一	国立天文台	23.3.23-3.24	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」
岡田 則夫	国立天文台	23.3.23-3.24	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」
三ツ井健司	国立天文台	23.3.23	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」
藤田 和之	北海道大学	23.3.22-3.24	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」
武井 将志	北海道大学	23.3.22-3.24	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」
上野 素裕	三重大学	23.3.23	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」
中川 浩希	三重大学	23.3.23	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」
桐 昭弘	富山大学	23.3.23-3.24	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」
柴田 幹	富山大学	23.3.23-3.24	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」
仲林 祐司	北陸先端科学技術大学院大学	23.3.23-3.24	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」
谷田貝悦男	東京大学	23.3.23-3.24	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」
石川 秀蔵	名古屋大学	23.3.23	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」
千田 進幸	名古屋大学	23.3.23	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」
中木村雅史	名古屋大学	23.3.23	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」
齋藤 清範	名古屋大学	23.3.23	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」
後藤伸太郎	名古屋大学	23.3.23	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」
月山 陽介	名古屋大学大学院	23.3.23	技術課セミナー「ナノ・マイクロ加工技術の基礎と応用」

4-1-3 人事

技術職員人事は、法人化されてからは、広く人材を確保するために、国立大学法人等採用試験や公募採用も取り入れ、即戦力、より高度な専門技術を持つ人材の採用を行ってきた。これら職員人事の経緯を表4に示す。また、職員採用については技術職員の年齢構成も考慮している。現在の職員の年齢構成は以下の様になっており、やや団塊となる世代が中堅職員層に見られ、ライン制の組織構造で起こる人材登用問題も深刻になりつつある。これらを踏まえ人事についての議論は教員を交え、なるべく多くの時間を費やすようにしている。技術職員は教員と違って人事の流動性はほとんどないため、長期間、同一職場に勤務すると、職務に対する意識が慢性化し活力が低下しがちである。従って

人事の流動は、組織と個人の活性化に重要な施策として不可欠である。その対策として法人化前は一定の期間、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、交流先の機関での人材確保や技術分野の一致が見られず、実施されていない状況である。現在、全国の技術職員のネットワークを通じて、新たな人事交流の可能性を模索している。

人事交流実績

名古屋大学理学部（技術分野：装置開発技術）

北陸先端科学技術大学院大学（技術分野：放射光技術，装置開発技術）

表 4 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 11 月 1 日	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	沼津工業高等専門学校
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	
2009 年 3 月 31 日	転出	光技術班	岩手大学
2009 年 10 月 1 日	採用（公募選考）	光技術班	
2009 年 11 月 1 日	採用（公募選考）	学術支援班	

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（2008 年定年退職） 日本化学会化学技術有功賞（1997）

西本史雄（2002 年辞職） 日本化学会化学技術有功賞（1999）

山中孝弥 日本化学会化学技術有功賞（2004）

石村和也 WATOC2005 Best Poster Diamond Certificate（2005）

堀米利夫 日本化学会化学技術有功賞（2005）

鈴井光一 日本化学会化学技術有功賞（2007）

吉田久史 日本化学会化学技術有功賞（2008）

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うほか、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、随時安全衛生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。安全衛生教育用の 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、安全衛生管理室の WEB ページ（<http://info.ims.ac.jp/safety/>）にまとめて掲載しており、必要な規則や書式に即座にアクセス可能である。また、安全衛生管理室員全員のメールアドレスが入っているメールングリスト（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、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ますます増加している。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。本年度のメンバー構成は、広報室長、副室長、技術職員 2 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、様々な改革を進めている。ここでは、以下の各項目に関して簡単に報告する。

- (1) 展示室の公開
- (2) 分子科学フォーラム
- (3) アウトリーチ活動連絡委員会
- (4) ホームページの部分改訂
- (5) 紹介ビデオの公開

4-3-1 展示室の公開

研究所見学に来訪される方々に、分子研における研究活動及び共同利用施設について分かり易く伝え、さらに、分子科学への理解を深めて頂くことを目的とした常設展示室が、平成 22 年 5 月に公開された。当展示室には、研究紹介のグラフィックパネル、UVSOR の 60 分の 1 模型、920MHz NMR の 4 分の 1 の半立体模型の他、分子科学研究の基礎を学ぶことができる 8 種類の体験型展示物を配置している。本年度は 15 団体以上(300 名以上)の見学者のほか、30 名程度の一般見学者の利用があった。

4-3-2 分子科学フォーラム

毎年 4 回開催される市民講座・分子科学フォーラムは、研究所のコロキウム委員により講演者の依頼などの企画と、実施当日及びその準備などの運営がなされ、広報室は運営の支援を担ってきた。今年度は、広報室が企画・運営に携わる比重が大きくなった。特に、第 87 回分子科学フォーラムとして企画した宇宙航空研究開発機構 川口淳一郎教授(「はやぶさ」プロジェクトマネージャー)の講演会は、岡崎コンファレンスセンター大会議室の収容能力をはるかに越える聴衆が押し寄せる大盛況となった。また、第 88 回分子科学フォーラム(ノーベル物理学賞受賞者 益川敏英教授講演)では、岡崎市民会館大ホールを会場とした大きな企画となり、広報室、分子研技術課と岡崎統合事務センターと連携による運営となった。この傾向は次年度以降のコロキウム委員のあり方を検討する材料となるものと思われる。

4-3-3 アウトリーチ活動連絡委員会

岡崎 3 機関アウトリーチ活動連絡委員会の委員として、広報室から 2 名が参加し、岡崎 3 研究所で協力して行うアウトリーチ活動の分子研での取りまとめを行った。今年度の当委員会の特筆すべき活動は、東岡崎駅構内での壁貼看板の実施である。平成 23 年 3 月から東岡崎駅構内の広告スペースの利用を開始した。この看板は、分子科学フォーラムを始めとするイベントや研究所の研究活動を広報する手段として有効と考えられる。

4-3-4 ホームページの部分改訂

平成 21 年 4 月にホームページの全面的な改訂がなされたが、運用する中で様々な要望が広報室に寄せられた。この要望を反映し、より、分かり易く情報発信ができるホームページへと部分改訂を行った。改訂のポイントは、トップページの情報量を増やすと同時に見易くする、下層ページへのアクセス向上、などである。

4-3-5 紹介ビデオの公開

平成 21 年度に作成を始めた研究所紹介（約 15 分）及び研究紹介（2 ～ 3 分 / 人）のビデオの、日本語版及び英語字幕版が完成し、分子研ホームページにて公開した。また、従前に作成されたビデオも合わせて分かり易くアクセスできるビデオ公開ページへと改良された。研究所紹介ビデオは、アウトリーチ活動である各種シンポジウムの際に分子研ブースで放映し、また、研究所見学者に御覧いただくなど有効に活用された。

4-4 史料編纂室

4-4-1 はじめに

分子研では創設三十周年記念を迎えた翌年（平成 18 年 1 月）、史料編纂室が設けられた（現在、南実験棟 102・109 号室）。そこでは、「分子研の創設の経緯」や「分子研の発展の経緯」について、非常に多数の史料を収集し、整理し、保存するという、いわゆる「アーカイブズ活動」を行っている（現在のメンバーは、木村克美、鈴木さとみ、南野智、室長・薬師久彌）。

これらの史料は、次の四つに大別できる。1）日本学術会議による分子研設立勧告（昭和 40 年）以前の動向、2）学術会議勧告から第一次分子研小委員会まで（昭和 40 - 45 年）、3）第二次分子研小委員会から分子研設立まで（昭和 45 - 50 年）、4）創設十周年記念までの分子研第一期（昭和 50 - 60 年）。

分子研創設までの比較的長い年月にわたる貴重な記録や歴史的な資料（種々の委員会の議事録や配付資料など）を可能な限り収集・保管しておくことは重要であると考えられる。これらの史料を一般に閲覧できるような検索機能をもたせることも計画している。なお、これまでの総研大アーカイブズ・プロジェクトにおける基盤共同利用機関の間の情報交換は、分子研アーカイブズ活動を進める上に非常に役立っている。

4-4-2 最近寄贈された史料

1. 井口洋夫（寄贈：平 22.3.19, 22.4.8, 22.4.28, 22.6.28）

(a)「分子研創設の資料」ファイル（昭和 48 年度総合研究費申請書・報告書、設備費一覧など）、(b)「分子研開所式の講演原稿」ファイル、(c)「日本 - スペイン共同研究」ファイル、(d)「インドとの学術交流事業」ファイル、(e)「赤松先生分 Part(3)」ファイル、(f)「歴史的材料」ファイル（平成 5 年時代の分子研スパコン導入に関する資料など）、(g)「新聞スクラップ」ファイル（分子研関連の多数の記事）、(h)「1995 年 Czech-Meeting」ファイル、(i)「OKAZAKI CONFERENCE 講演要旨集および集合写真」ファイル（昭和 60 年まで）、(j)「日米光合成研究会（ハワイ）」ファイルの資料（プログラムおよび写真）、(k)「スライド 5 枚」（化学を拓いた人・宇都宮三郎および幸福寺の写真、味の素を抽出している昔の写真）、(l) その他 7 点（分子研関連の記事が載された印刷物）。

2. 薬師久彌（寄贈：平 22.5.6, 22.7.16, 22.12.9）

(a)「30 周年記念 DVD（原稿、議事録、名簿、写真など）」、(b)「第 1 回 (1983)–10 回 (2010) 日中 Conduction-Photoconduction シンポジウム」講演要旨集および集合写真、(c)「1991 UPS-SMS 日中シンポジウム」集合写真。

3. 永瀬 茂（寄贈：平 22.7.7）

[平 15–20 年オーバーヘッド資料]。

4. 木村啓作（寄贈：平 22.8.13）

(a)「分子研ニュース」冊子 No.1 (1982)–No.5 (1984)、(b)「分子研（国立大学共同研究機関、昭和 50 年 4 月）」冊子、(c)「設立時の各部門の備品一覧」、(d)「分子研披露記念 (1979)」冊子、(e)「創設 10 周年記念事業 (1985)」冊子、(f)「電算機センターパンフレット（英語版）」冊子、(g) その他、分子研第 1 期の多数の資料。

5. 戸村正章（寄贈：平 22.4.8）

「化学試料室関連の設計図とアルバム（3 冊）」。

6. 技術課（寄贈：平 22.8.13, 22.9.3）

「分子研 20 周年記念行事の書類とカセットテープ（5 本）」および「分子研紹介ビデオテープ」（日本語版と英語版）

4-4-3 アーカイブズ研究会・学会への参加

(氏名は分子研史料編纂室からの参加者)

- (1)「アーカイブズ編成の理論と実践」(国文学研究資料館アーカイブズ研究系主催・公開研究集会)[平 22.1.9 立川市] 木村.
- (2)「アーカイブズプロジェクト打合せ」(総研大主催)[平 22.1.29, 核融合科学研究所史料室, 土岐] 木村.
- (3)「分子研創設の歴史」(日本化学会春季年会, 化学教育・化学史セッション)[平 22.3.28, 近畿大学, 東大阪市] 木村(口頭発表)・南野・鈴木・薬師.
- (4)「第1回自然科学アーカイブズ研究会」(高エネルギー・加速器研究機構史料室主催)[平 22.7.1, 自然科学研究機構研究連携室, 東京] 木村.
- (5)「教育研究機関におけるアーカイブズ活動を考える研究会」(日本アーカイブズ学会 2010 年度第1回研究集会)[平 22.9.23, 東大工, 東京] 木村.
- (6)「日米のサイエンス・アーカイブズを語る」(高エネルギー・加速器研究機構史料室主催)[平 22.10.13-14, 高エネルギー加速器研究機構, つくば] 木村, 鈴木.
- (7)「第2回自然科学アーカイブズ研究会」(核融合科学研究所史料室主催)[平 23.2.2, 核融合科学研究所] 木村, 鈴木.
- (8)「岡崎3研究所アーカイブズ懇談会」(基生研・生理研・分子研)[平 22.2.15, 22.5.24, 22.9.6, 22.12.6].

4-4-4 おわりに

史料は、文書保存箱に整理して保存している。長期保存のため、最近は中性紙の保存箱も利用している。各史料の保存については、(a) 通常の紙コピー、(b) デジタル化(PDF ファイル)、(c) 特に貴重と思われる史料については長期保存のためマイクロフィルム化を進めている。

分子研・史料編纂室としては、今後とも他機関のアーカイブズ室と連携を保ちながら、アーカイブズ活動を継続していきたい。

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 10 回開催されている。

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

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

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

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

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。

第 7 回：「科学的発見とは何か 「泥沼」から突然「見晴らし台へ」」，東京国際フォーラム，2009 年 3 月 20 日。

第 8 回：「脳が諸学を生み，諸学が脳を統合する」，学術総合センター橋記念講堂，2009 年 9 月 23 日。

第 9 回：「ビックリ 4D で見るサイエンスの革新」，東京国際フォーラム，2010 年 3 月 21 日。

第 10 回：「多彩な地球の生命—宇宙に仲間はいるか—」，学術総合センター橋記念講堂，2010 年 10 月 10 日。

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「分子研レポート 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。さらに第 7 回では，加藤晃一教授が自らの体験に基づいて「研究の醍醐味とは何か」を伝える講演を行った。

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，第 6 回以降は，新規に作成した分子研の紹介ビデオを放映している効果もあり，以前にも増して多数の方々より様々な質問を頂くようになった。

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，2010 年 12 月で 827 回目を数えた。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実現し，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。第 1 回は 1996 年 9 月にシカゴ大学教授の岡 武史先生（現名誉教授），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 88 回開催されている。

『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、分子研内の研究者がより広範な科学の内容に触れる場を提供してきたが、2008 年度より一般市民の方々に科学の面白さ・楽しさを広める「市民一般公開講座」として新たに位置づけた。2009 年度は広報・アウトリーチ活動の重要性が益々増大している現状に鑑み、一元的で効率的な活動の展開を目指して、広報室を中心とした実施体制の整備を進めた。また講演回数をこれまでの年 6 回から年 4 回に変更し、密度の高い講座を開講することで、より魅力的な『分子科学フォーラム』の実現を図った。

回	開催日	テーマ	講演者
85	2010. 6.16	水，水，水；不思議な水のミクロの世界	大峯 巖 (分子科学研究所長)
86	2010. 9. 3	化学は「くすりづくり」にどのように役立っているか	大島 正裕 (田辺三菱製薬株式会社・CMC 研究センター CMC 保証部長)
87	2010.11. 5	「はやぶさ」が挑んだ世界初の往復惑星飛行	川口 淳一郎 (宇宙航空研究開発機構教授，「はやぶさ」プロジェクトマネージャー)
88	2011. 1.14	益川流・フラフラのすすめ	益川 敏英 (名古屋大学素粒子宇宙起源研究機構長)

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講師を担当している。

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
2009 年度	平田 文男	生命活動における『水』の働き

4-5-4 その他

(1) 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。これらは主に技術課の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、交流会によって出来あがった協力体制は現在も継続している。また、平成 22 年度は隔年で開催される「岡崎ものづくりフェア 2010」へ大学・研究機関として参加出展した。

(2) 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実施している。

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組み～	西 信之 教 授
2010. 1.19	次世代の太陽電池について	平本 昌宏 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することに合意した。今年度は以下の 2 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

・「自作造波機を用いた文字の造波」（指導：装置開発室及び米満賢治准教授）

6 月 21 日に分子研装置開発室で、生徒から造波機の作成について相談を受け、造波機が完成した 10 月まで製作を支援した。また、文字を造波する際に必要とされる理論的な指導を米満准教授が行った。この研究は、第 54 回県学生科学賞にて優秀賞を受賞した。

・「物性理論研究への指針」（指導：米満賢治准教授）

7 月 28 日に、物性理論の研究に興味を持つ生徒に、今後の研究方向について指導した。

(2) 科学三昧 in あいち 2010

12 月 24 日にウィルあいち 愛知県女性総合ホール（名古屋市）で開催された。

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。

分子科学研究所が担当したものは以下のとおりである。

(1) 「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）

開催日	タイトル	講 師
2008. 6.21	二酸化炭素の科学を楽しんでいます	田中 晃二 教 授
2009. 6.13	エネルギー問題の解決は科学者の使命——太陽電池のはなし	平本 昌宏 教 授

(2) 「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体験し、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 1 F）、UVSOR

日時：2008 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

岡崎西高校は、2008 年度から連続して、今年度も、分子科学研究所宇理須グループと連携して科学技術振興機構（JST）のサイエンスパートナーシッププロジェクト（以下 SPP と略す）に応募して採択された。「神経細胞への遺伝子導入による光受容体タンパク質発現」のテーマのもと、7 月 16 日～20 日の期間で講義および実験指導が行われた。

4-6-4 あいち科学技術教育推進協議会

スーパーサイエンスハイスクール（SSH）研究指定校、愛知スーパーハイスクール研究校、さらに、サイエンスパートナーシップ（SPP）実施校である愛知県下の 16 高校が、2009 年度に「あいち科学技術教育推進協議会」を立ち上げた。これは、文部科学省指定 SSH 中核拠点育成プログラムの一貫として、SSH で得た知識や組織力を活用し、全

県的な取り組みとして理数教育の推進を目指したものである。協議会設立のキックオフイベントとして「科学三昧 in あいち 2009」が2009年12月24日に岡崎コンファレンスセンター（岡崎市）にて開催された。当イベントにおいては、協議会加盟校を含む県内の多数の高校から理科教員や高校生が集まり（参加総数300名以上）、科学や技術についての先進的教育活動の紹介が行われた。分子研からは「酸化物半導体薄膜を利用した光波干渉と光発電」「デスクトップ電子顕微鏡で観るナノの世界」と題した2つの体験型ブースをワークショップに出展し、高校生をはじめとする来場者との交流を行った。2010年度は、「科学三昧 in あいち 2010」が2010年12月24日にウィルあいち（名古屋市）にて開催された。

4-6-5 国研セミナー

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

分子科学研究所が担当したものは以下のとおりである。

回	開催日	テーマ	講 師
2	1986. 1.18	分子研の紹介	諸熊 奎治 教 授
3	1986. 6. 7	シンクロトロン放射とは （加速器・分光器・測定器の見学）	渡邊 誠 助教授 春日 俊夫 助教授
6	1986.10. 4	人類は元素をいかに利用してきたか	齋藤 一夫 教 授
9	1987. 6.13	レーザーの応用について	吉原経太郎 教 授
12	1987. 9.26	コンピュータで探る分子の世界	柏木 浩 助教授
15	1988. 7. 2	目で見える低温実験・発光現象と光酸化現象	木村 克美 教 授
18	1988.10.29	人工光合成とは何か	坂田 忠良 助教授
21	1989. 6.24	星間分子と水——生命を育む分子環境——	西 信之 助教授
24	1989.10.21	常温での超伝導は実現できるか	那須奎一郎 助教授
27	1990. 6.23	目で見える結晶の生成と溶解 ——計算機による実験（ビデオ）——	大瀧 仁志 教 授
30	1990.10.20	電気と化学	井口 洋夫 所 長
33	1991. 6.22	自己秩序形成の分子科学 ——分子はどのようにしてリズムやパターンを作り出すか——	花崎 一郎 教 授
37	1991.12.14	からだと酸素，そしてエネルギー：その分子科学	北川 禎三 教 授
39	1992. 7. 7	サッカーボール分子の世界	加藤 立久 助教授
42	1992.11.13	炭酸ガスの化学的な利用法	田中 晃二 教 授
45	1993. 6.22	化学反応はどのように進むか？	正畠 宏祐 助教授
48	1993.10. 1	宇宙にひろがる分子の世界	齋藤 修二 教 授
51	1994. 6.21	分子の動き	伊藤 光男 所 長
54	1995. 6.20	生体内で活躍する鉄イオン——国境なき科学の世界——	渡辺 芳人 教 授
57	1996. 6.28	分子を積み上げて超伝導体を作る話	小林 速男 教 授
60	1997. 6.13	生体系と水の分子科学	平田 文男 教 授
63	1998. 6.12	電子シンクロトロン放射光による半導体の超微細加工 ——ナノプロセスとナノ化学——（UVSOR 見学）	宇理須恆雄 教 授

66	1999. 6. 8	レーザー光で、何が見える？ 何ができる？	猿倉 信彦 助教授
69	2000. 6. 6	マイクロチップレーザーの可能性	平等 拓範 助教授
72	2001. 6. 5	ナノメートルの世界を創る・視る	夢田 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
96	2009. 6. 9	化学結合をいかに教えるか	平本 昌宏 教 授
101	2010.11. 9	生命の営みと「水」 ——化学・物理の理論とコンピュータで探る分子スケールの生命現象——	平田 文男 教 授

4-6-6 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
矢作中	2009.12. 4	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
岩津中	2010.10. 6	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
東海中	2010.11.30	電気を流す物ってどんな物？	中村 敏和 准教授

岡崎市立小豆坂小学校（親子おもしろ科学教室）

回	開催日	テーマ	講 師
1	1996.12. 5	極低温の世界（液体窒素）	加藤 清則 技官
3	1997.12. 4	いろいろな光（紫外線，赤外線，レーザー光）	大竹 秀幸 助手
17	2004.11.30	波と粒の話	大森 賢治 教授
23	2007.11.27	身の回りにも不思議はいっぱい	青野 重利 教授

4-6-7 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
2009	4	8	岡崎市立甲山中学校，豊川市立音羽中学校，岡崎市立東海中学校，岡崎市立竜南中学校
2010	4	9	岡崎市立甲山中学校，岡崎市立竜海中学校，岡崎市立竜南中学校，豊田市立高岡中学校

4-6-8 その他

(1) 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。分子科学研究所は２００７年は，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。２００９年は一般公開の宣伝と未来の科学者賞の案内を行った。２０１０年は常設展示室から３つの体験型展示物（ローレンツ力の実験，光の波長とモノの見え方，アンジュレータの磁石を使った実験）を設置し，来場者に体験していただいた。

4-7 一般公開

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

回 数	実施月日	備 考
第1回	1979.11. 9 (Fri)	創設記念一般公開
第2回	1980.11.15 (Sat)	
第3回	1981.11.14 (Sat)	3 研究所同時公開
第4回	1985. 5.11 (Sat)	10 周年記念一般公開
第5回	1988.11. 5 (Sat)	入場者 1700 人
第6回	1991.10.26 (Sat)	入場者 1974 人
第7回	1994.11.12 (Sat)	入場者 2700 人
第8回	1997.11.15 (Sat)	入場者 2400 人
第9回	2000.10.21 (Sat)	入場者 1183 人
第10回	2003.10.25 (Sat)	入場者 1600 人
第11回	2006.10.21 (Sat)	入場者 2058 人
第12回	2009.10.17 (Sat)	入場者 1346 人

4-8 見学者受け入れ

自然科学研究機構岡崎3機関の見学者の受け入れは、岡崎統合事務センター総務部総務課企画評価係が窓口になって行われており、その中で分子科学研究所の見学分については、技術課が中心となってその対応にあたっている。2010年5月に展示室を開設し、個人の見学受け入れを開始した。年間およそ300名が来訪している。

団体申込み

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 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 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 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 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 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 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 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 東京農工大学 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 愛知県立一宮高等学校 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 愛知県立安城南高等学校 ほか
2008	14	294	自動車技術会中部支部 愛知県立岡崎北高等学校 ほか
2009	8	154	東京都立科学技術高等学校 (株)デンソー技研センター ほか

2010	18	401	立命館高等学校，愛知教育大学，光ヶ丘女子高等学校，岡崎市姉妹都市ニューポートビーチ市使節団，豊橋商工会議所ものづくり委員会，東海大学付属高輪台高等学校，丹波地方小中学校理科教育研究会，東京都立科学技術高等学校，(社)近畿化学協会，愛知県陶磁器工業協同組合，(社)新化学発展協会，岡崎商工会議所，西尾幡豆納税貯蓄組合連合会，愛知工業大学名電高等学校，愛知県技術士会，愛知県立知立東高等学校，全豊田技術会議
------	----	-----	---

(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。)

個人申込み（分子研展示室）

年度	受入件数	見学者数
2010	13	33

5．各種事業

大学共同利用機関である分子科学研究所は、国際的な分子科学研究の中核拠点として所内外の研究者を中心とした共同研究と設備を中心とした共同利用を積極的に推進し、大学等との人事流動や国際交流を活性化しながら、周辺分野を含めた広い意味の分子科学の発展に貢献する使命を持っている。

分子科学研究所が行う事業には、『先端的な研究を推進する拠点事業』、『国内の研究者への共同研究・共同利用支援に関する事業』、『研究者の国際ネットワーク構築に関する事業』がある。予算的には運営費交付金の一般経費・特別経費、文部科学省の委託事業、日本学術振興会等の競争的資金で実施している。運営費交付金の一般経費以外はいずれも期間が定められており、運営費交付金一般経費も毎年削減を受けている。第1期中期計画期間に特別経費であった3事業（UVSOR 共同利用事業、エクストリームフォトンクス連携事業、研究設備ネットワーク事業）は平成22年度からの第2期中期計画の開始において相当予算削減された上で一般経費化された。なお、スーパーコンピュータ共同利用事業の特別経費については第1期中期計画期間の段階からすでに一般経費化されている。これら事業の継続は認められているが、今後も運営費交付金一般経費の予算削減は続く予想され、第1期中期計画期間と同じ水準での事業実施は困難である。すべての事業の精査を行い、重点化するなど事業を絞り込むこと、また、新たな事業に機動的に取り組むことが必要である。

(1) 『先端的な研究を推進する拠点事業』としては、UVSOR 共同利用事業（放射光分子科学）、エクストリームフォトンクス連携事業（レーザー分子科学）に関連するものとして、文科省で「光・量子科学研究拠点形成」プロジェクトが走っている。研究所としては、量子ビーム基盤技術開発プログラム（UVSOR が代表）、光創成ネットワーク研究拠点プログラム（分子科学研究所は分担）を受託、実施している。前者は平成24年度まで、後者は平成29年度までの事業である。また、スーパーコンピュータ共同利用事業（理論計算分子科学）に関連するものとして、文科省で「最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトが走っている。研究所としては平成18年度より「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」拠点のナノ分野の「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。この事業は平成23年度で終了する。

(2) 『国内の研究者への共同研究・共同利用支援に関する事業』のうち、実験研究のための共同利用は機器センター及び分子スケールナノサイエンスセンターが担当している。機器センターでは、研究設備ネットワーク事業（平成19年度から「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」、平成22年度より「大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用と共同研究の推進」）を進めており、分子スケールナノサイエンスセンターは、文科省の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」の「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、共同利用設備の共用を推進している。前者の大学連携研究設備ネットワーク事業については、当初の3つの目的、全国的設備相互利用、設備復活再生、最先端設備重点配置のうち、第2期中期計画期間では、最初のものだけが生き残り実施されることになったが、今後も運営費交付金の削減が予定されており、第2期中期計画期間中に事業の方向性を見直す必要がある。一方、後者のナノテクノロジーネットワーク事業は運営費交付金の事業ではなく、平成23年度で終了する。このような背景で、平成24年度以降の共同利用設備の安定的な運営を勘案し、現在、分子スケールナノサイエンスセンターの共同利用設備も機器センターに集約し、予算面では運営費交付金一般経費に頼るばかりでなく、組織的に適切な外部資金等を新たに獲得して、予算減を補うようにする方向で検討が進んでいる。

(3)『研究者の国際ネットワーク構築に関する事業』としては、個人ベースの萌芽的な取り組みと組織ベースの国際共同研究拠点の形成がある。従来からの外国人顧問制度、客員外国人制度、招へい外国人制度、国際研究集会（岡崎コンファレンスなど）を実施すると同時に、第1期中期計画期間から独自の分子研国際共同プログラムを進めてきた。このプログラムは個人ベースの国際共同研究のきっかけ（萌芽的国際共同）を作るものである。さらに国際共同研究拠点として組織ベースで取り組むために、第2期中期計画期間においては、自然科学研究機構としての運営費交付金特別経費で「自然科学研究における国際的学術拠点の形成事業」がスタートした。分子科学研究所では、「分子科学国際共同研究拠点の形成」による新たな取り組みの検討とその準備（協定締結等）が始まっている。また、日本学術振興会の多国間交流事業「アジア研究教育拠点事業」の一環として、「物質・光・理論分子科学のフロンティア」（平成18年度～平成22年度）の事業を行ってきた。これまで5年間、日中韓台の4拠点（協定をそれぞれ締結）を中心にしてマッチングファンド方式での様々な試みを行った。平成23年度以降は、これまでの経験を踏まえて精査を行った上で集中・重点化し、上記「分子科学国際共同研究拠点の形成」の予算枠で実施する方向で検討を行っている。また、分子科学研究所は、政府による21世紀東アジア青少年大交流計画（JENESYSプログラム）の枠で設定された日本学術振興会の「若手研究者交流支援事業」に平成20年度より毎年、応募・採択され、対象国の若手研究者（院生を含む）の人材育成に貢献しているところである。このようにアジア地区の国際ネットワークを構築すると同時に、さらに米国、欧州、インドとの国際共同研究を強化していく予定である。

5-1 大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用と共同研究の促進 (文部科学省)

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・地域研究設備活用ネットワークを構築し、大学間での研究設備の有効活用を図ることを目的として、「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」が平成 19 年度よりスタートしたが、平成 22 年度からは、「大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用と共同研究の促進」として体制が整えられた。

本ネットワークには国立大学ばかりでなく、私立大学や企業も含めて全国 79 の機関が参加している。平成 23 年 1 月 18 日現在、登録機器数は 342 台であるが、このうち外部公開設備は 264 台、学内専用設備は 78 台となっている。今後、学内専用設備の登録が加速され、6,711 名のユーザーには自己の学内専用設備と全国公開設備の双方の予約が可能となる。

平成 22 年度からは第 2 期中期計画時期に入ることもあり、化学系を越えたプロジェクトとして、「大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用と共同研究の促進」という新たな課題の下に、共同研究の促進という一層の発展を指向した提案を行い、協議会に於いて、平成 22 年度は 25 件の登録設備の活用を骨格とした共同研究プロジェクトと 1 件の復活再生が採択された。平成 23 年度も先端設備等相互利用設備を活用した全国・地域での複数の大学の研究者による共同研究プロジェクトが実施される予定である。第 2 期中期計画の間は、この体制を維持することが、平成 22 年 3 月の協議会に於いて決められた。この共同研究によって導入設備の一層の有効活用と研究者間のコミュニケーションの活性化が促進し、本事業の目的達成に相応しい実施体制が実現すると期待される。

一方、この予約課金システムを学内利用システムにも利用して頂き、学内専用設備と全国公開設備の予約システムの一元化を図っている。学内予約システムを整備し、学内専用予約システムに本システムを採用する大学が増加している。ソフトの維持管理や課金の自動化などに費用をかけずに相互利用を行う事が出来るのは多くの大学にとって大きなメリットとなるであろう。

5-2 連携融合事業「エクストリームフォトンクス」(文部科学省)

平成 17 年度から理化学研究所との連携融合事業として「エクストリーム・フォトンクス」を推進している。「光を造る」、「光で観る」、「光で制御する」という 3 つの観点から、両研究所が相補的に協力交流することによって、レーザー光科学のより一層の進展を図ろうとするプログラムである。分子研側からは、3 つの観点のそれぞれにおいて以下の課題を選定し、いずれも精力的に研究を推進してきた。

(1) 「光を造る」

「光波特性制御マイクロチップレーザーの開発」(平等)

(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)

(3) 「光で制御する」

「アト秒コヒーレント制御法の開発と応用」(大森)

「紫外強光子場による反応コヒーレントコントロール」(菱川)

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

これらの課題の成果は、既に *Science* 誌, *Nature Physics* 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、アメリカ物理学会フェロー表彰、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、英国王立化学会 PCCP 賞など、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。平成 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。平成 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。平成 19 年度は、4 月に理化学研究所にて「バイオイメージング」をテーマに第 5 回シンポジウムを開催した。ここでは、高感度レーザー顕微鏡やテラヘルツ分光を利用した生体系のイメージングについて議論した。さらに、11 月には「先端光源開発と量子科学への応用」を主題とした第 6 回シンポジウムを行い、高強度超短パルスレーザーを始めとする先端レーザー光源の開発と、それらを原子分子クラスターあるいは表面ダイナミックスの観察や制御へと応用した研究成果と今後の展望について議論した。平成 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。平成 21 年度は、5 月に理化学研究所にて「光で繋ぐ理研の基礎科学」をテーマに第 9 回シンポジウムを開催した。ここでは、これまでに本

事業によって推進された理研の光科学研究の成果を総括するとともに、今後の展開についての意見交換が行われた。さらに、11月には蒲郡にて分子科学研究所が主催で「凝縮系における量子の世界」と題した第10回シンポジウムを行い、固体やナノ構造体の量子性を対象にした新しい研究領域の可能性について議論した。平成22年度は、10月に理化学研究所にて「顕微分光技術と生物科学との接点」をテーマに第11回シンポジウムを開催した。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（自然科学研究機構）

5-3-1 概要

自然科学研究機構の法人化後第1期中期計画期間（平成16～21年度）には、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」が行われたが、平成22年度から第2期中期計画期間となり、これが再編され「自然科学研究における国際的学術拠点の形成事業」と「新分野の創成」となった。

「自然科学研究における国際的学術拠点の形成事業」では、分子科学研究所、国立天文台、核融合科学研究所が共同して進める「シミュレーションによる『自然科学における階層と全体』に関する新たな学術分野の開拓」、分子科学研究所が主体的に進める「分子科学国際共同研究拠点の形成」等のプロジェクトが行われることとなった。（この内前者には、平成21年度までに実施してきた「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」及び「自然科学における階層と全体」が発展的に展開されることとなった。）またこの他に機構内で提案公募に基づいて選考・実施する「若手研究者による分野間連携研究プロジェクト」を行い、分子科学研究所が中心となる課題として平成22年度は2件が採択・実施された。

「新分野の創成」では、機構の新分野創成センターが主体的に行うプロジェクトが行われている。これには、平成21年度まで「分野間連携」の一環として行われた「イメージング・サイエンス」が組み込まれる形となっている。

5-3-2 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。

その後、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・実施された（「イメージング・サイエンス—超高圧位相差電子顕微鏡をベースとした光顕・電顕相関3次元イメージング—」など）。これが上述の提案に代わるものとして、「イメージング・サイエンス」に係る具体的な機構内連携研究を推進した。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研究所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。平成

21 年度に機構本部の下に、5 研究所が連携して自然科学の新しい分野や問題を発掘することを目指して、新分野創成センターが設置され、その中に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がおかれた。イメージングサイエンス研究分野は5 研究所から1 名ずつの併任教授が就任した。また外部からの任期付き客員教授1 名及び実動部隊としての博士研究員若干名を公募し、上述のようなイメージングコンテンツの新たな表示法や、イメージからの特徴抽出の手法等の開発を推進することとなった。現在客員教授及び博士研究員2 名が、実際の活動を行っている。平成22 年度には、イメージングサイエンス研究分野所属の研究者と、関連する分野の大学の研究者が集まり、新たな「画像科学」を展開する研究領域を立ち上げる活動の模索を開始した。

(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、一般の市民を対象に、機構の研究アクティビティーをアピールすることを目的として、立花氏が企画して実現したもので、当日は約600 名収容の会場がほぼ満席となる参加があった。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 年度にクバ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。平成22 年3 月21 日には、再び立花隆氏のコーディネートによる自然科学研究機構シンポジウム（東京で開催）において、イメージングサイエンスを取り上げた。平成22 年12 月28 日には、核融合科学研究所において、イメージングサイエンス研究分野所属の研究教育職員と様々な関連分野の全国から研究者が集まり、「画像科学シンポジウム」が開催された。

5-3-3 シミュレーションによる「自然科学における階層と全体」に関する新たな学術分野の開拓

平成 22 年度より開始した本プロジェクトは、シミュレーションを利用した理論計算科学研究を推進することにより、分子スケールからメソスケールにおける物質や生体の機能や物性に繋がる電子・分子ダイナミクス多様性・階層性の解明を目的とする。さらに、理論計算科学研究を越えて、分子スケールの機能や物性から固体物質、ソフトマター、生物における機能や物性の実験研究を通して分子の階層性の解明を進め、新たな分子科学すなわちポストナノサイエンス分野の形成を目指している。

以上のポストナノサイエンス分野の形成を目指した研究活動に加え、ポストナノサイエンス分野における理論計算科学分野のセミナー、さらに、人材育成を目的とし分子シミュレーションに関する講習会を開催した。さらに、理論計算による自然界における階層と全体を俯瞰することを目的に、国立天文台および核融合科学研究所を中心とする理論研究者と、MD シミュレーションとその応用、低電離プラズマ物理と磁気リコネクション、表面をキーワードにした合同シンポジウムを開催した。

理論計算分子科学セミナー 5 回

人材育成講習会「分子シミュレーションスクール—基礎から応用まで—」平成 22 年 12 月 22 日～24 日

第 1 回所内ワークショップ 平成 22 年 10 月 28 日

三研究所合同シンポジウム 平成 23 年 1 月 18 日、19 日

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-acore/00gaiyou_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、台湾中央研究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、過去5年間に渡って双方向の活発な研究交流が進展した。また、4拠点研究機関以外の大学や研究機関も研究交流に参加した。平成22年度は最終年度である。これまでの5年間の活動の概要を以下にまとめる。

(1) 共同研究

物質分子科学においては、 π 電子系有機分子を基盤とする機能性ナノ構造体の構築と機能開拓、先端ナノバイオエレクトロニクス、自己組織化金属錯体触媒の開発（以上、中国との共同研究）、超高磁場NMRを用いた蛋白質-ペプチド相互作用の精密解析（韓国、台湾、香港との共同研究）、バッキーボウルに関する合成・物性研究、アミロイドベータの凝集と脂質二重膜との反応（以上、台湾との共同研究）、新規遷移金属錯体触媒システムの開発（韓国との共同研究）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）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、タンパク質フォールディング病の分子動力学シミュレーション（以上、台湾との共同研究）が進展した。

(2) 共同セミナー

平成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。

平成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。

平成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。

平成21年度は,「第2回日韓生体分子科学セミナー—実験とシミュレーション」(日本・名古屋),「日中機能性超分子構築シンポジウム」(日本・札幌),「日韓分子科学シンポジウム「物質分子科学・生命分子科学における化学ダイナミクス」」(日本・淡路島),「第4回物質・光・理論分子科学のフロンティア」冬の学校(韓国・ソウル),「中日先端有機化学シンポジウム」(中国・上海),「第4回全体会議」(台湾・台北)が開催された。

平成22年度は,「第3回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・済州島),「中日機能性超分子構築シンポジウム」(中国・長春),「協同機能触媒」(米国・ハワイ),「総研大/アジアコアプログラム冬の学校」(日本・岡崎),「中日触媒の合成化学シンポジウム」(中国・天津),「日韓有機金属化学シンポジウム」(日本・奈良),「第5回全体会議」(日本・岡崎)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、平成19年度より平成23年度まで名古屋大学、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している。

分子科学研究所では、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。平成22年度は協力研究32件、施設利用22件（1月13日現在）を採択し、うち協力研究14件、施設利用12件は実施した（来所予定確定分を含む）。所内利用も51件に上っている（1月13日現在）。

表1に分子科学研究所が担当する支援装置・プログラムの一覧、表2に平成22年度採択課題一覧を示す。支援は、担当研究者と共に研究を進めてゆく協力研究と、装置に関する十分な知識と経験を有する研究者が随時の申し込みによって当該装置を利用する施設利用の何れかの申し込みを通して行われる。課題申請等の詳細は<http://nanoims.ims.ac.jp/>にあり、本務の共同利用と同様に、通常申請（年2回）と随時申請がある。申請は分子スケールナノサイエンスセンター運営委員会の下部組織であるナノネット小委員会では審査される。本務の共同利用と異なり、本事業では産業界からの申請も無償（ただし結果の公開が義務付けられる）で幅広く受け付けている。

なお、成果等に関しては本冊子8章の分子スケールナノサイエンスセンターの節に記載した。

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
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
分子レベル触媒設計と構造解析支援	各種固体触媒表面の設計手法により, 分子レベルで固体触媒表面の構造を設計し, また, 固体 NMR, 赤外分光, ラマン分光, XAFS 等の各種分光法を用いた固体触媒の構造解析の支援, 特に, 触媒反応が進行しているその場で in-situ 構造解析を重点的に支援する。	唯美津木准教授	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。現状世界最高レベルの 920MHz NMR。固体, 多次元, 3 重共鳴にも対応。	加藤晃一教授 横山利彦教授	生命・錯体分子科学研究領域
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 平成 22 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
920MHz 超高磁場 NMR によるアミロイドβ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
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 水島 恒彦
920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いた自己集合性錯体の構造解析	NMR	東京大学大学院工学系研究科 佐藤 宗太
SiC 表面分解カーボンナノチューブ生成法における清浄表面化処理に関する研究	ESCA	名城大学理工学部 丸山 隆浩
SiC 表面分解生成法におけるカーボンナノチューブの構造評価	TEM	名城大学理工学部 丸山 隆浩
連結方法の異なる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	愛媛大学大学院理工学研究科 宇野 英満
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
TOF/TOF 質量分析を用いたバッキーボウル分子の解離フラグメントの解析	有機材料	東北大学大学院環境科学研究科 佐藤 義倫
金ナノ粒子配列の近接場イメージング	SNOM	(独)物質・材料研究機構 三木 一司
重原子を骨格に含む新しい芳香族化合物の合成とその性質の理論的解明	量子計算	埼玉大学大学院理工学研究科 斎藤 雅一
高周期元素の特性を活かした新規ナノスケール分子の開発	量子計算	京都大学化学研究所 時任 宣博
単層カーボンナノチューブのアミンによる側面化学修飾法の開発	量子計算	東京学芸大学教育学部 前田 優
ナノサイズ分子キャ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

課 題 名（後期）	支援装置	代 表 者
920MHz 超高磁場 NMR によるアミロイドβ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
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 水島 恒彦
920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いた自己集合性錯体の構造解析	NMR	東京大学大学院工学系研究科 佐藤 宗太
SiC 表面分解カーボンナノチューブ生成法における清浄表面化処理に関する研究	ESCA	名城大学理工学部 丸山 隆浩
SiC 表面分解生成法におけるカーボンナノチューブの構造評価	TEM	名城大学理工学部 丸山 隆浩
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
TOF/TOF 質量分析を用いたバッキーボウル分子の解離フラグメントの解析	有機材料	東北大学大学院環境科学研究科 佐藤 義倫
金ナノ粒子配列の近接場イメージング	SNOM	(独)物質・材料研究機構 三木 一司
連結方法の異なる核置換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	愛媛大学大学院理工学研究科 宇野 英満
有機分子 / 磁性金属ヘテロ構造に於ける電子スピン状態分光	磁気光学	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
重原子を骨格に含む新しい芳香族化合物の合成とその性質の理論的解明	量子計算	埼玉大学大学院理工学研究科 斎藤 雅一
高周期元素の特性を活かした新規ナノスケール分子の開発	量子計算	京都大学化学研究所 時任 宣博
単層カーボンナノチューブのアミンによる側面化学修飾法の開発	量子計算	東京学芸大学教育学部 前田 優
ナノサイズ分子キャ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
スマネン誘導体を 1 次元精密配列することによる機能性物質探索	有機材料	(独)産業技術総合研究所 岡崎 俊也
シクロペンタジエンとの環化付加反応を用いた常磁性 La@C ₈₂ の化学修飾	量子計算	筑波大学生命領域学術研究センター 赤阪 健
常磁性金属内包フラーレン配位子の合成と性質	量子計算	筑波大学生命領域学術研究センター 土屋 敬広
	磁気光学	Max-Planck Institut (Halle, Germany) Marek Przybylski
	磁気光学	京都大学大学院理学研究科 奥山 弘

(2) 施設利用

課 題 名（前期）	支援装置	代 表 者
自己組織化に分子配列を制御したポリマー太陽電池の開発	有機半導体	名古屋工業大学大学院工学研究科 林 靖彦
フッ化物薄膜を用いた紫外線検出器開発	SEM/FIB	名古屋工業大学大学院工学研究科 小野 晋吾
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
ナノ領域の特異現象と 46 億年前の微粒子形成	TEM	東北大学大学院理学研究科 木村 勇気
Pt 細線加工と観察	SEM/FIB	テラベース(株) 伊藤 俊幸
大電流パルススパッタを用いたナノ構造制御成膜法による Cr ₂ N 皮膜の構造解析および評価	TEM	(株)アヤボ 塚本 恵三
固体 NMR によるゴムの劣化メカニズム解明	NMR	住友ゴム工業(株) 小林 将俊
発光性シリコンナノクラスターの構造評価	TEM	東京理科大学理学部 根岸 雄一

カーボン系および非カーボン系薄膜材料の開発および物性評価	SEM/FIB (株)鈴寅	滝沢 守雄
大電流パルススパッタを用いたナノ構造制御成膜法による Cr ₂ N 皮膜の構造解析および評価	SEM/FIB (株)アヤボ	塚本 恵三

課 題 名 (後期)	支援装置	代 表 者
自己組織化に分子配列を制御したポリマー太陽電池の開発	有機半導体	名古屋工業大学大学院工学研究科 林 靖彦
フッ化物薄膜を用いた紫外線検出器開発	SEM/FIB	名古屋工業大学大学院工学研究科 小野 晋吾
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
ナノ領域の特異現象と 46 億年前の微粒子形成	TEM	東北大学大学院理学研究科 木村 勇気
Pt 細線加工と観察	SEM/FIB	テラベース(株) 伊藤 俊幸
大電流パルススパッタを用いたナノ構造制御成膜法による Cr ₂ N 皮膜の構造解析および評価	TEM	(株)アヤボ 塚本 恵三
固体 NMR によるゴムの劣化メカニズム解明	NMR	住友ゴム工業(株) 小林 将俊
カーボン系および非カーボン系薄膜材料の開発および物性評価	SEM/FIB	(株)鈴寅 滝沢 守雄
ヒアルロンダーゼ阻害活性を有するシソ科植物成分の構造解析	NMR	静岡県立大学薬学部 宮瀬 敏男
各種光学デバイス開発時のメカニズム解明および最適技術の確立	SEM/FIB	ソニーイーエムシーエス(株) 荒川 達士
プラズモン誘起化学反応解析のための貴金属ナノ構造体の形状分析	TEM	早稲田大学理工学術院先進理工学部 井村 考平
ガングリオシド GM2 及びウコン色素クルクミンの構造解析	NMR	岐阜大学応用生物科学部 中塚 進一

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、平成 18 年度より平成 23 年度まで「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

ナノ物質内の電子制御をシミュレートできる方法論を確立する。

(2) 次世代ナノ生体物質

ナノスケールの生体物質に対して、自由エネルギーレベルでの相互作用、自己組織化、また動的な振る舞いをシミュレートできる方法論を確立する。

(3) 次世代エネルギー

高効率の触媒・酵素の設計ができる方法論を確立する。

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。

「ナノ統合拠点」は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必要な理論・方法論およびプログラムの開発を進めると同時に、その実証研究を進めてきた。平成 22 年度に遂行した主な課題は下記のとおりである。

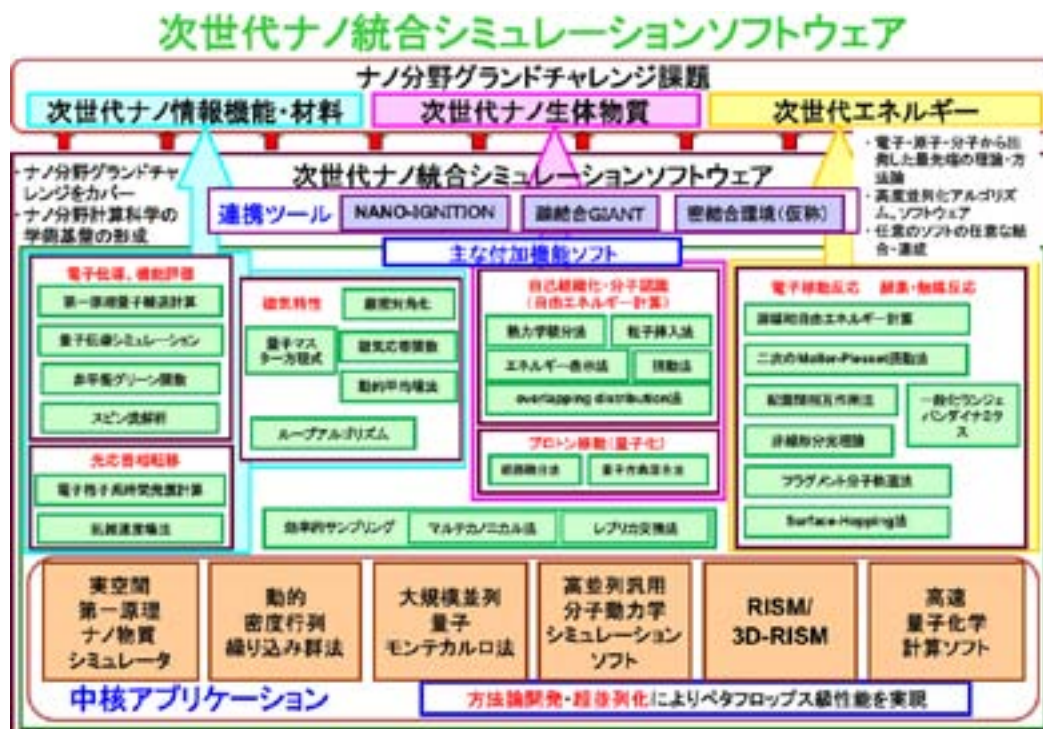
5-6-1 中核アプリを中心とする「次世代ナノ統合ソフトウェア」開発

我々が開発しているアプリケーションは 3 つの階層構造から成り立っている。

中核アプリ：ナノ分野の研究にとって基本的な量子力学、統計力学、分子シミュレーションに関する 6 本のアプリケーション。

付加機能ソフト：上記 6 本のアプリケーションを様々な組み合わせで、マルチスケール・マルチフィジックス問題を解決したり、構造探索を効果的に行なうなどの目的に対応するプログラム群。

連携ツール：「中核アプリ」と「付加機能ソフト」をシームレスに連結するためのツール群および蛋白質一次配列情報やポテンシャルパラメタなどの初期インプット情報を生成するためのプログラム。(資料 1)



「中核アプリ」に関する平成 22 年度の進捗状況は下記の表にまとめてある。

中核アプリ高度化

中核アプリケーション	責任者氏名	H22年度進捗状況(大規模実行テストを除く)
実空間第一原理ナノ物質シミュレータ	神山 洋	① ハイブリッド並列プログラムは開発済み。現在T2K上でチューニング中。 ② 実空間セル並列と電子状態グループ並列コードは開発済み。現在T2K上でチューニング中。 ③ 多機能化の側面では、スピン自由度への拡張は終了。現在、グラフィックの留性についての応用計算実行中 ④ RSDFT-CFMDコードは現在開発中
動的密度行列繰り込み群法	遠山 貴也	① 行列ベクトル積に2次元分割法を採用し、光子応答関数計算プログラム、熱伝導率プログラムへの組み込みと、有限温度動的行列繰り込み群法の先学応答関数計算への組み込みを完了。現在、高次元・チューニング中。 ② エネルギー領域分割並列と行列ベクトル積並列が共存する場合のプログラムの動作試験をT2K上で実施中。 ③ 実機を想定したエネルギー領域分割並列の動的な制御プログラムのアルゴリズムを開発済み。
大規模並列量子モンテカルロ法	藤室 真治	① 液体性質(特にループ結合振動数)について、プロファイラおよび基盤調整によるボトルネックの特定作業を行い、必要に応じてソースコード修正を繰り返しチューニングを行った。 ② アプリケーション版に "improved estimator" と呼ばれるもう一種の物理量測定方法を実装しその性能評価を行った。
高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト	岡崎 道	① FMM(mod/asi)における長距離相互作用計算部分の全通信参加ノード数を、距離化アルゴリズムにより、 2^{20} 分の1(同時点では $n=1$)に削減した。 ② FMM(mod/asi)における逆格点演算部のFFTに対し、T2K上でチューニング中。
RISM/3D-RISM	平田 文男	① 遠隔相互作用部分の改良を組み込み済み。 ② 上記コードのT2K上での小規模テスト済み。 ③ 遠隔計算インターフェースの設計中
高速量子化学計算ソフト	永瀬 豊 北澤 和夫	① AROMCを用いたGAMESS-4M0計算の動作確認を行った(佐藤Gの支援)。 ② スレッド並列化を実施中(佐藤Gの支援)。 ③ 本年1月に実施したT2K大規模テスト計算で得られたデータ交換の問題点を改良した。 ④ MP2の最適化であるRI-MP2コードを開発し、FMOで利用可能とした。
中核アプリ大規模並列化支援	佐藤 三久	① RSDFTについては、大規模実行支援を行った。 ② 3D-RISMでは、通信最適化を終了。最適化は完了。大規模実行を支援。 ③ 動的密度行列繰り込み群法の行列・ベクトル積については富士通までいくことになり、一時終了。 ④ 行列Ewald法の3次元FFTの適用について、作業。 ⑤ FMOについては基本的なOpenMP化を終了。現在、組み込んで評価。大規模実行を支援。 ⑥ 量子モンテカルロについては、さらなる並列化のための手法を検討。T2K実行時のキャッシュ解析を検討中。

2010年度は、筑波大学 T2K, 名古屋大学 FX1 を利用した高並列化に向けた高度化を継続実施した。特に、筑波大のご協力を得て、大規模高並列(1万コア並列)テストを3回実施(通算4回)した。中核アプリ6本について、目

標を達成しつつある。また、理研と共同でカーネル評価を実施し、次世代スパコン京の 400 ノードを利用する代行実行も開始した。

5-6-2 「アプリケーション実証研究」および「連続研究会」

ナノ分野における「アプリケーション実証研究」および「連続研究会」を実施した。これらの研究活動は、2008 年、外部評価委員会（魚崎浩平委員長）のアドバイスに基づき開始したものである。そもそも本拠点は前に述べた 3 つのグランドチャレンジ課題を解決する目的で「次世代スパコン」上で最大限の性能を発揮するアプリケーション群の開発を目指しているが、個々のアプリケーションは、問題を限定すれば、現在、稼働中のマシンを使用することにより、実験研究者が直面しているいくつかの問題の解決に有効である可能性をもっている。そこで、まず、解決を迫られている「ナノ分野」の課題を抽出するため、大学における実験研究者、企業研究者、および計算科学者を含む「連続研究会」を電子デバイス、ライフサイエンス、環境・エネルギーの広汎な分野で企画した。この連続研究会は 20 回におよぶ。以下の表に、2010 年度の連続研究会の開催状況を示す。その規模と広がりから、研究者の中に全国的な反響を巻き起こすと同時に、その中からすでに実験研究者と計算科学者の間で、いくつかの共同研究が生まれ、具体的な成果に結びついている。例えば、「抗がん剤を使わない癌治療法（上岡教授）に関する計算科学的サポート（岡崎グループ：上岡教授（崇城大学）との共同研究）」、あるいは、「カリウムチャネルのイオン選択性に関する 3D-RISM 計算（平田グループ：老木教授（福井医科大）との共同研究）」は、その例である。

平成 22 年度、総合科学技術会議（CSTP）からも、次世代スパコンのグランドチャレンジ研究の成果を期待する旨のコメントがあり、国民にアピールできる成果を目指してアプリ実証研究を推進している。

平成22年度連続研究会

開催日	開催場所	テーマ	開催責任者
2010年 12月2日、3日 (第20回)	福井市地域交流プラザ	イオンチャネル No.2	平田 文男 教授(分子研) 吉田 紀生 助教(分子研) 老木 成徳 教授(福井大)
2011年 3月17日、18日 (第21回)	物質・材料研究機構 千歳地区 本研究会は、東北地方太平洋沖地震の影響により中止	燃料電池 No.5 ー物性科学WGとの合同開催	兵頭 志明 主席研究員 (豊田中研) 平田 文男 教授(分子研) 岡崎 進 教授(名大) 山下 晃一 教授(東大)

以下に、プロジェクト開始時からの研究成果を表にまとめた。

論文など

成果の公表や情報発信など研究開発成果の普及に向けた取り組み

① 学術活動の成果 1 (学術論文、総説解説、受賞)

	平成 18年度	平成 19年度	平成 20年度	平成 21年度	平成 22年度
学術論文	278報	344報	326報	326報	306報
総説解説	59報	67報	55報	80報	66報
受賞など	13件	18件	20件	18件	12件

② 学術活動の成果 2 (招待講演、口頭発表)

	平成 18年度	平成 19年度	平成 20年度	平成 21年度	平成 22年度
招待講演 (国内会議)	103件	97件	98件	127件	103件
招待講演 (国際会議)	137件	131件	164件	182件	139件
口頭発表 (国内会議)	174件	194件	261件	279件	275件
口頭発表 (国際会議)	124件	103件	143件	108件	144件

学術論文の 代表的発表先	平成 18 年度	平成 19 年度	平成 20 年度	平成 21 年度	平成 22 年度
J. Chem. Phys.	31報	33報	33報	29報	30報
J. Am. Chem. Soc.	8報	9報	9報	12報	5報
J. Phys. Chem.	20報	18報	23報	13報	27報
Chem. Phys. Lett.	17報	13報	17報	13報	17報
Phys. Rev.	27報	63報	51報	52報	42報
Phys. Rev. Lett.	14報	14報	12報	13報	16報
J. Phys. Soc. Jpn.	31報	22報	22報	26報	28報
他	130報	172報	159報	168報	141報
合計	278報	344報	326報	326報	306報

5-6-3 プログラム公開に向けた取り組み

本プロジェクトは、国家プロジェクトであり、そこで開発されたプログラムは「公開」を原則とする。一方、本プロジェクトで開発されたプログラムの多くは過去の履歴をもってあり、公開に関しては様々な制約を帯びている。同時に、本プロジェクトで解決を目指している課題の多くは新規の理論や方法論の開発など基礎研究の要素をもってあり、研究者（開発者）のクレジットやプライオリティが保証されなければならない。

このため、本プロジェクトでは、成果の公開と研究に対するクレジットの尊重のバランスを取り、プログラム開発者が公開条件を設定することとし、関係機関の了解も得た。なお、公開するナノ統合ソフトの一覧を文末の表に示す。また、プログラム情報は <http://pal.ims.ac.jp/> で公開している。

5-6-4 今後の課題と取り組み

本プロジェクトは、平成 23 年度で終了するため、これまでの開発計画を継続しながらプロジェクト完了に向けた取り組みを強めていく。

第 1 は、本プロジェクトの一義的ミッションである「中核アプリ」および重要な「付加機能ソフト」の次世代機に向けた高度化および次世代スパコン京実機での検証と動作確認である。また、公開に向けたマニュアル整備等を進める。

第 2 は、「アプリ実証研究」および「連続研究会」であるが、これらの活動については、平成 20 年度に行なわれた外部評価委員会からのアドバイスおよび平成 21 年暮れの「仕分け作業」、更に平成 22 年度の CSTP のコメントを踏まえて、「何のために『次世代スパコン』が必要か?」、「『次世代スパコン』でどんな素晴らしいことができるか?」という国民の問に端的に答え得る「課題提示」が必要である。

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア一覧 (次世代ナノ情報機能・材料)

研究グループ名、種類	No.	プログラム名	開発責任者
(A) 次世代ナノ情報機能・材料			
①次世代ナノ複合材料			
中核アプリ 付加機能ソフト	1	実空間第一原理ナノ物質シミュレータ	澤山 淳
	2	QMAS (Quantum Materials Simulator)	石橋 章司
	3	連続変位クラスター変分計算プログラム	毛利 哲夫
	4	オーダーN 量子伝導プログラム	小林 伸彦
	5	量子モンテカルロ計算(強相関電子系)	加道 重一郎
	6	ナノ物質および器体表面での光励起キャリアーダイナミクスと基体化学反応	杉野 修
	7	OpenMX	塚崎 泰弘
	8	TOMBIX(全電子混合基法)	川道 良幸
	9	FMO-LCMO	常行 真司
	10	M2TD	吉本 芳英
②次世代ナノ電子材料			
中核アプリ 付加機能ソフト	11	動的密度行列繰り込み群法	満山 貴巳
	12	電子格子系時間発展計算プログラム	米満 賢治
	13	実空間Keldyshグリーン関数数値計算ソフトウェア	永長 直人
	14	変分モンテカルロ法	小杉 正男
	15	磁性半導体中の磁気相関	前川 祐通
	16	不規則系コンダクタンス	井上 順一郎
	17	有限要素法によるスピン重積の解析	市村 貴彦
③次世代ナノ磁性材料			
中核アプリ 付加機能ソフト	18	大規模並列量子モンテカルロ法	藤堂 賢治
	19	電子スピン共鳴解析ソフト	宮下 隼二
	20	オーダーN道幅グリーン関数法コード	赤井 久純
	21	McDMFT	常次 宏一
	22	DSQSS	川島 重輝

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア一覧 (次世代ナノ生体材料、次世代エネルギー、共通)

研究グループ名、種類	No.	プログラム名	開発責任者
(B) 次世代ナノ生体物質			
中核アプリ 付加機能ソフト	23	高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト	岡崎 遼
	24	高並列量子化学計算ソフト	北瀬 和夫
	25	REM	西本 祐幸
	26	エントロピー力の統計力学理論解析ソフトウェア	木下 正弘
	27	FIMO	三浦 伸一
	28	Trajen	斉藤 真司
	29	qmod	松林 伸幸
	30	高精度自由エネルギー計算:CPOL	三上 益弘
	31	高速3D-FISM	平田 文男
	32	高速量子化学計算ソフト	永瀬 茂
付加機能ソフト	33	DC: 分割統治量子化学計算プログラム	中井 浩巳
	34	Etrans	藤下 聡
	35	PIQUANDY	信定 亮幸
	36	多参照電子状態計算法	堀井 毅
	37	多核金属含有分子用CISOプログラム	奥村 光隆
	38	3D-FISM/MD	平田 文男
	39	3D-FISM-SCF	平田 文男
	40	qmod	松林 伸幸
	41	Calnos	森田 明弘
	42	Tullyの古典軌道ホップ法プログラム(TSH)	南都 伸幸
	43	SO-SO-CI	江原 正博
	44	MWDYN	関野 秀男
	45	Open-FMO	柳富 雄一、他
(C) 次世代エネルギー			
中核アプリ	31	高速3D-FISM	平田 文男
	32	高速量子化学計算ソフト	永瀬 茂
付加機能ソフト	33	DC: 分割統治量子化学計算プログラム	中井 浩巳
	34	Etrans	藤下 聡
	35	PIQUANDY	信定 亮幸
	36	多参照電子状態計算法	堀井 毅
	37	多核金属含有分子用CISOプログラム	奥村 光隆
	38	3D-FISM/MD	平田 文男
	39	3D-FISM-SCF	平田 文男
	40	qmod	松林 伸幸
	41	Calnos	森田 明弘
	42	Tullyの古典軌道ホップ法プログラム(TSH)	南都 伸幸
	43	SO-SO-CI	江原 正博
	44	MWDYN	関野 秀男
	45	Open-FMO	柳富 雄一、他
(D) 共通			
連携ツール	44	NANO-IGNITION	水谷 文保
	45	GIANT	水谷 文保

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、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)。本年度で3年目を迎えるが、既にこの拠点を舞台に、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つつある。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進みつつある。

平成 22 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

QUADRA レーザー開発のための要素技術として、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を行い、従来の MgLN における世界記録 5mm 厚を上回る 7mm 厚 PPMgLN の作製に世界で始めて成功した。また、QUADRA レーザー開発のための要素技術として、超広帯域(3–20 μm)中赤外コヒーレント光源の開発において、超広帯域のスペクトルを測定するために、真空中でも動作するフーリエ分光器を自作した。

(2) 供用技術の開発

超高精度量子制御技術では、世界最速スパコンより 1000 倍速くナノより小さい分子コンピュータを開発した。また、強いレーザーパルスで波動関数を書き換える新技術を開発した。また、大規模な構造変形をコヒーレントに誘起することに成功した。時空間分解顕微分光では、近接場光学顕微鏡のプロブ先端で高い時間分解能を得るための技術を開発した。超高速分光技術の開発では、極短パルス強レーザー場における分子過程とその応用に関して、(1)4 体クーロン爆発反応イメージングを用いた水素移動に伴う立体構造変化の実時間追跡;(2)電子・イオンコインシデンス計測による近赤外非共鳴 2 重イオン化過程の解明;(3)光のゆらぎによる深紫外非線形原子過程の解明、などの成果があった。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、「Workshop of Consortium for Photon Science and Technology “Nonlinear Optics for Highly Intense Lasers”」と題した国際シンポジウムを、平成 22 年 10 月 21 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。また、大森教授が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」[化学系セミナー]で講義を行った。また、総研大において、光科学に資する人材育成のための講義を行った。この際、今後の活用を目指して e-learning 教材を製作した。

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、平成 20 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、平成 20 年度より 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。具体的には、コヒーレントシンクロトロン放射と呼ばれる機構を利用した大強度テラヘルツパルス光の発生、コヒーレント高調波発生と呼ばれる機構を利用した大強度極紫外線パルス光の発生、また、これらの実用化及び利用法の開拓である。分子科学研究所が中核となり、名古屋大学では光源技術に関する研究開発、京都大学では利用に関する研究開発を行う。

今年度、分子科学研究所では、平成 20、21 年度に引き続き UVSOR-II 電子蓄積リング改造のための加速器及び機器の設計・製作、レーザー装置の増強などを進めた。平成 22 年春には加速器の大幅な改造を実施し、新しい光源装置の設置スペースを創出した。既存の実験装置を用いた光源開発研究も並行して実施するとともに、ビームラインの設計、利用法に関する検討も進めている。平成 22 年 2 月には、プログラムオフィサーなども交え、分子研および参画機関のメンバーによる検討会を開催し、今後の研究の進め方について議論を行った。

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(EAS 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。2010年10月から2011年9月までのプログラムで第3期となり、分子研は第1期より3期連続で採択されている。また、関連プロジェクトとして、JASSOの事業としてのJENESYSプログラムにも2011年度において採択され、10月より半年間の予定で、総研大事業として大学院生に限定した形で招へいを行った。

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にする。

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

第2期では、23研究室(うち分子研20、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) 指定交流相手機関からの推薦(学内公募を原則)
- (2) 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)。また前回に引き続き、継続的な基礎研究、共同研究を奨励する目的で、過去の参加者の中から希望者に対し、再度 research proposal および帰国後の future plan の提出を求めて審査を行い、招へい費用の一部を援助し、再来訪による共同研究の継続を支援する「revisit program」も同時に募集した。

その結果、指定交流機関からの推薦6名、公募5名、リビジットプログラム2名、計13名の招へいを実施した。国別では、マレーシア1名、シンガポール2名、タイ5名、ベトナム2名、インド1名と、これまでと同様タイからの採択が最も多くなった。このことは、タイ国内において既に本事業が高い評価を受けていることを意味しており、実際非常に多くの応募がタイから寄せられている。またキャリアの内訳は、博士研究員7名、博士課程学生6名となった。

招へいは、2010年4～8月にかけて実施され、各研究者に応じて、32～90日の期間での研究プログラムが組まれた。今期からは最大滞在期間を90日に延長することが可能となったため、60日を限度としていた前回までと比べ、より充実したプログラムとなった。また5月28日に、全員の招へい者を一同に会し、全体会議とミニシンポジウムを開催した。本プログラムの大きな目的のひとつとして、将来にわたるアジア分子科学ネットワークの形成があり、各国の同世代の若手研究者の横のつながりを形成する上でこの全体会議の役割は非常に大きく、実際参加者からは複数回の実施を希望する意見もあったほどである。

一方、JASSO-JENESYSプログラムに関しては、上記5カ国にフィリピンを加えた計6カ国より7名の大学院生（うち1名は学術交流協定先のタイ、チュラロンコーン大学）を特別聴講学生として招へいし、2010年10月より半年間のプログラムを行い、2011年2月20日には、アジア冬の学校のプログラムの一部として全体会議とミニシンポジウムを開催した。

一昨年より計4期にわたる本JENESYSプログラムで招へいしたアジアの若手研究者は、延べ44名となり、分子科学研究所の知名度向上のみならず、アジア分子科学ネットワーク形成に大きな影響力を与えつつある。

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
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
2008.9. ~ 2009.8.	2009	265	67
2009.9. ~ 2010.8.	2010	263	56

6-2 理論・計算分子科学研究領域

理論分子科学第一研究部門

永 瀬 茂 (教授) (2001 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：理論化学，計算化学

A-2) 研究課題：

- a) 分子のサイズと形状を利用した分子設計と反応
- b) 元素の特性を利用した分子設計と反応
- c) 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

- a) サイズの大きい分子が与える外部空間および内部空間は新しい機能発現として有用である。このために，金属内包フラーレンの化学修飾による内包金属の運動と位置の制御および選択的反応，グラフェン酸化物の反応，カーボンナノチューブのアルキル化と機能化，グラフェンの monovalency defects から導かれるナノ構造，新規な電気的性質をもつ金属内包フラーレン，金属内包フラーレンと π 拡張系とのドナー/アクセプター共役，金属性カーボンナノチューブの機能化とトランジスターへの応用，ジグソーパズル法によるとナノスケールの π 拡張系の構築と安定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。
- b) 高周期元素は新しい結合と多種多様な機能電子系の宝庫である。このために，5 配位ケイ素と 5 配位ケイ素の間に結合をもつ化合物，最高周期元素の鉛を骨格にもつ芳香族化合物，高いアリール置換基で保護されたケイ素-ケイ素三重結合化合物の構造と反応，ピシクロ [2.2.2] ヘキサンのゲルマニウム類似体，シリカ表面へのカテコールの吸着，Fe, Mn, Cr などの遷移金属間に異常に短い結合をもつ化合物の構造と電子状態等を理論と計算あるいは実験と共同して明らかにした。
- c) 周期構造を持つポリマー，ナノチューブ，固体表面，分子結晶における物理吸着などでは，非共有結合相互作用が本質的な役割をする。しかし，汎用的に広く用いられている密度汎関数法の多くは，非共有結合相互作用を上手に取り扱うことができない。このために，2 次の Møller-Plesset 摂動 (MP2) 法による周期境界条件 (Periodic Boundary Condition, PBC) 計算が望まれている。しかし，周期系の MP2 計算 (PBC-MP2) は計算コスト大きくなるばかりでなく，必要となるメモリとディスクの容量が大きくなるので，比較的小さなユニットセルを用いた計算に限定される。このために，RI (Resolution-of-identity) 法とポワソン・ガウス混合補助基底を用いる高速アルゴリズムを開発した。この方法では必要となるメモリとディスクの容量は格段に少なくなる。6-31G** 基底関数を用いたトランスポリアセチレンのテスト計算が示すように，PBC-RI-MP2 法では PBC-MP2 法より約 100 倍も高速化される。これらの結果が示すように，今回開発した PBC-RI-MP2 法は大規模周期系への応用が期待される。これからの計算化学では，Schrödinger 方程式の近似的な解ではなく正確な解が望まれる。このために，電子配置をウォーカーとしてサンプルするプロジェクトモンテカルロ (PMC) 法を開発してきているが，この方法を励起状態の計算に拡張した。幾つかの励起状態のテスト計算で示されるように，ウォーカー数が増大すると系統的に精度が向上して，与えられた基底関

数に対する full-CI 解が得られる。この PMC 法の利点は、分子のサイズが大きくなるにつれて顕著になり、full-CI 法より計算コストおよび計算資源において優位性が格段に大きくなる。

B-1) 学術論文

X. LU, H. NIKAWA, T. TSUCHIYA, T. AKASAKA, M. TOKI, H. SAWA, N. MIZOROGI and S. NAGASE, “Nitrated Benzyne Derivatives of La@C₈₂: Addition of NO₂ and Its Positional Directing Effect on the Subsequent Addition of Benzyne,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **49**, 594–597 (2010).

H. NIKAWA, Y. ARAKI, Z. SLANINA, T. TSUCHIYA, T. AKASAKA, T. WADA, O. ITO, K. -P. DINSE, M. ATA, T. KATO and S. NAGASE, “The Effect of Atomic Nitrogen on the C₆₀ Cage,” *Chem. Commun.* **46**, 631–633 (2010).

M. SAITO, T. TANIKAWA, T. TAJIMA, J. -D. GUO and S. NAGASE, “Synthesis and Structures of Heterasumanenes Having Different Heteroatom Functionalities,” *Tetrahedron Lett.* **51**, 672–675 (2010).

X. GAO, J. JANG and S. NAGASE, “Hydrazine and Thermal Reduction of Graphene Oxide: Reaction Mechanisms, Product Structures, and Reaction Design,” *J. Phys. Chem. C* **114**, 832–842 (2010).

M. YAMADA, T. AKASAKA and S. NAGASE, “Endohedral Metal Atoms in Pristine and Functionalized Fullerene Cages,” *Acc. Chem. Res.* **43**, 92–102 (2010).

Y. OHTSUKA and S. NAGASE, “Projector Monte Carlo Method Based on Slater Determinants. Test Application to Singlet Excited States of H₂O and LiF,” *Chem. Phys. Lett.* **485**, 367–370 (2010).

N. KANO, H. MIYAKE, K. SASAKI, T. KAWASHIMA, N. MIZOROGI and S. NAGASE, “Dianionic Species with a Bond Consisting of Two Pentacoordinated Silicon Atoms,” *Nat. Chem.* **2**, 112–116 (2010).

Y. MAEDA, S. SATO, K. INADA, H. NIKAWA, M. YAMADA, N. MIZOROGI, T. HASEGAWA, T. TSUCHIYA, T. AKASAKA, T. KATO, Z. SLANINA and S. NAGASE, “Regioselective Exohedral Functionalization of La@C₈₂ and its 1,2,3,4,5-Pentamethylcyclopentadiene and Adamantylidene Adducts,” *Chem. –Eur. J.* **16**, 2193–2197 (2010).

Y. MAEDA, T. KATO, T. HASEGAWA, M. KAKO, T. AKASAKA, J. LU and S. NAGASE, “Two-Step Alkylation of Single-Walled Carbon Nanotubes: Substituent Effect on Sidewall Functionalization,” *Org. Lett.* **12**, 996–999 (2010).

T. TSUCHIYA, T. AKASAKA and S. NAGASE, “New Vistas in Fullerene Endohedrals: Functionalization with Compounds from Main Group Elements,” *Pure Appl. Chem.* **82**, 505–521 (2010).

T. SASAMORI, J. S. HAN, K. HIRONAKA, N. TAKAGI, S. NAGASE and N. TOKITOH, “Synthesis and Structure of Stable 1,2-Diaryldisilyne,” *Pure Appl. Chem.* **82**, 603–612 (2010).

M. SAITO, T. TANIKAWA, T. TAJIMA, J. -D. GUO and S. NAGASE, “Archiving a Bay Area of Triphenylene[1,12-*bcd*]thiophene with Group 14 Functionalities: Synthesis of the First Triphenylene Derivatives Having Thiophene and Metallafluorene Moieties,” *J. Organomet. Chem.* **695**, 1035–1041 (2010).

K. TAKEUCHI, M. ICHINOHE, A. SEKIGUCHI, J. -D. GUO and S. NAGASE, “Reactivity of the Disilyne RSi≡SiR (R = SiⁱPr[CH(SiMe₃)₂]₂) toward Bis(silylcyanide) Forming a 1,4-Diaza-2,3-disilabenzene Analog,” *J. Phys. Org. Chem.* **23**, 390–394 (2010).

X. GAO, L. LIU, S. IRLE and S. NAGASE, “Carbon Spiral Helix: A Nanoarchitecture Derived from Monovalency Defects in Graphene,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **49**, 3200–3202 (2010).

M. YAMADA, T. TSUCHIYA, T. AKASAKA and S. NAGASE, “In-Depth Understanding of π -Electron Systems: New Vistas in Fullerene Endohedrals,” *Pure Appl. Chem.* **82**, 757–767 (2010).

- M. SAITO, M. SAKAGUCHI, T. TAJIMA, K. ISHIMURA, S. NAGASE and M. HADA**, “Dilithioplumbole: A Lead-Bearing Aromatic Cyclopentadienyl Analog,” *Science* **328**, 339–342 (2010).
- J. ZHOU, H. LI, J. LU, G. LUO, L. LAI, R. QIN, L. WANG, S. NAGASE, Z. GAO, W. MEI, G. LI, D. YU and S. SANVITO**, “Selection of Single-Walled Carbon Nanotubes According to Both Their Diameter and Chirality via Nanotweezers,” *Nano Res.* **3**, 296–306 (2010).
- X. LU, Z. SLANINA, T. AKASAKA, T. TSUCHIYA, N. MIZOROGI and S. NAGASE**, “Yb@C_{2n} (n = 40, 41, 42): New Fullerene Allotropes with Unexpected Electrochemical Properties,” *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 5896–5905 (2010).
- Y. TAKANO, M. A. HERRANZ, N. MARTIN, S. G. RADHAKRISHNAN, D. M. GULDI, T. TSUCHIYA, S. NAGASE and T. AKASAKA**, “Donor-Acceptor Conjugates of Lanthanum Endohedral Metallofullerene and π -Extended Tetrathiafulvalene,” *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 8048–8055 (2010).
- M. SAITO, M. SAKAGUCHI, T. TAJIMA, K. ISHIMURA and S. NAGASE**, “Synthesis, Structures, and Properties of Plumboses,” *Phosphorus, Sulfur Silicon Relat. Elem.* **185**, 1068–1076 (2010).
- M. O. ISHITUKA, H. ENOKI, T. TSUCHIYA, Z. SLANINA, N. MIZOROGI, S. NAGASE, M. T. H. LIU and T. AKASAKA**, “Chemical Modification of Endohedral Metallofullerene La@C₈₂ with 3-Chloro-3-phenyldiazirine,” *Phosphorus, Sulfur Silicon Relat. Elem.* **185**, 1124–1130 (2010).
- X. WANG, Y. PENG, Z. XHU, J. C. FETTINGER, P. P. POWER, J. GUO and S. NAGASE**, “Synthesis and Characterization of Two of the Three Isomers of a Germanium-Substituted Bicyclo[2.2.0]hexane Diradicaloid: Stretching the Ge–Ge Bond,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **49**, 4593–4597 (2010).
- D. M. GULDI, L. FENG, S. G. RADHAKRISHNAN, H. NIKAWA, M. YAMADA, N. MIZOROGI, T. TSUCHIYA, T. AKASAKA, S. NAGASE, M. A. HERRANZ and N. MARTIN**, “A Molecular Ce₂@I_h-C₈₀ Switch—Unprecedented Oxidative Pathway in Photoinduced Charge Transfer Reactivity,” *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 9078–9086 (2010).
- M. SAITO, T. KUWABARA, C. KAMBAYASHI, M. YOSHIOKA, K. ISHIMURA and S. NAGASE**, “Synthesis, Structure, and Reaction of Tetraethyldilithiostannole,” *Chem. Lett.* **39**, 700–701 (2010).
- A. P. RAHALKAR, M. KATOUDA, S. R. GADRE and S. NAGASE**, “Molecular Tailoring Approach in Conjugation with MP2 and RI-MP2 Codes: A Comparison with Fragment Molecular Orbital Method,” *J. Comput. Chem.* **31**, 2405–2418 (2010).
- M. SAITO, T. KUWABARA, K. ISHIMURA and S. NAGASE**, “Synthesis and Structures of Lithium Salts of Stannole Anions,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **83**, 825–827 (2010).
- J. NAGATSUKA, S. SUGITANI, M. KAKO, T. NAKAHODO, N. MIZOROGI, M. O. ISHITSUKA, Y. MAEDA, T. TSUCHIYA, T. AKASAKA, X. GAO and S. NAGASE**, “Photochemical Addition of C₆₀ with Siliranes: Synthesis and Characterization of Carbosilylated and Hydrosilylated C₆₀ Derivatives,” *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 12106–12120 (2010).
- S. YOO, J. WON, S. W. KANG, Y. S. KANG and S. NAGASE**, “CO₂ Separation Membranes Using Ionic Liquids in a Nafion Matrix,” *J. Membr. Sci.* **363**, 72–79 (2010).
- X. GAO, S. B. ZHANG, Y. ZHAO and S. NAGASE**, “A Nanoscale Jigsaw-Puzzle Approach to Large π -Conjugated Systems,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **49**, 6764–6767 (2010).
- H. LI, X. YAN, G. LUO, R. QIN, Q. LIU, L. YU, C. XU, J. ZHENG, J. ZHOU, J. LU, Z. GAO, S. NAGASE and W. N. MEI**, “Functionalized Metallic Single-Walled Carbon Nanotubes as a High Performance Single-Molecule Organic Field Effect Transistor: An Ab Initio Study,” *J. Phys. Chem. C* **114**, 15816–15822 (2010).

- Y. TAKANO, M. O. ISHITSUKS, T. TSUCHIYA, T. AKASAKA, T. KATO and S. NAGASE**, “Retro-Reaction of Singly Bonded La@C₈₂ Derivatives,” *Chem. Commun.* **46**, 8035–8036 (2010).
- M. KATOUDA and S. NAGASE**, “Application of Second-Order Møller–Plesset Perturbation Theory with Resolution-of-Identity Approximation to Periodic Systems,” *J. Chem. Phys.* **133**, 184103 (9 pages) (2010).
- Y. MAEDA, K. KOMORIYA, K. SODE, M. KANDA, M. YAMADA, T. HASEGAWA, T. AKASAKA, J. LU and S. NAGASE**, “Separation of Metallic Single-Walled Carbon Nanotubes Using Various Amines,” *Phys. Status Solidi B* **247**, 2641–2644 (2010).
- S. A. MIAN, L. C. SAHA, J. JANG, L. WANG, X. GAO and S. NAGASE**, “Density Functional Theory Study of Catechol Adhesion on Silica Surfaces,” *J. Phys. Chem. C* **114**, 20793–20800 (2010).
- T. AKASAKA, X. LU, H. KUGA, H. NIKAWA, N. MIZOROGI, Z. SLANINA, T. TSUCHIYA, K. YOZA and S. NAGASE**, “Dichlorophenyl Derivatives of La@C_{3v}(7)-C₈₂: Endohedral Metal Induced Localization of Pyramidalization and Spin on a Triple-Hexagon Junction,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **49**, 9715–9719 (2010).
- H. LEI, J. -D. GUO, J. C. FETTINGER, S. NAGASE and P. P. POWER**, “Two-Coordinate First Row Transition Metal Complexes with Short Unsupported Metal–Metal Bonds,” *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 17399–17401 (2010).
- M. YAMADA, M. MINOWA, S. SATO, M. KAKO, Z. SLANINA, N. MIZOROGI, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, S. NAGASE and T. AKASAKA**, “Thermal Carbosilylation of Endohedral Dimetallofullerene La₂@I_h-C₈₀ with Silirane,” *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 17953–17960 (2010).
- L. WANG, X. GAO, X. YAN, J. ZHOU, Z. GAO, S. NAGASE, S. SANVITO, Y. MAEDA, T. AKASAKA, W. N. MEI and J. LU**, “Half-Metallic Sandwich Molecular Wires with Negative Differential Resistance and Sign-Reversible High Spin-Filter Efficiency,” *J. Phys. Chem. C* **114**, 21893–21899 (2010).

B-3) 総説，著書

- T. TSUCHIYA, T. AKASAK and S. NAGASE**, “Recent Progress in Chemistry of Endohedral Metallofullerenes,” in *Chemistry of Nanocarbons*, T. Akasaka, F. Wudl and S. Nagase, Eds., John Wiley, Chapter 10, pp. 261–286 (2010).
- Y. MAEDA, T. AKASAK, J. LU and S. NAGASE**, “Dispersion and Separation of Single-Walled Nanotubes,” in *Chemistry of Nanocarbons*, T. Akasaka, F. Wudl and S. Nagase, Eds., John Wiley, Chapter 14, pp. 365–383 (2010).
- D. JIANG, X. GAO, S. NAGASE and Z. CHEN**, “Properties of π -Electrons in Graphene Nanoribbons and Nanographenes,” in *Chemistry of Nanocarbons*, T. Akasaka, F. Wudl and S. Nagase, Eds., John Wiley, Chapter 18, pp. 433–461 (2010).
- L. FENG, T. AKASAK and S. NAGASE**, “Endohedrals,” in *Carbon Nanotubes and Related Structures—Synthesis, Characterization, Functionalization, and Applications*, D. M. Guldi and N. Martin, Eds., Wiley-VCH, Chapter 15, pp. 455–490 (2010).
- Z. SLANINA, F. UHLIK, S. -L. LEE, T. AKASAK and S. NAGASE**, “Carbon Nanostructures: Calculations of Their Energetics, Thermodynamics, and Stability,” in *Carbon Nanotubes and Related Structures—Synthesis, Characterization, Functionalization, and Applications*, D. M. Guldi and N. Martin, Eds., Wiley-VCH, Chapter 16, pp. 491–523 (2010).
- X. LU, T. AKASAK and S. NAGASE**, “Rare Earth Metals Trapped Inside Fullerenes—Endohedral Metallofullerenes (EMFs),” in *Rare Earth Coordination Chemistry—Fundamentals and Applications*, C. Huang, Ed., John Wiley, Chapter 7, pp. 273–307 (2010).

B-4) 招待講演

S. NAGASE, “Interesting Bonds and Structures in Larger Molecules,” International Symposium on Molecular Theory for Real Systems, Kyoto (Japan), January 2010.

S. NAGASE, “Interesting Bonding and Reactions Provided by Heavier Group 14 Elements,” 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Society (PACIFICHEM2010), Honolulu (U.S.A.), December 2010.

S. NAGASE, “Interplay between Computation and Experiment,” 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Society (PACIFICHEM2010), Honolulu (U.S.A.), December 2010.

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 and Computational Chemists) Scientific Board (1999–).

APATCC (Asian Pacific Association of Theoretical & Computational Chemistry) Scientific Board (2004–).

ICCS (The International Conference on Computational Science) International Advisory Member (2010–).

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 Asian Pacific Conference on Theoretical & Computational Chemistry 組織委員長.

第3回分子科学討論会実行委員長.

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.

独立行政法人大学評価・学位授与機構の国立大学教育研究評価委員会専門委員.

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員.

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」20010年7月21日–23日.

城西大学大学院, 集中講義「有機物質設計特論」2010年7月26日–27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

科研費基盤研究(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).

科研費特定領域研究(A)(計画研究)「インターエメント多重結合の理論研究」永瀬 茂 (1997年–1999年).

科研費特定領域研究(A)(計画研究)「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 (1998年–2001年).

科研費基盤研究(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).

科研費特定領域研究(A)(公募研究)「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).

科研費特定領域研究(A)(計画研究)「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) ナノ構造体における電子・電磁場ダイナミクス
- b) 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
- c) 量子ドット列における励起子ダイナミクスの理論

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 1 nm ~ 数十 nm 程度のナノ構造体では，量子性を反映した特異な光誘起電子・核ダイナミクスが見られるが，その基礎理学的理解は十分ではない。ナノ構造体ダイナミクスでは，局所的な空間領域で物質と電磁場が再帰的に相互作用し，更にその相互作用を介したエネルギー移動がナノ粒子間で連鎖的に起こることが重要であり，双極子近似を使った通常の光学応答理論では理解することができないからである。物質系を記述するためのシュレディンガー方程式と電磁場を記述するためのマクスウェル方程式を自己無撞着に解くための理論開発とその理論に基づく実用的な数値計算手法の開発が必須となる。我々は実在系ナノ構造体における光誘起電子・核・電磁場ダイナミクスを記述するための光学応答理論の開発を第一の目標とし，開発した理論に基づく数値計算によってナノ構造体及びその表面・界面で起こる新しいダイナミクスの機構解明とその機構に基づく新規量子デバイス設計へ向けた基礎的知見の獲得を最終的な目標として研究を進めている。これまで開発してきた時間依存密度汎関数理論に基づく電子ダイナミクス法計算プログラムを用いて，最近，我々は近接場光局所電子励起によって，銀ナノクラスターに力を発生することができ，また光源のレーザー周波数を変えることによって，与える力の大きさを変化し得ることを明らかにした。これらの知見は，原子・分子レベルでの力学的物質操作に応用することが期待できる。
- b) 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しばしば使われるクラスターモデル (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，非物理的なクラスターの境界面が存在してしまう。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，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進めてきた。本年度は実験グループと協力して CS/Cu(111) を対象として，吸着種のコヒーレント核振動メカニズムの詳細を明らかにした。局所的吸着種電子励起，または表面電子励起状態が介在する電子励起の異なる二つの励起に対応して，核振動ダイナミクスが大きく変化することが分かった。実験結果とも定性的に良く一致し，表面吸着種ダイナミクスの詳細に迫る研究を行うことができた。
- c) 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。昨年度までの研究を継続して，理論的定式化及びその定式化に基づくプログラム開発を更に進めた。本年度は特に，量子ドット列における励起子ポラリトンの伝播メカニズムを明らかにした。また，温度によって励起子ポラリトンの伝播経路をコントロールすることができることも明らかにした。これは，次世代量子デバイス開発に資する重要な基礎的知見になると考えられる。

B-1) 学術論文

T. IWASA and K. NOBUSADA, “Near-Field-Induced Optical Force on a Metal Particle and C_{60} : Real-Time and Real-Space Electron Dynamics Simulation,” *Phys. Rev. A* **82**, 043411 (6 pages) (2010).

Y. NEGISHI, W. KURASHIGE, Y. NIIHORI, T. IWASA and K. NOBUSADA, “Isolation, Structure, and Stability of a Dodecanethiolate-Protected Pd_1Au_{24} Cluster,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12**, 6219–6225 (2010).

B-4) 招待講演

K. NOBUSADA, “Near-Field and Matter Interaction Theory for Electron Dynamics in Nanostructures,” 2010 Annual Meeting of Asian Core Program “Frontiers of Material, Photo-, and Theoretical Molecular Science,” Taipei (Taiwan), March 2010.

信定克幸, 「ナノ構造体における局所電子励起と機能性発現の分子論」分子研研究会「プラズモン増強光電場の分子科学研究への展開」岡崎市, 2010年6月.

T. YASUIKE and K. NOBUSADA, “Photoinduced coherent dynamics of adsorbates on metal surfaces: Nuclear wave packet simulation with quasi-diabatic potential energy curves obtained by open-boundary cluster model,” Okazaki Conference “New Frontier in Quantum Chemical Dynamics,” Okazaki, February 2010.

安池智一, 「表面吸着分子の電子状態計算のための開放系クラスターモデル: モデルの原理と吸着分子の光誘起コヒーレントダイナミクスへの応用」東京理科大学物性理論セミナー, 2010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).

理論化学討論会第3期世話人 (2009–).

B-8) 大学での講義, 客員

筑波大学計算科学研究センター, 共同研究員, 2006年6月–.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「構造分子基礎理論」2010年7月21日–23日.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「量子分子科学」2010年11月24日–26日.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「分子科学セミナー」2010年(通年)

B-10) 競争的資金

科研費奨励研究(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).

科研費基盤研究(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).

科研費特定領域研究(計画研究)「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–2010年).

科研費基盤研究(B),「近接場光励起による金属表面の局所電子ダイナミクスの理論」信定克幸 (2009年–).

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

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

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

科研費特別研究員奨励費,「複素座標法による超励起状態の研究」安池智一 (2000年–2003年).

科研費若手研究(B),「表面吸着分子の開放系電子状態理論の開発と応用」安池智一 (2007年–2009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・電磁場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。我々は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の新しい光学応答理論の開発に興味を持っており,具体的には分子の近接場光励起による電子・核・電磁場ダイナミクスの理論的解明を進める予定である。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。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考えている。

A-1) 専門領域：量子化学，理論化学，計算化学

A-2) 研究課題：

- a) 量子化学的手法に基づく多参照電子状態理論の開発：DMRG-CT
- b) 金属含有化合物の高精度電子状態計算に向けた DMRG-SCF 法の開発
- c) 共役有機磁性分子ポリカルベンの電子状態，多重スピン状態の解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 当研究グループでは「電子と電子との複雑な多体相互作用の複雑な量子効果」を根源とす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，ナノグラフェン，有機磁性体，生体反応中心などの共役分子の光化学・スピン物性，金属化合物の凝縮重電子状態などに表れる「複雑な電子状態」であり，その解明は大変興味を持たれている一方で，理論的な取り扱いにはチャレンジングな問題（多参照問題）である。多参照電子状態を正しく記述するためのキーとなる物理は，原子間スケールで凝縮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）」の基礎理論の開発を進めている。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。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，CT法に対して相補的な手法として，長距離スケールな強い電子相関を記述するための厳密対角化法，ab initio 密度行列繰り込み群（DMRG）法の新しい実装を開発した。この手法を利用した，多配置 CASSCF 波動関数で記述するための手法開発（DMRG-SCF）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 計算を実現した。
- b) 金属化合物の高精度計算に向けて DMRG-SCF 法の開発を行った。DMRG（密度行列繰り込み群）法は，大規模な Hilbert 空間（full CI 空間）をコンパクトな多体基底により取り扱う変分法である。DMRG 法は，空間的局所性から一次元的多体相関をもつ電子系に対して従来の方法では計算不可能な大きさの full CI 計算が可能となることが示され，近年では分子系への拡張が盛んに試みられている。量子化学において DMRG 法がターゲットとする系は，平均場理論（Hartree-Fock，Density Functional Theory）やそれをゼロ次近似とする摂動的な電子相関理論で扱うことが困難な凝縮重電子系（例えば，励起状態，金属化合物，開殻スピン状態など）があり，当グループでは，DMRG 法の応用範囲を一次元分子から一般分子へと拡張することで量子化学における大規模多配置問題の解決を目指した。我々は，DMRG 法に化学的洞察に基づく軌道列順序や射影密度行列に対する摂動補正を導入し，DMRG 法が非一次元分子に対しても効率よく full CI 会へと漸近であることを明らかにした。一方で，多数の基底関数を用いるような多参照計算への拡張として，予め設定した活性軌道に限り軌道緩和と静的電子相関を計算する DMRG-SCF 法を開発した。また残された仮想軌道との動的相関については，DMRG-SCF 波動関数を参照関数とする CT 法により計算して，DMRG-SCF-CT 法を用いた，二核錯体金属化合物の応用計算を行い，高精度な多参照計算を実現することができた。

- c) 有機磁性体は、単分子磁石をはじめとする分子デバイスの材料として注目されており多くの研究がなされている。分子デバイスとしての有機磁性体には、より大きな磁気モーメントを持ち、かつ寿命が長い区、異なるスピン状態間のエネルギー差が大きく高温でもスピン配列を崩さないものが望まれる。スピン配列の秩序を保つにはスピンサイト間の相互作用が強いほうが有利であることから、 π 共役でスピンサイト間をつなぐ through-bond アプローチに基づく設計などが行われている。また、有機化合物に大きな磁気モーメントを持たせるためには一つのサイトに2つのラジカルを持つカルベンがスピン源として効果的である。この二つを利用して大きな磁気モーメントをもつポリカルベン分子が設計されている。一方、高スピンを持つカルベンの各スピン状態に対する電子状態の研究は、これまで密度汎関数法などの単参照理論を用いた研究に限られてきた。ポリカルベンの低スピン状態を計算する上で静的相関の考慮は欠かせないと考えられるが、全 π 軌道とカルベンの面外の p_z 軌道、非結合性 sp^2 軌道を活性空間として扱う CASSCF 計算はコストが高く、小さなモデル分子に対してしか適応されていない。我々は、この問題に対して、ab initio DMRG に基づく高性能計算法を用いて、m-phenylene 型ポリカルベンの大規模な電子状態計算を実現した。

B-1) 学術論文

T. YANAI, Y. KURASHIGE, E. NEUSCAMMAN and G. K-L. CHAN, “Multireference Quantum Chemistry through a Joint Density Matrix Renormalisation Group and Canonical Transformation Theory,” *J. Chem. Phys.* **132**, 024105 (9 pages) (2010).

E. NEUSCAMMAN, T. YANAI and G. K-L. CHAN, “Strongly Contracted Canonical Transformation Theory,” *J. Chem. Phys.* **132**, 024106 (13 pages) (2010).

W. MIZUKAMI, Y. KURASHIGE and T. YANAI, “Novel Quantum States of Electron Spins in Polycarbenes from Ab Initio Density Matrix Renormalization Group Calculations,” *J. Chem. Phys.* **133**, 091101 (4 pages) (2010).

B-3) 総説，著書

E. NEUSCAMMAN, T. YANAI and G. K-L. CHAN, “A Review of Canonical Transformation Theory,” *Int. Rev. Phys. Chem.* **29**, 231–271 (2010).

B-4) 招待講演

柳井 毅, 「局所表現ハミルトニアンを用いた電子状態理論の開発」科学研究費補助金特定領域研究「実在系の分子理論」成果報告会, 東京大学, 2010年3月.

T. YANAI, “Density matrix renormalization group study of molecular electronic structures: π -conjugate organic spin systems and transition metal complexes,” CECAM-ETHZ, CECAM conference: Tensor network methods for quantum chemistry, Zurich (Switzerland), March 2010.

柳井 毅, 「DMRG およびその動的相関法の話を中心に」研究所内セミナー, 量子化学研究協会研究所, 京都大学, 2010年3月.

T. YANAI, “Canonical transformation theory for large-scale multireference calculations,” The 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2010), Honolulu (U.S.A.), December 2010.

T. YANAI, “Efficient multireference method for quantum chemistry with large active space,” The 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2010), Honolulu (U.S.A.), December 2010.

B-6) 受賞, 表彰

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

T. YANAI, The Wiley-International Journal of Quantum Chemistry Young Investigator Award (The 49th Sanibel Symposium) (2009).

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, 「量子分子科学」 2010年 11月 24日-26日.

B-10) 競争的資金

科研費特定領域研究(公募研究)「実在系の分子理論」柳井 毅 (2008年度-2010年度).

科学技術振興機構CREST 研究, 「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).

科研費基盤研究(C), 「高精度多参照理論による大規模 π 共役系の強相関的な多電子励起状態の解析法と応用」柳井 毅 (2009年度-2011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, 多参照な電子状態(電子が強く相関する状態)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) 生体高分子の溶媒と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) ウイルス内 M2 チャンネルのプロトン透過機構：M2 チャンネルはインフルエンザ A の細胞膜に存在するプロトンチャンネルであり，細胞膜内外の pH を調整する機能を持つ。よく知られたインフルエンザ薬であるアマンタジンはこのチャンネルの阻害剤である。

M2 チャンネルは pH に応じてゲートを開閉することで細胞内の pH を調整している。M2 チャンネルは 4 量体からなり，ゲート部には 4 つのヒスチジン残基が存在する。これまでの，実験およびシミュレーションなどから，細胞外の pH に応じてヒスチジンのプロトン化状態が変わることでゲートが開閉していることが知られている。そこで，0H (全てのヒスチジンがプロトン化していない状態) から 4H (全てのヒスチジンがプロトン化している状態) の 5 つの状態について，MD シミュレーションから抽出した構造を用いて，3D-RISM でチャンネル内のプロトン (ヒドロニウムイオン) および水分子の分布および平均力ポテンシャルを計算した。0H~2H では平均力ポテンシャルに大きな障壁が存在しており，水もプロトンも透過の可能性は無いことが分かる。3H では 5 kJ/mol 程度の障壁が見られるが，これは熱運動で越えることができる程度の障壁である。4H ではゲートは 3H よりも開いているものの，障壁が高くなり，プロトン透過性はむしろ下がっていることが分かる。ゲートの開閉はプロトン化したヒスチジン間の静電反発により起こるため 0H，1H，2H，3H，4H とプロトン化状態が進むほどゲートは大きく開くが，一方でプロトン化したヒスチジンにより，正の静電ポテンシャルが作られるため，ヒドロニウムイオンには反発力が働くことになる。したがって，M2 チャンネルのプロトン透過性はゲート開閉による立体障害とプロトン化による静電反発のトレードオフによって決まることになる。[*J. Am. Chem. Soc.* 132, 9782-9788 (2010) に既報]

- b) DNA B-Z 転移に対する塩効果：3D-RISM 理論による解析：DNA は通常生体内で右巻き二重螺旋の B 構造を取るが，

癌細胞中などでは左巻きの Z 構造を取ることが知られている。また、溶媒の塩濃度が高くなると B から Z 構造に転移することが実験的に確認されている。

この DNA の構造相転移について 2 つのモデルが提唱されている。一つは Saenger らの“経済的な水和”モデルである。このモデルは二重螺旋構造安定化の主要因を水和とみなす。塩濃度が上がるにつれて、水和に寄与する水分子の実効的な濃度が減少するため、リン酸基間の架橋によって水分子を効率的に利用することができる Z 構造の方が有利になるという説である。もう一つはリン酸同士のクーロン反発がイオン水溶液によって遮蔽されるというモデルである。この 2 つのモデルのどちらが正しいかを調べるためには水分子とイオンを正しく取り扱う必要がある。

我々は分子性液体を取り扱うことのできる 3D-RISM 理論と構造最適化プログラムと組み合わせて DNA の B-Z 転移のメカニズムを調べた。

NaCl 2M 水溶液中での B- 及び Z-DNA の最安定構造と周りの溶媒和構造を見ると、B-DNA では Na イオン（黄）はリン酸基の周りに局在化している。Z-DNA では Na イオンの分布はリン酸と塩基対を含む広い領域に非局在化している。リン酸基周りの動径分布関数で確認すると Z-DNA の方が Na イオンをより強く結合している事がわかった。また 2M NaCl 水溶液中の水の分布は 0M 時よりも減少していて、リン酸基間に架橋が見られず、Saenger らのモデルと一致しなかった。

二つの構造の自由エネルギー比較すると NaCl の濃度が高くなるにつれて B 構造よりも Z 構造が安定になり実験結果と定性的に一致した。純水中では Z 構造は B 構造に比べて構造エネルギー（リン酸基間のクーロン反撥）が高く不安定であるが、NaCl の濃度が高くなると溶媒和自由エネルギーおけるイオンの寄与が大きくなり安定化する。これはイオンによる遮蔽効果が B-Z 転移の主要因であることを示している。[*J. Phys. Chem. B* **114**, 6464–6471 (2010) に既報]

B-1) 学術論文

T. YUI, H. SHIIBA, Y. TSUTSUMI, S. HAYASHI, T. MIYATA and F. HIRATA, “Systematic Docking Study of Carbohydrate Binding Module Protein of Cel7A with Cellulose Ia Crystal Model,” *J. Phys. Chem. B* **114**, 49–58 (2009).

R. ISHIZUKA and F. HIRATA, “The Dynamics of Solvent around a Solute: Generalized Langevin Theory,” *Phys. Rev. E* **81**, 011202 (7 pages) (2010).

Y. MARUYAMA, N. YOSHIDA and F. HIRATA, “Revisiting the Salt-Induced Conformational Change of DNA with 3D-RISM Theory,” *J. Phys. Chem. B* **114**, 6464–6471 (2010).

S. PHONGPHONPHANEE, N. YOSHIDA and F. HIRATA, “Molecular Selectivity in Aquaporin Channels Studied by the 3D-RISM Theory,” *J. Phys. Chem. B* **114**, 7967–7973 (2010).

S. PHONGPHONPHANEE, T. RUNGROMONGKOL, N. YOSHIDA, S. HANNONGBUA and F. HIRATA, “Proton Transport through the Influenza A M2 Channel: 3D-RISM Study,” *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 9782–9788 (2010).

T. MIYATA, Y. IKUTA and F. HIRATA, “Free Energy Calculation Using Molecular Dynamics Simulation Combined with Three Dimensional Reference Interaction Site Model (3D-RISM) Theory. I. Free Energy Perturbation and Thermodynamic Integration along Coupling Parameter,” *J. Chem. Phys.* **133**, 044114 (15 pages) (2010).

B-3) 総説、著書

生田靖弘，平田文男，「3D-RISM 理論による環境・エネルギー問題への挑戦——バイオマスエタノールの有効活用を目指して——」*計算工学*, vol. 15, 18 (2010).

平田文男, 吉田紀生, S. PHONGPHANPHANEE, 「分子認識とイオンチャネルの統計力学理論」*Medical Bio* 10 月別冊「揺らぎと生体機能」寺嶋正秀監修 (2010).

N. YOSHIDA, Y. KIYOTA, S. PHONGPHANPHANEE, T. IMAI and F. HIRATA, “Statistical-Mechanics Theory of Molecular Recognition: Water and Other Molecules Recognized by Protein,” in *Water, the forgotten biological molecule*, Bihan and Fukuyama, Eds., Pan Stanford Publishing; Singapore (2010).

平田文男, 「化学のブレークスルー『理論化学編』」月刊「化学」別冊, 化学同人 (2010).

B-4) 招待講演

F. HIRATA, “Molecular Recognition Probed with the Statistical Mechanics of Molecular Liquids,” RIKEN Basic Science Interdisciplinary Research Project Mid Term evaluation symposium 2009, Wako, March 2010.

平田文男, 「ナノ分野における『グランドチャレンジ』課題への挑戦と計算科学」第一回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム, 筑波大学計算科学研究センター, つくば市, 2010 年 5 月.

平田文男, 「RISM-SCF 理論の開発と発展 ~ RISM-SCF 理論誕生秘話 ~」加藤重樹教授記念シンポジウム「化学反応のポテンシャル曲面とダイナミクス」京都大学理学研究科セミナーハウス, 京都市, 2010 年 6 月.

F. HIRATA, “On the origin of energy produced by the hydrolysis reaction of ATP:3D-RISM-SCF study,” ICPOC-20: 20th International Conference on Physical Organic Chemistry, Busan (Korea), August 2010.

F. HIRATA, “Statistical Mechanics of Molecular Liquids Reveals Elementary Processes in Life Phenomena,” EMLG-JMLG joint meeting 2010, Lviv (Ukraine), September 2010.

F. HIRATA, “Statistical mechanics of Molecular Liquids Reveals Elementary Processes in Life Phenomena,” The Overseas Sokendai Lecture in Bangkok: The Inaugural CU-IMS Joint Symposium, Bangkok (Thailand), October 2010.

F. HIRATA, “Molecular Recognition in Biological Functions Revealed by Statistical Mechanics of Molecular Liquids,” 4th International symposium on “Molecular Science of Fluctuations toward Biological Functions,” Otsu, November–December 2010.

F. HIRATA, “Ligand binding and escaping pathway in myoglobin studied by the 3D-RISM theory,” Dynamics and Mechanisms of Photochemical Reactions of Biological Proteins, Pacificchem 2010, Honolulu (U.S.A.), December 2010.

吉田紀生, 「“計算科学”と“計算機科学”の連携による統計力学理論の超高並列化への挑戦」SS 研 HPC フォーラム e-science のフロンティア, 汐留シティセンター, 東京, 2010 年 8 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).

鄭 誠虎, 日本物理学会若手奨励賞 (2008).

清田泰臣, 溶液化学シンポジウムポスター賞 (2010).

B-7) 学会及び社会的活動

学協会役員等

溶液化学研究会会長 (2010–).

溶液化学研究会運営委員長 (2004–2010).

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–).

岡崎市民講座「生命活動における「水」の働き」(2009).

第 101 回「国研セミナー」(岡崎市教育委員会主催)で講演「生命の営みと『水』」(2010).

岡崎高校スーパーサイエンスハイスクール活動支援

講演「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?」(2009).

B-8) 大学での講義, 客員

Harvard University Department of Molecular and Cellular Biology, “Statistical Mechanics of Molecular Liquids Reveals Elementary Processes in Life Phenomena,” March 20, 2010.

国立情報学研究所, 客員教授, 2010 年 4 月 1 日–2011 年 3 月 31 日.

B-10) 競争的資金

科研費重点領域研究(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).

科研費特定領域研究(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).

科研費奨励研究(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).

科研費基盤研究(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).

科研費特定領域研究(計画研究)「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).

科研費特定領域研究(計画研究)「生体内化学過程の統計力学理論」平田文男 (2003 年–2007 年).

科研費若手研究(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).

科研費新学術領域研究(計画研究)「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).

科研費基盤研究(A), 「イオンチャネルの統計力学理論」平田文男 (2010 年–2012 年).

C) 研究活動の課題と展望

我々は過去数年の研究において「分子認識の理論」とも呼ぶべき新しい統計力学理論を構築しつつある。それは溶液内の超分子や蛋白質などによる分子認識(複合体形成)過程を第一原理的に実現する方法論である。しかしながら、現在までの理論では十分に扱うことができない問題がある。それは蛋白質の構造揺らぎと共役した機能発現過程(化学過程)である。酵素反応やイオンチャネルなど蛋白質の機能発現においては基質分子を蛋白内に取り込む過程(分子認識)が重要であるが、このプロセスは単に「鍵と鍵孔」のような機械的なフィッティング過程ではない。例えば、酵素反応の場合、酵素の反応ポケット周辺の構造が変化して、基質を取り込む現象は実験的にも良く知られている。また、イオンチャネルにイオンを取り込む際の「ゲーティング」という機構も同様の構造揺らぎによって実現される。このような蛋白質の構造揺らぎと共役した化学過程を取り扱うために、溶液のダイナミクスと共役した蛋白質の構造揺らぎを記述する理論の発展は今後の重要な課題である。

このような理論を発展させる上で、構造揺らぎのスケールに応じて二つの方向が考えられる。ひとつは蛋白質のフォールディングのようにグローバルな構造揺らぎを追跡する場合で、この場合は構造変化の時間的分解能よりはそのグローバルな安定構造を探索することが重要である。この問題に対して我々はすでに 3D-RISM 理論と拡張アンサンブル法を組み合わせた方法論を提案しており、最近、分子動力学法と組み合わせた新しい方法論を開発した。一方、酵素反応の反応速度を追跡する場合のように、蛋白質の比較的速い構造揺らぎが関与する場合には、溶液のダイナミクスと蛋白質の構造揺らぎとの動的相関を記述する理論が必要である。我々は一般化ランジェヴィアン理論と 3D-RISM/RISM 理論を結合した新たな理論の開発に着手した。

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) 電荷秩序の光誘起融解の初期過程における電荷移動と分子振動の量子干渉
- b) 1次元絶縁体のサイズに依存して連続変化する絶縁破壊機構と伝導特性
- c) 光誘起ダイナミクスが示す中性イオン性相転移に対する分子振動の役割

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 2次元 1/4 フィリングの有機導体で電荷秩序を有し、光誘起融解ダイナミクスがよく調べられている α -(BEDT-TTF)₂I₃ の初期過程に注目した。電荷秩序を安定化するのに最も重要なのはクーロン相互作用である。光照射後数百フェムト秒の時間スケールでは分子配置の変化に対応する格子振動との結合が見えていた。光照射直後数十フェムト秒では、相関をもつ多電子の運動と分子変形に対応する分子振動が見えることがわかった。これは分子間の電子移動と分子振動の励起が同程度のエネルギーで起こるためであり、これらが量子的に干渉してファノ反共鳴を起こす。従来の異方性三角格子の拡張パイエルス・ハバード模型に分子振動とのホルシュタイン結合を加えて計算を行った。多電子・フォノン系の厳密な波動関数の時間発展から、この干渉挙動を求めて実験結果とよい一致を見た。光照射は分子間の電子移動を駆動し、分子振動を励起する。これらの位相が逆になって弱め合った後に分子振動に相当する周期で電子が分子間で揺さぶられる。これらの位相がずれた後に金属への相転移が起きる。光照射前の電荷秩序を主に安定化しているのはクーロン相互作用だが、分子振動との結合もかなり安定化に寄与していることがわかった。
- b) 絶縁破壊による非線形伝導機構として、ランダウ・ツェナーの議論したものと、一方の金属電極から物質の準位を通して他方の金属電極に電子が移動するものがある。これらは文献でしばしば混同されているが本来は違う現象である。これらの関係を見るため非平衡グリーン関数法を用い、絶縁体と金属電極の結合を顕わに取り入れて電流電圧特性を計算した。トランスファー積分交替によるバンド絶縁体とオンサイト斥力によるモット絶縁体のそれぞれの模型に、界面付近のポテンシャル変調を生む長距離クーロン相互作用を加え、ハートリー近似で非平衡定常状態を求めた。系が小さいとき左右の金属の化学ポテンシャルが伝導帯と価電子帯に位置して電子が流れ始めるのに対し、系が大きいときはランダウ・ツェナーの絶縁破壊が起きる。前者は閾値電圧を、後者は閾値電場を持つ。つまり後者では電場下で電子正孔対が絶縁体の相関長だけ離れて得るエネルギーが電荷ギャップを超えたときに電子が流れる。これらの間の移り変わりは連続的で、それを再現するにはポテンシャル変調および電極付近の電子状態変調を考慮する必要があることを示した。
- c) 擬1次元 1/2 フィリングの交互積層型電荷移動錯体の TTF-CA はその光誘起中性イオン性相転移のダイナミクスが以前から実験と理論で研究されている。最近格段に上がった時間分解能により、その初期ダイナミクスに分子振動が観測されている。1次元拡張パイエルス・ハバード模型に準位交替を考慮した模型では、中性相とイオン性相での電荷移動量と光学伝導度を矛盾なく説明することができなかった。分子振動とのホルシュタイン結合を考慮して初めて、イオン性相がモット絶縁相であることを再現でき、光学伝導度の平衡状態でのスペクトルとその光誘起時間変化を矛盾なく説明できることがわかった。

B-1) 学術論文

Y. TANAKA and K. YONEMITSU, “Growth Dynamics of Photoinduced Domains in Two-Dimensional Charge-Ordered Conductors Depending on Stabilization Mechanisms,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 024712 (8 pages) (2010).

S. MIYASHITA, Y. TANAKA, S. IWAI and K. YONEMITSU, “Charge, Lattice, and Spin Dynamics in Photoinduced Phase Transitions from Charge-Ordered Insulator to Metal in Quasi-Two-Dimensional Organic Conductors,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 034708 (9 pages) (2010).

N. MAESHIMA, K. HINO and K. YONEMITSU, “Photoinduced Coherent Oscillations in the One-Dimensional Two-Orbital Hubbard Model,” *Phys. Rev. B* **82**, 161105 (4 pages) (2010).

Y. KAWAKAMI, T. FUKATSU, Y. SAKURAI, H. UNNO, H. ITOH, S. IWAI, T. SASAKI, K. YAMAMOTO, K. YAKUSHI and K. YONEMITSU, “Early-Stage Dynamics of Light-Matter Interaction Leading to the Insulator-to-Metal Transition in a Charge-Ordered Organic Crystal,” *Phys. Rev. Lett.* **105**, 246402 (4 pages) (2010).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

N. MAESHIMA, K. YONEMITSU and K. HINO, “Photoinduced Dynamics in the One-Dimensional Two-Orbital Degenerate Hubbard Model,” *J. Phys.: Conf. Series* **200**, 012109 (4 pages) (2010).

Y. TANAKA and K. YONEMITSU, “Theory of I–V Characteristics for Two-Dimensional Charge-Ordered Electron Systems at Quarter Filling,” *Physica B* **405**, S211–S213 (2010).

K. YONEMITSU, S. MIYASHITA and Y. TANAKA, “Frustration and Lattice Effects on Photoinduced Melting of Charge Orders in Quasi-Two-Dimensional Organic Conductors,” *Physica B* **405**, S369–S372 (2010).

B-3) 総説，著書

K. YONEMITSU, “Theory of Photoinduced Phase Transitions in Quasi-One-Dimensional Organic Conductors,” in *Molecular Electronic and Related Materials—Control and Probe with Light*, T. Naito, Ed., Research Signpost/Transworld Research Network; Trivandrum, 305–320 (2010).

B-4) 招待講演

米満賢治, 「光誘起相転移ダイナミクスの理論：低次元の電気伝導性をもつ化合物を光で物性変化するための相互作用と構造の模型解析」第23期CAMPフォーラム本例会, 東京, 2010年4月.

米満賢治, 「有機導体の光誘起絶縁体金属転移における量子フォノンと干渉効果」物性研短期研究会「外部場の時間操作と実時間物理現象」東京大学, 2010年6月.

田中康寛, 「二次元有機導体における電荷秩序の光誘起融解ダイナミクスの理論」物性研短期研究会「外部場の時間操作と実時間物理現象」東京大学, 2010年6月.

K. YONEMITSU, S. MIYASHITA and N. MAESHIMA, “Photoinduced Modulation of Effective Interactions and Carrier Densities in Organic Mott Insulators,” International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals 2010, Kyoto (Japan), July 2010.

K. YONEMITSU, Y. TANAKA, S. MIYASHITA and N. MAESHIMA, “Photoinduced Insulator-to-Metal Transition Dynamics in Models for Quasi-Two-Dimensional Organic Conductors,” The 9th International Conference on Excitonic and Photonic Processes in Condensed and Nano-Materials, Brisbane (Australia), July 2010.

K. YONEMITSU, Y. TANAKA and N. MAESHIMA, “Quantum Phonon Effects on Photoinduced Insulator-to-Metal Transition Dynamics in Organic BEDT-TTF Salts,” The 10th Japan–China Joint Symposium on Conduction and Photoconduction in Organic Solids and Related Phenomena, Kyoto (Japan), October 2010.

米満賢治, 「BEDT-TTF 塩の電荷秩序の光誘起融解過程からみえる分子振動と格子変位の役割」研究会「関連電子系における電荷秩序と誘電異常——遷移金属酸化物と分子性化合物の最近の展開」青山学院大学, 2010 年 11 月.

米満賢治, 田中康寛, 「有限バイアス下における電荷秩序の挙動と非線形伝導」G-COE 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と生物物性の連携新領域創成を目指して」東北大学, 2010 年 12 月.

田中康寛, 「光と電流による物質の相変化：非平衡状態の理論的研究」有機固体若手の会・冬の学校 2010：有機物質科学博覧会, 諏訪, 2010 年 12 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66期代議員 (2007–).

学会の組織委員等

第4回光誘起相転移と協力現象国際会議「国際科学委員会」委員 (2010–).

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–).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (2008–2010).

学会誌編集委員

日本物理学会誌, 編集委員 (1998–1999).

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

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(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).

科研費特定領域研究(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).

科研費基盤研究(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

光誘起相転移の動的挙動の実験および理論研究が進むにつれて, 電子間や電子と格子振動および電子と分子振動の相互作用や分子配置の幾何学的性質がどのように相転移に関わっているかがわかってきた。現時点で, 光誘起電子状態が平衡状態で実現される電子相のどれとも異なることや, 供給されたエネルギーが異なる自由度の間で遷移する状況がわかってきている。これまでの実験では, 異なる時間スケールやプローブによる情報を解釈する時点で, 平衡状態で成立する関係がし

ばしば暗黙に仮定された。しかし今や変遷する非平衡状態をそのまま観測し理論的に記述することが必要である。平衡状態では表に出なかった、分子内の軌道および振動の自由度が、光誘起相転移に限らず平衡状態の記述をも変えつつある。これらを含めて広い時空スケールで相転移挙動を説明できて初めて非平衡の動的制御を論じられる。相関電子系の電圧や電場に誘起される非平衡過程においても、相互作用の競合・協力が生む現象の理解を深める。

計算分子科学研究部門

齊 藤 真 司 (教授) (2005 年 10 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：理論化学

A-2) 研究課題：

- a) 光励起反応ダイナミックスの理論研究
- b) 線形・非線形分光法による凝縮系ダイナミックスの理論研究
- c) 過冷却液体のダイナミックスの理論研究
- d) 生体高分子における構造揺らぎ・構造多様性と構造変化の理論研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 励起状態のポテンシャル面の精度を維持し効率よく計算する方法論を 10-Hydroxybenzo[h]quinoline に適用し，光励起にともなうプロトン移動ダイナミックスの解析を進めている。電子励起後の色素分子の振動コヒーレンス，さらに色素分子の振動から周囲の溶媒分子への緩和ダイナミックス等の起源を明らかにした。
- b) 線形および非線形分光法による凝縮系のダイナミックス，とくに水の分子内および分子間ダイナミックスの解析を進め，分子間運動の揺らぎ（スペクトル拡散）の起源，エネルギー緩和ダイナミックスを明らかにした。さらに，エネルギー緩和ダイナミックスに対する新しい解析手法を提案し，その手法による詳細な解析を行った。また，分子内振動・変角運動における揺らぎの影響の解析を行った。変角運動に関する二次元赤外分光法等の解析から，変角運動における変調への伸縮振動の影響など新たな知見を明らかにした。変角運動については，実験的にも未知の問題が多いが，今後の実験の展開に期待がもたれる。
- c) 多時間相関のアイデアを過冷却液体の不均一ダイナミックスの解析へと展開した。その結果，3 時間相関関数は不均一ダイナミックスに非常に敏感であり， α 緩和時間とは異なる動的不均一性の寿命を明らかにした。さらに，温度低下とともに増大する協調的な不均一運動が Stokes-Einstein 関係の破綻に関わることも明らかにした。また，ここ数年，過冷却水の定圧比熱の特異的温度依存性について解析を進めてきたが，このような熱力学的異常性の起源となるダイナミックスの時間・空間スケールを明らかにしたとともに，分光学的にプローブできる可能性を示した。
- d) 分子シミュレーションを利用し，細胞増殖に関わるタンパク質に関する構造揺らぎ・構造変化を解析した。さらに，複数の状態に対する主成分解析および実験で得られている構造情報をも利用し，大域的な構造変化過程を提案した。さらに，イヌミクライソザイムの unfolding 過程を解明するため，様々な温度における揺らぎや出現する構造を明らかにし，構造変化がどのような状態を経て進行するかを解析した。

B-1) 学術論文

J. TAYAMA, A. ISHIHARA, M. BANNO, K. OHTA, S. SAITO and K. TOMINAGA, “Temperature Dependence of Vibrational Frequency Fluctuation of N_3^- in D_2O ,” *J. Chem. Phys.* **133**, 014505 (11 pages) (2010).

K. KIM and S. SAITO, “Multi-Time Density Correlation Functions in Glass-Forming Liquids: Probing Dynamical Heterogeneity and its Lifetime,” *J. Chem. Phys.* **133**, 044511 (10 pages) (2010).

K. KIM and S. SAITO, “Role of the Lifetime of Dynamic Heterogeneity in the Frequency Dependent Stokes-Einstein Relation of Supercooled Liquids,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 093601 (4 pages) (2010).

K. KIM, K. MIYAZAKI and S. SAITO, “Molecular Dynamics Studies of Slow Dynamics in Random Media: Type A-B and Reentrant Transitions,” *Eur. Phys. J. Special Topics* **189**, 135–139 (2010).

C. KOBAYASHI and S. SAITO, “Relation between Conformational Heterogeneity and Reaction Cycle of Ras: Molecular Simulation of Ras,” *Biophys. J.* **99**, 3726–3734 (2010).

T. YAGASAKI, S. SAITO and I. OHMINE, “Effects of Nonadditive Interactions on Ion Solvation at the Water/Vapor Interface: A Molecular Dynamics Study,” *J. Phys. Chem. A* **114**, 12573–12584 (2010).

B-3) 総説，著書

金 鋼，齊藤真司，「ガラス転移の動的不均一性とその時間スケール：多時間相関関数による解析」*アンサンブル* **12**, 16–21 (2010).

B-4) 招待講演

T. YAGASAKI and S. SAITO, “Intermolecular Dynamics in Water: From Normal Liquid State to Supercooled Liquid State,” Flemingfest: Frontiers in Condensed Phase Physical Chemistry, Berkeley (U.S.A.), July 2010.

T. YAGASAKI, K. KIM and S. SAITO, “Ultrafast Water Dynamics and Low Heterogeneous Dynamics Probed by Multi-Time Correlation Functions,” 5th International Conference on Coherent Multidimensional Spectroscopy, Minneapolis (U.S.A.), August 2010.

K. KIM and S. SAITO, “Lifetime of Dynamical Heterogeneity in Supercooled Liquids and its Role in Stokes-Einstein Violation,” Workshop on the Dynamics of the Glass/Jamming Transition in celebration of the 80th birthday of Prof. Kyozi Kawasaki, Novotel Ambassador, Busan (Korea), September 2010.

T. YAGASAKI and S. SAITO, “Dynamics in Water and Ice Revealed by Theoretical Nonlinear IR Spectroscopy,” Pacificchem, Honolulu (U.S.A.), December 2010.

B-6) 受賞，表彰

金 鋼，日本物理学会若手奨励賞 (2010).

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 (2002–2009).

日本化学会東海支部幹事 (2007–2008).

分子シミュレーション研究会幹事 (2007–2011).

分子科学会運営委員 (2008–2012).

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，「量子分子科学」2010年11月22日–24日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B)(2),「線形・非線形分光シミュレーションによる緩和および反応ダイナミクスの解明」 斉藤真司 (2010年度–2012年度).

科研費若手研究(B),「多時間相関関数を用いたガラス転移の不均一ダイナミクスの解析」 金 鋼 (2009年度–2010年度).

科研費若手研究(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).

科研費特定領域研究(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).

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(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).

C) 研究活動の課題と展望

光励起反応ダイナミクスの理論研究に関しては,細胞のイメージングに広く用いられているにも関わらず,そのダイナミクスについては未だによく分かっていない緑色蛍光タンパク質(GFP)の励起状態プロトン移動反応の解析を行う。さらに,光合成反応で重要な光捕集アンテナ系タンパク質の中の1つであるFenna-Matthews-Olson タンパク質(FMO)の高効率な励起エネルギー移動反応の解析を行う。

線形・非線形分光法による凝縮系ダイナミクスの理論研究に関しては,水の分子内・分子間ダイナミクスの解析を進め,各運動の揺らぎ,伸縮と変角運動,変角運動と分子間運動のカップリングの様相,水中のエネルギー散逸機構を明らかにし,水溶液内の化学反応機構の基礎をなす水の分子内・分子間振動ダイナミクスの包括的な解明を目指す。

さらに,高次非線形分光法および状態変化の両面から解析を行い,過冷却水やイオン液体等の不均一ダイナミクスの起源について解析を進める。

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) 光機能分子の電子過程の解析と理論設計
- c) 内殻電子過程の理論精密分光
- 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・発光スペクトルは多くの場合，溶液中などの環境場で観測される。分子に極性があり，励起状態において電荷分布が変化する場合，溶媒和の効果は小さくない。励起状態の溶媒効果を評価する PCM-SAC-CI 理論の開発を行い，プログラムの実装を行った。この方法では，溶媒和の効果を分極する連続体で近似し，電子励起による速い溶媒の分極による効果は非平衡過程 (Non-equilibrium) で記述し，溶媒が再配向する遅い溶媒和の効果は平衡過程 (Equilibrium) で記述する。この方法をアクロレインやメチレンシクロプロペンの $\pi\pi^*$ 励起状態や $n\pi^*$ 励起状態に適用し，励起状態におけるソルバトロミズムについて研究した。さらに PCM-SAC-CI 理論の解析的エネルギー微分法をプログラム実装し，溶媒中における励起状態の構造論を研究する方法を開発した。
- b) テトラアザポルフィリン ($C_{16}H_{10}N_8$) とその π 電子系を拡張した化合物，フタロシアニン ($C_{32}H_{18}N_8$)，ナフトロシアニン ($C_{48}H_{26}N_8$)，アントラコシアニン ($C_{64}H_{34}N_8$) の吸収スペクトルの SAC-CI による精密な理論研究を行った。これらの化合物は近赤外領域の色素分子設計で重要である。Fe(CO)₅ 分子と Co(C₅H₄)(CO)₂ 分子のペニングイオン化スペクトルについて研究し，SAC-CI 法による精密な帰属を行った。さらに励起 He 原子との相互作用を検討し，ポテンシャル曲面を計算することによって，ペニングイオン化スペクトルで観測される CEDPICS と相互作用ポテンシャルの異方性の相関を明らかにした。
- c) 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いる。観測された現象を理解するためには，理論の正確な情報は極めて重要となる。本年度は，2 電子イオン化状態の研究を行い，実験で得られる情報から，緩和エネルギーなどの情報を引き出せる可能性を閉殻分子と開殻分子について理論的に示した。また，NH₃ や CH₄ の 2 電子内殻イオン化エネルギーや 2 電子内殻イオン化状態からのオージェ過程の終状態の CVV 状態や VVVV 状態について理論計算を行い，実験スペクトルの帰属を行った。
- 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。新規な燃料電池として注目されるエタノールを用いた DEFC で重要である金属表面触媒上における酸化反応について研究した。エタノールから CO に酸化されるまでの反応について研究を行い，反応の電子的メカニズムを明らかにした。

B-1) 学術論文

- J. H. D. ELAND, M. TASHIRO, P. LINUSSON, M. EHARA, K. UEDA and R. FEIFEL**, “Double Core Hole Creation and Subsequent Auger Decay in NH_3 and CH_4 Molecules,” *Phys. Rev. Lett.* **105**, 213005 (4 pages) (2010).
- R. FUKUDA, M. EHARA and H. NAKATSUJI**, “Excited States and Electronic Spectra of Extended Tetraazaporphyrins,” *J. Chem. Phys.* **133**, 144316 (16 pages) (2010).
- M. TASHIRO, M. EHARA and K. UEDA**, “Double Core-Hole Electron Spectroscopy for Open-Shell Molecules: Theoretical Perspective,” *Chem. Phys. Lett.* **496**, 217–222 (2010).
- R. CAMMI, R. FUKUDA, M. EHARA and H. NAKATSUJI**, “Symmetry-Adapted Cluster and Symmetry-Adapted Cluster-Configuration Interaction Method in the Polarizable Continuum Model-Theory for Solvent Effect on Electronic Excitation of Molecules in Solution,” *J. Chem. Phys.* **133**, 024104 (24 pages) (2010).
- M. TASHIRO, M. EHARA, H. FUKUZAWA, K. UEDA, C. BUTH, N. V. KRYZHEVOI and L. S. CEDERBAUM**, “Molecular Double Core-Hole Electronic Spectroscopy for Chemical Analysis,” *J. Chem. Phys.* **132**, 184302 (11 pages) (2010).
- R. FUKUDA, M. EHARA, H. NAKATSUJI, N. KISHIMOTO and K. OHNO**, “Valence Ionized States of Iron Pentacarbonyl and Ita5-Cyclopentadienyl Cobalt Dicarboxyl Studied by the SAC-CI Calculation and Collision-Energy Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy,” *J. Chem. Phys.* **132**, 084302 (12 pages) (2010).
- M. EHARA and K. UEDA**, “Vibrational Spectra and Geometry Relaxation in Core-Electronic Processes of N_2O and CO_2 ,” *J. Phys.: Conf. Series* **235**, 012020 (9 pages) (2010).
- R. R. LUCCHESI, R. MONTUORO, K. KOTSIS, M. TASHIRO, M. EHARA, J. D. BOZEK, A. DAS and E. D. POLIAKOFF**, “The Effect of Vibrational Motion on the Dynamics of Shape Resonant Photoionization of BF_3 Leading to the $\text{E}^2\text{A}_1'$ State of BF_3^+ ,” *Mol. Phys.* **108**, 1055–1067 (2010).

B-3) 総説，著書

- M. EHARA and H. NAKATSUJI**, “Development of SAC-CI General-R Method for Theoretical Fine Spectroscopy,” in *Recent Progress in Coupled Cluster Methods: Theory and Applications*, P. Carsky, J. Pittner, J. Paldus, Eds., Springer, pp. 79–112 (2010).

B-4) 招待講演

- M. EHARA**, “Theoretical Fine Spectroscopy and Photophysical Chemistry with the SAC-CI Method,” Pacificchem 2010 Congress; Symposium for “Computational Quantum Chemistry: Theory and Interactions with Experiment,” Honolulu (U.S.A.), December 2010.
- M. EHARA**, “Photochemistry of Functional Molecules Studied by the SAC-CI Method,” Pacificchem 2010 Congress; Symposium for “Molecular Theory for Real Systems and Chemical Reactions,” Honolulu (U.S.A.), December 2010.
- M. EHARA**, “Photophysical Chemistry based on the SAC-CI Method,” The 1st Chulalongkorn–Institute for Molecular Science Joint Symposium, Bangkok (Thailand), October 2010.
- M. EHARA**, “Theoretical Spectroscopy of Core-Electron Processes and Solvent Effect in Excited States,” The 15th International Workshop Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-XV), Cambridge (U.K.), August–September 2010.

M. EHARA, “Photochemistry of Functional Conjugated Molecules Studied by the SAC-CI Method,” Kolkata Univ., Kolkata (India), April 2010.

M. EHARA, “Photochemistry of Functional Conjugated Molecules Studied by the SAC-CI Method,” Pure and Applied Chemistry International Conference 2010, Ubon Ratchathani (Thailand), January 2010.

M. EHARA, “Theoretical Fine Spectroscopy and Photo-physical Chemistry,” International Symposium on “Molecular Theory for Real Systems,” Kyoto (Japan), January 2010.

M. EHARA, “Theoretical Spectroscopy for Single and Double Core-Hole Ionization,” Recent Advances in Many-Electron Theories, Shankarpur (India), January 2010.

B-6) 受賞，表彰

江原正博, APATCC (Asia-Pacific Association of Theoretical & Computational Chemists) Pople Medal (2009).

江原正博, QSCP (Quantum Systems in Chemistry and Physics) Promising Scientist Award of CMOA (Centre de Mecanique Ondulatoire Appliquee) (2009).

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).

VIIth Congress of International Society for Theoretical Chemical Physics, Organization Committee (2008).

第3回分子科学討論会実行委員 (2009).

その他

次世代スパコン戦略プログラム「計算物質科学イニシアティブ」企画室 (2009–).

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 ナノ統合ソフト担当 (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, 「構造分子基礎理論」 2010年 7月 21日–23日.

大阪大学大学院工学研究科, 「計算機化学」 2010年 4月 22日–23日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(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).

科研費特定領域研究, 「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).

科学技術振興機構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).

科研費基盤研究(B), 「内殻電子過程の超精密理論分光」 江原正博 (2009年–2011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。

奥村久士(准教授)(2009年5月1日着任)

A-1) 専門領域：理論生物物理学，理論化学物理学

A-2) 研究課題：

- a) ポリアラニンのマルチバーリック・マルチサーマル分子動力学シミュレーション
- b) ペプチドの部分的マルチカノニカル分子動力学法の最適化
- c) ファンデルワールスレプリカ交換法の提案
- d) 生体分子の分子動力学シミュレーションプログラム GEMB の高速化

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 最近提案したマルチバーリック・マルチサーマル法は加熱，加圧による物性の変化を正しく調べることができる。温度・圧力の変化によるペプチドの構造変化を議論するため，この方法をポリアラニンに適用した。その結果， α ヘリックスや 3_{10} ヘリックスのヘリックス構造やポリアラニンの主鎖の間で水素結合のできていないアンフォールド状態が得られた。また温度を上げててもまた圧力をかけても，アンフォールド状態に対するヘリックス構造の存在確率は減ることがわかった。さらにヘリックス構造とアンフォールド状態の間の部分モルエンタルピー差と部分モル体積差を求めることができた。
- b) マルチカノニカル法は有力な方法であるが，大きな系ではポテンシャルエネルギーの分布が $1/\sqrt{N}$ (N は粒子数)に比例して鋭くなるので事前に重み因子を決めるのが難しくなる。この問題を解決するために提案した部分的マルチカノニカル法では，多くの構造をサンプルするのに重要なポテンシャルエネルギー項についてだけ広くカバーする。生体分子系においてどのポテンシャルエネルギー項を広くカバーするのが最も効率的が明らかにするため，アラニンジペプチドを例にポテンシャルエネルギー項の多くの選び方について調べた。その結果，レナード・ジョーンズポテンシャル，静電ポテンシャル，二面角ポテンシャルの和を広くカバーするのが最も効率良く多くの構造を探索できることがわかった。
- c) 生体分子のシミュレーションではレプリカ交換法もよく使われる。この方法では系のコピー(レプリカ)を複数用意し，これらのレプリカ間で温度交換がおこなうことで，効率的な構造空間のサンプリングが実現される。しかし，自由度が大きい系を扱う場合，多数のレプリカを用意する必要がある。この問題点を解決するため，最近ファンデルワールスレプリカ交換法を提案した。この方法ではレプリカ間で温度を交換する代わりに，原子半径(ファンデルワールス半径)を記述するパラメータの交換をおこなう。これにより原子間の立体障壁を取り除き，構造空間の効率的サンプリングを実現する。また，タンパク質内の相互作用に関わるパラメータのみ交換することで，水中のタンパク質系に対するレプリカの増大を抑えることが可能である。
- d) これまで独自の高速分子動力学シミュレーションプログラム Generalized-Ensemble Molecular Biophysics (GEMB) プログラムを開発してきた。このプログラムには以下のような特徴がある。
 - (1) 拡張アンサンブル分子動力学法により多くの構造を効率よく探索できる。
 - (2) シンプレクティック解法を用いているのでシミュレーションを安定に実行できる。
 - (3) 多時間ステップ法を使って高速にシミュレーションを行う。このプログラムをより高速化するため，OPEN MP と MPI の両方を用いて2重並列化した。

B-1) 学術論文

S. G. IOTH, H. OKUMURA and Y. OKAMOTO, “Replica-Exchange Method in Parameter Space: Overcoming Steric Restrictions for Biomolecules,” *J. Chem. Phys.* **132**, 134105 (8 pages) (2010).

H. OKUMURA, E. GALLICCHIO and R. M. LEVY, “Conformational Populations of Ligand-Sized Molecules by Replica Exchange Molecular Dynamics and Temperature Reweighting,” *J. Comput. Chem.* **31**, 1357–1367 (2010).

S. G. ITOH, A. TAMURA and Y. OKAMOTO, “Helix-Hairpin Transitions of a Designed Peptide Studied by a Generalized-Ensemble Simulation,” *J. Chem. Theory Comput.* **6**, 979–983 (2010).

B-3) 総説，著書

H. OKUMURA, “Generalized-Ensemble Molecular Dynamics and Monte Carlo Algorithms beyond the Limit of the Multicanonical Algorithm,” *Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol.* **1**, 033002 (2010).

奥村久士, 「マルチバーリック・マルチサーマル法と部分的マルチカノニカル法」 *アンサンブル* **12**, No. 2, 23 (2010).

奥村久士, 「分子動力学シミュレーションにおける温度・圧力制御第6回: マルチカノニカル法とマルチバーリック・マルチサーマル法」 *アンサンブル* **12**, No. 1, 64 (2010).

B-4) 招待講演

H. OKUMURA, “Some molecular dynamics simulations of Lennard-Jones fluid,” Seminar at Institute of Physics, Academia Sinica, Taipei (Taiwan), November 2010.

H. OKUMURA, “New generalized-ensemble algorithms for alanine dipeptide and polyalanine simulations,” 2010 NCTS November Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Taipei (Taiwan), November 2010.

H. OKUMURA, “Generalized-ensemble molecular dynamics simulations of alanine dipeptide and polyalanine,” The ACP 17th workshop on Recent Development in Computational Statistical Physics, Tokyo (Japan), October 2010.

H. OKUMURA, “Generalized-ensemble molecular dynamics simulations of a peptide,” Indo–Japan Joint Workshop on New Frontiers in Molecular Spectroscopy; from Gas Phase to Proteins, Kobe (Japan), September 2010.

H. OKUMURA, “Generalized-ensemble molecular dynamics with limited degrees of freedom for biomolecules,” The 10th Taiwan International Symposium on Statistical Physics, Taipei (Taiwan), July 2010.

H. OKUMURA, “Generalized-ensemble molecular dynamics simulations of alanine dipeptide,” The First International Workshop on Computational Biophysics, Ho Chi Minh City (Vietnam), February 2010.

S. G. ITOH, “Dimerization of amyloid beta-peptides studied by the multicanonical-multioverlap algorithm,” 2010 NCTS November Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Taipei (Taiwan), November 2010.

奥村久士, 「分子動力学シミュレーションにおける温度・圧力制御手法」第4回分子シミュレーションスクール——基礎から応用まで——, 分子科学研究所, 岡崎, 2010年12月.

奥村久士, 「分子動力学シミュレーション手法の開発と核融合科学との連携」第1回「自然科学における階層と全体に関する新たな学術分野の開拓」ワークショップ, 分子科学研究所, 岡崎, 2010年10月.

奥村久士, 「分子動力学シミュレーション手法の最近の進展——プラズマ科学との連携に向け——」第4回シミュレーション科学シンポジウム, 核融合科学研究所, 2010年9月.

伊藤 暁,「レプリカ交換法の生体分子への応用と改良」理論生物化学物理研究室セミナー, 名古屋大学, 名古屋, 2010年10月.

伊藤 暁,「Improvement of TIGER (Temperature Intervals with Global Energy Reassignment) method」理論生物化学物理研究室セミナー, 名古屋大学, 名古屋, 2010年4月.

B-8) 競争的資金

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

C) 研究活動の課題と展望

これまでにマルチバーリック・マルチサーマル法, 部分的マルチカノニカル法, ファンデルワールスレプリカ交換法などの新しいシミュレーション手法を開発してきた。これらの手法はサンプリング効率が高く注目されているが, それでも50残基以上のタンパク質を折りたたむのには成功していない。それはどの手法も特定の構造に近づくようにシミュレーションするわけではなく, ただ多くの構造をサンプルするだけだからである。そこで狙った構造に近づくように力をかける新しい手法「ヘリックス・ストランドレプリカ交換法」を提案し, ペプチドおよびタンパク質に応用する。この手法を用いれば50残基を超えるタンパク質を世界で初めて折りたたみ, 立体構造の形成過程を原子レベルで明らかにできると考えている。

石 田 干 城 (助教) (2004 年 11 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：理論化学，計算化学

A-2) 研究課題：

- a) 溶液内光励起反応過程の理論研究
- b) 分子動力学法によるイオン液体の理論的研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 光励起後の励起状態におけるフェムト秒オーダーでの超高速電子移動反応プロセスや溶媒和過程の解析を可能にするため、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、時間依存形式の RISM-SCF 法と組み合わせることで、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を提案し、溶質分子としての色素分子の光励起電子移動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色素分子における励起状態で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。さらに短パルスレーザーを用いた分光実験による報告例と比較したところ、分子内電子移動反応に必要とされる時間の見積もりと非常によい一致が見られることが示された。加えて、励起状態での電子移動反応過程について従来から提唱されてきた分子内構造変化が起点となる反応過程とは異なり、分子内での電子移動反応が構造変化に先だって起こる過程が存在することも初めて示された。また、提案・拡張された方法論をエネルギー移動の問題へと適用すべく、さらなる方法論の拡張への取り組みを行っている。
- b) 陽イオンと陰イオンのペアで構成されるイオン液体中において、イオン分子間の相互作用の特性がその物理的、化学的な性質を左右している。このような相互作用を分子レベルで理解することがイオン液体の研究における最重要課題の一つである。特に、イオン液体中でのダイナミクスなどで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、これらについてのデータは静的な挙動のデータに加えて必要不可欠である。しかしながら、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を伴い、さらなる理解のためにはコンピュータ・シミュレーションによる研究との比較・検討が有効である。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、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多体効果による分極の効果によって大きく影響されることが始めて示された。また、陽・陰イオンの相互相関を調べることで、イオン液体中ではいわゆる「かご効果」は分極の効果により小さくなることが見出され、イオン液体の挙動を制御する原因の一つとなっていることも明らかになった。

B-4) 招待講演

T. ISHIDA, "Theoretical Investigation of Polarization Effects in Solution: Importance of Solvent Collective Motions," 8th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE) 2010, Kos (Greece), October 2010.

B-10) 競争的資金

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

科研費特定領域研究(公募研究)「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).

科研費特定領域研究(公募研究)「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

本年度は溶液内での光励起後の分子内電子移動反応の解析に必要な方法論の拡張に関する研究と、イオン液体中でのイオン間ダイナミクスの分子動力学法による解析の2つを中心として研究活動を計画し、行った。溶液内色素分子における励起状態での分子内電子移動反応の研究には理論的方法の拡張により計算効率を改善し、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も応用することが可能となり、多くの知見と進展を得ることができた。今後はさらにエネルギー移動の問題や金属錯体や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対象となる系における相互相関を解析するための方法を確立することができ、理論研究をさらに推し進めることが可能となった。今後もさらにイオン液体のもつ特性を制御するための物理的因子について研究を進めていきたい。

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) 有機分子からなるナノ構造体の光化学・物理的特性
- 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と相互作用

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，特徴的な光学の性質，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しており，近接場で 20 fs レベルの超高速測定が今少しで可能となる段階にきている。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観測すること等が可能になると予測している。
- b) 所外との共同研究として，LB 膜を生成する共役高分子化合物，ポリジアセチレン膜を有する金属微粒子等に関して，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，低パワー近赤外光による多光子重合反応等を見だし，解析を進めている。またポリジアセチレン膜を有する金属微粒子の，単一粒子レベルのキャラクタリゼーションを行い，微粒子上におけるジアセチレンの光重合プロセスの解析に不可欠な情報を得た。
- 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。既に数年前に，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だししていた。その理論的解釈について，所外との共同研究を行い，試料と測定系を全て含んだ大規模な電磁気学シミュレーションにより，微粒子と近接場測定系との相互作用に関する進んだ解釈が可能となりつつある。また電子線描画による 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のイメージングや，ある種の金属微粒子で近接場光が異常に強く透過するなど，興味深い光学特性を見だし，その起源も理論解析によりほぼ明らかとなっている。
- d) 貴金属微粒子を凝集・配列した試料の近接場領域での光学の性質に関する研究を，所外との共同研究で行っている。微粒子の形状・サイズと凝集状態による電場増強の違い，微粒子間の電磁気学的な相互作用，周囲のクロモフォア分子との相互作用に関して，近接場イメージングを用いた実証的研究を進めている。貴金属薄膜に開けた微細な開口（ナノヴォイド）の作る光電場の構造についても研究を進めた。また金属微粒子を用いた光反応場の研究への展

開の可能性を探っている。この他、非線形光学効果が関与する新規な光トラッピングの現象を見だし、理論解析を通じてその起源を解明した。この手法は、ナノ配列を作成する新たな方法としての可能性が期待できる。

B-1) 学術論文

K. SAWADA, H. NAKAMURA, T. MARUOKA, Y. TAMURA, K. IMURA, T. SAIKI and H. OKAMOTO, “FDTD Simulated Observation of a Gold Nanorod by Scanning Near-Field Optical Microscopy,” *Plasma Fusion Res.* 5, S2110 (4 pages) (2010).

Y. JIANG, T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, “Nonlinear Optical Effects in Trapping Nanoparticles with Femtosecond Pulses,” *Nat. Phys.* 6, 1005–1009 (2010).

B-3) 総説，著書

岡本裕巳, 「光ナノ計測」, 「光科学研究の最前線2」, 光科学研究の最前線2編集委員会編, 強光子場科学研究懇談会, p. 62 (2009).

B-4) 招待講演

岡本裕巳, 「プラズモン波動関数と増強電場の近接場光学イメージング」, 第21回名古屋コンファレンス, 名古屋, 2010年1月.

岡本裕巳, 井村考平, 「近接場分光法による金属ナノ構造の光子場イメージング」, 第57回応用物理学関係連合講演会, 平塚, 2010年3月.

井村考平, 岡本裕巳, 「近接場顕微分光に基づく光反応場の動的可視化・制御」, 第57回応用物理学関係連合講演会, 平塚, 2010年3月.

岡本裕巳, 井村考平, 「低次元系金属構造体における局在光電場分布の可視化」, 日本物理学会第65回年次大会, 岡山, 2010年3月.

K. IMURA and H. OKAMOTO, “Optical imaging of plasmon wavefunctions and optical fields in noble metal nanostructures,” The 3rd Taiwan–Japan Joint Symposium on Organized Nanomaterials and Nanostructures Related to Photoscience, Hualien (Taiwan), March 2010.

H. OKAMOTO and K. IMURA, “Near-Field Optical Imaging of Enhanced Photon Fields and Plasmon Waves in Metal Nanostructures,” The 28th Progress in Electromagnetics Research Symposium (PIERS 2010), Cambridge (U.S.A.), July 2010.

H. OKAMOTO and K. IMURA, “Near-Field Imaging of Plasmonic Waves and Enhanced Optical Fields,” The 6th International Workshop on Nano-scale Spectroscopy and Nanotechnology, Kobe (Japan), October 2010.

H. OKAMOTO and K. IMURA, “Field enhancement in metal nanostructures visualized by near-field microscopy,” Pacificchem 2010 Symposium #72 “Frontiers of Surface-Enhanced Raman Scattering: Single-Nanoparticles and Single Cells,” Honolulu (U.S.A.), December 2010.

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).
原田洋介, ナノオプティクス賞 (2010).

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).
Japan-Korea Joint Symposium on Molecular Science 2009 “Chemical Dynamics in Materials and Biological Molecular Sciences” (Awaji), Co-chair, Secretary general (2009).
The 7th Asia-Pacific Conference on Near-Field Optics (Jeju), Technical Program Committee (2009).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2006–2007).
日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (2008–2010).
日本学術振興会国際事業委員会書面審査員 (2008–2010).

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).
総合研究大学院大学物理科学研究科副研究科長 (2010–).

B-8) 大学での講義，客員

総合研究大学院大学物理科学研究科，「分子分光学」2010年7月8日-12日.

総合研究大学院大学物理科学研究科，「量子分子科学」2010年11月24日-26日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(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-2006年).

科研費若手研究(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-2006年).

倉田記念日立科学技術財団倉田奨励金，「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).

科研費萌芽研究，「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).

科研費特定領域研究「極微構造反応」(公募研究)「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).

科研費基盤研究(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-2010年).

科研費若手研究(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-2010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次元高確度歪み検出系開発」成島哲也 (2007年).

科研費特定領域研究「光-分子強結合場」(計画研究)「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，「プラズモン物質の波動関数の光制御とその応用」井村考平 (2008年-).

科研費挑戦的萌芽研究，「ナノ円二色性イメージングの開発と分子集合体キラリティ」岡本裕巳 (2009年-).

科研費基盤研究(S)，「ナノドット配列における結合励起状態の時空間特性と励起場制御」岡本裕巳 (2010年-).

C) 研究活動の課題と展望

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を推進している。有機分子系では所外との共同研究を数件行い，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。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するという独自の研究領域を拓く事ができ，プラズモンの物理的本質に関する新たな視点を得つつある。これらを次のフェーズに発展させることが，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(特に微粒子の集合構造における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，或いは確立しつつある。間もなく研究室内で電子線描画法によるナノ構造体作成ができるようになる予定であり，それらを発展させる方向も継続して積極的に進める。また最近，金属微粒子の研究の副産物として，非線形光トラッピングという新たな現象を見い出したが，環境を整えばこれを発展させて新たな研究領域開拓に繋げたい。

大 島 康 裕 (教授) (2004 年 9 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：分子分光学，化学反応動力学

A-2) 研究課題：

- a) 非断熱相互作用による状態分布や量子波束の制御
- b) 大振幅な構造変形運動に関する量子波束の生成と観測
- c) ベンゼンを含む分子クラスターの高分解能レーザー分光
- d) 高分解能非線形コヒーレント分光の開発
- e) 強レーザー場イオン化ダイナミクスについての分光学的研究
- f) 円錐交差ダイナミクスに対する高分解能分光学的アプローチ

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，状態選択的プローブを利用した独自の実験的方法論により，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ている。昨年度，高繰返しでデータ取得が可能なように真空チャンバーならびにパルス色素レーザーを整備し，高い S/N 比を短時間で達成できるようになった。この新測定システムを利用することにより，NO 分子を対象として，回転量子波束の位相・振幅情報を完全に実験的に決定することに成功した。さらに，パルス対を利用した励起において，パルス間隔を適切に調節することによって単一の回転準位に 70~80% まで分布を集中させることが可能であることを初めて実験的に示した。
- b) 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である。これまで既に，ベンゼン 2:3 量体や NO-Ar において分子間振動分布に関する非断熱移動を実現し，さらに，振動波束干渉を実時間領域のスペクトルとして観測することにも成功している。本年度は，NO-Ar について詳細な実験的検討を行ない，様々なホットバンドをモニターして系統的に時間領域のデータを取得するとともに，2次元振動量子波束の時間発展を厳密に数値的に解くためのプログラム整備を行なった。
- c) 芳香環の関与する分子間相互作用を詳細に特定する目的で，ベンゼンを含む分子クラスターに関する分光学的研究を進めている。中でも最も結合の弱いベンゼン-He 系を重点的に取り上げ，単一縦モードナノ秒パルス光源を利用して高分解能で電子スペクトルを測定した。分子間振動励起状態への振電遷移を初めて観測することに成功し，特に，He 原子が1個ついた系では大規模な構造変形運動によるトンネル分裂を見出した。
- d) コヒーレント状態分布移動の新技术としてチャープパルスを利用した非共鳴誘導ラマン分光を提案し，さらに，当分光法を実現しうる新奇なコヒーレント光源として，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た。
- e) 強レーザー場中における分子のトンネルイオン化過程について，分光学的手法を活用して解明する研究を行なった。イオン化の影響による回転状態分布の変化を実験的に定量し，モデル計算との比較によって強光電場イオン化の角度依存性との相関を明らかにした。

- f) 韓国 KAIST の研究グループは、イオウを含む芳香族分子の光解離過程において、反応分岐比が特定の振電バンド近傍で急激に変化することを見出した。この観測事実は、初期励起状態が解離性の電子状態と円錐交差を通じて相互作用していることを実験的に明示した結果として、高い注目を集めている。この円錐交差ダイナミックスについて分光学的側面からアプローチするために、KAIST グループと協力して、当該分子の電子スペクトルを高分解能で測定する研究に着手した。

B-1) 学術論文

Y. SUMIYOSHI, I. FUNAHARA, K. SATO, Y. OHSHIMA and Y. ENDO, “Microwave Spectroscopy of the Ne–OH($^2\Pi_i$) Complex and Three-Dimensional Intermolecular Potentials,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12**, 8340–8349 (2010).

R. ITAKURA, H. HASEGAWA, Y. KUROSAKI, A. YOKOYAMA and Y. OHSHIMA, “Coherent Correlation between Nonadiabatic Rotational Excitation and Angle-Dependent Ionization of NO in Intense Laser Fields,” *J. Phys. Chem. A* **114**, 11202–11209 (2010).

Y. SUMIYOSHI, I. FUNAHARA, K. SATO, Y. OHSHIMA and Y. ENDO, “Three-Dimensional Intermolecular Potential Energy Surface of the Kr–OH Complex,” *Mol. Phys.* **108**, 2207–2218 (2010).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

H. HASEGAWA and Y. OHSHIMA, “Coherent Rotational Dynamics of Molecules Induced by Intense Ultrafast Laser Fields,” *J. Phys.: Conf. Series* **185**, 012014 (4 pages) (2009).

B-3) 総説，著書

Y. OHSHIMA and H. HASEGAWA, “Coherent Rotational Excitation by Intense Nonresonant Laser Fields,” *Int. Rev. Phys. Chem.* **29**, 619–663 (2010).

大島康裕, 「極短パルスレーザー光による分子回転の高速制御」/パリティ 12月号, 34–36 (2010).

B-4) 招待講演

大島康裕, 「高強度レーザー場によって誘起される分子振動・回転のコヒーレント光ダイナミクス」レーザー学会第30回年次大会, 千里ライフサイエンスセンター, 大阪府豊中市, 2010年2月.

Y. OHSHIMA, “Coherent rotational/vibrational dynamics of gas-phase molecules induced by intense ultrafast laser fields,” Seminar, National Chiao Tung University, Hsinchu (Taiwan), March 2010.

Y. OHSHIMA, “Coherent rotational/vibrational dynamics of molecules induced by intense ultrafast laser fields,” Symposium on “Physics and Chemistry of Coherently Controlled Quantum Systems,” Meitetsu Inuyama Hotel, Inuyama (Japan), March 2010.

Y. OHSHIMA, “Intermolecular vibrational dynamics of molecular clusters investigated by frequency- and time-domain spectroscopy,” PACIFICHEM 2010, Honolulu (U.S.A.), December 2010.

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).
北野健太, 平成21年度分子科学会優秀講演賞 (2009).

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).
分子科学総合討論会運営委員 (2004–2006).
分子科学会運営委員 (2006–2010).
分子科学会幹事 (2008–2010).
日本分光学会先端レーザー分光部会幹事 (2006–).
日本化学会物理化学ディビジョン主査 (2010–).

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, 2010–2011).

B-8) 大学での講義，客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「分子分光学」 2010年 7月 8日–12日.
総合研究大学院大学物理科学研究科, 「量子分子科学」 2010年 11月 24日–26日.

B-9) 学位授与

北野健太, 「分子の回転角運動量オリエンテーションに関する新手法の開拓」 2010年 3月, 博士(理学)

B-10) 競争的資金

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).

科研費基盤研究(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).

科研費特定領域研究「強光子場分子制御」(公募研究)「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).

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

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

科研費若手研究(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).

科研費萌芽研究,「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).

科研費特定領域研究「高次系分子科学」(公募研究)「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–2011年).

科研費若手研究(B),「高強度レーザー場を用いた新しい振動分光法による孤立分子クラスター研究の新展開」長谷川宗良 (2009年–2010年).

科研費基盤研究(A),「分子運動量子状態のデザインと再構築」大島康裕 (2010年–2013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による非断熱回転励起においては、単なる状態分布移動のみでなく、生成する回転量子波束の実験的再構築や角運動量が配列した量子波束の生成など、高度なコヒーレント制御・観測が実現できる体制が整った。今後は、イオンイメージング技術と結合した回転運動の画像化や、光分解・光イオン化などの反応ダイナミックス研究への展開を目指す。また、非断熱励起を振動自由度へ適用する研究も順調に進行しており、分子回転で発展させてきた様々な方法論を利用する段階である。特に、多段階のラマン過程が関与した量子波束生成を実現し、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。

ナノ秒コヒーレント光源を利用した周波数領域分光では、ベンゼン-(He)₁₂について極低温(0.3 K)条件下の高分解能スペクトル測定を行うなど、実験システムの整備はほぼ完了した。今後は、 π 水素結合の典型であるベンゼン-水など、順次、研究対象を拡大する。その際、複雑かつ不規則な回転構造の帰属を確定させるために、複数の高分解能ナノ秒パルス光源を利用した非線形分光を活用する。また、現在、早急に進めているナノ秒チャープ光源の開発が完了次第、新規な断熱分布移動の実現に着手する。これによって、クラスターの内部運動に関する振動準位構造を詳細に特定することが可能となる。

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

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。さらに、固体パラ水素中の非局在化した量子状態 (vibron) の干渉を観測し制御する事に成功した。
- c) 光子場の振幅情報を分子の振動固有状態の量子振幅として転写する量子メモリーの開発を行なった。ここでは、フェムト秒光パルス対によって分子内に生成した2個の波束間の量子位相差をアト秒精度で操作し、これらの干渉の結果生成した第3の波束を構成する各振動固有状態のポピュレーションを観測することによって、光子場の振幅情報が高精度で分子内に転写されていることを証明することができた。また、フェムト秒光パルス対の時間間隔をアト秒精度で変化させることによって波束内の固有状態のポピュレーションの比率を操作できることを実証した。
- d) 分子メモリーを量子コンピューターに発展させるためには、c) で行ったポピュレーション測定だけでなく、位相の測定を行う必要がある。そこで我々は、c) の第3の波束の時間発展を別のフェムト秒パルスを用いて実時間観測した。これによって、ポピュレーション情報と位相情報の両方を分子に書き込んで保存し、読み出すことが可能であることを実証した。振動固有状態の組を量子ビットとして用いる量子コンピューターの可能性が示された。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。

B-1) 学術論文

K. HOSAKA, H. SHIMADA, H. CHIBA, H. KATSUKI, Y. TERANISHI, Y. OHTSUKI and K. OHMORI, “Ultrafast Fourier Transform with a Femtosecond Laser Driven Molecule,” *Phys. Rev. Lett.* **104**, 180501 (4 pages) (2010).

H. GOTO, H. KATSUKI and K. OHMORI, “Optical Modification of the Vibrational Distribution of the Iodine Molecule,” *Chem. Phys. Lett.* **493**, 170–172 (2010).

B-2) 総説, 著書

H. KATSUKI, H. CHIBA, C. MEIER, B. GIRARD and K. OHMORI, “Wave Packet Interferometry with Attosecond Precision and Picometric Structure,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12**, 5189–5198 (2010).

B-4) 招待講演

K. OHMORI, “Spatiotemporal Coherent Control with Picometer and Attosecond Precision—From cold molecules to bulk solids—,” 40th Winter Colloquium on The Physics of Quantum Electronics, Snowbird (U.S.A.), January 2010.

K. OHMORI, “Spatiotemporal Coherent Control with Picometer and Attosecond Precisions,” The Seminar Series of the Ultrafast X-Ray Science Laboratory, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley (U.S.A.), January 2010.

K. OHMORI, “Spatiotemporal Coherent Control with Picometer and Attosecond Precisions,” LCLS-PULSE Seminar Series, Stanford University, Palo Alto (U.S.A.), January 2010.

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; 冷却分子からバルク固体まで」第2回文部科学省「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」シンポジウム, 豊中市千里ライフサイエンスセンター, 2010年2月.

K. OHMORI, “Spatiotemporal Coherent Control with Picometer and Attosecond Precision; From cold molecules to bulk solids,” The 69th Okazaki Conference on “New Frontier in Quantum Chemical Dynamics,” Okazaki (Japan), February 2010.

K. OHMORI, “Spatiotemporal Coherent Control with Picometer and Attosecond Precision; From cold molecules to bulk solids,” Photon-Frontier Consortium Symposium on “Physics and Chemistry of Coherently Controlled Quantum Systems,” Inuyama (Japan), March 2010.

K. OHMORI, “Spatiotemporal Wave-Packet Engineering with Picometer and Attosecond Precision,” Workshop on “Coherence in Ultracold Molecular Physics,” Vancouver (Canada), May 2010.

K. OHMORI, “Spatiotemporal Wave-Packet Engineering with Picometer and Attosecond Precision,” Fritz Haber Institute Special Seminar, Berlin (Germany), May 2010.

K. OHMORI, “Spatiotemporal Wave-Packet Engineering with Picometer and Attosecond Precision,” Center for Quantum Dynamics Seminar, Heidelberg (Germany), May 2010.

K. OHMORI, “Ultrafast Fourier Transform with a Femtosecond-Laser-Driven Molecule,” 6th International Workshop on Optimal Control of Quantum Dynamics: Theory and Experiment, Ringberg (Germany), May–June 2010.

K. OHMORI, “Coherent Control and the Quantum/Classical Boundary,” Physical Chemistry Colloquium, Munich (Germany), June 2010.

大森賢治, 「アト秒ピコメートル精度の量子エンジニアリング; 冷却分子からバルク固体まで」物性研短期研究会「外部場の時間操作と実時間物理現象」, 柏, 2010年6月.

大森賢治,「アト秒ピコメートル精度の時空間量子エンジニアリング～極低温分子からパルク固体まで～」第4回分子科学討論会, 豊中, 2010年9月.

大森賢治,「アト秒ピコメートル精度の時空間量子エンジニアリング～極低温分子からパルク固体まで～分子コンピューターの実現に向けて」第4回分子科学討論会, 豊中, 2010年9月.

K. OHMORI, “Ultrafast Fourier Transform with a Femtosecond-Laser-Driven Molecule,” ASILS6, Peking (China), October 2010.

K. OHMORI, “Ultrafast Fourier Transform with a Femtosecond-Laser-Driven Molecule,” Chemistry Department Seminar Series of Temple University, Philadelphia (U.S.A.), October 2010.

K. OHMORI, “Simulating Molecular Wave Functions Distorted by Impulsive Electronic Interaction with an Intense Femtosecond Laser Pulse,” Pacifichem 2010, Honolulu (U.S.A.), December 2010.

K. OHMORI, “Ultrafast coherent control of Ultracold molecules,” Pacifichem 2010, Honolulu (U.S.A.), December 2010.

H. KATSUKI, “Wave Packet Interferometry in Solid Parahydrogen,” 14th East Asian Workshop on Chemical Dynamics, Nara, May 2010.

香月浩之,「アト秒精度のコヒーレント制御：凝縮系への挑戦」第7回AMO 討論会, つくば国際会議場, 筑波, 2010年6月.

B-6) 受賞, 表彰

大森賢治, アメリカ物理学会フェロー表彰 (2009).

大森賢治, 日本学士院学術奨励賞 (2007).

大森賢治, 日本学術振興会賞 (2007).

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).

香月浩之, 英国王立化学会 PCCP 賞 (2009).

香月浩之, 光科学技術研究振興財団研究表彰 (2008).

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 (2006–2007, 2010–).

原子衝突研究協会運営委員 (2006–2007).

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).

8th Symposium on Extreme Photonics “Ultrafast Meets Ultracold” 組織委員長 (2009).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

European Research Council (ERC), Invited Panel Evaluator.

European Research Council (ERC), Invited Expert Referee.

その他

平成16年度安城市シルバーカレッジ「原子のさざ波と不思議な量子の世界」

岡崎市立小豆坂小学校 第17回・親子おもしろ科学教室「波と粒の話」

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

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「量子動力学」2010年12月20日–22日.

東京大学大学院理学系研究科, 流動講座教授, 2009年4月–2011年3月.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構CREST事業, 「アト秒精度の凝縮系コヒーレント制御」大森賢治 (2010年–2015年).

科研費基盤研究(A), 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御法を用いた量子 / 古典境界の探索」大森賢治 (2009年–2011年).

科研費特別研究員奨励費, 「非線形波束干渉法の開発とデコヒーレンスシミュレーターへの応用」大森賢治 (2009年–2010年).

科研費特別研究員奨励費, 「極低温原子分子の超高速コヒーレント制御」大森賢治 (2008年–2010年).

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(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).

科研費特定領域研究(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).

科研費基盤研究(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).

科研費特定領域研究(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).

科研費基盤研究(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その時間発展の観測・制御。さらに極低温分子の生成とコヒーレント制御。これらを通じて、多体量子問題のシミュレーション実験、量子情報処理、極低温化学反応の観測と制御を目指す。

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，凝縮分子・分子固体，固体中の不純物分子，液体分子，溶質・溶媒分子の局所構造（幾何学的構造及び電子構造）を解明するための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。相互作用解析から，例えば，溶媒分子を溶質に近接したものとそれ以外に分離して，その配位構造や電子構造を解明することに成功している。バンド形成がはっきりしなかった弱い分子間相互作用を持つ有機固体のバンド分散の観測にも成功している。
- 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。さらにこれら共鳴分光を利用することで，酸素分子において，Rydberg-valence 相互作用を含む非断熱遷移のダイナミクスの詳細が初めて明らかになった。
- 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

M. NAGASAKA, T. HATSUI, T. HORIGOME, Y. HAMAMURA and N. KOSUGI, "Development of a Liquid Flow Cell to Measure Soft X-Ray Absorption in Transmission Mode: A Test for Liquid Water," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **177**, 130–134 (2010).

- C. MIRON, V. KIMBERG, P. MORIN, C. NICOLAS, N. KOSUGI, S. GAVRILYUK and F. GEL'MUKHANOV, "Vibrational Scattering Anisotropy Generated by Multichannel Quantum Interference," *Phys. Rev. Lett.* **105**, 093002 (4 pages) (2010).
- H. YAMANE, A. GERLACH, S. DUHM, Y. TANAKA, T. HOSOKAI, Y. Y. MI, J. ZEGENHAGEN, N. KOCH, K. SEKI and F. SCHREIBER, "Site-Specific Geometric and Electronic Relaxations at Organic-Metal Interfaces," *Phys. Rev. Lett.* **105**, 046103 (4 pages) (2010).
- W.-J. HUA, H. YAMANE, B. GAO, J. JIANG, S.-H. LI, H.S. KATO, M. KAWAI, T. HATSUI, Y. LUO, N. KOSUGI and H. ÅGREN, "A Systematic Study of Soft-X-Ray Spectra of Poly(dG)Poly(dC) and Poly(dA)Poly(dT) DNA Duplexes," *J. Phys. Chem. B* **114**, 7016–7021 (2010).
- M. NAGASAKA, H. KONDOH, K. AMEMIYA, I. NAKAI, T. SHIMADA, R. YOKOTA and T. OHTA, "Mechanism of Ammonia Formation on Rh(111) Studied by Dispersive Near-Edge X-Ray Absorption Fine Structure Spectroscopy," *J. Phys. Chem. C* **114**, 2164–2170 (2010).
- T. NAKAZATO, Y. FURUKAWA, M. CADATAL-RADUBAN, M. PHAM, T. TATSUMI, A. SAIKI, Y. ARIKAWA, N. SARUKURA, H. NISHIMURA, H. AZECHI, K. MIMA, T. FUKUDA, M. HOSAKA, M. KATOH and N. KOSUGI, "Systematic Study on Ce:LuLiF₄ as a Fast Scintillator Using Storage Ring Free-Electron Lasers," *Jpn. J. Appl. Phys.* **49**, 122602 (4 pages) (2010).

B-4) 招待講演

- N. KOSUGI, "Molecular inner-shell spectra of weakly bonding and interacting systems," 37th International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics (VUVX-2010), Vancouver (Canada), July 2010.

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).
- 山根宏之, 日本放射光学会奨励賞 (2009).

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, 2010–2011), 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, 放射光光源計画 2009–2011).
- 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–).
- 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).

ICESSE 電子分光及び電子構造国際会議国際諮問委員 (2006–).

ICESSE-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 (2009).

ICESSE-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, 2010–2011).

DyNano2010 短波長放射光によるナノ構造及びダイナミクス国際ワークショップ諮問委員 (2010).

台湾軟X線散乱国際ワークショップ組織委員 (2009).

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議長 (2002).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

フランスCNRS ANR 基盤研究審査員 (2010).

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), 特別研究員等審査会専門委員 (2009–2010), 国際事業委員会書面審査員 (2009–2010).

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, 2010–2011).

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 (1994–2011).

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 国際諮問委員及びプログラム委員 (2007, 2009).

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 (2007–2009), 放射光科学国際諮問委員会電子物性分科会委員 (2008).

核融合科学研究所外部評価委員会共同研究・連携研究専門部会委員 (2010–2011).

台湾放射光科学国際諮問委員会委員(2008-2011).

台湾中央研究院研究計画審査委員(2010).

フィンランド Oulu 大学物理学教授選考外部専門委員(2010).

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，「量子分子科学」2010年11月24日-26日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(B),「内殻励起を利用したスピン禁制イオン化・励起状態の研究」小杉信博(2003年-2005年).

科研費基盤研究(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).

科研費若手研究(B),「表面共吸着系の電子状態の同時観測法の開発と電極反応への展開」長坂将成(2009年-2010年).

科研費若手研究(B),「内殻励起を利用した有機半導体薄膜・界面の局所電子状態と電荷輸送ダイナミクスの研究」山根宏之,(2009年-2010年).

C) 研究活動の課題と展望

本研究グループは、内殻X線励起による局所構造解析の面から放射光の分子科学への新たな方法論の開発と応用を展開している。現在、測定対象の現象としては、内殻励起過程を中心とした研究から脱励起過程も考慮した研究に重点をシフトし、測定対象の物質系としては、孤立分子・クラスター系や分子固体を中心とした研究から液体・溶液の研究に重点をシフトしている。最終的なゴールは、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ることである。内殻励起状態を中間状態とする二次光学過程は遷移確率の少ない過程なので、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。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、高分解能軟X線吸収分光システム、高分解能光電子分光システム、高分解能軟X線発光分光システム等の開発に取り組んでいる。また、理論解析コードも整備している。現在、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。「フラーレンの極端紫外分光専用ライン」に特化させ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）。第1に，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。第2に，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。第3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。第4に，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，フラーレン分子線の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）。平成22年度には，運動量画像観測法を用いて，クラスターやオリゴマーの正確な3次元速度分布と内部温度を，広範囲のクラスターサイズを網羅して一気に測定する試みに初めて成功した。
- b) 紫外モードロックレーザーとアンジュレタ光を組み合わせ，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

Y. POO-ARPORN, V. VAILIKHIT, D. BASHYAL, K. NAKAJIMA, P. SONGSIRIRITTHIGUL and K. MITSUKE, “Preparation and Evaluation of High Efficiency Dye-Sensitized Solar Cells,” *Pure and Applied Chemistry International Conference PACCON 2010*, 424–426 (2010).

H. KATAYANAGI, B. P. KAFLE, C. HUANG, MD. S. I. PRODHAN, H. YAGI and K. MITSUKE, “Feasibility Study on the Mass-Selected Velocity Map Imaging of Polyatomic Molecules and Fullerenes,” *Pure and Applied Chemistry International Conference PACCON 2010*, 941–944 (2010).

K. NAKAJIMA, K. OHTA, H. KATAYANAGI and K. MITSUKE, “Azo Dyes as Photosensitizers for Organic Solar Cells,” *Pure and Applied Chemistry International Conference PACCON 2010*, 967–970 (2010).

H. KATAYANAGI and K. MITSUKE, “Mass-Analyzed Velocity Map Imaging of Thermal Photofragments from C₆₀,” *J. Chem. Phys. (Communication)* **133**, 081101 (4 pages) (2010).

B-4) 招待講演

K. MITSUKE, “Photoionization and Dissociation Dynamics of Gaseous Fullerenes Studied by Synchrotron Radiation,” International Symposium at Faculty of Liberal Arts and Science, Kasetsart University (Thailand), January 2010.

K. MITSUKE, “Photoionization Dynamics of Fullerenes and Emission Spectroscopy of Dye-Sensitized Solar Cells,” International Symposium at Faculty of Science, Kasetsart University (Thailand), January 2010.

K. MITSUKE, “Spectroscopy of Transient Species of Organic Solar Cells Studied by Laser and Synchrotron Radiation,” *Pure and Applied Chemistry International Conference PACCON2010*, Ubon Ratchathani (Thailand), January 2010.

K. MITSUKE, “Photovoltaic Mechanisms of the Organic Solar Cells Containing Ru Complex or Azo Dyes,” Seminar of Synchrotron Light Research Institute, Nakhon Ratchasima (Thailand), January 2010.

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 (2008–2009).

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, 国際事業委員会書面審査員 (2009–2010).

学会誌編集委員

原子衝突研究協会誌編集委員 (2006–2008).

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 (2007–2009).

愛知県知の拠点重点研究プロジェクト第8研究会委員 (2008–2010).

総合研究大学院大学「科学知の総合化」アジアにおける学術状況調査事業派遣者 (2010).

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, 「量子分子科学」2010年11月26日.

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).

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(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).

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).

科研費若手研究(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).

科研費基盤研究(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).

科研費特定領域研究(公募研究),「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).

科研費基盤研究(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: フラーレンや金属内包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, 有機太陽電池の電子構造や電子移動機構の研究。発電メカニズムの探求を通して, 太陽電池のエネルギー変換効率向上や長期安定化を目指す。

菱 川 明 栄 (准教授) (2003 年 4 月 1 日 ~ 2010 年 3 月 31 日)^{*}

A-1) 専門領域：光物理化学，強レーザー場科学

A-2) 研究課題：

- a) 強レーザー場中原子分子過程の解明と制御
- 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) 単一分子から生成したすべてのイオンおよび電子の多重コインシデンス法の開発を行い，近赤外超短パルス強レーザー場における孤立原子および分子の多重電離過程における電子相関および核ダイナミクスを明らかにした。また，電子励起状態からの分子の解離性イオン化過程の観測に成功した。さらに理研播磨研究所における SCSS 試験加速器 FEL を用い，EUV 超短パルスレーザー場における非線形多重イオン化過程経路を「光のゆらぎ」を利用した新しい光電子分光計測によって明らかにした。
- b) 分散補償ミラーと中空ファイバーからなるパルス圧縮器によってサブ 10 フェムト秒領域のレーザーパルスの発生を行った。これを集光して得た強レーザー場における多重クーロン爆発を利用することによって超高速分子反応過程，特に分子内の水素原子の動きがを実時間で可視化すること成功した。
- c) 希ガス非線形媒質 (Ne または Ar) を用いて発生させた高調波を，希ガス圧，セル長，集光強度を制御変数として最適化を行い，その特性を評価をした。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あるいは金属薄膜フィルターと 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，27 次，10 次) 高調波を用い，価電子あるいは内殻光電子およびオージェ電子の観測および核ダイナミクスの追跡に成功した。

B-1) 学術論文

Y. HIKOSAKA, M. FUSHITANI, A. MATSUDA, C.-M. TSENG, A. HISHIKAWA, E. SHIGEMASA, M. NAGASONO, K. TONO, T. TOGASHI, H. OHASHI, H. KIMURA, Y. SENBA, M. YABASHI and T. ISHIKAWA, "Multiphoton Double Ionization of Ar in Intense Extreme Ultraviolet Laser Fields Studied by Shot-by-Shot Photoelectron Spectroscopy," *Phys. Rev. Lett.* **105**, 133001 (4 pages) (2010).

B-3) 総説，著書

彦坂泰正，伏谷瑞穂，菱川明栄，「EUV SASE-FEL を用いた原子の多光子多重イオン化過程の研究」*放射光* **23**, 291–294 (2010).

B-4) 招待講演

A. HISHIKAWA, “Visualizing ultrafast chemical reactions by few-cycle intense laser pulse,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2010), Honolulu (U.S.A.), December 2010.

A. HISHIKAWA, “Visualizing ultrafast chemical reactions by intense ultrashort laser pulses,” The 7th International conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics (VUVX 2010), Vancouver (Canada), July 2010.

A. HISHIKAWA, “Visualizing ultrafast chemical reaction by few-cycle intense laser pulses,” The 4th Yamada Symposium on Advanced Photons and Science Evolution 2010 (APSE2010), Osaka (Japan), June 2010.

A. HISHIKAWA, “Visualizing ultrafast chemical reaction by few-cycle intense laser pulses,” The 9th Joint Seminar University of Münster–Nagoya University, Nagoya (Japan), May 2010.

A. HISHIKAWA, “Molecular processes in few-cycle intense laser fields,” One Day Symposium on Molecules in Intense Laser Field and Related Phenomena, Tokyo (Japan), March 2010.

A. HISHIKAWA, “Visualizing chemical reactions by intense ultrashort laser pulses,” The 6th Asian Conference on Ultrafast Phenomena (ACUP), Taipei (Taiwan), January 2010.

菱川明栄, 「クーロン爆発イメージングによる超高速化学反応の追跡」 第一回統合物質シンポジウム「統合物質創製化学の現状と展望」 京都大学, 宇治, 2010年12月.

菱川明栄, 「数サイクル強レーザー場における分子過程」 「実在系分子理論」取りまとめシンポジウム, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2010年7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」主催者 (2008).

分子科学討論会2009実行委員 (2008–2009).

レーザー学会第29回年次大会プログラム委員 (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 (2009–2010).

B-10) 競争的資金

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

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(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).

科研費若手研究(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).

科研費特定領域研究(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).

科学技術振興機構さきがけ研究, 「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

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。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。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。

*) 2010年4月1日名古屋大学大学院理学研究科教授, 分子科学研究所教授兼任

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) 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。共同利用運転の全運転時間を、電子ビーム強度を一定に保つトップアップ入射で実施可能となった。さらに安定な放射光発生を目指した電子軌道安定化システムの試験運転に成功した。
- b) 自由電子レーザーに関する研究を継続している。利用研究を継続する一方で、シード光注入による安定化や発振制御の研究に着手した。また、既設の自由電子レーザーでは発振の難しい真空紫外領域において外部レーザー光源と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、その出力飽和に関する新たな知見を得た。
- 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研究を継続している。テラヘルツ光の発生効率に関する研究や電場計測に関する研究を進めている。
- d) 外部レーザーと高エネルギー電子線を用いた逆コンプトン散乱によるエネルギー可変、偏光可変の極短ガンマ線パルス発生に関する研究を進めている。パルス幅数ピコ秒程度のガンマ線パルスの生成、エネルギー可変性の実証に成功した。

B-1) 学術論文

S. KIMURA, T. ITO, M. SAKAI, E. NAKAMURA, N. KONDO, T. HORIGOME, K. HAYASHI, M. HOSAKA, M. KATOH, T. GOTO, T. EJIMA and K. SODA, “SAMRAI: A Novel Variably Polarized Angle-resolved Photoemission Beamline in the VUV region at UVSOR-II,” *Rev. Sci. Instrum.* **81**, 053104 (7 pages) (2010).

C. SZWAJ, S. BIELAWSKI, M. -E. COUPRIE, C. BRUNI, M. HOSAKA, A. MOCHIIHASHI and M. KATOH, “Remaining Noise-Induced Spatiotemporal Dynamics in a Free Electron Laser Stabilized by Feedback Control,” *Eur. Phys. J. D* **59**, 451–455 (2010).

C. EVAIN, C. SZWAJ, S. BIELAWSKI, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, M. SHIMADA, S. KIMURA, M. KATOH, A. MOCHIIHASHI, T. TAKAHASHI and T. HARA, “Laser-Induced Narrowband Coherent Synchrotron Radiation: Efficiency versus Frequency and Laser Power,” *Phys. Rev. S. T. Accel. Beams* **13**, 090703 (15 pages) (2010).

T. TANIKAWA, M. ADACHI, H. ZEN, M. HOSAKA, N. YAMAMOTO, Y. TAIRA and M. KATOH, “Observation of Saturation Effect on Vacuum Ultraviolet Coherent Harmonic Generation at UVSOR-II,” *Appl. Phys. Express* **3**, 122702 (3 pages) (2010).

T. NAKAZATO, Y. FURUKAWA, M. CADATAL-RADUBAN, M. PHAM, T. TATSUMI, A. SAIKI, Y. ARIKAWA, N. SARUKURA, H. NISHIMURA, H. AZECHI, K. MIMA, T. FUKUDA, M. HOSAKA, M. KATOH and N. KOSUGI, “Systematic Study on Ce:LuLiF₄ as a Fast Scintillator Using Storage Ring Free-Electron Lasers,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **49**, 122602 (4 pages) (2010).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

M. ADACHI, M. KATOH, T. TANIKAWA, J. YAMAZAKI, K. HAYASHI, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA and N. YAMAMOTO, “Status of UVSOR-II and Light Source Developments,” *Proc. 23rd Particle Accel. Conf.* 2318–2320 (2009).

H. ZEN, M. ADACHI, K. HAYASHI, J. YAMAZAKI and M. KATOH, “Present Status of Control System of UVSOR-II,” *Proc. 12th Internat. Conf. Accel. Large Exp. Phys. Control Systems* 304–306 (2009).

H. ZEN, M. ADACHI, K. HAYASHI, M. KATOH, J. YAMAZAKI, T. TANIKAWA, M. HOSAKA, M. KOIKE, Y. TAIRA, Y. UNO and N. YAMAMOTO, “Present Status of UVSOR-II FEL,” *Proc. 31st Internat. Free Electron Laser Conf.* 576–579 (2009).

T. TANIKAWA, M. ADACHI, M. KATOH, J. YAMAZAKI, H. ZEN, M. HOSAKA, Y. TAIRA and N. YAMAMOTO, “Status of VUV-CHG at UVSOR-II,” *Proc. 31st Internat. Free Electron Laser Conf.* 285–288 (2009).

I. KATAYAMA, H. SHIMOSATO, M. BITO, K. FURUSAWA, M. ADACHI, M. SHIMADA, H. ZEN, S. KIMURA, N. YAMAMOTO, M. HOSAKA, M. KATOH and M. ASHIDA, “THz Field Detection of the Coherent Synchrotron Radiation Produced by Laser Bunch Slicing,” *Proc. Conf. Lasers Electro-Optics* paper CMF6 (2009).

M. SHIMADA, M. KATOH, M. ADACHI, T. TANIKAWA, S. KIMURA, H. HOSAKA, N. YAMAMOTO, Y. TAKASHIMA and T. TAKAHASHI, “Observation of Transverse-Longitudinal Coupling Effect at UVSOR-II,” *Proc. 1st Internat. Particle Accelerator Conf.* 3650–3652 (2010).

N. YAMAMOTO, M. SHIMADA, M. ADACHI, H. ZEN, T. TANIKAWA, Y. TAIRA, S. KIMURA, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, T. TAKAHASHI and M. KATOH, “Study of the Coherent Terahertz Radiation by Laser Bunch Slicing at UVSOR-II Electron Storage Ring,” *Proc. 1st Internat. Particle Accelerator Conf.* 2570–2572 (2010).

M. ADACHI, M. KATOH, H. ZEN, Y. TAIRA, J. YAMAZAKI, K. HAYASHI, S. KIMURA, T. TANIKAWA, M. HOSAKA, N. YAMAMOTO, Y. TAKASHIMA and T. TAKAHASHI, “Present Status and Upgrade Plan of Coherent Light Source Developments at UVSOR-II,” *Proc. 1st Internat. Particle Accelerator Conf.* 2573–2575 (2010).

H. ZEN, M. ADACHI, M. KATOH, K. HAYASHI, J. YAMAZAKI, T. TANIKAWA, Y. TAIRA, M. HOSAKA and N. YAMAMOTO, “Status of Top-Up Operation in UVSOR-II,” *Proc. 1st Internat. Particle Accelerator Conf.* 2576–2578 (2010).

T. TANIKAWA, M. ADACHI, M. KATOH, J. YAMAZAKI, H. ZEN, M. HOSAKA, Y. TAIRA and N. YAMAMOTO, “Spectral Measurement of VUV CHG at UVSOR-II,” *Proc. 1st Internat. Particle Accelerator Conf.* 2206–2208 (2010).

Y. TAIRA, M. ADACHI, H. ZEN, M. KATOH, N. YAMAMOTO, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, K. SODA and T. TANIKAWA, “Generation of Ultra-Short Gamma-Ray Pulses by Laser Compton Scattering in an Electron Storage Ring,” *Proc. 1st Internat. Particle Accelerator Conf.* 2117–2119 (2010).

B-3) 総説，著書

M. KATO, “Terahertz Light Source Based on Synchrotron Radiation,” *J. Vac. Soc. Jpn.* **53**, No. 6, 393–398 (2010).

B-4) 招待講演

M. KATO, “Radiation from Laser-Modulated and Laser-Sliced Electron Bunches in UVSOR-II,” The 32nd International Free Electron Laser Conference, Malmoe (Sweden), August 2010.

B-6) 受賞，表彰

平 義隆, 第53回放射線化学討論会若手優秀講演賞 (2010).

平 義隆, 第23回日本放射光学会年会 JSR10 学生発表賞 (2010).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

日本加速器学会組織委員 (2004–).

日本加速器学会評議員 (2008–2009).

日本放射光学会評議員 (2006–2009, 2010–).

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–2009年.

名古屋大学シンクロtron光研究センター，客員教授，2006年–.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(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–2010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2000年以降の複数回の高度化により，低エネルギーのシンクロtron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。この高度化された光源の性能を最大限引き出すために，放射光の安定性を高めることが次の課題である。このために，トップアップ入射方式を導入し一定強度運転を実現した。さらに電子軌道の安定化のためにフィードバックシステムの開発を進めている。また，光源加速器のさらなる高輝度化，高安定化とアンジュレータの増設のための次の加速器改造を計画している。また，さらにその先の将来計画の検討にも着手している。

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，トップアップ運転の導入による安定化などに取り組んでいる。また，レーザー発振のダイナミクスの基礎研究やシード光注入によ

る発振の安定化や制御に関する研究を進めている。これらは将来のX線共振器型自由電子レーザーなど 次世代自由電子レーザー開発において重要な知見となるはずである。

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が、今後は実用化を意識して、大強度化・広帯域化・高安定化に向けた技術開発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遂行中である。新しい量子ビーム源として、レーザーと電子ビームの相互作用による極短パルスガンマ線の発生に関する研究を開始した。エネルギー可変、偏光可変のガンマ線の発生に成功し、今後、ガンマ線のパルス幅測定法の開発や、極短パルスガンマ線の利用法の開拓を行う。また、分子科学研究においてシンクロtron光や自由電子レーザー光と相補的となりうる量子ビーム源として、スピン偏極電子源の開発に着手する予定である。

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現れる物質について，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プ EuO 単結晶薄膜および超薄膜試料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 の絶縁体金属転移の起源

重い電子系 CeIn₃ の低温高圧下テラヘルツ分光による局在から遍歴に至る電子状態

CDW 転移を示すカゴ状物質 CeT₂Al₁₀ ($T = \text{Fe, Ru, Os}$) および非フェルミ液体 YbCo₂Zn₂₀ の電子状態

- 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。新しいアイデアで建設した 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， $h\nu = 6 \sim 40 \text{ eV}$ 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で，順調に研究及びユーザー利用が進行している。今後，BL1 にテラヘルツコヒーレント放射光およびコヒーレント高調波を積極的に利用するビームラインを設置し，コヒーレント放射光を使った新しい分光法の開発を進める。

B-1) 学術論文

A. HERZOG, M. MARUTZKY, J. SICHELSCHEIDT, F. STEGLICH, S. KIMURA, S. JOHNSEN and B. B. IVERSEN, “Strong Electron Correlations in FeSb₂: An Optical Investigation and Comparison with RuSb₂,” *Phys. Rev. B* **82**, 245205 (7 pages) (2010).

T. IIZUKA, S. KIMURA, A. HERZOG, J. SICHELSCHEIDT, J. FERSTL, C. KRELLNER, C. GEIBEL and F. STEGLICH, “Temperature- and Magnetic-Field-Dependent Optical Properties of Heavy Quasiparticles in YbIr₂Si₂,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 123703 (4 pages) (2010).

T. HIRAHARA, Y. SAKAMOTO, T. FUJII, Y. TAKEICHI, H. MIYAZAKI, S. KIMURA, I. MATSUDA, A. KAKIZAKI and S. HASEGAWA, “Anomalous Transport in an n-Type Topological Insulator Ultrathin Bi₂Se₃ Film,” *Phys. Rev. B* **82**, 155309 (6 pages) (2010).

- C. EVAIN, C. SZWAJ, S. BIELAWSKI, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, M. SHIMADA, S. KIMURA, M. KATOH, A. MOCHIIHASHI, T. TAKAHASHI and T. HARA, “Laser Induced Narrowband Coherent Synchrotron Radiation: Efficiency versus Frequency and Laser Power,” *Phys. Rev. S. T. Accel. Beams* **13**, 090703 (15 pages) (2010).
- H. MIYAZAKI, T. ITO, H. J. IM, K. TERASHIMA, S. YAGI, M. KATO, K. SODA and S. KIMURA, “La-Doped EuO: A Rare Earth Ferromagnetic Semiconductor with the Highest Curie Temperature,” *Appl. Phys. Lett.* **96**, 232503 (3 pages) (2010).
- M. KIMURA, H. FUJIWARA, A. SEKIYAMA, J. YAMAGUCHI, K. KISHIMOTO, H. SUGIYAMA, G. FUNABASHI, S. IMADA, S. IGUCHI, Y. TOKURA, A. HIGASHIYA, M. YABASHI, K. TAMASAKU, T. ISHIKAWA, T. ITO, S. KIMURA and S. SUGA, “Polaronic Behavior of Photoelectron Spectra of Fe_3O_4 Revealed by Both Hard X-Ray and Extremely Low Energy Photons,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 064710 (5 pages) (2010).
- S. KIMURA, T. ITO, M. SAKAI, E. NAKAMURA, N. KONDO, K. HAYASHI, T. HORIGOME, M. HOSAKA, M. KATOH, T. GOTO, T. EJIMA and K. SODA, “SAMRAI: A Variably Polarized Angle-Resolved Photoemission Beamline in the VUV Region at UVSOR-II,” *Rev. Sci. Instrum.* **81**, 053104 (7 pages) (2010).
- Y. SAKAMOTO, T. HIRAHARA, H. MIYAZAKI, S. KIMURA and S. HASEGAWA, “Spectroscopic Evidence of a Topological Quantum Phase Transition in Ultrathin Bi_2Se_3 Films,” *Phys. Rev. B* **81**, 165432 (4 pages) (2010).
- T. HIRAHARA, Y. SAKAMOTO, Y. SAISYU, H. MIYAZAKI, S. KIMURA, T. OKUDA, I. MATSUDA, S. MURAKAMI and S. HASEGAWA, “A Topological Metal at the Surface of an Ultrathin $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ Alloy Film,” *Phys. Rev. B* **81**, 165422 (5 pages) (2010).
- J. H. KIM, S. J. KIM, C. I. LEE, M. A. JUNG, H. J. OH, J.-S. RHYEE, Y. JO, H. MITANI, H. MIYAZAKI, S. KIMURA and Y. S. KWON, “Kondo-Like Behavior in Magnetic and Thermal Properties of Single-Crystal $\text{Tm}_5\text{Si}_2\text{Ge}_2$,” *Phys. Rev. B* **81**, 104401 (8 pages) (2010).
- S. R. PARK, W. S. JUNG, C. KIM, D. J. SONG, C. KIM, S. KIMURA, K. D. LEE and N. HUR, “Quasiparticle Scattering and the Protected Nature of the Topological States in a Parent Topological Insulator Bi_2Se_3 ,” *Phys. Rev. B* **81**, 041405(R) (4 pages) (2010).
- M. MULAZZI, A. CHAINANI, N. KATAYAMA, R. EGUCHI, M. MATSUNAMI, H. OHASHI, Y. SENBA, M. NOHARA, H. TAKAGI and S. SHIN, “Absence of Nesting in the Charge-Density-Wave System 1T-VS_2 as Seen by Photoelectron Spectroscopy,” *Phys. Rev. B* **82**, 075130 (6 pages) (2010).
- M. OKAWA, M. MATSUNAMI, K. ISHIZAKA, R. EGUCHI, M. TAGUCHI, A. CHAINANI, Y. TAKATA, M. YABASHI, K. TAMASAKU, Y. NISHINO, T. ISHIKAWA, K. KUGA, N. HORIE, S. NAKATSUJI and S. SHIN, “Strong Valence Fluctuation in the Quantum Critical Heavy Fermion Superconductor $\beta\text{-YbAlB}_4$: A Hard X-Ray Photoemission Study,” *Phys. Rev. Lett.* **104**, 247201 (4 pages) (2010).
- P. A. BHOBE, A. CHAINANI, M. TAGUCHI, T. TAKEUCHI, R. EGUCHI, M. MATSUNAMI, K. ISHIZAKA, Y. TAKATA, M. OURA, Y. SENBA, H. OHASHI, Y. NISHINO, M. YABASHI, K. TAMASAKU, T. ISHIKAWA, K. TAKENAKA, H. TAKAGI and S. SHIN, “Evidence for a Correlated Insulator to Antiferromagnetic Metal Transition in CrN ,” *Phys. Rev. Lett.* **104**, 236404 (4 pages) (2010).
- M. TAGUCHI, A. CHAINANI, M. MATSUNAMI, R. EGUCHI, Y. TAKATA, M. YABASHI, K. TAMASAKU, Y. NISHINO, T. ISHIKAWA, S. TSUDA, S. WATANABE, C.-T. CHEN, Y. SENBA, H. OHASHI, K. FUJIWARA, Y. NAKAMURA, H. TAKAGI and S. SHIN, “Anomalous State Sandwiched between Fermi Liquid and Charge Ordered Mott-Insulating Phases of Ti_4O_7 ,” *Phys. Rev. Lett.* **104**, 106401 (4 pages) (2010).

Y. TANAKA, S. P. COLLINS, S. W. LOVESEY, M. MATSUNAMI, T. MORIWAKI and S. SHIN, “Determination of Absolute Chirality of Tellurium: Resonant Diffraction with Circularly Polarized X-Rays,” *J. Phys.: Condens. Matter* **22**, 122201 (7 pages) (2010).

P. A. RAYJADA, A. CHAINANI, M. MATSUNAMI, M. TAGUCHI, S. TSUDA, T. YOKOYA, S. SHIN, H. SUGAWARA and H. SATO, “Kondo Scaling of the Pseudogap in $\text{CeOs}_4\text{Sb}_{12}$ and $\text{CeFe}_4\text{P}_{12}$,” *J. Phys.: Condens. Matter* **22**, 095502 (8 pages) (2010).

R. EGUCHI, H. YOSHIDA, Y. OKAMOTO, A. CHAINANI, M. MATSUNAMI, Y. ISHIDA, Y. SENBA, H. OHASHI, S. SHIN and Z. HIROI, “Resonant Photoemission Spectroscopy of Layered Triangular Lattices Ag_2MO_2 ($M = \text{Ni}$ and Mn); Evidences for M 3d States at Fermi Level,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 0230704 (4 pages) (2010).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

S. KIMURA, E. NAKAMURA, M. HOSAKA, T. TAKAHASHI and M. KATOH, “Design of Terahertz Pump – Photoemission Probe Spectroscopy Beamline at UVSOR-II,” *AIP Conf. Proc.* **1234**, 63–65 (2010).

H. MIYAZAKI, T. ITO, H. J. IM, K. TERASHIMA, T. IIZUKA, S. YAGI, M. KATO, K. SODA and S. KIMURA, “Change of Lattice Constant due to Hybridization Effect of a Ferromagnetic Semiconductor EuO ,” *J. Phys.: Conf. Series* **200**, 012124 (4 pages) (2010).

S. KIMURA, T. MIZUNO and T. IIZUKA, “Synchrotron Terahertz Spectroscopy of Solids under Extreme Conditions,” *AIP Conf. Proc.* **1214**, 71–74 (2010).

M. ADACHI, M. KATOH, H. ZEN, Y. TAIRA, J. YAMAZAKI, K. HAYASHI, S. KIMURA, T. TANIKAWA, M. HOSAKA, N. YAMAMOTO, Y. TAKASHIMA and T. TAKAHASHI, “Present Status and Upgrade Plan on Coherent Light Source Developments at UVSOR-II,” *Proc. IPAC’10* 2573–2575 (2010).

N. YAMAMOTO, M. SHIMADA, M. ADACHI, H. ZEN, T. TANIKAWA, Y. TAIRA, S. KIMURA, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, T. TAKAHASHI and M. KATOH, “Study of the Coherent Terahertz Radiation by Laser Bunch Slicing at UVSOR-II Electron Storage Ring,” *Proc. IPAC’10* 2570–2572 (2010).

M. SHIMADA, M. KATOH, M. ADACHI, T. TANIKAWA, S. KIMURA, M. HOSAKA, N. YAMAMOTO, Y. TAKASHIMA and T. TAKAHASHI, “Observation of Transverse-Longitudinal Coupling Effect at UVSOR-II,” *Proc. IPAC’10* 3650–3652 (2010).

H. OKAMURA, M. MATSUNAMI, R. KITAMURA, S. ISHIDA, A. OCHIAi and T. NANBA, “Infrared Studies of f Electron Systems under High Pressure Using Synchrotron Radiation,” *J. Phys.: Conf. Series* **215**, 012051 (6 pages) (2010).

H. OKAMURA, R. KITAMURA, M. MATSUNAMI, T. NANBA, H. SUGAWARA and H. SATO, “High Pressure Infrared Studies of Correlated Electron Materials at SPring-8,” *AIP Conf. Proc.* **1214**, 75 (3 pages) (2010).

B-3) 総説，著書

木村真一, 「テラヘルツシンクロトロン放射光；光学系と利用研究」 *J. Vac. Soc. Jpn.* **53**, 399–405 (2010).

木村真一, 「放射光顕微赤外分光」 *高分子分析入門* 講談社サイエンティフィク, pp. 75–83 (2010).

宮崎秀俊, 木村真一, 「希土類酸化物薄膜の将来展望」 *機能材料* **30(1)**, 55–61 (2010).

M. MATSUNAMI, “Definitive Evidence for Fully Occupied 4f Electrons in YbS and Yb Metal,” *SPring-8 Research Frontiers* **2009**, pp. 74–75 (2010).

B-4) 招待講演

S. KIMURA, “Infrared and Terahertz Synchrotron Radiation,” SESAME-JSPS-KEK-Sabancı School, Antalya (Turkey), March 2010.

S. KIMURA, “Optical study on pressure-induced valence transition of CeIn_3 ,” Festkörperphysikalisches Kolloquium, Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe, Dresden (Germany), July 2010.

S. KIMURA, “Infrared, terahertz and photoemission spectroscopy of correlated materials at UVSOR-II,” The 2010 Users Meeting of National Synchrotron Radiation Laboratory, Lanzhou (China), August 2010.

I. KATAYAMA, H. SHIMOSATO, M. BITO, K. FURUSAWA, M. ADACHI, M. SHIMADA, H. ZEN, S. KIMURA, N. YAMAMOTO, M. HOSAKA, M. KATOH and M. ASHIDA, “Coherent Synchrotron Terahertz Radiation Using Electron Bunch Slicing,” 35th International Conference on Infrared, Millimeter and Terahertz Waves, Rome (Italy), September 2010.

木村真一, 「 $\text{CeOs}_2\text{Al}_{10}$ の光学伝導度とギャップの異方性」新学術領域研究「重い電子系の形成と秩序化」ワークショップ——希薄f電子格子系の新しい秩序——, 高知, 2010年8月.

松波雅治, 「近藤効果を示す $\text{PrTi}_2\text{Al}_{20}$ の光電子分光」新学術領域研究「重い電子の形成と秩序化」ワークショップ——希薄f電子格子系の新しい秩序——, 高知, 2010年8月.

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, 2009–2011).

日本放射光学会会計幹事 (2009–2011).

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

分子研研究会「大強度テラヘルツ光の発生と利用研究」代表者 (岡崎, 2010).

第24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, 実行委員 (2010).

2nd UVSOR Workshop on Low-Energy Photoemission of Solids Using Synchrotron Radiation (LEPES 09), Co-Chair, (Okazaki, Japan, October 2009).

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, Member of International Advisory Board (Banff, Canada, September 2009).

第23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 (2009).

平成21年度総研大国際シンポジウム「総研大学術ネットワークの構築」実行委員 (葉山, 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, Member of 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, Member of 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

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委員 (2009–).

東京大学放射光連携研究機構物質科学ビームライン課題審査委員会委員 (2009–).

(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–).

(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

Proceedings of 11th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure, Special Issue of Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Guest Editor, Elsevier (2010).

真空誌編集委員 (2007–).

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

B-8) 大学での講義，客員

立命館大学 SR センター，特別研究員，2009 年 4 月–2010 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–。

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「室温強磁性半導体を目指した酸化ユーロピウム(III)の基礎研究」木村真一 (2010 年–2012 年)。

科研費基盤研究(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)。

科研費特定領域研究(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)。

科研費若手研究(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)。

科研費萌芽研究,「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)NPO 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)NPO 科学技術協会海外研究者招聘助成金,「 CeSbNi_x ($x > 0.08$) の金属絶縁体転移の光学的研究」木村真一 (2000 年)。

科学技術振興事業団さきがけ研究 2 1,「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)。

科研費若手研究(スタートアップ),「強磁性基板によって誘起された常磁性体のスピン偏極電子状態」宮崎秀俊 (2009 年–2010 年)。

C) 研究活動の課題と展望

2010 年 4 月より，新たに松波雅治助教および森龍也博士研究員を迎え，研究体制を一新した。また，名古屋大学の伊藤孝寛准教授のグループとも大学院生の受け入れや共同のセミナーを行うなど，共同研究も順調に進行し，成果も上がっている。建設・調整を進め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)は順調にユーザー利用が行われ，成果が出始めている。このビームラインに加えて，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)の研究の場が整備された。また，機能性薄膜試料を育成し，そのままの状態で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，順調に成果が出ている。今後，これらの放射光技術および薄膜資料作成技術を生かした研究を推進すると共に，テラヘルツおよび真空紫外のコヒーレント放射光を使った全く新しい方法論および新規電子分光法を開発し，物質科学に貢献していく方針である。

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) 高分解能電子分光法による原子分子の内殻励起ダイナミクスの研究
- b) 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
- c) 角度相関計測のための高効率電子エネルギー分析器の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 2008年夏に建設した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，BL6Uでは，40～400 eVの光エネルギー範囲において，分解能10000以上かつ光強度 10^{10} 光子数/秒の性能を達成している。入射スリットレス配置の不等刻線平面回折格子を用いた可変偏角斜入射分光器は，低エミッタンス運転時にその威力を発揮する。特に2010年度前期より開始された，トップアップ運転モードの際には設計値に近い分光性能が得られることが確認されている。2009年初秋以降，気体の高分解能電子分光を行うための実験装置の整備，及び，アンジュレータと分光器，及び電子エネルギー分析器を同時に制御するための整備を行った。国際共同研究を中心に，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。今後重点的に展開するのは，電子スペクトルを光エネルギーの関数として計測する，二次元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。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，従来，SPring-8のBL27SUで行われてきたが，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と制御プログラムの開発を行った。2011年2～3月に，フランスよりニグループが来所し，国際共同研究を実施する予定である。
- b) 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国際共同研究のもう一つの柱として継続している。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，近年，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。また，SPring-8 サイトに建設された深紫外の自由電子レーザー施設，SCSS に磁気ボトル型分析器を持ち込んだ共同研究も実施している。なお，磁気ボトル型分析器では分解能的に不十分な場合については，BL6Uにおいて高分解能電子分光実験を実施し，高分解能スペクトルを取得している。
- c) 上述のように，磁気ボトル型電子エネルギー分析器の導入により，軟X線領域における原子分子の多重電離過程に関する理解は急速に深まったと言える。しかしながら，磁気ボトル型分析器では，多重電離ダイナミクスの本質を理解するために必須となる放出電子間の角度相関に関する情報を得ることは原理的に難しい。この困難を克服するために，磁気ボトル型分析器と静電場を利用した飛行時間型分析器とを組み合わせた新しいエネルギー分析器の開発に着手した。シミュレーションソフトを用いた基本設計を終え，具体的な設計を進めている。

B-1) 学術論文

H. IWAYAMA, K. NAGAYA, H. MURAKAMI, Y. OHMASA and M. YAO, “Coulomb Explosion Imaging of Bromobenzene and Bromophenol Molecules Following Br K-Shell Ionization,” *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **43**, 185207 (5 pages) (2010).

H. IWAYAMA, A. SUGISHIMA, K. NAGAYA, M. YAO, H. FUKUZAWA, K. MOTOMURA, X-J. LIU, A. YAMADA, C. WANG, K. UEDA, N. SAITO, M. NAGASONO, K. TONO, M. YABASHI, T. ISHIKAWA, H. OHASHI, H. KIMURA and T. TOGASHI, “Inhomogeneous Charge Redistribution in Xe Clusters Exposed to an Intense Extreme Ultraviolet Free Electron Laser,” *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **43**, 161001 (5 pages) (2010).

S. SHEINERMAN, P. LABLANQUIE, F. PENENT, Y. HIKOSAKA, T. KANEYASU, E. SHIGEMASA and K. ITO, “PCI Effects in Argon 2p Double Auger Decay Probed by Multielectron Coincidence Methods,” *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **43**, 115001 (9 pages) (2010).

E. SHIGEMASA, T. KANEYASU, T. MATSUSHITA, Y. TAMENORI and Y. HIKOSAKA, “Doppler Effect in Fragment Autoionization Following Core-to-Rydberg Excitations of N₂,” *New J. Phys.* **12**, 063030 (9 pages) (2010).

Y. HIKOSAKA, M. FUSHITANI, A. MATSUDA, C.-M. TSENG, A. HISHIKAWA, E. SHIGEMASA, M. NAGASONO, K. TONO, T. TOGASHI, H. OHASHI, H. KIMURA, Y. SENBA, M. YABASHI and T. ISHIKAWA, “Multiphoton Double Ionization of Ar in Intense Extreme Ultraviolet Laser Fields Studied by Shot-by-Shot Photoelectron Spectroscopy,” *Phys. Rev. Lett.* **105**, 133001 (4 pages) (2010).

Y. HIKOSAKA, T. TANEYASU, T. MATSUSHITA, Y. TAMENORI and E. SHIGEMASA, “Dissociation of Core-Valence Doubly Excited States in NO Followed by Atomic Auger Decay,” *J. Chem. Phys.* **133**, 154315 (4 pages) (2010).

R. GUILLEMIN, M. SIMON and E. SHIGEMASA, “Doppler Effect in Fragment Autoionization Following Core-to-Valence Excitation in O₂,” *Phys. Rev. A* **82**, 051401(R) (4 pages) (2010).

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 (2006–2009, 2010–).

日本放射光学会渉外幹事 (2007–2009).

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, 2009).

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).

第23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 (2009).

第24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 (2010).

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 (2010–). (岩山洋士)

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

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(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).

松尾学術研究助成, 「極端紫外レーザー光によるクラスター発光分光分析」 岩山洋士 (2010年).

C) 研究活動の課題と展望

我々の専用ビームラインであるBL6Uは、UVSOR 技術職員の献身的な支援を受けながら、計測システム及びビームライン全体の整備を行ってきた。蓄積リングの運転に影響しない最小アンジュレーターギャップが当初予定されていた値よりも大きく、また、前置鏡の炭素汚染のために、300 eV 付近の分光性能には問題があるもの、SPring-8 では実施出来ない 250 eV より低いエネルギー領域については、設計値に近い分光性能に達していることが確認されている。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実験研究を行えるよう整備を進めている。実験システムの早期完成を目指して、種々のテスト実験を行いながら装置開発を続けて行く。BL6U の優れた分光性能を活かすことが出来る、周期律表の第3周期元素の 2p 内殻励起領域を観測対象とし、二次元電子分光を含む高分解能電子分光実験を行うことにより、内殻正孔状態の脱励起過程に特徴的な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し、内殻励起分子のダイナミクスに関する理解を深めたい。

先端レーザー開発研究部門（分子制御レーザー開発研究センター）

平 等 拓 範（准教授）（1998年2月1日着任）

A-1) 専門領域：量子エレクトロニクス，光エレクトロニクス，レーザー物理，非線形光学

A-2) 研究課題：

- 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リソグラフィの展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

分子科学に関連して重要な波長域にレーザーの高輝度光を展開する為の固体レーザー，非線形波長変換法につき包括的な研究を進めている。特に近年のマイクロ固体フォトリソグラフィ [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），バルク擬似位相整合（QPM）素子：大口径周期分極反転 MgO:LiNbO₃（PPMgLN）] を先導すると共に，共同研究を通し赤外域分子分光などにその展開を図っている。国際誌の雑誌編集，特集号企画から国際シンポジウム・会議の企画提案，開催に積極的に参加する事でその成果を内外に発信している。

- a) マイクロドメイン構造，界面（粒界面，結晶界面，さらには自発分極界面）を微細に制御する固相反応制御法の研究として，レーザーセラミックス，レーザー素子，分極反転素子の作製プロセスの高度化を図っている。特に，固体レーザーの発光中心である希土類イオンのスピン・軌道角運動量を利用したマイクロドメインの配向制御は，これまで不可能だった異方性セラミックスによるレーザー発振を成功させただけでなく原理的にはイオンレベルでの複合構造を可能とするなど，新たなフォトリソグラフィを創出するものと期待される。
- b) 光の発生，増幅，変換の高度制御を可能とする為の研究として，希土類イオンの発光・緩和機構の解明，固体中の光，エネルギー伝搬，さらにはマイクロドメイン構造と光子及び音子の相互作用機構解明，非線形光学過程の解明，モデル化を進めている。Yb レーザーの機構解明，Nd レーザーの直接励起可能性，希土類レーザーの励起光飽和特性，YVO₄ の高熱伝導率特性の発見，実証に繋がったばかりでなく，マイクロ共振器の高輝度効果，レーザー利得と非線形光学過程の量子相関などの興味深い展開も見せている。
- c) 開発した光素子を用いた新規レーザー，波長変換システムの開発と展開を図っている。エッジ励起セラミック Yb:YAG マイクロチップレーザーにおける連続波（CW）414W 発生（出力密度 200 kW/cm²），手のひらサイズ高輝度温度マイクロチップ Q スイッチレーザー（エネルギー：～4 mJ，光強度：～15 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：100～300 μm），さらには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リソグラフィで実証した。特に広帯域波長可変赤外光源が超音速ジェット中の化学種に対する振動分光に有用である事を検証した。今後，分子の振動状態についてのより詳細な分光学的情報を得ることが出来ると期待される。

B-1) 学術論文

- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “High Energy Quasi-Phase Matched Optical Parametric Oscillation Using Mg-Doped Congruent LiTaO₃ Crystal,” *Opt. Express* **18**, 253–258 (2010).
- M. TSUNEKANE, T. INOHARA, A. ANDO, N. KIDO, K. KANEHARA and T. TAIRA**, “High Peak Power, Passively Q-Switched Microlaser for Ignition of Engines,” *IEEE J. Quantum Electron.* **46**, 277–284 (2010).
- N. PAVEL, M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “Enhancing Performances of a Passively Q-Switched Nd:YAG/Cr⁴⁺:YAG Microlaser with a Volume Bragg Grating Output Coupler,” *Opt. Lett.* **35**, 1617–1619 (2010).
- G. MASADA, T. SUZUDO, Y. SATOH, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and A. FURUSAWA**, “Efficient Generation of Highly Squeezed Light with Periodically Poled MgO: LiNbO₃,” *Opt. Express* **18**, 13114–13121 (2010).
- J. AKIYAMA, Y. SATO and T. TAIRA**, “Laser Ceramics with Rare-Earth-Doped Anisotropic Materials,” *Opt. Lett.* **35**, 3598–3600 (2010).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- T. TAIRA**, “Bulk Quasi-Phase-Matched Device: Large Aperture PPMgLN and PPMgLT,” *SPIE Photonics West*, 7582-37 (2010). (*Invited Paper*)
- J. AKIYAMA and T. TAIRA**, “Development of Anisotropic Transparent Ceramics for Laser Media,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics 2010*, ATub3 (2010).
- N. PAVEL, M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “Passively Q-Switched Nd:YAG/Cr⁴⁺:YAG Laser with a Volume Bragg Gratings Output Coupler,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics 2010*, AWB18 (2010).
- A. SUGITA, T. MATSUSHITA and T. TAIRA**, “Design of High Average Power Mode-Locked Oscillator Based on Edge-Pumped all Ceramic Yb:YAG/YAG Microchip,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics 2010*, AWB24 (2010).
- M. TSUNEKANE, T. TAIRA, T. INOHARA and K. KANEHARA**, “Efficient Ignition of a Real Automobile Engine by a High Brightness, Passively Q-Switched Cr:YAG/Nd:YAG Micro-Laser,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics 2010*, AWE7 (2010).
- T. TAIRA**, “The Promise of Giant Micro Photonics,” *SOLID STATE LASERS. 50 YEARS AFTER* (2010). (*Invited*)
- T. TAIRA**, “Next Generation of Laser Ceramics Toward Giant Micro-Photonics,” *The 7th Asia Pacific Laser Symposium (APLS2010)*, Fr-R2-1 (2010). (*Invited*)
- Y. SATO, T. TAIRA, V. SMIRNOV, L. GLEBOVA and L. GLEBOV**, “Laser Oscillation of Nd³⁺-Doped Photo-Thermo-Refractive Glass under Diode Laser Pumping,” *The Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO 2010)*, CTuJ4 (2010).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Continuously Tunable, High-Energy Mid-Infrared Optical-Parametric Oscillation by Angular Tuning of PPMgLN with Tilted QPM Structures,” *The Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO 2010)*, JTuD73 (2010).
- N. PAVEL, M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “Diode-Pumped Passively Q-Switched Nd:YAG/Cr⁴⁺:YAG Micro-Laser Controlled by Volume Bragg Gratings,” *The Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO 2010)*, JTuD117 (2010).
- T. TAIRA**, “Giant Micro-Photonics: Domain Controlled Optical Materials,” *4th International Workshop on Photonic and Electronic Materials*, 40–41 (2010). (*Invited*)

- T. TAIRA**, “Advanced Laser Ceramics Toward Giant Micro Photonics,” *The 16th international conference on crystal growth/ 14th international conference on vapor growth and epitaxy (ICCG-16/ICVGE-14)* (2010). (Invited)
- N. PAVEL, M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “Passively Q-Switched Nd:YAG/Cr⁴⁺:YAG Laser with Enhanced Performances and Wavelength Tuning by a Volume Bragg Grating,” *4th EPS-QEOD Europhoton Conference*, TuP1 (2010).
- M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “Diode Edge-Pumped, Composite Ceramic Nd:YAG Microchip Laser with Sm:YAG Pump Waveguide,” *4th EPS-QEOD Europhoton Conference*, WeP8 (2010).
- T. TAIRA**, “Micro Solid-State Photonics—New Photonics by Micro-Domain Controlled Materials,” *E-MRS 2010 Fall Meeting* (2010). (Invited)
- T. TAIRA**, “Laser Ignition of Combustion Engines for Cleaner Vehicles (Plenary),” *ICALEO—International Congress on Applications of Lasers & Electro-Optics*, P2 (2010). (Plenary Talk)
- M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “Diode Edge-Pumped, Composite Ceramic Nd:YAG/Sm:YAG Microchip Lasers,” *Frontiers in Optics 2010*, FThG3 (2010).
- T. TAIRA**, “Anisotropic Ceramics as a Next Generation Laser,” *6th Laser Ceramics Symposium* (2010). (Invited)

B-3) 総説，著書

- N. PAVEL, M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “High Peak-Power Passively Q-Switched All-Ceramics Nd:YAG/Cr⁴⁺:YAG Lasers,” *ROMOPTO 2009, Proc. of SPIE 7469*, 746903 (12 pages) (2009).
- T. TAIRA**, “High Brightness Microchip Laser and Engine Ignition,” *Rev. Laser Eng.* **38**, 576–584 (2010). (in Japanese).
- 平等拓範, 「光波特性制御マイクロチップレーザー——ジャイアントマイクロフォトリクス」の創成——」*光科学研究の最前線* **2**, 強光子場科学研究懇談会, 42 (2009).
- 石垣直也, 宇野進吾, 齊川次郎, 門谷章之, 東條公資, 徳田勝彦, 渡辺一馬, 井戸豊, 平等拓範, 「全固体UVパルスレーザーの開発とその応用」*島津評論* **67**, 13–21 (2010).
- M. TSUNEKANE, T. INOHARA, K. KANEHARA and T. TAIRA**, “Micro-Solid-State Laser for Ignition of Automobile Engines,” in *Advances in Solid-State Lasers: Development and Applications*, Mikhail Grishin, Ed., ISBN 978-953-7619-80-0, INTECH; Croatia, Chapter 10, pp. 195–212 (2010).
- 平等拓範, 「マイクロチップ固体レーザー」「レーザーディスプレイ」黒田和男, 山本和久, 栗村直 編, 第2章 光源技術, 第2.2節 波長変換, オプトロニクス社, 第2.2.2節, pp. 84–104 (2010).

B-4) 招待講演

- T. TAIRA**, “Bulk Quasi-Phase-Matched Device: Large Aperture PPMgLN and PPMgLT,” SPIE Photonics West, San Francisco (U.S.A.), January 2010.
- 平等拓範, 「固体レーザーの新展開：ジャイアントマイクロフォトリクス」第4回光材料・応用技術研究会, 早稲田大学, 東京, 2010年3月.
- T. TAIRA**, “Automobile Engine Ignition by High Brightness Micro-Laser,” First Workshop on Plasma-Assisted Combustion, Osaka University, Osaka, March 2010.
- T. TAIRA**, “The Promise of Giant Micro Photonics,” SOLID STATE LASERS. 50 YEARS AFTER, Tarragona (Spain), March 2010.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics by New Domain Controlling,” ETH–OPTeth-Laser Seminar, Zurich (Switzerland), March 2010.

平等拓範,「高輝度マイクロチップレーザー」光電相互変換第125委員会「本委員会第208回研究会」日本学術振興会, 東京理科大学, 東京, 2010年5月.

T. TAIRA, “Next Generation of Laser Veramics Toward Giant Micro-Photonics,” The 7th Asia Pacific Laser Symposium (APLS2010), Jeju Island (Korea), May 2010.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics: Domain Controlled Optical Materials,” 4th International Workshop on Photonic and Electronic Materials, San Sebastian (Spain), July 2010.

T. TAIRA, “Advanced Laser Ceramics Toward Giant Micro Photonics,” The 16th international conference on crystal growth/ 14th international conference on vapor growth and epitaxy (ICCG-16/ICVGE-14), Beijing (China), August 2010.

T. TAIRA, “State-of-the Art Micro Solid-State Photonics,” University of Twente, Enschede (Netherlands), September 2010.

T. TAIRA, “Micro Solid-State Photonics—New Photonics by Micro-Domain Controlled Materials,” E-MRS 2010 Fall Meeting, Warsaw University of Technology, Warsaw (Poland), September 2010.

T. TAIRA, “Laser Ignition of Combustion Engines for Cleaner Vehicles (Plenary),” ICALEO—International Congress on Applications of Lasers & Electro-Optics, Anaheim (U.S.A.), September 2010.

平等拓範,「自動車産業における光省エネ」第2回光材料・応用技術研究会, パシフィコ横浜, 神奈川, 2010年10月.

平等拓範,「ジャイアントマイクロフォトニクスの開拓世界」レーザー衝撃と応用技術専門委員会, レーザー学会, 浜松ホトニクス東京支店, 東京, 2010年10月.

宮崎充彦, 斎川次郎, 石月秀貴, 平等拓範, 藤井正明,「ZGP/PPLN/色素レーザーによる中赤外波長可変レーザーを用いた超音速分子線レーザー分光」日本光学会年次学術講演会, 中央大学, 東京, 2010年11月.

平等拓範,「マイクロ固体フォトニクスの展開——高輝度マイクロチップレーザーとエンジン点火などの応用——」第78回研究会(第50回レーザ技術セミナー)中部レーザ応用技術研究会, 名古屋, 2010年11月.

平等拓範,「受動Qスイッチ型μチップレーザの高輝度化とエンジン点火」第34回レーザ協会セミナー, レーザ協会, 東京, 2010年11月.

T. TAIRA, “Anisotropic Ceramics as a Next Generation Laser,” 6th Laser Ceramics Symposium, Munster (Germany), December 2010.

B-5) 特許出願

特願 2009-287546,「半導体レーザー励起によるエンジン点火用固体レーザー装置」常包正樹, 平等拓範, 金原賢治(自然科学研究機構, (株)日本自動車部品総合研究所) 2009年.

特願 2010-006562,「半導体レーザー励起固体レーザー装置」常包正樹, 平等拓範(自然科学研究機構) 2010年.

特願 2010-032011,「多点点火用半導体レーザー励起固体レーザーアレイ装置」常包正樹, 平等拓範, 金原賢治(自然科学研究機構, (株)日本自動車部品総合研究所) 2010年.

B-6) 受賞, 表彰

斎川次郎, 応用物理学会北陸支部発表奨励賞 (1998).

平等拓範, 第23回(社)レーザー学会業績賞(論文賞)(1999).

平等拓範, 第1回(財)みやぎ科学技術振興基金研究奨励賞 (1999).

池末明生, 鈴木敏之, 佐々木優吉, 平等拓範, 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, 平等拓範, 吉田國雄, (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, 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).

秋山 順, 第26回(2009年春季)応用物理学会講演奨励賞 (2009).

栗村 直, 平等拓範, 谷口浩一, 三菱電線工業(株)平成21年度発明考案表彰(アメリカ特許7106496号「波長変換用, 光演算用素子」他)(2010).

平等拓範, 米国光学会フェロー: 2010 Optical Society of America (OSA) Fellow (2010).

常包正樹, 猪原孝之, 安藤彰浩, 木戸直樹, 金原賢治, 平等拓範, 第34回(社)レーザー学会業績賞(論文賞)オリジナル部門 (2010).

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 (2005–2006).

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).

財団法人光産業技術振興協会多元技術融合光プロセス研究会幹事 (2009–2011).

米国光学会 Optical Society of America (OSA) 非線形光学テクニカル・グループ議長(米国ワシントンDC)

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–).

レーザー学会「マイクロ固体フォトンクスの新展開」専門委員会主査 (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).

OSA, Nonlinear Optics (NLO 2011), 国際会議プログラム委員会議長 (2010–).

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 (2004–2005).

Advanced Solid-State Photonics, 国際会議プログラム委員 (2005–2010).

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 (2006–2009).

OSA, Nonlinear Optics, 国際会議プログラム委員 (2006–).

3rd Laser Ceramics Symposium: International Symposium on Transparent Ceramics for photonic applications, 国際会議諮問委員 (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).

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 (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).

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).

レーザー学会学術講演会第30回年次大会実行委員会委員 (2009).

4th Europhoton Conference on “Solid-State, Fiber and Waveguide Coherent Light Sources,” 国際会議分科委員 (2009–2010).

International Workshop on Holographic Memories & Display (IWHM&D2010), 国際会議プログラム委員会委員 (2010).

Lasers and Their Applications Symposium, Photonics Global Conference 2010, 国際会議テクニカル・プログラム委員会委員 (2010).

EQEC 2011, Fundamentals of Nonlinear Optics, 国際会議分科委員 (2010–).

Advances in Optical Materials (AIOM 2011), 国際会議プログラム委員会委員 (2010–).

CLEO 2011: Science & Innovations 2: Solid-State, Liquid and Gas Lasers, 国際会議諮問委員 (2010–).

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).

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

豊橋技術科学大学ナノフォトニクス情報テクノロジーリサーチセンター, 客員教授, 2010年.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「光物理」2010年前期.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(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).

科研費特別研究員奨励費,「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).

科研費基盤研究(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クレーザーの開発研究」平等拓範(2000年-2002年).

科研費基盤研究(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-).

科研費若手研究(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-).

科研費基盤研究(B),「小型可搬な広帯域波長可変中赤外レーザーの開発研究」平等拓範(2009年-2011年).

科学技術振興機構先端計測分析技術・機器開発事業,「次世代質量イメージングのためのUV マイクロチップレーザーを用いた計測システムの開発」平等拓範(2010年-).

B-11) 産学連携

(株)コンボン研究所,「マイクロ固体フォトリソの基礎研究」平等拓範(2010年).

(株)日本自動車部品総合研究所,「中赤外 4.3 μ m CW レーザによる CO₂ 濃度計測の研究」平等拓範(2010年).

浜松ホトニクス(株),「マイクロチップレーザーの高繰り返し化に関する研究」平等拓範(2010年).

(株)リコー,「面発光型高出力レーザー光源の研究」平等拓範(2010年).

C) 研究活動の課題と展望

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

藤 貴 夫 (准教授) (2010 年 2 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：量子エレクトロニクス，レーザー物理，非線形光学，超高速分光

A-2) 研究課題：超短光パルスの研究

- a) 超短光パルスの超広帯域波長変換技術の開発
- b) 超短光パルスの位相制御，評価の研究
- c) 超広帯域光源による超高速分光

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 超短光パルスを発生できるレーザーの波長は限られている。それを様々な波長へ効率よく，パルス幅を短い状態で波長変換する技術は，超短光パルスの応用範囲を広げる上で，非常に重要である。この研究では，固体結晶と比べて透過領域が桁違いに広い気体を波長変換媒質として使用することで，真空紫外から赤外光までの超短光パルスを同時に発生させることを目標としている。気体は非線形係数が小さいため，一般的に効率は低いが，超短光パルスのフィラメンテーションという現象を使うことで，効率のよい波長変換が行える。フィラメンテーションとは，高強度の超短光パルスをゆるやかに気体に集光することで，非線形効果による屈折率の増加とプラズマ発生による屈折率の減少が釣り合い，レイリー長よりはるかに長い距離をビームが集光されたまま伝搬する現象である。この効果によって，極めて高い強度で長い相互作用長の波長変換を行うことができ，気体としては非常に高い効率で波長変換を行うことができる。この手法は，藤准教授が前職の理研において発展させた研究である。今年の成果としては，チタンサファイアレーザーの二倍波（400 nm）と，近赤外の光パラメトリック増幅の出力（1300 nm）とを気体中（ネオン）に集光し，237 nm と 167 nm の超短光パルスを発生させることに成功した。この実験は，前職の理化学研究所で行われた。分子研では，その手法を赤外光（3–20 μm ）パルス発生に適用させることをめざし，準備を進めている。
- b) 前述の研究によって発生した紫外光（237 nm）パルスの位相を制御し，パルス幅を最適化する研究を行った。パルス整形技術は近年，可視光から赤外領域で大きく発展しており，様々な形のパルスを作ることができるようになってきているが，紫外領域は固体結晶の透過領域，損傷などが問題で，技術的に大きな困難がある。この研究では，波長変換前の近赤外光の位相を制御することによって，波長変換後の紫外光パルスの位相を制御することを行った。紫外光パルスは，基本的には差周波混合過程によって発生しているため，近赤外光と位相の時間変化が逆方向に転写される。近赤外光，紫外光の位相は，それぞれ，周波数分解光ゲート法（FROG）によって，測定し，近赤外光の位相が転写される様子を観測した。この実験も，前職の理化学研究所で行われた研究であり，分子研では，その手法を，赤外領域（3–20 μm ）の発生に応用することを考えている。
- c) 前述と同等の手法で発生した紫外光パルス（200，260 nm）を使って，超高速光電子イメージング分光を気相の分子について行った。ピラジン（ $\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2$ ）やフラン（ $\text{C}_4\text{H}_4\text{O}$ ）の分子について，寿命が 20 fs 程度で減衰する超高速過程を明瞭に観測した。それぞれの実験結果について，分子動力学をつかった理論計算結果と比較し，それぞれの分子における超高速ダイナミクスについて，理解を深めることとなった。この研究も，前職の理化学研究所で行われた研究であり，分子研では，赤外光パルス（3–20 μm ）を使った二次元分光を行うことを予定している。

B-1) 学術論文

P. DOMBI, S. E. IRVINE, P. RÁCZ, M. LENNER, N. KROÓ, G. FARKAS, A. MITROFANOV, A. BALTUŠKA, T. FUJI, F. KRAUSZ and A. Y. ELEZZABI, “Observation of Few-Cycle, Strong-Field Phenomena in Surface Plasmon Fields,” *Opt. Express* **18**, 24206–24212 (2010).

P. ZUO, T. FUJI and T. SUZUKI, “Spectral Phase Transfer to Ultrashort UV Pulses through Four-Wave Mixing,” *Opt. Express* **18**, 16183–16192 (2010).

Y.-I. SUZUKI, T. FUJI, T. HORIO and T. SUZUKI, “Time-Resolved Photoelectron Imaging of Ultrafast $S_2 \rightarrow S_1$ Internal Conversion through Conical Intersection in Pyrazine,” *J. Chem. Phys.* **132**, 174302 (8 pages) (2010).

S. Y. LIU, Y. OGI, T. FUJI, K. NISHIZAWA, T. HORIO, T. MIZUNO, H. KOHGUCHI, M. NAGASONO, T. TOGASHI, K. TONO, M. YABASHI, Y. SENBA, H. OHASHI, H. KIMURA, T. ISHIKAWA and T. SUZUKI, “Time-Resolved Photoelectron Imaging Using a Femtosecond UV Laser and a VUV Free-Electron Laser,” *Phys. Rev. A* **81**, 031403 (4 pages) (2010).

T. FUJI, Y.-I. SUZUKI, T. HORIO, T. SUZUKI, R. MITRIĆ, U. WERNER and V. BONAČIĆ-KOUTECKY, “Ultrafast Photodynamics of Furan,” *J. Chem. Phys.* **133**, 234303 (9 pages) (2010).

N. KUSE, Y. NOMURA, A. OZAWA, M. KUWATA-GONOKAMI, S. WATANABE and Y. KOBAYASHI, “Self-Compensation of Third-Order Dispersion for Ultrashort Pulse Generation Demonstrated in an Yb Fiber Oscillator,” *Opt. Lett.* **35**, 3868–3870 (2010).

P. HEISLER, R. HÖRLEIN, M. STAFE, J. M. MIKHAILOVA, Y. NOMURA, D. HERRMANN, R. TAUTZ, S. G. RYKOVANOV, I. B. FÖLDES, K. VARJÚ, F. TAVELLA, A. MARCINKEVICIUS, F. KRAUSZ, L. VEISZ and G. D. TSAKIRIS, “Toward Single Attosecond Pulses Using Harmonic Emission from Solid-Density Plasmas,” *Appl. Phys. B* **101**, 511–521 (2010).

R. HÖRLEIN, Y. NOMURA, P. TZALLAS, S. G. RYKOVANOV, B. DROMEY, J. OSTERHOFF, ZS. MAJOR, S. KARSCH, L. VEISZ, M. ZEPE, D. CHARALAMBIDIS, F. KRAUSZ and G. D. TSAKIRIS, “Temporal Characterization of Attosecond Pulses Emitted from Solid-Density Plasmas,” *New J. Phys.* **12**, 043020 (2010).

S. ADACHI, N. ISHII, Y. NOMURA, Y. KOBAYASHI, J. ITATANI, T. KANAI and S. WATANABE, “1.2 mJ Sub-4-fs Source at 1 kHz from an Ionizing Gas,” *Opt. Lett.* **35**, 980–982 (2010).

S. ADACHI, N. ISHII, Y. KOBAYASHI, Y. NOMURA, J. ITATANI, T. KANAI and S. WATANABE, “Carrier-Envelope Phase Control of Few-Cycle Parametric Chirped-Pulse Amplifier,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **49**, 032703 (4 pages) (2010).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. FUJI, Y.-I. SUZUKI, T. HORIO and T. SUZUKI, “Time-Energy Map of Photoelectron Angular Anisotropy for Investigation of Ultrafast Internal Conversion,” *Ultrafast Phenomena 2010* ThB6 (2010).

T. FUJI, P. ZUO and T. SUZUKI, “Ultrashort UV Pulse Generation by Four-Wave Mixing through Filamentation,” *ICONO/LAT 2010* ITu1 (2010). (invited)

S. Y. LIU, Y. OGI, T. FUJI, K. NISHIZAWA, T. HORIO, T. MIZUNO, H. KOHGUCHI, M. NAGASONO, T. TOGASHI, K. TONO, M. YABASHI, Y. SENBA, H. OHASHI, H. KIMURA, T. ISHIWAKA and T. SUZUKI, “Time-Resolved Photoelectron Imaging Using a Femtosecond UV Laser and a VUV Free-Electron Laser,” *VUVX2010* 6PL3 (2010).

Y. OGI, S. Y. LIU, T. FUJI, K. NISHIZAWA, T. HORIO, T. MIZUNO, H. KOHGUCHI, M. NAGASONO, T. TOGASHI, K. TONO, M. YABASHI, Y. SENBA, H. OHASHI, H. KIMURA, T. ISHIWAKA and T. SUZUKI, "Time-Resolved Photoelectron Imaging on Pyrazine Using a Femtosecond UV Laser and a VUV Free-Electron Laser," *Pacificchem 2010* ID#1569 (2010).

J. M. MIKHAILOVA, P. HEISLER, R. HOERLEIN, M. STAFE, Y. NOMURA, D. HERRMANN, R. TAUTZ, S. RYKOVANOV, I. FOELDES, K. VARJU, F. TAVELLA, A. MARCINKEVICIUS, F. KRAUSZ, M. ZEPF, L. VEISZ and G. D. TSAKIRIS, "Broadband Relativistic High-Harmonic Generation Using Few-Cycle Multiterawatt Light Pulses," *Frontiers in Optics 2010, Laser Science XXVI* (2010).

N. KUSE, M. KUWATA-GONOKAMI, Y. NOMURA, S. WATANABE and Y. KOBAYASHI, "Experimental Study of Pulse Evolution in a 30-fs Mode-Locked Yb-Fiber Oscillator," *Conference on Lasers and Electro-Optics/Quantum Electronics and Laser Science* (2010).

Y. KOBAYASHI, Y. NOMURA and S. WATANABE, "1.3-GHz, 20-W, Femtosecond Chirped-Pulse Amplifier System," *Conference on Lasers and Electro-Optics/Quantum Electronics and Laser Science* (2010).

B-4) 招待講演

藤 貴夫, 「15 フェムト秒紫外光パルスを用いた光電子イメージング分光」 静岡大学光学部プロジェクト第三回研究会 光と電子の変換の科学, 浜松, 2010年3月.

T. FUJI, P. ZUO and T. SUZUKI, "Ultrashort UV pulse generation by four-wave mixing through filamentation," *ICONO/LAT 2010, Kazan (Russia)*, August 2010.

B-6) 受賞, 表彰

藤 貴夫, 日本光学会奨励賞 (1999).

藤 貴夫, 大阪大学近藤賞 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

CLEO/Europe 2007国際会議プログラム委員 (2007).

化学反応討論会実行委員 (2009).

CLEO/Pacific Rim 2009国際会議プログラム委員 (2009).

HIRAS 国際会議プログラム委員 (2011).

CLEO/Europe 2011国際会議プログラム委員 (2011).

B-8) 大学での講義, 客員

(独)理化学研究所, 客員研究員, 2010年2月-.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「光物理」2010年前期.

B-10) 競争的資金

科研費奨励研究(A),「サブ5フェムト秒パルスによる位相敏感超高速分光」藤 貴夫 (2000年–2001年).

(独)理化学研究所研究奨励ファンド,「搬送波包絡線周波数の安定した超短赤外光パルス発生」藤 貴夫 (2006年).

科研費若手研究(A),「光電子イメージング分光のための10フェムト秒深紫外光パルス発生」藤 貴夫 (2007年–2008年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携プロジェクト,「プラズマを使ったフェムト秒中赤外光パルス発生の研究」藤 貴夫 (2010年).

科研費特別研究員奨励費,「高次高調波発生による高繰り返し極端紫外光源の開発およびその応用」野村雄高 (2010年).

C) 研究活動の課題と展望

フィラメンテーションを用いた波長変換は、気体を媒質としながらも、高効率な超短光パルスの波長変換法として有効であり、これまで、近赤外光のチタンサファイアレーザーの出力を真空紫外や赤外への波長変換を実験的に示してきた。今後、これらの波長の光を同時に発生させ、それらを使ったユニークな分光を行うことを目指している。当面の目標としては、3–20 μm にわたる広帯域な赤外光を発生させることを挙げているが、そのような広帯域において位相を揃えて重ね合わせ、分光で利用できる光パルスとするには、様々なハードルがある。まず、スペクトルの測定装置について、市販の分光器では、帯域や、光パルスのデータ取得法において、問題が多いので、現在、真空中で動作するフーリエ赤外分光装置を自作している。チタンサファイアレーザーが2011年2月に導入される予定であり、それを使って本格的な実験をスタートする。また、チタンサファイアレーザーだけでなく、高繰り返し周波数が可能なファイバーレーザーを独自の手法で開発することも視野に入れている。分光では、高繰り返し周波数がデータ取得において極めて重要であり、新しい光源を開発する価値は非常に高いと考えている。

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，ナノ構造体

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) 銅アセチリド系化合物を前駆体とした金属ナノ触媒の創成
- 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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 高機能の炭素材料は、表面積が大きく、化学的に安定なグラファイト構造に富んだ多孔性のナノ構造体としての性質を有するが、これは高分子の焼結によって作られることが多い。しかしながら、この方法では不安定な結合を多く含み、単体のサイズも小さいことから、化学的に安定で電気伝導性に優れ、さらに究極的な広い表面積を有するメソ多孔体の創成が求められてきた。これは、最近の高性能な2次電池・空気電池・そして燃料電池にとって不可欠の要素であるが、同時に高いコストパフォーマンスも要求される。我々は、平均径 2 nm の細孔を持ち、壁が主としてグラフェン単層で出来ているため BET 比表面積が 2000 m²/g に及ぶ Mesoporous Carbon Nano-Dendrite (MCND) を発表したが、更に大きなメソ細孔を有する炭素の開発を行った。銅アルキルアセチリド分子は $(R-C\equiv C-Cu)_{4n}$ で示されるように、4個の分子がユニットとなってアルキル基を外に向け4個の銅原子が1サイクルらせんとなってクラスターユニットからなるらせんワイヤー超分子を形成する。このワイヤー分子が疎水性相互作用によって束状となりワイヤー結晶を生成する。このワイヤー結晶をランダムに集積させ、200 °C 以上の温度に加熱すると炭素と銅ナノ粒子の混合物への偏析反応が起き、ワイヤー同士が接触していた部位は炭素の化学結合で繋がり、アルキル基はガスとなって飛んで行く。これは空隙を発生するが、さらに、真空加熱によって銅を昇華させると銅部分が空孔となり、銅の逃げ道が外部へ通じる開口部となる。この脱銅反応を 1400 °C 以上の加熱、或いはマイクロ波加熱すると銅との相互作用が手伝って炭素は3層程度のグラフェン壁に変換される。このようにして得られた「多層グラフェン壁を持つ炭素ナノ構造体」の大きさは厚さ数ミクロンで幅がほぼ数百ミクロンの大きさになる。平均細孔径は 6 nm 程度であり、この中にシリコンを担持するが、樹間空間にほぼ 10 nm 厚のシリコンナノテープ、ナノシート、ナノワイヤーも生成する。シリコン中には大量のリチウムを吸蔵させることが可能であり、これがナノシリコンであるため、短時間に大量のイオンを吸収・放出させることが可能である。我々は、このシリコン担持を高密度に行う、ライデンフロスト現象を応用した単純な方法によりシリコンナノ構造体のメソ空孔への担持と薄い銅薄膜表面を持つ様々なシリコンナノ構造体の作成に成功し、大量で極めて安価に大容量リチウムイオン2次電池負極を製造する道を開いた。
- b) 金属ナノ粒子は構成原子のうち表面および表面近傍に占める割合が非常に高いため、高活性な表面触媒になると期待されている。しかしながら 活性な表面は非常に酸化されやすく触媒への応用は金や白金といった安定な金属元素に限られている。本研究では、銅アセチリド系化合物を前駆体とすることで、触媒へと応用可能な銅ナノ粒子を得ることを試みた。アセチリド化合物を真空中で 100~200 °C 程度に加熱を行うと、銅元素と炭素への偏析反応が進行し直径 4~10 nm の銅ナノ粒子を得ることができた。さらに、解離反応で生成した有機分子は銅ナノ粒子表面を覆い、酸化に対する保護膜も同時に作成できる

特徴がある。1～2時間程度の空気への暴露では銅ナノ粒子は金属表面を維持している一方、保護膜は程よく柔軟であり触媒反応における反応分子や生成分子を通過させることもできる。実際に、水素吸蔵反応や水性ガスシフト反応における触媒として利用できることを確認した。銅アセチリド化合物を前駆体として理想的な金属ナノ触媒を作成することに成功したといえる。

- c) 代表的な導電性分子である tetrathiafulvalene (TTF) がエチニル基により磁性遷移金属イオンへと直接配位した新規錯体 $[\text{CrCyclam}(\text{C}\equiv\text{C}-5\text{-methyl-4'5'-ethylene-dithio-TTF})_2]^+$ (1^+) を合成するとともに、溶液中で電解酸化を行うことで磁性結晶 $(1)[\text{X}]_2(\text{MeCN})(\text{PhCl})_2$ ($\text{X} = \text{ClO}_4^-, \text{BF}_4^-$) を得ることに成功した。本結晶中では隣接する錯体間で配位子を重ねるような構造をとっており、TTF 骨格は二量体を構築している。また電解により生じた二量体1つあたり+1の電荷はこの二量体内で非局在化しており、部分酸化状態が実現している。磁気構造的には $S = 3/2$ の CrCyclam ユニットと $S = 1/2$ の二量体が交互に並び、その間がエチニル基で接続されたフェリ鎖が基本となっており、磁化率の測定結果から鎖内には $2J = -30 \text{ K}$ と非常に大きな交換相互作用が働いていることが明らかとなった。この強い相互作用は Cr^{3+} と TTF 二量体という二つのスピン源の間がエチニル基で直接結合していることに由来している。鎖間にも二量体同士が接することにより弱い相互作用が働いており、本物質は 23 K という高い転移温度を持つ弱強磁性体であった。

B-1) 学術論文

K. OHASHI, K. INOUE, T. IINO, J. SASAKI, K. JUDAI, N. NISHI and H. SEKIYA, "A Molecular Picture of Metal Ion Solvation: Infrared Spectroscopy of $\text{Cu}^+(\text{NH}_3)_n$ and $\text{Ag}^+(\text{NH}_3)_n$ in the Gas Phase," *J. Mol. Liq.* **147**, 71–76 (2009).

Y. HARADA, C. OKABE, T. KOBAYASHI, T. SUZUKI, T. ICHIMURA, N. NISHI and Y.-Z. XU, "Ultrafast Intersystem Crossing of 4-Thiothymidine in Aqueous Solution," *J. Phys. Chem. Lett.* **1**, 480–484 (2010).

B-4) 招待講演

西 信之, 「グラフェン壁を持つメソ多孔性炭素ナノ構造体の創成とその応用」 社団法人新化学発展協会高選択性反応分子会講演会, 新化学発展協会, 2010年10月.

西 信之, 「クラスター科学とコロイドおよび界面化学との接点: Part 1: 水溶液系に於ける会合性分子のミクロな相分離について—: Part 2: グラフェン壁を持つ肺胞状炭素の創成とその蓄電池への応用」 日本化学会コロイド化学部会, 日本化学会館, 東京, 2010年11月.

B-5) 特許出願

特願 2010-179686, 「炭素ナノ構造体, 金属担持炭素ナノ構造体, リチウムイオン2次電池, 炭素ナノ構造体の製造方法, 及び金属担持炭素ナノ構造体の製造方法」 西 信之, 安達紀和, 大場保幸, 山田 学, 加美謙一郎, 水内和彦, 2010年.

特願 2010-207936, 「炭素ナノ構造体」 西 信之, 安達紀和, 大場保幸, 山田 学, 加美謙一郎, 水内和彦, 2010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).

西條純一, 分子科学会平成21年優秀講演賞 (2009).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

ナノ学会第8回大会主催 (2010年5月13日-15日, 岡崎コンファレンスセンター)

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 (2007.4-2010.3).

日本学術振興会特別研究員等審査会委員 (2008-2009, 2010-).

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

科研費基盤研究(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).

科研費若手研究(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).

科研費基盤研究(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).

科研費若手研究(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).

B-11) 産学連携

共同研究(株)デンソー) 西 信之 (2010年).

共同研究(日産自動車(株)) 西 信之 (2010年).

共同研究(新日鐵化学(株)) 西 信之 (2010年).

C) 研究活動の課題と展望

研究室は2011年3月までで解散となり, それぞれのメンバーが新しい環境で新たな活動を展開する予定である。

横 山 利 彦 (教授) (2002 年 1 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：表面磁性，X線分光光学，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，NH₃による表面化学処理により不活性化した Si(111) 表面上に成長させた強磁性 Fe 薄膜の STM，MOKE，XMCD による構造や磁気特性評価，磁性金属フタロシアニン薄膜の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。また，金属フタロシアニンのX線磁気円二色性の理論解析にも着手した。
- b) 2006 年に我々が発見した，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，超高速時間分解紫外磁気円二色性光電子顕微鏡を開発してきた。今年度は新たに自然円二色性を利用したキラル顕微鏡の開発に着手した。

B-1) 学術論文

H. YOSHIKAWA, S. HAMANAKA, Y. MIYOSHI, Y. KONDO, S. SHIGEMATSU, N. AKUTAGAWA, M. SATO, T. YOKOYAMA and K. AWAGA, “Rechargeable Batteries Driven by Redox Reactions of Mn₁₂ Clusters with Structural Changes: XAFS Analyses of the Charging/Discharging Processes in Molecular Cluster Batteries,” *Inorg. Chem.* **48**, 9057–9059 (2009).

Y. TAKAGI, K. ISAMI, I. YAMAMOTO, T. NAKAGAWA and T. YOKOYAMA, “Structure and Magnetic Properties of Iron Nitride Thin Films on Cu(001),” *Phys. Rev. B* **81**, 035422 (8 pages) (2010).

H. IRIE, T. SHIBANUMA, K. KAMIYA, S. MIURA, T. YOKOYAMA and K. HASHIMOTO, “Characterization of Cr(III)-Grafted TiO₂ for Photocatalytic Reaction under Visible Light,” *Appl. Catal. B* **96**, 142–147 (2010).

I. YAMAMOTO, T. NAKAGAWA, Y. TAKAGI and T. YOKOYAMA, “Spin Reorientation Transitions of Ni/Pd(111) Films Induced by Fe Deposition,” *Phys. Rev. B* **81**, 214442 (7 pages) (2010).

T. NAKAGAWA, I. YAMAMOTO, Y. TAKAGI and T. YOKOYAMA, “Magnetic Circular Dichroism Study of Ultrathin Ni Films by Threshold Photoemission and Angle Resolved Photoemission Spectroscopy,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **181**, 164–167 (2010).

K. HILD, G. SCHÖNHENSE, H. J. ELMERS, T. NAKAGAWA, T. YOKOYAMA, K. TARAFDER and P. M. OPPENEER, “Energy- and Angle-Dependent Threshold Photoemission Magnetic Circular Dichroism from an Ultrathin Co/Pt(111) Film,” *Phys. Rev. B* **82**, 195430 (11 pages) (2010).

K. NAKATSUJI, Y. TAKAGI, Y. YOSHIMOTO, T. IIMORI, K. YAJI, K. TOMATSU, Y. HARADA, T. TAKEUCHI, T. TOKUSHIMA, Y. TAKATA, S. SHIN, T. ISHIKAWA and F. KOMORI, "Polarization Dependent Soft X-Ray Emission Spectroscopy of Cobalt Nano-Islands on a Nitrogen-Adsorbed Cu(001) Surface," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **181**, 225–228 (2010).

B-4) 招待講演

中川剛志, 「レーザー光電子磁気円二色性顕微鏡の開発と磁性超薄膜研究への応用」第57回応用物理学関係連合講演会, 平塚, 2010年3月.

中川剛志, 「閾値光電子磁気円二色性による磁性薄膜の研究」日本物理学会第65回年次大会, 岡山, 2010年3月.

中川剛志, 「短パルスレーザー光電子磁気円二色性による磁性薄膜の研究」放射光学会若手研究会「顕微分光の最先端」東京, 2010年8月.

横山利彦, 「紫外およびX線磁気円二色性による磁性薄膜表面の磁気特性評価」応用物理学会第16回シリサイド系半導体研究会「シリサイド微細構造の利用と関連評価技術」長崎, 2010年9月.

横山利彦, 「Mn フタロシアニン / 強磁性薄膜の相互作用と Mn-L 吸収端 XMCD」日本表面科学会放射光表面科学部会・SPring-8 利用者懇談会顕微ナノ材料科学研究会合同シンポジウム, 東京, 2010年12月.

T. NAKAGAWA, "Magnetic Domain Imaging of Ultrathin Films Using Laser-PEEM," The 6th International Workshop on Nano-scale Spectroscopy and Nanotechnology, Kobe (Japan), October 2010.

B-6) 受賞, 表彰

中川剛志, 日本物理学会第4回若手奨励賞 (2010).

高木康多, 日本物理学会第2回若手奨励賞受賞 (2008).

中川剛志, 日本表面科学会第3回若手研究者部門講演奨励賞 (2006).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

Executive Committee member of the International X-ray Absorption Society (2003.7–2009.8).

日本化学会関東支部幹事 (1999–2001).

日本 XAFS 研究会幹事 (2001–2007, 2010–).

日本放射光学会評議員 (2004–2005, 2008–2010).

日本放射光学会編集幹事 (2005–2006).

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).

XAFS 討論会プログラム委員 (1998–2010).

日本放射光学会年会組織委員, プログラム委員 (2005).

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システム研究センター専門研究員 (2010–).

文部科学省ナノテクノロジー・ネットワーク運営委員 (2007–).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2004–2005, 2008–2009).

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–), 同
化学材料分科会委員長 (2005–2009).

学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集委員 (2000–2002, 2004–2006).

日本放射光学会誌編集委員長 (2005–2006).

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

総合研究大学院大学物理科学研究科，「物性化学」2010年後期.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A)，「キラル光電子顕微鏡の開発」横山利彦 (2010年–2012年).

科研費挑戦的萌芽研究，「レーザー誘起磁気円二色性STMの開発」横山利彦 (2008年–2009年).

科研費基盤研究(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).

科研費若手研究(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).

科研費若手研究(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).

科研費若手研究(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).

科研費特定領域計画研究，「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).

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(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).

B-11) 産学連携

共同研究，富士フィルム株式会社，「無機機能性材料の固体構造解析」横山利彦 (2010年).

受託研究，日本学術振興会学術システム研究センター・学術動向等の調査研究「シンクロトロン放射光の化学への応用に関
する学術動向の調査研究」横山利彦 (2010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・ナノドットの磁気的性質、および分子吸着などの表面化学的な処理による新しい現象の発見とその起源の解明などを目指し、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)、磁気的第二高調波発生法(フェムト秒 Ti:Sapphire レーザー使用)、極低温超高真空走査トンネル顕微鏡など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。今年度から、全く新たな展開として、自然円二色性光電子分光・光電子顕微鏡の開発に着手した。これまでのキラル顕微鏡は光学顕微鏡レベルであり、成功すれば全く例のない新しい顕微鏡として大きな成果が期待できる。

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) 金属錯体の表面固定化による新規固定化金属錯体触媒の構築と in-situ 構造解析
- b) 酵素インスパイアードモлекуラーインプリンティング表面の設計と触媒反応制御
- c) 燃料電池電極触媒の燃料電池作動条件下における in-situ XAFS 構造解析
- d) In-situ 空間分解 XAFS 計測法の開発と in-situ 触媒構造解析への展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 複数の金属による表面での協同触媒作用の発現を目指して，Ir ダイマーや Mn₄ 核クラスター，Re クラスター，Ru₃ 核クラスター等の金属クラスターをシリカやアルミナ等の酸化物表面に固定化して，新しい複核金属触媒活性構造を表面に創出した。FT-IR，固体 NMR，XPS，UV/vis，ラマン分光，XAFS 等の構造解析法により，表面における触媒活性構造を明らかにした。
- b) 表面の固定化金属錯体の配位子を鋳型分子とした表面モлекуラーインプリンティング法を発展させ，インプリント空間内部に分子認識サイトを有する新しいモлекуラーインプリンティング触媒を設計した。
- c) Pt 及び Pt 系合金ナノ粒子カソード触媒の燃料電池作動条件下での in-situ XAFS 測定を行い，Pt 系触媒の溶出過程の構造解析を行った。
- d) X線マイクロビームを用いた走査型空間分解 XAFS 法のための in-situ XAFS 測定セルを開発し，Ni 触媒粒子の空間分解 XAFS 構造解析を行った。

B-1) 学術論文

K. MOTOKURA, M. TADA and Y. IWASAWA, “Layered Materials with Coexisting Acidic and Basic Sites for Catalytic One-Pot Reaction Sequences,” *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 7944–7945 (2009).

M. TADA, S. MURATSUGU, M. KINOSHITA, T. SASAKI and Y. IWASAWA, “Alternative Selective Oxidation Pathways for Aldehyde Oxidation and Alkene Epoxidation on a SiO₂-Supported Ru Monomer Complex Catalyst,” *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 713–724 (2010).

S. ICHIKAWA, T. SEKI, M. TADA, Y. IWASAWA and T. IKARIYA, “Amorphous Nano Structured Silicas for High-Performance Carbon Dioxide Confinement,” *J. Mater. Chem.* **20**, 3163–3165 (2010).

M. TADA, Y. UEMURA, R. BAL, Y. INADA, M. NOMURA and Y. IWASAWA, “In-situ Time-Resolved DXAFS for the Determination of Kinetics of Structural Changes of H-ZSM-5-Supported Active Re-Cluster Catalyst in the Direct Phenol Synthesis from Benzene and O₂,” *J. Phys. Chem. C* **12**, 5701–5706 (2010).

T. TANIKE, M. TADA, R. COQUET, Y. MORIKAWA, T. SASAKI and Y. IWASAWA, “A Novel Mechanism for Spectator CO-Mediated Reaction with Unique *cis*-(NO)₂ Dimer on a Co²⁺-Dimer/ γ -Al₂O₃ (110) Model Catalyst: Density Functional Theory Calculations,” *J. Mater. Chem.* **20**, 3163–3165 (2010).

M. TADA, “Surface-Mediated Design and Catalytic Properties of Active Metal Complexes for Advanced Catalysis Creation,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **83**, 855–876 (2010).

B-3) 総説, 著書

唯美津木, 「放射光が拓く触媒科学」『学術の動向 8月号』, 12–17 (2010).

唯美津木, 「モレキュラーインプリンティング金属錯体触媒の展開」『化学と工業 9』, 722–723 (2010).

B-4) 招待講演

唯美津木, 「選択反応制御のための分子レベル触媒表面設計とリアル系触媒の動的構造解析」理化学研究所ナノサイエンス研究施設交流会, 埼玉, 2010年3月.

唯美津木, 「選択触媒機能創出を目指した表面触媒活性構造の構築」第3回豊田中央研究所 - 分子科学研究所研究交流会, 愛知, 2010年3月.

唯美津木, 「in-situ 時間分解 XAFS による固体触媒の動的構造解析」日本セラミックス協会 2010 年会, 東京, 2010年3月.

M. TADA, “Design of Molecularly Imprinted Ru Complex Catalysts on SiO₂,” 第90回日本化学会 Asian International Conference—Coordination Chemistry, Organometallic Chemistry, Inorganic Chemistry—, 大阪, 2010年3月.

M. TADA, “Direct Phenol Synthesis from Benzene on a Novel Re Catalysts Supported on HZSM-5 Zeolite,” Catalysis Research Center, Hokkaido University 及び Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft 共催「サステナブル社会を目指した触媒化学・表面科学シンポジウム」, 札幌, 2010年4月.

唯美津木, 「酵素インスパイアード触媒表面の創出と選択触媒反応制御」ナノ学会第8回大会「未来を拓くナノサイエンス: 理学, 工学, 医学へのひろがり」, 岡崎, 2010年5月.

唯美津木, 「放射光を用いた in-situ 時間分解 XAFS による触媒構造の動的解析」化学技術戦略推進機構萌芽技術奨励講演会, 東京, 2010年5月.

唯美津木, 「選択触媒機能を生み出す高活性金属構造の分子レベル設計と構造解析」東北大学理学部化学科一般雑誌会, 仙台, 2010年5月.

唯美津木, 「選択触媒機能制御を目指した固体触媒表面の分子レベル設計」理化学研究所ワークショップ, 浜名湖, 2010年5月.

M. TADA, “In-situ Time-resolved XAFS Study for Heterogeneous Catalysis,” The 5th Asia-Oceania Forum for Synchrotron Radiation Research (AOFSTR), Pohang (Korea), July 2010.

M. TADA, “Advanced Design of Supported Metal-Complex Catalysts for Selective Oxidation Catalysis,” (KEYNOTE LECTURE), 1st International Conference on Molecular and Functional Catalysis, Singapore (Singapore), July 2010.

M. TADA, “Direct Phenol Synthesis from Benzene and Oxygen on Supported Re-Pt Catalysts,” RSC-CSJ Joint Symposium, London (U.K.), July 2010.

M. TADA, “Structures and Catalytic Performances of Oxide-Supported Ir-Dimer Catalysts,” 8th China–Japan Joint Symposium on Metal Cluster Compounds, Xianyang (China), August 2010.

唯美津木, 「固体触媒表面の分子レベル設計と動的触媒構造解析」新化学発展協会講演会, 東京, 2010年8月.

唯美津木, 「固定化金属錯体を用いた酸素の活性化」第60回錯体化学討論会, 大阪, 2010年9月.

S. MURATSUGU, “Surface Design of A Molecularly Imprinted Ru Complex for Catalytic Regioselective Epoxidation of Limonene using O₂,” 60th Anniversary Conference on Coordination Chemistry in OSAKA, Osaka (Japan), September 2010.

M. TADA, “Preparation and Structures of New Ir Dimer and Monomer Supported on Oxide Surfaces for Transfer Hydrogenation Catalysis,” 総研大海外レクチャー in バンコク「第一回 CU-IMS ジョイントシンポジウム」, Bangkok (Thailand), October 2010.

唯美津木,「リアル系固体触媒の分子科学」分子研所長招聘研究会「2020年の物質分子科学を語る」岡崎, 2010年12月.
S. MURATSUGU, “Design of Surface Molecularly Imprinted Ru Catalysts for Regioselective Epoxidation of Limonene,” JSPS-DST Asian Academic Seminar 2010, Kolkata (India), November 2010.

M. TADA, “Design and Catalytic Performances of Supported Metal-Complex Catalysts on Oxide Surfaces,” The 9th JOM symposium “Frontiers in Organometallic Chemistry” (PACIFICHEM 2010), Honolulu (U.S.A.), December 2010.

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).

唯美津木, 日本放射光学会奨励賞 (2009).

唯美津木, 井上リサーチアワード (2009).

唯美津木, 化学技術戦略推進機構萌芽技術奨励 (2009).

唯美津木, 守田科学研究奨励賞 (2009).

S. MURATSUGU, 2nd Asian Conference on Coordination Chemistry *Dalton Transactions* Poster Prize (2009).

邨次 智, 井上研究奨励賞 (2009).

邨次 智, 日本化学会優秀講演賞(学術)(2010).

唯美津木, 触媒学会若手優秀講演賞 (2010).

S. MURATSUGU, The Royal Society of Chemistry Poster Prize (2010).

唯美津木, 文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2010).

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–).

触媒学会表面化学と触媒設計の融合研究会世話人 (2009–).

触媒学会西日本地区幹事 (2010–).

日本放射光学会放射光サイエンス将来計画特別委員会委員 (2010–2011).

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).

第89回日本化学会春季年会特別企画企画担当 (2008–2009).

International Conference on Nanoscopic Colloid and Surface Science, Program Committee Member (2009–2010).

ナノ学会第8回大会実行委員会委員 (2009–2010).

International Symposium on Surface Science—Focusing on Nano-, Green, and Biotechnologies— (ISSS-6), Program Committee Member (2010–2011).

学会誌編集委員

Catalysis Letters, Editorial Board Member (2010–).

Topics in Catalysis, Editorial Board Member (2010–).

Catalysis Science & Technology, Editorial Board Member (2010–).

B-10) 競争的資金

科研費特別研究員奨励費, 「表面モレキュラー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).

科研費若手研究(B), 「モレキュラー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).

科研費特定領域研究「配位空間の化学」(公募研究)「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).

科研費特定領域研究「協奏機能触媒」(計画研究)「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).

科研費若手研究(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).

科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業研究シーズ探索プログラム(物質・機能探索分野)「酵素インスパイアード触媒表面の創製によるテイラーメイド触媒反応空間の設計と選択触媒反応制御」 唯美津木 (2010年).

科研費新学術領域研究「配位プログラム」(公募研究)「テンプレート電気化学法を駆使した合金ナノ粒子超構造体触媒表面の創製」 邨次 智 (2010年–2011年).

科研費新学術領域研究「分子活性化」(計画研究)「固体表面での高反応性活性構造の創出と触媒的高効率物質変換」 唯美津木 (2010年–2014年).

NEDO 固体高分子形燃料電池実用化推進技術開発「基盤技術開発」MEA 材料の構造・反応物質移動解析, 「時空間分解 X線吸収微細構造(XAFS)等による触媒構造反応解析」 唯美津木 (2010年–2012年).

B-11) 産学連携

(株)本田技研研究所四輪開発センター, 「In-situ XAFS 法を用いた燃料電池の構造解析研究」 唯美津木 (2009年–2010年).

井上科学振興財団井上リサーチアワード, 「分子認識能を組み込んだ表面モレキュラーインプリンティング固定化金属錯体触媒の設計による触媒反応の精密制御法の構築」 唯美津木 (2009年–2011年).

化学技術戦略推進機構萌芽技術研究奨励金,「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」唯美津木(2009年-2011年).

C) 研究活動の課題と展望

目的の物質のみを効率良く合成するための新しい固体触媒表面の分子レベル設計のために、金属錯体の表面固定化、孤立化、表面空間化学修飾、表面分子インプリンティング等の独自に考案した触媒表面設計法により、固体表面上に電子的、立体的に制御された新規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を目指している。調製した固定化金属錯体触媒の構造を固体NMRやEXAFSにより明らかにすることで、表面の触媒活性構造とその触媒作用の相関を分子レベルで解明したい。

また、放射光硬X線を用いたin-situ時間分解XAFS、in-situ空間分解XAFS法の開発に取り組んでいる。触媒反応が効率良く進行する場合(in-situ)で実高活性触媒の働き(時間情報)や空間的な情報を計測することにより、新規触媒機構の提案や固体触媒に内在する新現象の解明を行いたい。

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

電子間クーロン斥力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) 電荷秩序相に隣接する金属相の電子状態の特徴は電荷密度ゆらぎである。対称性の高い θ -(BEDT-TTF)₂X では、金属相において短距離電荷秩序に由来する構造ゆらぎが X 線散漫散乱で観測されている。 α -(BEDT-TTF)₂X の金属相ではこのような構造ゆらぎを X 線回折で観測することができないが、振動分光法を用いれば、電荷密度の時間度ゆらぎを観測することができる。このような観点から α -(BEDT-TTF)₂I₃ の金属相における電荷密度ゆらぎの相関時間を求めた。そして、相関時間が長いことからこのゆらぎは金属相において様々な配列の短距離電荷秩序が熱励起されている事に由来すると解釈した。この解釈は、遠赤外領域の光学伝導度にドルーデ応答が観測されない事で裏付けられた。この他、 α' -(BEDT-TTF)₂IBr₂ の相転移に同位体効果のある事を見出し、この物質でポーラロン効果が働いていることを明らかにした。さらに、電荷秩序状態にある物質の電子遷移に現れる特徴的な窪み (dip) が C=C 伸縮振動の倍音であり、なぜ電荷秩序状態でのみ現れるかを理論的に明らかにした。
- 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。この種の物質は電子が整列する事に起因して自発分極が発生する事から電子強誘電体と呼ばれている。今年度は α' -(BEDT-TTF)₂IBr₂ の SHG 信号を丁寧に測定し直し、相転移温度 210 K より低温の 160 K から自発分極が急速に発達する事を見出した。160 K の異常は比熱でも観測された。また、低温で自発分極が飽和せず、発散する様に振舞う異常な現象を見出した。さらに、圧力と共に二つの相転移温度が融合することも見出した。

B-1) 学術論文

H. NAKAYA, K. ITHO, Y. TAKAHASHI, H. ITOH, S. IWAI, S. SAITO, K. YAMAMOTO and K. YAKUSHI, "Terahertz Responses of High-Temperature Metallic Phase and Photoinduced Metallic State in Ferroelectric Charge-Ordered Organic Salt," *Phys. Rev. B* **81**, 15511 (6 pages) (2010).

K. YAMAMOTO, A. KOWALSKA and K. YAKUSHI, "Direct Observation of Ferroelectric Domains Created by Wigner Crystallization of Electrons in α -[bis(ethylenedithio)tetrathiafulvalene]₂I₃," *Appl. Phys. Lett.* **96**, 122901 (3 pages) (2010).

T. MURATA, X. SHAO, Y. NAKANO, H. YAMACHI, M. URUICHI, K. YAKUSHI, G. SAITO and K. TANAKA, "Tuning of Multi-Instabilities in Organic Alloy, [(EDO-TTF)_{1-x}(MeEDO-TTF)_x]₂PF₆," *Chem. Mater.* **22**, 3121–3132 (2010).

- S. HIROSE, A. KAWAMOTO, N. MATSUNAGA, K. NOMURA, K. YAMAMOTO and K. YAKUSHI**, “Reexamination of ^{13}C -NMR in $(\text{TMTTF})_2\text{AsF}_6$: Comparison with Infrared Spectroscopy,” *Phys. Rev. B* **81**, 205107 (6 pages) (2010).
- Y. YUE, K. YAMAMOTO, M. URUICHI, C. NAKANO, K. YAKUSHI, S. YAMADA, T. HIEJIMA and A. KAWAMOTO**, “Non-Uniform Site Charge Distribution and Fluctuation of Charge Order in the Metallic State of α -(BEDT-TTF) $_2\text{I}_3$,” *Phys. Rev. B* **82**, 075134 (8 pages) (2010).
- K. MURATA, K. YOKOGAWA, K. KOBAYASHI, K. MASUDA, T. SASAKI, Y. SENO, N. R. TAMILSELVAN, H. YOSHINO, J. S. BROOKS, D. JEROME, K. BECHGAARD, M. URUICHI, K. YAKUSHI, Y. NOGAMI and R. KATO**, “Field-Induced Successive Phase Transitions in the CDW Organic Conductor HMTSF-TCNQ,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 103702 (4 pages) (2010).
- K. KAWAKAMI, T. FUKATSU, Y. SAKURAI, H. UNNO, H. ITOH, S. IWAI, T. SASAKI, K. YAMAMOTO, K. YAKUSHI and K. YONEMITSU**, “Early-Stage Dynamics of Light-Matter Interaction Leading to the Insulator-to-Metal Transition in a Charge Ordered Organic Crystal,” *Phys. Rev. Lett.* **105**, 246402 (4 pages) (2010).
- A. SHIMIZU, T. KUBO, M. URUICHI, K. YAKUSHI, M. NAKANO, D. SHIOMI, K. SATO, T. TAKUI, Y. HIRAO, K. MATSUMOTO, H. KURATA, Y. MORITA and K. NAKASUJI**, “Alternating Covalent Bonding Interactions in One-Dimensional Chain of Phenalenyl-Based Singlet Biradical Molecule Having Kekule Structures,” *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 14421–14428 (2010).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- R. MORGUNOV, A. DMITRIEV, A. CHERNENKAYA, K. YAMAMOTO, K. YAKUSHI and Y. TANIMOTO**, “Charge Order–Disorder Phase Transition Detected by EPR in α' -(BEDT-TTF) $_2\text{IBr}_2$,” *Physica B* **405**, S138–S140 (2010).
- T. HIEJIMA, S. YAMADA, M. URUICHI and K. YAKUSHI**, “Infrared and Raman Studies of α -(BEDT-TTF) $_2\text{MHg}(\text{SCN})_4$ with $\text{M} = \text{K}$ and NH_4 at Low Temperature—the Charge Ordering Fluctuation with Breaking of the Inversion Symmetry,” *Physica B* **405**, S153–S156 (2010).
- M. HIGA, R. KONDO, A. MURATA, S. KAGOSHIMA, H. NISHIKAWA and K. YAKUSHI**, “Electronic States of Organic Quasi-Two Dimensional Conductor β' -(DODHT) $_2\text{PF}_6$: Charge Ordering and Superconductivity,” *Physica B* **405**, S172–S175 (2010).
- Y. YUE, K. YAMAMOTO, C. NAKANO, M. URUICHI, K. YAKUSHI, M. INOKUCHI, T. HIEJIMA and A. KAWAMOTO**, “Order–Disorder Type of Charge-Ordering Phase Transition in Narrow-Bandwidth Compound, α' -(BEDT-TTF) $_2\text{IBr}_2$,” *Physica B* **405**, S232–S236 (2010).
- T. YAMAMOTO, Y. NAKAZAWA, R. KATO, K. YAKUSHI, H. AKUTSU, A. S. AKUTSU, H. YAMAMOTO, A. KAWAMOTO, S. S. TURNER and P. DAY**, “Charge Fluctuation of the Superconducting Molecular Crystals,” *Physica B* **405**, S237–S239 (2010).
- K. YAMAMOTO, A. KOWALSKA, C. NAKANO and K. YAKUSHI**, “Inhomogeneous Ferroelectric Polarization in α' -(BEDT-TTF) $_2\text{IBr}_2$ Revealed by Second-Harmonic Generation Microscopy,” *Physica B* **405**, S363–S364 (2010).

- K. MURATA, K. YOKOGAWA, J. S. BROOKS, A. KISMARAHARDJA, E. STEVEN, M. KANO, Y. SENO, N. R. TAMILSELVAN, H. YOSHINO, T. SASAKI, D. JEROME, P. SENZIER, K. BECHGAARD, M. URUICHI and K. YAKUSHI, "Transport Properties of HMTSF-TCNQ up to 8 GPa and a Novel Hysteresis and Quantum Oscillatory Behavior in Magnetoresistance in Magnetic Field up to 31 Tesla," *J. Phys.: Conf. Series* **215**, 012064 (5 pages) (2010).
- K. TAKEDA, S. SASAKI, J. HAYASHI, S. KAGAMI, I. SJOROTANI and K. YAKUSHI, "X-Ray and Optical Studies of One-Dimensional Bis(dimethylglyoximate)Pd(II), Pd(dmg)₂ at High Pressures," *J. Phys.: Conf. Series* **215**, 012065 (5 pages) (2010).
- T. MURATA, X. SHAO, Y. NAKANO, H. YAMOCCHI, G. SAITO, M. URUICHI, K. YAKUSHI and K. TANAKA, "Metal-Insulator Transition of Alloyed Radical Cation Salts, (Me_xEDO-TTF)₂PF₆," *Physica B* **405**, S45-S48 (2010).
- Y. NAKANO, T. NISHI, M. URUICHI, K. YAKUSHI and H. YAMOCCHI, "Synthesis, Crystal Structure, and Physical Property of Radical Cation Salt of 2-(thiopyrana-4-ylidene)-4,5-ethylenedithio-1,3-dithiole (TP-EDTT): (TP-EDTT)₂SbF₆," *Physica B* **405**, S49-S54 (2010).
- X. F. SHAO, Y. NAKANO, G. SAITO, K. YAKUSHI, S. KOSHIHARA, K. TANAKA and H. YAMOCCHI, "The Effect of a Methyl Group Incorporated in EDO-TTF," *Physica B* **405**, S75-S78 (2010).
- K. MURATA, K. YOKOGAWA, J. S. BROOKS, A. KISMARAHARDJA, E. STEVEN, M. KANO, Y. SENO, N. R. TAMILSELVAN, H. YOSHINO, T. SASAKI, D. JEROME, P. SENZIER, K. BECHGAARD, M. URUICHI and K. YAKUSHI, "Successive Bi-Stable Quantum Phases in HMTSF-TCNQ Induced by Field-Sweep," *Physica B* **405**, S111-S112 (2010).
- K. KODAMA, M. KIMATA, Y. TAKAHIDE, T. TERASHIMA, H. SATSUKAWA, A. HARADA, K. HAZAMA, S. UJI, K. YAMAMOTO and K. YAKUSHI, "Non-Linear Current-Voltage Characteristics in α -(BEDT-TTF)₂I₃," *Physica B* **405**, S176-S178 (2010).
- Y. NAKANO, Y. MISAKI, M. URUICHI, K. YAKUSHI and H. YAMOCCHI, "Charge Disproportionation in Semiconducting θ -Type Salt of BTM-TTP," *Physica B* **405**, S198-S201 (2010).

B-3) 総説, 著書

- K. YAMAMOTO and K. YAKUSHI, "Second-Harmonic Generation Study of Ferroelectric Organic Conductors α -(BEDT-TTF)₂X (X = I₃ and I₂Br)," in *Molecular Electronic and Related Materials—Control and Probe with Light*, T. Naito, Ed., Transworld Research Network; Kerala, 185-201 (2010).

B-4) 招待講演

- K. YAKUSHI, "Charge-ordering phase transition in α' -(BEDT-TTF)₂I₂Br₂," ISSP-MDF "Spin-related phenomena in organic materials," Kashiwa (Japan), July 2010.
- K. YAKUSHI, "Charge-ordering phase transition in α' -(BEDT-TTF)₂I₂Br₂," 10th Japan-China Joint Symposium, "Conductive and photo-conductive organic solids and related phenomena," Kyoto (Japan), October 2010.
- 山本 薫, 「電荷秩序による有機導体の強誘電相転移」日本物理学会第65回年次大会, 岡山, 2010年3月.
- 山本 薫, 「 α' -(BEDT-TTF)₂I₂Br₂ 塩の強誘電体転移に対する圧力効果」研究会「関連電子系における電荷秩序と誘電異常」東京, 2010年11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, 10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, 2010).

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).

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).

学会誌編集委員

日本化学会欧文誌編集委員 (1985–1986).

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学研究科, 「物性化学」 2010年10月–11月.

B-10) 競争的資金

科研費特定領域研究(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).

科研費特別研究員奨励費, 「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).

科研費基盤研究(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).

科研費特定領域研究, 「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).

科研費特別研究員奨励費, 「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).

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(C), 「分子導体における電荷密度ゆらぎの研究」 薬師久弥 (2010年–2013年).

科研費奨励研究(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).

科研費若手研究(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).

科研費若手研究(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).

科研費萌芽研究,「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).

科研費新学術領域研究「分子自由度が拓く新物質科学」(公募研究)「 α' -(BEDT-TTF)₂IBr₂における電子型強誘電相の不均一分布」山本 薫 (2009年–2010年).

C) 研究活動の課題と展望

電荷秩序相に隣接する高伝導相の電子状態を特徴づけているのは電荷密度ゆらぎである。電荷に敏感なC=C伸縮振動モードの線形を解析するとによりサイト電荷の時間ゆらぎの相関時間を知ることができるが、二つの系統の物質があることが分かってきた。一つは α' -(BEDT-TTF)₂IBr₂に代表される局在性の強い物質で、個別的に運動するスモールポーラロンのサイト間ホッピングによって理解する事ができる。相転移温度の同位体効果はスモールポーラロンを強く示唆する実験事実であるので、この方向を裏付ける実験が重要である。もう一つは α -(BEDT-TTF)₂X₂に代表される遍歴性の強い物質で、金属相における相関時間はバンド充満率 1/4 の拡張ハバード模型における電荷相関関数 $C(q, \omega)$ の相関時間と対応させる事ができる。このような観点からこれまでの電荷秩序系物質の金属相の電子状態を統一的に理解する道が開けると考えている。

電荷秩序相の電子状態で残された課題は強誘電性である。現在強誘電性の確定しているのは α -(BEDT-TTF)₂I₃, α -(BEDT-TTF)₂I₂Br と α' -(BEDT-TTF)₂IBr₂のみである。これらの物質は電子の配列が自発分極を発生する電子強誘電性として認知されつつある。理想的な電子強誘電体は超高速の光応答や低い閾値電場による分極反転など応用面からの期待がもてる。さらに、室温付近で電荷秩序相をとる物質も多数あることから、室温における電子強誘電体の発見が期待できる。この他、一軸圧によって強誘電相を崩壊させる事により、低温における超伝導の発現が期待される。

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，物質科学

A-2) 研究課題：

- a) 磁気共鳴法による有機導体・低次元スピン系の電子状態理解
- b) 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・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磁気共鳴測定を行っている。一次元電子系の競合電子相の起源に迫るために，4 GPa に迫る系統的な超高压下での NMR 測定ならびにパルス ESR を行い，リエントラント反強磁性相や量子臨界点の是非，電荷秩序相と基底状態の相関について研究を行っている。この他，新規な自己ドーブ型有機導体の強磁場 ESR を用いた研究，二次元モット - 超伝導近傍相での電荷注入に関する微視的研究も行っている。
- b) 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。本年度は Q-band の多重パルスシステムも稼働した。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. FURUKAWA, T. HARA and T. NAKAMURA, “Spin-Dynamics in Vicinity of Spin-Gap Phase Transition for Organic Conductor (TMTTF)₂X,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 043702 (4 pages) (2010).

K. FURUKAWA, T. NAKAMURA, Y. KOBAYASHI and T. OGURA, “Novel Type of Charge Generated System: Magnetic Investigations of TTF-Based Self-Doped Hydrogen-Bonding Conductor,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 053701 (4 pages) (2010).

N. YONEYAMA, K. FURUKAWA, T. NAKAMURA, T. SASAKI and N. KOBAYASHI, “Magnetic Properties of X-Ray Irradiated Organic Mott Insulator κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Cl,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 063706 (4 pages) (2010).

F. IWASE, K. SUGIURA, K. FURUKAWA and T. NAKAMURA, “The Ground States and Critical Behavior in the Quasi-One-Dimensional Complexes (TMTTF)₂[(AsF₆)_x(SbF₆)_{1-x}],” *Phys. Rev. B* **81**, 245126 (6 pages) (2010).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

H. OHTA, N. MATSUMI, S. OKUBO, M. FUJISAWA, T. SAKURAI, H. KIKUCHI, K. FURUKAWA and T. NAKAMURA, “Spin Gap Observation in Triangular Lattice Antiferromagnet InMnO₃ by High Field ESR,” *J. Phys.: Conf. Series* **200**, 022041 (4 pages) (2010).

F. IWASE, K. FURUKAWA and T. NAKAMURA, “¹³C NMR Investigation of Low-Temperature States in One-Dimensional Organic Cation Radical Salt, (TMTTF)₂SbF₆, under High Pressures,” *J. Phys.: Conf. Series* **215**, 012063 (4 pages) (2010).

N. YONEYAMA, T. SASAKI, N. KOBAYASHI, K. FURUKAWA and T. NAKAMURA, “X-Ray Irradiation Effect on Magnetic Properties of Dimer-Mott Insulators: κ -(BEDT-TTF) $_2$ Cu[N(CN) $_2$]Cl and β' -(BEDT-TTF) $_2$ ICl $_2$,” *Physica B* **405**, S244–S246 (2010).

K. YOKOGAWA, H. YOSHINO, T. NAKAMURA, J. S. BROOKS and K. MURATA, “First Observation of Superconductivity by Uniaxial Strain in (TMTTF) $_2$ X-Salt,” *Physica B* **405**, S291–S294 (2010).

B-4) 招待講演

T. NAKAMURA, “Advanced ESR Study on Molecular-based Conductors,” Asia-Pacific EPR/ESR Symposium (APES2010), International Convention Center, Jeju (Korea), November 2010.

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).

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).

電子スピンサイエンス学会担当理事 (2004–2005).

電子スピンサイエンス学会運営理事 (2006–).

アジア環太平洋EPR/ESR 学会(Asia-Pacific EPR/ESR Society) 秘書 / 財務 (2004–2008) , 日本代表 (2010–).

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).

第3回分子科学討論会 2009 (名古屋) プログラム委員 (2009).

第49回電子スピンサイエンス学会年会(名古屋) プログラム委員 (2010).

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

福井大学大学院工学研究科，「物性・電磁物理学特別講義Ⅰ」2010年2月23日-24日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(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YNAMICS研究」中村敏和 (2008年-2011年).

科研費特定領域研究「100テスラ領域の強磁場スピン科学」(公募研究)「シアノ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).

科研費特定領域研究「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).

科研費基盤研究(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).

科研費特定領域研究(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).

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。有機導体に対する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) 多孔性共役高分子による新規光捕集システムの創出
- b) 多孔性共役高分子による新規触媒システムの構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 光捕集は光エネルギー変換において最も基本的な過程であり，方向性を持って励起エネルギーを必要とする場所に伝達できることが，変換システムに欠かせないものである。本研究では，多孔性共役高分子に着目し，これまでにない新しい光捕集システムを構築した。多孔性共役高分子は広がった共役構造を持ちながら，巨大な表面積を有するユニークな高分子である。このような構造特徴により，多孔性高分子骨格は光捕集アンテナとして優れた特性を持ち，光を吸収するユニットを高密度に集積することができる。共役構造は三次元的に広がっているため，吸収した光エネルギーは特定のユニットにとどまることなく，分子骨格を高速移動できることが特徴である。これは，独自の手法により多孔性高分子の内部にアクセプター分子を組み込むことで，高分子骨格で捕集した光エネルギーをその分子に伝達させることを可能にした。本研究は，多孔性共役高分子の新しい機能を示したもので，分子設計が可能な光捕集システムとして大いに注目されている (*J. Am. Chem. Soc.* 2010 , Highlighted by ACS Noteworthy Chemistry and NPG Asian Materials Highlights , 中日新聞 , 科学新聞) 。
- b) 本研究では，世界に先駆けて触媒ユニットをビルディングブロックとして持ち，極めて高い表面積を有する触媒内蔵型多孔性高分子の合成に成功した。多孔性高分子骨格は，共有結合でクロスリンキングして細孔構造を形成しているため，高い構造安定性及びボア安定性を兼備する。ミクロン細孔を通して反応基質が容易に反応中心にアクセスすることができ，高い触媒機能が発揮できる構造となっている。さらに，ミクロン細孔を反応場として用いて，均一系よりはるかに高い触媒機能を有することを見いだした。反応選択性，触媒の再利用及び大量合成等において，いずれも優れており，ミクロン細孔及び触媒内蔵型骨格構造が特異な変換機能の発現に寄与していることを突き止めた (*J. Am. Chem. Soc.* 2010) 。

B-1) 学術論文

L. CHEN, Y. HONSHO, S. SEKI and D. JIANG, “Light-Harvesting Conjugated Microporous Polymers: Rapid and Highly Efficient Flow of Light Energy with a Porous Polyphenylene Framework as Antennae,” *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 6624–6628 (2010). (Cover Page)

L. CHEN, Y. YANG and D. JIANG, “CMPs as Scaffolds for Constructing Porous Catalytic Frameworks: A Built-In Heterogeneous Catalyst with High Activity and Selectivity Based on Nanoporous Metalloporphyrin Polymers,” *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 9138–9143 (2010).

B-4) 招待講演

D. JIANG, “Design and Functions of Two-dimensional Macromolecule,” 3rd International Symposium on Creation of Functional Nanospace by Metal–Organic Frameworks, Kanagawa University, February 2010.

D. JIANG, “Design and Functions of Two-dimensional Macromolecule,” 239th ACS National Meeting, San Francisco (U.S.A.), March 2010.

D. JIANG, “Design and Functions of Two-dimensional Conjugated Macromolecule,” China–Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Changchun (China), July 2010.

D. JIANG, “Design and Functions of Two-dimensional Conjugated Macromolecule,” Xiangshan Science Conference on Functional Supramolecular Systems, Beijing (China), October 2010.

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).

China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Hokkaido, August 2–5, Organizer (2009).

Sokendai Asian Winter School “Molecular Sciences on Different Space-Time Scales,” Okazaki, December 2–5, Co-Organizer (2009).

China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Jilin University, Changchun, July 25–28, Organizer (2010).

B-10) 競争的資金

科研費特定領域研究(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).

科研費若手奨励研究(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).

科研費基盤研究(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).

科学技術振興機構さきがけ研究『太陽光と光電変換機能領域』『シート状高分子を用いた光エネルギー変換材料の創製』
江 東林 (2009年–2012年).

C) 研究活動の課題と展望

分子研に着任して5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。芽が見えてきましたので、これから大きく育てていきます。

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) 固体 NMR による膜タンパク質研究のための自発磁場配向脂質膜の開発
- b) 固体 NMR 解析のための生体分子試料調製
- c) Keggin 型モリブデンポリ酸の固体 ^{95}Mo NMR
- d) 920MHz 超高磁場固体 NMR 用試料温度調節機能付き MAS プローブの開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 本研究では不飽和，および飽和脂質分子を適切な割合で混合することにより，少なくとも 30 °C から 65 °C の温度領域で安定的に自発磁場配向する超橢円体脂質膜試料の開発に成功した。その磁場配向特性について ^{31}P - 固体 NMR を用いて解析した。
- b) 固体 NMR を用いた膜表在型・膜貫通型タンパク質の解析法確立のための試料調製として，膜表在型タンパク質（ヒト由来 PLC- $\delta 1$ PH ドメイン；hPH），細胞質内水溶性タンパク質（ヒト由来 FK506 結合タンパク質；FKBP），複数回膜貫通型タンパク質（大腸菌由来）の，大腸菌を用いた大量発現系構築を行った。その結果，hPH および FKBP の大量発現，精製および安定同位体標識試料の作成に成功した。また大腸菌由来膜タンパク質については，大量発現が確認されたため精製条件の最適化を行っている。
- c) 詳細な構造が不明な d^1 電子を有する Keggin 型モリブデンポリ酸について，固体高分解能 ^{95}Mo NMR の測定を行った。得られたスペクトルのシミュレーション解析や DFT 計算の結果から， d^1 電子はほぼ局在しており結晶は disorder 構造をとっていることが分かった。
- d) 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 プローブの開発を昨年度から行っており，プローブ本体の開発は昨年，暫定的完成を終えている。本年度は開発したプローブを実際に超伝導マグネット下で運用するために必要な，周辺機器接続のための専用台座などの設計，製作，および，設置テストを行い，本年度中の公開使用のための準備を完了した。

B-1) 学術論文

S. TORAYA, N. JAVKHLANTUGS, D. MISHIMA, K. NISHIMURA, K. UEDA and A. NAITO, "Dynamic Structure of Bombolitin II Bound to Lipid Bilayers as Revealed by Solid-State NMR and Molecular-Dynamics Simulation," *Biophys. J.* **99**, 3282–3289 (2010).

T. IJIMA, T. YAMASE, M. TANSO, T. SHIMIZU and K. NISHIMURA, "Solid-State ^{95}Mo NMR of Mixed-Valence Polyoxomolybdates (V, VI) with Localized or Delocalized d^1 Electrons," *Chem. Phys. Lett.* **487**, 232–236 (2010).

B-6) 受賞，表彰

西村勝之, 日本核磁気共鳴学会 優秀若手ポスター賞 (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 (2004–2009).

日本核磁気共鳴学会評議員 (2009–2010).

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 (2005–2009).

Global Journal of Biochemistry, Editorial Board (2010–).

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，講義「機能構造化学」2010年.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「固体 NMR による新規室温磁場配向膜を用いた膜表面タンパク質脂質結合機構の解明」西村勝之 (2010年–2012年).

科研費萌芽研究, 「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).

科研費若手研究(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).

科研費若手研究(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).

科研費若手研究(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).

科研費若手研究(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

本年度より着任した特任助教の不断努力の結果，着任以来，試料調製に苦慮していた膜表面タンパク質などの大量発現系の構築，精製法の確立にようやく成功した。昨年，および本年度に開発した自発磁場配向膜を有効活用し，膜表面タンパク質など生体分子の構造解析を本格的に開始すると共に，それに必要な一連の新規測定法を開発し，グループ内で開発した測定法のみで一連の研究が完了するように体系的に研究を完成させたいと考えている。

ナノ分子科学研究部門（分子スケールナノサイエンスセンター）

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) 有機半導体の pn 制御
- b) 高効率有機薄膜太陽電池の設計技術の開発
- c) p-i-n 有機太陽電池の共蒸着 i 層ナノ構造の設計

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a)

a-1) フラーレン (C_{60}) を p 型化できるドーパントの発見；有機半導体における精密な pn 制御技術の確立によって初めて，有機薄膜太陽電池の本質的効率向上ができるという考えに基づき， C_{60} 薄膜のフェルミレベルに対するドーピング効果を検討した。p 型化ドーパントとして， MoO_3 ， V_2O_5 ， WO_3 ， RuO_2 等の金属酸化物を検討し， MoO_3 ， V_2O_5 等が p 型化に有効なことを見いだした。その中で特に有効であった MoO_3 を用いて検討を行った。n 型化ドーパントとして，水素， $Li@C_{60}$ (Li 内包フラーレン)， P ， Ca 等を検討したが， Ca が最も効果的であったため，当面 Ca を使用している。ただ，金属は再結合中心になるなどの副作用が予想されるため，探索を継続中である。以下，p 型化について述べる。本年度購入した，グローブボックス（純窒素雰囲気，酸素，水ともに 0.5 ppm 以下）に内蔵した蒸着装置，ケルビンプローブを用いて，全く大気にさらすことなく実験を行った。セブンナイン（99.99999%，7N）まで超高純度化した C_{60} を，ITO 基板上に 100 nm 厚堆積し，即座にケルビン法によりフェルミレベル (E_F) を測定した。ドーパントとして MoO_3 を用い，共蒸着によって 3.6% (36000 ppm)，0.3% (3000 ppm) ドーピングした。ノンドープ C_{60} の E_F は 4.6 eV にあり，バンドキャップ中央より上で，やや n 型性であることが分った。 MoO_3 をドープすると， E_F は大きくプラスシフトして HOMO 位置 (6.4 eV) に近づき，5.88 eV の値が得られた。この結果は， C_{60} 薄膜が p 型化した可能性を強く示唆している。そこで，ノンドープと， MoO_3 をドープした C_{60} 単層セルを，同じグローブボックス内蔵蒸着装置を用い，石英窓付セル測定容器へグローブボックス内に移すことで，全く空気にさらさず作製・評価した。ノンドープの場合，n 型 C_{60} /金属界面に形成される，バンドの曲りが下に凸のショットキー接合が， MoO_3 ドープの場合，p 型 C_{60} /金属界面に形成される，バンドの曲りが上に凸のショットキー接合が形成されていることを，電流 - 電圧特性，アクションスペクトル等の，光起電力特性から確認した。すなわち， C_{60} 薄膜が MoO_3 ドーピングによって n 型から p 型になったことを，光起電力特性からも確認できた。p 型 C_{60} の形成は，世界初の成果である。この成果は，*Appl. Phys. Lett.* に投稿し，現在，印刷中である。

a-2) 共蒸着膜の pn 制御；n 型性 C_{60} を MoO_3 ドープによって p 型化できたが， C_{60} 単独膜では，ドナー / アクセプター増感がなく，生ずる光電流量が少ない。そこで，アクセプターの C_{60} にドナーを混合した共蒸着膜を p 型化できるか検討した。今回は， C_{60} との組み合わせで大きな開放端電圧 V_{OC} が得られるドナーとしてオリゴチオフェン (α -6T) を用いた。まず， V_{OC} が 0.9 V 得られることを確認した。 C_{60} :6T 共蒸着膜 (6T の割合：3–10%) に， MoO_3 を三元蒸着でドープした。70 ppm の極微量をドープできる精密なレート制御技術を確認した。仕事関数が 4.7 eV と 6.7 eV の，ITO と MoO_3 でサンドイッチしたセル（セル構造：ITO/ C_{60} :6T 共蒸着膜 [MoO_3 をドープ] / MoO_3 / Ag) を作製し，ITO 側から光照射して光電変換特性を測定した。ここでは，アクションスペクトル測定の結果を述べる。ノンドープと 400 ppm- MoO_3 ドープでは， C_{60} : α -6T セルの吸収の裾に光電

流が生じており(マスキング効果), 活性領域が光照射側と反対の MoO_3 電極側にあることが分った。これは MoO_3 側に n 型のショットキー接合が出来ていることを意味する。一方, 1100, 4300 ppm ドープでは吸収と一致しており, ITO 電極側に活性領域があることが分かる。これは, ITO 側に p 型のショットキー接合が出来ていることを意味する。以上の結果は, 400–1100 ppm の間で C_{60} -a-6T の伝導タイプが n 型から p 型に劇的に変化していることを示している。本系は, V_{OC} が 0.9 V あるため, 1ミクロン程度の厚膜セルで, 内部抵抗の低減, 最適なセル設計を行えば, 大きな効率向上につながる可能性を持つ。共蒸着膜へのドーピングは, 未解明の部分が多く, 今後, pn ホモ接合や pin ホモ接合の形成, アクセプター (C_{60}) とドナー (6T) 片方だけにドーピング効果を持つ, 選択ドーピング等を追求して, 高効率を得られる最適のセル構造を設計できるようにする必要がある。

a-3) ホール輸送材料のドーピングによるフェルミレベル制御; C_{60} との組み合わせによって, 0.7 V から 1V 程度の大きな開放端電圧が得られるホール輸送材料のフェルミレベル (E_F) に対するドーピング効果を検討した。ホール輸送材料は透明であるが, C_{60} との共蒸着膜で, ドーピングによってセル内部抵抗を低減し, 1ミクロン程度まで厚膜化できれば, C_{60} の吸収によって可視光全域に感度を持たせることが可能である。ホール輸送材料として TPD, NPD, CBP を用い, ITO 基板上に 100 nm 堆積した。 MoO_3 を共蒸着によって約 4000 ppm ドーピングした。TPD NPD CBP すべて E_F は価電子帯 (VB) と伝導帯 (CB) の中央付近にあり 絶縁体であることを示している。 MoO_3 をドープすると E_F は大きくプラスシフトし, それぞれ 4.87 4.95 5.67 eV となり価電子帯 (それぞれ, 5.3, 5.5, 6.1 eV) に近づいた。また, ホール輸送材料と MoO_3 の体積比 1:1 の共蒸着膜において, 近赤外 (1000-2000 nm) に明瞭な CT 吸収が観測され, MoO_3 がホール輸送材料から電子を引き抜いて, p 型化させていることが分った。現在, C_{60} との 2 層型接合セル, 共蒸着セルを作製し, セル特性への p 型化の影響を調べている。

a-4) 有機半導体の純度評価方法の確立 (三菱化学との共同研究); 三菱化学 (フロンティアカーボン) との共同研究によって, フラーレン単結晶に対して, TPD-Mass (Temperature Programmed Desorption Mass Spectroscopy) による純度評価を行い, セブンナイン (7N) 以上の純度であることを確認した。これは, 我々が以前行った SIMS による純度評価とも一致した。

b)

b-1) pn ホモ接合を有する C_{60} 太陽電池; MoO_3 ドーピングにより C_{60} 薄膜を p 型化できたので, pn ホモ接合を持つ C_{60} セルの作製に挑戦した。p 型化には MoO_3 (4750 ppm) を用い, n 型化には Ca (5200 ppm) を用いて, C_{60} へ共蒸着によってドープした。セル構造は, ITO/ MoO_3 (10 nm)/ MoO_3 -doped C_{60} (500 nm)/Ca-doped C_{60} (500 nm)/BCP/Ag である。ITO 電極側から光照射した時, C_{60} の吸収の裾にピークを持つスペクトルが観測され, また, Ag 電極側から光照射した時も, C_{60} の吸収の裾にピークを持つスペクトルが観測できた。どちら側から光照射してもマスキング効果が現れているということは, 2つの金属 / 有機界面で光電流が生じているのではなく, セルバルクの中央, すなわち pn 接合で光電流を生じていることを意味している。また, pn 接合位置を動かすことで, アクションスペクトルの形が敏感に変化し, pn ホモ接合の形成をさらに支持する結果を得た。以上のように, C_{60} の pn ホモ接合の作製に初めて成功した。

b-2) 可視 - 近赤外全域 (400–1100 nm) に感度を持つセルの開発; 近赤外域に吸収を有する鉛フタロシアニン (PbPc) と C_{60} の共蒸着膜 ($\text{PbPc}:\text{C}_{60}$) と, 可視域に感度を有するメタルフリーフタロシアニン (H_2Pc) と C_{60} の共蒸着膜 ($\text{H}_2\text{Pc}:\text{C}_{60}$) を, 接合したダブルバルクヘテロ接合セル (p-i-i'-n セル) を検討中である。このタイプのセルで可視, 近赤外全域利用できる可能性がある。400–1100 nm すべて利用できれば, 単結晶シリコンに匹敵する, 30 mA/cm^2 程度の短絡光電流が得られる。また, PbPc の近赤外感度は PbPc の J 凝集体 (結晶形の 1 タイプ) に由来するが, それをナフタロシアニン等のそれ自体が近赤外に吸収を持つ有機半導体分子に置き換えることも検討中である。現在, 当面, 効率 7% 越えることを目標に検討している。

c) どのような有機半導体の組み合わせにも普遍的に適用できる, 共蒸着膜のナノ構造制御方法を開発している。守秘義務のため, 今回は詳細を省く。2011年春季応用物理学会発表後に報告できる。

B-1) 学術論文

M. HIRAMOTO and H. SHIOKAWA, “One Month Continuous Operation of Organic *p-i-n* Solar Cells Covered with a Zinc Oxide Protection Layer,” *Appl. Phys. Express* **3**, 082301 (2 pages) (2010). [*Editor's choice, SPOTLIGHT*]

K. NISHIYAMA, T. HANAMOTO, H. SHIGEMATSU, K. KITADA, K. IKETAKI, T. KAJI and M. HIRAMOTO, “Morphology of Rare-Earth (Y, Sm) Nanostructures Synthesized by the Surfactant-Assembled Method,” *Chem. Lett.* **39**, 974–976 (2010).

B-3) 総説，著書

平本昌宏, 「低分子系有機薄膜太陽電池」, 「ポリマーフロンティアシリーズNo.32 有機薄膜太陽電池」(株)エヌ・ティー・エス, pp. 1–32 (2010).

平本昌宏, 「有機太陽電池」, 「電子情報通信学会誌 Vol. 93(3)」, pp. 204–211 (2010).

平本昌宏, 「低分子系有機薄膜太陽電池の研究開発の現状と今後の動向」, 「太陽電池の基礎と応用」, 日本学術振興会次世代の太陽光発電システム175委員会, 小長井誠, 山口真史, 近藤道雄, 編著, 培風館, 第8章, 第4節, pp. 304–311 (2010).

平本昌宏, 「pin 有機太陽電池」(5 - 1章), 「超高純度化と太陽電池特性」(5 - 2章), 「有機半導体デバイス——基礎から最先端デバイスまで」, 学振大142委員会, オーム社, pp. 299–309 (2010).

平本昌宏, 「効率 10% が見え始めた有機薄膜太陽電池」, 特集: 分子相界面を活用した高機能デバイスの革新技术, 「化学と工業」**63(2)**, pp. 131–133 (2010).

平本昌宏, 「p-i-n 接合を用いた高効率有機薄膜太陽電池」, 「人工光合成と有機系太陽電池——最新の技術とその研究開発 最新の化学レビュー・シリーズ 第2巻」, 第II部 <Current Review> 研究最前線(第16章) 日本化学会編, 化学同人, pp. 149–153 (2010).

平本昌宏, 「有機系太陽電池——材料・技術動向と課題」, 「工業材料誌」, 特集 最新・太陽電池——普及拡大に向けた技術動向を探る, **Vol. 58 (No. 4)**, pp. 54–57 (2010).

平本昌宏, 「有機太陽電池」, 「レアメタル便覧」, 第21章太陽電池, 21.3節, 発行: 丸善(株)(2010).

平本昌宏, 「p-i-n 接合を持つ有機薄膜太陽電池」, 「エレクトロニクスシリーズ——有機薄膜太陽電池の開発動向」, 上原 吉川, 監修, シーエムシー出版, 第2章第3節, pp. 79–86 (2010).

B-4) 招待講演

M. HIRAMOTO, “Organic p-i-n Solar Cells Incorporating Seven-Nine Purified Fullerene,” The 5th International Workshop on Electronic Structure and Processes at Molecular-Based Interfaces (ESPMI-V), Chiba Univ., Chiba (Japan), January 2010.

M. HIRAMOTO, “Organic p-i-n Solar Cells Incorporating Seven-Nine Purified Fullerene,” The 37th International Symposium on Compound Semiconductors (ISCS2010), Takamatsu (Japan), May–June 2010.

M. HIRAMOTO, “Solar Cells Using Organic Semiconductors,” International Conference on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials (G-COE, Osaka, Univ.), Osaka Univ. Convention Center, Osaka (Japan), May–June 2010.

M. HIRAMOTO, “Organic p-i-n Solar Cells Incorporating Seven-nine Purified Fullerene,” 2010 International Symposium on Organic and Inorganic Electronic Materials and Related Nanotechnologies, Toyama (Japan), June 2010.

M. HIRAMOTO, “Organic p-i-n Solar Cells Incorporating Seven-nine Purified Fullerene,” FIRST Symposium on Organic Photovoltaics: Satellite Meeting of ICSM 2010, Kyoto University, Katsura Campus Funai Tetsuo Auditorium, July 2010.

平本昌宏,「エネルギー問題の解決は科学者の使命——次世代の太陽電池の話——」(一般聴衆に対するエネルギー問題の話)環境技術講座 Vol. 2, 岡崎商工会議所, 岡崎大学懇話会, 岡崎ものづくり推進協議会, コミュニティサテライトオフィス, 岡崎, 2010年1月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の現状と将来」色材セミナー「環境とエネルギー～太陽電池～」名古屋市工業研究所, 2010年3月.

池滝何以, 嘉治寿彦, 平本昌宏,「有機薄膜太陽電池のナノ構造制御」ATP (T7. 低炭素社会を実現する新エネルギー技術, C. 次世代太陽光発電技術)日本化学会第90回春季年会, 近畿大学, 2010年3月.

平本昌宏,「次世代太陽電池——有機太陽電池の現状と将来」岡崎ものづくり推進協議会「太陽電池ゼミナール」岡崎商工会議所, 岡崎, 2010年4月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の技術動向」専門セミナー3 次世代太陽電池——集光型, 有機薄膜型, 色素増感型太陽電池の最新動向——, PV-Japan 2010, 横浜(主催: SEMI, 太陽光発電協会, 後援: 経済産業省, 東京都, 横浜市, NEDO)パシフィコ横浜, 2010年6月-7月.

平本昌宏,「Hole-Transport Highway in Phthalocyanine: C₆₀ *i*-Interlayer」CREST 有機太陽電池シンポジウム——光・ナノ・バイオ技術から光電変換機能への展開——, 京都大学宇治構内おうばくプラザきほだホール, 京都, 2010年7月.

平本昌宏,「基礎から学ぶ有機太陽電池」2010年度印刷・情報記録・表示研究会基礎講座——基礎から学ぶ有機半導体材料・有機電子デバイス Part III——, 東京大学弥生講堂, 2010年7月.

平本昌宏,「低分子有機薄膜太陽電池の最近の進展」応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会講習会 有機太陽電池の開発最前線, 産総研臨海副都心センター, 2010年11月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の基礎と効率向上の方法」有機エレクトロニクス研究開発の最前線——分子技術からデバイス応用まで——, 大阪電子通信大学・エレクトロニクス基礎研究所, 2010年12月.

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).

Fifth International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics (M&BE5)(Miyazaki), Organization Committee Member (2009).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

科学技術交流財団(財)「有機半導体の基礎科学と有機太陽電池への応用に関する研究会」座長(2009–2011).

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).

さきがけ「太陽光と光電変換」研究領域 領域アドバイザー(2009–).

B-8) 大学での講義，客員

大阪大学ナノテク社会人教育プログラム第2コース，「有機薄膜太陽電池(I)(II)(ナノエレクトロニクス・ナノ材料学)」，2010年12月21日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(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).

科学技術振興機構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).

科学技術振興機構シーズ育成試験，「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).

科研費基盤研究(B)(2)，「有機半導体のイレブンナイン超高純度化による10%効率有機薄膜太陽電池の開発」平本昌宏(2009年–2010年).

科研費挑戦的萌芽研究，「直立超格子ナノ構造を組み込んだ高効率有機太陽電池」平本昌宏(2009年).

科学技術振興機構CREST研究「太陽光を利用した独創的クリーンエネルギー生成技術の創出研究領域」，「有機太陽電池のためのバンドギャップサイエンス」平本昌宏(2009年–).

B-11) 産学連携

共同研究(三菱化学)「蒸着法有機薄膜太陽電池」平本昌宏(2010年).

C) 研究活動の課題と展望

2009年10月にスタートしたCRESTプロジェクト「有機太陽電池のためのバンドギャップサイエンス」の遂行のために，今年度，CREST研究員4名(久保，新村，横山，大坪)を雇用し，現在，嘉治助教，石山(博士2年次)，中尾研究員，杉原(秘書)と私の5名とあわせ，9名のグループとなった。プロジェクトを強力に推進するため，グローブボックス内蔵蒸着装置1台，4

蒸着源蒸着装置3台を導入し、クリーンルーム内の蒸着設備を大幅に増強した。擬似太陽光源2台、AC ホール効果測定システム(1式)を導入し、太陽電池特性評価、有機半導体評価装置を増強した。今年度、研究室のactivity はほぼ軌道にのり、成果を定常的にアウトプットできる状態にすることができた。今後、よりactivity を高めるためには、インパクトのある成果を生み出して、次のプロジェクトにつなげること、及び、研究室のHP の充実、積極的な広報などを通じて、学生を確保して行くことが大事と考えている。

なお、嘉治助教が、低分子薄膜系太陽電池の世界的研究者であるChing Tang 教授(ロチェスター大、米国)に、3ヶ月間滞在し、その時の成果をもとに、共同研究を進めている。

有機薄膜太陽電池は、欧米を中心に世界的に競争が加速している。実用化の目安とされる効率10%も数年内に突破されることが確実である。私は、21世紀の基幹産業となる、エネルギー・環境分野において、有機薄膜太陽電池の実用化をその1つの解答として提示しようと考えている。有機薄膜太陽電池においては、有機半導体物性物理の確立という基礎研究にもとづいて、ブレイクスルーを起こし、その結果として、高効率化を達成していくことが求められる。基礎と応用の連携によって、基礎研究 - 実用化の間に横たわるデスバレーを突破しなければならない。

具体的研究テーマとして、以下の項目を強力に推進していく。 有機半導体をイレブンナインまで超高純度化し、ppm-ppbレベルの純度を精確に評価する技術の確立、 有機半導体のドーピングによるpn 制御技術の確立、 有機太陽電池の内蔵電界形成技術の確立、 厚膜セルにおけるセル内部抵抗の低減、 金属/有機オーミック接合形成技術の確立、 有機半導体物性評価法の確立、 現在パーコレーションに頼っている共蒸着i 層ナノ構造の設計・製作技術の確立、 近赤外を利用できる有機半導体、1 V 程度の開放端電圧を示す有機半導体の開発、など。数年内に、低分子系有機太陽電池の効率10%を目指す。

鈴木 敏 泰 (准教授) (1998 年 1 月 1 日着任)

A-1) 専門領域 : 有機合成化学

A-2) 研究課題 :

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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 最近, 京大化研・山子グループにより 8 個のベンゼン環がパラ位で共役・環化した [8] シクロパラフェニレンが報告された (S. Yamago, Y. Watanabe, and T. Iwamoto, *Angew. Chem., Int. Ed.* **49**, 757–759 (2010))。シクロパラフェニレン (CPP) は, 歪んだベンゼン環をもつシクロファン的一种である。従来のものと異なる点は, アルキル鎖がなく, 芳香環のみでできているため, π 共役が分子全体に広がっていることである。このため, ユニークな構造をもつ π 共役オリゴマーとして, 有機半導体デバイスへの応用が興味深い。本年度より, 山子グループとの共同研究において, 分子の昇華精製, 基本物性の測定, および結晶構造解析を行っている。通常の π 共役オリゴマーは, 分子が長くなるにつれて, HOMO が上昇することが知られている。しかしながら, CPP では, 分子が短いほど HOMO が高いことが DFT 計算によって示唆されている。[8] ~ [12] CPP のサイクリックボルタンメトリーを測定したところ, それぞれ可逆の 1 電子酸化が観測された。酸化電位は DFT 計算の結果とよい相関を示した。このため, イオン化ポテンシャルの最も高い [8] CPP は, p 型半導体として機能することが期待される。

B-1) 学術論文

S. L. WONG, H. HUANG, Y. L. HUANG, Y. Z. WANG, X. Y. GAO, T. SUZUKI, W. CHEN and A. T. S. WEE, “Effect of Fluorination on the Molecular Packing of Perfluoropentacene and Pentacene Ultrathin Films on Ag (111),” *J. Phys. Chem. C* **114**, 9356–9361 (2010).

B-3) 総説, 著書

阪元洋一, 「 n 型フッ素化アセン」, 「有機半導体デバイス——基礎から最先端材料・デバイスまで——」, オーム社, pp. 231–236 (2010).

B-4) 招待講演

鈴木敏泰, 「完全フッ素化による有機 n 型半導体の開発」, 第 42 回有機合成セミナー「時代を変える化学技術」, 大阪, 2010 年 10 月.

T. SUZUKI, “Perfluorinated Aromatic Compounds as Organic n-Type Semiconductors,” The 5th Taiwan–Japan Bilateral Symposium on Architecture of Functional Organic Molecules, Taipei (Taiwan), October 2010.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(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).

科研費奨励研究(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).

科研費基盤研究(B) (一般) 「有機トランジスタのためのn 型半導体の開発」 鈴木敏泰 (2002年–2003年).

科研費若手研究(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).

科研費若手研究(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

本年10月より, 京大化研・山子教授を代表者とするCREST 「超分子化学的アプローチによる環状 π 共役分子の創製とその機能」がスタートし, 共同研究者として参加することとなった。有機EL や有機トランジスタの材料開発において, π 共役分子の経験が豊富なところが期待されているのだと思う。これまで, 有機デバイスに使われている π 共役分子は直鎖型のものである。これが環化することによって, どのような固体構造を取るのか興味深い。アモルファスになるのか, 結晶になるのか, それとも分子構造により自由に制御できるのか, その点を見極めていきたい。我々はここ数年, 短いナノチューブの有機合成に取り組んでいる。これは, 今回のCREST のテーマとも合致するので, 今後ともその完成を目指していきたいと思う。

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) 二成分結合型配位子を用いた第一遷移金属錯体の構造と電気化学特性の制御
- b) 金属錯体と有機色素を用いた光励起電子移動系の開発と触媒反応への展開
- c) 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) ビビリジン・タービリジンの二成分結合型配位子のコバルト (II) 錯体と亜鉛ポルフィリンを含む系について，新しい光反応を見いだした。ポルフィリン・コバルト錯体連結化合物，もしくはポルフィリンとコバルト錯体の 1 : 1 混合物を触媒量添加し，ヒドロキノンと 3 級アミンを含む溶液を可視光で照射すると，対応するキノンが生成した。酸化剤となっているのは溶媒のクロロホルムであるが，ポルフィリン・コバルト錯体・光照射のいずれが欠けても反応は進行しないので，ポルフィリンの光励起電子移動によりコバルト (I) 化学種が発生し，これがクロロホルムと反応することで後続反応が進行すると考えられる。
- b) 有機色素として，これまでのポルフィリンに加えてフタロシアニンに着手した。フタロシアニンは一般的に溶解性の悪さが課題であるが，かさ高い疎水性置換基を 8 つ導入することで，ヘキサン等を含む広範囲の有機溶媒に可溶なフタロシアニンを合成できた。亜鉛錯体とフリーベース体のそれぞれについて蛍光発光測定，電気化学測定を行い，ポルフィリンに比べて酸化還元を受けやすい一方，励起エネルギーが低いことを確認した。キノンとチオフェノール共存下で可視光を照射し，キノンをヒドロキノンに変換する光反応がポルフィリンと同様に進行することを見いだした。ただし，ポルフィリンよりも低い励起エネルギー（亜鉛ポルフィリン：2.1 eV，亜鉛フタロシアニン：1.8 eV）で反応が進行することは注目に値する。
- c) これまで展開してきたキノンプールの化学をさらに拡張するため，剛直なベンズアミド系デンドリマー骨格を用いたキノンプール分子の合成を行った。酸化還元電位の異なるキノンを位置特異的に導入するため，キノンの保護基および合成手順について吟味を加え，2 種類の異なるキノンを持つキノンプールの分子の合成に成功した。

B-1) 学術論文

H. OZAWA, M. KAWAO, T. NAGATA, S. UNO and K. NAKAZATO, "Fabrication of Microspheres from Phthalimide-Substituted Porphyrin Derivatives," *Chem. -Asian J.* 5, 2393-2399 (2010).

T. NISHINO, R. NEGISHI, M. KAWAO, T. NAGATA, H. OZAWA and K. ISHIBASHI, "The Fabrication and Single Electron Transport of Au Nano-Particles Placed between Nb Nanogap Electrodes," *Nanotechnology* 21, 225301 (6 pages) (2010).

H. UOYAMA, K. S. KIM, K. KUROKI, J.-Y. SHIN, T. NAGATA, T. OKUJIMA, H. YAMADA, N. ONO, D. KIM and H. UNO, "Highly Pure Synthesis, Spectral Assignments, and Two-Photon Properties of Cruciform Porphyrin Pentamers Fused with Benzene Units," *Chem. -Eur. J.* 16, 4063-4074 (2010).

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).

The 70th Okazaki Conference “Molecular Mechanism of Photosynthetic Energy Conversion: The Present Research and Future Prospects” 組織委員 (2010).

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」2010年7月.

B-10) 競争的資金

科研費萌芽研究, 「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).

科研費特定領域研究(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).

科研費基盤研究(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).

科研費新学術領域研究(研究課題提案型), 「ヘテロ複核金属錯体を触媒として用いる二酸化炭素の資源化」永田 央 (2009年–2011年).

科研費基盤研究(C), 「時系列外部刺激を用いた分子機能の動的制御」永田 央 (2010年–2012年).

C) 研究活動の課題と展望

本年度は、コバルト錯体とポルフィリンを用いた新しい光反応を見いだしたことが最も大きな進歩であった(課題(a)). この反応は、ヒドロキノン電子源として還元反応を駆動するものであり、先に開発したキノンの光還元と合わせて、形式的には光合成のZ-スキームを構成する素反応が出揃ったことになる。ただし、現状では酸化側・還元側とも反応自体が無価値なことが問題である。酸化側は水の酸化を、還元側は二酸化炭素の還元を最終目標とすべきであり、そのための分子触媒の開発を続ける必要がある。

また、生体内の化学エネルギー変換には、光/化学の他にも重要で興味深いものが多い。とりわけ興味深いのは、シトクロム b_6f やATP合成酵素に見られる分子内の大きな構造変化である。合成分子でこのような系に近づくにはどのようなアプローチが有効か、検討を始めているところであり、今後の研究につなげていきたい。

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「バッキーボール」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
- c) 上記2手法を組み合わせた、ナノチューブの単一組成合成の試み

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) お椀型共役化合物「バッキーボール」は、フラーレン・単一組成カーボンナノチューブ合成達成への鍵物質として、あるいはそれ自身の特異な物理的性質を利用した新規物質の基本骨格として魅力的な化合物群である。我々はバッキーボールの「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、 C_3 対称官能化バッキーボールの一般的合成手法の確立を達成した。また、含窒素ヘテラバッキーボールの合成経路を確立することに成功した。さらに、キラルバッキーボールの光学分割法の開発にも成功し、これにより、当研究室で既に開発しているキラルバッキーボールの不斉合成法を合わせ、バッキーボールのキラリティ制御の手法を確立した。
- b) ナノメートルサイズの金属クラスターはバルク金属とも単核金属錯体とも異なる特性を示し、従来にない触媒の開発が期待される。特に金属表面と分子との相互作用が弱く、バルクにおける触媒活性がない金のクラスターに注目して研究を行っている。今年度の研究においては、金クラスターの空気酸化触媒活性評価の一環として、アミンとアルコール、あるいはアルデヒドからの直接アミド合成法の開発に成功した。また、金クラスターの保護高分子として、生体分子由来のキトサンが有効であり、酸性水溶液条件における有機ホウ素化合物の選択的ホモカップリング反応に対して極めて触媒活性が高いことを明らかにした。さらには、金-パラジウムなどの2原子系合金クラスターに注目し、単原子系との触媒活性の違いについて系統的な研究を行っている。その一例として、グリセロール酸化においては、Au 単原子系の場合、炭素結合解裂を伴わない生成物が主生成物であるが、Au/Pd においては、炭素結合解裂が進行し、2炭素系生成物であるコハク酸が主生成物として得られることを明らかにした。

B-1) 学術論文

H. KITAHARA and H. SAKURAI, "Gold Nanocluster as a Catalyst for Intramolecular Addition of Primary Amines to Unactivated Alkenes under Aerobic Conditions," *Chem. Lett.* **39**, 46–48 (2010).

R. TSURUOKA, S. HIGASHIBAYASHI, T. ISHIKAWA, S. TOYOTA and H. SAKURAI, "Optical Resolution of Chiral Buckybowls by Chiral HPLC," *Chem. Lett.* **39**, 646–647 (2010).

S. HIGASHIBAYASHI, A. F. G. M. REZA and H. SAKURAI, "Stereoselective Cyclotrimerization of Enantiopure Iodonorborenes Catalyzed by Pd Nanoclusters for C_3 or C_{3v} Symmetric *syn*-Tris(norborneno)benzenes," *J. Org. Chem.* **75**, 4626–4628 (2010).

H. SAKURAI, I. KAMIYA and H. KITAHARA, "Formal Lewis Acidic Character of Gold Nanocluster Catalyst," *Pure Appl. Chem.* **82**, 2005–2016 (2010).

P. PREEDASURIYACHAI, H. KITAHARA, W. CHAVASIRI and H. SAKURAI, “*N*-Formylation of Amines Catalyzed by Nanogold Under Aerobic Oxidation Conditions with MeOH or Formalin,” *Chem. Lett.* **39**, 1174–1176 (2010).

B-3) 総説，著書

東林修平, 「飛翔する若手研究者：おわん分子の化学」*化学と工業* **63**, 978 (2010).

B-4) 招待講演

H. SAKURAI, “Hidehiro Sakurai, “Gold is Green: Nano-Sized Gold as a Unique Catalyst under Ambient Condition,” Department Seminar, De La Salle University, Manila (Philippines), February 2010.

H. SAKURAI, “Gold is Green: Nano-Sized Gold as a Unique Catalyst under Ambient Condition,” Department Seminar, University of Santo Tomas, Manila (Philippines), February 2010.

H. SAKURAI, “Gold is Green: Nano-Sized Gold as a Unique Catalyst under Ambient Condition,” Department Seminar, University of Philippines Diliman, Quezon (Philippines), February 2010.

H. SAKURAI, “Gold is Green: Nano-Sized Gold as a Unique Catalyst under Ambient Condition,” Department Seminar, Ateneo de Manila University, Quezon (Philippines), February 2010.

東林修平, 「 C_3 対称バッキーボウルの液相合成法の開発」日本化学会第90春季年会, 東大阪, 2010年3月.

H. SAKURAI, “Gold Nanocluster as a Unique Catalyst under Aerobic Condition,” 25th Philippine Chemistry Congress, Subic (Philippines), April 2010.

S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI, “Cyclotrimerization of Haloalkenes Catalyzed by Pd Nanoclusters and its Application to Asymmetric Synthesis of Chiral Buckybowls,” Inaugural (1st) International Conference on Molecular & Functional Catalysis (ICMFC-1), Singapore (Singapore), July 2010.

H. SAKURAI, “Colloidal Nano GOLD as a Unique *quasi*-Homogeneous Catalyst,” Department Seminar, Indian Association for the Cultivation of Science, Kolkata (India), July 2010.

H. SAKURAI, “Synthetic Strategy to Construct C_3 Symmetric Buckybowls, Bowl-Shaped Aromatic Compounds,” Department Seminar, Indian Institute of Technology-Kharagpur, Kharagpur (India), July 2010.

H. SAKURAI, “Synthetic Strategy to Construct C_3 Symmetric Buckybowls, Bowl-Shaped Aromatic Compounds,” Department Seminar, Indian Institute of Science, Education and Research -Kolkata, Mohanpur Nadia (India), July 2010.

H. SAKURAI, “Asymmetric Synthesis of Chiral Buckybowls,” Organic Synthesis and Human Well Being: Emerging Opportunities and Challenges, Hyderabad (India), August 2010.

H. SAKURAI, “Gold is Green: Nano-Sized Gold as a Unique Catalyst under Ambient Condition,” Department Seminar, Universiti Sains Malaysia, Penang (Malaysia), August 2010.

H. SAKURAI, “Gold is Green: Nano-Sized Gold as a Unique Catalyst under Ambient Condition,” Department Seminar, Universiti Putra Malaysia, Selangor Darul Ehsan (Malaysia), August 2010.

H. SAKURAI, “Gold is Green: Nano-Sized Gold as a Unique Catalyst under Ambient Condition,” Department Seminar, Universiti Kebangsaan Malaysia, Selangor Darul Ehsan (Malaysia), August 2010.

H. SAKURAI, “Colloidal Nanogold as a Catalyst for Intramolecular Heterocyclization under Aerobic Conditions,” China–Japan Symposium on Catalytic Organic Synthesis, Tianjin (China), September 2010.

H. SAKURAI, “Synthetic Strategy to Construct C_3 Symmetric Buckybowls, Bowl-Shaped Aromatic Compounds,” Department Seminar, Wuhan University, Wuhan (China), October 2010.

H. SAKURAI, “Bowl Chirality,” 6th IUPAC International Symposium on Novel Materials and their Synthesis and 20th International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers, Wuhan (China), October 2010.

H. SAKURAI, “Synthetic Strategy to Construct C_3 Symmetric Buckybowls, Bowl-Shaped Aromatic Compounds,” Department Seminar, Chulabhorn Research Institute, Bangkok (Thailand), October 2010.

H. SAKURAI, “Synthetic Strategy to Construct C_3 Symmetric Buckybowls, Bowl-Shaped Aromatic Compounds,” National Organic Symposium Trust XIV Organic Chemistry Conference, Goa (India), December 2010.

H. SAKURAI, “Synthetic Strategy to Construct C_3 Symmetric Buckybowls, Bowl-Shaped Aromatic Compounds,” Department Seminar, University of Delhi, Delhi (India), December 2010.

B-6) 受賞，表彰

櫻井英博, 有機合成化学協会研究企画賞 (2002).

東林修平, 天然物化学談話会奨励賞 (2005).

東林修平, 第24回若い世代の特別講演会 (2010).

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 (2008–2009).

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 (2008–2010).

JASSO-21世紀東アジア青少年大交流計画(JENESYS)に基づくアセアン及び東アジア諸国等を対象とした学生交流支援事業 コーディネーター (2010–).

B-8) 大学での講義，客員

北海道大学触媒化学研究センター，学外研究協力教員，2009年–2010年.

名古屋工業大学大学院工学研究科，「未来材料創成工学特別講義」2010年7月21日.

総合研究大学院大学物理科学研究科，総研大海外レクチャー@バンコク「Buckybowl: Bowl-Shaped Aromatic Compound」2010年10月20日–21日.

B-9) 学位授与

北原宏朗, “Novel Catalytic Activity of Gold Nanoclusters,” 2010年3月, 博士(理学)

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(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).

科研費特定領域研究(公募研究)「動的カルベン錯体の設計と機能」 櫻井英博 (2003年).

科研費特定領域研究(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).
 科研費特定領域研究(公募研究)「バッキーボウルの自在構築」櫻井英博(2006年–2008年).
 科研費特定領域研究(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).
 科研費特定領域研究(公募研究)「金ナノクラスターの触媒活性を実現するためのマトリクス開発」櫻井英博(2006年–2007年).
 科研費若手研究(B)「キラル・ヘテロバッキーボウル類の合成」東林修平(2008年–2009年).
 科研費基盤研究(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).
 科研費新学術領域研究(研究領域提案型)「精密有機合成によるカーボン π 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).
 科学技術振興機構さきがけ研究「有機化学手法によるカーボンナノチューブのキラリティ制御」櫻井英博(2007年–2010年).
 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).
 住友財団基礎科学研究助成「 C_3 対称曲面 π 共役系拡張バッキーボウルの合成」東林修平(2009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、数年来の課題であった、 C_3 対称バッキーボウルの一般的合成法および含窒素ヘテロバッキーボウルの合成をほぼ完成させることができた。担当した研究者に敬意を表したい。また、合目的な分子デザインが可能となってきたことで、物性評価に関する共同研究を順次開始しており、次の展開が期待されるところである。昨年も指摘したが、合成面では「通常の」有機合成と「ナノ」サイエンスのギャップ領域に入ってきており、新たな方法論の創出の必要性がいよいよ顕在化してきつつある。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実用的側面の他に、多元素系の合金クラスターに関する基礎研究がスタートした。従来の常識を覆す新反応が見つかってきており、この「新現象の宝庫」を充分堪能し、本質的な反応過程の理解を深めていきたい。

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。また、JENESYS プログラム等を通じて、特に展開研究に関して我々の研究を広め、多くの研究者の参加を促していきたいと思う。

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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 本研究では「逐次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」を目指し，各種基本分子パーツの開発，及びそれらパーツ群の精密接合プロセスの開拓を系統的に進めている。今年度は懸案の課題（理論的分子設計指針が出るのを期待していたのだが……），即ち「トンネル接合と静電接合の作り分け」を自在に行うための分子設計論について集中的に検討を行った。まず「電荷が系全体に非局在化し易いタイプのパイ共役鎖」と絶縁部位とからなる多端子接合系を各種合成した。また，これと対極的なシステムとして，「共役鎖の両端に電荷が集中するタイプのパイ共役鎖」を導入した多端子接合系も合成した。さらに現在，それらの間を埋める分子群として，両者のハイブリッドタイプの合成を進めている。あとは被計測分子の実空間観測が可能な多端子計測系の開発を待って，分子サイズや形状，また局所電子構造の調整・最適化を行う段取りである（いつまで待てばいいのだろうか？）なお，単一分子鎖の導電特性に関する共同研究（阪大・夢田 G）については，単一分子伝導度の温度変化についての実験データが得られ，トンネル伝導からポラロン伝導へ遷移する分子鎖長が明確となった。この知見は，分子パーツ群のサイズを規格化するための基本データであり，単一分子内集積化を実現するための足場の一つとなるものである。

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

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(B),「単電子/正孔トンネルデバイス回路の単一分子内集積化のための分子開発」田中彰治 (2010年–2012年).

C) 研究活動の課題と展望

今、本研究で最も必要とするのは、規格外の分子をきちんと取り扱うことのできる単一分子物性研究者である。しかし、非周期的・定序配列型の巨大パイ共役分子が構築可能になったのがつい最近なので、そもそも実技指導者が皆無である。しかたがないので、単一分子伝導度計測済みの分子セット(1–20 nm)を、学部生あたりの練習用にばらまいて(委託合成を頼むと数千万円はとられるぞよ)、彼らの成長を気長に待つことにしよう。できれば、将来復活するであろう。研の「科学」の付録に、STMと一緒につけたいものである。

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開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 以前より，4,4'-ピピリジン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，1,2,5-チアジアゾール-3,4-ジカルボン酸-4,4'-ピピリジン (2:1) 錯体の結晶構造中に分子間 O-H $\cdots$ N と S $\cdots$ O 相互作用により形成されるユニークな二次元ラダー型分子ネットワーク構造を見出した。この分子ラダーはインターペネトレーションが見られず二次元的にスタックしている。これは分子間ヘテロ原子相互作用で構築された分子ラダー構造の初めての例である。
- b) ジフェニルアミノフェニル基と *tert*-ブチル基を持つシアノアクリル酸誘導体とピチオフェンあるいはターチオフェン骨格を持つホウ素錯体を合成・開発し，その構造ならびに有機電子材料としての応用について検討した。前者の分子は *tert*-ブチル基を持たないものより効率の高い色素増感型太陽電池を与えた。後者は新しいタイプの電子アクセプター分子であり，これを用いた OFET デバイスにおいて優れた n 型半導体特性を示した。

B-1) 学術論文

M. TOMURA and Y. YAMASHITA, "A Two-Dimensional Ladder-Type Network in the 2:1 Co-Crystal of 1,2,5-Thiadiazole-3,4-dicarboxylic Acid and 4,4'-Bipyridine," *Struct. Chem.* **21**, 107–111 (2010).

K. ONO, T. YAMAGUCHI and M. TOMURA, "Structure and Photovoltaic Properties of (*E*)-2-Cyano-3-[4-(diphenyl-amino)phenyl]-acrylic Acid Substituted by *tert*-Butyl Groups," *Chem. Lett.* **39**, 864–866 (2010).

K. ONO, A. NAKASHIMA, Y. TSUJI, T. KINOSHITA, M. TOMURA, J. NISHIDA and Y. YAMASHITA, "Synthesis and Properties of Terthiophene and Bithiophene Functionalized by BF₂ Chelation: A New Type of Electron Acceptor Based on Quadrupolar Structure," *Chem. –Eur. J.* **16**, 13539–13546 (2010).

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 $\cdots$ π 相互作用・立体障害といった新しいツールによる分子集合体設計，特に，格子状有機超分子構造体の構築に取り組みたい。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ヒューリスティックな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) ヘム含有型気体分子センサータンパク質の構造と機能に関する研究
- b) ヘムをシグナル分子とする新規な転写調節因子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) 緑膿菌 (*Pseudomonas aeruginosa*) の酸素に対する走化性 (Aerotaxis) 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 Aer2 タンパク質が、ヘムを活性中心とする新規な酸素センサータンパク質であることを見出した。Aer2 タンパク質では、分子中に存在する PAS ドメインがセンサードメインとして機能しており、PAS ドメイン中にヘムが含まれていることが分かった。ヘム含有 PAS ドメインを有するセンサータンパク質は、これまでにいくつか報告されている。代表的なものとして、FixL, EcDOS などがある。これらのヘム含有 PAS ドメインと Aer2 の PAS ドメインのアミノ酸配列を比較すると、Aer2 のアミノ酸配列中で、FixL, EcDOS においてヘム近位側軸配位子として機能している His に対応する位置に His (His234) が保存されている。His234 を Ala に置換した H234A 変異体は、ヘムをほとんど含まないアポ体として発現することが分かった。これらの結果より、Aer2 では His234 がヘム近位側軸配位子として機能していると考えられる。共鳴ラマン分光法を用いて Aer2 のヘム近傍構造の解析を行い、ヘムに配位した酸素あるいは一酸化炭素と相互作用するアミノ酸残基の同定を行った。
- b) 乳酸菌 (*Lactococcus lactis*) はヘム生合成系を欠損しているが、外部からヘム分子を取込むことにより酸素呼吸により生育可能である。しかし、必要量以上に取り込まれたヘム分子は、活性酸素産生などにより細胞毒性を示すため、細胞内のヘム濃度は厳密な制御を受けている。本年度の研究において、YgfC タンパク質が乳酸菌細胞内のヘム濃度制御に重要な役割を果たしていることを明らかにした。YgfC は、ヘムをシグナル分子 (エフェクター分子) とする転写調節因子であり、その DNA 結合活性がヘムの有無により制御されていることを明らかにした。ヘムを含まないアポ型 YgfC は、DNA 結合活性を有しており、リプレッサーとして機能していると考えられる。一方、ヘムが結合することにより、YgfC は DNA 結合活性を失うことが分かった。

B-1) 学術論文

H. SAWAI, S. YOSHIOKA, T. UCHIDA, M. HYODO, Y. HAYAKAWA, K. ISHIMORI and S. AONO, "Molecular Oxygen Regulates the Enzymatic Activity of a Heme-Containing Diguanylate Cyclase (HemDGC) for the Synthesis of Cyclic Di-GMP," *Biochim. Biophys. Acta, Proteins Proteomics* **1804**, 166–172 (2010).

H. NAKAJIMA, N. TAKATANI, K. YOSHIMURA, M. ITO, S. AONO, Y. TAKAHASHI and Y. WATANABE, "The Role of the Fe-S Cluster in the Sensory Domain of Nitrogenase Transcriptional Activator VnfA from *Azotobacter vinelandii*," *FEBS J.* **277**, 817–832 (2010).

B-4) 招待講演

S. AONO, "A new oxygen sensor protein adopting a heme-containing PAS domain as a sensor for aerotaxis control," Pacificchem 2010, Honolulu (U.S.A.), December 2010.

S. AONO, "Trap of the Michaelis Complex of a Novel Heme Enzyme, Aldox Dehydratase," 6th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-6), New Mexico (U.S.A.), July 2010.

澤井仁美, 杉本宏, 加藤康夫, 浅野泰久, 城宜嗣, 青野重利, 「ヘム蛋白質の新規な構造と機能: アルドキシム脱水酵素の活性制御機構」日本蛋白質科学会2010年度年会, 札幌, 2010年6月.

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–).

日本化学会東海支部常任幹事 (2009–2010).

学会の組織委員等

第14回国際生物無機化学会議組織委員会総務委員長 (2009).

Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences—Experiments and Simulations 組織委員 (2008–2010).

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).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2010–).

学会誌編集委員

J. Biol. Inorg. Chem., Editorial Advisory Board (2002–2004).

Biosensors, Editorial Board (2010–).

B-10) 競争的資金

科研費特定領域研究(公募研究)「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).

科研費基盤研究(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).

科研費特定領域研究(計画研究)「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).

科研費基盤研究(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).

科研費萌芽研究「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).

東レ科学振興会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).

科研費基盤研究(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).

科研費若手研究(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).

科研費特定領域研究(公募研究)「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).

内藤記念科学振興財団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).

科研費若手研究(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).

科研費基盤研究(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).

科研費特別研究員奨励費「ヘムを活性中心とする気体センサータンパク質の構造と機能の相関」澤井仁美(2007年–2009年).

科研費特定領域研究(公募研究)「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–2010年).

科研費若手研究(スタートアップ)「ヘム結晶化の分子機構解明」石川春人(2009年).

科研費研究活動スタート支援「ヘム含有PASドメインをセンサーとする新規なシグナル伝達タンパク質の構造と機能」澤井仁美(2010年–2011年).

C) 研究活動の課題と展望

近年,酸素(O_2),一酸化炭素(CO),一酸化窒素(NO)などの気体分子が生理的なエフェクター分子として機能し,遺伝子発現制御,走化性制御,セカンドメッセンジャー(cyclic di-GMP)の合成/分解制御など様々な生理機能制御に関与していることが報告され,気体分子の新規生理機能として大きな注目を集めている。当研究室では,これら気体分子が生理機能を発揮するために必要不可欠な気体分子センサータンパク質を研究対象とし,それらの構造機能相関ならびに機能発現機構を分子レベルで明らかにすることを目的として研究を進めている。今後は,構造生物学的な実験手法を活用し,これら気体分子センサータンパク質のより詳細な構造機能相関解明を進めるとともに,気体分子以外の小分子,金属イオン等のセンサータンパク質に関する研究にも取組みたいと考えている。

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 ラクトアルブミンのモルテン・グロビュール状態の特性と生物機能
- b) ヒト及びヤギ α ラクトアルブミン変異体の結晶構造解析
- c) OspA のフォールディング機構
- d) 大腸菌シャペロニン GroEL の ATP 結合の速度論
- e) GroEL/GroES 複合体の構造揺らぎと生物機能
- f) tRNA メチル基転移酵素の前定常状態速度論

A-3) 研究活動の概要と主な成果

- a) 腫瘍細胞選択的細胞死活性を持つ α ラクトアルブミン - 脂肪酸 (オレイン酸) 複合体は，蛋白質のフォールディング中間体 (モルテン・グロビュール) が脂肪酸と複合体を形成することによって新規な生物活性を発現する例であり，活性発現の分子機構に興味を持たれる。NMR を用いた昨年度までの研究で，ヤギとヒト α ラクトアルブミンのオレイン酸結合部位の同定に成功している。本年は，ヤギ α ラクトアルブミン - 脂肪酸複合体のオリゴマー形成を磁場勾配 NMR 法を用いて解析した。その結果，生理的条件下では複合体のモノマーと 10 量体程度のオリゴマーが共存していた。
- b) 大腸菌中で発現した組換え体 α ラクトアルブミンは乳より調製した真性体よりも著しく不安定であり，不安定化の分子機構に興味を持たれる。そこで，本年は，ヤギ α ラクトアルブミン N 末端残基欠失変異体 (E1M) と組み換え型ヒト α ラクトアルブミンの結晶構造を，それぞれ 1.60 Å, 1.81 Å の分解能で決定した。E1M の立体構造は真性体ヤギ α ラクトアルブミンの立体構造とほぼ一致していた。一方，組み換え型ヒト α ラクトアルブミンの立体構造は，N 末端領域のみが真性体とは顕著に異なっていた。昨年度までのヒト α ラクトアルブミン変異体 (K1M) の結果も含めて，ヤギおよびヒト α ラクトアルブミン組換え体は，いずれも，N 末端への Met 残基付加によって，N 末端域に局在化した立体構造変化が起こる，このような立体構造変化が蛋白質を著しく不安定化させる，N 末端残基欠失変異体 (E1M と K1M) では Met 残基付加によって N 末端の位置が真性体の位置に戻るため，立体構造も真性体の構造に戻り，安定性も回復することが分かった。
- c) ボレリア菌由来 Outer Surface Protein A (OspA) は N 末端ドメインと C 末端ドメイン間に単層 β シート領域を持つ特徴的な双ドメイン蛋白質であり， β シートそのものの物理化学的特性を調べる上で有用なモデルである。OspA のフォールディング機構を明らかにするため，尿素による変性状態からの巻き戻り反応をストップフロー法により調査している。昨年のストップフロー蛍光スペクトルによる解析に引き続き ストップフロー円二色性 (CD) を用いた解析を行った。巻き戻り反応に伴う CD 変化は 2 つの指数関数で表され，N 末端ドメインのみが形成した経路上の中間体を経由する，三状態の巻き戻り過程であることが明らかとなった。
- d) 大腸菌のシャペロニン GroEL は代表的な分子シャペロンであり 二重リング構造を持つ 14 量体の超分子複合体である。GroEL は ATP-Mg²⁺ との結合に伴って協同的な構造転移 (アロステリック転移) を示し，この転移がその機能発現にとって重要である。GroEL にトリプトファン残基を導入した変異体 (Y485W) の蛍光スペクトルを利用して，その ATP-Mg²⁺ 結合とアロステリック転移の速度論的な研究を行っている。本年は，蛍光ストップフロー法を用いて Y485W の

ATP-Mg²⁺ 結合過程を測定した。K⁺ 非存在下で、ATP-Mg²⁺ の結合に伴う蛍光強度変化が観察された。この反応は二分子反応として良く表され、結合と解離の反応速度定数を決定することが出来た。これらの速度定数から求められた結合定数は、等温滴定型熱量計により決定した結合定数と一致した。結合速度定数のアイリングプロットから求めた活性化エンタルピーは 14–15 kcal/mol と十分大きいので、ATP-Mg²⁺ の GroEL への結合は、拡散律速的な遭遇複合体形成の後、高エネルギーの遷移状態を通して進行することが分かった。

- e) シャペロニン複合体 GroEL/GroES の構造揺らぎと機能発現との関係を明らかにするために水素 / 重水素 (H/D) 交換二次元 NMR を用いた研究を行っている。本年は GroES 単独での H/D 交換反応を TROSY-NMR 法を用いて追跡した。結果、モバイルループ領域の大きな構造揺らぎが観察された。しかし、交換速度が速いため、DMSO 停止 H/D 交換二次元 NMR 法による測定結果と合わせて解析する必要があり、現在、その測定を進めている。
- f) tRNA (Gm18) メチル基転移酵素 (TrmH) は、S アデノシルメチオニンから tRNA の G18 へのメチル基転移を触媒する。酵素反応速度論、ゲルシフトアッセイ、さまざまな tRNA^{Phe} 変異体を用いた阻害実験などから、高度好熱菌 *Thermus thermophilus* の TrmH によるグアニン塩基認識部位の柔軟性や、認識部位の原子団に関する知見が得られていた。酵素による基質認識の分子機構をさらに明らかにするため、ストップフロー蛍光スペクトルを用いて、前定常状態における酵素反応の速度論的解析を行った。その結果、TrmH と tRNA との結合反応は少なくとも 3 段階より成り、最初の 2 分子結合反応の後、2 段の 1 分子反応的な誘導適合 (induced-fit) 過程の起こることが分かった。

B-1) 学術論文

T. KANZAKI, S. USHIOKU, A. NAKAGAWA, T. OKA, K. TAKAHASHI, T. NAKAMURA, K. KUWAJIMA, A. YAMAGISHI and M. YOHDA, “Adaptation of a Hyperthermophilic Group II Chaperonin to Relatively Moderate Temperatures,” *Protein Eng., Des. Sel.* **23**, 393–402 (2010).

T. NAKAMURA, K. MAKABE, K. TOMOYORI, K. MAKI, A. MUKAIYAMA and K. KUWAJIMA, “Different Folding Pathways Taken by Highly Homologous Proteins, Goat α -Lactalbumin and Canine Milk Lysozyme,” *J. Mol. Biol.* **396**, 1361–1378 (2010).

A. OCHI, K. MAKABE, K. KUWAJIMA and H. HORI, “Flexible Recognition of the tRNA G18 Methylation Target Site by TrmH Methyltransferase through First Binding and Induced Fit Processes,” *J. Biol. Chem.* **285**, 9018–9029 (2010).

B-3) 総説、著書

中村敬, 真壁幸樹, 桑島邦博, 「何がタンパク質のフォールディング経路を決めるのか?」*MedicalBio* 10月別冊「揺らぎと生体機能」寺嶋正秀監修, オーム社, pp. 49–54 (2010).

B-4) 招待講演

K. KUWAJIMA, “Hydrogen-exchange kinetics of the *Escherichia coli* chaperonin complex,” 2nd Japan–Korea Seminar on Biomolecular Science—Experiments and Simulations (Asian Core Program by JSPS), Symposium Hall, Nagoya University, December 2009.

K. MAKABE, “Role of the Main-Chain Hydrogen Bonding in β -Sheet Register,” 2nd Japan–Korea Seminar on Biomolecular Sciences—Experiments and Simulations (Asian Core Program by JSPS), Symposium Hall, Nagoya University, December 2009.

T. NAKAMURA, “The molten globule state and its biological function in α -lactalbumin,” 2nd Japan–Korea Seminar on Biomolecular Sciences—Experiments and Simulations (Asian Core Program by JSPS), Symposium Hall, Nagoya University, December 2009.

J. CHEN, “A Potassium Switch of ATP-Induced GroEL Conformational Changes,” 2nd Japan–Korea Seminar on Biomolecular Sciences—Experiments and Simulations (Asian Core Program by JSPS), Symposium Hall, Nagoya University, December 2009.

K. KUWAJIMA, “Molecular mechanisms of protein folding,” 2010 Annual Meeting of Asian CORE Program “Frontiers of Materials, Photo-, and Theoretical Molecular Sciences,” Institute of Atomic and Molecular Sciences, Academia Sinica, Taipei (Taiwan), February–March 2010.

K. KUWAJIMA, “Is the Folding Pathway Conserved in Homologous Proteins?” Bit Life Science’s 3rd Annual Protein and Peptide Conference “After a Solution of the Machines of Life,” Beijing International Convention Center, Beijing (China), March 2010.

桑島邦博, 「蛋白質フォールディング問題とバイオサイエンス」 蛋白研 - 統合バイオ共同セミナー, 大阪大学蛋白質研究所, 2010年4月.

K. KUWAJIMA, “Identification of fatty-acid binding site in the anti-tumor complex of α -lactalbumin by 920-MHz NMR spectroscopy,” IPR Seminar “Cooperation in Protein Science between Asian and Pacific Countries,” the Institute for Protein Research, Osaka University, June 2010.

桑島邦博, 「蛋白質フォールディング経路の速度論的理解」 2010年日本物理学会秋季大会シンポジウム「揺らぎが決める生体分子の構造形成と機能発現」 大阪府立大学・中百舌鳥キャンパス, 2010年9月.

K. KUWAJIMA, “Identification of fatty-acid binding site in the anti-tumor complex of α -lactalbumin by 920-MHz NMR spectroscopy,” The 10th KIAS Conference on Protein Structure and Function, Korea Institute for Advanced Study (KIAS), Seoul (Korea), September–October 2010.

J. CHEN, “Alpha-crystallin domain assembly and GroEL dynamics,” Workshop on Recent Advances in Protein Folding and Molecular Chaperones, Institute of Biophysics, Chinese Academy of Sciences, Beijing (China), October 2010.

K. KUWAJIMA, “Molecular Mechanisms of Protein Folding,” The Overseas Sokendai Lecture in Bangkok FY2010 & The Inaugural CU-IMS Joint Symposium, Chulalongkorn University, Bangkok (Thailand), October 2010.

B-6) 受賞, 表彰

真壁幸樹, 2009年度日本蛋白質科学会若手奨励賞 (2009).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本蛋白質科学会会長 (2010–).

日本蛋白質科学会副会長 (2008–2009).

日本生物物理学会中部支部長 (2009–).

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

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2009, 2010).

文部科学省科学研究費審査部会専門委員会委員 (2002, 2004, 2009).

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 Board (1993–).

J. Mol. Biol., Associate Editor (2004–).

BIOPHYSICS, Associate Editor (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

総合研究大学院大学物理科学研究科長 (2008.4–2010.3).

大阪大学蛋白質研究所外部評価委員 (2000, 2007).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(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).

科研費特定領域研究「蛋白質一生」(公募研究)「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).

科研費特定領域研究「ゲノム情報科学」(公募研究)「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).

科研費特定領域研究「水と生体分子」(計画研究(2))「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).

科研費特定領域研究「水と生体分子」(計画研究(1))「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).

科研費基盤研究(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).

科研費特定領域研究(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).

科研費基盤研究(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–2010年).

科研費新学術領域「揺らぎと生体機能」(計画研究)「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–).

科研費若手研究(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」真壁幸樹 (2008年–2009年).

科研費基盤研究(S) 分担(代表 東北大学大学院 熊谷泉)「ナノ世界のインターフェースとしてのタンパク質工学的デザイン学」真壁幸樹 (2010年–).

アステラス病態代謝研究会,「蛋白質工学的なアプローチによるアミロイドの基本骨格構造形成の物理化学的基盤の解明」真壁幸樹 (2010年–2011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。現在までの研究から,われわれはヤギ α ラクトアルブミン-オレイン酸複合体(GAMLET)とヒト α ラクトアルブミン-オレイン酸複合体(HAMLET)を二次元NMRを用いて調べ,それぞれの蛋白質でオレイン酸結合部位を同定することに成功している。今後は,水素/重水素(H/D)交換二次元NMR法の手法を用いて,GAMLETとHAMLETの複合体の構造揺らぎを調べ,構造揺らぎと複合体の抗腫瘍活性との関連性について調べる。複合体の状態でのH/D交換反応を行なった後,DMSOで反応を停止し,ペプチドアミドプロトンの交換挙動を二次元NMRを用いて追跡する。このようにして得られた複合体の蛋白質部分のH/D交換プロフィールを,遊離した α ラクトアルブミンのモルテン・グロビュール状態のH/D交換プロフィールと比較し,両者で構造揺らぎに大きな違いがあるか否か,またあるとすれば,それは複合体の抗腫瘍活性に関係があるかないかなどを検討する。また,もし蛋白質部分が「運び屋」として働いているだけならば,他のモルテン・グロビュール状態を示す蛋白質,例えば,アポミオグロビン,シトクロームc,カルボニックアンヒドラーゼなどでも,オレイン酸と複合体を形成することにより同様の抗腫瘍活性が発現される可能性がある。培養腫瘍細胞を用いた実験によりこれらの複合体の抗腫瘍活性についても調べる。

既に,DMSO中のGroESの94個のアミドプロトン中70個のNMRシグナルの帰属を終え,遊離7量体GroESのH/D交換プロフィールを得ている。また,新たな知見として,GroELへのATP結合の二分子反応速度過程の定量的解析を終えている。今後,さまざまな機能的に異なるGroEL/GroES複合体のアミドプロトンのH/D交換反応を二次元NMRを用いて追跡するとともに,ATP結合により誘導されるGroELのアロステリック転移の速度論的解析を進める。シャペロニン複合体の機能発現にその構造揺らぎがどのように関わっているかを明らかにする。

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) 天然変性タンパク質を対象に超高磁場 NMR 解析を行った。 α -synuclein は生理的条件下で立体構造を形成していない，天然変性タンパク質の 1 つであり，本タンパク質の会合体はパーキンソン病や他のシヌクレイン病に特徴的な filamentous inclusion の主要な構成成分となっていることが知られている。ポリフェノール化合物はこの会合を数 mM オーダーの IC₅₀ 値で阻害できることが報告されており，そのような条件下では α -synuclein は非毒性で可溶性のオリゴマーを形成することが示されていた。しかしながら，これらポリフェノール化合物と α -synuclein のオリゴマー形成の詳細なメカニズムはこれまで不明であった。そこで私たちはポリフェノールおよびその類縁体である exifone, gossypetin, dopamine 存在下で α -synuclein 2 量体を調製して，阻害剤が結合した α -synuclein のオリゴマー構造を 920MHz NMR 装置を用いて解析し，これらの化合物による阻害メカニズムを明らかにした。

一方，オステオポンチン (OPN) は細胞外マトリクスタンパク質として細胞接着性を介した生体機能調節を行っている天然変性タンパク質である。本タンパク質は分子の中央部にインテグリン結合配列を有しており，その C 末端側近傍にトロンピンによる切断される領域を有している。この切断をうけるとインテグリンに対する結合活性が上昇する。我々は常磁性効果を利用した NMR 解析により OPN が溶液中で C 末端部が N 末端側に空間的に近接したコンフォメーションを取り得ることを明らかとした。OPN がトロンピンによる切断をうけると，このような分子内相互作用が消失し，その結果，インテグリンが OPN 上の結合部位に対してアプローチし易くなるものと考察される。

- b) ERGIC-53 と MCFD2 は複合体を形成することによって糖タンパク質である血液凝固第 V・第 VIII 因子の細胞内輸送を司る分子装置として機能している。これら 2 つのタンパク質の変異による細胞内輸送障害は先天性の止血異常症である血液凝固第 V 第 VIII 因子欠乏症の病因となる。ERGIC-53 は糖鎖認識ドメイン (CRD) を有する I 型膜タンパク質であり，MCFD2 はカルモジュリン様の EF ハンド構造を有する Ca²⁺ 結合型タンパク質である。我々は，ERGIC-53-CRD と MCFD2 の複合体による血液凝固因子の輸送機構を明らかとするため，X 線結晶構造解析，超遠心解析，NMR 解析を駆使してこれら 2 つのタンパク質の複合体の 3 次元構造を決定した。興味深いことに，MCFD2 上の ERGIC-53-CRD との相互作用部位は EF ハンド構造を有するタンパク質に共通するリガンド結合部位とは異なっていた。さらに，ERGIC-53-CRD が結合することによって MCFD2 に，特にその EF ハンドタンパク質に共通するリガンド結合部位において立体構造変化が誘起されることも判明した。これらのことから MCFD2 は ERGIC-53 と結合することにより構造変化が誘起され，血液凝固因子に対する結合能を新たに獲得する可能性が示唆された。また，これまでに報告されている MCFD2 の遺伝子変異は，ERGIC-53 との相互作用部位に相当する部位に集中していることから，両タンパク質の相互作用が損なわれることが，血液凝固第 V 第 VIII 因子欠乏症をもたらしていることが示された。

また，4 つのユビキチンが全て Lys48 を介したイソペプチド結合により連結された環状テトラユビキチンの結晶構造を明らかにすることに成功した。

- c) 糖鎖およびその集合体を対象に，NMR を利用して立体構造情報を取得する方法を開発した。*N,N'*-ジアセチルキトビオースの還元末端に EDTA 誘導体を導入し，それに種々のランタニドイオンを配位することによって糖鎖の NMR 信号に誘起される擬コンタクトシフトを観測した。それによって糖鎖の 3 次元構造モデルを構築することが可能となった。本方法の応用範囲をより複雑な糖鎖の構造解析に拡張するために，マンノース 8 残基と *N*-アセチルグルコサミン 2 残基からなる高マンノース型糖鎖について試料の大量調製法を検討した。糖鎖のプロセッシング経路にかかわる酵素をコードする遺伝子 (*Och1*, *Mnn1*, *Mnn4*) を欠損した酵母変異体を，¹³C で標識したグルコースを唯一の炭素源とする培地中で培養することにより，目的の高マンノース型糖鎖を ¹³C 標識体として大量に調製することに成功した。
- 一方，超高磁場 NMR を用いてガングリオシドクラスターとアミロイド β (Aβ) の相互作用を解析した。Lyso-GM1 ミセルに由来する NMR 信号の帰属を完了し，核オーバーハウザー効果がもたらす距離情報に基づいて，その糖鎖部分の 3 次元構造を決定した。さらに，スピラベル化した Aβ を用いて，lyso-GM1 ミセルの NMR 信号に誘起される常磁性効果を観測した。これにより両者の相互作用様式を明らかにすることができた。

B-1) 学術論文

- E. SAKATA, T. SATOH, S. YAMAMOTO, Y. YAMAGUCHI, M. YAGI-UTSUMI, E. KURIMOTO, K. TANAKA, S. WAKATSUKI and K. KATO, "Crystal Structure of Ubch5b~Ubiquitin Intermediate: Insight into the Formation of the Self-Assembled E2~Ub Conjugates," *Structure* **18**, 138–147 (2010).
- Y. YAMAGUCHI, M. MASUDA, H. SASAKAWA, T. NONAKA, S. HANASHIMA, S.-I. HISANAGA, K. KATO and M. HASEGAWA, "Characterization of Inhibitor-Bound α-Synuclein Dimer: Role of α-Synuclein N-Terminal Region in Dimerization and Inhibitor Binding," *J. Mol. Biol.* **395**, 445–456 (2010).
- H. YAGI, M. YAMAMOTO, S.-Y. YU, N. TAKAHASHI, K.-H. KHOO, Y. C. LEE and K. KATO, "N-Glycosylation Profiling of Turtle Egg Yolk: Expression of Galabiose Structure," *Carbohydr. Res.* **345**, 442–448 (2010).
- O. SERVE, Y. KAMIYA, A. MAENO, M. NAKANO, C. MURAKAMI, H. SASAKAWA, Y. YAMAGUCHI, T. HARADA, E. KURIMOTO, M. YAGI-UTSUMI, T. IGUCHI, K. INABA, J. KIKUCHI, O. ASAMI, T. KAJINO, T. OKA, M. NAKASAKO and K. KATO, "Redox-Dependent Domain Rearrangement of Protein Disulfide Isomerase Coupled with Exposure of Its Substrate-Binding Hydrophobic Surface," *J. Mol. Biol.* **396**, 361–374 (2010).
- M. YAGI-UTSUMI, T. KAMEDA, Y. YAMAGUCHI and K. KATO, "NMR Characterization of the Interactions between Lyso-GM1 Aqueous Micelles and Amyloid β," *FEBS Lett.* **584**, 831–836 (2010).
- T. DOJIMA, T. NISHINA, T. KATO, T. UNO, H. YAGI, K. KATO, H. UEDA and E. Y. PARK, "Improved Secretion of Molecular Chaperone-Assisted Human IgG in Silkworm, and No Alterations in Their N-Linked Glycan Structures," *Biotechnol. Prog.* **26**, 232–238 (2010).
- M. NISHIO, Y. KAMIYA, T. MIZUSHIMA, S. WAKATSUKI, H. SASAKAWA, K. YAMAMOTO, S. UCHIYAMA, M. NODA, A. R. MCKAY, K. FUKUI, H.-P. HAURI and K. KATO, "Structural Basis for the Cooperative Interplay between the Two Causative Gene Products of Combined Factor V and Factor VIII Deficiency," *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **107**, 4034–4039 (2010).
- N. TAKEMAE, R. RUTTANAPUMMA, S. PARHARIYANON, S. YONEYAMA, T. HAYASHI, H. HIRAMATSU, N. SRIWILAIJAROEN, Y. UCHIDA, S. KONDO, H. YAGI, K. KATO, Y. SUZUKI and T. SAITO, "Alteration in Receptor-Binding Properties of Swine Influenza Viruses of the H1 Subtype after Isolation in Embryonated Chicken Eggs," *J. Gen. Virol.* **91**, 938–948 (2010).

- Y. YAMAGUCHI, S. HANASHIMA, H. YAGI, Y. TAKAHASHI, H. SASAKAWA, E. KURIMOTO, T. IGUCHI, S. KON, T. UEDE and K. KATO**, “NMR Characterization of Intramolecular Interaction of Osteopontin, an Intrinsically Disordered Protein with Cryptic Integrin-Binding Motifs,” *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **393**, 487–4918 (2010).
- S. SATO, O. MOROHARA, D. FUJITA, Y. YAMAGUCHI, K. KATO and M. FUJITA**, “Parallel-Stacked Aromatic Hosts for Orienting Small Molecules in a Magnetic Field: Induced Residual Dipolar Coupling by Encapsulation,” *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 3670–3671 (2010).
- Y. WADA, A. DELL, S. M. HASLAM, B. TISSOT, K. CANIS, P. AZADI, M. BÄCKSTRÖM, C. E. COSTELLO, G. C. HANSSON, Y. HIKI, M. ISHIHARA, H. ITO, K. KAKEHI, N. KARLSSON, C. E. HAYES, K. KATO, N. KAWASAKI, K.-H. KHOO, K. KOBAYASHI, D. KOLARICH, A. KONDO, C. LEBRILLA, M. NAKANO, H. NARIMATSU, J. NOVAK, M. V. NOVOTNY, E. OHNO, N. H. PACKER, E. PALAIMA, M. B. RENFROW, M. TAJIRI, K. A. THOMSSON, H. YAGI, S.-Y. YU and N. TANIGUCHI**, “Comparison of Methods for Profiling O-Glycosylation: Human Proteome Organization Human Disease Glycomics/Proteome Initiative Multi-Institutional Study of IgA1,” *Mol. Cell Proteomics* **9**, 719–727 (2010).
- J. HOSEKI, H. SASAKAWA, Y. YAMAGUCHI, M. MAEDA, H. KUBOTA, K. KATO and K. NAGATA**, “Solution Structure and Dynamics of Mouse ARMET,” *FEBS Lett.* **584**, 1536–1542 (2010).
- C. A. SANDOVAL, F. BIE, A. MATSUOKA, Y. YAMAGUCHI, H. NAKA, Y. LI, K. KATO, N. UTSUMI, K. TUTSUMI, T. OHKUMA, K. MURATA and R. NOYORI**, “Chiral η^6 -Arene/*N*-Tosylethylenediamine–Ruthenium(II) Complexes: Solution Behavior and Catalytic Activity for Asymmetric Hydrogenation,” *Chem. –Asian J.* **5**, 806–816 (2010).
- N. HOSOKAWA, L. O. TREMBLAY, B. SLENO, Y. KAMIYA, I. WADA, K. NAGATA, K. KATO and A. HERSCOVICS**, “EDEM1 Accelerates the Trimming of α 1,2-Linked Mannose on the C Branch of *N*-Glycans,” *Glycobiology* **20**, 567–575 (2010).
- S. KIM, Y. SAEKI, K. FUKUNAGA, A. SUZUKI, K. TAKAGI, T. YAMANE, K. TANAKA, T. MIZUSHIMA and K. KATO**, “Crystal Structure of Yeast Rpn14, a Chaperone of the 19 S Regulatory Particle of the Proteasome,” *J. Biol. Chem.* **285**, 15159–15166 (2010).
- H. YAGI, M. YANAGISAWA, K. KATO and R. K. YU**, “Lysosome-Associated Membrane Protein 1 Is a Major SSEA-1-Carrier Protein in Mouse Neural Stem Cells,” *Glycobiology* **20**, 976–981 (2010).
- K. MASUDA, Y. YAMAGUCHI, N. TAKAHASHI, R. JEFFERIS and K. KATO**, “Mutational Deglycosylation of the Fc Portion of Immunoglobulin G Causes O-Sulfation of Tyrosine Adjacent to the Originally Glycosylated Site,” *FEBS Lett.* **584**, 3474–3479 (2010).
- M. NAKASAKO, A. MAENO, E. KURIMOTO, T. HARADA, Y. YAMAGUCHI, T. OKA, Y. TAKAYAMA, A. IWATA and K. KATO**, “Redox-Dependent Domain Rearrangement of Protein Disulfide Isomerase from a Thermophilic Fungus,” *Biochemistry* **49**, 6953–6962 (2010).
- T. SATOH, E. SAKATA, S. YAMAMOTO, Y. YAMAGUCHI, A. SUMIYOSHI, S. WAKATSUKI and K. KATO**, “Crystal Structure of Cyclic Lys48-Linked Tetraubiquitin,” *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **400**, 329–333 (2010).
- T. NAKAGAWA, S. TAKEISHI, A. KAMEYAMA, H. YAGI, T. YOSHIOKA, K. MORIWAKI, T. MASUDA, H. MATSUMOTO, K. KATO, H. NARIMATSU, N. TANIGUCHI and E. MIYOSHI**, “Glycomic Analyses of Glycoproteins in Bile and Serum During Rat Hepatocarcinogenesis,” *J. Proteome Res.* **9**, 4888–4896 (2010).

M. SUGIYAMA, E. KURIMOTO, H. SAHASHI, E. SAKATA, Y. MORIMOTO, K. ITOH, K. MORI, T. FUKUNAGA, Y. MINAMI and K. KATO, “SANS Investigation of Assembly State of Proteasome Activator 28 and the 20S Proteasome,” *J. Phys.: Conf. Series* **247**, 012020 (2010).

H. YAGI, M. YANAGISAWA, Y. SUZUKI, Y. NAKATANI, T. ARIGA, K. KATO and R. K. YU, “HNK-1 Epitope-Carrying Tenascin-C Spliced Variant Regulates the Proliferation of Mouse Embryonic Neural Stem Cells,” *J. Biol. Chem.* **285**, 37293–37301 (2010).

B-3) 総説，著書

神谷由紀子，加藤晃一，「糖鎖によるタンパク質社会の秩序維持」*化学工業* **61**, 23–31 (2010).

N. HOSOKAWA, Y. KAMIYA and K. KATO, “The Role of MRH Domain-Containing Lectins in ERAD,” *Glycobiology* **20**, 651–660 (2010).

K. KATO, Y. YAMAGUCHI and Y. ARATA, “Stable-Isotope-Assisted NMR Approaches to Glycoproteins Using Immunoglobulin G as a Model System,” *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.* **56**, 346–359 (2010).

K. MATSUZAKI, K. KATO and K. YANAGISAWA, “A β Polymerization through Interaction with Membrane Gangliosides,” *Biochim. Biophys. Acta, Mol. Cell Biol. Lipids* **1801**, 868–877 (2010).

Y. YAMAGUCHI and K. KATO, “Dynamics and Interactions of Glycoconjugates Probed by Stable-Isotope-Assisted NMR Spectroscopy,” *Methods in Enzymology* **478**, 305–322 (2010).

N. HOSOKAWA, K. KATO and Y. KAMIYA, “Mannose 6-Phosphate Receptor Homology Domain-Containing Lectins in Mammalian Endoplasmic Reticulum-Associated Degradation,” *Methods in Enzymology* **480**, 181–197 (2010).

加藤晃一，矢木真穂，「神経変性疾患にかかわる天然変性タンパク質の分子構造ダイナミクス」*Medical Bio 別冊「揺らぎと生体機能」* 寺嶋正秀編，オーム社，32–37 (2010).

坂田絵理，佐藤匡史，山口芳樹，若槻壮市，加藤晃一，「細胞の中の不要なタンパク質に目印をつける仕組み」*日本結晶学会誌* **52**, 255–261 (2010).

坂田絵理，佐藤匡史，山口芳樹，若槻壮市，加藤晃一，「コヒキチン鎖伸長の構造的基盤」*PF NEWS* **3**, 20–24 (2010).

B-4) 招待講演

加藤晃一，「タンパク質の細胞内品質管理における分子センシング機構」平成21年度「バイオ分子センサー」連携研究公開シンポジウム，岡崎，2010年1月。

加藤晃一，山口拓実，神谷由紀子，「超高磁場NMR分光法による天然変性タンパク質および糖脂質クラスターの構造解析」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運営委員会(第11回)岡崎，2010年3月。

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」抗体／バイオ医薬品開発に向けたタンパク質・糖鎖・抗体価の分析・測定，東京，2010年3月。

加藤晃一，「複合糖質の構造・機能解析の体系的な研究戦略」蛋白研－統合バイオ合同セミナー，大阪，2010年4月。

西尾美穂，神谷由紀子，水島恒裕，若槻壮市，笹川弘昭，山本一夫，内山 進，野田勝紀，A. R. McKay，福井希一，H. P. Hauri，加藤晃一，「レクチンとEFハンドタンパク質の協働的相互作用による血液凝固因子の細胞内輸送の構造基盤」第10回日本蛋白質科学会年会，札幌，2010年6月。

加藤晃一，神谷由紀子，「真核細胞発現系を用いた糖タンパク質の安定同位体標識」第10回日本蛋白質科学会年会，札幌，2010年6月。

加藤晃一,「NMR を利用したタンパク質・複合糖質の揺らぎの検出とその機能関連の探査」新学術領域「揺らぎと生体機能」平成22年度合同班会議,加賀,2010年6月.

矢木真穂,加藤晃一,「ガングリオシドクラスターに結合したアミロイドβのNMR 構造解析」平成22年度生理学研究所研究会 糖鎖機能研究会——分子レベルでの解明を目指して,岡崎,2010年7月.

K. KATO, “NMR characterization of the interactions between amyloid β and gangliosidic micelles,” Max Planck Institute for Biophysical Chemistry Seminar, Göttingen (Germany), July 2010.

K. KATO, “A systematic structural glycobiology by NMR in conjunction with X-ray crystallography and sugar library approaches,” The Chinese University of Hong Kong Seminar, Hong Kong (China), July 2010.

K. KATO, “A systematic structural glycobiology by NMR in conjunction with X-ray crystallography and sugar library approaches,” Hong Kong University Seminar, Hong Kong (China), July 2010.

K. KATO, “Structural Glycomics by NMR and Sugar Library Approaches,” WCU Special Seminar, Seoul (Korea), July 2010.

K. KATO, “A systematic approaches of structural glycobiology based on NMR and sugar library,” International Workshop on Glycan Structure Analysis of Therapeutic Recombinant Glycoproteins, Bucheon (Korea), July 2010.

加藤晃一,「超高磁場NMRによる複合糖質の動的構造・相互作用解析」大阪大学蛋白質研究所セミナー,吹田,2010年7月.

K. KATO, “NMR Characterization of Conformations, Dynamics, and Interactions of Glycoconjugates,” The 25th International Carbohydrate Symposium (ICS2010), Tokyo, August 2010.

加藤晃一,「複合糖質の構造・機能解析」岡崎統合バイオサイエンスセンター・サマースクール,岡崎,2010年8月.

加藤晃一,「920MHz NMR 装置を利用した複合糖質の構造・ダイナミクス・相互作用の解析」ナノネット機能別会合(分子物質合成・極限環境)岡崎,2010年9月.

加藤晃一,「複合糖質の体系的構造解析:NMRと糖鎖ライブラリーによるアプローチ」第59回高分子討論会,札幌,2010年9月.

K. KATO, “Structural and functional glycomics based on HPLC database, sugar library, and NMR spectroscopy,” BIT’s 8th Annual Congress of International Drug Discovery Science and Technology (IDDST2010), Beijing (China), October 2010.

K. KATO, “Structural and Functional Analyses of Post-Translationally Diversified Proteins,” The 1st Yosei-IMS Joint Workshop, Jeju (Korea), November 2010.

水島恒裕,加藤晃一,森本幸生,田中啓二,「プロテアソームの構造生物学」BMB2010,神戸,2010年12月.

K. KATO and T. MIZUSHIMA, “Structural views of the ubiquitin-proteasome system,” The 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2010), Honolulu (U.S.A.), December 2010.

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).

西尾美穂,第73回日本生化学会中部支部例会奨励賞(2009).

神谷由紀子,糖鎖科学名古屋拠点若手研究者奨励賞(2009).

矢木真穂,第74回日本生化学会中部支部例会奨励賞(2010).

西尾美穂,糖鎖科学名古屋拠点第8回「若手のカフォーラム」奨励賞(2010).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本バイオイメーシング学会評議員 (1995-).
日本生化学学会評議員 (2002-).
日本糖質学会評議員 (2003-).
日本核磁気共鳴学会評議員 (2006-), 理事 (2008-2009).
NPO バイオものづくり中部理事 (2008-).
日本蛋白質科学会理事 (2010-).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2009-).
日本学術振興会先端科学シンポジウム事業委員会 プランニング・グループ・メンバー (2009-).

学会誌編集委員

Open Glycoscience, Editorial board member (2008-).
Glycoconjugate Journal, Editorial board member (2009-).
World Journal of Biological Chemistry, Editorial board member (2010-).
Journal of Glycomics & Lipidomics, Editorial board member (2010-).

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

お茶の水女子大学, 客員教授, 2006年6月- .
名古屋市立大学薬学部, 大学院薬学研究科, 特任教授, 2008年4月- .
名古屋市立大学薬学部, 「構造生物学」「薬学物理化学Ⅱ」「生命薬科学入門」「薬学概論」「テーマ科目 薬と生命」「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」2010年.
名古屋市立大学大学院薬学研究科, 「創薬生命科学基礎Ⅱ」「生命分子構造学特論」2010年.
理化学研究所, 客員研究員, 2009年4月- .

B-10) 競争的資金

武田科学振興財団薬学系研究奨励金, 「構造生物学的アプローチによる免疫系複合糖質の立体構造形成と分子認識機構の解析」加藤晃一 (2001年).
山田科学振興財団研究援助金, 「糖タンパク質の立体構造形成および分子認識機構の構造生物学的解析」加藤晃一 (2001年).
島津科学技術振興財団研究開発助成金, 「生体分子間相互作用および生体超分子の計測を指向したエレクトロスプレーイオン化質量分析装置の開発」加藤晃一 (2001年).
内藤記念科学振興財団研究助成金, 「多機能型シャペロン・カルレティキュリンの分子認識機構の解明」加藤晃一 (2001年).
(財)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).

科研費基盤研究(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).

科研費特定領域研究「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).

科研費特定領域研究「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).

科学技術振興機構ブラザ育成研究調査,「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パイオものづくり中部,「糖鎖分科会」加藤晃一(2005年-2006年).

科研費特定領域研究「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).

科研費萌芽研究,「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).

科研費基盤研究(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).

科研費新学術領域研究「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連関の探査」加藤晃一(2008年-).

科研費基盤研究(B)「ポスト小胞体品質管理における細胞内レクチンの分子認識と超分子形成の構造基盤の解明」加藤晃一(2009年-).

科研費若手研究(スタートアップ)「細胞内レクチンとCa 結合タンパク質との連携による生体機能発現の分子基盤の探究」神谷由紀子(2009年-2010年).

科研費若手研究(スタートアップ)「オリゴ糖鎖ナノクラスターの精密構築と生体分子認識機構の解明」山口拓実(2009年-).

科研費特定領域研究「タンパク質社会」(公募研究)「糖鎖認識を介したタンパク質社会の秩序維持機構の構造基盤の解明」,神谷由紀子(2010年-).

B-11) 産学連携

協和発酵キリン(株)抗体研究所,「ヒトIgG1とヒトFc γ受容体IIIaとの結合状態の構造解析」加藤晃一(2010年).

味の素(株)ライフサイエンス研究所,「味覚変調蛋白質の立体構造形成と機能発現に関する研究」加藤晃一(2010年).

(株)豊田中央研究所,「耐熱性カピプロテインジスルフィドイソメラーゼのNMRによる高次構造解析」加藤晃一(2010年).

大陽日酸(株)「タンパク質の安定同位体標識技術の開発」加藤晃一(2010年).

(株)グライエンス,取締役兼科学技術顧問として研究開発連携,加藤晃一(2010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。酵母変異体を利用して、均一にあるいは選択的に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。特に、小胞体とゴルジ体間の糖タンパク質輸送にかかわる分子間の動的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、化学的に設計した糖鎖クラスター上でのA β の分子間相互作用および糖鎖間の相互作用をNMRを利用して捉え、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、神経系における糖鎖機能の解明のために、キシロース転移酵素の候補遺伝子をノックアウトしたマウスの系統的な表現型解析を実施する。このように、神経系における糖鎖機能のミクロ・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) ヘム酵素反応中間体の機能発現の分子機構の研究
- b) Jacobsen 触媒の不斉誘起機構の研究
- c) シアンイオンを NMR プロブとしたヘムタンパク質の機能解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 酸化反応に関わる金属酵素の機能制御機構を解明するため，高酸化反応中間体のモデル錯体を合成し，電子構造と反応性の関わりを研究した。オキソ鉄 4 価ポルフィリン π -カチオンラジカル錯体は，チトクローム P450 の活性反応中間体として知られ，さまざまな炭化水素の水酸化反応を行う。シトクロム P450 によるアルカンの水酸化反応における水素原子のトンネル効果の作用機構を解明するため，オキソ鉄四価ポルフィリン π -カチオンラジカル錯体を低温で合成し，ベンジル位に水素を持つ炭化水素の水酸化反応の反応過程を研究した。反応速度の温度依存性や H-D 同位体効果から，水素原子のトンネル効果について考察した。モデル錯体に結合する軸位の配位子を変化させることにより，モデル錯体の活性を変化させ水素原子トンネル効果への影響を研究した。また，異なる C-H 解離エネルギーをもつ炭化水素を用いて，C-H 結合エネルギーと水素原子トンネル効果に関わりを検討した。これらの実験から，水素原子トンネル効果を制御する因子を解明した。
- b) 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。エチレンジアミン部位に不斉を導入したマンガンサレン錯体は，Jacobsen 触媒として知られ，不斉エポキシ化反応を可能にする。我々は，Jacobsen 触媒がどのような機構で不斉エポキシ化反応を誘起しているのかを，活性反応中間体から研究を行ってきた。これまでの研究で，マンガンイオンが 3 価から 4 価に酸化されると，サレン骨格が不斉歪みを起こすこと，軸配位子の配位力の強さが不斉歪みを制御する因子であることを見出した。本年度は，エポキシ化反応の活性種と考えられているマンガンオキソ錯体の同定と反応性の解明に成功した。マンガン 4 価オキソ錯体を合成し，種々の分光法で同定することができた。マンガン 4 価オキソ錯体は，非常に容易にプロトン化を受けマンガン 4 価ヒドロキシ錯体を生成することを示した。これらオキソ錯体とヒドロキシ錯体の反応性を比較した結果，オキソ錯体が高い反応性を有することを見出すことができた。
- c) 金属酵素と強く結合するシアンイオンをプロブとした金属酵素の構造・機能測定法の開発を行った。我々はこれまで，ヘムタンパク質に結合したシアンイオンの ^{13}C ， ^{15}N NMR シグナルがヘム近傍の構造や水素結合ネットワークを検索する優れたプロブであることを明らかにした。この手法をペルオキシダーゼの変異体に適応した。ヘム近傍のアミノ酸を置換したさまざまな変異体を作成し，水素結合ネットワークと酵素機能の関わりを研究した。その結果，ヘムの軸位に配位するヒスチジン残基からの電子供与性効果と過酸化水素との反応により生成する活性種の生成速度が相関することを見出した。この相関がどのような機構で発現しているかを研究した結果，ヒスチジン残基からの電子供与性がヘム近傍の水分子とヘム鉄の結合の強さを変化させ，これが過酸化水素との反応速度を制御しているという新しい制御機構を提案することができた。

B-1) 学術論文

T. KURAHASHI, A. KIKUCHI, Y. SHIRO, M. HADA and H. FUJII, “Unique Property and Reactivity of High-Valent Manganese-Oxo versus Manganese-Hydroxo in the Salen Platform,” *Inorg. Chem.* **49**, 6664–6672 (2010).

H. ISHIMARU, H. FUJII and T. OGURA, “Resonance Raman Study of a High-Valent Fe=O Porphyrin Complex as a Model for Peroxidase Compound II,” *Chem. Lett.* **39**, 332–333 (2010).

S. NOZAWA, T. SATO, M. CHOLLET, K. ICHIYANAGI, A. TOMITA, H. FUJII, S. ADACHI and S. KOSHIHARA, “Direct Probing of Spin State Dynamics Coupled with Electronic and Structural Modifications by Picosecond Time-Resolved XAFS,” *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 61–63 (2010).

D. NONAKA, H. WARIISHI, K. G. WELINDER and . FUJII, “Paramagnetic ^{13}C and ^{15}N NMR Analyses of the Push- and Pull-Effects in Cytochrome *c* Peroxidase and *Coprinus cinereus* Peroxidase Variants: Functional Roles of Highly-Conserved Amino Acids around Heme,” *Biochemistry* **49**, 49–57 (2010).

B-4) 招待講演

H. FUJII and S. MOCHIZUKI, “Functional Role of Unique Heme d_1 in Nitrite Reduction by Heme-Containing Nitrite Reductase,” 60th Anniversary Conference on Coordination Chemistry, Osaka (Japan), September 2010.

T. KURAHASHI and H. FUJII, “Critical Factors for the Formation of a Chiral Conformation in Manganese Salen Complexes, Related to Enantioselective Epoxidation,” 60th Anniversary Conference on Coordination Chemistry, Osaka (Japan), September 2010.

藤井 浩, 「アキシャル位配位子による高原子価サレンマンガン錯体の電子構造と反応性の制御」日本化学会第4回関東支部大会, 筑波大学, 筑波, 2010年8月.

藤井 浩, 「酸化反応を触媒する金属酵素の反応中間体の電子構造」第4回生物物質科学フォーラム, 東京工業大学, 東京, 2010年5月.

H. FUJII and D. NONAKA, “ ^{13}C and ^{15}N NMR Spectroscopy of Heme-Bound Cyanide ($^{13}\text{C}^{15}\text{N}$) in Ferric Heme Peroxidases,” Japan–Korea Seminars on Biomolecular Sciences—Experiments and Simulations, Nagoya (Japan), December 2009.

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

科研費基盤研究(B), 「高原子価オキソ金属錯体の反応性と反応選択性を制御する分子機構の解明」藤井 浩 (2010年–2013年).

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(B), 「単核非ヘム酵素反応中間体としての高酸化オキソ錯体の合成と反応性の研究」藤井 浩 (2002年–2004年).

科研費基盤研究(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).

科研費特定領域研究「配位空間（公募研究）」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).

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).

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).

C) 研究活動の課題と展望

生体内の金属酵素の構造と機能の関わりを,酵素反応中間体の電子構造から研究している。金属酵素の機能をより深く理解するためには,反応中間体の電子状態だけでなく,それを取り囲むタンパク質の反応場の機能を解明することも重要であると考え。これまでの基礎研究で取得した知見や手法をさらに発展させて,酵素,タンパクのつくる反応場の特質と反応性の関係を解明していきたいと考える。また,これらの研究を通して得られた知見を基に,酵素機能変換法の新概念を確立できるよう研究を進めたいと考える。

生体分子情報研究部門

宇理須 恒 雄（教授）（1992 年 5 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：電子シンクロト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) 生体材料の AFM，SIMS，赤外反射吸収分光（BML-IRRAS）による評価
- b) 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) 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。2010 年度も引き続き，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。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した。視野全体を通常のビデオレートで観察するための均一照明用の励起光路に加えて，励起光を試料位置で集光するための光路を装置中に加えることで最大 2000 fps (frames per second) の高速観察を実現した。これらの 2 つの照明系を用いることでミリ秒・100 nm オーダーから秒・ μm オーダーまでの幅広い時間・空間スケールにおいて，脂質分子の拡散挙動を捉えることができるようになった。幅約 200 nm の単原子ステップピットを持つ $\text{TiO}_2(100)$ 表面上では，ピット内での 100 nm オーダーの距離では脂質の拡散が速く，ピット間をまたいで移動する μm オーダーの距離では拡散係数が減少することを明らかにした。細胞膜内で起きている異常拡散現象を 基板表面ナノ構造を利用して人為的に誘起しうることが示された。
- b) 神経細胞ネットワーク素子の応用として，物理化学の観点から細胞核内反応を調べることに的をしぼって素子開発を進める方針とした。このような研究はこれまでほとんど調べられていない，そのためには，まず安定した測定のできる実用性の高い素子の開発が必須であると考え，2010 年は，超安定電極の開発，小型で集光性能の良いレーザープローブの開発，細胞の位置合わせの容易で確実なマイクロ流路の形成，上面にマイクロ流路，下面にピペット溶液溜めの構造を有するプラスチック基板作成のための，両面ホットエンボス技術の開発，微細貫通孔形成のための Deep X-ray Lithography 技術の開発を進め，これらの技術開発をほぼ完成し，4 チャンネル素子の作成を達成した。素子動作の確認を 2011 年 3 月末までに行う。

B-1) 学術論文

Z. G. SHANG, Y. LI MAO, R. TERO, T. HOSHINO, M. TANAKA and T. URISU, "Clustering Effects of GM1 and Formation Mechanisms of Interdigitated Liquid Disordered Domains in GM1/SM/CHOL-Supported Planar Bilayers on Mica Surface," *Chem. Phys. Lett.* **497**, 108–114 (2010).

T. C. HE, C. S. WANG, T. URISU, T. NAGAIRO, R. TERO and R. XIA, "The PDMS-Based Microfluidic Channel Fabricated by Synchrotron Radiation Stimulated Etching," *Opt. Express* **18**, 9733–9738 (2010).

Y. L. MAO, Z. G. SHANG, Y. IMAI, T. HOSHINO, R. TERO, M. TANAKA, N. YAMAMOTO, K. YANAGISAWA and T. URISU, “Surface-Induced Phase Separation of a Sphingomyelin/Cholesterol/Ganglioside GM1-Planar Bilayer on Mica Surfaces and Microdomain Molecular Conformation that Accelerate A β Oligomerization,” *Biochim. Biophys. Acta, Biomembr.* **1798**, 1090–1099 (2010).

T. Y. CHIANG, T. MAKIMURA, T. C. HE, S. TORII, T. YOSHIDA, R. TERO, C. S. WANG and T. URISU, “Synchrotron-Radiation-Stimulated Etching of Polydimethylsiloxane (PDMS) Using XeF₂ as a Reaction Gas,” *J. Synchrotron Radiat.* **17**, 69–74 (2010).

S. TAKAKUSAGI, K. I. FUKUI, R. TERO, K. ASAKURA and Y. IWASAWA, “First Direct Visualization of Spillover Species Emitted from Pt Nanoparticles,” *Langmuir* **26**, 16392–16396 (2010).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

A. ANDO, M. A. SAYED, T. ASANO, R. TERO, K. KITANO, T. URISU and S. HAMAGUCHI, “Protein Patterning by Atmospheric-Pressure Plasmas,” *J. Phys.: Conf. Series* **232**, 012019 (5 pages) (2010).

B-3) 総説，著書

高田紀子，水谷伸雄，青山正樹，鈴木光一，宇理須恒雄，「多チャンネル神経細胞ネットワーク素子の開発」*Molecular Electronics and Bioelectronics*, **21**, 243–246 (2010).

B-4) 招待講演

T. URISU, “Development of *in vitro* Neural Network Device with Photo-Stimulations and Precise Nanofabrication Technologies,” 先端ナノバイオフォーラム，姫路キャスパールホール，2010年11月.

T. URISU, “Development of Neural Network Functional Analysis Device based on the Multi-Channel Planar Patch Clamp Method,” 4th International Symposium of Nanomedicine, Okazaki (Japan), November–December 2010.

手老龍吾，「支持脂質二重膜内での微小構造の形成と分子拡散挙動への影響」第48回日本生物物理学会年会，東北大学，仙台，2010年10月.

手老龍吾，「酸化物質板表面上の平面支持脂質二重膜内での分子拡散挙動のその場観察」膜シンポジウム2010，京都大学，京都，2010年11月.

B-5) 特許出願

特願 2010-204326，「神経細胞機能解析素子およびイオンチャンネル電流の測定方法」宇理須恒雄，鈴木光一，青山正樹，高田紀子，王 志宏，宇野秀隆(大学共同利用機関法人自然科学研究機構) 2010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 (1993–2010).

東北大学電気通信研究所研究外部評価委員 (1995–).

日本工業技術振興協会, 放射光の半導体への応用技術研究委員会顧問委員 (1995–2000).

新機能素子研究開発協会, 新世紀素子等製造評価技術の予測委員会 / ハードフォトン技術研究部会委員 (1995).

姫路工業大学ニュースパル利用検討委員会委員 (1996–1998).

姫路工業大学ニュースパル新素材開発利用専門委員会委員 (1999–2000).

近畿通産局, 超次世代原子デバイスの自己形成技術に関する調査委員会委員 (1997–1998).

電気学会, 放射光・自由電子レーザプロセス技術調査専門委員会委員 (1997–1999).

放射線利用振興協会, 放射線利用技術指導研究員 (1997.11.18–20).

日本原子力研究所, 研究嘱託 (1998.4–2002.3).

科学技術庁, 「顕微光電子分光法による材料, デバイスの高度分析評価技術に関する調査」調査推進委員会委員 (1998–1998).

科学技術庁, 「顕微光電子分光法による材料, デバイスの高度分析評価技術に関する調査」研究推進委員会委員 (1999–2000).

日本原子力研究所, 博士研究員研究業績評価委員 (1998–1999).

佐賀県シンクロトン光応用研究施設整備推進委員会委員 (2000–2001).

科学技術振興調整費「顕微光電子分光法による材料・デバイスの高度分析評価技術に関する研究」研究推進委員 (1999–2002).

科学技術振興調整費「カーボンナノチューブエレクトロニクス研究」外部運営委員 (2001–2003).

日本学術振興会学術創生研究費書面審査委員 (2001).

科学技術交流財団「ナノ反応場とバイオエレクトロニクスインターフェイス制御研究会」座長 (2001.4–2003.3).

日本原子力研究所研究評価委員会, 光科学研究専門部会専門委員 (2002.11.1–2003.3.31).

電気学会「量子放射ビームを用いたナノ・バイオプロセッシング技術調査専門委員会」アドバイザー (2004.5–).

日本表面科学会評議員 (2003.4–).

日本放射光学会評議員 (2003.4–2006.12).

(財)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 (2008.4–2010.3).

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 (1992–2010).

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 (2004–2006).
日本表面科学会出版委員 (2005.6–2007.5).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(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).
科研費特定領域研究(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).
科研費特定領域研究(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).
科研費特定領域研究(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).
科研費基盤研究(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).
科学技術振興機構CREST研究, 「光神経電子集積回路開発と機能解析応用」宇理須恒雄 (2009年10月–2015年3月).
(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).
科研費若手研究(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).
科研費若手研究(A), 「固液界面の脂質二重膜に形成される非平衡・非対称ドメイン内部での分子挙動の解明」手老龍吾, (2009年–2010年).
科研費特定領域研究(公募研究), 「外場が誘起する脂質二重膜の非平衡相分離挙動の解明」手老龍吾, (2009年–2010年).
科研費新学術領域研究(研究領域提案型)(公募研究), 「脂質膜の過渡的相分離過程における構造・物性とその機構」手老龍吾, (2009年–2010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開始し、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ペプチド(A β)の凝集がガングリオシドGM1の分子構造および周辺脂質分子のドメイン構造の違いによって反応速度が大きく変わることの発見、イオンチャンネルバイオセンサー素子内に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、というブレークスルーがあった。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さ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。2009年度は本イオンチャンネルバイオセンサーが「長期間経過観察が可能、多チャンネル観測が可能」という、当該分野において従来に無い新しい重要な特性を有することを実証できた。2010年度は、開発する素子をどのように応用するかを検討し、神経細胞の核内反応と神経細胞ネットワーク機能との相関をしらべることに的がしぼられた。このような系の研究はほとんど未開拓であるが、脳科学や脳の難病の研究に非常に有用と考えられる。そのためには、開発する素子の安定動作が重要で、超安定電極、小型レーザープローブ、マイクロ流路による細胞パターンニング、などの技術開発の他、多チャンネル用プラスチック基板の開発などを進めた。4月以降、私は名古屋大学の革新ナノバイオデバイス研究センターに移る予定であるが、引き続き神経細胞ネットワーク素子の開発を続ける予定である。名古屋大学医学部脳神経外科の研究グループとの共同研究が具体化しつつあり、この共同研究を通して、神経細胞核内反応の研究を全力で進めたいと考えている。

古 谷 祐 詞 (准教授) (2009 年 3 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：生物物理学, 生体分子科学

A-2) 研究課題：

- a) 全反射赤外分光法による膜タンパク質とイオンとの相互作用の研究
- b) 時間分解赤外分光法によるバクテリオロドプシンおよびハロロドプシンのタンパク質内水素結合変化の実時間計測
- c) 急速溶液混合法と時間分解赤外分光法を組み合わせた膜タンパク質の構造変化解析法の開発
- d) 表面増強赤外分光法による膜タンパク質の構造変化計測系の構築
- e) 赤・緑視物質の波長制御機構および視物質ロドプシンの熱雑音発生機構に関する研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 膜タンパク質は、細胞膜に存在し、細胞外と細胞内とを橋渡しする重要な役割を担っている。特にイオン輸送タンパク質は、電気信号の発生、電気化学ポテンシャルの形成など生体にとって非常に重要な役割を担っている。膜タンパク質分子とイオンとの相互作用を、タンパク質の分子振動変化として観測するのに、全反射 (ATR) 赤外分光法は有効である。9 回反射型 ATR 結晶に 5 μ L (タンパク質濃度は 1 mg/ml 程度) を滴下し、乾燥後に任意の緩衝液を流すことで、様々な膜タンパク質のイオン交換誘起赤外差スペクトルの計測を実現している。現在、カリウムイオンチャネル KcsA や ATP 駆動型 Na⁺ 輸送タンパク質 (V-ATPase) について論文準備中である。
- b) ロドプシンは発色団レチナールを結合し、その光異性化反応によりタンパク質の構造を変化させ、光情報を伝達したり、プロトンやイオンを輸送したりする機能を持つ。分子科学研究所に赴任した際に、新規に Bruker 社製 VERTEX80 を導入し、試料室や試料ホルダーを改造することで、レーザー光誘起の時間分解赤外分光計測系を立ち上げた。最初のプロトン移動が起きる M 中間体だけでなく、これまで情報の乏しい最終中間体 O についても、水素結合変化の詳細な情報が得られるものと期待している。また、塩化物イオンポンプであるハロロドプシンについても同様の計測を行い、プロトンと塩化物イオンの輸送機構の違いについて研究を進めている。
- c) 助教の木村哲就氏が 2009 年 12 月に赴任し、a) の課題をさらに発展させるべく、急速溶液混合法 (ストップフロー法および連続混合法) と赤外分光法を組み合わせた新規計測法の開発を行っている。膜タンパク質のイオン結合に伴う構造変化を実時間で捉える挑戦的な試みである。現在、急速溶液混合法の組込方法について議論し、試作品を用いた予備実験を行い、装置の設計に本格的に取りかかっている段階である。
- d) 全反射赤外分光用のシリコン結晶表面に 20 nm 程度の金薄膜を真空蒸着法により形成し Ni-NTA で表面処理を行い、His-tag をもつ膜タンパク質を表面に固定化することで単一分子層からの赤外吸収スペクトルを計測することが可能となる。さらに界面活性剤を脂質と置き換えることで、膜タンパク質が脂質二重膜一層に埋め込まれた状況での計測が可能となる。現在、様々な金薄膜を調製し、膜タンパク質の構造変化計測に最適な条件を検討している段階である。
- e) 名古屋工業大学の神取秀樹教授および京都大学霊長類研究所今井啓雄准教授との共同研究である色覚ではたらく緑および赤視物質の波長制御機構の研究に協力した (Katayama *et al.*, *Angew. Chem., Int. Ed.*)。また、視物質ロドプシンのレチナール近傍に存在する Thr118 の H/D 交換反応を赤外分光法で追跡することを提案し、熱揺らぎの熱力学パラメーターの解析および熱雑音の発生機構を明らかにすることに貢献した (V. A. Lorentz-Fonfria *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*)。

B-1) 学術論文

K. KATAYAMA, Y. FURUTANI, H. IMAI and H. KANDORI, “An FTIR Study of Monkey Green- and Red-Sensitive Visual Pigments,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **49**, 891–894 (2010).

K. HASHIMOTO, A. R. CHOI, Y. FURUTANI, K.-H. JUNG and H. KANDORI, “Low-Temperature FTIR Study of Gloeobacter Rhodopsin: Presence of Strongly Hydrogen-Bonded Water and Long-Range Structural Protein Perturbation upon Retinal Photoisomerization,” *Biochemistry* **49**, 3343–3350 (2010).

V. A. LORENZ-FONFRIA, Y. FURUTANI, T. OTA, K. IDO and H. KANDORI, “Protein Fluctuations as the Possible Origin of the Thermal Activation of Rod Photoreceptors in the Dark,” *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 5693–5703 (2010).

K. KATAYAMA, Y. FURUTANI and H. KANDORI, “An FTIR Study of the Photoreaction of Bovine Rhodopsin in the Presence of Hydroxylamine,” *J. Phys. Chem. B* **114**, 9039–9046 (2010).

S. NEYA, M. SUZUKI, T. HOSHINO, H. ODE, K. IMAI, T. KOMATSU, A. IKEZAKI, M. NAKAMURA, Y. FURUTANI and H. KANDORI, “Molecular Insight into Intrinsic Heme Distortion in Ligand Binding in Hemoprotein,” *Biochemistry* **49**, 5642–5650 (2010).

B-3) 総説，著書

H. KANDORI, Y. SUDO and Y. FURUTANI, “Protein–Protein Interaction Changes in an Archaeal Light-Signal Transduction,” *J. Biomed. Biotech.* Article ID 424760, 14 pages (2010).

B-4) 招待講演

古谷祐詞, 「X-H, X-D 伸縮振動領域の赤外分光法から何が分かるか？」分子研研究会「拡がるロドプシンの仲間から“何が分かるか” “何をもちたらすか”」岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2010年3月.

Y. FURUTANI, “Interaction between Membrane Proteins and Ions Studied by ATR-FTIR Spectroscopy: A Potential Tool for Drug Screening,” BIT’s 1st Annual International Conference of Medichem-2010, Beijing International Convention Center, Beijing (China), May 2010.

古谷祐詞, 「赤外分光法によるイオン輸送蛋白質の構造変化解析」アドバンス生命理学特論：世話人；須藤雄気 准教授 (名大・院理) 名古屋大学, 名古屋, 2010年7月.

古谷祐詞, 「ロドプシン-KcsA 融合蛋白質の発現とFTIRによる構造変化解析」特定領域研究「高次系分子科学」第9回ミニ公開シンポジウム, サギセミナーセンター, 広島県三原市, 2010年8月.

T. KIMURA, “In vitro protein folding dynamics in the microsecond to millisecond timescale,” The 48th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Advanced Insight into Protein Motions; in silico, in vitro and in vivo Studies, Tohoku University, Sendai (Japan), September 2010.

Y. FURUTANI, “Stimulus-Induced Difference Infrared Spectroscopy for Membrane Proteins; Visual and Archaeal-Type Rhodopsins, and Flagella Motor Protein,” Indo–Japan Joint Workshop on “New Frontiers of Molecular Spectroscopy; from Gas Phase to Proteins,” Hotel Kitano Plaza Rokkoso, Kobe (Japan), September 2010.

B-6) 受賞, 表彰

古谷祐詞, 平成19年度名古屋工業大学職員褒賞優秀賞 (2007).

B-7) 学会および社会的活動

学会誌編集委員

生物物理中部地区編集委員 (2007, 2010).

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(スタートアップ)「ATR-FTIR 分光法によるロドプシンのタンパク質間相互作用の解析」古谷祐詞 (2006年).

科研費特定領域研究「革新的ナノバイオ」(公募研究)「光駆動プロトンポンプの動作機構の解明」古谷祐詞 (2007年–2008年).

科研費特定領域研究「細胞感覚」(公募研究)「古細菌型ロドプシンの新奇情報伝達機構の解明」古谷祐詞 (2007年–2008年).

科研費特定領域研究「高次系分子科学」(公募研究)「孤立ナノ空間に形成された水クラスターの水素結合ダイナミクス解析」古谷祐詞 (2008年–2009年).

科研費特定領域研究「革新的ナノバイオ」(公募研究)「光駆動イオン輸送蛋白質の動作機構の解明」古谷祐詞 (2009年–2010年).

科研費特定領域研究「細胞感覚」(公募研究)「古細菌型ロドプシンの新奇情報伝達機構の解明と光応答性カリウムチャネルの開発」古谷祐詞 (2009年–2010年).

科研費特定領域研究「高次系分子科学」(公募研究)「孤立ナノ空間を有する有機金属錯体での特異な光化学反応の分光解析」古谷祐詞 (2010年–2011年).

科研費若手研究(B)「赤外差スペクトル法によるイオン輸送蛋白質の分子機構解明」古谷祐詞 (2010年–2011年).

科研費研究活動スタート支援「時間分解赤外分光法を用いた膜蛋白質フォールディング機構の解明」木村哲就 (2010年–2011年).

C) 研究活動の課題と展望

タンパク質の機能発現に係る構造変化を赤外分光法で捉える手法は、光を反応のトリガーとして使える光受容タンパク質において発展してきた。これまでロドプシンを中心として、光反応中間体を低温で安定化することで、精密な光誘起赤外差スペクトルを計測し、4000–1800 cm^{-1} の領域に現れる水素結合ドナー (N–H や O–H 基) の伸縮振動の情報から、様々な機能発現に重要な構造変化を見いだしてきた。今後、これらの手法を時間分解計測に発展させることで、低温で安定化できない過渡的な中間体の水素結合変化の情報を得ることを目指す。また、光に応答しないタンパク質についても、液中での計測が容易な全反射法 (ATR 法) を利用することで、イオンや化合物の結合による赤外スペクトル変化を計測し、様々な膜タンパク質における機能発現機構を明らかにすることを目指す。特に急速溶液混合法と赤外分光法を組み合わせた手法を発展させることで、微細な赤外吸収スペクトル変化 (0.001 程度以下の吸光度変化) を実時間で計測し、膜タンパク質が機能する過程でダイナミックに変化する姿を捉えたいと考えている。さらに、表面増強赤外分光法により、一層の脂質二重膜中の膜タンパク質の構造変化を時間分解計測する研究にも発展させたい。

錯体触媒研究部門

魚 住 泰 広 (教授) (2000 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：有機合成化学，有機金属化学

A-2) 研究課題：

- a) 完全水系メディア中での触媒反応
- b) 高機能ハイブリッド金属錯体触媒・金属ナノ触媒の設計・開発
- c) 新しい遷移金属錯体の創製

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) パラジウム錯体触媒，ロジウム錯体触媒などを両親媒性高分子によって機能修飾することで，これら遷移金属錯体触媒有機変換工程の多くを完全水系メディア中で実施することに成功した。水中不均一での高立体選択的触媒反応の開発を世界にさがけて成功した。
- b) 高分子分散型ナノ粒子金属触媒（有機高分子 - 金属粒子のハイブリッド），メソポーラスシリカ担持分子性遷移金属錯体（無機担体 - 有機金属のハイブリッド），金属架橋高分子の自己集積触媒（架橋構造と触媒機能のハイブリッド）を開発した。マイクロ流路内の層流界面での自己集積錯体触媒膜の創製に成功した。
- c) 新しいピンサー錯体の合成方法論を確立した。新方法論によって従来にない全く新しいピンサー錯体合成が可能となり，その物性，反応性を明らかとしつつある。

B-1) 学術論文

Y. HIRAI and Y. UOZUMI, "Clean Synthesis of Triarylaminines: Buchwald-Hartwig Reaction in Water with Amphiphilic Resin-Supported Palladium Complexes," *Chem. Commun.* **46**, 1103–1105 (2010).

C. K. JIN, Y. M. A. YAMADA and Y. UOZUMI, "Chemoselective Oxidation of Sulfides Promoted by a Tightly Convuluted Polypyridinium Phosphotungstate Catalyst with H_2O_2 ," *Bull. Korean Chem. Soc.* **31**, 547–548 (2010).

T. OSAKO and Y. UOZUMI, "A Self-Supported Palladium-Bipyridyl Catalyst for the Suzuki-Miyaura Coupling in Water," *Heterocycles* **80**, 505–514 (2010).

T. SUZUKA, Y. OKADA, K. OOSHIRO and Y. UOZUMI, "Copper-Free Sonogashira Coupling in Water with an Amphiphilic Resin-Supported Palladium Complex," *Tetrahedron* **66**, 1064–1069 (2010).

Y. HIRAI and Y. UOZUMI, "Heterogeneous Aromatic Amination of Aryl Halides with Arylamines in Water with PS-PEG Resin-Supported Palladium Complexes," *Chem. -Asian J.* **5**, 1788–1795 (2010).

Y. UOZUMI, "Green Chemistry—A New Paradigm of Organic Synthesis," *Synlett* 1988–1989 (2010).

Y. M. A. YAMADA, T. WATANABE, T. BEPPU, F. NAOSHI, T. KAORU and Y. UOZUMI, "Palladium Membrane-Installed Microchannel Deviced for Instantaneous Suzuki-Miyaura Cross-Coupling," *Chem. -Eur. J.* **16**, 11311–11319 (2010).

Y. M. A. YAMADA, C. K. JIN and Y. UOZUMI, " H_2O_2 -Oxidation of Alcohols Promoted by Polymeric Phosphotungstate Catalysts," *Org. Lett.* **12**, 4540–4543 (2010).

B-4) 招待講演

Y. UOZUMI, “Organic Transformations in Water with Polymer-Supported Palladium Catalysts,” 2010 Annual Meeting of Asian Core Program Frontiers of Materials, Photo-, and Theoretical Molecular Sciences, Taipei (Taiwan), March 2010.

魚住泰広, 「水中で有機反応は可能か——不均一パラジウム触媒による精密化学変換——」日本学術振興会創造機能化学講演会, 東京, 2010年6月.

魚住泰広, 「水中不均一での不斉Pd触媒反応」第22回万有札幌シンポジウム構築的有機合成化学: 医療そして材料科学の未来へ, 札幌, 2010年7月.

魚住泰広, 「水中不均一でのPd触媒反応」第43回有機金属若手の会夏の学校, 志賀島, 2010年7月.

Y. UOZUMI, “Organic Molecular Transformations in Water with Recyclable Transition Metal Catalysts,” NIMS 2010 Conference Challenges of Nanomaterials Science: Towards the Solution of Environment and Energy Problems, Tsukuba (Japan), July 2010.

Y. UOZUMI, “Organic Molecular Transformations in Water with Recyclable Transition Metal Catalysts,” McGill-RIKEN Scientific Workshop on Nanotechnology and Green Chemistry, Quebec (Canada), September 2010.

Y. UOZUMI, “Asymmetric Suzuki-Miyaura Coupling in Water with Polymer-Supported Palladium Complexes,” China–Japan Symposium on Catalytic Organic Synthesis, Tianjin (China), September 2010.

Y. UOZUMI, “Asymmetric Suzuki-Miyaura Coupling in Water with a Chiral Palladium Catalyst Supported on an Amphiphilic Resin,” Japan–Korea Symposium on Organometallic Chemistry, Nara (Japan), October 2010.

魚住泰広, 「クリーン有機合成を実現する水中機能性固定化遷移金属触媒」日本プロセス化学会2010ウインターシンポジウム, 名古屋, 2010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).

魚住泰広, 井上学術賞 (2010).

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).

コンビナトリアル・ケミストリー研究会代表幹事 (1998–2009).

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 誌アドバイザリ - ボード (2002–).
SYNFACTS 誌編集委員 (2005–).
ACS Combinatorial Science 誌エディトリアルアドバイザリーボード (2010–).

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-8) 大学での講義, 客員

東京工業大学大学院理工学研究科, 連携教授, 2010年4月–.

B-9) 学位授与

渡部敏裕, 「Development of Catalytic Membrane-Installed Microchannel Devices and Their Application to Organic Transformations」2010年9月, 博士(理学)

B-10) 競争的資金

科研費特定領域研究(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).
科研費特定領域研究(計画研究: 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).
科研費基盤研究(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).
科研費特定領域研究(計画研究: 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).
科研費新学術領域研究(研究領域提案型)「触媒膜導入マイクロ流路反応デバイスの創製」魚住泰広 (2010年–2011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).

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(2009年-2012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).

科研費若手研究(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).

科研費若手研究(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).

科研費若手研究(B),「水中分子変換を実現する高分子担持銅触媒の創製」大迫隆男(2010年-2011年).

C) 研究活動の課題と展望

2000年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。特に均一触媒系でさえ未開拓であった高立体選択的不斉Suzukiカップリング反応を水中不均一で達成したことは大きな成果である。またナノパラジウム粒子の高分子マトリクス内での発生・分散と固定化に成功し、アルコール酸化やハロゲン化芳香族の脱ハロゲン反応など、グリーン化学の中心課題を解決してきた。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の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) オキシシルおよびアミノラジカル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 錯体での光誘起 2, 4, 6 電子還元反応が可能となった。
- d) 水の 4 電子酸化反応での酸素 - 酸素生成過程の測定に成功。

B-1) 学術論文

Y. TSUKAHARA, T. WADA and K. TANAKA, “Redox Behavior of Ruthenium(bipyridine)(terpyridine)(carbonyl) Complex-Modified Carbon Electrode and Reactivity toward Electrochemical Reduction of CO₂,” *Chem. Lett.* **39**, 1134–1135 (2010).

T. FUKUSHIMA, T. WADA, H. OHTSU and K. TANAKA, “Photoinduced Four- and Six-Electron Reduction of Mononuclear Ruthenium Complexes Having NAD⁺ Analogous Ligand,” *Dalton Trans.* **39**, 11526–11534 (2010).

T. FUKUSHIMA, E. FUJITA, J. MUCKERMAN, E. DOMITRY, T. WADA and K. TANAKA, “Photochemical Stereospecific Hydrogenation of a Ru Complex with an NAD⁺/NADH Type Ligand,” *Inorg. Chem.* **48**, 11510–11512 (2010).

S. FUKUI, N. SUZUKI, T. WADA, K. TANAKA and H. NAGAO, “Formation and Structure of an (Iminium)Ruthenium Complex and Reaction of the Iminium Ion Moiety with Alcohols,” *Organometallics* **29**, 1534–1536 (2010).

B-4) 招待講演

K. TANAKA, “Electronic structures of dinuclear Ru-dioxolene complexes and reactivity toward four-electron oxidation of water,” 11th Eurasia Conference on Chemical Sciences EuAsC₂S-11, The Dead Sea (Jordan), October 2010.

K. TANAKA, “Four-Electron Oxidation of Water Catalyzed by Dinuclear Ru Complexes,” Inaugural (1st) International Conference on Molecular and Functional Catalysts, Singapore (Singapore), July 2010.

K. TANAKA, “Development of Metal Complexes Aimed at Storage and Conversion of Chemical Energy,” 240th Annual Meeting of American Chemical Society, Boston (U.S.A.), August 2010.

K. TANAKA, “Reversible Conversion between Chemical Energy and Electrical One Mediated with Metal Complexes,” 8th Japan–China Metal-Cluster Symposium, Xian (China), August 2010.

K. TANAKA, “Photo-Induced Multi-Electron Transfer Catalyzed by Ru Complexes,” Pacifichem 2010, Honolulu (U.S.A.), December 2010.

K. TANAKA, “Four-Electron Water Oxidation Catalyzed by Ru Complexes,” Pacifichem 2010, Honolulu (U.S.A.), December 2010.

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」日本化学会春季年会, 東京, 2010年3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 (2006–2010).

日本学術振興会学術センター・化学調査班委員 (2007–2010).

文部科学省理工系委員会委員 (2007–2010).

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

科学技術振興機構 CREST 研究,「化学エネルギー変換素子の構築」田中晃二 (2001年度-2005年度).

科研費基盤研究(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).

科研費特定領域研究,「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).

科研費特別推進研究,「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, 二酸化炭素を有機合成の 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。

7．点検評価と課題

昨年度に引き続き外国人運営顧問 Anthony J. Stace 教授（Physical Chemistry, Univ. Nottingham, UK）と Jean-Pierre Sauvage 教授（French Academy of Science, France）によって研究活動評価を実施していただき、また新たに Graham Fleming 教授（Univ. California, Berkeley, USA）と柳田敏雄特任教授（阪大）に研究顧問をお願いし、所全体の研究評価、研究体制についての提言をいただいた。

外国人運営顧問 Anthony J. Stace 教授と Jean-Pierre Sauvage 教授による、理論・計算分子科学研究領域の全グループ、また物質分子科学研究領域と生命・錯体分子科学研究領域の一部のグループの研究評価が、平成 23 年 1 月に数日間 にわたって行われ、その評価レポート、また分子科学研究所全体のあり方についての提言をいただいた（以下のページに掲載）。特に、理論・計算分子科学研究領域は世界的にみても最大規模であり、分子科学の重要な範囲をほとんどカバーしており、各グループの研究が非常に優れていること、またヒヤリングを受けた実験グループが世界レベルのユニークな研究を行っていることなど、研究面での高い評価をいただいた一方、院生やポスドクの数が少なく、研究室サイズが小さ過ぎること、また所外との共同研究は盛んではあるが所内の研究グループ間の共同研究が十分でないことなど、所全体としての問題点の指摘を受けた。

その対策の一環として、従来のポスドク制度（IMS フェロー）をより柔軟に運用する一方、新たに特任助教制度を導入してきている。また、京都大学、名古屋大学、名古屋工業大学との学生の交流会や、新しい大学院制度の検討などを行っている。また、所内で交流の場を増やすために、研究所コロキウム、所長招聘研究会を活性化し、その後の検討・交流会の実施などを行ってきた。国際性の向上のため、従来、インド、韓国などとの研究交流が盛んであったものを再度活性化し、また、欧米のいくつかの拠点大学・研究所との研究協力を深めていく予定である。

また、研究顧問 Graham Fleming 教授による研究・組織評価が、平成 22 年 12 月に 4 日間にわたって行われ、所全体の研究のヒヤリングによる各研究領域の研究レベル評価、また改善の方向性についてのアドバイスを受けた。分子科学研究所が目指すべき新しい研究の方向性や、その実施のための組織化等についての提言を受けた。

分子科学研究所では、これからの研究の 2 つの柱「エクストリーム状態の分子科学」と「ポストナノサイエンス（分子システム研究）」を設定し、その具体的なアクションプランの作成を行い、またそれらを実行するための研究グループのあり方について検討を行っている。

上記の評価以外に、毎年 1 月末に、全グループリーダー（教授および准教授）による研究検討会を実施し、分子科学研究所における研究内容のヒヤリングを行っている。

（大峯 巖）

7-1 外国人運営顧問による点検評価

7-1-1 Anthony John Stace 外国人運営顧問

原文

To: Prof. Iwao Ohmine, Director-General of IMS

From: Anthony J. Stace, Professor of Physical Chemistry, University of Nottingham, U. K.

Subject: Report of my visit, January 4th–8th

As part of the review process during my visit in 2009 I had the opportunity to examine research undertaken within groups that fell under the headings of Photo-Molecular Science and Materials Molecular Science. During this visit in 2011, discussions with staff have concentrated on research under the heading of Theoretical and Computational Molecular Science; however, there was also an opportunity to discuss recent new developments that have taken place within the research program of Prof. N. Nishi from the division: Materials Molecular Science and to review the work of Prof. Furutani from the division: Life and Coordination-Complex Molecular Science. I should state that many of the views expressed in my report last year regarding the overall excellence of the experimental research undertaken at IMS remain true, and the Institute continues to justify its position as one of the World's leading centres for research. This document will focus primarily on those aspects of the Theory and Computational research at IMS that I have been able to examine during this current review period.

First, a few general observations on the division as a whole. Over a period of three days, I met with the leaders of eight theoretical and computational research groups. With this number of full and associate professors, the theoretical division is significantly larger than one would expect to find in most universities either in Japan or World-wide. Taking my own university (Nottingham) as a reference point, then the IMS group is twice as large and this is probably true in most other universities. Therefore, the division should have a “critical mass” that brings significant intellectual and (possibly!) financial benefits to IMS. Intellectual benefits should come from a pooling of theoretical techniques and resources, whereby each new research problem does not always require the investigator to ‘reinvent the wheel,’ but instead he/she can call on the reservoir of methodologies that already exists with the division. Financial benefits could come from the group as a whole being able to justify significant investment in state-of-the-art computational power.

The breadth of theoretical research being undertaken within the division is very impressive, and ranges from the analysis of core excitations in gas phase molecules, through to solid state simulations and the study of conformational changes in biomolecules. All members of the division are actively engaged in a mixture of theory development and application and there is no evidence of groups, for example, just running computer code developed by others.

Each group leader spent approximately 45 minutes summarising their current research and describing plans for future projects. Each presentation was very comprehensive and provided details of both the theoretical/computational background and applications to real systems with evidence of supporting experimental data where applicable. Since it is not possible to give a detailed breakdown of all the material covered in each presentation, I will provide what **in my opinion** are the research highlights from each project.

Prof. Nagase—Important developments in the implementation of fast and accurate theoretical methods for the treatment of large molecules. The identification of a novel class of endohedral metallofullerenes with unique magnetic and electronic properties.

Prof. Hirata—Application of statistical mechanics methods to the treatment of processes in biomolecular systems where hydration

is considered important. Important problems being treated include ion transport and the thermodynamics of the hydrolysis reaction in ATP.

Prof. Yanai—Implementation of multireference methods for the treatment of systems where electronic motion is strongly correlated. These methods are seen as essential for the development of accurate quantum chemistry calculations on transition metal and other open-shell or high spin systems.

Prof. Okumura—Development of new methods for the simulation of small biomolecules in water. New techniques make it possible to sample regions of configuration space that would not otherwise be accessible using conventional MD methods.

Prof. Ehara—Development of methods for the study of excited states and chemical reactivity. Impressive results on the interpretation of double core hole spectra in small molecules, and where the match with experimental results is excellent.

Prof. Saito—Development of new correlation methods for understanding the vibrational and librational motion of molecules in the condensed phase. The work has led to important advances in our understanding of anomalous behaviour in the heat capacities of bulk water.

Prof. Nobusada—Research focuses on the dynamical behaviour of electrons in materials that has been induced by electromagnetic radiation. Has made important advances in the theory of light matter-interactions making it possible to propose new quantum devices based on nanoscale particle arrays.

Prof. Yonemitsu—Important advances in the study of photo-induced phase transitions. Calculations have revealed the time sequence of events that lead to the generation of a metallic phase following the photoexcitation of a two-dimensional organic insulator.

All of the members of the Theoretical and Computational Molecular Science division have an excellent track record for publishing in leading international journals, and my overall view of the division is that the research undertaken is of the highest quality and competes very effectively at an international level.

From the Materials Molecular Science division I also had an opportunity to examine the work of Prof. Nishi on the development and characterisation of new structural forms of carbon and carbon/metal nanowires. It is very pleasing to see how rapidly this work has moved from the laboratory out into areas of potential application, such as the development of new types of fuel cell.

From the Life and Coordination-Complex Molecular Science division I had an opportunity to examine the work of Prof. Furutani. He has developed novel light-induced difference methods in FTIR spectroscopy that are able to reveal the presence of water molecules trapped within proteins. The experiments provide evidence of water clusters in proteins, and can reveal details of the mechanism of proton transport and how ions, such as chloride, interact with proteins.

As noted in my report last year, where there is a deficiency within IMS, and this is reflected also in the Theory division, is in the ability of the Institute to attract good graduate students. I am pleased to see that there is an important new initiative in the form of SOKENDAI, which should provide graduate students with the academic background necessary to pursue a successful research career. Hopefully, this initiative will begin to take effect soon. As with Research Institutes and Universities in many countries, there are continuing concerns over finances. Although the recent cuts do not appear to have been as severe as were expected this time last year, the long-term future of IMS as one of the World's premier institutes for the pursuit of fundamental research does rely on there being stable sources of income. If, for example, number of good graduate students continues to remain low, then IMS will require the financial support necessary to attract the best post-doctoral fellows from across the World.

As observed last year by myself and also by several previous Foreign Councillors, many of the research groups at IMS are

small—some far smaller than would be seen in a typical research-active university. On the positive side, this pattern allows the Institute to employ more scientists and so develop a more diverse research portfolio; however, it can also limit progress within individual groups. The Institute might want to consider the possibility of reducing the number of senior scientists working in each division. Such a step would release money to support a larger number of postdoctoral workers, which would enable some of the groups to expand. Since several scientists are due to retire within the next year, a reduction in staff could be achieved simply by not appointing replacements.

From the two occasions that I have been able to review the work undertaken at IMS, my overall impression is of an Institute consisting of a very many highly talented individuals. However, talent alone may not be sufficient to survive the next 5 or so years of financial difficulties. It may be necessary for the Institute to adopt a more collective approach to research and develop new projects and research directions that actively emphasise collaborations between research groups.

訳文

分子科学研究所 大峯 巖 所長へ

英国ノッティンガム大学物理化学教授 アントニー・J・ステースより

件名：1月4日から8日の訪問リポート

2009年の評価の為の訪問では、光分子科学・物質分子科学の両研究領域の研究グループで行われています研究内容について評価を行いました。2011年の訪問では、理論・計算分子科学研究領域のスタッフの研究に関する議論を集中的に行いました。しかし、同時に、物質分子科学研究領域の西教授の最近の研究の進展状況や生命・錯体分子科学研究領域の古谷准教授の仕事をレビューする機会も持てました。昨年の報告に書きましたように分子研で行われています実験系の研究が全体的な優越性を示しているという多くの私の評価は、(理論系のそれについても)同じく正しいものですし、この研究所は世界の最先端の研究センターの一つであるという立場が正しいことを確信しました。この報告書は、今回のレビューの期間に審査を行った分子研の理論及び計算科学の研究に対するこのような観点について中心的に述べるものです。

理論・計算分子科学研究領域に関する全体的な立場からの幾つかの一般的な印象：3日間にこの領域の8名のグループリーダーに会いました。この(8名という)数の教授及び准教授は、日本はおろか世界的にも多くの大学に見られる数に比べると極めて多いと言えます。私自身の大学(Nottingham)と比較しても分子研の(理論)グループの規模は2倍ですし、他の殆どの大学と比べても同じ状況でしょう。従って、この領域は、分子研に極めて知的な、そして(恐らく)財政的な有利性をもたらすに“必要な量”を持つべきです。知的な有利性とは、理論的(研究開発)技術とその資源のプール化が可能ですが、それによって、個々の新しい研究課題にあたる研究者が、“車を最初から作り直す”必要を常には伴わず、その代わりに領域内に既に存在する方法論の蓄積を利用することが出来るのです。財政的な有利性は、グループ全体に於いて、最高レベルの計算機パワーへの大きな投資を正当化させることを可能にする点でしょう。

この領域内では実に幅の広い理論的研究が行われていることが大変印象的なことであり、気相分子のコア励起状態の解析や、凝縮状態のシミュレーションから生体分子の構造変化の研究に至るまでの大きな広がりを示しています。この領域の全てのメンバーが理論と応用の両面の発展において活発な活躍をしています。そして、例えば、グループの中には、他人によって開発されたコードを計算機に走らせているだけの人が居ないのは明らかです。

それぞれのグループリーダーが、彼らの最近の研究とこれからのプロジェクトをおよそ45分にわたって紹介してくれました。それぞれの発表は、大変広範囲にわたるもので、理論的あるいは計算科学的な背景を詳細に説明し、その理論が適用可能な実験データによって裏付けられる実在系への応用についてのものでした。個々の紹介で示された題材の全てを詳細に評価することは難しいので、私なりの意見でそれぞれのプロジェクトのハイライトと思われるものを以下に紹介します。

永瀬教授：大きな分子の速くて正確な理論計算手法を提供する重要な開発。ユニークな磁気特性と電子的な振る舞いを持った新しい種類のエンドヘドラル金属フラレン（金属原子を内部に閉じ込めたフラレン）の同定。

平田教授：水和現象が重要な働きをしていると考えられる生体分子系の（動的）過程の統計力学的手法による取扱い。（特に、）イオンの輸送やATPの加水分解反応の熱力学的（データ）を含んだ重要な問題に取り組んでいます。

柳井准教授：電子の運動が強く相関している系を多参照法によって取り扱うことを可能にする（理論）開発。これらの手法は、遷移金属系や他の閉殻系、高スピン系の正確な量子化学計算には必須のものと思われます。

奥村准教授：水中に存在する小さな生体分子の（振る舞い）のシミュレーションを行う新しい手法の開発。この新しい技術は、通常の分子動力学法ではできない配置空間における（必要な）領域を取り上げることが可能にしています。

江原教授：励起状態と化学反応性を調べる手法の開発。小さな分子のコア／ホール二重（励起）スペクトルの説明は実験結果との絶妙な一致が見られ、印象的なものでした。

斉藤教授：凝縮系での振動や回転運動の理解のための新しい相関手法の開発。この仕事は、バルクの水の熱容量の異常な振る舞いを理解する上で重要な役割を果たします。

信定准教授：電磁波によって誘起される物質内の電子の動力学的な振る舞いに研究の焦点があります。光と物質との相互作用理論を進展させ、ナノスケールの粒子列による新しい量子デバイスを提案するという重要な発展を遂げました。

米満准教授：光誘起相転移の研究に於ける重要な発展。2次元の誘起絶縁体の光励起に伴う金属相発生の時間変化を理論計算で明らかにしました。

理論・計算分子科学研究領域の全てのメンバーが先端の国際誌に（成果を）出版するという優秀な業績を挙げてきました。私のこの領域に対する全体的な評価は、最高の質を持つ研究業績を挙げており、国際的な水準でも大変有効に競争しているということです。

物質分子科学研究領域からも、西教授の新しい構造を持った炭素や炭素／金属ナノワイヤーの開発とその物性に関する仕事を知る機会を持ちました。この仕事が如何に急速に実験室レベルの仕事から例えば新しい燃料電池への応用開発レベルに進展しているかを知る事が出来たのは、大変喜ばしい事でした。

生命・錯体分子科学研究領域からは、古谷准教授の仕事を知る機会を持ちました。彼は、蛋白質の中にトラップされた水分子の存在を明らかにする新しい光誘起 FTIR 分光法を開発しました。この実験は、蛋白質の中に水クラスターが存在することを明らかにし、プロトン移動機構や塩素のようなイオンが蛋白質と相互作用する機構の詳細をも解明します。

昨年の私の報告でも指摘しましたように分子科学研究所に欠けていますものは、これは理論領域にも言えることで

すが、優秀な大学院生を集める能力でしょう。嬉しいことに、総研大という形で重要な新しい改善策が見られます。それは、大学院学生に研究者としての素晴らしい経歴を具えさせるに必要なバックグラウンドを与えるでしょう。この改善の道は、早急に効果を現し始めると期待されます。多くの国の研究所や大学でもそうであるように、このところ財政的な懸念が続いています。昨年この時期に心配された程には今回の予算削減は起こらなかったようですが、分子研が基礎科学の分野で世界の最高の研究をずっと将来に亘って続けて行けるかどうかは、如何に安定な財源を確保できるかにかかっています。もし、例えば、多くの優秀な大学院生を確保できないならば、分子研は世界中から優秀な博士研究員を集めることが出来る財政的な支援を必要とするでしょう。

昨年私が指摘しましたように、そしてこれまでも何人かの外国人顧問が指摘しましたように、分子研の多くの研究グループは小さい、幾つかのグループが活発な研究を行っている典型的な大学に比べて遙かに小さいのです。ポジティブな見方をすれば、この形体は研究所がより多くの科学者を雇用し、さらに広く研究分野の拡大を図ることができるでしょう。しかしながら、それは（それぞれの領域における）各グループの中での発展にしかならないでしょう。研究所は、各研究領域に属するシニアな研究者の数を減らす可能性を検討しなければなりません。そのような方策を行うことは、より多くの博士研究員の雇用を図って幾つかの研究グループの規模を拡大するに必要な資金を生み出すでしょう。来年度までに（6名の）研究者が退職しますから、その後任をすべて埋めることをせずに、（常勤の）スタッフ数を減らすことが可能となるでしょう。

分子研で行われている仕事をレビューするこの2回の機会において、研究所は極めて多くの恵まれた才能のある研究者を抱えているという全体的な印象を持ちました。しかしながら、能力だけでは、次の財政的に困難な5年やそれ以上の期間を乗り越えるには不十分です。研究を集中的に展開する体制の採用と研究グループ間の共同研究を活性化させる新しいプロジェクトや研究方向を打ち出すことがこの研究所にとって必要となるでしょう。

7-1-2 Jean-Pierre Sauvage 外国人運営顧問

原文

Jean-Pierre Sauvage

Professeur Émérite de l'Université de Strasbourg

Directeur de Recherche Émérite du CNRS

Distinguished Visiting Scholar Northwestern University

IMS, Okazaki

Evaluation Report (Jean-Pierre Sauvage)—January 2011

First, I would like to thank Prof. Koji Tanaka for organising everything for my visit and for being such a wonderful host. Thank you! I also thank IMS for inviting me and allowing me to visit them once more and interact with a few group leaders.

My general impression, after discussing with three PIs (Principal Investigators) working at IMS (Professors Tada, Nagata and Hiramoto), is very good to excellent. However, for most of the points I raised on the occasion of my last visit to IMS (evaluation of the 8 teams of the Life and Coordination-Complex Molecular Science Department, September 29 to October 2nd, 2009), limited

progress has been done in terms of **attracting top level students** and **internal collaborations** as well as for the implementation of a common platform aimed at inducing interaction between groups which seem to have difficulties to tackle joint projects with their neighbours. I do not know if it was realistic to hope for improvement but one can –once more– note that the same weak points still exist. This being said, the essential mission of the researchers is to do high level science, and on this side **I have strictly no doubt that IMS is very successful!**

In my previous report, I also suggested the various PIs to prepare a small document with a list of publications for the last 4 years or so, as well as a citation record (overall number of citations, h index and number of citation per paper). I am very conscious that bibliometric data have to be handled with great care but, on the other hand, it is almost impossible to ignore them nowadays.

1. Prof. Misuki TADA

This very young group is working in an important basic area of research (catalysis) which can potentially lead rapidly to applications (industrial transformations and organic synthesis processes for pharmaceutical companies). The group leader, Dr. Tada, showed an impressive energy and enthusiasm during the discussion. In addition, some of the results presented are with no doubt very novel and promising in terms of efficiency (yields, turnover numbers and selectivity). The general principle is to perform catalytic reactions using oxide-supported transition metal complexes. The molecular catalysts themselves are not always completely new but the combination of such molecular species with surfaces is certainly very novel. It leads to exceptionally active catalytic systems compared to the analogous catalysts used in solution. It has also been possible to generate chirality close to the surface which is potentially of interest for asymmetric catalysis, which seems to be of prime importance in industry. Prof. has also presented some nice work on the generation of phenol from benzene and O₂, using a surface-confined rhenium cluster as catalyst. The role of two interstitial nitrogen atoms is intriguing and seem to be related to a particularly efficient stabilisation of the cluster edifice. Another interesting project is dealing with molecular imprinting on the surface and the use of the cavities obtained (with their association selectivity for certain substrates) with the hope that these systems will behave in way reminiscent of enzyme active sites. Of course, the analogy between the active site of an enzyme, which is highly adaptable to the substrate, and the present systems has limitations.

No doubt that Prof. Tada's group is very productive and creative. It is very beneficial to the IMS that Prof. Tada accepted the position offered by the Institute.

2. Prof. Toshi NAGATA

The general project of the group (artificial photosynthesis) is certainly very important and interesting. It is also extremely ambitious and will involve long term research, successes and failures. It is very likely that the researchers will obtain results which are not necessarily the ones they would have hoped to get. Artificial photosynthetic systems, based on molecular chemistry, have been long-awaited molecular devices. It is indeed essential to try and mimic what Nature could achieve (although on a much longer period of time than humans!) in terms of conversion of solar energy to chemical energy. The group led by Prof. Nagata has a recognised expertise in the field of organic synthesis, which is indispensable for building multi-component molecular species able to behave in way reminiscent of the Photosynthetic Reaction Centres as well as a deep knowledge of natural photosynthesis (mostly green plants). Generally speaking, research projects involving multi-step synthesis are extremely time-consuming and require a lot of work, the "trial and errors" strategy which has to be used in synthesis, being certainly risky. This is probably the reason why the productivity

of researchers involved in such an approach is not as high, in terms of publications, as that of scientists working in others research fields. A possible improvement would be to simplify the structure of the target molecules if possible, so as to reach interesting functions without paying such a high synthetic price.

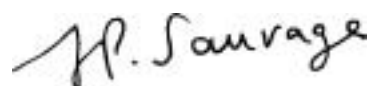
I note that Prof. Nagata has published a few joint papers with Prof. Tanaka. This is certainly a positive aspect of the work and similar collaborative work should be encouraged among other teams.

3. Prof. Masahiro Hiramoto

The group of Prof. Hiramoto is mostly working on solar cells. They have selected p-I (for “interlayer”)-n devices, based on organic electro- and photoactive chromophores. As stated by the PI, a very important discovery related to the use of **two** organic components, made in 1986 by Tang, had a huge impact on the field and on the research of Prof. Hiramoto. Combining two organic molecular species seems to be the best solution to favour charge separation in the material and thus generation of Charge Transfer excitons leading to large photocurrents. Interestingly, similar concepts are used in purely molecular systems in solution, in the field of “artificial photosynthesis,” also in relation to models of the biological photosynthetic apparatus. Prof. Hiramoto’s team has focused on C₆₀ and a simple metal-free phthalocyanine. These compounds are commercially available or easy to obtain in the lab and they are chemically stable (especially phthalocyanine). The research team led by Hiramoto explores both the most fundamental aspects of organic solar cells and the potential of these devices in relation to applications for solar energy conversion. It is indeed important to identify the weak points of the present systems so as to be able to improve the performance of the available solar cells in terms of efficiency and long-term stability of the materials when exposed to light. Obviously, the field may find important applications which explained why it is highly competitive. The contributions of Prof. Hiramoto and his co-workers is very significant. I have no doubt that the team should be supported if IMS wants to be competitive in this field within the international context.

Okazaki, January 8, 2011,

Jean-Pierre SAUVAGE



訳文

Jean-Pierre Sauvage

ストラスブール大学名誉教授

CNRS 名誉研究所長

ノースウェスタン大学名誉招聘教授

評価レポート

最初に、私の訪問についてあらゆる尽力をいただいた素晴らしいホストの田中晃二教授に感謝します。どうもありがとうございます！ また、私を招待し数人のグループリーダーと接するよう配慮してくださった分子研にも感謝します。

分子研で働く3人のグループリーダー（唯、永田、平本）と議論して、「大変良い～素晴らしい」という一般的な

印象を持った。しかしながら、前回の訪問（2009年9月29日～10月2日、生命・錯体分子科学研究領域の8グループの評価）の際に指摘した点の中で、以下の点についてはあまり進歩していないと感じた。すなわち、最高レベルの学生を勧誘すること、内部の共同研究を促進することである。後者については、グループ間で共同のプロジェクトに取り組むことが困難なようであり、グループ間の相互作用を引き起こすための共通基盤を作り上げる必要がある。改善を望むことが現実的かどうかは私には判断できないが、同じ弱点が未だに存在していることはもう一度指摘しておきたい。その上で申し上げれば、研究者の最も重要な使命は高いレベルのサイエンスを行うことであり、この点については分子研が非常に成功していることには何の疑いもない。

前回の報告で、私はそれぞれのグループリーダーに過去4年程度の業績リストと、引用記録（全体の引用回数、H指数、論文ごとの引用回数）を提出するよう求めた。このような計量書誌学データは注意深く扱うべきものであることは十分に理解しているが、一方今日ではこれを無視することはほとんど不可能である。

1. 唯美津木准教授

このグループは非常に若く、重要な基礎科学（触媒）の研究を行っている。この分野は、工業的な化学変換や製薬企業の有機合成化学などの応用に直結する可能性を持っている。グループリーダーの唯准教授は、議論の間中すばらしいエネルギーと熱意を見せてくれた。それに加えて、得られた成果のうちいくつかは非常に新しく、効率（収量、ターンオーバー数、選択性）の点できわめて有望である。全体的な方針は、酸化物に担持された遷移金属錯体を用いて触媒反応を行うことである。触媒分子自体はすべて新しいものを使っているわけではないが、そのような分子と表面との組み合わせは間違いなく非常に新しい。その結果、溶液中で類似の触媒を使うよりもはるかに高活性な触媒系を作ることに成功している。さらに、表面付近でキラリティを誘起することに成功しており、これは工業的に重要な不斉触媒に展開できる可能性がある。唯准教授はまた、表面担持レニウムクラスターを用いて、ベンゼンと酸素からフェノールを合成する見事な成果を発表している。隙間にある2つの窒素原子の役割はたいへん興味深く、クラスター構造が特別に安定化されていることと関係しているように思われる。もう一つの興味深いプロジェクトは、表面上の分子インプリンティングを用いて、特定の基質に選択性を持つ空孔によって酵素の活性中心と似た反応系を組み立てようとするものである。もちろん、酵素の活性中心は基質に対して非常に柔軟に適合するものなので、このような系とのアナロジーには一定の限界は存在する。

唯准教授のグループが非常に生産的かつ創造的であることは疑いない。唯准教授が分子研に着任したことは、研究所にとって大きな利益があったと言える。

2. 永田 央准教授

このグループのプロジェクト（人工光合成）は非常に重要かつ興味深い。それと同時に、非常に野心的であり、長期間の研究と成功・失敗を含むものである。この種の研究では、必ずしも最初に意図していたわけではない結果が得られることが非常にしばしばある。分子化学に基づく人工光合成は、古くから目標とされてきた分子素子である。太陽エネルギーを化学エネルギーに変換するという点で、自然がこれまでに達成してきたことを模倣することは、確かに重要である（もちろん、自然は人類よりもはるかに長い時間をかけてきたわけではあるが）。永田准教授のグループは、優れた有機合成技術を持つものとして認知されており、これは光合成反応中心と類似の機能を持つ複合分子系を組み立てるには必須のものである。また、天然の光合成系（特に緑色植物）についての深い知識も持っている。一般的に言えば、このような多段階の合成を含むプロジェクトは多くの実験と試行錯誤を必要とし、非常に時間がかか

るため、大きなリスクを伴う。このようなアプローチをとる研究者は他分野の研究者に比べて、論文数という点での生産性が低くなることは避けられない。一つの改善策は、もし可能であれば標的化合物の構造を単純化して、それほど大きな合成上の代償を支払うことなく興味深い機能を達成することであろう。

永田准教授は田中教授と共著の論文を出している。これは良い点であり、他の研究グループ間でもこのような共同研究を進めることが推奨されるべきである。

3. 平本昌宏教授

平本教授のグループは太陽電池について研究している。選んだのは p-I (interlayer)-n 型のデバイスで、電気的活性・光活性を持つ有機物を用いている。平本教授が指摘する通り、1986 年の Tang らによる 2 つの有機成分による太陽電池に関する重要な報告が、この研究に多大な影響を与えている。2 つの有機分子を組み合わせることは、物質中の電荷分離とエキシトン生成によって大きな光電流を得るための最善の策である。興味深いことに、生体系の光合成を模倣した「人工光合成」分野における溶液中の分子系においても、同様のコンセプトが使われている。平本教授のグループは、 C_{60} と単純なフリーベースフタロシアニンに注目している。これらの化合物は市販されているか、研究室で容易に調製することができ、化学的にも安定である（特にフタロシアニン）。平本教授のグループは、有機太陽電池の最も基本的な性質について探求するとともに、太陽エネルギー変換への応用の可能性も視野に入れている。現状のシステムの弱点を解明することは重要であり、太陽電池の効率や光照射下での長期間の安定性を改善するのに有用である。この分野が重要な実用化につながることは明らかであり、そのために激しい競争がある。平本教授のグループは著しい貢献をしてきている。分子研がこの分野で国際的な競争力を維持するためには、このグループへのサポートが必要であることは疑いない。

2011 年 1 月 8 日

Jean-Pierre Sauvage

（署名）

8．研究施設の現状と将来計画

共同利用設備を充実させ、大学等の共同利用研究者の研究支援を行うことが大学共同利用機関の主要な役目のひとつである。1975年の研究所発足当初から装置開発室と機器センターを設置し、1976年に化学試料室、1977年に極低温センターを設置した。さらに1979年には電子計算機センターに大型計算機を導入し、1983年から極端紫外光実験施設（UVSOR 施設）で放射光源装置が運転を開始した。これらの施設では単に設備を設置するだけでなく、共同利用支援業務を滞りなく行うために技術職員を充実させた。また、高度な研究を進めるためには研究開発が不可欠であり、研究職員も配置した。

流動性の高い分子科学研究所の場合、着任後の研究立ち上げスピードの速さが重要である。また、各研究グループサイズが小さいことも補う必要がある。このような観点でも施設を充実させることが重要である。それによって、転出後もこれらの施設の共同利用によって研究のアクティビティを維持することが可能である。研究者が開発した優れた装置が転出後、施設の管理となって、さらに広く共同利用されるケースもある。このように、研究所として見た場合、施設の充実には研究職員が流動していくシステムそのものを支援することになる。従って、施設の継続的な運営が重要であり、毎年、所全体に定員削減、人件費削減の要請があっても施設の技術職員については手を付けず技術の向上に努め、絶えず技術レベルの高い人材を確保するようにした。技術職員が研究所外に出かけその高い技術力で研究支援するなどの技術交流を可能とした。さらに長期戦略が必要な施設には教授を置くことで、現在は、施設所属の研究職員であっても流動性を保てる方向になっている。

現在、極端紫外光研究施設（UVSOR 施設）、計算科学研究センター（組織的には岡崎共通研究施設のひとつ）が大型設備を有し、計画的に高度化、更新を行うことで世界的にトップクラスの共同利用を実施している。国内外には超大型の放射光施設やスーパーコンピュータ拠点があるが、それらとの連携を図りつつ、差別化・役割分担を行い、機動性を活かした特徴ある共同利用が進んでいる。分子制御レーザー開発研究センター（1997年設置）、分子スケールナノサイエンスセンター（2002年設置）、機器センター（2007年に旧機器センター、旧極低温センター、旧化学試料室の機能を再構築して設置）は本来の共同利用支援業務を行う一方で、それぞれ最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点事業、ナノテクノロジー・ネットワーク事業、大学連携研究設備ネットワーク事業をそれぞれ受託し、特定分野の重点的な強化、大学等の研究を支えるシステム作りを行ってきた。また、装置開発室は高度な特殊装置・コンポーネント開発にその高い技術力を活かすべく、研究所外からの依頼に対応することで共同利用施設としての役目を果たしている。

（大峯 巖）

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(一定ビーム強度運転)導入に向けての整備も順調に進み,2010年度よりトップアップ運転での定常的な共同利用を開始した。

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つの方向で考えてきたが,幸い,前者について予算化され2011 - 2012年に実現できる見通しとなった。その具体的な内容は,UVSOR-II 蓄積リングで唯一建設以来手つかずであった偏向電磁石を,ビーム収束作用を持つ複合機能型に交換することでエミッタンスを現在の27 nm-rad から15 nm-rad 程度まで下げ,さらに高輝度化を図るものである。また,アンジュレータ1台を増設し,合計6台のアンジュレータを稼働させる。新しいアンジュレータ用のビームラインには顕微分光装置を組み込み,UVSOR の高輝度特性を活かした研究を展開する。

上記の高度化により,一層の高度な共同利用研究を推進しつつ,次期計画の具体化に向けた検討を進める。今のところ,

- i) 1.5-2.5GeV 級新第3世代リング
- ii) 1GeV 級超高輝度リング
- 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。ii) は汎用性よりも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。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はずである。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。

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。

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。平成19年度から、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、現在の専任教員は、平本昌宏教授、鈴木敏泰准教授、永田央准教授、櫻井英博准教授の4名である。

共同研究支援に関しては、分子科学研究所が、平成19年度から文部科学省・先端研究施設共用イノベーション創出事業の一環であるナノテクノロジー・ネットワークプロジェクトを受託しており、ナノセンターが業務としてこれを運営している。本プロジェクトを遂行するため、併任教員を配置している。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（岡崎統合バイオサイエンスセンター）、永瀬茂教授、唯美津木准教授が併任し、ナノネットプロジェクト業務を実施している。また、920MHz NMRでの温度可変固体プローブ開発を目的として、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には、920MHz NMR、300kV 分析透過電子顕微鏡、走査電子顕微鏡、集束イオンビーム加工機、クリーンルームがあり、クリーンルームを除いてはナノネットを通して共同利用（協力研究と施設利用）に供されている。また、UVSOR-IIに設置された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）は利用者が多く、昨年度からUVSORとの連携（BL4Bを一定時間ナノセンターのビームタイムとして配分）により、ナノネットを通して共通機器的に運用している。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、専任教授・准教授全員、センター以外の教授・准教授若干名（併任のセンター教員を含む）ならびに外部委員からなる。平成22年度の外部委員は、夢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、日原岳彦名古屋工業大学大学院工学研究科准教授、神谷格豊田工業大学教授であった。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ている。

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及びフラー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。所内でも、岡崎統合バイオサイエンスセンターの加藤晃一教授のグループが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おり、さらに、岡崎統合バイオサイエンスセンターの桑島邦博教授のグループもパワーユーザーであり、所内外とも充実した先端利用がなされている。また、安定な共同

利用運用に加えて、本年度は、新たに西村准教授が温度可変固体プローブを開発し、共同利用供与を行える段階である。920MHz NMR と同じ環境で作動する予備装置として 600MHz 溶液固体 NMR 装置が機器センターに納入され、来年度から公開される。これにより 920MHz NMR がさらに有効に利用できると期待できる。

やや中期・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。予備測定を実施するための 600MHz 溶液固体 NMR 装置の導入が実現できた。920MHz NMR を最大限有効に活用するには、同じ環境で作動する予備装置を利用できることが極めて重要である。また、現状では ^1H と ^{15}N の 2 核種しか測定できないので、核種の拡張を目的としてプローブを開発する。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。

平成 22 年度には協力研究 32 件、施設利用 22 件（1 月 13 日現在）を採択し、うち協力研究 14 件、施設利用 12 件は実施した（来所予定確定分を含む）。所内利用も 51 件に上っている（1 月 13 日現在）。代表的な成果を以下に挙げる。

1) 最高周期の鉛を骨格にもつ芳香族化合物の初めての合成

この研究成果は埼玉大学の斎藤雅一教授らによって国際誌 *Science* (2010) に発表されたもので、ジリチオプルンボールを合成し、分子研・永瀬教授らとの大規模量子化学計算支援を受けて、炭素 π 電子系骨格に鉛を有する初めての芳香族化合物であることを明らかにした。*Nature* 誌、*Chemistry World*、*Chemistry&Industry* でも紹介され、国内でも数社による新聞報道があった。

2) 有機物宇宙微粒子（ダスト）類似物の再現合成

東北大学の木村勇気助教らは、有機物宇宙微粒子（ダスト）の類似物の再現合成に初めて成功し、未知であったグラファイトウィスカーと空洞炭素質粒子の生成過程を提案した。前者は金属フリーのグラファイトが触媒となるガスとの反応、後者は宇宙線の照射による原子空孔の生成、拡散、集合過程が鍵となるものである。ナノセンターの透過分析電子顕微鏡が利用された。本成果は国際誌 *Nanoscience and Nanotechnology Letters* (2010) と *Astrophysical Journal Letters* (2 件、2009、2010) に発表され、NASA の *News & Features* でも紹介された。

3) 高平面性高共役ポルフィリン 5 量体の合成

愛媛大学の宇野英満教授らは、分子研・永田准教授らとの共同研究を通し、光電変換材料や分子ワイヤー、分子ドットなどの有機ナノ電子材料として注目されている、高度に共役拡張したオリゴポルフィリンのうち、平面性の高い高共役ポルフィリン 5 量体を高純度で得ることに成功し、この物質の電子状態を解明した。この成果は国際誌 *Chem. -Eur. J.* (2010) に報告された。

4) 先天的血液凝固因子合併欠乏症の原因の MCFD-2 と ERGIC-53 複合体の立体構造

名古屋市立大学の水島恒裕准教授らは、先天的な血液凝固因子合併欠乏症の原因遺伝子産物である MCFD-2 および ERGIC-53 の両者の複合体の立体構造を明らかにすることにより、両者が協調して血液凝固因子を運ぶモデルを提唱した。この研究では超高磁場 NMR が利用され、成果は国際誌 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* (2010) に発表された。

8-3 分子制御レーザー開発研究センター

8-3-1 経緯と現状、将来構想

分子制御レーザー開発研究センター（以後「レーザーセンター」）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名の技術職員が行ってきた。放射光同期レーザー開発研究部は、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。特殊波長レーザー開発研究部は、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活動を行った。

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行われたが、この中で、レーザー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レーザー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・フォトンクス」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再設置であった。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、レーザーセンターと分子物質開発研究センターが設置され、後者は更に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。これに伴って、レーザー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、レーザー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、センターとしての活動の重点を開発研究に移すことが可能となった。そこで改組後のレーザーセンターでは、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、分子研におけるレーザー関連光分子科学の開発研究の中心として機能することを重要なミッションと考えることとなった。ただし、光分子科学研究領域の研究グループとレーザーセンターの役割の違いを認識しておく必要がある。光分子科学研究領域の各研究グループではそれぞれの興味のもとで光分子科学の研究分野を開拓し、先端的研究を展開するのに対して、レーザーセンターのミッションは、光分子科学の先端的研究とその将来的な発展に必要な、光源を含む装置、方法論の開発、及びそれらの技術の蓄積に重点がおかれるべきである。光分子科学研究領域とレーザーセンターのインタープレイにより生まれた技術や方法論を蓄積するだけではなく、開発された手法、装置や部品を所内外に提供・共同利用に供する点で、研究領域における各グループの研究活動との差が存在する。

ただし、技術や方法論の開発段階においては、各グループの研究活動とレーザーセンターの活動を明瞭に区別することは、しばしば困難である。従って、レーザーセンターと研究グループの人的な相互乗り入れは不可欠であり、平成19

年度の組織再編に際しては、光分子科学研究領域及び UVSOR に属する数名の教授・准教授がレーザーセンターに併任する形で運営することとなった。このような組織で、光分子科学の新分野を切り拓くための装置、方法論の開発と技術蓄積を行なう開発研究施設という位置づけで、レーザーセンターを運営している。開発された装置や方法論の技術的蓄積も既に始まっており、今後、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望まれる。

平成 22 年度現在、レーザーセンターは以下の 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；平等拓範准教授（専任）、藤 貴夫准教授（専任）、加藤政博教授（UVSOR より併任）
- (2) 超高速コヒーレント制御研究部門；大森賢治教授（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；岡本裕巳教授、大島康裕教授（以上、光分子科学研究領域より併任）

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。レーザー光源の開発から新たなスペクトロスコーピー、マイクロスコーピー、制御法に至る統合的な研究手法を開発することを目的としている。これらの開発研究により、他に類を見ない装置や方法論を創出して分子科学研究の重要な柱として寄与し、分子科学研究所とコミュニティの新たな共同利用の機会を開拓することが求められる。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、新たに開発された装置や方法論をセンターに蓄積し、継承していくための原動力として活躍する事が、センターのミッションに照らして重要な点である。その意味で、現在 1 名しか配置されていない技術職員ポストが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への加藤教授（UVSOR 所属）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る。平成 22 年度は実際に、レーザーセンターと UVSOR の現場の研究者・技術職員が、レーザーと相対論的電子ビームを組み合わせたコヒーレント放射光源の開発に関して議論を重ね、実験に取りかかっている。今後、先鋭化する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むことが期待され、それにより光分子科学の新たな領域を創出する正のフィードバックも加速されるであろう。将来的には、レーザーセンターと UVSOR を包括した、研究センターの設立も視野に入れた検討を行う必要も出てくると考えている。

8-3-2 共同研究の状況

平成 22 年度は、下記のような共同研究とその成果があった。

1)「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」

この研究で用いた全セラミック Yb:YAG マイクロチップレーザーは、分子研で研究開発したもので、世界最高の出力密度が得られている。静岡大学の杉田篤史准教授は、この特性に着目し、高出力モードロック発振器の可能性を探究する目的で共同研究を行っている。研究成果はすでに一部発表済みで、更に新たな成果が出次第、改めて論文に投稿する予定である。

2)「レーザー誘起ブレイクダウンを用いた着火に関する研究」

この研究で用いたジャイアントパルス Nd:YAG マイクロチップレーザーは、分子研で研究開発したもので世界で最も高輝度なマイクロチップレーザーとされている。大阪大学の赤松史光教授らは、これによるレーザー誘起ブレイクダウンが、従来報告に比べ 1 桁以上小さなエネルギーで可能であることに着目し、本共同研究を実施している。これにかかる研究成果は、近く論文に投稿される予定である。

8-4 機器センター

機器センターは、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を主な業務としている。この他、研究所内外の共同利用者と協力して、機器センターの機器を利用した特色ある測定装置の開発とその共同利用も行っている。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、機器センター所有の多くの機器を大学連携研究設備ネットワークに公開しつつ、この事業の実務を担当している。機器センターにはセンター長（兼任）のほかに9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2名、寒剤装置2名、研究設備ネットワーク1名）と2名の非常勤事務職員（機器センター1名、大学連携研究設備ネットワーク1名）が配置されている。技術職員が担当する機器は厳密に分担が区分けされているわけではなく、大学連携研究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。平成19年4月に発足した機器センターは発足後4年目を終了しようとしている。平成21年度から始まった実験棟耐震工事にともなって、機器センターの機器も一次的な移動を余儀なくされたが、平成23年3月の工事終了とともに新たな配置を考える時期にきている。

8-4-1 設備

山手地区には、NMR、質量分析装置、元素分析装置、粉末X線回折装置、円二色性分光装置などの化学分析機器が配置してある。平成20年度末に導入した生体試料用の示差走査型カロリメータおよび等温滴定型カロリメータは一年間の所内利用期間を終了して、平成22年4月より研究設備ネットワークの予約システムを通して所外にも公開した。所内利用が主であるが、所外からも8件の施設利用の申請があった。また、マトリックス支援イオン化飛行時間型質量分析装置は購入後11年が経過しているため、制御用コンピューターの更新とレーザーの交換を行った。この他、平成21年度末に納入された600 MHz NMRは研究設備ネットワークの予約システムを利用して、平成22年10月から所内公開した。平成23年4月から所外にも公開する予定である。また、500 MHz NMRは購入後15年を経ている。平成22年度には総研大の予算で400 MHz NMRが導入されることが決まったので、保守を機器センターが担当する予定である。

明大寺地区には、ESR、SQUID磁束計、X線回折装置、熱分析装置などの汎用物性測定装置を配置している。平成22年度はW-band ESRの共振器の修理とENDOR用アンプの購入を行った。平成21年度末に導入された高感度パルス電子スピン共鳴装置（Q-band）は平成22年10月から所内公開した。平成23年4月から所外にも公開する予定である。特色ある測定装置の開発を目的として、平成21年度より大阪大学大学院理学研究科の中澤康浩教授を物質分子科学研究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設計・製作を行っている。平成22年度に一応の完成をみたので、中澤教授より寄稿された装置の詳細を「機器センターたより No.3」交流欄に掲載した。平成23年度の準備期間を利用して装置の改良を続け、平成24年4月からの公開を目指している。明大寺地区にはこれらの物性測定装置の他に、三種のパルスレーザーシステム、波長可変ピコ秒レーザーシステム、蛍光分光装置、紫外可視近赤外分光装置などの分光計測装置を配置している。平成22年度末にはピコ秒レーザーシステムのロッド交換等を行った。平成21年度末に導入した顕微ラマン装置は平成22年10月より所内公開した。平成23年4月より所外にも公開の予定である。明大寺地区のヘリウム液化装置は修復不能の故障にともない、昨年度の予算内示を受けて更新作業が進行している。平成22年7月17日に入札公告、8月20日に開札を行って、平成23年11月の納入を目指している。更に、平成23年1月4日に「ヘリウム液化装置用周辺機器」仕様策定委員会を開催し、長尺ポンベ等ヘリウム液化機の周辺装置の仕様を策定し、1月18日に入札説明会を開催した。3月22日開札の予定で、これも11月納入を目指している。

8-4-2 利用状況

機器センターは、共同利用として前期・後期に分けて年二回の施設利用を受け付けている。平成 22 年度の所外施設利用件数は平成 23 年 2 月末現在で 60 件である（平成 21 年度は 51 件）。所外施設利用者には半期に一件あたり 2 泊 3 日の旅費を 1 回支給しているが、1 回で目的が達成されるような実験は非常に少ない。そのため、自費で分子研に來所する施設利用者が多い。このような施設利用の統計を昨年に引き続き発行した「機器センターたより No. 3」に掲載した。毎年、施設利用者から送付される報告書と論文別刷りは共同利用専門委員会で回覧されるが、一般に公開されていない。本年度より、送付された論文タイトルや雑誌名等の情報を「機器センターたより」に掲載した。

機器センターの共同利用を通して得られた成果として以下の 3 件を紹介する。(1)「新規自己ドーピング型水素結合系有機導体の磁性研究」この研究は早稲田大学（現在、物質・材料研究機構）の小林由佳准教授らとの共同研究によって国際誌 *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 053701 (2010) へ発表されたものである。機器センターの ESR 装置 Bruker E680 を利用して自己ドーピング型水素結合系 TTF 導体のキャリア生成の起源と電子状態およびスピンダイナミクスを多周波（高磁場）ESR 法によって調べたもので、自己ドーピングという新規なキャリア注入機構をこの実験で実証した。(2)「光機能性部位を有するドナーの光誘起三重項状態研究」の研究は、大阪府立大学藤原秀起講師らとの共同研究により国際誌 *Chem. Lett.* (in press) に発表予定のものである。機器センターの ESR 装置 Bruker E680 を利用して、光機能性部位を有するドナーの光誘起三重項状態をパルス時間分解 ESR の手法によりそのスピンダイナミクスを調べたもので、導電性機能性材料の光誘起緩和過程を世界で始めて観測することに成功した。(3)「超音速ジェット分子の波長 - 時間 2 次元分光」の施設利用は、京都大学大学院理学研究科の馬場正昭准教授によって提案されたものを機器センターが所有しているレーザー機器を利用して、独自の測定システムを開発して行ったものである。超音速ジェット中の孤立冷却分子を電子励起状態の単一振電準位に励起し、そこからの蛍光強度の時間変化の励起波長依存性を正確に測定するという最高水準の分子分光研究であり、その成果は近く論文として国際誌へ投稿される予定である。

8-4-3 今後の課題

- (1) 機器センターの運営委員会は、4 つの研究領域から推薦された委員と機器センター職員で構成される所内委員会である。所内外の施設利用者の意見をすくい上げる場として機器センターたよりの交流欄を設け、投稿をよびかけているが、平成 22 年度は所外から 2 件の投稿があった。この他、所内外の利用者の意見を収集するために、各機器にアンケート箱を用意すべく準備している。今後は、機器センター運営委員に所外委員を入れることも検討する必要がある。
- (2) 平成 21 年度より大学連携研究設備ネットワーク事務室を南実験棟一階へ移動した。実験棟耐震工事に伴ってスペースが確保できない状況になっているため、現在使用している 2 部屋は機器センター事務室も兼ねている。工事が完了する平成 23 年度からは機器センター事務室としてもう 1 部屋を確保する必要がある。これに伴い、南実験棟一階の部屋の再配置を行う必要がある。
- (3) 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。しかし、南実験棟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。耐震工事終了後には、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。

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研究者との密接な協力的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技術支援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、より高度で先進的な技術を基盤として研究・開発を支援するために様々な新しい加工技術の開発に取り組んでいる。多点計測型イオンチャンネルバイオセンサーの製作に必要な超精密金型を、理化学研究所と共同で超精密ナノ加工機により試作を行っている。またホットエンボス加工により10 μm の残膜部を有するPMMA基板の製作を産業技術総合研究所と共同で、さらにニュースパルにおいてPMMA基板への直径1 μm の微細貫通穴加工をDeep X-ray Lithographyにより試みている。さらに今年度はボジ型フォトレジストを用いたフォトリソグラフィーとシリコンウェットエッチングによる溝幅4 μm の微細流路形状パターンを製作し、バイオセンサー基板用の電鋳モールドを製作した。今後これらの技術は、装置開発室の新たな研究支援サービスとして展開できるものと期待している。

従来から国立天文台と共同で行っている「脆性材料の超精密加工技術開発」も継続して取り組んでいる。これまで行ってきた硫化亜鉛(ZnS)イマージングレーティングの精密切削加工技術をさらに発展させ、複雑な3次元創成加工へと展開を図るためミリング加工によるガラスの形状創成を試み、延性加工可能な臨界切り込み量および臨界送り速度について調査を行った。今後は脆性光学部材の非球面レンズ形状加工を試み、オプティクス製作への展開、応用を目指す予定である。

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では、装置開発室に設置されている工作機械では精度不足のため、サブミクロン駆動の精密フライス装置の製作を行っている。平成22年度はこの装置が完成し、既存機械との精度比較を行いその有効性について確認した。今後は工作依頼で持ち込まれる高い寸法精度が必要とされる機器製作に活用していく予定である。

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、プログラム論理回路素子を用いたカスタムICの開発を積極的に行っている。東北大学多元物質科学研究所からの施設利用である「超高速多重同時計測回路」では、従来のECLに代えてCPLDでの開発を行い、回路の高速性と高機能化の検証を行った。デバイスの高速化の一方では、低電圧化によるノイズマージンの低下が問題となる。今後は、高周波回路での基板レイアウト設計の検討を行い、高速デバイスを利用する上での回路技術の確立を目指す。

また、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、ワークステーションを用いたVDEC EDA環境の整備を行った。本年は、CMOSプロセスによる差動増幅回路をトランジスタレベルから設計しチップ試作を行った。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により設備更新が徐々に進みつつある。しかしながら、先端的な加工設備や計測機器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。一方、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、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の活用を調査・検討していく。

8-5-3 共同研究の状況

- ・施設利用実施件数：5 件
- ・成果報告

研究課題名：「マイクロ波イメージング」

マイクロ波 CT は、新しい CT として数理的にも医学や産業への応用研究としても世界的な研究競争が起きている。日本ではまだ数理的研究が先行しており、実機開発が課題である。そこで、その第一歩として、核融合科学研究所の長山好夫教授が考案したマイクロ波イメージング検出器の素子を、分子研において開発した。研究は端緒についたばかりだが、自然科学研究機構新分野創成センターのプロジェクトの一環として今後の展開が期待される。

研究課題名：「電子線コンプトン散乱の時間分解反応顕微鏡の開発による物質内電子移動の可視化」

この研究は、東北大学多元物質科学研究所の高橋正彦教授らによって提案された時間分解反応顕微鏡のための多重同時計測回路を分子科学研究所で開発することで、世界に類をみない、過渡系電子波動関数が時間発展する様をスナップショット的に観測することを可能にするものである。開発した回路は初期の性能を十分に満足し、その結果、既存の装置と組み合わせ、電子線コンプトン散乱で生成する 2 電子を一つの検出器によって検出することに世界で初めて成功した。この回路の詳細を含めた研究成果は、現在論文として投稿中である。

研究課題名：「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」

この装置開発は、産業技術総合研究所の銘苅主任研究員らによって提案された投影露光システムを分子科学研究所で設計・製作したもので、紫外線を 10% 以下の損失で反射できるように立体ミラーの反射面を $\lambda/20$ 以下の表面粗度で精密機械加工し、さらに既存の両面コンタクトアライナーに挿入できるようなコンパクトな設計を特徴とする。このシステムは円筒のような立体表面上に繋ぎ目なく微細パターンが転写できるものであり、実際の露光実験によりその実用性が証明された。このシステムを利用した成果を実施例として、産業技術総合研究所より特許が出願された（特願 2009-265059）。

研究課題名：「スパッタ成膜およびドライエッチング用自動回転機能付きサンプルホルダーの開発」

このホルダーは、産業技術総合研究所の銘苅主任研究員らの要望に基づいて、分子科学研究所で開発したものである。これは、円筒のような三次元曲面を有する立体試料表面にスパッタによる金属膜の形成やエッチングによる膜除去を目的とした自動回転機能付きサンプルホルダーである。当該サンプルホルダーにはバッテリー、モーター、ギア変速機構等が外部に露出することなく搭載され、過酷な真空やプラズマ雰囲気下にも耐えられるようにドライエッチング耐性の高いセラミック材料にてパッケージングされている。このサンプルホルダーを利用した研究成果は、近く論文に投稿される予定である。

研究課題名：「高輝度反射楕円回転体鏡の製作」

この施設利用は、京都大学理学部化学科の馬場正昭准教授によって提案されたものを分子科学研究所装置開発室の精密工作機械を用いて製作したもので、これによって気体分子の微弱発光をほぼ 100% の効率で検出器に集光できる。この機器によってこれまで不可能だった弱い電子遷移の超高分解能スペクトルの測定が可能となり、本年度の研究成果は “ *Journal of Molecular Spectroscopy*, Vol. 260, 72–72 (2010) ” に論文として掲載された。

研究課題名：「ヨウ化銀室温超イオン伝導性の研究」

この研究は、京都大学の北川宏教授らによって国際誌 *Nature Materials* に発表されたものである。分子科学研究所装置開発室において技術開発された低次元系機能性材料開拓のための固体 NMR プローブ装置を用いて、ヨウ化銀ナノ粒子の伝導性について調べたもので、銀イオンの室温超イオン伝導性を世界で初めて見つけることができた。多数の新聞報道が成された。

研究課題名：「Pd 様の AgRh 合金の研究」

この研究は、京都大学の北川宏教授らによって国際誌アメリカ化学会誌 (*J. Am. Chem. Soc.*) に発表されたものである。分子科学研究所装置開発室において技術開発された低次元系機能性材料開拓のための固体 NMR プローブ装置を用いて、AgRh ナノ粒子の水素吸蔵能について調べたもので、AgRh ナノ合金において Pd と類似の性質を世界で初めて見つけることができた。多数の新聞報道がなされた。

8-6 計算科学研究センター

計算科学研究センターは、2000年度の組織改組（電子計算機センターから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、2010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。

2011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SR16000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。

さらに、2012年2月以降に「超高速分子シミュレータ」を更新するために、2010年1月に仕様策定委員会を設置し、導入に向けた手続きを開始している。

共同利用に関しては、2010年度も169の研究グループにより、総数662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、2010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。また、近年、共同利用における利用者の数が増加傾向にある。このことは、計算科学研究センターが分子科学分野や物性科学分野において、極めて重要な役割を担っており、特色のある計算機資源とソフトウェアを提供していることを示している。

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でもいべき分野拠点として、活動を展開している。この中で、本年度は計算科学研究センターワークショップとして、「分子科学プログラムライブラリの充実にむけて」をテーマとしたワークショップを開催した。

また、本年度より、次世代スーパーコンピュータプロジェクトである「ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」と平行して、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）戦略プログラムが開始した。その中で、物性科学分野、分子科学分野、材料科学分野が、HPCI 戦略プログラム分野 2「新物質・エネルギー創成」計算物質科学イニシアティブ（CMSI: Computational Materials Science Initiative）を構成し、HPCI 戦略プログラムを推進している。今後、分子科学研究所は、CMSI の戦略機関の一つとして参加し、分子科学分野の中核として戦略プログラムを推進する。その事業の中で、計算科学研究センターは、HPCI の資源提供機関の一つとして HPCI 戦略プログラムに参加する。具体的には、本年度後期より、コンピューター資源の一部（20% 未満）を提供することで協力を開始した。

平成 22 年度 システム構成

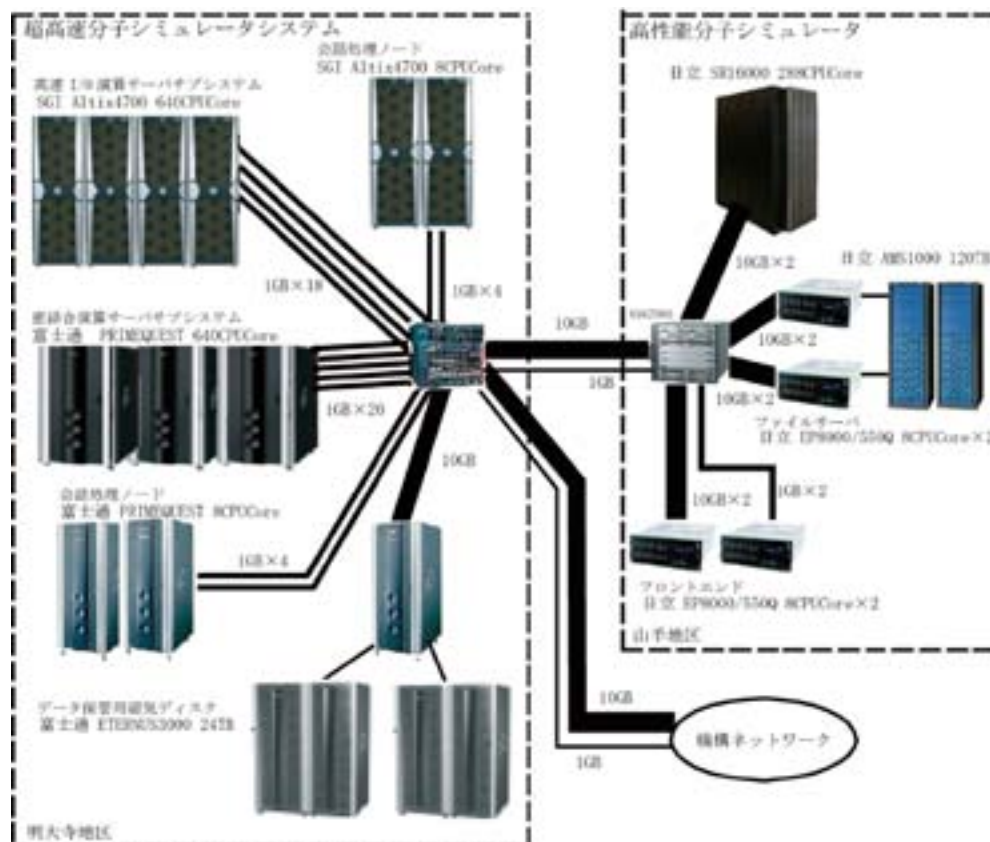
超高速分子シミュレータシステム

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

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 SR16000 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

システム構成図



8-7 岡崎統合バイオサイエンスセンター

岡崎統合バイオサイエンスセンターは、岡崎 3 機関（基礎生物学研究所、生理学研究所、分子科学研究所）と連携し、新たなバイオサイエンスを切り開くことを目的として設置された岡崎共通研究施設であり、三つの研究領域（時系列生命現象研究領域、戦略的方法論研究領域、生命環境研究領域）から構成されている。岡崎統合バイオサイエンスセンターに所属する専任教員は、基礎生物学研究所、生理学研究所、分子科学研究所、いずれかの研究所の教員を兼務している。現在、分子科学研究所教員を兼務している教員は、青野重利教授、加藤晃一教授、桑島邦博教授、藤井浩准教授、真壁幸樹助教の 5 名である。平成 21 年度～22 年度にかけては、青野重利教授がセンター長を務めている。

岡崎統合バイオサイエンスセンターでは、平成 22 年度から「環境分子・生体分子応答機構研究推進事業」、「生命機能分子から生命システムの全体像にせまる統合バイオサイエンス」の 2 つの研究プロジェクトを推進している。

(1) 「環境分子・生体分子応答機構研究推進事業」においては、環境分子による生理機能攪乱の本質を明らかにし、環境分子が生物へ及ぼす影響の定量予測法の確立、環境分子による生物への悪影響の低減策確立のための科学的基盤の確立を目的として、下記のようなサブテーマを設定して研究を実施している。

- 1) 環境分子の受容・応答機構研究
- 2) 環境分子による生理機能攪乱の統合的研究
- 3) 生殖細胞分化機構研究
- 4) 細胞のストレス応答・ストレス防御機構研究
- 5) 生体分子による正常生理機能制御の統合的研究
- 6) 環境分子の生物影響に関する統合的データベース構築

(2) 「生命機能分子から生命システムの全体像にせまる統合バイオサイエンス」においては、高次生命現象を生命機能分子の構造的側面にまで掘り下げて理解することにより、生命システムの全体像を解き明かすことを目的として、下記のようなサブテーマを設定して研究を実施している。

- 1) 生命現象の機能解析（特に神経回路網形成や視覚の解析）
- 2) 生命機能分子の網羅的探索（特に発生・神経回路網形成に関わる蛋白質の遺伝子レベルでの解析）
- 3) 生命機能分子の構造・機能解析（網羅的探索で明らかにされた蛋白質（大部分は天然変性蛋白質）のうち、高次生命現象にとって重要なもの、および、チャンネル蛋白質やセンサー蛋白質などの膜蛋白質を対象とする）
- 4) 高次生命システムと生命機能分子の計算機シミュレーション
- 5) 上記の研究を進めるための方法論・装置開発

また、平成 22 年度には、本事業のテーマに関連し、「生命機能分子から生命システムの全体像に迫る—細胞内ネットワークと天然変性蛋白質」をテーマとし、主に若手研究者を対象としたサマースクールを実施した。

岡崎統合バイオサイエンスセンターは、平成 22 年度に設立 10 周年を迎えた。10 周年という節目を契機とし、今後さらに岡崎統合バイオサイエンスセンターを発展させるためにはセンターはどうあるべきかについて、3 研究所とセンターの間で検討を行っている。

9 . 資料

9-1 評議員（1976 ～ 1981）

氏名・所属（当時）	1976.1.10 ～ 1978.1.9	1978.1.10 ～ 1980.1.9	1980.1.10 ～ 1981.4.13
小谷 正雄 東京理科大学長	○	○	○
長倉 三郎 東京大物性研教授	○	○	○
石塚 直隆 名古屋大学長	○	○	○
梅棹 忠夫 国立民族学博物館長	○	○	○
岡村 総吾 東京大工教授	○	○	○ (日本学術振興会理事)
ハインツ・ゲリシャー マックス・プランク財団 フリッツ・ハーバー研究所長	○	○	
柴田 承二 東京大薬教授	○	○ (東京大名誉教授)	○
関 集三 大阪大理教授	○		
田島弥太郎 国立遺伝学研究所長	○	○	○
田中 信行 東北大理教授	○		
福井 謙一 京都大工教授	○	○	○
伏見 康治 名古屋大名誉教授	○	○ (日本学術会議会長)	○
ゲルハルト・ヘルツベルグ カナダ国立研究所 ヘルツベルグ天体物理学研究所長	○		
森野 米三 相模中央化学研究所長	○	○	○ (相模中央化学研究所 最高顧問理事)
山下 次郎 東京大物性研究所長	○		
湯川 泰秀 大阪大産業科学研教授	○	○ (大阪大名誉教授)	○ (大阪女子大学長)
渡辺 格 慶應義塾大医教授	○	○	○
植村 泰忠 東京大理教授		○	○
メルビン・カルビン カリフォルニア大学ケミカル・ ヴィオダイナミックス研究所長		○	○
神田 慶也 九州大理学部長		○	○ (九州大学長)
齋藤 一夫 東北大理教授		○	○
ジョージ・ポーター 英国王立研究所教授化学部長			○

9-2 評議員 (1981 ~ 2004)

氏 名	所 属	第 1 期 '81.6.1 ~ '83.5.31	第 2 期 '83.6.1 ~ '85.5.31	第 3 期 '85.6.1 ~ '87.5.31	第 4 期 '87.6.1 ~ '89.5.31	第 5 期 '89.6.1 ~ '91.5.31	第 6 期 '91.6.1 ~ '93.5.31	第 7 期 '93.6.1 ~ '95.5.31	第 8 期 '95.6.1 ~ '97.5.31	第 9 期 '97.6.1 ~ '99.5.31	第 10 期 '99.6.1 ~ '01.5.31	第 11 期 '01.6.1 ~ '03.5.31	第 12 期 '03.6.1 ~ '04.3.31
赤松 秀雄	東大名誉教授， 分子研名誉教授	○	○	○	○ '88.1.8 死亡								
石川 忠雄	慶應大学長	○											
石塚 直隆	名大学長	○ ~'81.7.22											
飯島 宗一	名大学長	○ '81.9.1~	○	○	○ ~'87.7.21								
植村 泰忠	東大理教授， 東京理大教授	○	○	○									
神田 慶也	九大学長	○											
小谷 正雄	東京理科大学長	○											
小松 登	豊田中研所長	○	○										
齋藤 一夫	東北大理教授， 国際基督教大教授	○	○ ~'84.5.15			○	○	○					
榊 米一郎	豊橋技科大学長	○	○ ~'84.3.31										
島村 修	相模中央研最高顧問 理事	○	○										
田島弥太郎	遺伝研所長	○											
馬場 宏明	北大応電研所長	○	○	○	○								
福井 謙一	京大工教授， 京都工繊大学長， 基礎化学研究所長	○	○	○	○	○	○						
藤巻 正生	お茶女大家政教授， お茶女大学長	○	○	○									
向坊 隆	東大名誉教授	○											
森 大吉郎	宇宙研所長	○	○ '83.11.25 死亡										
亀谷 哲治	星薬科大学長		○	○									
角戸 正夫	姫路工大学長		○	○									
本多 波雄	豊橋技科大学長		○ '84.4.16~	○	○	○							

氏名	所属	第1期 '81.6.1 ~ '83.5.31	第2期 '83.6.1 ~ '85.5.31	第3期 '85.6.1 ~ '87.5.31	第4期 '87.6.1 ~ '89.5.31	第5期 '89.6.1 ~ '91.5.31	第6期 '91.6.1 ~ '93.5.31	第7期 '93.6.1 ~ '95.5.31	第8期 '95.6.1 ~ '97.5.31	第9期 '97.6.1 ~ '99.5.31	第10期 '99.6.1 ~ '01.5.31	第11期 '01.6.1 ~ '03.5.31	第12期 '03.6.1 ~ '04.3.31
田中 郁三	東工大理工学部学部長， 学長，学位授与機構長		○	○	○	○	○						
中嶋 貞雄	東大物性研所長	○											
小田 稔	宇宙研所長	○	'84.2.16~	○	○								
斎藤 喜彦	慶應大理工教授		○	○	○								
森田 正俊	豊田中研代表取締役		○	○	○	○							
伊東 椒	東北大理教授， 徳島文理大薬教授			○	○	○							
鈴木 進	東北大金材研所長			○	○	○	○						
豊沢 豊	東大物性研所長， 中央大理工教授			○	○								
平野 龍一	東大名誉教授			○	○								
藤田 栄一	大阪薬科大学長， 京大名誉教授				○	○	○						
西原 春夫	早稲田大学総長				○	○							
倉田 道夫	三菱瓦斯化学(株) 顧問				○	○							
朽津 耕三	長岡技科大教授， 城西大理教授				○	○	○	○					
田丸 謙二	東京理科大理工教授				○	○	○	○					
早川 幸男	名大学長				○	'87.7.22~	○	'92.2.5 死亡					
千原 秀昭	阪大理教授，(社)化学 情報協会専務理事				○	○	○	○					
米澤貞次郎	近畿大理工学総合研教 授，近畿大理工教授				○	○	○	○					
赤池 弘次	統計数理研究所長					○	○	○					
三ヶ月 章	日本学術振興会学術相 談役，東大名誉教授					○	○	○					
伊藤 昌壽	東レ(株)相談役最高顧問						○	○	○				
佐々木 慎一	サイエンスクリエイト (株)常任顧問						○	○	○				
佐野 博敏	東京都立大学長						○	○					
櫻井 英樹	東北大理学部長， 東北大理教授						○	○					
松永 義夫	神奈川大理教授						○	○	○				
秋本 俊一	学士院会員						○	○	○				

氏名	所属	第1期 '81.6.1 ~ '83.5.31	第2期 '83.6.1 ~ '85.5.31	第3期 '85.6.1 ~ '87.5.31	第4期 '87.6.1 ~ '89.5.31	第5期 '89.6.1 ~ '91.5.31	第6期 '91.6.1 ~ '93.5.31	第7期 '93.6.1 ~ '95.5.31	第8期 '95.6.1 ~ '97.5.31	第9期 '97.6.1 ~ '99.5.31	第10期 '99.6.1 ~ '01.5.31	第11期 '01.6.1 ~ '03.5.31	第12期 '03.6.1 ~ '04.3.31
岩村 秀	九大有機化学基礎研究センター教授							○	○				
加藤 延夫	名大総長							○	○	○			
黒田 晴雄	東京理科大総合研教授							○	○	○			
塩野 宏	成蹊大法教授							○	○	○			
田中 久	前京都薬科大学長							○	○				
堀 幸夫	金沢工業大副学長							○	○				
森本 英武	(株)豊田中央研顧問							○	○				
守谷 亨	東京理科大理工教授							○	○				
大瀧 仁志	立命館大理工教授							○	○				
清水 良一	統数研所長							○	○		○		
田隅 三生	埼玉大理教授，理学部長							○	○	○			
土屋 莊次	早稲田大理工学総合研センター客員教授							○	○	○	○		
又賀 昌司	(財)レーザー技術総合研第5研究部長							○	○	○			
丸山 和博	京都工繊大学長							○	○	○			
大塚 榮子	(独)産業技術総合研フェロー							○	○	○	○		
京極 好正	(独)産業技術総合研生物情報解析研究センター長							○	○	○	○		
後藤 圭司	豊橋技科大学長							○	○	○	○	○	
高橋 理一	(株)豊田中央研代表取締役所長							○	○	○	○	○	
中西 敦男	学術著作権協会常務理事							○	○	○	○		
細矢 治夫	お茶水女子大理教授							○	○	○	○	○	

氏名	所属	第1期 '81.6.1 ~ '83.5.31	第2期 '83.6.1 ~ '85.5.31	第3期 '85.6.1 ~ '87.5.31	第4期 '87.6.1 ~ '89.5.31	第5期 '89.6.1 ~ '91.5.31	第6期 '91.6.1 ~ '93.5.31	第7期 '93.6.1 ~ '95.5.31	第8期 '95.6.1 ~ '97.5.31	第9期 '97.6.1 ~ '99.5.31	第10期 '99.6.1 ~ '01.5.31	第11期 '01.6.1 ~ '03.5.31	第12期 '03.6.1 ~ '04.3.31
本多 健一	東京工芸大学長									○			
安岡 弘志	東大物性研所長									○			
山崎 敏光	理化学研 RI ビーム科学研究室協力員									○		○	
荻野 博	放送大学宮城学習センター所長									○		○	
木原 元央	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設長									○			
近藤 保	豊田工業大客員教授									○			○
佐原 眞	国立歴史民俗博物館長									○			
廣田 襄	京大名誉教授									○		○	
福山 秀敏	東大物性研所長									○		○	
松尾 稔	名大総長									○			
山村 庄亮	慶應大名誉教授									○			○
蟻川 芳子	日本女子大理教授									○		○	
飯吉 厚夫	中部大学長									○		○	
石谷 炯	(財)神奈川科学技術アカデミー専務理事									○		○	
海部 宣男	国立天文台長									○			○
木村 嘉孝	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所長									○			
北川源四郎	統計数理研究所長												○
木下 實	東大名誉教授												○
小間 篤	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所長												○

9-3 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（台湾）国立交通大学講座教授 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～）

9-4 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

9-5 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	2009. 4. 1 ～ 2011.3.31
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			○	
STACE, Anthony John 英国ノッティンガム大学教授				○
SAUVAGE, Jean-Pierre フランスストラスブール大学教授				○

9-6 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		○	○	○	
吉原経太郎 分子研教授		○			
霜田 光一 東大理教授			○	○	
武内 次夫 豊橋技科大教授			○	○	
山本 常信 京大理教授			○	○	
岩村 秀 分子研教授			○		
坂田 忠良 分子研助教授			○		
木下 実 東大物性研助教授				○	
黒田 晴雄 東大理教授				○	○
山下 雄也 名大工教授				○	○
高谷 秀正 分子研助教授				○	
花崎 一郎 分子研教授				○	○
安積 徹 東北大理助教授					○
志田 忠正 京大理助教授					○
鈴木 洋 上智大理工教授					○
伊達 宗行 阪大理教授					○
田仲 二郎 名大理教授					○
千原 秀昭 阪大理教授					○
土屋 莊次 東大教養助教授					○
永沢 満 名大工教授					○
務台 潔 東大教養助教授					○
藤田純之佑 名大理教授					○
塚田 捷 分子研助教授					○

9-7 運営協議員(1981 ~ 2004)

会長（議長） 人・人事選考部に属する運営協議員
（副） 副会長（副議長） 共・共同研究専門委員会

[illegible]

氏 名	所 属	第1期 '81.5.1 ~ '83.4.30	第2期 '83.5.1 ~ '85.4.30	第3期 '85.5.1 ~ '87.4.30	第4期 '87.5.1 ~ '89.4.30	第5期 '89.5.1 ~ '91.4.30	第6期 '91.5.1 ~ '93.4.30	第7期 '93.5.1 ~ '95.4.30	第8期 '95.5.1 ~ '97.4.30	第9期 '97.5.1 ~ '99.4.30	第10期 '99.5.1 ~ '01.4.30	第11期 '01.5.1 ~ '03.4.30	第12期 '03.5.1 ~ '04.3.31
山寺 秀雄	分子研教授(客員) (名大理教授)	○											
田仲 二郎	名大理教授	○	○人	○(副)人									
伊藤 光男	東北大理教授		○										
木村 雅男	北大理教授		○										
黒田 晴雄	東大理教授		○共										
高柳 和夫	宇宙研教授		○	○									
中島 威	東北大理教授		○人										
中村 宏樹	分子研教授		○共	○	○人	○人	○共	○人	○	○	共	○人	○人
丸山 有成	分子研教授(客員) (お茶女大理教授)	○(共'82.5.1~)	○	○	○	○人	○人						
山本 明夫	分子研教授(客員) (東工大名誉教授)	○	○	○	○	○							
茅 幸二	慶應大理工教授			○共	○共	○共							
菅野 暁	東大物性研教授			○	○								
坪村 宏	阪大基礎工教授			○人									
細矢 治夫	お茶女子理教授			○人	○人								
又賀 昌男	阪大基礎工教授			○共	○~'88.3.31								
松永 義夫	北大理教授			○人	○人	○人・共	○	○人	○人	○	○'00.4.1~		
北川 禎三	分子研教授			○共	○人・共								
齋藤 一夫	分子研教授			○	○								
青野 茂行	金沢大院自然科学研 究科長				○								
安積 徹	東北大理教授				○人	○人							
原田 義也	東大養学教授				○人	○(副)人							
松尾 拓	九大工教授				○共								
丸山 和博	分子研教授(客員) (京大理教授)			○	○'88.6.1~								
大瀧 仁志	分子研教授				○'88.4.1~	○	○共	○人	○共	○共	○共	○人	○人
薬師 久彌	分子研教授				○'88.9.1~	○共	○人						

氏名	所属	第1期 '83.5.1 ~ '83.4.30	第2期 '83.5.1 ~ '85.4.30	第3期 '85.5.1 ~ '87.4.30	第4期 '87.5.1 ~ '89.4.30	第5期 '89.5.1 ~ '91.4.30	第6期 '91.5.1 ~ '93.4.30	第7期 '93.5.1 ~ '95.4.30	第8期 '95.5.1 ~ '97.4.30	第9期 '97.5.1 ~ '99.4.30	第10期 '99.5.1 ~ '01.4.30	第11期 '01.5.1 ~ '03.4.30	第12期 '03.5.1 ~ '04.3.31
木田 茂夫	分子研教授				○ ~'88.3.31	○ 人	○ 人	○ '94.4.1~	○ 人	○ 人	○ ~'00.3.31		
岩田 末廣	分子研教授					○ 人	○ 人						
志田 忠正	京大理教授					○ 人	○						
田隅 三生	東大理教授					○ 人	○						
仁科雄一郎	東北大金材研教授					○ 共	○						
村田 好正	東大物性研教授					○	○ (副)	○ 人					
中筋 一弘	分子研教授					○	○ 人	(~'94.3.31)					
飯島 孝夫	学習院大理教授						○ 人	○ (副)					
伊藤 公一	大阪市立大理教授						○ 人	○ 人					
小川禎一郎	九大総合理工教授						○ 人	○ 共					
小尾 欣一	東工大理教授						○ 共	○					
京極 好正	阪大蛋白研教授						○ 人	○ 人	○ 人	○ 人	○ 共	○ 共	
田中 晃二	分子研教授						○	○ 共	○ 共	○ 共			
齋藤 修二	分子研教授						○ ~'92.4.1	○ 共	○ 人				
川崎 昌博	北大電子科学研教授							○ 人	○ (副)人				
近藤 保	東大理教授							○ 人	○				
斎藤 軍治	京大理教授							○ 共	○ 共				
塚田 捷	東大理教授							○ 人	○ 人				
山口 兆	阪大理教授							○ 人	○ 共	○ 共	○	○ 共	
宇理須恆雄	分子研教授							('94.5.1~)	○ 共				
中村 晃	分子研教授							○	○ 人	○ 人	○ 共	○ 人	
小杉 信博	分子研教授							○ 共	○ 共	○ 共	○ 人	○ ~'02.3.31	
渡辺 芳人	分子研教授							○	○	○ 共			
大澤 映二	豊橋技科大工教授												
生越 久靖	福井高専校長												
小谷 正博	学習院大理教授								○ 人	○ 人	○ 人	○ 共	
西 信之	分子研教授							○ 人	○ 人	○ 人	○ 共	○ 共	
三上 直彦	東北大院理教授										○ 共		
岡田 正	阪大院基礎工教授										○ 共		
加藤 重樹	京大院理教授									○ 人	○ 人		

氏 名	所 属	第1期 '81.5.1 ~ '83.4.30	第2期 '83.5.1 ~ '85.4.30	第3期 '85.5.1 ~ '87.4.30	第4期 '87.5.1 ~ '89.4.30	第5期 '89.5.1 ~ '91.4.30	第6期 '91.5.1 ~ '93.4.30	第7期 '93.5.1 ~ '95.4.30	第8期 '95.5.1 ~ '97.4.30	第9期 '97.5.1 ~ '99.4.30	第10期 '99.5.1 ~ '01.4.30	第11期 '01.5.1 ~ '03.4.30	第12期 '03.5.1 ~ '04.3.31
小谷野猪之助 関 一彦	姫路工業大理教授 名大物質科学国際研 究会教授									○ 共 ○ 人	○ 共 ○ 人		
田中 武彦	九大院理教授									○ 人	○ 人		
篠野 嘉彦	九大院総合理工教授									○ 人	○ (副)		
小林 速男	分子研教授									○ 人	○ 人	○ 共	○ 共
阿知波洋次	東京都立大院理教授										○	○ 人共 (人'02.4.1~)	○ 人
北原 和夫	国際基督教大教養教授										○	○	○
山口 宏夫	東大院理教授									○ 人	○ 人	○ 人	○ 人
松本 和子	早稲田大理工教授									○ 人	○ 人	○ 人 (~'02.3.31)	
平田 文男	分子研教授									○ 人	○ 人	○ 人	○ 人
藤井 正明	分子研教授									○ 人	○ 人	○ 人	
阿久津秀雄	阪大蛋白研教授										○	○	○
宇田川康夫	東北大多元研教授										○ (副) 人	○ (副) 人	○ (副) 人
太田 信廣	北大電子科学研教授										○ 人	○ 人	○ 人
川合 眞紀	理化学研主任研究員										○	○	
榊 茂好	九大有機化学基礎 教授										○ 人	○ 人	○ 人
菅原 正	東大院総合文化教授										○ 共	○ 共	○ 共
魚住 泰広	分子研教授										○ '02.4.1~	○	○
西川 恵子	千葉大院自然科学教授											○	○
岡本 裕巳	分子研教授											○ 人	○ 人
加藤 隆子	核融合科学研教授												○

9-8 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 名大副総長, 教授			○

9-9 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

この規則は、平成 19 年 4 月 1 日から施行し、改正前の別表の規定により任期を定めて雇用されていた者について適用する。

別表（第 2 条関係）

法第 4 条第 1 項第 1 号に掲げる 教育研究組織に該当する組織	該当する職	分子研規則 による種別	任 期	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		

9-10 自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則

平成 16 年 4 月 1 日

分研規則第 4 号

自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則

（目的）

第 1 条 この規則は、自然科学研究機構分子科学研究所（以下「研究所」という。）の設置目的及び社会的使命を達成するため、研究活動等の状況について自己点検・評価、及び外部の者による評価（以下「外部評価」という。）を行い、もって研究所の活性化を図ることを目的とする。

（点検評価委員会）

第 2 条 研究所に、前条の目的を達成するため分子科学研究所点検評価委員会（以下「委員会」という。）を置く。

2 委員会は、次に掲げる者をもって組織する。

- 一 研究所長
- 二 研究総主幹
- 三 研究主幹
- 四 研究施設の長
- 五 本部研究連携室の研究所所属の研究教育職員
- 六 技術課長
- 七 その他研究所長が必要と認めた者

3 前項第 7 号の委員の任期は、2 年とし、再任を妨げない。

（委員長）

第 3 条 委員会に委員長を置き、研究所長をもって充てる。

2 委員長に事故があるときは、研究総主幹がその職務を代行する。

（招集）

第 4 条 委員会は、委員長が招集し、その議長となる。

（点検評価委員会の任務）

第 5 条 委員会は、次に掲げる事項について企画、検討及び実施する。

- 一 自己点検・評価及び外部評価の基本方針に関すること。
- 二 自己点検・評価及び外部評価の実施に関すること。
- 三 自己点検・評価報告書及び外部評価報告書の作成及び公表に関すること。
- 四 独立行政法人大学評価・学位授与機構が行う評価に係る諸事業への対応に関すること。
- 五 その他自己点検・評価及び外部評価に関すること。

（点検評価事項）

第6条 委員会は、次の各号に掲げる事項について点検評価を行うものとする。

- 一 研究所の在り方、目標及び将来計画に関すること。
- 二 研究目標及び研究活動に関すること。
- 三 大学等との共同研究体制及びその活動に関すること。
- 四 大学院教育協力及び研究者の養成に関すること。
- 五 研究教育職員組織に関すること。
- 六 研究支援及び事務処理に関すること。
- 七 国立大学法人総合研究大学院大学との関係及び協力に関すること。
- 八 施設設備等研究環境及び安全に関すること。
- 九 国際共同研究に関すること。
- 十 社会との連携に関すること。
- 十一 学術団体との連携に関すること。
- 十二 管理運営に関すること。
- 十三 学術情報体制に関すること。
- 十四 研究成果等の公開に関すること。
- 十五 財政に関すること。
- 十六 点検評価体制に関すること。
- 十七 その他委員会が必要と認める事項

2 前項各号に掲げる事項に係る具体的な点検評価項目は、委員会が別に定める。

（専門委員会）

第7条 委員会に、専門的事項について調査審議するため、専門委員会を置くことができる。

2 専門委員会に関し必要な事項は、委員会が別に定める。

（点検評価の実施）

第8条 自己点検・評価又は外部評価は、毎年度実施する。

（点検評価結果の公表）

第9条 研究所長は、委員会が取りまとめた点検評価の結果を、原則として公表する。ただし、個人情報に係る事項、その他委員会において公表することが適当でないと認めた事項については、この限りではない。

（点検評価結果への対応）

第10条 研究所長は、委員会が行った点検評価の結果に基づき、改善が必要と認められるものについては、その改善に努めるものとする。

(庶務)

第 11 条 委員会の庶務は、岡崎統合事務センター総務部総務課において処理する。

(雑則)

第 12 条 この規則に定めるもののほか、委員会の運営に関し必要な事項は、委員会の議を経て研究所長が定める。

附則

1 この規則は、平成 16 年 4 月 1 日から施行する。

2 この規則施行後、第 2 条第 2 項第 7 号により選出された最初の委員の任期は、同条第 3 項の規定にかかわらず、平成 18 年 3 月 31 日までとする。

9-11 自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則

平成 16 年 4 月 1 日

分研規則第 5 号

自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則

（設置）

第 1 条 自然科学研究機構分子科学研究所（以下「研究所」という。）に、研究所の将来計画について検討するため、将来計画委員会（以下「委員会」という。）を置く。

（組織）

第 2 条 委員会は、次の各号に掲げる委員をもって組織する。

- 一 研究所長
- 二 研究総主幹
- 三 研究所の教授数名
- 四 研究所の准教授数名
- 五 その他分子科学研究所長（以下「研究所長」という。）が必要と認めた者

2 前項第 3 号、第 4 号及び第 5 号の委員の任期は、1 年とし、再任を妨げない。ただし、補欠の委員の任期は、前任者の残任期間とする。

3 前項の委員は、研究所長が委嘱する。

（委員長）

第 3 条 委員会は、研究所長が招集し、その委員長となる。

（専門委員会）

第 4 条 委員会に、専門的な事項等を調査検討させるため、専門委員会を置くことができる。

（委員以外の者の出席）

第 5 条 委員長は、必要に応じて、委員以外の者を委員会に出席させ、意見を聴取することができる。

（庶務）

第 6 条 委員会の庶務は、岡崎統合事務センター総務部総務課において処理する。

附則

1 この規則は、平成 16 年 4 月 1 日から施行する。

2 この規則施行の後最初の任命に係る委員の任期は 第 2 条第 2 項の規定にかかわらず 平成 17 年 3 月 31 日までとする。

附則

この規則は、平成 19 年 4 月 1 日から施行する。

9-12 大学共同利用機関法人自然科学研究機構年度計画（平成 23 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、核融合科学、分子科学、基礎生物学、生理学の各分野（以下「各分野」という。）における拠点的研究機関（以下「機関」という。）において、以下の各計画のように、国際的に高い水準の学術研究を進める。

岡崎統合バイオサイエンスセンターが中心となり、基礎生物学研究所、生理学研究所、分子科学研究所と連携を図りつつ、環境分子の受容・応答機構、高次生命現象の機能解析、生命機能分子の探索等に関する研究を更に展開するとともに、神経回路網形成、生命機能分子解析等に関する研究を行う。

新分野創成センター プレインサイエンス研究分野においては、国内の脳研究者コミュニティにより、引き続き今後の我が国の脳研究のあり方について討論する。特に、脳研究における新しい分野開拓について、若手を中心に将来計画を議論する。また、平成 22 年度、日本学会会議に提案した「脳機能モデル動物研究センター」の実現に向け海外調査等を含め具体的検討を図る。

新分野創成センター イメージングサイエンス研究分野においては、各機関の持つイメージングデータを活用した 4 次元イメージング化の研究を進める。また、限られた情報をもとにイメージを再構成する汎用性の高い技法の開発を進める。特に画像の定量化法を適用し、「数理画像解析法」の確立を進め、新分野「画像科学」の創成に向けた研究者コミュニティを結成し、研究を開始する。

更に、新分野創成センターに新たな研究分野を設置することについて検討する。

各分野の特記事項を以下に示す。

（国立天文台）

すばる望遠鏡を用いた初期宇宙や太陽系外惑星探査等の重点プログラム、野辺山宇宙電波観測所の 45m ミリ波望遠鏡と ASTE 10m サブミリ波望遠鏡の連携による電波天文学研究、天文広域精測望遠鏡（VERA）による高精度位置天文観測などを推進する。大学等との連携のもとに、理論天文学、光赤外天文学、電波天文学、太陽・天体プラズマの先端的研究を進めるとともに、独創的開発研究を推進する。

すばる望遠鏡の次世代観測装置として、主焦点広視野カメラ Hyper-Suprime-Cam の製作と主焦点広視野分光器の検討を進め、それに対応する望遠鏡の改修を行う。波面補償光学を利用した次世代装置の検討を進める。

建設候補地が米国ハワイ州マウナケア山に決まった次世代超大型光学赤外線望遠鏡計画 TMT（口径 30 m）に国際協力による実現に向けた検討を行う。

岡山天体物理観測所に設置予定の京都大学新光学赤外線望遠鏡の技術開発を、京都大学、名古屋大学等と協力して行う。

宇宙航空研究開発機構と協力して太陽観測衛星「ひので」を運用し新たな成果を得るとともに 野辺山太陽電波観測所をはじめ、他の太陽観測衛星・施設との共同研究を推進する。

スーパーコンピュータシステムを運用し、また、これを駆使したシミュレーション天文学を推進する。新規コンピュータシステムの構成の検討を始める。

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の建設（以下「アルマ計画」という。）において、受信機の一部を除き、すべての装置の製作を完了するとともに、一部のアンテナを用いた部分運用を引き続き行う。

次期太陽観測衛星計画の検討をまとめ、機会を捉えて具体的なミッション提案を行うとともに、将来の位置天文観測衛星、太陽系外惑星探査衛星、月惑星探査衛星等の実現に向けて検討・基礎技術開発を進める。

暦を決定する業務として暦象年表を発行するとともに、暦要項を公表する。

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）

大型ヘリカル実験装置（LHD）において、中性粒子ビーム垂直入射による加熱運転の最適化を進め、イオン温度の向上を軸としたプラズマの高性能化実験を遂行する。ダイバータによる粒子制御研究を進めるため、排気能力を持つ閉構造ダイバータを段階的に整備する。プラズマ性能の拡大に加えて、精細な分布計測に基づく物理機構の解明等の学術研究を進める。

核融合プラズマ閉じ込めの物理機構解明、その体系化及びヘリカル型数値試験炉の構築を目指し、電磁流体力学（MHD）シミュレーションコード、運動論的シミュレーションコード、及び統合輸送コード等の拡張・高精度化を進めるとともに、磁場閉じ込めプラズマの 3 次元平衡、輸送、不安定性、非線形発展及び関連する物理特性に関するシミュレーション研究を行う。

制御核融合の実現のための工学プロジェクトを推進し、原型炉の概念設計研究を推進する。そのためのブランケット及び超伝導コイルシステムを含む炉工学基盤の構築を目指した実験研究を推進し、併せて、基礎となる学際研究の推進を図る。

（基礎生物学研究所）

細胞内小器官の形成と機能に関わる分子機構の解析、細胞極性やシグナル伝達及び転写制御等に着目した発生・分化研究、幹細胞の分化・維持機構の研究、体液イオン濃度センサーと血圧調節ホルモンの関係に関わる脳機能の解析、脳領野や神経系の成り立ちと働きに関する研究、性決定・性分化機構の研究、複合適応形質進化の分子機構解明の基盤となるゲノム解読とトランスクリプトーム解析等の生命現象の基本原理を明らかにするための基盤研究を行う。

モデル生物研究センター並びに生物機能解析センターの活動を充実させ、変異体リソースの拡充や遺伝子機能の制御のための研究手法の開発、環境に対する適応機構の解明に向けた研究基盤の整備、次世代ゲノム研究を推進するための解析手法の改良、光シート型顕微鏡（DSLM）等を用いた多様な生物試料のイメージング法の開発等を行う。

（生理学研究所）

生体機能を担う分子の修飾メカニズム、生体恒常性維持の発達、分子・細胞メカニズム及び破綻による病態等に関する研究を進める。

脳神経系における情報処理、記憶学習の分子・細胞的基盤及び病態への関わりに関する研究を行う。

痛覚・視覚等の感覚・認知や四肢・眼球の運動制御等の脳内機構に関する研究、及び判断・感情や社会的行動等の神経科学的基盤を明らかにする研究を進める。脳神経系障害や神経疾患の病態と代償・回復メカニズムに関する研究を進める。

分子・細胞から個体にいたる各レベルでの生体機能の可視化を進める。また、可視化のためのプローブ・ベクター作製等、技術開発・改良を行う。また、各レベルのデータの統合に向けて連携研究を進める。

(分子科学研究所)

理論・計算分子科学研究領域が中心となって、大規模量子化学計算の高速・精密化を進め、光機能性分子などの励起状態、凝縮状態などを明らかにするとともに、外場を考慮した非平衡電子物性やナノ構造体のダイナミクス、生体分子の構造・ダイナミクス、分子認識等に関する研究を行う。

光分子科学研究領域が中心となって、特徴あるレーザー光源やコヒーレント放射光源の開発を推進するとともに、それらを用いて分子ダイナミクスの解明と制御、局所電子状態解析、化学状態分析等に関する研究を行う。

物質分子科学研究領域が中心となって、太陽電池・伝導体・半導体等の機能性有機化合物や分子性触媒・表面磁性新物質相などの創成・開発、新規分子物性探索、新規分光法による分子物性・生体関連物質構造評価等に関する研究を行う。

生命・錯体分子科学研究領域が中心となって、無機小分子の活性化反応、新規化学エネルギー変換反応、水中での高選択的有機分子変換、生体内情報伝達系の構造機能相関、複合糖質が関与する生命分子科学等に関する研究を展開する。

(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

個々の研究者が応募できる研究推進経費の充実、及び研究進捗状況の審査を踏まえた若手研究者への経費の重点配分など、効果的な経費の配分を行い、個人の自由な発想に基づく学術研究等を進展させる。

大型研究プロジェクトに関しては、本中期目標・計画の達成に向け、研究者コミュニティの議論も踏まえつつ、各機関内の柔軟な研究連携を組織的に推進する。

新分野創成センター運営委員会の委員を拡充するなど組織運営を充実させる。

ブレインサイエンス研究分野で、研究者コミュニティから若手研究者を登用した将来計画などを検討する組織を整備する。また、サル類を中心とする研究センター設立について検討する組織や、自然現象のイメージング化の研究を推進する体制を充実させる。

2 共同利用・共同研究に関する目標を達成するための措置

(1) 共同利用・共同研究の内容・水準に関する目標を達成するための措置

引き続き各研究施設の高性能化・高機能化を図り、より国際的に高い水準の共同利用・共同研究を進める。

各機関において、その研究分野に応じた学術研究ネットワークの中核拠点としての共同利用・共同研究を実施する。

国立天文台では、大型観測装置を共同利用に供するほか、電波 VLBI 分野に加え、光赤外分野において、大学間連携の枠組み等により天文学研究ネットワークの中核拠点としての役割を果たす。

核融合科学研究所では、一般共同研究の全てのカテゴリーにおいて双方向性を強化し、中核拠点として大学の研究活性化に資する役割を強化する。また双方向型共同研究に参画している6センター間の連携を一層推進する。

分子科学研究所では、化学分野における先端的研究設備の充実を図り、それら設備の利用による共同研究を推進する。

各分野の特記事項を以下に示す。

(国立天文台)

すばる望遠鏡による国内外の共同利用、次世代装置の共同開発や次世代超大型望遠鏡に向けた国際連携を強化する。

アルマ望遠鏡の部分運用に対応して、アルマ東アジア地域センターの整備を継続し、サブミリ波天文学の東アジアの拠点として国際共同利用・共同研究を継続して進める。

観測装置の共同開発、共同利用を進めるほか、観測施設や「ひので」、「かくや」など衛星も含め、取得されたデータの共同利用を推進し、その成果に関する情報を広く発信する。また、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と、これを利用した研究を進める。

(核融合科学研究所)

LHD 実験への参加及び実験データ利用を促進するための方策を共同研究者コミュニティと議論し、国内外との共同研究を引き続き推進する。

理論・シミュレーションによる国内外共同研究を積極的に推進する。また、シンポジウム・講習会・報告会等の開催によるシミュレーション科学の普及及び研究交流を進める。

炉工学研究の研究拠点として、ブランケット・マグネット研究などを国内外の共同研究、特に双方向型共同研究を活用して推進する。

核融合分野の研究拠点として「幅広いアプローチ」への研究協力等の国内外の各種事業と連携研究を大学と共に積極的に進める。

(基礎生物学研究所)

引き続き生物機能解析センター及びモデル生物研究センターにおける設備・人員の強化によって共同研究の利便性を図る。また、基生研コンファレンス・生物学国際高等コンファレンス(OBC)などの国際コンファレンスや欧州分子生物学研究所(EMBL)、米国・プリンストン大学、ドイツ・マックス・プランク植物育種学研究所及びシンガポール・テマセク生命科学研究研究所との学術交流を通して、国際共同研究の核として機能すべく拠点化を進める。

(生理学研究所)

分子から個体にいたる各レベルのイメージング技術を用いた共同利用研究を進展させ、データ解析手法の開発も行う。

対人関係における脳機能等が測定可能な2台の同時計測用機能的磁気共鳴画像装置(fMRI)を共同利用に供し、共同研究を開始する。

ナショナルバイオリソースプロジェクト(NBRP)の一環として、ニホンザルの安定した供給を進める。供給ニホンザルの一層の高品質化を図り、諸検査結果等のデータベース化を進める。長期的安定供給のための体制整備を引き続き検討する。

計画共同研究として遺伝子改変ラット・マウスの作製と供給を行う。ラット遺伝子改変技術の開発を継続して行う。

(分子科学研究所)

極端紫外光研究施設において、更なる高輝度化、トップアップ運転高精度化、顕微分光ビームラインの構築に向けて装置開発を進める。更に、分子制御レーザー開発研究センターとの連携による新たなコヒーレント光源の開発を継続し、レーザー波形整形器を応用したコヒーレントシンクロトロン光制御の実現を目指す。

計算科学研究所において、共同利用・共同研究を強化するためにスーパーコンピュータの更新を行う。

(2) 共同利用・共同研究の実施体制等に関する目標を達成するための措置

国立天文台では、各観測所・センターがユーザーズ・ミーティングを開催し共同利用研究者の意見を集約するほか、分野ごとの専門委員会(約半数が台外委員)による審議・助言を得て、観測所の運用や共同利用観測装置の性能・運用について改善を図る。

核融合科学研究所では、一般共同研究のカテゴリーを研究組織の改組に対応させる。公募内容を見直し、研究者コミュニティから要求の強かった計測器の貸出制度等を新たに盛り込み、共同研究を推進する。

基礎生物学研究所では、生物機能解析センター及びモデル生物研究センターの運用を本格化し、共同利用・共同研究の拠点としての体制を充実させる。特に、生物機能解析センターの効率的な運用やサポート体制の充実を図ることにより、研究者コミュニティからの共同利用・共同研究の要請に応える。

生理学研究所では、行動・代謝分子解析センター代謝生理研究室において計画共同研究を開始する。サバティカル制度等を利用した長期滞在型の共同研究を推進する。

分子科学研究所では、引き続き研究会及び協力研究の随時申請も受け付け、研究者コミュニティからの共同利用・共同研究の要請に対して機動的に対応する。更に申請手続きの効率化など、改善可能性について検討する。

国立天文台ハワイ観測所では、米国ハワイ州マウナケア山の他の観測所と観測時間の交換を行って、共同利用観測者に多様な観測機会を提供する。また、アルマ東アジア地域センターでは、初期科学運用継続のため共同利用・共同研究の実施体制を引き続き整備する。VERAと韓国のVLBI観測網(KVN)との結合、中国、韓国との太陽系外惑星探索協力などを通して、東アジアを中心とした研究交流を推進する。

核融合科学研究所では、連携研究プロジェクトにより、国際的な共同利用・共同研究を総合的に促進する。

基礎生物学研究所では、開催する各種国際コンファレンスを活用して、所内外の研究者に新規の国際共同研究を発足させるための協議の場を提供するとともに、共同研究実施例に基づいて実施上の問題点等を検討し、国際共同研究の拠点としての機能充実を図る。

生理学研究所では、日米科学技術協力事業「脳研究」分野の事業を継続し、研究交流の促進を図るとともに、研究成果発表を更に積極的に行う。

分子科学研究所では、独自の「分子研国際共同研究」を継続して実施する。アジア地域の分子科学分野での共同研究推進について、検討と資金獲得の努力を継続する。また、分子科学に関する国際研究集会(岡崎コンファレンス)を開催する体制を維持する。

国立天文台では、大学連携型共同研究の枠組みにより、8大学4機関による国内VLBI観測網を駆使して電波天文学の研究を進める。また、国立天文台と7大学が国内外の光学赤外線望遠鏡の連携観測により、光赤外天文学の研究を進める。

核融合科学研究所では、双方向型共同研究において、前年度6大学に増えた参画附属研究センター間の連携を一層強化し、核融合工学分野の拡充を図る。

基礎生物学研究所では、低炭素社会実現に向けた植物研究推進のための基盤整備の一環として導入したゲノム大規模解析システム等を活用するための共同研究体制を整備する。

生理学研究所では、脳科学の研究領域における戦略的プロジェクト等の研究成果が、広く研究者コミュニティで利用できるように、実験技術・研究リソース等の積極的な提供を図る。

分子科学研究所では、機器センター及び分子スケールナノサイエンスセンターが協力して、先端的分光計測・構造機能物性評価設備の効率的な運用と共同利用支援の一層の強化を図る。「大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用と共同研究の促進」プロジェクトを引き続き実行し、分子科学領域における先端的研究設備の相互利用を一層進めるためのソフトウェアの共有事業を推進する。

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

引き続き高度な研究設備と国際的な研究環境を活かした研究を通じて、自然科学の広い視野と知識を備えた研究者を育成する。総合研究大学院大学の教育に積極的に参加し、大学共同利用機関としての機能を生かした特色ある大学院教育を実施する。

物理科学研究科の基盤機関である国立天文台、核融合科学研究所、分子科学研究所においては「組織的な大学院教育改革推進プログラム」事業を推進し、e-ラーニングの整備に基づいた基礎教育の充実や複数の専攻の協力による共通講義の整備を進める。

生命科学研究科の基盤機関である基礎生物学研究所や生理学研究所においては、入学した大学院生に、指導体制を早期に周知させるためのガイダンスを充実させ、研究科内の他専攻と協力して実施する合同セミナーを引き続き実施する他、専攻を超えた教育システムである「脳科学専攻間融合プログラム」を推進する。

全国の国公私立大学より特別共同利用研究員を受け入れ、大学院教育に協力する。また、東京大学大学院、名古屋大学大学院等との間で、単位取得互換制度を備えた教育連携を進める。

(2) 人材養成に関する目標を達成するための措置

優秀な若手研究者を、国内外を問わず公募して、博士研究員として受入れる。また、リサーチアシスタント(RA)制度を見直すことで優れた若手研究者の養成を図る。

更に寄附金や基金なども活用し、研究発表の機会の提供等、若手研究者・学生支援の充実を図る。

各機関において、総合研究大学院大学の事業「夏の体験入学」及び「アジア冬の学校」を実施するとともに、総合研究大学院大学大学院生を対象とした「すばる望遠鏡観測実習」「電波天文観測実習」(国立天文台)、「核融合科学人材養成プログラム」(核融合科学研究所)、大学院生一般を対象とした電波天文、数値シミュレーションなどのスクール(国立天文台)、国内研究者を対象にした「ゲノムインフォマティクストレーニングコース」(基礎生物学研究所)、「生理科学実験技術トレーニングコース」及び「多次元共同脳科学推進センタートレーニング&レクチャー」(生理学研究所)更には国際的に参加者を募集する「インターナショナルプラクティカルコース」(基礎生物学研究所)等を実施し、大学院生を含む国内外の若手研究者の育成に取り組む。

4 その他の目標を達成するための措置

(1) 社会との連携や社会貢献に関する目標を達成するための措置

ホームページやメーリングリスト、広報誌を活用して社会に向けた学術情報の発信を行う。また、一般公開や市民向け公開講座を行い、自然科学における学術研究の重要性を直接的にかつ分かり易く社会・国民に訴える活動を展開する。

各機関において、出前授業やスーパーサイエンスハイスクール事業等の理科教育に協力するとともに、地域の特性を活かしつつ、自治体、公民館や医師会等との協力による市民講座やセミナーの開催、理科・工作教室等の科学イベントの実施、クラブ活動への協力、展示館の運営等を通じて科学の普及活動を実施する。

学術成果を社会に還元するため、研究成果・知的財産等を創出する。民間等との共同研究や受託研究等を適切に受け入れ、その成果の中で可能なものについては特許出願及び権利活用を行う。また、特許収支を考慮した登録特許の管理を行う。

(2) 国際化に関する目標を達成するための措置

我が国の自然科学分野における国際的学術拠点として、機構長のリーダーシップの下、国際戦略本部を中心に、欧州分子生物学研究所(EMBL)や米国・プリンストン大学等との国際的な共同研究を積極的に実施する。

また、国際戦略を見直すとともに、その具体的なアクションプランについて検討する。

各機関において、すばる国際研究集会（国立天文台）国際土岐コンファレンス（核融合科学研究所）基生研コンファレンス（基礎生物学研究所）、生理研国際シンポジウム（生理学研究所）、岡崎コンファレンス（分子科学研究所）等の各機関主催の国際シンポジウムを開催し、国際交流を進める。人事公募においては、ホームページに英語による研究者の採用情報を掲載し、海外からの応募を可能とするとともに、機構で働く、もしくは機構を訪問する外国人研究者のために、就業規則等の英文化を計画的に整備するための検討を進める。また、日独交流 150 周年にあたり、自然科学研究機構とハイデルベルグ大学を軸にした日独ラウンドテーブル会議を開催する。

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 組織運営の改善に関する目標を達成するための措置

機構長のリーダーシップの下、役員会や外部委員を含む経営協議会、教育研究評議会等を開催して、研究の促進に向けた不断の点検を行い、必要な改善を行う。

各機関の運営会議等において、研究計画や共同利用・共同研究の重要事項について、外部の学識経験者からの助言や意見を参考に、各研究分野の特性を踏まえた業務の改善を実施して効率的な運営を進める。また、核融合科学研究所及び分子科学研究所では、豊富な学識経験者を顧問に任命し、助言を受ける。

機構長のリーダーシップの下、各機関が一体となって自然科学の新分野の創成を図るため、新分野創成センターの体制を充実させるとともに、若手研究者による萌芽的な分野間協力形成の支援等を行う。

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。また、研究者の流動化による研究の活性化を図るため、分子科学研究所においては、内部昇格禁止を実施し、その他の機関においては、各研究分野の特性を踏まえた任期制を実施する。

技術職員、事務職員の専門的能力の向上を図るため、機構及び各機関主催の研修を計画的に実施しつつ、外部の研究発表会、研修等へも積極的に参加させる。また、機構内部の研修については、研修内容の見直しを行う。更に、全国の大学・共同利用機関等を対象とした技術研究会及び東海・北陸地区の技術研修を実施する。

男女共同参画社会に適した環境整備を行うため、男女共同参画推進に向けた本期アクションプランを立案・作成する。特に、研究教育職員の人事公募に女性研究者が応じやすくするための方策を講ずる。

2 事務等の効率化・合理化に関する目標を達成するための措置

機構全体として効率的な事務処理を推進するため、業務の見直しを行うとともに、事務職員人事の一元化を更に進める。

事務処理に係る情報の共有化やシステム化を進めるため、機構横断的な情報化担当者連絡会を開催する。また、各機関の業務実績を一元的に管理するシステムの構築を開始する。更に、情報の共有化やシステム化を推進するため、事務局に新しいグループウェアを導入する。

事務職員については、大学や研究機関等との人事交流を行うとともに、能力及び業績に関する人事評価を行う。

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、寄附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

自己収入の増加を図るため、外部研究資金の募集等の情報を機構一体的に掲載するために開設した Web ページを見直し、充実させる。

2 経費の抑制に関する目標を達成するための措置

「経済財政運営と構造改革に関する基本方針 2006」（平成 18 年 7 月 7 日閣議決定）に基づき、国家公務員に準じた人件費改革に取り組み、人件費削減を行う。

水道光熱費、消耗品費、通信運搬費などの人件費以外の経費について、経年及び月単位の変化の増減要因の分析結果に基づき、節約方策の検討を行う。

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

固定資産の管理及び活用状況を点検するため各機関の使用責任者に加えて資産管理部署による使用状況の確認も実施する。また、所期の目的を達成し、活用されていないものに関しては、Web ページへの掲載などの情報提供方策を充実し、有効活用を図る。

「自然科学研究機構野辺山研修所」の整備を進める。

国立天文台乗鞍コロナ観測所施設を転用して設置した「自然科学研究機構乗鞍観測所」の利用を促進するため、全国の大学等に対して周知を図るとともに、施設の利用を希望するあらゆる研究分野の研究者を対象に、共同利用を開始する。また、平成 22 年度末をもって閉所した生理学研究所伊根実験室施設について、機構本部に管理を移管して具体的な転用方策について引き続き検討を行う。

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

研究体制及び共同利用・共同研究体制について、国際的見地から各機関の特性に応じた自己点検及び外部評価等を実施し、その結果を広く公開するとともに、必要に応じて見直しを行う。

機構全体としての業務運営の改善に資するため、年度計画に基づく実績の検証を行うとともに、平成 24 年度に外部評価を実施するための具体的な方策を講じる。

2 情報公開や情報発信等の推進に関する目標を達成するための措置

機構の諸活動、財務内容や共同利用・共同研究の状況等を、シンポジウムの開催及び Web ページの充実、報道発表の実施等により、一般社会に対して積極的かつ分かりやすく発信する。

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・活用等に関する目標を達成するための措置

世界的に激しい競争が展開されている脳研究を推進するため、生理学研究所実験研究棟の改修を行うなど、各機関において研究の高度化に対応して緊急に研究環境を向上させる必要のある施設・設備等の整備を行う。

施設実態調査及び満足度調査を行うとともに、その結果に基づき重点的・計画的な整備並びに、施設の有効活用を推進する。

施設・設備の維持・保全計画に基づいた維持保全を行う。

2 安全管理に関する目標を達成するための措置

防火，防災マニュアルの役職員への周知を徹底するとともに，防災訓練等を実施する。

職員の過重労働に起因する労働災害の防止策について，各機関で設置する安全衛生委員会等で検討し，必要な対策を講じる。

機構の情報システムや重要な情報資産への不正アクセス等に対する十分なセキュリティ対策を行うとともに，情報セキュリティセミナー等を開催して，セキュリティに関する啓発を行う。また，セキュリティに関する事例の機構内共有を促進する。

3 法令遵守に関する目標を達成するための措置

法令違反，論文の捏造・改ざん・盗用，各種ハラスメント，研究費の不適切な執行等の行為を防止するため，各種講習会やセミナー等を実施し，周知徹底を図る。