

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と予想され、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年度で終了した。

(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年度で終了した。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」の予算枠で実施している。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、イスラエル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連携し、老朽化した研究設備の復活再生、および、最先端研究設備の重点的整備を行い、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、文部科学省特別経費「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」事業が平成19年度よりスタートした。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」事業として経常経費化された。

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87の機関が参加している。平成24年2月3日現在、登録機器数は401台、うち外部公開設備は298台、学内専用設備は103台となっている。ユーザー総数は、7,114名である。

昨年度に引き続き、本年度も、13の地域から提案された共同研究プロジェクトと復活再生事業を実施した。また、平成23年3月11日に発生した東日本大震災に際して、「相互利用・測定依頼を受け入れ可能な設備」の情報を収集し、ホームページにて一覧を掲示(3月17日対応)、震災下で困難な状況に直面した研究者の方々に支援する取り組みを行った。

本ネットワークの周辺状況として留意すべきは、文部科学省が本年度より「施設サポートセンターの整備」事業を開始したことである。これは、大学における設備マネジメント機能を強化することにより、教育研究設備の有効活用を促進し、「強い人材」を育てるための教育研究環境を整備することを目指したプログラムであり、そのための設備サポートセンター設立を支援するものである。本年度は6大学が採択され、3年間の事業がスタートしている。「設備サポートセンター」事業は本ネットワークと理念を共有し、かつ、連携を行うことによって具体的なメリットも多々あると考えられる。例えば、各大学が個別にシステム構築を行うことは大きな負担であるが、ノウハウの蓄積がある「設備ネットワーク」のシステムを援用することによって大幅な効率化が図れる。一方、現行の「設備ネットワーク」は主に化学系分野を中心に企画されたものであり、大学の全部局をカバーすべき「設備サポートセンター」との連携には、システム構成を十分に検討する必要がある。

以上の現状を踏まえて、「設備サポートセンター」事業の該当校ならびに地域代表校を中心として緊密な連絡・協議を行い、本ネットワークにおける現行の設備管理システムの再構成に着手することが、本年度2月に開催された協議会で承認された。学内研究設備の有効活用は全ての大学において重点課題であり、大学間施設共用・有効利用のシステムと有機的に連携することは、単に「設備サポートセンター」事業の関連校のみならず、全ての大学にとって大きなメリットをもたらすものである。

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学との接点」をテーマに第11回シンポジウムを開催した。平成23年度は、6月に理化学研究所にて第12回シンポジウムを開催した。今年度は、東日本大震災の影響や夏場の電力事情等も考慮し、発表者は理研および分子研のメンバーに限定するなど、例年よりも若干小規模なシンポジウムとなった。特に今後の研究グループ間の研究交流をより促進することを目指し、各グループの若手・中堅研究者を主体にしたプログラム構成とした。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23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名及び実働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、イメージング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。現在客員教授及び特任助教、博士研究員が、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、平成23年度もその取組みを継続している。また平成23年度には、機構内でイメージングサイエンスに関わる研究プロジェクトを公募し、8件のプロジェクト研究と2件の研究会（但し2件を1件に集約して実施することとなった）が採択された。

(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ところを目的として、「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。平成24年3月5、6日には、岡崎コンファレンスセンターにおいて、基生研バイオイメージングフォーラムと合同で「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

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・分子ダイナミクスの多様性・階層性の解明を目的とする。また、理論計算科学研究の推進に加え、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協奏的分子科学分野の形成を目指している。

国際シンポジウムとして、7月に日韓分子科学シンポジウム“New Visions for Spectroscopy and Computation: Temporal and Spatial Adventures of Molecular Sciences,” 10月にはミニ国際シンポジウム“Recent Developments of Spectroscopy and Spatial and Temporal Hierarchical Structures in Molecular Science”を開催するとともに、協奏的分子科学分野におけるセミナーを開催した。また、人材育成を目的として分子シミュレーションおよび電子状態理論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理コネクション、物体の表面現象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 11回

第5回分子シミュレーションスクール—基礎から応用まで— 平成23年12月12日～15日

第1回量子化学ウィンタースクール—基礎理論を中心として— 平成23年12月19日、20日

日韓分子科学シンポジウム 平成23年7月6～8日

ミニ国際シンポジウム 平成23年10月18日

分子科学研究所・国立天文台・核融合科学研究所合同シンポジウム 平成24年2月10日、11日

5-4 アジア研究教育拠点事業

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。

分子科学研究所では、平成18年度より平成22年度までの5年間にわたり日本学術振興会・アジア研究教育拠点事業（以下「JSPSアジアコア事業」という。）「物質・光・理論分子科学のフロンティア」を展開してきた。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.jspso.go.jp/j-acore/00gaiyou_acore.html）」実施されたものである。上記JSPSアジアコア事業においては分子科学研究所（IMS）、中国科学院化学研究所（ICCAS）、韓国科学技術院自然科学部（KAIST）、台湾中央研究院原子分子科学研究所（IAMS）を日本、中国、韓国、台湾の東アジア主要3カ国1地域の4拠点研究機関と位置づけ、また4拠点研究機関以外の大学や研究機関の積極的な研究交流への参加を得て、互いに対等な協力体制に基づく双方向の活発な研究交流を進めることができた。

平成23年度には上記JSPSアジアコア事業の後継として、分子研独自の予算によるIMSアジアコア事業「東アジアにおけるポスト・ナノサイエンスを指向した分子科学研究」を実施している。これは上述のJSPSアジアコア事業によって醸成したIMS-ICCAS-KAIST-IAMS相互のパートナーシップをさらに発展させ、研究会、セミナー、共同研究、研究者交流を深めるためのプラットフォーム的プロジェクトであり、平成23年度研究集会として、「第4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・奈良）、「中日機能性超分子構築シンポジウム」（中国・北京）が開催された。また教育・研究集会としては、平成24年2月に「The Winter School of Asian-Core Program (Beijing)」がICCASのホストにより日本・韓国・台湾から100人超の参加を得て開催された。教育面での関連事業としては、平成24年1月に「総研大 アジア冬の学校」（日本・岡崎）も開催している。「東アジアにおけるポスト・ナノサイエンスを指向した分子科学研究」は来年度以降の更なる充実と発展を目指している。

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23年度は協力研究40件、施設利用63件を採択し、うち協力研究31件、施設利用44件は実施した。所内利用も63件に上っている。

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23年度採択課題一覧を示す。支援は、担当研究者と共に研究を進めてゆく協力研究と、装置に関する十分な知識と経験を有する研究者が随時の申し込みによって当該装置を利用する施設利用の何れかの申し込みを通して行われる。課題申請等の詳細は<http://nanoims.ims.ac.jp/>にあり、本務の共同利用と同様に、通常申請（年2回）と随時申請がある。申請は分子スケールナノサイエンスセンター運営委員会の下部組織であるナノネット小委員会で審査される。本務の共同利用と異なり、本事業では産業界からの申請も無償（ただし結果の公開が義務付けられる）で幅広く受け付けている。

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。	横山利彦教授	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
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。	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 2011 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
連結方法の異なる色素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
920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いた自己集合性錯体の磁場配向性の評価	NMR	東京大学大学院工学系研究科 佐藤 宗太
920MHz 超高磁場 NMR によるアミロイド ペプチドの重合開始機構の構造生物学的基盤の解明	NMR	(独)国立長寿医療センター研究所 柳澤 勝彦
SiC 表面分解法により生成したカーボンナノチューブアレイ構造へのドーピングに関する研究	TEM	名城大学理工学部 丸山 隆浩
SiC 表面分解法におけるカーボンナノチューブの構造制御	ESCA	名城大学理工学部 丸山 隆浩
920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いたタンパク質複合体の構造解析	NMR	名古屋市立大学大学院薬学研究科 矢木 宏和
高分解能透過分析電子顕微鏡による Co/Pt 微粒子の構造解析	TEM	岐阜大学工学部 嶋 睦宏
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
有機 - 希土類ハイブリッド薄膜発光体の基礎物性測定と発光体実装プロセスの最適化	有機半導体	島根大学教育学部 西山 桂
XMCD による吸着 NO の磁性評価	磁気光学	京都大学大学院理学研究科 奥山 弘
常磁性金属内包フラレン誘導体の電荷移動特性	量子計算	筑波大学生命領域学際研究センター 赤阪 健
湾曲 電子系化合物と金属内包フラレンに基づく超分子系の構築	有機材料	筑波大学生命領域学際研究センター 土屋 敬広
金属ナノ構造体の増強光電場によるジアセチレン LB 膜の二光子光重合反応の検討	SNOM	埼玉大学大学院理工学研究科 坂本 章
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検索	有機材料	(独)産業技術総合研究所 岡崎 俊也
超高磁場下での ¹ H スピン拡散 NMR 測定による結晶構造解析法の開発	NMR	東京農工大学大学院工学研究院 朝倉 哲郎
SiC 表面分解法におけるカーボンナノチューブの構造制御	有機半導体	名城大学理工学部 丸山 隆浩
課 題 名（後期）	支援装置	代 表 者
920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いた自己集合性錯体の磁場配向性の評価	NMR	東京大学大学院工学系研究科 佐藤 宗太
920MHz 超高磁場 NMR によるアミロイド ペプチドの重合開始機構の構造生物学的基盤の解明	NMR	(独)国立長寿医療センター研究所 柳澤 勝彦
SiC 表面分解法により生成したカーボンナノチューブアレイ構造へのドーピングに関する研究	TEM	名城大学理工学部 丸山 隆浩
SiC 表面分解法におけるカーボンナノチューブの構造制御	ESCA	名城大学理工学部 丸山 隆浩
920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いたタンパク質複合体の構造解析	NMR	名古屋市立大学大学院薬学研究科 矢木 宏和
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
XMCD による吸着 NO の磁性評価	磁気光学	京都大学大学院理学研究科 奥山 弘
常磁性金属内包フラレン誘導体の電荷移動特性	量子計算	筑波大学生命領域学際研究センター 赤阪 健
湾曲 電子系化合物と金属内包フラレンに基づく超分子系の構築	有機材料	筑波大学生命領域学際研究センター 土屋 敬広
金属ナノ構造体の増強光電場によるジアセチレン LB 膜の二光子光重合反応の検討	SNOM	埼玉大学大学院理工学研究科 坂本 章
近赤外色素の合成とその電子状態の解明	有機材料	愛媛大学大学院理工学研究科 宇野 英満
有機 - 希土類ハイブリッド薄膜発光体の基礎物性測定と発光体実装プロセスの最適化	有機半導体	島根大学教育学部 西山 桂
Pd/USY ゼオライトを触媒とした選択的 C-C 結合形成による環化三量体合成	有機材料	鳥取大学大学院理工学研究科 奥村 和
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検索	有機材料	(独)産業技術総合研究所 岡崎 俊也
超高磁場下での ¹ H スピン拡散 NMR 測定による結晶構造解析法の開発	NMR	東京農工大学大学院工学研究院 朝倉 哲郎
コイ血液由来の糖鎖（ペンタオース）の NMR スペクトル（NOESY）の測定	NMR	三重大学大学院生物資源学研究科 青木 恭彦
SiC 表面分解法におけるカーボンナノチューブの構造制御	有機半導体	名城大学理工学部 丸山 隆浩
ナノスケール高周期超原子価典型元素分子の開発と性質の解明	量子計算	北里大学理学部 箕浦 真生
SiC 表面分解法におけるカーボンナノチューブの構造制御	SEM/FIB	名城大学理工学部 丸山 隆浩
金属ミラー保護膜表面の元素分析（ALMA 型 Band4 受信機カートリッジ常温光学系ミラー）	SEM/FIB	国立天文台先端技術センター 岡田 則夫
ナノサイズ分子キャビティを活用した活性化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
Fe/Ag(116) 薄膜における量子井戸効果の X 線磁気円二色性による研究	磁気光学	Max-Planck Institut (Halle, Germany) Marek Przybylski
典型元素と遷移元素を骨格に含む新しい芳香族性の構築とその性質の論理的解明	量子計算	埼玉大学大学院理工学研究科 齋藤 雅一

(2) 施設利用

課 題 名 (前期)	支援装置	代 表 者
スタフィロコッカル・ヌクレアーザの NMR 解析	NMR	名古屋大学大学院理学研究科 榎 互介
金ナノ粒子ハイブリッドの電子線回折, 顕微鏡写真, 元素分析	TEM	兵庫県立大学理学部 木村 啓作
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
カーボン系および非カーボン系薄膜材料の開発および評価	SEM/FIB	積水ナノコートテクノロジー(株) 滝沢 守雄
ナノ領域の特異現象と 46 億年前の微粒子形成	TEM	東北大学理学研究科 木村 勇気
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
金属を内包したメソポーラスカーボンの形態観察	TEM	名古屋工業大学ながれ領域 西 信之
金属を内包したメソポーラスカーボンの形態観察	SEM/FIB	名古屋工業大学ながれ領域 西 信之
ナノ領域の特異現象と 46 億年前の微粒子形成	SEM/FIB	東北大学理学研究科 木村 勇気
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
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院 平沖 敏文
シリコンナノチューブの構造解析	TEM	大阪大学大学院基礎工学研究科 多田 博一
高出力パルススパッタ HIPIMS を用いたナノ構造制御成膜法による窒化チタンアルミニウムおよび窒化クロムアルミニウム皮膜の構造解析および評価	SEM/FIB	(株)アヤボ 塚本 恵三
高出力パルススパッタ HIPIMS を用いたナノ構造制御成膜法による窒化チタンアルミニウムおよび窒化クロムアルミニウム皮膜の構造解析および評価	TEM	(株)アヤボ 塚本 恵三
高出力パルススパッタ HIPIMS を用いたナノ構造制御成膜法による窒化チタンアルミニウムおよび窒化クロムアルミニウム皮膜の構造解析および評価	ESCA	(株)アヤボ 塚本 恵三
アセチリド化合物の自己組織的ナノらせん構造構築の起源解明	TEM	日本大学文理学部 十代 健
アセチリド化合物の自己組織的ナノらせん構造構築の起源解明	SEM/FIB	日本大学文理学部 十代 健
共役系ラセン高分子の側鎖置換基の精密構造解析	NMR	室蘭工業大学大学院工学研究科 馬渡 康輝
単糖および多糖の水和と構造変化に関する研究	NMR	名城大学農学部 前林 正弘
課 題 名 (後期)	支援装置	代 表 者
スタフィロコッカル・ヌクレアーザの NMR 解析	NMR	名古屋大学大学院理学研究科 榎 互介
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
カーボン系および非カーボン系薄膜材料の開発および評価	SEM/FIB	積水ナノコートテクノロジー(株) 滝沢 守雄
ナノ領域の特異現象と 46 億年前の微粒子形成	TEM	東北大学理学研究科地学専攻 木村 勇気
金属を内包したメソポーラスカーボンの形態観察	TEM	名古屋工業大学ながれ領域 西 信之
金属を内包したメソポーラスカーボンの形態観察	SEM/FIB	名古屋工業大学ながれ領域 西 信之
ナノ領域の特異現象と 46 億年前の微粒子形成	SEM/FIB	東北大学理学研究科地学専攻 木村 勇気
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
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院 平沖 敏文
シリコンナノチューブの構造解析	TEM	大阪大学大学院基礎工学研究科 多田 博一
高出力パルススパッタ HIPIMS を用いたナノ構造制御成膜法による窒化チタンアルミニウムおよび窒化クロムアルミニウム皮膜の構造解析および評価	SEM/FIB	(株)アヤボ 塚本 恵三
高出力パルススパッタ HIPIMS を用いたナノ構造制御成膜法による窒化チタンアルミニウムおよび窒化クロムアルミニウム皮膜の構造解析および評価	TEM	(株)アヤボ 塚本 恵三
高出力パルススパッタ HIPIMS を用いたナノ構造制御成膜法による窒化チタンアルミニウムおよび窒化クロムアルミニウム皮膜の構造解析および評価	ESCA	(株)アヤボ 塚本 恵三
アセチリド化合物の自己組織的ナノらせん構造構築の起源解明	TEM	日本大学文理学部 十代 健
アセチリド化合物の自己組織的ナノらせん構造構築の起源解明	SEM/FIB	日本大学文理学部 十代 健
共役系ラセン高分子の側鎖置換基の精密構造解析	NMR	室蘭工業大学大学院工学研究科 馬渡 康輝
単糖および多糖の水和と構造変化に関する研究	NMR	名城大学農学部 前林 正弘
一次元 sp ³ カーボン材料のキャラクタリゼーション	TEM	名城大学理工学部 小澤 理樹
製造条件差による樹脂フィルム化学構造差についての検証	有機半導体	ソニーイーエムシーエス(株) 土谷 薫
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

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)

2006年4月より開始した表記のプロジェクトは本年度末(2012年3月31日)で終了した。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。本稿ではその成果をまとめた。

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次の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に組み合わせて, 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)



「次世代ナノ統合ソフトウェア」の開発においては、中核アプリ（6本）、付加機能ソフト（38本）、連携ツール（2本）の開発を行い、いずれも「京」システム向けにポータルを利用して公開した。このうち、6本の中核アプリに関する成果を下記の表にまとめた。

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 — 豊かな未来社会に貢献するナノ分野グランドチャレンジ — 具体的な研究開発と成果		
中核アプリ	2013年度末の達成目標	「京」により可能となる波及効果
実空間第一原理 ナノシミュレータ HP-RSDFT	優先的使用が可能な場合には、10万超コアでの実効速度10%の達成を目指す。同時に10万原子系のナノ電子デバイス全体の実行確認を行う。	高速応答・高機能、省エネルギーのこれまでにないデバイスの設計を可能とする。
動的密度行列繰り込み群法 DDMRG	約100原子からなる格子振動を十分含んだ強相関一次元ナノ電子系の非線形光学応答、特にパルス電場照射直後緩和ダイナミクスシミュレーションを実行し、緩和プロセスに対する格子振動の効果を解明する。	強相関効果を用いた新しいタイプの光スイッチ素子の開発につながる。
大規模並列量子モンテカルロ法 ALPS/looper	量子反強磁性体における指数関数的に小さなエネルギーギャップの精密測定・量子一次相転移現象の解明。	新奇な磁気秩序状態と量子相転移現象の解明につながる。
高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト MODYLAS	全原子シミュレーション(1000万原子系)によるウイルスの安定構造、カプシドタンパク質間の接合構造と熱ゆらぎ、熱安定性、環境依存性等の解明に向けた試験的短時間シミュレーションを行う。	ウイルス性疾患に対する予防法と治療薬の開発、創薬の効率化につながる。
液体の統計力学理論計算 RISM/3D-RISM	無数の分子を含む混合溶液中の蛋白質(5万原子)の構造揺らぎに関する実行確認を行う。	高効率のセルロース分解酵素などの開発につながる。
高速量子化学計算ソフト FMO-MP2	FMO法による高精度電子状態計算を行い、インフルエンザ治療薬標的タンパク質の分子間相互作用を詳細に解析し、医薬品分子設計に向けての基礎的知見を得る。	計算による論理的・効率的な医薬品分子設計につながる。

5-6-2 学術的研究成果

本開発研究の過程で、それぞれの段階の方法論やプログラムの有効性を実証するための研究を行ってきた。以下に、プロジェクト開始時からの学術的研究成果を表にまとめた。

成果の公表や情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	平成23年度
学術論文	278	344	326	326	306	294
総説解説	59	67	55	80	66	81
受賞など	13	18	20	18	12	16
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	平成23年度
招待講演(国内会議)	103	97	98	127	103	113
招待講演(国際会議)	137	131	164	182	139	170
口頭発表(国内会議)	174	194	261	279	275	261
口頭発表(国際会議)	124	103	143	108	144	100
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	平成23年度
J. Chem. Phys.	31	33	33	29	30	29
J. Am. Chem. Soc.	8	9	9	12	5	12
J. Phys. Chem.	20	18	23	13	27	14
Chem. Phys. Lett.	17	13	17	13	17	10
Phys. Rev.	27	63	51	52	42	32
Phys. Rev. Lett.	14	14	12	13	16	5
J. Phys. Soc. Jpn.	31	22	22	26	28	27
他	130	172	159	168	141	165
合計	278	344	326	326	306	294

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おり、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おり、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。「産」「学」「官」の間で、これらの二つの要素を考慮した「プログラム公開」の原則を確立するための意見調整を行ない2012年3月1日に公開した。

5-6-4 本プロジェクトにおける注目すべき成果

[計算科学上の成果]

計算機(情報)科学分野の研究者との共同で、これまで「困難」あるいは「不可能」といわれていた数値計算アルゴリズムの超高並列化を達成した。

(1) 押山グループ(東大)と佐藤グループ(筑波大)及び理研との共同による実空間密度汎関数法(RSDFT)の開発。

この成果は2011年度のゴードン・ベル賞に輝いている。

- (2) 平田グループ(分子研)と佐藤グループ(筑波大)との共同による3D-FFTの超高並列化(一万ノード)。従来、3D-FFTは並列化が不可能と考えられていたが、その常識を打ち破った。
- (3) 遠山グループ(京大)と町田グループ(原研:クレスト)との共同で、巨大粗行列の対角化に関する超高並列化を達成した。

[学術上の成果]

平田グループは3D-RISM理論に基づき、「生命現象」の統計力学とも呼べる新しい学問分野を創出した。

[社会貢献]

少なくとも、3つの方法(3D-RISM, Replica exchange, FMO)が具体的に知的創薬研究に応用され、社会的注目を集めつつある。

5-7 「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)の構築」 HPCI 戦略分野 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)における計算分子科学研究拠点 (TCCI)の活動について(文部科学省)

5-7-1 はじめに

(1) CMSI について

次世代スパコン京の戦略的活用を目指す5つの戦略分野において公募の結果、分野2新物質・エネルギー創成を担う戦略機関として東大物性研(代表)、分子研、東北大金研が選定された。この3機関を纏める形で、計算物質科学拠点(CMSI)が設置され、物性研に事務局が設置された(統括責任者:常行真司東大教授)。詳しくは、分子研レターズ64 P56-P57をご覧ください。

分子研では、この戦略機関の責務を担うため、計算分子科学研究拠点(TCCI)を設置し、平成23年度より5年間の活動を開始した。

(2) 戦略課題研究と計算科学技術推進体制構築について

CMSIの担う大きな責務として、京を利用する戦略課題研究の推進と計算科学技術推進体制の構築がある。前者については、大きく4つの部会が設置され研究が進められている。各部会には、当面重点的に推進する重点課題と、次の重点課題たる特別支援課題が選定されている。各部会の課題は、以下の通りである。

第1部会:「新量子相・新物質の基礎科学」

第2部会:「次世代先端デバイス科学」

第3部会:「分子機能と物質変換」

第4部会:「エネルギー変換」

これらの部会で、分子科学が担当する重点課題を図1に示す。TCCIが支援する特別支援課題を図2に示す。

重点課題(分子科学関係)	
第1部会	超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測 代表者:天能 精一郎(神戸大院シス情報)
	分子における電子の動的過程と多体量子力学 代表者:高塚 和夫(東大院総合文化)
	凝縮分子科学系における揺らぎとダイナミクス 代表者:齊藤 真司(分子研)
第3部会	全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開 代表者:岡崎 進(名大院工)
第4部会	水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性 代表者:田中 秀樹(岡山大理)

図1 分子科学が担当する重点課題

TCCIで支援する特別支援課題	
第2部会	ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発 代表者：信定 克幸（分子研）
第3部会	拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明 代表者：岡本 祐幸（名大院理）
	ポリモルフから生起する分子集団機能 代表者：松林 伸幸（京大化研）
	ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス 代表者：中井 浩巳（早大先進理工）
第4部会	機能性分子設計-光機能分子と非線形外場応答分子の光物性 代表者：江原 正博（分子研）
	太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算 代表者：山下 晃一（東大院工）
	バイオマス利用のための酵素反応解析 代表者：吉田 紀生（分子研）

図2 TCCIで支援する特別支援課題

計算科学技術推進体制の構築では、幅広く分野振興を行うもので、TCCIとしては、分子科学の分野において計算科学の推進体制の構築と戦略課題研究の推進を行うことが求められている。以下、本稿では、TCCIにおける平成23年度のこの活動の報告を行う。

5-7-2 TCCIの活動について

(1) 推進体制について

平成23年度の活動を推進するにあたって図3のような推進体制を構築した。左側は、研究部門であり、特別支援課題、重点課題を支援するための組織である。右側が、TCCIとしての執行部門であり、各先生にお願いして拠点として必要な活動を分担して頂いている（図4）。その多くは、上部組織であるCMSIの小委員会の機能に対応するもので、TCCIの責任者は、CMSIの委員も兼務して、CMSIとTCCIで風通しのよい活動をねらっている。特に執行の要となる運営委員会では、これらの執行部門と前記の部会の分子科学の責任者などから構成し、TCCIの運営に必要な審議・決定を行うようにしている。

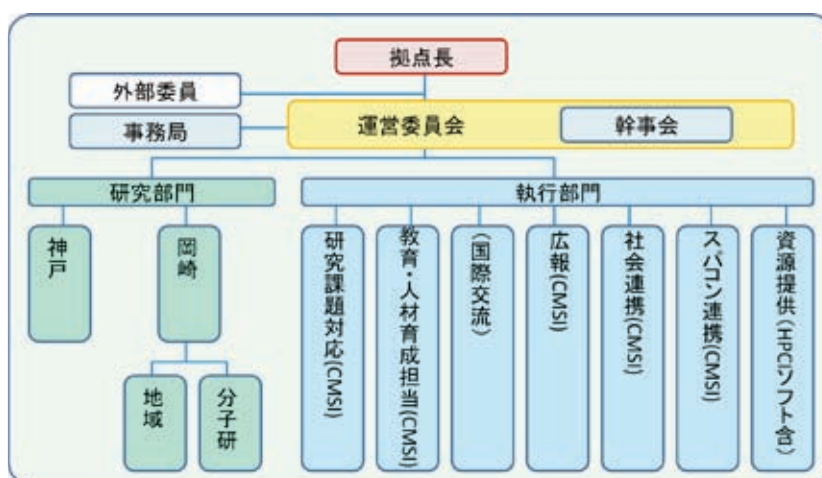


図3 計算分子科学研究拠点（TCCI）体制

会議体	委員(○委員長または責任者)
運営委員会 (3ヶ月に1回)	○高塚、天能、信定、岡崎、山下、長岡、関野、奥村、柳井、兵頭、永瀬、平田、斉藤、江原、榊
幹事会(2ヶ月に1回) (運営委員会の一部)	○高塚、永瀬(主幹会議担当)、平田、斉藤、江原、榊、岡崎
外部委員	(未定)
事務局	榊、岡崎、石谷
人事検討委員会	○高塚、榊、岡崎、天能、山下
教育・人材育成委員会	○信定、天能、長岡、関野、岡崎
国際交流	(未定)
広報	○奥村、柳井
社会連携	○兵頭、高塚、榊、太田、岡崎、江原
スパコン連携	○斉藤
資源提供	○江原

図4 TCCIの委員会など

(2) 平成23年度の実績について

今年度はTCCI立ち上げの年であり、分子科学分野での立ち位置の確立を目指して以下の活動を行った。

拠点立ち上げと人材の確保

分子研に本部事務局を、東大駒場に地域拠点を、神戸では理研計算科学研究機構内に神戸拠点を設置した。また、人材育成・教育担当の教員、研究支援に必要なCMSI研究員の採用などを行った(図5)。残念ながら、平成23年度内に採用できなかったポジションも若干残っているが、平成24年度からは要員体制は整う見込みである。

		第1部会	第2部会	第3部会	第4部会
分子科学	重点課題	天能(2) 笹井(1)		岡崎(1) 北浦(1) 北尾(1)	田中(1)
拠点関係 分子研(1) 東大総合文化(1) 神戸大(1)* 名大工(1)*	特別支援課題		信定(1)	岡本(1) 松林(1) 中井(1) 岡崎・北浦(1)	山下(1) 吉田(1) 長谷川・三浦(1)

*:教員

図5 CMSI研究員・教員配置

人材育成・教育

前述のように担当する教員の公募を行い採用した。そして、TCCIでは、CMSIの人材育成・教育活動の一環として、図6の教育コースを企画推進、或いは共催した。また、平成24年度以降の計画についても企画・検討を行った。

CMSI人材育成・教育の一環として企画・実施

行事名	開催日程	場所	備考
第15回分子シミュレーション夏の学校	2011年9月9日(金)～11日(日)	岡山大学理学部附属牛窓臨海実験所	共催
	参加者27名、講師4名		
TCCIウィンターカレッジ(分子シミュレーション)	2011年12月12日(月)午後～15日(木)	自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター	
	参加者86名(内、民間企業9名)、講師ほか18名		
TCCIウィンターカレッジ(量子化学)	2011年12月19日(月)、20日(火)	自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター	
	参加者46名(内、民間企業4名)、講師・座長8名		
量子化学超並列プログラミング国際ワークショップ	2012年2月28日(火)	東大駒場ファカルティハウス	
	参加者64名(内、民間企業13名)		

図6 人材育成・教育

人的ネットワークの形成(研究会, シンポジウムの開催)

図7に示す研究会・シンポジウムを開催した。

TCCI第2回研究会:TCCIの全体シンポジウムである第2回研究会を理研・計算科学研究機構で開催した。100名を超える研究者が集り、「京」用プログラム開発の状況や研究の進捗についての発表・議論を行った。今後も、毎年1回は公開の全体シンポジウムの開催を予定している。

TCCI第1回実験化学との交流シンポジウム:TCCIの関わる有機化学, 物理化学, 生命科学の実験サイドから計算科学への期待・要望等に関する交流シンポジウムを開催した。優れた講演者の参加によって、非常に興味深く有意義なシンポジウムとなった。今後は、TCCIにおける実験研究者との交流の進捗に合わせて公開シンポジウムを開催していく予定である。また、文科省からCMSIへ元素戦略に関する支援要請を受け、TCCIでもその対応を進めている。そこで、「電池材料」および「触媒」に関する実験および理論計算研究の研究紹介を実験計算連携検討会にて行った。平成23年度にまとまる予定の新元素戦略に計算化学の立場から積極的に関与していく予定である。

TCCI第1回産学連携シンポジウム:企業における計算科学の利用と学術研究への期待, TCCIにおける研究状況等の紹介・意見交換を通じた産学連携を目的に産学連携シンポジウムを開催した。半数近くが民間からの参加であり、この分野における産学連携への期待の高さが垣間見られる。TCCIでは、今回のシンポジウムを切掛けに産学連携のより具体的な活動を継続的に実施していく予定である。

行事名	開催日程	場所
TCCI第2回研究会	2011年8月11日(木)～12日(金)	理研計算科学研究機構(AICS) 6F 講堂
	参加者数:107名(内、民間企業16名)	
TCCI第1回 実験化学との交流シン ポジウム	2011年11月10日(木)～11日(金)	京大 福井謙一記念研究センター
	参加者数:84名(内、民間企業9名)	
TCCI第1回 産学連携シンポジウム	2011年11月24日(木)午後	野村コンファレンスプラザ日本橋、5 階 大ホール
	参加者数:70名(内、民間企業30名)、民間企業役員2名が講演	
CMSI 元素戦略WG「電 池材料の部」実験計算 連携検討会	2011年11月9日(水)	東大 小柴ホール
	参加者数:94名(内、民間企業45名)	
CMSI 元素戦略WG「触 媒の部」実験計算連携 検討会	2011年11月12日(土)	京大 福井謙一記念研究センター
	参加者数:56名(内、民間企業10名)	

図7 研究会・シンポジウム

計算機資源の提供

自然科学研究機構計算科学研究センターでは、TCCI 活動の一環として、戦略機関向けに平成 23 年度から計算機資源の 20% の提供を開始した。センターの計算機システムの更新にともない、平成 24 年度からは、より多くの計算機パワーが提供される見込みである。

ナノ統合ソフトの継承について

平成 23 年度で終了する「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」で開発されたソフトウェア(分子科学)については、継承すべく関係者で打合せを行った。

5-7-3 今後の課題と取組みについて

関係者のご尽力のおかげで、平成 23 年度は、拠点の立ち上げと、上記のような各種の活動を行うことができた。感謝したい。平成 24 年度後半からは、京の本格利用が開始される。この世界最速のスーパーコンピュータを利用して如何に成果を出していくかが、戦略機関全体に関わる課題である。TCCI としても、重点課題、特別支援課題を担当される先生方を支援助し、少しでも成果創出のお手伝いができればと考える次第である。

また、実験化学との交流及び産学連携は今後も継続発展させていく予定である。特に、産学連携については、学生のキャリアパス拡大に向けて、シンポジウムでの新規課題の発掘・相談、社会人の再教育の場の提供など、産に対する一貫性のある対応システムの確立を目指して行く所存である。

5-8 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 23 年度の分子科学研究所における活動内容を以下にまとめる。

(1) 光源要素技術の開発

マイクロドメイン制御に基づく超小型高輝度高品位レーザーの開発において、ウェーハ-スケールのPPMgLNが望める斜め分極反転に成功した他、原研とQUADRAに用いる次世代レーザーモジュールの共同開発を開始した。

深紫外や中赤外領域における新しい超短光パルス発生技術の開発において、アルゴンガス中にチタンサファイアレーザーの出力の基本波(800 nm)と二倍波(400 nm)を重ね合わせて集光し、四光波混合過程による波長変換によって、2-20 μm まで広がった中赤外光スペクトルを発生させた。2 μm と 20 μm では、10 倍も波長が異なっているが、その全帯域において、光がコヒーレントに重ね合わされ、中赤外光が約半周期しか振動しないような、ハーフサイクルパルスになっていることを確認した。

超高精度量子制御技術のうち、コヒーレント制御技術を分子集合体や凝縮相に適用するための研究開発では、CREST 研究として進めている超高速量子シミュレーターの開発に必要な光格子ポテンシャルの作成、およびさきがけ研究として進めている固体パラ水素結晶中での時空間コヒーレント制御において、京都大学の野田進教授の面発光レーザーが有効であることが期待される。今年度は、野田グループとの研究交流を通じて、面発光レーザーの将来的な導入に向けた準備を進めた。また、超高速量子シミュレーターの開発においては、分子性結晶をモデル化するために Rb 原子だけでなく Rb₂ 分子を用いることが望ましい。極低温の Rb₂ 分子を生成するための技術開発の一環として、同技術開発のパイオニアである Heidelberg 大学物理研究所長の Matthias Weidemüller 教授との研究交流を進めた。また、バルク固体のコヒーレント制御実験(CREST)やパラ水素実験(さきがけ)において、同様にバルク固体中の量子状態の研究を精力的に展開している東京大学の五神真教授(先端光量子科学アライアンス拠点長)との研究交流を進めた。また、コヒーレント制御技術を分子集合体に適用するための研究開発では、NO-Ar 分子錯体における大振幅な分子間振動を高強度極短パルス光によってコヒーレントに励起した実験結果を、分子間力ポテンシャル上での量子

波束の時間発展に関する数値計算により再現することができた。この成果は、今後、大規模な構造変形を引き起こすような励起法を探索する上での基盤となると期待される。

時空間分解顕微分光技術の開発では、開口ファイバースコープを用いた近接場光学顕微鏡において、プローブ先端で約 16 fs のパルス幅を安定に得る技術を確立した。これを用いて、金ナノ微粒子試料のプラズモン励起の位相緩和を測定し、約 8 fs の緩和時間を観測することに成功した。

極短パルス光源の開発と超高速現象への応用では、これまでに開発したサブ 10 フェムト秒極短パルス光源を用いて、強レーザー場中分子反応ダイナミクスの追跡を行った。特に NO 分子を用いて、電子励起による電子軌道の形状変化が強レーザー場における解離性イオン化過程の異性に反映されることを明らかにした。深紫外域の強レーザーパルスを用いて、多光子吸収による He 2 電子励起状態の生成に成功した。また日本原子力研究開発機構（関西光科学研究所）の協力のもとに、超短パルス XUV 光の波形計測法について理論計算による検討を行った。

(2) 人材育成・施設共用

人材育成では、上述の光源要素技術の開発業務への参加を通じて、他機関の若手研究者や学生の教育を行った他、大森教授が東京大学グローバル COE プログラム「未来を拓く物理科学結集教育研究拠点」、東北大学グローバル COE プログラム「分子系高次構造体化学国際教育研究拠点」で講義を行った。

施設共用では、ナノ秒コヒーレント光源、超高精度光干渉計、走査型近接場光学顕微鏡を拠点内の先端的な共同研究の資源として提供するための準備を進めた。

さらに、本ネットワークにおける供用研究の推進への寄与を目的として、第 4 回「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」シンポジウムを主催した。

5-9 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、22年度に引き続き光源装置、ビームライン装置の設計・製作を進めた。平成23年春にはこれらの装置を加速器に装着した。プログラムの最終年度に向けて機器の立ち上げ調整を進めている。

5-10 若手研究者招へい事業～東アジア首脳会議参加国からの招へい～

5-10-1 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。1年あまりの中断期間を経て、2008年度後期より3期にわたって実施されてきたJSPS-JENESYSの第4期プログラムが6月より実施され、分子研は過去3期に引き続き、実施研究機関として採択された。中断期間中に実施されたJASSO-JENESYSプログラム、分子研独自プログラムであるEXODASSプログラムと合わせると、同種のプログラムは6期目となり、本プログラムはすっかり分子研に定着した感があるとともに、東南アジア諸国にとっても、若手研究者における重要なキャリアパスのひとつとして認識されるようになってきている。

5-10-2 分子研主催プロジェクト課題について

プロジェクト課題名は、「『環境・エネルギー』基礎研究基盤の確立」である。

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

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

5-10-3 実施状況

第4期では、24研究室（うち分子研22、所外2）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、カセサート大学（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。

今回は採択決定から公募、採択までの期間が極めて短かったのだが、わずか2週間弱の募集期間で、さらにリサーチプロポーザルの提出を求めているにもかかわらず、過去最高の7カ国、61名の応募が集まった。またその提案内容もこれまで以上に充実していたため、指定交流相手機関とホームページ応募の全ての候補者を同列に扱い、審査を行った。その結果、予定の12名より多い16名を最終的に採択し、分子研をはじめ、協力機関である大阪大学、甲南大学に招聘した。内訳はタイ10名、インド2名、マレーシア、ベトナム、インドネシア、フィリピン各1名である。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4名、博士課程学生12名と、大学院生中心の構成となった。

招へいは、2011年8～10月にかけて実施され、各研究者に応じて、29～72日の期間での研究プログラムが組まれた。また10月11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い。既に9月に開催された第14回アジア化学会議においても、JENESYS関係者の各方面での活躍が見られた。

このように、本プログラムによってまかれた種は東南アジア諸国で確実に根付いており、アジア地域における分子研のプレゼンスと分子科学ネットワークは確実に強化されている。安倍政権時に提案された本JENESYSプログラムはひとまず終了となり、今後の後継プログラムについての詳細はまだ不明であるが、独自事業のEXODASSプログラムをはじめ、様々なチャネルを利用して、今後の継続が望まれるところである。