

# 「分子研リポート 2011」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
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	2011 年度の実施状況	38
3-3-3	共同利用研究実施件数一覧	52
3-4	国際交流と国際共同研究	53
3-4-1	外国人客員部門等及び国際交流	53
3-4-2	岡崎コンファレンス	56
3-4-3	分子科学研究所国際共同研究	59
3-4-4	日韓共同研究	60

3-5	大学院教育.....	61
3-5-1	特別共同利用研究員.....	61
3-5-2	総合研究大学院大学二専攻.....	62
3-5-3	オープンキャンパス・分子研シンポジウム.....	66
3-5-4	夏の体験入学.....	66
3-5-5	総研大アジア冬の学校.....	68
3-5-6	組織的な大学院教育改革推進プログラム.....	69
3-5-7	統合生命科学教育プログラム.....	70
4	研究支援等.....	71
4-1	技術課.....	72
4-1-1	技術研究会.....	72
4-1-2	技術研修.....	74
4-1-3	人事.....	76
4-1-4	受賞.....	76
4-2	安全衛生管理室.....	78
4-3	史料編纂室.....	79
4-4	広報室.....	80
4-5	社会との交流.....	82
4-5-1	自然科学研究機構シンポジウム.....	82
4-5-2	大学共同利用機関シンポジウム.....	83
4-5-3	分子科学フォーラム.....	83
4-5-4	分子研コロキウム.....	83
4-5-5	岡崎市民大学講座.....	84
4-5-6	その他.....	85
4-6	理科教育への協力.....	86
4-6-1	スーパーサイエンスハイスクール.....	86
4-6-2	あいち科学技術教育推進協議会.....	86
4-6-3	国研セミナー.....	86
4-6-4	小中学校での出前授業.....	88
4-6-5	職場体験学習.....	88
4-6-6	その他.....	89
4-7	一般公開.....	90
4-8	見学者受け入れ.....	91
5	各種事業.....	93
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).....	95
5-2	連携融合事業「エクストリームフォトニクス」(文部科学省).....	96
5-3	分野間連携(自然科学研究機構).....	98
5-3-1	概要.....	98
5-3-2	イメージング・サイエンス.....	98
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.....	100
5-4	アジア研究教育拠点事業.....	101

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)	102
5-5-1	概要	102
5-5-2	2011年度採択課題一覧(分子科学研究所担当分)	104
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)	106
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	106
5-6-2	学術的研究成果	108
5-6-3	プログラム公開に向けた取り組み	108
5-6-4	本プロジェクトにおける注目すべき成果	108
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)	110
5-7-1	はじめに	110
5-7-2	TCCIの活動について	111
5-7-3	今後の課題と取り組みについて	114
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)	115
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)	117
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～	118
5-10-1	全体趣旨	118
5-10-2	分子研主催プロジェクト課題について	118
5-10-3	実施状況	118
<b>6</b>	<b>研究領域の現状</b>	<b>121</b>
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	133
	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)	176
	光物性測定器開発研究部門(極端紫外光研究施設)	180
	光化学測定器開発研究部門(極端紫外光研究施設)	186
	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)	189
6-4	物質分子科学研究領域	200
	電子構造研究部門	200
	電子物性研究部門	212
	分子機能研究部門	218
	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)	223
	安全衛生管理室	239

6-5 生命・錯体分子科学研究領域.....	241
生体分子機能研究部門.....	241
生体分子情報研究部門.....	258
錯体触媒研究部門.....	266
錯体物性研究部門.....	270
7 . 点検評価と課題.....	277
7-1 外国人運営顧問による点検評価.....	278
7-1-1 Stephen Berry 外国人運営顧問.....	278
7-2 研究顧問による点検評価.....	287
7-2-1 Graham R. Fleming 研究顧問.....	287
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.....	298
8-5 装置開発室.....	300
8-6 計算科学研究センター.....	301
8-7 岡崎統合バイオサイエンスセンター.....	304
9 . 資料.....	305
9-1 評議員 ( 1976 ~ 1981 ).....	305
9-2 評議員 ( 1981 ~ 2004 ).....	306
9-3 運営顧問 ( 2004 ~ ).....	310
9-4 外国人評議員 ( 1976 ~ 2004 ).....	311
9-5 外国人運営顧問 ( 2004 ~ ).....	312
9-6 運営に関する委員会委員 ( 1975 ~ 1981 ).....	313
9-7 運営協議員 ( 1981 ~ 2004 ).....	314
9-8 運営会議委員 ( 2004 ~ ).....	318
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.....	319
9-10 自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則.....	320
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.....	323
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 24 年度 ).....	324

# 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、2011年における各研究グループ（現在38名のPIがいます）と、所としての活動状況が述べられています。分子研では（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」と「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」、（2）ナノテクノロジーネットワークプログラム、（3）理研との共同による「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」等の特別プロジェクトが進行中です。

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）、を遂行してきました。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、2011年度から「IMSアジアコア」として実施しています。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はプログラムが一時的に終了しており、現在分子研独自のプログラム post-JENESYSとして新たな展開を計っています。

人事面では、2011年3月末に、西、薬師、宇理須教授、さらに2012年3月末に永瀬、平田、田中教授が定年を迎えられ退職されました。また見附、米満准教授も大学の教授として転出されました。これらの先生方は長年分子科学研究所の研究、運営の根幹を担ってこられました。ここに改めて感謝をささげたいと思います。

新任の教授として、2012年4月に、名古屋大学の秋山修志准教授と大阪大学の村橋哲朗准教授が生命・錯体分子科学領域の教授として、また理化学研究所の山本浩史専任研究員が物質分子科学領域の教授として就任しました。また2月と3月には、東京工業大学とカルフォルニア大学バークレイ校のPDであった鹿野豊、石崎章仁の両氏が、新設した独立若手フェロー（特任准教授）に就任しました。同時に相当数の助教の転出入が行われております。このように、分子科学研究所は人事面でも大きな変化の時期にあります。特に、新任教授は全員40歳以下です。また独立若手フェローの1名は採用決定時27歳であり、研究所は若い力がみなぎってきています。

このような変革時、しっかりとした研究の方向性と運営方針をもつことが大切であり、多数のPIと一緒に新しい研究の方向を模索し設定しました。同時に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教授と大阪大学の特任教授の柳田敏雄教授に研究顧問をお願いし、プロジェクト研究の進め方、研究の将来構想など

について提言を頂きました。Fleming 教授は 2011 年 10 月に 5 日間にわたり、昨年度からの継続として各研究グループの研究のヒヤリングを行い、また研究所の在り方に種々の提言を行っていただきました。また、外国人運営顧問である、米国シカゴ大学 Stephen Berry 教授にも同様の評価と提言を頂きました。

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今立っています。皆様のご支援とご協力をお願いいたします。

2012 年 4 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。

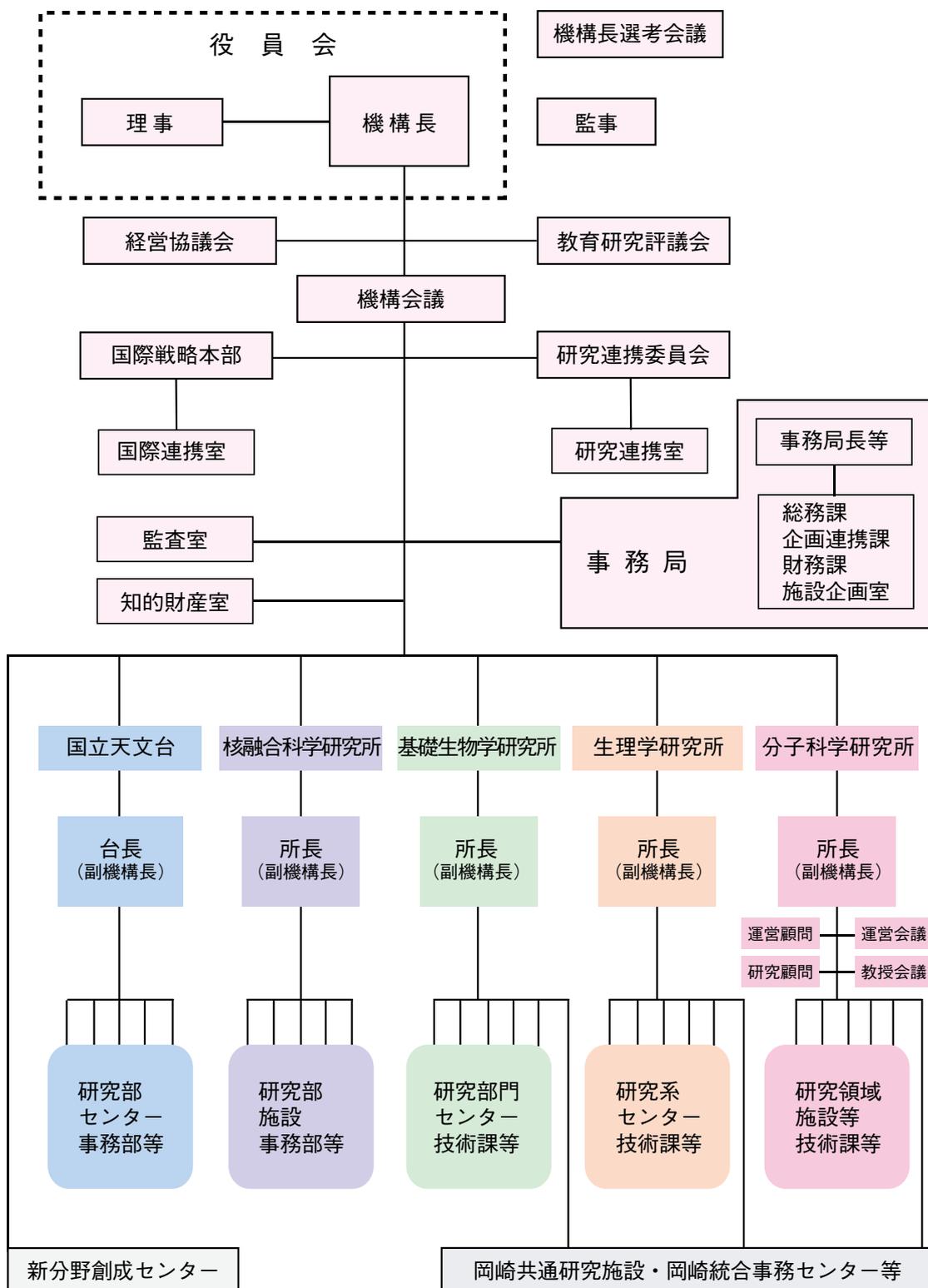
1965. 12.13 日本学会会議は、「分子科学研究所」(仮称)の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
1973. 10.31 学術審議会は、「分子科学研究所」(仮称)を緊急に設立することが適当である旨、文部大臣に報告した。
1974. 4.11 文部大臣裁定により、東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室(室長:井口洋夫前東京大学物性研究所教授,定員3名)及び分子科学研究所創設準備会議(座長:山下次郎前東京大学物性研究所長,学識経験者35人により構成)が設置された。
1974. 7. 6 分子科学研究所創設準備会議において、研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
1975. 4.22 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 m<sup>2</sup>)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 m<sup>2</sup>)が竣工した。
1978. 3.11 装置開発棟(1,260 m<sup>2</sup>),機器センター棟(1,053 m<sup>2</sup>),化学試料棟(1,063 m<sup>2</sup>)が竣工した。
1978. 4. 1 電子構造研究系に電子状態動力学研究部門,電子構造研究部門が,分子集団研究系に基礎光化学研究部門が設置された。
1979. 3. 1 電子計算機センター棟(1,429 m<sup>2</sup>)が竣工した。
1979. 3.24 実験棟第2期工事(3,742 m<sup>2</sup>),極低温センター棟(1,444 m<sup>2</sup>)が竣工した。

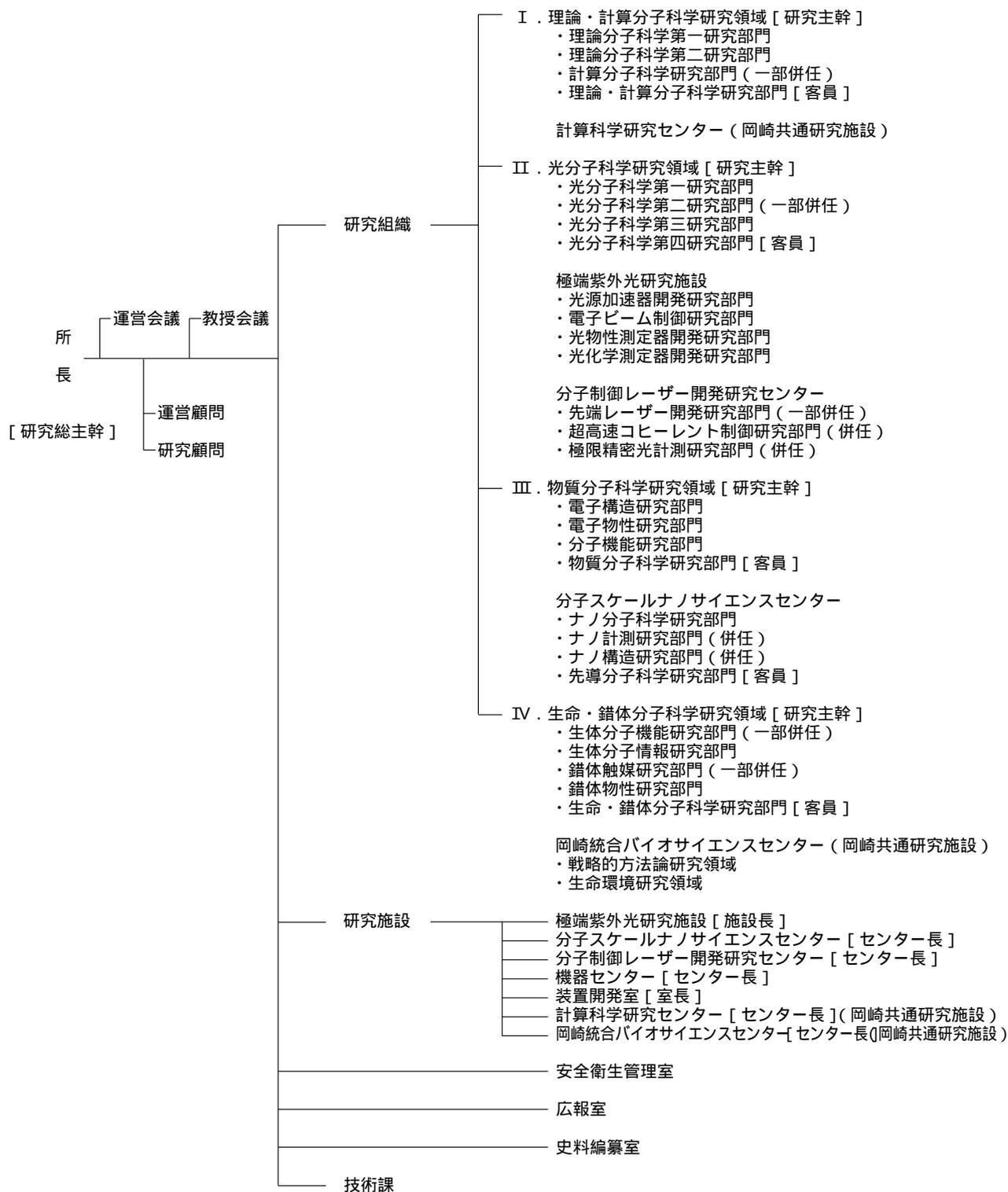
1979. 4. 1 分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され、管理局が総務部（庶務課，人事課，国際研究協力課），経理部（主計課，経理課，建築課，設備課），技術課に改組された。
1979. 11. 8 分子科学研究所創設披露式が挙行された。
1981. 4. 1 第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4.14 国立学校設置法の一部を改正する法律により，分子科学研究所と生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所，生理学研究所）は総合化され，岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され，管理局が岡崎国立共同研究機構管理局となり，技術課が研究所所属となった。
1982. 4. 1 研究施設として極端紫外光実験施設（UVSOR）が設置された。
1982. 6.30 極端紫外光実験棟第1期工事（1,281 m<sup>2</sup>）が竣工した。
1983. 3.30 極端紫外光実験棟第2期工事（1,463 m<sup>2</sup>）が竣工した。
1983. 4. 1 電子構造研究系に分子エネルギー変換研究部門が，分子集団研究系に分子集団動力学研究部門，極端紫外光研究部門が設置された。
1983. 11.10 極端紫外光実験施設ストレージリング装置に電子貯蔵が成功した。
1984. 2.28 極端紫外光実験施設の披露が行われた。
1984. 4.11 研究施設として，錯体化学実験施設（錯体合成研究部門，錯体触媒研究部門）が設置された。流動研究部門制度が発足し錯体化学実験施設に錯体合成研究部門が設置された。
1985. 5.10 分子科学研究所創設10周年記念式典が挙行された。
1987. 4. 1 第三代研究所長に井口洋夫分子科学研究所教授が任命された。
1989. 2.28 分子科学研究所南実験棟（3,935 m<sup>2</sup>）が竣工した。
1989. 5.28 分子集団研究系に界面分子科学研究部門が，関連領域研究系に有機構造活性研究部門（共に流動研究部門）が設置された。
1991. 3.27 極端紫外光実験棟（増築）（283 m<sup>2</sup>）が竣工した。
1991. 4.11 極端紫外光科学研究系（反応動力学研究部門）が設置された。基礎光科学，界面分子科学，極端紫外光の各研究部門は分子集団研究系から極端紫外光科学研究系へ振替された。
1993. 4. 1 第四代研究所長に伊藤光男前東北大学教授が任命された。
1994. 1.31 電子計算機センター棟（増築）（951 m<sup>2</sup>）が竣工した。
1995. 3.31 関連領域研究系有機構造活性研究部門（流動）が廃止された。
1995. 4. 1 理論研究系に分子基礎理論第四研究部門が設置された。
1995. 5.12 分子科学研究所創設20周年記念式典が挙行された。
1996. 5.11 関連領域研究系に分子クラスター研究部門（流動）が設置された。
1997. 4. 1 機器センター，極低温センター，化学試料室が廃止され，分子制御レーザー開発研究センター，分子物質開発研究センターが設置された。
1999. 4. 1 第五代研究所長に茅幸二慶應義塾大学教授が任命された。
2000. 4. 1 電子計算機センター，錯体化学実験施設錯体合成研究部門が廃止され，電子計算機室が設置された。共通研究施設として，統合バイオサイエンスセンター，計算科学研究センター，動物実験センター，アイソトープ実験センターが設置された。
2002. 2.28 山手2号館（統合バイオサイエンスセンター，計算科学研究センター）（5,149 m<sup>2</sup>）が竣工した。
2002. 3.11 山手1号館A（動物実験センター，アイソトープ実験センター）（4,674 m<sup>2</sup>）が竣工した。
2002. 4. 1 関連領域研究系分子クラスター研究部門（流動），極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門（流動），分子物質開発研究センターが廃止され，分子スケールナノサイエンスセンター（分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門，ナノ触媒・生命分子素子研究部門，ナノ光計測研究部門，界面分子科学研究部門（流動），分子クラスター研究部門（流動））が設置された。
2003. 8.20 山手4号館（分子科学研究所分子スケールナノサイエンスセンター）（3,813 m<sup>2</sup>）が竣工した。
2004. 3. 1 山手5号館（NMR）（664 m<sup>2</sup>）が竣工した。
2004. 3. 8 山手3号館（統合バイオサイエンスセンターなど）（10,757 m<sup>2</sup>）が竣工した。

2004. 4. 1 国立大学法人法により，国立天文台，核融合科学研究所，基礎生物学研究所，生理学研究所，分子科学研究所が統合再編され，大学共同利用機関法人自然科学研究機構が創設された。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。
2004. 4. 1 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。
2004. 4. 1 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も候補に加えて、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名で運用することになった。

#### 外国人運営顧問（2011年度）

WOLYNES, Peter G.	米国ライス大学教授
BERRY, R. Stephen	米国シカゴ大学名誉教授

### 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（2011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原案を作成して、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	神奈川大学理学部教授
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	東京大学大学院理学系研究科教授
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
大島康裕	光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
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、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。また，平成 23 年度の年俸制導入によって特任准教授（若手独立フェロー）も人事選考部会で選考することになった。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，助教候補者および特任准教授（若手独立フェロー）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，可否の投票等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，任期のない助教に移行した。

人事選考部会委員（2011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（東大院教授）	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（2011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ことについて，検討し，意見を述べる。所長が議長を務める。

学会等連絡会議構成員（2011年度）

【所外委員】

（日本化学会推薦）

加 藤 昌 子（北大院教授）	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）

澤 博（名大院教授）	松 尾 由 賀 利（理研前任研究員）
------------	--------------------

（日本放射光学会推薦）

水 木 純 一 郎（関西学院大教授）

(錯体化学会推薦)

北川 宏 (京大院教授)

(分子科学会推薦)

阿波賀 邦夫 (名大教授)

神取 秀樹 (名工大院教授)

河野 裕彦 (東北大院教授)

関谷 博 (九大院教授)

武田 定 (北大院教授)

西川 恵子 (千葉大院教授)

(日本生物物理学会推薦)

寺嶋 正秀 (京大院教授)

【所内委員】

岡本 裕巳 (分子研教授)

田中 晃二 (分子研教授)

平田 文男 (分子研教授)

見附 孝一郎 (分子研准教授)

横山 利彦 (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。特任助教(特別研究員)及びIMSフェロー等の選考を行う。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	2011.10.17~ 10.21, 2012. 2.8~2.10
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	2011.6.28
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	2011.5.20 (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		2012.3.29
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	2012.3.21
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	2011.8.19, 2012.1.25
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) 室長 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	2011.9.28
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	2011.5.30, 12.12
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
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	2011.5.18, 8.31, 12.26, 2012.2.24
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	-
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		2011.4.1, 4.27, 6.9, 7.1, 9.1, 9.29, 11.4, 11.28, 2012.1.6, 2.2, 3.2
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	2011.4.19, 5.17, 6.21, 7.12, 9.20, 10.18, 11.1, 12.20, 2012.1.17, 2.21, 3.9
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	2011.6.28
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。	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	2012.2.28
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 室長が必要と認められた者1	委員会規則	2011.5.25, 7.21, 10.31, 12.15, 2012.2.2
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	2011.8.10, 2012.2.13
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	2012.3.13
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	2012.3.19
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	2011.4.19, 5.17, 6.21, 7.19, 8.26, 9.20, 10.18, 11.15, 12.20, 2012.1.17, 2.21, 3.19
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	2011.9.20
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	2011.4.26, 7.4, 12.14, 2012.2.28
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	2012.2.2
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	2011.9.13, 2012.3.12
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	2011.7.19, 2012.3.23
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	2011.6.28

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	2011.8.25
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		2011.6.7, 6.14, 8.4, 11.1
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	2011.5.24
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	2011.5.24
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	協議会規則	2011.5.11, 7.13, 9.7, 11.9, 2012.1.9, 3.14
施設整備委員会	岡崎3機関各地区の施設整備, エネルギー及び環境保全等に関する事項の立案を行い, 所長会議に報告する。	研究総主幹 教授 1 計算科学研究センター長 技術課長	岡崎3機関施設整備委員会規則	2011.6.7, 12.21
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	2012.3.7
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	2011.6.30, 11.16, 2012.1.31

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
宇理須 恆 雄	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
西 信 之	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
藥 師 久 彌	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
LUO, Guangfu	研究員(IMS フェロー)
榊 茂 好	研究員
GUO, Jingdong	研究員
SUBRAMANIAN, Karthikeyan	専門研究職員
ZHOU, Xin	専門研究職員
信 定 克 幸	准教授
安 池 智 一	助 教
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
清 田 泰 臣	学振特別研究員
丸 山 豊	専門研究職員
PHONGPHANPHANEE, Saree	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)
宮 崎 真 長	受託研修員

計算分子科学研究部門

齊藤真司	教授
金鋼	助教
矢ヶ崎琢磨	研究員
東雅大	学振特別研究員
野田真史	専門研究職員
SINDHIKARA, Daniel Jon	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)

吉澤一成	教授(九大先導研)
杉田有治	教授(理研基幹研)

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
西山嘉男	専門研究職員(分子科学研究所特別研究員/特任助教)
大島康裕	教授
水瀬賢太	助教
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
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
PRAJONGTAT, Pongthep	特別協力研究員
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)
近藤寛	教授(慶應大理工)
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) 横 山 利 彦

電子構造研究部門

横 山 利 彦	教 授
中 川 剛 志	助 教
高 木 康 多	助 教
才 田 隆 広	研究員
唯 美津木	准教授
邨 次 智	助 教
MAITY, Niladri	研究員
ZHANG, Shenghong	研究員
西 條 純 一	助 教

電子物性研究部門

中 村 敏 和	准教授
古 川 貢	助 教
山 本 薫	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)
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)

太 田 信 廣	教 授 (北大電科研)
安 倍 学	教 授 (広大院理)
加 藤 立 久	教 授 (京大高等教育機構)

生命・錯体分子科学研究領域 研究主幹(併) 魚 住 泰 広

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)
藤 澤 敏 孝	専門研究職員
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
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

古 谷 祐 詞	准教授
木 村 哲 就	助 教
塚 本 寿 夫	専門研究職員 (分子科学研究所特別研究員／特任助教)
宇 野 秀 隆	特別訪問研究員

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
山田 陽 一	特別訪問研究員
皆川 真 規	特別訪問研究員
SARKAR, Shaheen Md.	特別訪問研究員
BAEK, Heeyoel	特別訪問研究員
佐藤 太久真	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
中根 大 輔	研究員
正岡 重 行	准教授
近藤 美 欧	助 教

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
井村 敬一郎	研究員
石川 理 沙	研究員
田中 誠 一	研究員

電子ビーム制御研究部門

大東 琢 治	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
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
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
GARIKAPATI, Narahari Sastry	外国人研究職員 (Indian Institute of Chemical Technology) '11.12.1 ~ '12.3.31
東林 修平	助教
森田 悠紀	研究員
PANDA, Gautam	学振外国人招へい研究者 '11.9.26 ~ '12.7.25
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)
横山 利彦	教授(併)
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
石月 秀貴	助教
佐藤 庸一	専門研究職員
常包 正樹	専門研究職員
BHANDARI, Rakesh	専門研究職員
東 康弘	共同研究員
大石 大輔	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) 大 島 康 裕

装置開発室 室長(併) 加 藤 政 博

安全衛生管理室 室長(併) 田 中 晃 二  
戸 村 正 章 助 教

### 岡崎共通研究施設 (分子科学研究所関連)

#### 岡崎統合バイオサイエンスセンター

##### 戦略的方法論研究領域

青 野 重 利	教 授
吉 岡 資 郎	助 教(兼)
澤 井 仁 美	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	専門研究職員
藤 井 浩	准教授
倉 橋 拓 也	助 教(兼)
CONG, Zhiqi	研究員(IMS フェロー)
大 舘 彰 道	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)
矢 木 真 穂	専門研究職員(特任助教)
植 草 義 徳	研究員

#### 計算科学研究センター センター長(併) 齊 藤 真 司

齊 藤 真 司	教 授(兼)
金 鋼	助 教(兼)
江 原 正 博	教 授
MUKHERJEE, Debashis	外国人研究職員 ( Indian Association for the Cultivation of Science ) '11.8.28 ~ 11.27
福 田 良 一	助 教(兼)
BOBUATONG, Karan	研究員
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
石 谷 隆 広	専門研究職員

技術課 課長 鈴木 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2011年12月1日現在。ただし、外国人研究者で2011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。平成23年度より、年俸制職員の特任准教授である若手独立フェロー制度を試行することになった。年俸制職員の定めに従って任期は5年である。対象は、博士号取得2年以内（見込み含む）、あるいは博士号取得後、海外で研究中の人は帰国後1年以内（滞在中含む）である。今後、准教授へのテニュアトラック化する方向で詳細を検討中である。

### (2) 創立以来の人事異動状況（2012年1月1日現在）

#### ① 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	若手独立フェロー/ 特任准教授	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	76	255	154	0	13	206
転出者数	6	32	59	214	116	0	6	201
現員	1	12(3)	17	41	38(1)	0	7	5

( ) は委嘱で外数。

#### ② 客員研究部門

職名 区分	教授	准教授
就任者数	137	144
現員	8	4

#### ③ 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	10

\*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

2012.1.1

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(1)	8	14(6)		14(6)
光分子科学研究領域		4(3)	1(3)	7	12(6)		12(6)
物質分子科学研究領域		1(3)	4	8	13(3)		13(3)
生命・錯体分子科学研究領域		2(4)	2(5)	7(1)	11(10)		11(10)
研究施設		2(8)	7(2)	11	20(10)		20(10)
技術課						38(1)	38(1)
小計	1	12(23)	17(11)	41(1)	71(35)	38(1)	109(36)
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	16(24)	19(11)	42(8)	78(43)	38(1)	116(44)

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

### 2-6-2 財政

(単位：千円)

科目等 \ 年度	2007 年度	2008 年度	2009 年度	2010 年度	2011 年度
人件費	1,230,465	1,187,815	1,207,802	1,224,363	1,187,453
運営費，設備費	1,993,108	2,200,634	2,090,047	2,125,872	2,983,850
施設費	7,140	0	607,060	575,589	0
合計	3,230,713	3,388,449	3,904,909	3,925,824	4,171,303

寄付金

区 分	2007 年度	2008 年度	2009 年度	2010 年度	2011 年度
件数 ( 件 )	10	62	43	4	10
金額 ( 千円 )	9,700	16,455	26,770	12,870	7,409

共通研究施設を除く

科学研究費補助金

区 分	2007 年度	2008 年度	2009 年度	2010 年度	2011 年度
件数 ( 件 )	71	64	74	64	58
金額 ( 千円 )	335,610	291,835	334,961	381,763	312,600

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

2011 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	6	2	8
新学術領域研究	課題	1	0	1
特定領域研究		2	1	3
挑戦の萌芽研究		3	1	4
若手研究	( S )	0	0	0
若手研究	( A )	4	0	4
若手研究	( B )	11	2	13
基盤研究	( S )	1	0	1
基盤研究	( A )	5	0	5
基盤研究	( B )	9	4	13
基盤研究	( C )	8	0	8
特別研究員奨励費		3	0	3
特別研究員奨励費	外国人	2	0	2
研究活動スタート支援		1	2	3
奨励研究		1	0	1
合計		58	12	70

\* 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		17,400	0	17,400
新学術領域研究	領域	25,200	30,400	55,600
新学術領域研究	課題	7,500	0	7,500
特定領域研究		4,000	2,100	6,100
挑戦の萌芽研究		6,100	1,600	7,700
若手研究	(S)	0	0	0
若手研究	(A)	32,600	0	32,600
若手研究	(B)	17,300	2,400	19,700
基盤研究	(S)	41,800	0	41,800
基盤研究	(A)	45,600	0	45,600
基盤研究	(B)	28,600	17,700	46,300
基盤研究	(C)	10,700	0	10,700
特別研究員奨励費		2,200	0	2,200
特別研究員奨励費	外国人	1,600	0	1,600
研究活動スタート支援		1,200	2,460	3,660
奨励研究		600	0	600
合計		242,400	56,660	299,060

\* 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	2007年度	2008年度	2009年度	2010年度	2011年度
件数(件)	13	21	15	10	5
金額(千円)	25,571	51,430	33,292	29,982	27,730

2011年12月31日現在

## 受託研究

区分	2007年度	2008年度	2009年度	2010年度	2011年度
国	4	5	4	4	4
独立行政法人	13	15	20	22	22
大学等	2	3	3	1	1
民間企業他	0	0	0	0	0
合計件数(件)	19	23	27	27	27
合計金額(千円)	708,673	813,550	755,710	919,914	818,379

(岡崎共通研究施設を含む)

2011年12月31日現在



## 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、JST からの外部委員 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、レーザー装置、抗癌細胞作用のある分子の作製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 22 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 9 件（実出願 8 件）、平成 23 年度は、個人有 0 件、機構有 7 件（実出願 6 件）であった（平成 24 年 3 月 31 日現在）。

### 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、平成 18 年度から 22 年度において、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た。平成 23 年度には、このような取り組みをアジア地区に限定することなく、より国際的に発展・拡充するため、分子科学国際共同研究拠点形成事業を開始した。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 8 月、1 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 ,分子および分子集合体の構造，電子物性，反応性に関する理論的研究  
2 ,細胞内分子ダイナミクスを理解するシミュレーションの開発
- 研究課題 1 ,ナノ構造体の電子物性に関する研究  
2 ,酵素と触媒の構造と反応性に関する研究  
3 ,表面と界面の関わる現象と反応に関する研究  
4 ,溶液中での糖鎖のダイナミクスの分子シミュレーション  
5 ,混合脂質二重膜に関するマルチスケールシミュレーション

## 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

### 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拓  
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 表面の物理的・化学的新機能とその機構解明

- 研究課題
- 1 ,表面科学的制御を基にした新規磁性薄膜の創製・評価と新しい磁気光学測定手法の開発
  - 2 ,表面を媒体とした新しい金属錯体触媒構造の創出と選択触媒反応制御

#### 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 ,分子性固体の磁気共鳴研究

#### 分子機能研究部門

研究目的 生体分子・高分子・超分子の構造と機能

- 研究課題
- 1 ,生体分子の構造・物性解析のための固体核磁気共鳴法の開発
  - 2 ,二次元高分子の創製

#### 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

- 研究課題
- 1 ,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
  - 2 ,ポリラジカルのスピン整列に基づく未開拓物質分子群の創製
  - 3 ,自己会合型金属錯体などの超分子系が示す分子磁性

#### 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 物質変換・エネルギー変換のための新規ナノ構造体やデバイスの創製

- 研究課題
- 1 ,有機薄膜太陽電池
  - 2 ,プラスチックエレクトロニクスのための有機半導体の開発
  - 3 ,人工分子で光合成系を組み立てる
  - 4 ,ナノサイズのお椀と粒：「バッキーボール」と「クラスター触媒」

#### 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 光や電子線を用いた新しいナノ計測手法の開発

研究課題 1 ,新しいイメージング等の分光計測法の開発

#### 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・生体分子の物性や機能の解明

研究課題 1 ,ナノ構造物質における大規模電子状態理論計算

2 ,分子触媒や生体分子の構造と機能

#### 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 生体分子の構造と機能

#### 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 赤外、可視、蛍光等の分光法と表面増強効果あるいは顕微計測技術を組み合わせた新規計測法や分光計測に適した試料調製法の開発により、細胞のエネルギー変換および情報伝達にはたらく膜タンパク質の分子機構を明らかにする

研究課題 1 ,赤外差分分光計測による膜タンパク質の構造機能相関解明

2 ,低収量生体分子の時間分解計測を目指したマイクロ流体ミキサーの開発

3 ,イオンチャネルおよびG蛋白質共役型受容体の機能的発現と分子機構解析

#### 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
  - 5 ,水の4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。平成 19 年度から始まった文部科学省ナノテクノロジー・ネットワークプロジェクトを通して、世界最高性能の 920MHz 核磁気共鳴装置，300kV 透過分析電子顕微鏡，高性能走査電子顕微鏡，集束イオンビーム加工装置などのセンター所有の共通機器に加え，センター専任併任教員所有の最先端機器を，民間を含めた全国共同利用に供している。

### 分子制御レーザー開発研究センター

目的 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；高分解能分光法とナノ領域顕微光イメージング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，汎用分光計測装置を集中管理し，さらに冷媒の供給管理も担当することにより，研究所内外の共同利用に資することを目的として設立された。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、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。また、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。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)

また、分子科学研究所では、平成23年3月11日の東日本大震災で研究の継続が困難となった大学及び国・公立研究所等の研究機関の研究者を支援するため、平成23年3月17日から「共同利用研究特別プロジェクト」を開始し、共同利用研究の利用枠の提供を行っている。平成23年度は、協力研究の特別枠に東北大学をはじめ、13研究室、41人の利用があった。

- (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。  
(ア)「分子研研究会(一般分)」国内の研究者が集まるもの。  
(イ)「アジア連携分子研研究会」アジア地区の研究者が数名含まれるもの。  
(ウ)「学協会連携分子研研究会」分子科学関連学協会が共催するもの。
- (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 2011 年度の実施状況

##### (1) 課題研究

課 題 名	分子科学研究所	提案代表者
偏極量子ビーム源の開発とその分子科学への応用		加藤 政博

##### (2) 協力研究

課 題 名 (前期)	代 表 者
発光スペクトルに対する溶媒効果の分子論：RISM-SCF 理論と分光実験との併用	島根大学教育学部 西山 桂
K <sup>+</sup> 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
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
励起三重項分子の構造とスピンドYNAMIX	京都大学大学院理学研究科 馬場 正昭
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
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
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
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
光誘起伝導性を示す D-A 型複合分子の微小結晶構造解析と光誘起電荷分離状態の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科 藤原 秀紀
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
マグネシウム輸送タンパク質 MgT <sub>E</sub> のイオン認識と輸送機構の解明	東京大学大学院理学系研究科 石谷隆一郎
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
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
高効率 AlGaAs/SiO <sub>2</sub> 高屈折率差導波路型波長変換素子の開発	東京大学工学部 松下 智紀
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
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
アルカリドープしたエキゾチックナノカーボンの <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
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
光学測定による強磁場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
有機薄膜太陽電池の作製プロセスと電荷挙動に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	森 竜雄
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
バッキーボウルとその誘導体の構造と機能の研究	東邦大学理学部	菅井 俊樹
酸化活性オキソ種あるいはスルフィド種の創成と反応性の解明	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	養父田 正文
NMR 法と MD 計算を用いたガングリオシド - アミロイド 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
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
交差共役系高分子合成に用いる高速重合金属触媒の探索	山形大学大学院理工学研究科	前山 勝也
組換え <i>GaussiaLuciferase</i> 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
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
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	早稲田大学理工学術院創造理工学部	宮里 裕二
生体膜上における脂質結合蛋白質ドメインの動的構造および機能	兵庫県立大学大学院生命理学研究科	辻 暁
新規分子磁性体の合成と構造物性研究	首都大学東京大学院理工学研究科	藤田 涉
Pd/USY 触媒の精密有機合成反応への展開	鳥取大学大学院工学研究科	奥村 和
Pd 触媒によるハロアルケンの環化三量化反応に関する理論および実験研究	立教大学理学部	山中 正浩
分子の回転波束ダイナミクスの 3 次元計測	東京大学大学院総合文化研究科	長谷川宗良
DNA binding protein の DNA 結合時における分子認識機構の 3D RISM による計算	九州工業大学大学院情報工学研究院	入佐 正幸
近接場光学顕微鏡による金ナノ粒子光導波路の解析	京都大学大学院工学研究科	一井 崇
ヘム結晶化タンパク質の構造・機能相関解析	大阪大学大学院理学研究科	石川 春人
ヘムオキシゲナーゼにおけるヘム 90 度回転の共鳴ラマンスペクトルへの現れ方	兵庫県立大学大学院生命理学研究科	北川 禎三
超高真空下磁気光学効果測定法による強磁性半導体超薄膜の磁気特性	名古屋工業大学	宮崎 秀俊
超高磁場下での $^1\text{H}$ スピン拡散 NMR 測定による結晶構造解析法の開発	東京農工大学大学院工学研究院	朝倉 哲郎
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
[ 共同利用研究特別プロジェクト( 震災対応 ) ]		
光合成蛋白を用いた光駆動生物電池のナノ構造の解明	東北大学多元物質科学研究所	松岡 秀人
炭酸マンガン及び酸化マンガナノ粒子の形状・サイズ制御	東京大学大学院新領域創成科学研究科	佐々木岳彦
金ナノ粒子配列の近接場透過分光イメージング測定	筑波大学大学院数理物質科学研究科	三木 一司
新奇縮合多環系芳香族化合物の合成と構造	東北大学大学院理学研究科	平郡 諭
ナノカーボンの光誘起転位・解離反応制御のシミュレーション	東北大学大学院理学研究科	河野 裕彦
表面および界面の軟 X 線分光	慶應義塾大学理工学部	近藤 寛
気相原子分子小集団の共鳴多光子イオン化解離過程のピコ秒時間分解観測	東北大学大学院理学研究科	美津津文典
パルス ESR による距離計測技術を用いたプリオン凝集体構造の解明	明治大学理工学部	平岡和佳子
シトシン - グアニン混合薄膜の分子間エネルギーバンド分散	北陸先端科学技術大学院大学マテリアルサイエンス研究科	FRIEDLEIN, Rainer

課 題 名 ( 後 期 )	代 表 者	
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
発光スペクトルに対する溶媒効果の分子論: RISM-SCF 理論と分光実験との併用	島根大学教育学部	西山 桂
DNA 切断酵素 EcoRV における水と金属イオンの役割	九州工業大学大学院情報工学研究院	入佐 正幸
$\text{K}^+$ チャネルのゲーティングの微視的機構の解明	福井大学医学部	炭竈 享司
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
金ナノ粒子配列の近接場透過分光イメージング測定	(独)物質・材料研究機構高分子材料ユニット	三木 一司
近接場光学顕微鏡による金ナノ粒子光導波路の解析	京都大学大学院工学研究科	一井 崇
分子の回転波束ダイナミクスの 3 次元計測	東京大学大学院総合文化研究科	長谷川宗良
励起三重項分子の構造とスピンドイナミクス	京都大学大学院理学研究科	馬場 正昭

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
内殻空孔緩和分光による有機分子 - 基盤電荷移動の研究	慶應義塾大学理工学部	近藤 寛
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
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
イオン液体中のニトロキシドラジカルの異方的磁気共鳴パラメータ測定	東京工業大学大学院理工学研究科	河合 明雄
有機磁性体の低温構造と磁性の相関	大阪府立大学大学院理学系研究科	細越 裕子
光誘起伝導性を示す D-A 型複合分子の微小結晶構造解析と光誘起電荷分離 状態の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	藤原 秀紀
金属錯体系イオン液体の磁気物性の探索・評価	神戸大学大学院理学研究科	持田 智行
磁気共鳴法による備前焼原料粘土に含まれる超磁性体の粒径と電子状態解明	奈良女子大学理学部	松岡 由貴
有機結晶とイオン伝導体の物性に対する光照射効果と光励起ダイナミクス	北海道大学電子科学研究所	飯森 俊文
マグネシウム輸送タンパク質 MgtE のイオン認識と輸送機構の解明	東京大学大学院理学系研究科	石谷隆一郎
水分子ダイナミクス計測のためのコヒーレントテラヘルツ光源開発	(独)理化学研究所テラヘルツ光研究プロ グラム	林 伸一郎
高効率 AlGaAs/SiO <sub>2</sub> 高屈折率差導波路型波長変換素子の開発	東京大学大学院工学系研究科	松下 智紀
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
3 原子分子の準安定な多価イオン状態の生成機構解明	新潟大学理学部	副島 浩一
パルス圧縮を用いた大強度短パルス放射光発生に関する研究	京都大学エネルギー理工学研究所	全 炳俊
テラヘルツコヒーレント放射光を用いた時間領域分光法の開発	大阪大学大学院基礎工学研究科	芦田 昌明
アルカリドープしたエキゾチックナノカーボンの <i>in situ</i> 高分解能光電子分光 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	東京工業大学原子炉工学研究所	尾上 順
光学測定による強磁場下での固体電子状態の研究	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
有機薄膜太陽電池の作製プロセスと電荷挙動に関する研究	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
低分子型有機薄膜太陽電池の性能向上に関する研究	名古屋大学大学院工学研究科	森 竜雄
混合発光性錯体の構造と物性解明	立命館大学理工学部	服藤 憲司
交差共役系高分子合成に用いる高速重合金属触媒の探索	富山大学大学院理工学研究部	柘植 清志
Pd 触媒によるハロアルケンの環化三量化反応に関する理論および実験研究	山形大学大学院理工学研究科	前山 勝也
バッキーボウルとその誘導体の構造と機能の研究	立教大学理学部	山中 正浩
固体担持バイメタリック触媒の創成	東邦大学理学部	菅井 俊樹
水と酸素の相互変換を可能にする複核遷移金属錯体触媒の開発	琉球大学理学部	鈴鹿 俊雅
ヘムオキシゲナーゼにおけるヘム 90 度回転の共鳴ラマンスペクトルへの現れ方	立教大学理学部	和田 亨
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	兵庫県立大学大学院生命科学研究科	北川 禎三
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	養玉田正文
窒化物半導体結晶の高精度熱伝導率評価	大阪大学大学院工学研究科	黒田 裕
ピロリン酸架橋型ルテニウム二核錯体による水の 4 電子酸化	早稲田大学理工学術院	森 勇介
モリブデン酵素様作用を持つ錯体の合成と尿酸の生成阻害剤の開発	大阪大学大学院工学研究科	宮里 裕二
遠・中赤外超広帯域コヒーレント光の時間領域測定	香川大学工学部	杉本 秀樹
水中で作用する高機能性触媒の開発とフローケミストリーへの応用	大阪工業大学工学部	鶴町 徳昭
電子励起状態計算を用いた液体アミドの遠紫外領域に現れる電子遷移の溶 媒依存性の研究	大阪工業大学工学部	大高 敦
ヘム結晶化タンパク質の構造・機能相関解析	関西学院大学大学院理工学研究科	森澤 勇介
NMR 法と MD 計算を用いたガングリオシド - アミロイド 相互作用系に おける構造アンサンブルの解析	大阪大学大学院理学研究科	石川 春人
超高真空下磁気光学効果測定法による強磁性半導体超薄膜の磁気特性	(独)産業技術総合研究所	亀田 倫史
SAC-CI 法による分子の励起状態に関する理論的研究	名古屋工業大学若手研究イノベータ養成 センター	宮崎 秀俊
気相イオンの極低温冷却と NMR 分光への応用	量子化学研究協会	宮原 友夫
	神戸大学	富宅喜代一
[ 共同利用研究特別プロジェクト(震災対応) ]		
光合成蛋白を用いた光駆動生物電池のナノ構造の解明	東北大学多元物質科学研究所	松岡 秀人
新奇縮合多環系芳香族化合物の合成と構造	東北大学大学院理学研究科	平郡 論
気相原子分子小集団の共鳴多光子イオン化解離過程のピコ秒時間分解観測	東北大学大学院理学研究科	美齊津文典
NMR を用いた無機材料特異的抗体断片の立体構造解析	東北大学大学院工学研究科	梅津 光央

### (3) 研究会

#### 第5回分子科学会シンポジウム

2011年6月28日(火)～29日(水) 岡崎コンファレンスセンター

6月28日(火)

- 13:30-13:40 開会の辞
- 13:40-15:30 ディスカッションリーダー：福井賢一(阪大院基)  
講師：田原太平(理研), 福間剛士(金大フロンティア), 安部武志(京大院工)  
「セッション(1) 界面の液体計測」
- 16:00-17:50 ディスカッションリーダー：池庄司民夫(東北大原子分子)  
講師：白鳥和矢(東北大院理), 赤木和人(東北大原子分子), 杉野修(東大物性研)  
「セッション(2) 界面の液体シミュレーション」
- 18:30-20:30 懇親会

6月29日(水)

- 9:30-11:20 ディスカッションリーダー：大西洋(神戸大院理)  
講師：竹田精治(阪大産研), 唯美津木(分子研), 平本昌宏(分子研)  
「セッション(3) 界面の固体計測」
- 11:20-11:30 閉会の辞

#### 実験と理論による高次分子システムの機能発現の分子

2011年11月1日(火)～2日(水) 岡崎コンファレンスセンター 小会議室

11月1日(火)

- 12:50-13:00 Opening remarks 関谷 博(九大院理)
- (座長) 藤井正明(東工大資源研)
- 13:00-13:30 田原太平(理研)  
IL-1「新しい非線形分光で明らかになる界面の水」
- 13:30-14:00 森田明弘(東北大院理)  
IL-2「界面分光の理論と実験 協力体制が拓く界面化学」
- 14:00-14:30 大西 洋(神戸大院理)  
IL-3「プローブ顕微鏡で界面液体構造を観る」
- 14:30-15:00 斉藤真司(分子研)  
IL-4「凝縮系ダイナミクス 超高速ダイナミクスから熱力学的性質の起源まで」
- 15:00-15:10 集合写真
- (座長) 田原太平(理研)
- 15:25-15:55 関谷 博(九大院理)  
IL-5「水素結合ネットワークのダイナミクス」
- 15:55-16:25 藤井朱鳥(東北大院理)  
IL-6「大サイズクラスターの分光研究：現状と展望」
- 16:25-16:55 田中秀樹(岡山大院自然)  
IL-7「極端条件下の水の構造とダイナミクス」
- (座長) 斉藤真司(分子研)
- 17:10-17:40 中井浩巳(早大先進理工)  
IL-8「電子状態理論と高次系分子科学」
- 17:40-18:10 内山真伸(東大院薬/理研基幹研)  
IL-9「実験と理論による反応機構解析と機能発現解析」
- 18:10-18:40 佐藤啓文(京大院工)  
IL-10「量子化学と統計力学に立脚した高次系の分子理論」
- 19:00-20:30 交流会

11月2日(水)

- 9:00- 9:30 藤井正明(東工大資源研)  
IL-11「生体分子の気相分光法の開発と分子認識機構へのアプローチ」
- 9:30-10:00 松下道雄(東工大物理)  
IL-12「低温一分子分光によるタンパク質分子へのアプローチ」
- 10:00-10:30 北尾彰朗(東大分生研/JST CREST)  
IL-13「生体超分子の構造変化を制御する分子メカニズム」

(座長) 北尾彰朗 (東大分生研)

- 10:45-11:15 水谷泰久 (阪大院理)  
IL-14 「タンパク質内のエネルギーフローを時空間分解して観測する」
- 11:15-11:45 秋山修志 (名大院理)  
IL-15 「Kai タンパク質時計に秘められた秩序ある遅いダイナミクス」
- 11:45-12:15 林 重彦 (京大院理)  
IL-16 「ハイブリッド分子シミュレーションで探る酵素反応の分子機構」
- 12:15-12:25 Closing remarks 藤井正明 (東工大資源研)

### イノベーションを目指す若手錯体化学者シンポジウム

2012年3月13日(火) 分子科学研究所 研究棟 201号室

- 13:00-13:10 趣旨説明
- 13:10-13:40 二瓶雅之 (筑波大院数物)  
「金属多核錯体の電子状態制御に基づく多重安定性・多重応答性の発現」
- 13:40-14:10 久米晶子 (東大院理)  
「分子応答性を組み立てる——配位子回転と電子移動相関」
- 14:10-14:40 松田亮太郎 (ERATO 北川統合細孔)  
「選択的分子認識・吸着能を有する多孔性金属錯体」
- 14:40-15:10 張 浩徹 (北大院理)  
「ノニノセント型配位子を含む錯体集合体の外場応答性」
- 15:30-16:00 有川康弘 (長崎大院生産科学)  
「二核ルテニウム錯体上での NO 分子の動的挙動」
- 16:00-16:30 上野隆史 (京大院物質)  
「蛋白質複合体の設計と金属錯体高次機能の発現」
- 16:30-17:00 村橋哲郎 (阪大院工)  
「サンドイッチ化合物の新展開」
- 17:00-17:10 総括

### 次世代分子科学に向けた複合研究討論会

2012年3月15日(木) ~ 16日(金) 分子科学研究所 研究棟 201号室

3月15日(木)

- 12:45-13:00 松本剛昭 (兵庫県大院物質)  
開催挨拶, 及び研究会趣旨説明
- 13:00-13:30 石内俊一 (東工大資源研)  
生体関連分子の気相分光は何をどこまでカタレルか?
- 13:30-14:00 井上圭一 (名工大院工)  
ロドプシンの謎に分子科学は迫れるか?
- 14:00-14:30 保科宏道 (理研)  
テラヘルツ光技術の進歩と分子科学への応用可能性
- 14:50-15:20 板倉隆二 (JAEA)  
超高速・高強度レーザーによる電子ダイナミクス
- 15:20-15:50 北幸海 (横浜市大院生命ナノ)  
量子モンテカルロ法による原子・分子への陽電子吸着に関する理論的解析 ~ 現状と今後の展望 ~
- 15:50-16:20 小城吉寛 (理研)  
交差分子線イメージングによる気相二分子反応の動力学的研究
- 16:20-16:50 赤井伸行 (農工大 BASE)  
低温希ガスマトリックス単離分光の現状と将来展望
- 17:10-17:40 十代 健 (日大文理)  
自己組織化の分子科学: クラスタ研究は結晶成長を解明できるのか?
- 17:40-18:10 松田欣之 (東北大院理)  
真空紫外光イオン化の気相レーザー分光への応用とその展開

3月16日(金)

- 9:00- 9:30 古谷祐詞 (分子研)  
赤外分光法の膜タンパク質への適用 ~ 過去・現在・未来 ~
- 9:30-10:00 山本典史 (名大院情報)  
計算科学は溶液内の化学反応を捉えることができるか

10:00-10:30	三井正明(静岡大院理) 不均一複雑系への分子科学的アプローチにおける単一分子分光の可能性
10:45-11:15	川島雪生(九大院理) 分子シミュレーションを用いた分子クラスターの安定構造探索
11:15-11:45	迫田憲治(九大院理) ゆらく反応場の理解を目指して：我々は何をどのように測ればよいのか
11:45-12:15	全体討論
12:15-12:25	総括，閉会

(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	広島大学大学院理学研究科 赤瀬 大

(5) UVSOR 施設利用

(前期)

シリル化 MoO <sub>3</sub> /H-MFI 触媒のメタン脱水素芳香族化高活性因子の解明	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
リン酸カルシウム中に含まれる微量元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
改良型 CuAl タルサイト粘土の Al 局所構造解明	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
廃棄物の有効利用を目指した人工ゼオライトの局所構造の解明	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
XAFS 法を用いたリンドープ酸化チタン中のリンの電子状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
BL3B における真空紫外発光分光系の整備と性能評価	山形大学理学部	北浦 守
BL3B の整備 (基本特性)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
BL3B の整備 (高分解能分光)	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
高分解能多電子同時計測による分子のオージェ過程の研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
希土類元素添加希薄磁性体における磁性元素の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
BL4B ビームライン整備	分子科学研究所	岩山 洋士
プラグインハイブリッド自動車用リチウムイオン電池における正極活物質表面の劣化挙動解析	(独)産業技術総合研究所	鹿野 昌弘
機能性薄膜の構造解析による機能性発現メカニズムの解明	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所	神田 一浩
金属上の磁気不純物系における表面近藤共鳴ピークの温度依存性	弘前大学大学院理工学研究科	任 皓駿
シリコン表面上の Bi/Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> 超薄膜の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
複雑構造 Mg-Al 単結晶および非化学量論組成 Fe <sub>2-x</sub> V <sub>1+x</sub> Al 単結晶の角度分解光電子分光	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
歪み超格子半導体ミニバンド構造における周期「乱れ」の影響	名古屋大学大学院工学研究科	宇治原 徹
BL5U の整備	分子科学研究所	木村 真一
強相関電子系の 3 次元角度分解光電子分光	分子科学研究所	木村 真一
電子ドープ EuO 単結晶超薄膜の高分解能角度分解光電子分光	名古屋工業大学	宮崎 秀俊
擬 2 次元 CDW 系化合物における CDW 長周期構造の面間変化の直接観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
水星探査衛星に用いる極端紫外光検出器の開発	東京大学大学院理学系研究科	吉川 一朗
アモルファス半導体における光劣化現象の全光電子収量による評価	岐阜大学工学部	林 浩司
超イオン導電体におけるコヒーレントイオン伝導の研究	東北学院大学工学部	淡野 照義
高輝度放射光を用いた低エネルギー励起による固体電子状態の研究	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
$\alpha$ 面 AlN の遠赤外・中赤外反射スペクトル測定	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
鉛フリー圧電体の遠赤外線スペクトル	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
高誘電体 CaCu <sub>3</sub> Ti <sub>4</sub> O <sub>12</sub> における高分解能の角度分解光電子分光	弘前大学大学院理工学研究科	任 皓駿
FeSb <sub>2</sub> で観測される巨大ゼーベック係数の発現機構の解明	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
ARPES studies on 3 dimensional Dirac Fermions in Bi <sub>1-x</sub> Sb <sub>x</sub>	分子科学研究所	木村 真一
Polarization dependence measurements of detwined Fe <sub>1-y</sub> Te single crystals	分子科学研究所	木村 真一
強相関電子系の高分解能角度分解光電子分光	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	分子科学研究所	松波 雅治
Yb 化合物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
鉄系高温超伝導体における高分解能 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
真空紫外光励起下における衝突励起プロセスの発光イオン種依存性	山形大学理学部	北浦 守
新規オージェ・フリー発光物質の真空紫外分光	山形大学理学部	大西 彰正

高速シンチレータ材料におけるエネルギー移動と内殻励起の寄与の定量的解析	東北大学大学院工学研究科	越水 正典
希土類イオンで付活したアパタイトおよびシリカにおける量子カッピング現象	新潟大学工学部	太田 雅壽
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
ダイヤモンドに発生する不純物バンドの紫外光観測	東海大学工学部	犬島 喬
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
太陽ライマン $\alpha$ 光偏光観測ロケット実験 (CLASP) の Engineering Model 評価実験	宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所	成影 典之
BL7B 及び VUV エリプソメトリーの整備	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
ダイヤモンド中不純物の紫外発光	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
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
不純物ドーブによって実現される SrGa <sub>2</sub> S <sub>4</sub> 薄膜の極性反転現象の検証	山形大学理学部	北浦 守
光触媒における酸化還元機構の解明 (4)	新潟大学工学部	太田 雅壽
有機薄膜太陽電池の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
金属単結晶上の有機半導体薄膜における分子基板相互作用の解明	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
光照射下における有機薄膜の電子構造変化の観測	島根大学総合理工学部	田中 仙君
分子性有機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
角度分解紫外光電子分光法による SAM 膜上に作成した有機薄膜の分子配向評価	千葉大学融合科学研究科	奥平 幸司
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
XANES によるハイドロキシアパタイト中の微量元素の局所環境解析	京都大学大学院工学研究科	大場 史康
アト秒ビームスプリッターの研究	大阪市立大学大学院工学研究科	熊谷 寛
高感度原子核乾板の開発	名古屋大学素粒子宇宙起源研究機構現象解析研究センター	長縄 直崇
リン酸カルシウム中に含まれる Na の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
NEXAFS 測定による天然石英の熱ルミネッセンス機構の研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
(後期)		
シリル化 MoO <sub>3</sub> /H-MFI 触媒のメタン脱水素芳香族化高活性因子の解明	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
リン酸カルシウム中に含まれる微量元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
XAFS 法を用いたリンドーブ酸化チタン中のリンの電子状態分析	福岡大学理学部	栗崎 敏
高分解能多電子同時計測による分子のオージェ過程の研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
希土類元素添加希薄磁性体における磁性元素の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
BL4B ビームライン整備	分子科学研究所	岩山 洋士
プラグインハイブリッド自動車用リチウムイオン電池における正極活物質表面の劣化挙動解析	(独)産業技術総合研究所	鹿野 昌弘
機能性薄膜の構造解析による機能性発現メカニズムの解明	兵庫県立大学高度産業科学技術研究所	神田 一浩
金属上の磁気不純物系における表面近藤共鳴ピークの温度依存性	弘前大学大学院理工学研究科	任 皓駿
シリコン表面上の Bi/Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> 超薄膜の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
複雑構造 Mg-Al 単結晶および非化学量論組成 Fe <sub>2-x</sub> V <sub>1+x</sub> Al 単結晶の角度分解光電子分光	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
歪み超格子半導体ミニバンド構造における周期「乱れ」の影響	名古屋大学大学院工学研究科	宇治原 徹
BL5U の整備	分子科学研究所	木村 真一
強相関電子系の 3 次元角度分解光電子分光	分子科学研究所	木村 真一
電子ドーブ EuO 単結晶超薄膜の高分解能角度分解光電子分光	名古屋工業大学	宮崎 秀俊
擬 2 次元 CDW 系化合物における CDW 長周期構造の面間変化の直接観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
水星探査衛星に用いる極端紫外光検出器の開発	東京大学大学院理学系研究科	吉川 一朗
アモルファス半導体における光劣化現象の全光電子収量による評価	岐阜大学工学部	林 浩司
超イオン導電体におけるコヒーレントイオン伝導の研究	東北学院大学工学部	淡野 照義
高輝度放射光を用いた低エネルギー励起による固体電子状態の研究	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
$\alpha$ 面 AlN の遠赤外・中赤外反射スペクトル測定	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
鉛フリー圧電体の遠赤外線スペクトル	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
高誘電体 CaCu <sub>3</sub> Ti <sub>4</sub> O <sub>12</sub> における高分解能の角度分解光電子分光	弘前大学大学院理工学研究科	任 皓駿
FeSb <sub>2</sub> で観測される巨大ゼーベック係数の発現機構の解明	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
ARPES studies on 3 dimensional Dirac Fermions in Bi <sub>1-x</sub> Sb <sub>x</sub>	分子科学研究所	木村 真一
Polarization dependence measurements of detwined Fe <sub>1-y</sub> Te single crystals	分子科学研究所	木村 真一
強相関電子系の高分解能角度分解光電子分光	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	分子科学研究所	松波 雅治
Yb 化合物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
鉄系高温超伝導体における高分解能 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
高速シンチレータ材料におけるエネルギー移動と内殻励起の寄与の定量的解析	東北大学大学院工学研究科	越水 正典
希土類イオンで付活したアパタイトおよびシリカにおける量子カッピング現象	新潟大学工学部	太田 雅壽
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
ダイヤモンドに発生する不純物バンドの紫外光観測	東海大学工学部	犬島 喬
太陽ライマン $\alpha$ 光偏光観測ロケット実験 (CLASP) の Engineering Model 評価実験	宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所	成影 典之
BL7B 及び VUV エリプソメトリーの整備	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
ダイヤモンド中不純物の紫外発光	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
光触媒における酸化還元機構の解明 (4)	新潟大学工学部	太田 雅壽
有機薄膜太陽電池の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
金属単結晶上の有機半導体薄膜における分子基板相互作用の解明	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
光照射下における有機薄膜の電子構造変化の観測	島根大学総合理工学部	田中 仙君
分子性有機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
角度分解紫外光電子分光法による SAM 膜上に作成した有機薄膜の分子配向評価	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
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
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
ZnO 系透明導電性薄膜の真空紫外・紫外・可視領域での光学特性	岐阜大学工学部	柏倉 伸男
高濃度ドーピングした CsCl:I の緩和励起子発光	大阪電気通信大学工学研究科	大野 宣人
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
固体酸化燃料電池正極及び色素増感太陽電池負極の X 線吸収微細構造測定	分子科学研究所	見附孝一郎
炭素化ポーラスシリコンからの X 線励起発光を利用した XAFS 測定の試み	名古屋大学エコトピア科学研究所	吉田 朋子
Mn 置換 LiMnFePO <sub>4</sub> 正極材料の P の局所構造解明	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
Fe, Mg, Mn 等機能元素添加 HAp の局所構造解析	東北大学金属材料研究所附属研究施設関西センター	佐藤 充孝
蛍光法による Mg 添加 HAp の Mg-K 殻 XAFS 測定	東北大学金属材料研究所附属研究施設関西センター	佐藤 充孝
真空紫外発光分光法による軽金属酸化物結晶の励起子安定配置の解明	山形大学理学部	北浦 守
希土類イオンで付活したアパタイトおよびシリカにおける量子カッピング現象	新潟大学工学部	太田 雅壽
天然石英の紫外光励起によるルミネッセンスの研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
K <sub>2</sub> NiF <sub>4</sub> 型コバルト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
BL3B の整備 (評価)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
貴金属陰イオンを含んだアルカリヨウ化物のシンチレーター特性の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
BL3B の整備 (高分解能分光)	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
固体酸化燃料電池正極及び色素増感太陽電池負極の X 線吸収微細構造測定	分子科学研究所	見附孝一郎
20 ~ 250eV 領域におけるアミノ酸固相の吸収スペクトル測定	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
グラファイトの低エネルギー光電子分光 II	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
希土類添加無機蛍光体における発光機構の解明	学習院大学理学部	稲熊 宣之
反応性スパッタリング法により作製した Nb-Bi 酸化物薄膜の VUV スペクトルの測定	明治大学理工学部	松本 皓永
真空紫外発光材料探索のための希土類添加物質の体系的な光学特性評価	大阪大学レーザーエネルギー学研究中心	清水 俊彦
2 ~ 30eV 領域におけるアミノ酸固相の吸収スペクトル測定	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
ダイヤモンドの真空紫外反射スペクトル	神戸大学大学院理学研究科	岡村 英一
紫外光電子分光法によるユーロピウムチオガレート多重励起閾値エネルギーの決定	山形大学理学部	北浦 守
バッキーボウルの光電子分光	分子科学研究所	見附孝一郎
高感度原子核乾板の開発	名古屋大学素粒子宇宙起源研究機構現象解析研究センター	長縄 直崇
NEXAFS 測定による天然石英の熱ルミネッセンス機構の研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
コバルトサレン錯体一電子酸化生成物の電子構造	分子科学研究所	藤井 浩
極紫外域 SiC 薄膜ミラーの光学特性評価	名古屋大学大学院理学研究科	菱川 明栄
FEL 発光分光測定のための平面結像型斜入射分光器の波長較正	(独)理化学研究所放射光科学総合研究センター	永園 充

(6) 施設利用

機器センター

(前期)

キラルシッフ塩基 3d-4f 金属錯体の磁性測定	東京理科大学理学部	秋津 貴城
TEMPO ラジカルを側鎖に導入したポリグルタメートの磁気特性	東京工芸大学工学部	比江島俊浩
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 (2)	新潟大学工学部	太田 雅壽
AAA タンパク質による ATP 加水分解の分子機構の解明	熊本大学発生活医学研究所	江崎 雅俊
ナノ粒子化に伴う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
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
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
CoPt 微粒子複合材, 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
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
ナノマテリアルの構造と物性評価	法政大学生命科学部	緒方 啓典
有機スピラダー構造における磁気物性の解明	広島大学大学院理学研究科	井上 克也
希土類磁性薄膜における磁気特性および磁気共鳴に関する研究	名古屋工業大学セラミック基盤工学研究センター	安達 信泰
新規相分離構造を有するブロック共重合体のガラス転移温度評価	名古屋工業大学大学院工学研究科	山本 勝宏
窒化ボロン化合物の 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
フッ化物レーザー材料開発に関する研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 晋吾
ベンゼン重水素置換体の分子構造精密決定	九州大学稲盛フロンティア研究センター	石元 孝佳
琵琶湖難分解性有機物の NMR 法によるキャラクタリゼーション	京都大学大学院工学研究科	清水 芳久
生体の無染色イメージングを目的とした光シート型ラマン顕微鏡の開発と性能評価	自然科学研究機構基礎生物学研究所	大嶋 佑介
コンパクト多環芳香族炭化水素 (PAH) の励起分子ダイナミクス	京都大学大学院理学研究科	小若 泰之
MgB <sub>2</sub> 超伝導体の超伝導特性におけるホウ素同位体効果	自然科学研究機構核融合科学研究所	菱沼 良光
新規な機能性分子の構造解明	東京工業大学大学院理工学研究科	芦沢 実
拡張型電子供与体を用いた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
合成糖鎖リガンドのレクチンおよび加水分解酵素に対する結合親和性の解析	静岡大学創造科学技術大学院	尾形 慎
NMR を利用した複合糖質およびマルチドメインタンパク質の動的構造解析	名古屋市立大学大学院薬学研究科	矢木 宏和
遷移金属酸化物の軌道状態解明のための単結晶 X 線構造解析	名古屋大学大学院理学研究科	清水 康弘
圧力誘起超伝導 <i>beta</i> -( <i>meso</i> -BEDT-TTF) <sub>2</sub> PF <sub>6</sub> の低温電荷秩序構造	東京大学物性研究所	森 初果
顕微ラマン分光法による (ET) <sub>2</sub> N(SO <sub>2</sub> F) <sub>2</sub> の相転移の解析	京都大学低温物質科学研究センター	中野 義明
複雑な有機化合物の X 線結晶構造解析	豊橋技術科学大学	藤澤 郁英
可逆的な構造変化を示す新規有機酸化還元系の設計と合成	信州大学理学部	太田 哲
90K で金属絶縁体転移を示す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	坏 広樹
有機ラジカル単結晶の低温結晶構造解析	大阪府立大学大学院理学系研究科	細越 裕子
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
μ <sub>3</sub> -オキソ三核鉄錯体に基づく配位高分子の結晶構造解析	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	満身 稔
金属を導入した DNA の電子状態の解明	首都大学東京大学院理工学研究科	溝口 憲治
Belousov-Zhabotinsky 反応の磁場効果	大阪大谷大学薬学部	谷本 能文
共役系ラセン分子の溶液中における高次構造の温度依存性	室蘭工業大学大学院工学研究科	馬渡 康輝
医薬品原料由来有機ラジカル種の ESR 解析	大阪薬科大学薬学部	山沖 留美
新規機能性分子性固体の開発	名城大学総合研究所	吉田 幸大
ポルフィリン類縁鉄 (III) 錯体における電子構造の外部刺激応答性に関する研究	東邦大学医学部	大胡 恵樹
コロシアジン鉄 (III) 錯体の磁氣的挙動	島根大学総合理工学部	池上 崇久
メソ多孔性炭素材料の新規合成と評価	名古屋工業大学大学院工学研究科	西 信之
フラビン発色団を有する化合物における光誘起ラジカルペアの 3 重項状態の寿命評価	富山大学薬学部	岡 芳美

(後期)

キラルシッフ塩基希土類遷移金属複核錯体の磁性測定	東京理科大学理学部	秋津 貴城
MgB <sub>2</sub> 超伝導体の超伝導特性におけるホウ素同位体効果	自然科学研究機構核融合科学研究所	菱沼 良光
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 (3)	新潟大学工学部	太田 雅壽
新規分子磁性体の結晶構造と磁氣的性質	首都大学東京大学院理工学研究科	藤田 涉
琵琶湖難分解性有機物の NMR 法によるキャラクタリゼーション	京都大学大学院工学研究科	清水 芳久
Mn-Si-(Cr,V) 系準結晶関連物質の磁気特性	北海道大学大学院工学研究院	柏本 史郎

メソ多孔性炭素材料の新規合成と評価	名古屋工業大学大学院工学研究科	西 信之
CMC-NiFe 複合材, Co/Pd ナノ細線, Fe/Pt ナノ粒子の磁気的性質の解明	岐阜大学工学部	嶋 睦宏
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
新規希土類フリー発光材料の創製および機構解明	東北大学大学院工学研究科	岩崎謙一郎
新規ナノマテリアルの構造および物性評価	法政大学生命科学部	緒方 啓典
希土類磁性薄膜における磁気特性および磁気共鳴に関する研究	名古屋工業大学セラミック基盤工学研究センター	安達 信泰
外部刺激応答性を持つポルフィリン類緑体錯体の開発	東邦大学医学部	大胡 恵樹
機能性有機半導体分子の構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	芦沢 実
相転移を示す金属錯体の極低温結晶構造解析	九州大学先端物質化学研究所	姜 舜徹
ベンゼン重水素置換体の振動エネルギーと分子構造の精密決定	九州大学稲盛フロンティア研究センター	石元 孝佳
TEMPO ラジカルを側鎖に導入したポリグルタミンのらせん磁性に関する研究	東京工芸大学工学部	比江島俊浩
金属を導入した DNA の電子状態の解明	首都大学東京大学院理工学研究科	溝口 憲治
高真空アルコールガスソース法による単層カーボンナノチューブの低圧力成長に関する研究	名城大学理工学部	丸山 隆浩
アルカリ土類金属添加窒化硼化合物の構造と磁気特性	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	小林 本忠
フラビン発色団を有する化合物における光誘起ラジカルペアの寿命評価	富山大学薬学部	岡 芳美
PH ドメインの脂質膜界面における構造転移および機能の解析	兵庫県立大学大学院生命理学研究科	辻 暁
有機ラジカル磁性体の X 線結晶構造解析	大阪市立大学大学院理学研究科	塩見 大輔
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
圧力誘起超伝導 $\beta$ - <i>meso</i> -(BEDT-TTF) <sub>2</sub> X, X = PF <sub>6</sub> とその周辺物質 (X = AsF <sub>6</sub> , SbF <sub>6</sub> , NbF <sub>6</sub> ) の低温電荷秩序構造	東京大学物性研究所	磯野 貴之
フェナンスレン分子の構造と励起分子ダイナミクス	京都大学大学院理学研究科	小若 泰之
新規ミクロ相分離構造を有するブロック共重合体のガラス転移温度評価	名古屋工業大学大学院工学研究科	山本 勝宏
X 線結晶構造解析による扇型分子の分子配列の解明	静岡大学工学部	植田 一正
気相クラスターの共鳴イオン化解離過程のピコ秒時間分解測定システムの整備と観測	東京工芸大学工学部	實方 真臣
純有機磁性金属 $\kappa$ - $\beta$ '-(BEDT-TTF) <sub>2</sub> (PO-CONHC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> SO <sub>3</sub> ) の低温 ESR 測定	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	坪 広樹
拡張型電子供与体を用いた導電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
NMR を利用した複合糖質およびマルチドメインタンパク質の動的構造解析	名古屋市立大学大学院薬学研究科	矢木 宏和
非天然構造を有するヘムタンパク質の熱安定性評価	大阪大学大学院工学研究科	大洞 光司
新奇な磁気緩和現象を示す単核金属錯体の結晶構造解析	神戸大学大学院理学研究科	高橋 一志
シクロデキストリン類と低分子薬物の包接複合体結晶の単結晶 X 線構造解析	愛知学院大学薬学部	小川 法子
一次元ロジウム (I)- ジオキソレン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
一次元ロジウム - ジオキソレン錯体の磁気特性の解析	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	満身 稔
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
ポルフィリンダブルデッカー型錯体の単分子磁石特製評価	大阪大学大学院理学研究科	田中 大輔
共役系ラセン分子の溶液中における高次構造の温度及び溶媒依存性	室蘭工業大学大学院工学研究科	馬渡 康輝
反強磁性状態に近接した分子性超伝導体における電荷不均一性の探索	大阪大学大学院理学研究科	山本 貴

### 装置開発室

(前期)

マイクロ波イメージング

高集光効率回転楕円体面鏡の製作

光神経電子集積回路開発

視覚と触覚の感覚統合による素材弁別の神経メカニズムについての研究

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改造

高磁界超伝導線材の臨界電流特性における曲げ歪印加効果測定プローブの開発

グラフェン分子読み取りデバイス開発

電子ビーム溶接における異種金属の接合 ものづくり教育のための試作装置の製作・開発

(後期)

マイクロ波イメージング

高磁界超伝導線材の臨界電流特性における曲げ歪印加効果測定プローブの開発

自然科学研究機構核融合科学研究所

京都大学大学院理学研究科

名古屋大学革新ナノバイオデバイス研究センター

自然科学研究機構生理学研究所

東京大学物性研究所

自然科学研究機構核融合科学研究所

横浜国立大学大学院工学研究院

名城大学理工学部

自然科学研究機構核融合科学研究所

自然科学研究機構核融合科学研究所

長山 好夫

馬場 正昭

宇理須恒雄

小松 英彦

吉信 淳

菱沼 良光

荻野 俊郎

増田 忠志

長山 好夫

菱沼 良光

多チャンネル光神経電子集積回路素子の PMMA 基板開発 ——微細貫通孔形成の精度向上——	名古屋大学革新ナノバイオデバイス研究センター	宇理須恒雄
多チャンネル光神経電子集積回路素子の電子回路開発 ——4ch 素子用回路開発——	名古屋大学革新ナノバイオデバイス研究センター	宇理須恒雄
超高分解能・超長時間保持型気相移動度測定システムのための、多チャンネル高電圧高周波・低周波ハイブリッドマイクロコンピューター制御電源の開発	東邦大学理学部	菅井 俊樹
時間分解電子運動量分光装置のための超音速分子線源および画像観測イオン検出器の開発	東北大学多元物質科学研究所	高橋 正彦
ものづくり教育のための試作装置の製作・開発	名城大学理工学部	榎本 和城

### 計算機利用

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
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
5d 金属原子を含む多核錯体の電子状態	岐阜大学工学部	海老原昌弘
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
DNA 光補修酵素の電子移動反応	名古屋大学大学院理学研究科	倭 剛久
K <sup>+</sup> チャンネルにおけるイオンの透過パターンの解析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
MD/3D-RISM シミュレーションを用いたミセルの熱力学的安定性に関する研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮田 竜彦
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	佐賀大学大学院工学系研究科	海野 雅司
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
SVM を用いたドメイン境界領域の予測手法の開発	東京農工大学工学府	辻良 太郎
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
カーボンナノリングの構造と物性研究	名古屋大学物質科学国際研究センター	瀬川 泰知
かさ高い芳香族アジド基が有する高いクリック反応性に関する研究	東京医科歯科大学生体材料工学研究所	吉田 優
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
キラル超分子集合体の理論的検討	東京大学大学院工学系研究科	伊藤 喜光
ゲノム中の内在性ウイルス由来の分子の構造と相互作用のシミュレーションによる研究	大分大学医学部	谷川 雅人
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
サルモネラ由来 AAA <sup>+</sup> 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
シリレン錯体の構造と物性研究	群馬大学大学院工学研究科	津留崎陽大
スーパーシリル基を利用した高選択的アルドール反応に関する理論的研究	愛知教育大学教育学部理科	赤倉松次郎
ゼオライト細孔内における不安定分子の反応性制御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
セルロース結晶の溶媒と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
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
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
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	筑波大学大学院数理物質科学研究科	神谷 克政
デザイナー流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
ドーブ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
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
ナノ・バイオ関連物質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
ナノ・バイオ物質の電子状態・構造・機能の相関	東京大学工学系研究科	押山 淳
ナノカーボンの光誘起転位・解離反応制御のシミュレーション	東北大学大学院理学研究科	河野 裕彦
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	筑波大学数理物質科学研究科	岡田 晋
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
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
ナノ物質の構造と機能に関する第一原理計算	金沢大学理工学研究域	斎藤 峯雄
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
フラストレーションのある伝導電子系における磁性と伝導特性の数値的研究	東京大学工学系研究科	石塚 大晃
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
ベンゼン誘導体における $\pi$ - $\pi$ 相互作用と多環芳香族炭化水素の振電相互作用の解明	電気通信大学大学院情報理工学研究科	山北 佳宏
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

ホストゲストケミストリーを用いた高次フラレン、内包フラレンの新しい分離法の開発：シクロパラフェニレンによるフラレンの選択的補足	名古屋大学理学研究科	北浦 良
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
ホタルルシフェラーゼの構造と発光波長の予想	兵庫県立大学大学院工学研究科	加藤 太郎
ランタノイド(III)錯体の溶液中における構造及び安定性に関する量子化学計算	東京工業大学理工学研究科	奥村 森
リガンドのタンパク質への結合過程のマルチスケールシミュレーション	東京大学大学院農学生命科学研究科	寺田 透
レーザー誘起ブレイクダウンプラズマ過程の理論解析	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
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
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
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
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
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
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
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
化学反応経路の自動探索	東北大学名誉教授	大野 公一
過冷却液体のガラス転移の数値的研究	筑波大学大学院数理物質科学研究科	宮崎 州正
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
開いた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
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
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
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
核内受容体の変異による構造変化の理論的解析	東海大学情報教育センター	渡邊 千鶴
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
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
含ホウ素 PBP ピンサー-金属錯体の反応性の解明とアルカンの末端選択的酸化へ向けた均一系錯体触媒デザイン	中央大学理工学部	山下 誠
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
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
擬1次元 1/4 充填有機分子性固体 (EDO-TTF) <sub>2</sub> PF <sub>6</sub> の光誘起相転移の第一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
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
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
凝縮系における緩和および反応ダイナミクスの理論研究	分子科学研究所	斉藤 真司
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
局所的な格子歪みと結合した幾何学的フラストレート反強磁性体におけるスピングラス転移	(独)産業技術総合研究所	品岡 寛
金属カチオン-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
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
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
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
金属錯体触媒の電子構造制御と機構解明	分子科学研究所	正岡 重行
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
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
計算科学の超精密化と巨大化	量子化学研究協会	中辻 博
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
固体表面と生体分子の相互作用に関する研究	横浜国立大学工学研究院	荻野 俊郎
光トラップを用いた過冷却水滴のラマン分光	明治大学理工学部	立川 真樹
光合成酸素発生中心 CaMn <sub>4</sub> O <sub>5</sub> クラスターの構造、電子状態および反応性に関する理論的研究	大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター	山口 兆
光触媒材料の理論設計	(独)物質・材料研究機構	梅澤 直人
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
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
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

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
三核金錯体を基盤とする新規発光材料の開発	立命館大学生命科学部	堤 治
軸不斉ユニットをもつキロオプティカルスピンの開発	北里大学理学部	長谷川真士
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
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
触媒表面反応の電子構造計算	岩手大学工学部	西館 数芽
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
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
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
水溶液の自己相関関数の分子動力学計算と誘電緩和	九州大学大学院理学研究院	久保田陽二
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
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
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
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
生体分子と高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
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
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
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
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
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
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
相変態のための dftb 計算	分子科学研究所	周 欣
多環式芳香族炭化水素の光物性評価	名古屋大学大学院理学研究科	川澄 克光
多機能性修飾 $\beta$ -cyclodextrin の包接複合体による除菌のための薬剤開発	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
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
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
第一原理計算による電界を印加された Pd 薄膜における強磁性の発現に関する研究	慶應義塾大学大学院理工学研究科	相原 章吾
第一原理反応ダイナミクスの多角的展開	北海道大学大学院理学研究院	武次 徹也
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
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
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
超臨界水中の並進拡散および溶媒和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
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
鉄砒素系高温超伝導体における超伝導発現機構および輸送現象の理論研究	名古屋大学理学部	紺谷 浩
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
二次元高分子の構造最適化	分子科学研究所	江 東林
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
燃料電池材料の分子シミュレーション	(独)産業技術総合研究所	崔 隆基
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
反応高活性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
非晶性有機半導体材料の幾何・電子構造および振動モードの計算	山形大学大学院理工学研究科	横山 大輔
非平面有機半導体の分子設計	分子科学研究所	鈴木 敏泰
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
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
表面・薄膜・クラスターの電子状態と反応過程	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	島 信幸
不純物による触媒被毒が固体高分子形燃料電池 (PEFC) のセル電圧に及ぼす影響の分子論的予測	大同大学燃料電池研究センター	鈴木 昭也
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
複合電子系の構造, 電子状態, 反応過程, 溶媒和構造に関する理論的研究	京都大学福井謙一記念研究センター	榊 茂好
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

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
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
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
分子間相互作用理論とその分子クラスター研究への応用	(財)豊田理化学研究所	岩田 未廣
分子軌道計算による有機反応設計および分子構造設計のための電子構造予測	東京大学大学院薬学系研究科	大和田 智彦
分子軌道計算を基盤とする高機能分子触媒の設計・開発・反応機構解析	立教大学理学部	山中 正浩
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
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
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
分子性液体に関する分子シミュレーション解析	岐阜大学工学部	寺尾 貴道
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
分子動力学シミュレーションを用いた膜タンパク質の自由エネルギー解析	金沢大学理工研究域	齋藤 大明
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
密度汎関数法による金属クラスターの幾何構造、電子構造および反応経路探索	豊田工業大学クラスター研究室	市橋 正彦
密度汎関数法計算による金属イオン・有機抽出剤錯体の構造研究	(独)日本原子力研究開発機構	佐伯 盛久
有機ケイ素化合物の構造と電子状態	群馬大学大学院工学研究科	久新 荘一郎
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
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置換基効果	鳥取大学大学院工学研究科	早瀬 修一
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
有機超伝導体における一軸性圧縮効果	名古屋大学工学研究科	大成 誠一郎
溶媒が有機反応に及ぼす影響に関する理論研究	高知大学大学院総合人間自然科学研究科	金野 大助
理論計算からみた孤立分子・クラスターの高エネルギー光化学	広島大学放射光科学研究センター	田林 清彦
両親媒性ピンサー型パラジウム錯体から成るベシクルの分子動力学計算	総合研究大学院大学	武藤 翼
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
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
量子化学計算による気相分子と溶液・固体中の安定構造に関する研究	静岡大学理学部	関根 理香
量子化学計算に基づく錯体触媒の構造および反応性解明とその改良	東京大学大学院総合文化研究科	増井 洋一
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
量子多成分系分子理論の開発およびその応用	横浜市立大学生命ナノシステム科学研究科	立川 仁典
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
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
(物質計算科学イニシアティブ利用枠)		
高性能リチウムイオン電池の開発に向けた基礎研究	(独)産業技術総合研究所	大谷 実
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	名古屋大学大学院工学研究科	岡崎 進
拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明	名古屋大学大学院理学研究科	岡本 祐幸
凝縮分子科学系の揺らぎとダイナミクス	分子科学研究所	斉藤 真司
ポリモルフから生起する分子集団機能	京都大学化学研究所	松林 伸幸
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	東京大学大学院工学系研究科	山下 晃一
バイオマス利用のための酵素反応解析	分子科学研究所	吉田 紀生
分子における電子の動的過程と多体量子動力学	東京大学大学院総合文化研究科	高塚 和夫

### 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～'04		'05		'06		'07		'08		'09		'10		'11		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	101	807	1	13	1	8	2	29	2	22	1	28	0	0	1	11	人数： 登録人数
協力研究	3,464	4,587	96	232	84	208	91	219	90	200	119	412	122	316	107	292	〃
招へい 協力研究	195	197	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	〃
所長 招へい	3,601	3,601	100	100	162	162	132	132	159	159	148	148	148	148	66	66	人数： 旅費支給者
研究会	287	4,615	11	206	13	310	9	198	4	105	5	110	6	137	3	71	〃
若手研究会等	—	—	—	—	—	—	—	—	1	12	1	10	1	14	1	11	〃
施設利用 I	1,696	3,861	53	106	47	86	59	120	72	177	60	179	66	166	90	249	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)	4,170	13,490	132	510	142	538	145	595	147	656	171	676	170	666	179	668	〃
合計	13,514	31,158	393	1,167	449	1,312	438	1,293	475	1,331	505	1,563	513	1,447	447	1,368	
経費	545,194		—		—		—		—		—		—		—		千円

\*施設利用IIは'00より電子計算機施設利用

('11年度の数值は、2012.1.6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～'04		'05		'06		'07		'08		'09		'10		'11		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	3	3	人数： 旅費支給者
研究会	33	544	1	59	3	37	2	55	2	18	2	44	1	1	9	74	〃
施設利用	2,291	11,294	126	643	113	494	145	678	156	708	147	660	140	659	135	658	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	2,746	13,442	127	702	116	531	161	747	159	727	149	704	141	660	147	735	
経費	230,477		—		—		—		—		—		—		—		千円

('11年度の数值は、2012.1.6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）

（単位：人）

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
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
10	3	7	64	8	71	153
合計	98	69	426	307	1,031	1,931

\* 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）

（単位：人）

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
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
10	16	3	13	18	22	25	1	55	153
合計	270	75	143	160	314	299	46	624	1,931

表3 海外からの研究者(2011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			
MUKHERJEE, Debashis	インド	Indian Association for the Cultivation of Science, Emeritus Professor	'11. 8.28-'11.11.27
GARIKAPATI, Narahari Sastry	インド	Indian Institute of Chemical Technology グループ長	'11.12. 1-'12. 3.31
3. 日本学術振興会招へい外国人研究者等			
MURUGADOSS, Arumugam	インド	自然科学研究機構分子科学研究所	'09.11. 1-'11.10.31
TAN, Qitao	中国	Shanghai Chempartner Co. Ltd., Director	'10. 8. 5-'12. 8. 4
KIM, Hyojoon	韓国	Dong-A University, Assistant Professor	'11. 6.27-'11. 8.25
PANDA, Gautam	インド	Central Drug Research Institute, CSIR 研究員	'11. 9.26-'12. 7.25
4. 国際共同研究			
陳 龍	中国	Beijing Institute of Technology 大学院生	'11. 5. 1-'11. 6.11
SETSIRI, Haesuwannakij	タイ	Mahidol University 研究員	'11. 5.23-'11. 8. 8
KWON, Yong Seung	韓国	成均館大学教授	'11. 6.20-'11. 7. 2
JUNG, Min-cherl	韓国	Pohang University of Science and Technology 准教授	'11. 7.22-'11. 8.13
JEON, Seong Hwan	韓国	Pohang University of Science and Technology 大学院生	'11. 7.22-'11. 7.30
JIANG, Lu	シンガポール	National University of Singapore 大学院生	'11. 8.21-'11.10.10
BORVE, Knut	ノルウェー	University of Bergen 教授	'11. 9.30-'11.10. 8
CHIANG, Hsin-lin	台湾	中央研究院物理研究所兼任助理	'11.10. 3-'11.12. 2
VAILIKHIT, Veeramol	タイ	Kasetsart University 講師	'11.10. 6-'11.11.20
JIANG, Lu	シンガポール	National University of Singapore 大学院生	'11.10.11-'11.11.19
GURITANU, Violeta	ドイツ	University of Geneva 博士研究員	'11.10.24-'11.11.13
PATCHARIN, Kaewmati	タイ	Mahidol University 大学院生	'11.10.24-'12. 1.22
VAILIKHIT, Veeramol	タイ	Kasetsart University 講師	'11.11.21-'12. 1. 7
LIM, Min Hwee	シンガポール	National University of Singapore 大学院生	'11.12.18-'12. 1.31
HAN, Jin Wook	韓国	Hanyang University 准教授	'11.12.26-'11.12.29
ARULMOZHIRAJA, Sundaram	オーストラリア	The Australian National University 研究員	'12. 1. 4-'12. 2.10
JEON, Seong Hwan	韓国	Pohang University of Science and Technology 大学院生	'12. 1.10-'12. 1.21
SEGONDS, Patricia	フランス	Universite Joseph Fourie Institut NEEL 准教授	'12. 1.12-'12. 1.26
KWON, Yong Seung	韓国	成均館大学教授	'12. 1.16-'12. 1.29
MIN, Byeon Hun	韓国	Sungkyunkwan University 研究員	'12. 1.16-'12. 1.29
SONG, Yun Young	韓国	成均館大学教授	'12. 1.21-'12. 1.29
LIM, Min Hwee	シンガポール	National University of Singapore 大学院生	'12. 2. 1-'12. 3.16
ARULMOZHIRAJA, Sundaram	オーストラリア	The Australian National University 研究員	'12. 2.11-'12. 3.31
PIANCASTELLI, Maria Novella	フランス	Universite Pierre et Marie Curie 教授	'12. 2.18-'12. 2.26
DABROWSKI, Maciej	ドイツ	Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik 大学院生	'12. 2.19-'12. 3.12
YILDIZ, Fikret	トルコ	Gebze Institute of Technology 助教授	'12. 2.24-'12. 3.11
CEOLIN, Denis	フランス	Synchrotron SOLEIL 准教授	'12. 2.27-'12. 3. 5
BOULANGER, Benoit	フランス	ジョセフ・フーリエ大学, ニール研究所教授	'12. 2.29-'12. 3.15
ILAS, Simon	フランス	Ecole National Superieure de Chimie de pari 大学院生	'12. 3. 2-'12. 3. 2
ROUSSEL, Eleonore	フランス	Lille University of Science and Technology 大学院生	'12. 3.11-'12. 4. 2
谷川 貴紀	日本	Lille University of Science and Technology ポスドク研究員	'12. 3.11-'12. 4. 2
PROBST, Petra	ドイツ	The Karlsruhe Institute of Technology ポスドク研究員	'12. 3.24-'12. 4. 1
5. 所長招へい協力研究員			
田中 裕也	日本	The University of Hong Kong ポスドク研究員	'11. 4.29-'11. 5. 1
河野 正規	日本	Pohang University of Science and Technology 教授	'11. 6.16-'11. 6.18
SPRIK, Michiel	イギリス	University of Cambridge 教授	'11.11.22-'11.11.23
伊藤 良一	日本	National University of Singapore 学振特別研究員	'11.12.18-'11.12.18
石崎 章仁	日本	The University of California ポスドク研究員(常勤)	'11.12.18-'11.12.18
熊谷 崇	ドイツ	Fritz-Haber-Institute 学振海外特別研究員	'11.12.18-'11.12.18
GRUEBELE, Martin	アメリカ	University of Illinois, Professor	'12. 1.15-'12. 1.19
HRVOJE, Petek	アメリカ	University of Pittsburgh 教授	'12. 3. 3-'12. 3. 6

6. 特別訪問研究員			
OZKENDIR, Osman Murat	トルコ	Mersin University, Assistant Professor	'11. 4. 1-'11.11.30
SARKAR, Shaheen Md.	バングラディシュ	理化学研究所特別研究員	'11. 4. 1-'12. 3.31
BAEK, Heeyoel	韓国	理化学研究所大学院生	'11. 5. 1-'12. 3.31
JONG, Kuk Lim	韓国	Chosun University, Assistant Professor	'11. 7.11-'11. 8.24
7. 特別協力研究員			
PRAJONGTAT, Pongthep	タイ		'11. 4. 1-'12. 1.31
8. 招へい研究員			
WOODS, Robert J.	アイルランド	The University of Georgia 教授	'11.10. 8-'11.10.17
PAULSON, James C	アメリカ	The Scripps Research Institute 教授	'11.10. 9-'11.10.14
PETERS, Thomas	ドイツ	University of Luebeck 教授	'11.10.10-'11.10.15
VON, Itzstein Mark	オーストラリア	Griffith University 教授	'11.10.10-'11.10.15
KHOO, Kay-hooi	台湾	Academia Sinica, Research Fellow	'11.10.11-'11.10.14
KIM, Seung-yeon	韓国	Chungju National University 教授	'12. 1. 8-'12. 1.12
YUMLEMBAM HEMAJIT, Singh	インド	Korea Institute for Advanced Study ポスドク研究員	'12. 1. 8-'12. 1.12
BAE, Euiyoung	韓国	Seoul National University 助教	'12. 1. 8-'12. 1.11
SHIN, Dong Hae	韓国	Ewha Womans University 教授	'12. 1. 8-'12. 1.11
JEONG, Hawoong	韓国	Korea Advanced Institute of Science and Technology, Chair Professor	'12. 1. 8-'12. 1.12
ADEEL, Malik	インド	Korea Institute for Advanced Study ポスドク研究員	'12. 1. 8-'12. 1.12
KIM, Sangrak	韓国	Kyonggi University 教授	'12. 1. 8-'12. 1.12
JOO, Keehyoung	韓国	Korea Institute for Advanced Study 特任助教	'12. 1. 8-'12. 1.12
MOON, Sunjin	韓国	Yonsei University 大学院生	'12. 1. 8-'12. 1.12
RHEE, Sangkee	韓国	Seoul National University 准教授	'12. 1. 8-'12. 1.11
RHEE, Young Min	韓国	POSTECH Pohang University of Science and Technology 助教	'12. 1. 8-'12. 1.12
KIM, Juin	韓国	Korea Advanced Institute of Science and Technology 大学院生	'12. 1. 8-'12. 1.12
KIM, Dongsup	韓国	Korea Advanced Institute of Science and Technology 准教授	'12. 1. 8-'12. 1.12
JEON, Chanil	韓国	Korea Advanced Institute of Science and Technology 大学院生	'12. 1. 8-'12. 1.12
SUH, Jeong-yong	韓国	Seoul National University 助教	'12. 1. 8-'12. 1.12
YOON, Tae-young	韓国	Korea Advanced Institute of Science and Technology 准教授	'12. 1. 8-'12. 1.12
SEOK, Chaok	韓国	Seoul National University 准教授	'12. 1. 8-'12. 1.11
LEE, Jooyoung	韓国	Korea Institute for Advanced Study, Professor	'12. 1. 8-'12. 1.12
LEE, Ki-ho	韓国	Korea Institute for Advanced Study 特任助教	'12. 1. 8-'12. 1.12
RYU, Dewey	アメリカ	University of California, Davis 教授	'12. 1. 9-'12. 1.11
WITTAYANARAKUL, Kitiyaporn	タイ	Khonkaen University 講師	'11. 4.30-'11. 5.31
RUNGROTMONGKOL, Thanyada	タイ	Chulalongkorn University 研究員	'11. 4.30-'11. 6.15
NUNTHABOOT, Nadtanet	タイ	Maharakham University 講師	'11. 5. 1-'11. 6.11
LE, Hong Quang	ベトナム	Institute of Material Research and Engineering 研究員	'11. 5. 9-'11. 6.18
WONGRAVEE, Kanet	タイ	Chulalongkorn University 博士研究員	'11. 5.10-'11. 6. 4
NAMUANGRUK, Supawadee	タイ	National Nanotechnology Center, National Science and Technology	'11. 5.14-'11. 6.28
TABTHONG, Sittichoke	タイ	Kasetsart University 大学院生	'11. 5.24-'11. 7. 7
TRINH, Anh Xuan	ベトナム	Hanoi University of Science and Technology 講師	'11. 5.24-'11. 7. 2
LE, Hong Quang	ベトナム	Institute of Material Research and Engineering 研究員	'11. 6.19-'11. 6.30
NAMUANGRUK, Supawadee	タイ	National Nanotechnology Center, National Science and Technology	'11. 6.29-'11. 6.30
TABTHONG, Sittichoke	タイ	Kasetsart University 大学院生	'11. 4. 9-'11. 5.23
TRINH, Anh Xuan	ベトナム	Hanoi University of Science and Technology 講師	'11. 4.11-'11. 5.23
WOJCIK, Marek Janusz	ポーランド	Jagiellonian University 教授	'11. 4. 6-'11. 4.20
森 俊文	日本	Stanford University 博士研究員	'11. 6. 1-'11. 6. 1
永田 勇樹	日本	University of California 博士研究員	'11. 6.27-'11. 7.29
石崎 章仁	日本	University of California ポスドク研究員 (常勤)	'11. 7. 2-'11. 7.10
CHIANG, Hsin-lin	台湾	中央研究院物理研究所兼任助理	'11. 7. 4-'11. 7.14
SUHULZ, Claus-perter	ドイツ	Max Born Institute プロジェクトリーダー	'11. 7.10-'11. 7.12
ZHAO, Xiang	中国	西安交通大学教授	'11. 7.25-'11. 8.27
DANG, Jingshuang	中国	Xi' an Jiaotong University 大学院生	'11. 7.25-'11. 8.27
YANG, Tao	中国	Xi' an Jiaotong University 大学院生	'11. 7.25-'11. 8.27
MEEPRASERT, Arthitaya	タイ	Chulalongkorn University 大学院生	'11. 8.21-'11.11.18

TEW, David Peter	イギリス	University of Bristol 研究員	'11. 8.26-'11. 8.28
RHEE, Young Min	韓国	POSTECH Pohang University of Science and Technology 助教	'11. 9. 8-'11. 9.10
MATSIKA, Spiridoula	アメリカ	Temple university 准教授	'11. 9. 8-'11. 9.10
CHALUPSKY, Jakub	チェコ	Institute of Organic Chemistry and Biochemistry 研究員	'11.10. 2-'11.11. 3
CHO, Minhaeng	韓国	Korea University 教授	'11.10.17-'11.10.19
朴 光哲	中国	Qingdao University of Science and Technology 教授	'11.12. 6-'11.12. 8
DANG, Liem X.	ベトナム	Pacific Northwest National Laboratory 主任研究員	'11.12.14-'11.12.17
HU, Chin-kun	タイ	The LSCP, Academia Sinica 教授	'11.12.16-'11.12.23
LE, Hong Quang	ベトナム	Institute of Material Research and Engineering 研究員	'12. 1.17-'12. 1.21
ZHAO, Xiang	中国	西安交通大学教授	'12. 2.15-'12. 2.17
YANG, Tao	中国	Xi'an Jiaotong University 大学院生	'12. 2.15-'12. 2.17
DANG, Jingshuang	中国	Xi'an Jiaotong University 大学院生	'12. 2.15-'12. 2.17
RANJIT, Biswas	インド	S. N. Boet National Centre for Basic Science 准教授	'12. 2.27-'12. 2.27
VIANA, Bruno	フランス	Ecole National Supérieure de Chimie de Paris LCMCP 上級研究員	'12. 3.26-'12. 3.27
SANGHERA, Jasbinder	アメリカ	Naval Research Laboratory 光学材料・装置部門長	'12. 3.26-'12. 3.27
JOYE, Alain	フランス	Universite Joseph Fourier 教授	'12. 3.30-'12. 4. 3

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 ウムを定期的で開催し, 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
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)	2011. 2.20	2014. 2.19	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	情報交流, 共同研究, 研究 交流, 会議, シンポジウム, セミナーへの研究者派遣	2009.10.23	2014.10.22	校長	所長

(2011.12.31 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こととなり、大学共同利用機関として行う公募型の「岡崎コンファレンス」は、予算的には新しく認定されるようになったCOE各機関がそれぞれ行う独自企画の中規模の国際シンポジウムの予算に

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

以上のように、全国の分子科学研究者からの申請に基づく「岡崎コンファレンス」を引き継ぐような小規模国際研究集会の枠組みをこれまで探索してきたが、継続的に開催していくためには分子研独自の事業として運営費交付金を使うしか方策がないことがわかった。その検討結果を受けて、「岡崎コンファレンス」を再開することを決断し、平成 18 年度に 6 年半ぶりに第 66 回岡崎コンファレンスを開催した。また平成 19 年度からは公募方式によって課題を募集し、毎年 1 件を採択して開催している。平成 23 年度は下記の第 71 回岡崎コンファレンスを開催した。平成 24 年度開催予定の岡崎コンファレンスからは、応募の方式を見直し、分子研研究会等、他の共同研究と同時期に募集を行い、審査についても共同研究専門委員会で行うこととした。これに伴い、年度当り複数件の開催も、予算状況等により可能となる予定である。

会 議 名： 第 71 回岡崎コンファレンス

“New Perspectives on Molecular Science of Glycoconjugates”

(糖鎖分子科学の新たな展望)

期 間： 2011 年 10 月 12 日(水)～14 日(金)

場 所： 岡崎コンファレンスセンター

組織委員： 若槻壮市 (高エネルギー加速器研究機構, 提案代表者), 加藤晃一 (分子研, 所内対応者),

加藤龍一 (高エネルギー加速器研究機構), 山口芳樹 (理研), 佐藤匡史 (名市大), 神谷由紀子 (分子研)

内 容:

糖鎖は、核酸・タンパク質とならぶ「第 3 の生命鎖」ともよばれており、その生物学的重要性が次々と明らかになっている。しかしながら、糖鎖の分子科学は、他の生命分子の場合に比べて著しく立ち遅れてきた。なぜなら、糖鎖の情報はゲノムに直接記されておらず、その分子構造は不均一でかつ運動性に富んでおり、しかも糖鎖は弱い分子間相互作用を集積して機能を発現しているからである。すなわち、糖鎖が担う生命情報の解読には、今後の分子科学が取り組むべき課題の多くが集約されている。

こうした問題意識のもと、第 71 回岡崎コンファレンス New perspectives on molecular science of glycoconjugates 「糖鎖分子科学の新たな展望」を開催した。最先端の糖鎖科学者とともに、異分野の研究者にも講演や討議に加わっていただき、24 件の講演 (うち海外 5 名) と 18 件のポスター発表をもとに、総計 73 名の参加者が討論を行った。3 日間のプログラムを以下に示す。

## October 12 (Wed.)

- 9:15 - 9:30 Taking Photograph  
9:30 - 9:40 Opening Remarks  
(*Iwao Ohmine, Director-General of Institute for Molecular Science*)  
9:40 - 10:00 Introductory Talk  
(*Soichi Wakatsuki and James C. Paulson*)

### Session 1: Trends in Molecular Science of Glycoconjugates

Chair: *Naoyuki Taniguchi*

- 10:00 - 10:35 **James C. Paulson** (*The Scripps Research Institute, USA*)  
“Structure Aided Design of Siglec Ligands for *in vivo* Targeting of Nanoparticles to Immune Cells”  
10:35 - 11:10 **Toshisuke Kawasaki** (*Ritsumeikan University*)  
“Recognition of Endogenous Ligands by C-Type Animal Lectins”  
11:10 - 11:45 **Koichi Kato** (*Institute for Molecular Science*)  
“Structural Views of Functional and Pathological Roles of Sugar Chains”  
11:45 - 13:00 Lunch and Poster Viewing

### Session 2: Structural Glycobiology (I)

Chairs: *Ryuichi Kato*

- 13:00 - 13:35 **Kay-Hooi Khoo** (*Academia Sinica, Taiwan*)  
“Towards Direct Glycopeptide Sequencing and Identification in Glycoproteomic Applications”  
13:35 - 14:10 **Kunihiko Gekko** (*Hiroshima University*)  
“Structural Analysis of Carbohydrates by Synchrotron-Radiation Vacuum-Ultraviolet Circular Dichroism Spectroscopy”  
14:10 - 14:45 **Katsumi Matsuzaki** (*Kyoto University*)  
“GM1 Cluster Mediated-Aggregation of Alzheimer’s Amyloid  $\beta$ -Protein”  
14:45 - 15:05 Coffee Break

### Session 3: Chemical Glycobiology

Chairs: *Yoshiki Yamaguchi*

- 15:05 - 15:40 **Koichi Fukase** (*Osaka University*)  
“Glyco-Imaging for Glycan Dynamics Study”  
15:40 - 16:15 **Mikiko Sodeoka** (*RIKEN*)  
“Synthesis and Biological Activity of Ganglioside Analogues with  $CF_2$ - and  $CH_2$ -Sialoside Linkage”  
16:15 - 16:50 **Leonard M.G. Chavas** (*High Energy Accelerator Research Organization*)  
“Influenza Virus Sialidases’ Targeted Drugs: Their Interaction With Human Sialidases”  
16:50 - 17:25 **Mark von Itzstein** (*Griffith University, Australia*)  
“Exploring New Opportunities in Influenza Virus Sialidase Inhibitor Discovery”

## October 13 (Thu.)

### Session 4: Glycobiology and Glycophysiology

Chairs: *Toshisuke Kawasaki and Koichi Furukawa*

- 9:00 - 9:35 **Shinji Takada** (*National Institute for Basic Biology*)  
“Post-Translational Modification in the Secretion and Extracellular Transport of Wnt Proteins”  
9:35 - 10:10 **Koichi Furukawa** (*Nagoya University*)  
“Functional Analysis of Globo-Series Glycolipids Using Gb3/CD77 Synthase Knockout Mice”  
10:10 - 10:30 Coffee Break  
10:30 - 11:05 **Kazuhiro Ikenaka** (*National Institute for Physiological Sciences*)  
“N-Linked Sugar Chains: Regulation of Their Synthesis and Their Physiological Significance”  
11:05 - 11:40 **Shoko Nishihara** (*Soka University*)  
“Maintenance and Induction of Naïve State Embryonic Stem Cells Require LacdiNAc Carbohydrate Structure”  
11:40 - 12:15 **Naoyuki Taniguchi** (*RIKEN*)  
“Regulation of Brain-Specific GnT-IX (Vb) Expression by Neural Histone-Code”  
12:15 - 13:25 Lunch and Poster Viewing

### Session 5: Theoretical and Computational Science of Glycoconjugates

Chairs: Suyong Re and Yukiko Kamiya

- 13:25 - 14:00 **Kiyoko F. Aoki-Kinoshita** (*Soka University*)  
“Methods and Applications of Glycome Informatics”
- 14:00 - 14:35 **Keiko Takano** (*Ochanomizu University*)  
“Theoretical Studies of the Interaction between Proteins and Glycans Using *ab initio* FMO Method”
- 14:35 - 14:55 **Toyokazu Ishida** (*AIST*)  
“Computational Modeling of Carbohydrate Recognition in Selectin Complex”
- 14:55 - 15:15 Coffee
- 15:15 - 15:50 **Fumio Hirata** (*Institute for Molecular Science*)  
“Exploring Life Phenomena with a Statistical Mechanics of Molecular Solution”
- 15:50 - 16:25 **Robert J. Woods** (*University of Georgia, USA*)  
“Computational Carbohydrate Grafting Leads to the Discovery of Novel Glycan-Binding Specificities for an Anti-Tumor Antibody”
- 16:25 - 17:25 **Short Talk from Poster Presentation**  
Chair: Tadashi Satoh
- 17:25 - 18:30 Poster Presentation
- 18:30 - 20:00 Banquet

October 14 (Fri.)

### Session 6: Structural Glycobiology (II)

Chair: Koichi Kato

- 9:00 - 9:35 **Yoshiki Yamaguchi** (*RIKEN*)  
“<sup>13</sup>C-NMR Quantification of Proton Exchange at LewisX Hydroxyl Groups in Water”
- 9:35 - 10:10 **Daisuke Kohda** (*Kyushu University*)  
“Comparative Structural Biology of Oligosaccharyltransferases”
- 10:10 - 10:30 Coffee
- 10:30 - 11:05 **Thomas Peters** (*University of Lübeck, Germany*)  
“NMR Provides Insights into Virus-Carbohydrate Interactions at Atomic Resolution”
- 11:05 - 11:25 **Soichi Wakatsuki** (*High Energy Accelerator Research Organization*)  
“Structural Glycobiology as Part of Integrated Structural Life Science”
- 11:25 - 11:50 **General Discussion** (Chairs: Soichi Wakatsuki and Koichi Kato)
- 11:50 - 12:00 **Closing Remarks** (Soichi Wakatsuki, High Energy Accelerator Research Organization)

## 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、平成22年度13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。

2011 年度実施状況

代表者	研究課題名	相手国
見附孝一郎	色素増感酸化半導体電極の電子状態変化の光電子分光と X 線吸収分光による長期追跡	タイ
江原 正博	抗ウイルスドラッグとタンパク質の相互作用に関する理論的研究：アダマンタン類縁体	オーストラリア
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
唯 美津木	新しい表面固定化金属錯体の創製と触媒反応の開拓	シンガポール
木村 真一	3d, 4f 電子を有する強相関係の電子状態の光学的・光電的研究	韓国
奥村 久士	拡張アンサンブル分子動力学法によるペプチドの凝集機構の解明	台湾
櫻井 英博	バイオマス有効利用を目指した金属クラスター触媒の研究	タイ
横山 利彦	微斜面基板上的 FeCo 合金薄膜の磁気特性	ドイツ 米国 トルコ
加藤 政博	共振器型自由電子レーザーにおけるビームダイナミクス	フランス
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
平等 拓範	ポッケルス効果とブラッグ回折を考慮した角度擬位相整合に関する研究	フランス
江 東林	二次元高分子の合成に関する研究	中国
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

### 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。2011年7月には韓国・釜山において14回目のシンポジウムが“New Visions for Spectroscopy & Computation: Temporal and Spatial Adventures of Molecular Science”のテーマで開催された。次回の日韓分子科学シンポジウムは、2013年に日本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。

### 3-5 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 ~ 2001	02	03	04	05	06	07	08	09	10	11
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	1
筑波大学	2										1
宇都宮大学		2	2								
群馬大学	1										
埼玉大学	2										
千葉大学	4	1									
東京大学	31						2	4	3	3	1
東京工業大学	28	6	6	2							
お茶の水女子大学	6										
横浜国立大学	1										1
金沢大学	11										
新潟大学	4					1	1				
福井大学	10										
信州大学	4								1	1	
岐阜大学	2										
静岡大学										2	2
名古屋大学	76	2	2			3	4	6	6	4	11
愛知教育大学						1					
名古屋工業大学	15			2							2
豊橋技術科学大学	30		7	2				1			
三重大学	7										
京都大学	39	1			2	1	1	1	2		
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	26							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	13	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	42	2	1								2

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							1
首都大学東京	17			2		1					
名古屋市立大学	4				9	8	5	4	4	4	2
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	8	1									
上智大学	1										
中央大学										1	
東海大学	2	1									
東京理科大学	7		1	1							
東邦大学	3										
星薬科大学	1										
早稲田大学	10	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	3
計	532	28	26	17	14	16	17	17	17	17	27

\* 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（2011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	8	10	20
機能分子科学専攻	9	9	22
計	17	19	42

在籍学生数（2011年12月現在）単位：人

（年度別）

入学年度専攻		2006	2007	2008	2009	2010	2011	計	定員
構造分子科学専攻	5年一貫	0	1	1	3	1	1	7	2
	博士後期	1	1	2	2	4	0	10	3
機能分子科学専攻	5年一貫	0	1	1	1	2	2	7	2
	博士後期	0	0	0	5	2	4	11	3

学位取得状況 単位：人

（年度別）

専攻	1991～2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	63(11)	11	6	3	7	5	5(1)	7	5	2	0	114(12)
機能分子科学専攻	59(6)	5(4)	1	5(4)	4	5	1	4	2(1)	5	0	91(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	1989～2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011
構造分子科学専攻	95	3	7	7	8	11(1)	8(1)	5(1)	5(3)	5(1)	1(1)
機能分子科学専攻	83	6	6	6	7	4	5(1)	5(2)	7(2)	4(2)	6(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		
	1989-2009年度	2010年度	2011年度	1989-2009年度	2010年度	2011年度
中国	18	4		6		1
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	2			1	2	
フィリピン				2		
ベトナム				1		1
タイ				1		1

大学別入学者数 単位：人

大学名等	構造分子科学専攻			機能分子科学専攻			計
	'89 ~ '09 年度	'10 年度	'11 年度	'89 ~ '09 年度	'10 年度	'11 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			3			5
信州大学	3			1			4
静岡大学	2			1			3
名古屋大学	2			5	1	1	9
名古屋工業大学	1						1
豊橋技術科学大学	5			2		1(1)	8(1)
三重大学	1						1
京都大学	12(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		1(1)	2			5(1)
佐賀大学				1			1
熊本大学	3(1)						3(1)
鹿児島大学				2(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		1	4

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				2(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	30(1)	4(1)		18	3(2)	3(1)	58(5)

\* 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 ) 単位 : 人

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

2011年5月27日(金)午後～28日(土)午前まで分子研シンポジウム2011を開催し、引き続き28日(土)午後に分子研オープンキャンパス2011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年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、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5回目になる。

分子研関係者、総研大卒業生を中心に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、所内は把握していないが、所外からは47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、鳥取から北海道まで、学部学生5名、修士課程22名、博士課程5名、教員・研究者8名、民間7名であり、あわせて合計47名であった。昨年度と比較すると、教員、民間の参加者が増加し、学生の参加者数は減少している。東北、関東地域の参加人数が減少しており、震災の影響が大きかったと考えられる。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	民間	合計
北海道	0	1	2	0	0	3
東北	0	1	0	0	0	1
関東	2	8	1	2	2	15
甲信越	1	0	0	1	0	2
東海	0	0	0	0	5	5
近畿	2	8	2	5	0	17
山陰	0	4	0	0	0	4
合計	5	22	5	8	7	47

### 3-5-4 夏の体験入学

2011年8月8日(月)～11日(木)の期間、分子科学研究所において「分子研夏の体験入学」(第8回)を開催した。本事業は分子科学研究所における大学院教育、研究者養成、共同利用研究などの特徴ある活動が分子科学の発展に大きく貢献していることを知って頂くことを目的としている。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8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、分子研独自のポスター作成および配布さらに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。また、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ている。参加者構成は学部学生39名、修士課程3名、その他1名の合計43名(期間外参加者4名を含む)となり、例年とは異なり学部生が大多数を占め、近年では最も多い参加者数となった。実施スケジュールは以下の通りである。

8月8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9日(火), 10日(水): 研究体験

8月11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	北海道大学	修士1年	磁気共鳴法・磁性測定による機能性材料の電子状態(磁性・伝導性)の観測	中村 准教授
2	京都大学	学部2年	フロンティア軌道理論と現在の理論化学・計算化学	江原 教授
3	大阪市立大学	学部1年	光で分子を回してみよう!	大島 教授
4	近畿大学	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
5	愛媛大学	学部1年	固体表面電子の相対論効果を見よう!	木村 准教授
6	京都大学	学部2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
7	静岡大学	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
8	立命館大学	学部4年	NMR を用いてタンパク質のかたちと動きを実感する	加藤(晃)教授
9	福岡大学	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
10	青山学院大学	学部3年	計算化学のハッキング体験学習	柳井 准教授
11	近畿大学	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
12	立命館大学	学部4年	有機 EL 素子の作製と発光測定	平本 教授
13	名古屋大学	学部2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
14	名古屋大学	学部2年	金属錯体で学ぶ人工光合成	正岡 准教授
15	奈良女子大学	学部3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
16	京都大学	学部2年	光を使って分子を制御しよう	大森 教授
17	千葉大学	学部3年	光合成モデル化合物の合成	永田 准教授
18	青山学院大学	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
19	千葉大学	学部3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
20	立命館大学	学部4年	有機 EL 素子の作製と発光測定	平本 教授
21	福岡大学	学部3年	緑色蛍光蛋白質の巻き戻りを調べてみよう	桑島 教授
22	京都大学	学部2年	光合成モデル化合物の合成	永田 准教授
23	東京理科大学	学部3年	凝縮系におけるダイナミクスと分光の理論研究	斉藤 教授
24	大阪市立大学	学部1年	酸化物表面固定化金属触媒の構造解析	唯 准教授
25	山形大学	学部4年	酸化物表面固定化金属触媒の構造解析	唯 准教授
26	甲南大学	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
27	東京工業大学	学部1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
28	横浜国立大学	修士2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

29	立命館大学	学部 2 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
30	福岡大学	学部 3 年	金属錯体で学ぶ人工光合成	正岡 准教授
31	学習院大学	学部 2 年	有機 EL 素子の作製と発光測定	平本 教授
32	岡山理科大学	学部 2 年	超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
33	名古屋大学	学部 2 年	金属錯体で学ぶ人工光合成	正岡 准教授
34	奈良女子大学	学部 3 年	分子性物質の光誘起相転移ダイナミクス	米満 准教授
35	岐阜薬科大学	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
36	信州大学	学部 3 年	液体の統計力学によって生命現象を解明する	平田 教授
37	名古屋大学	学部 2 年	金属酵素モデルを用いた酵素研究の体験	藤井 准教授
38	京都大学	学部 2 年	ナノの金属ロッドを作って波動関数を見る	岡本 教授
39	東京工業大学	学部 1 年	金属タンパク質を対象とした研究を体験してみよう	青野 教授
40	東京工業大学	学部 1 年	緑色蛍光蛋白質の巻き戻りを調べてみよう	桑島 教授
41	鳥取大学大学院	修士 2 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
42	日油株式会社		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
43	東京工業大学	学部 3 年	光を使って分子を制御しよう	大森 教授

### 3-5-5 総研大アジア冬の学校

2012年1月10日(火)から13日(金)にかけて岡崎コンファレンスセンターで「総研大アジア冬の学校」が開催された。総研大・物理科学研究科では、研究科内の5専攻で行っている研究・教育活動をアジア諸国の大学院生および若手研究者の育成に広く供するために、2004年度よりアジア冬の学校を開催してきた。分子研(構造分子科学専攻・機能分子科学専攻)での開催は今回で8回目である。海外からの応募は28名あり、そのうち20名を受け入れた。その国籍別の内訳はインド6名、タイ5名、韓国3名、イラン2名、中国2名、台湾1名、モンゴル1名である。そのほかに分子研の若手研究者など日本国内からの参加者が11名(国籍は日本,中国,台湾,タイ),合計31名であった。今回は基礎から最先端までじっくり講義することを目的として、テーマを“Basics and Frontiers in Molecular Science”と設定した。これまでの冬の学校よりも1講義当たりの時間を長く(90 - 180分)取って講義をおこなった。なお、プログラムの詳細は下記のとおりである。

#### January 10

14:00-17:30: Registration  
17:30-19:00: Welcome Reception

#### January 11

9:30-11:00: **Prof. Shigeyuki Masaoka (IMS)**  
*Coordination Chemistry and its Application toward Artificial Photosynthesis*  
11:00-11:10: Break  
11:10-12:40: **Prof. Shigeyuki Masaoka (IMS)**  
*Coordination Chemistry and its Application toward Artificial Photosynthesis*  
12:40-14:00: Lunch  
14:00-15:30: **Prof. Yasuhiro Ohshima (IMS)**  
*Molecules in Motion: From Probe to Control by Light*

15:30-15:40: Break  
15:40-17:10: **Prof. Yasuhiro Ohshima** (IMS)  
*Molecules in Motion: From Probe to Control by Light*  
17:30-19:00: **Poster Presentation**

#### January 12

9:30-11:00: **Prof. Katsuyuki Nishimura** (IMS)  
*Principles of Solid State NMR and its Application for the Characterization of Biomolecules*  
11:00-11:10: Break  
11:10-12:40: **Prof. Masatoshi Ohishi** (National Astronomical Observatory of Japan)  
*Towards Life in the Universe*  
12:40-14:00: Lunch  
14:00-15:30: **Prof. Kunihiko Kuwajima** (IMS)  
*Molecular Mechanism of Protein Folding*  
15:30-15:40: Break  
15:40-17:10: **Prof. Kunihiko Kuwajima** (IMS)  
*Molecular Mechanism of Protein Folding*  
17:30-19:00: Banquet

#### January 13

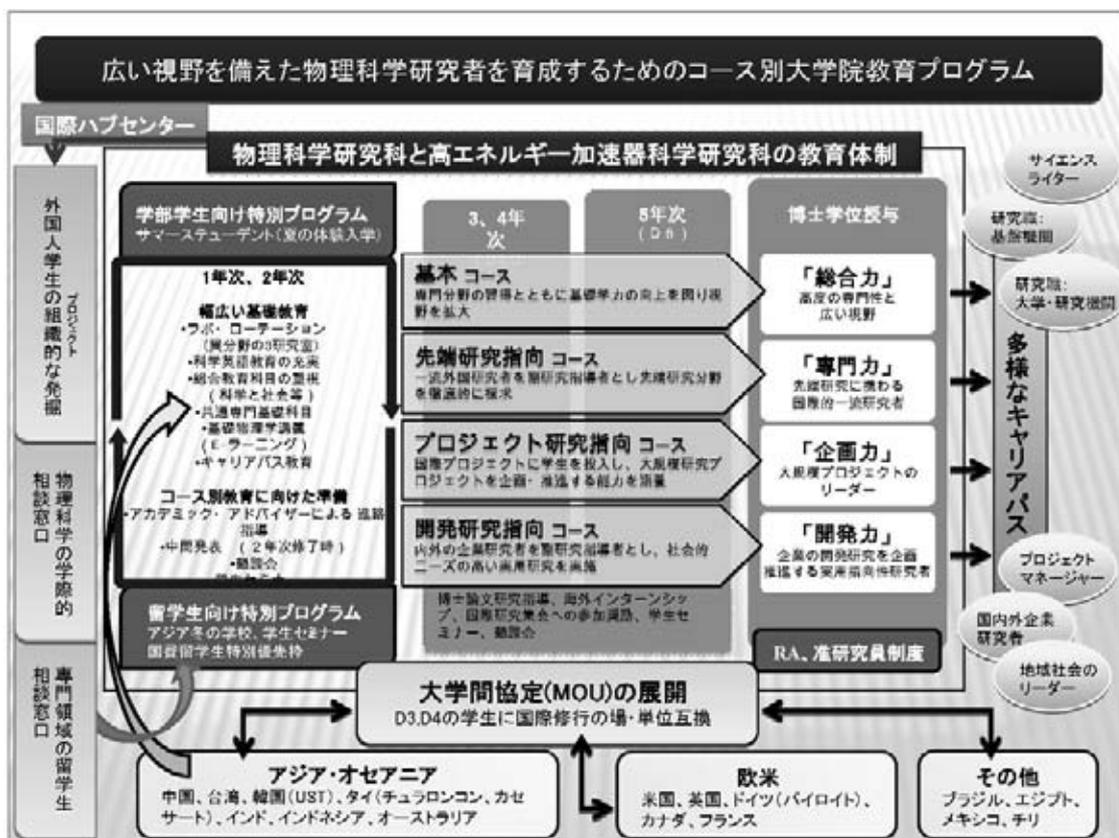
9:30-11:00: **Prof. Fumio Hirata** (IMS)  
*From Statistical Mechanics of Liquids to Biomolecular Science*  
11:00-11:10: Break  
11:10-12:40: **Prof. Fumio Hirata** (IMS)  
*From Statistical Mechanics of Liquids to Biomolecular Science*  
12:40-: Closing and Lab Tour/Free Time

### 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、2009年から3年間のプログラムとして、2011年度まで実施されてきた。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、本研究科所属の各専攻を擁する基盤機関は全国に分散しており、それゆえに他専攻の授業を受講することは従来困難であった。本プログラムでは研究科所属の大学院生が幅広い物理科学の素養を得られるべく、複数の研究室を短期間体験するラボ・ローテーションを実施し、また共通専門基礎科目のeラーニング化とその積極的活用により専攻間の縦横な授業履修を可能としている。すでに2011年度から分子研所属の構造分子科学専攻、機能分子科学専攻のeラーニング授業が配信されている。また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。

また、本プログラムは2012年度以降、特別経費（概算要求）「広い視野を備えた物理科学研究者を育成するためのコース別大学院教育プログラム」として、これまでの物理科学研究科に高エネルギー加速器科学研究科（加速器科学

専攻、物質構造科学専攻、素粒子原子核専攻)を加えた後継プロジェクトとして継続される(下に新プロジェクトの概要スキームを掲載する)。研究科の枠を越え総研大全体に波及する教育プログラムであることから、履修既定や単位認定法などの調整が進められつつある。



### 3-5-7 統合生命科学教育プログラム

総研大では文部科学省・特別経費の支援によって、2011年より4年間の予定で表記事業「統合生命科学教育プログラム」を開始し、講義を2011年10月から行っている。

生命科学の分野では、日々急速な勢いで蓄積されつつある、ゲノム情報やその他の生物学的大量情報を統合し、そこから意味のある情報を抽出して新たな学問分野を形成することが喫緊の課題となっている。そのような新たな生物学に対応するには生物科学のみならず、物理科学、数理科学、情報科学などに通じる学際的かつ統合的な生命観を持つ研究者の養成が必要である。そのため本プログラムでは、国内最先端の研究機関において幅広い分野の大学院教育が行われている総研大の特色を生かし、統合生命科学の新しいカリキュラムを作成し、遠隔地講義配信システムを利用して現地、遠隔地専攻に差がなく受講できるようにしている。専攻をまたいだ分野横断的教育プログラムであるため、履修規定の改定など制度的整備を進めている。講義以外にも各専攻最先端の教育研究の場で集中的に演習・実習などを受けるシステム、大学院生が自ら提案し実施する分野横断型共同研究への支援も準備している。さらに、統合生命科学を広く普及させるため、国内外の大学院生と若手研究者を対象とし、年ごとにテーマを決めた特別講義とセミナーを行う「統合生命科学サマースクール」を年に1回実施している。

## 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。特に法人となってからは、全国の分子科学コミュニティの連帯を強めるために、研究支援部門を強化してきた。法人化後に新設された部門には、「安全衛生管理室」、「広報室」、「史料編纂室」がある。

技術課は、研究支援組織の中核になる大きな集団を構成している。分子科学研究所は、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、2011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物・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（現、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	
昭和 55	分子科学研究所	昭和 55 年 2 月	機械, 回路, 電子計算機	
	高エネルギー物理学研究所	昭和 55 年 10 月 24 日	機械	
昭和 56	分子科学研究所	昭和 56 年 1 月 30 日	機械, 回路, 電子計算機, 低温	低温分科会を創設 技術課長 内田 章
	高エネルギー物理学研究所	昭和 56 年 1 月 30 日	機械	
昭和 57	高エネルギー物理学研究所	昭和 58 年 3 月 17-18 日	機械, 回路, 電子計算機, 低温	技術部長 馬場 斉 3 研究機関持ち回り開催が始まる
昭和 58	分子科学研究所	昭和 59 年 3 月 2-3 日	機械, 回路, 電子計算機, 低温	
昭和 59	名古屋大学プラズマ研究所	昭和 59 年 11 月 15-16 日	機械, ガラス, セラミック, 低温回路, 電子計算機, 装置技術	実行委員長 藤若 節也
昭和 60	高エネルギー物理学研究所	昭和 61 年 3 月 19-20 日	機械, 計測制御, 低温, 電子計算機, 装置技術	技術部長 山口 博司
昭和 61	分子科学研究所	昭和 62 年 3 月 19-20 日	機械, 回路, 電子計算機, 低温	
昭和 62	名古屋大学プラズマ研究所	昭和 63 年 3 月 29-30 日	機械, 回路, 低温, 電子計算機, 装置技術	
昭和 63	高エネルギー物理学研究所	平成元年 3 月 23-24 日	機械, 計測制御, 低温, 電子計算機, 装置技術	技術部長 阿部 實
平成元	分子科学研究所	平成 2 年 3 月 19-20 日	機械, 回路, 低温, 電子計算機, 総合技術	2ヶ所で懇談会
平成 2	核融合科学研究所	平成 3 年 3 月 19-20 日	機械, 低温, 計測制御, 電子計算機, 装置技術	
平成 3	高エネルギー物理学研究所	平成 4 年 2 月 6-7 日	機械, 低温, 計測制御, 電子計算機, 装置技術	
平成 4	分子科学研究所	平成 5 年 3 月 11-12 日	装置 I, 装置 II, 低温, 電子計算機	実行委員長 酒井 楠雄 3 研究機関代表者会議
平成 5	核融合科学研究所	平成 6 年 3 月 23-24 日	機械, 低温, 計測制御, 電子計算機, 装置技術	技術部長 村井 勝治 研究所間討論会
平成 6	高エネルギー物理学研究所	平成 7 年 2 月 16-17 日	機械, 低温, 計測制御, 電子計算機, 装置技術	技術部長 三国 晃 研究所間討論会
平成 7	分子科学研究所	平成 8 年 3 月 18-19 日	機械, 回路, 計測制御, 電子計算機, 化学分析	技術課長 酒井 楠雄 研究所間懇談会 化学分析を創設
平成 8	国立天文台・電気通信大学共催	平成 8 年 9 月 19-20 日	計測・制御, 装置・回路計算機・データ処理	初めての分散開催
	大阪大学産業科学研究所	平成 8 年 11 月 14-15 日	機器分析	
	名古屋大学理学部	平成 9 年 2 月 6-7 日	装置開発 A,B, ガラス工作	
	北海道大学理学部	平成 9 年 2 月 27-28 日	低温	
平成 9	核融合科学研究所	平成 9 年 9 月 11-12 日	機械, 回路, 低温, 電子計算機, 装置技術	
	静岡大学	平成 9 年 11 月 27-28 日	機器分析	工学部, 情報学部, 電子工学研究所 各技術部の共催
平成 10	名古屋工業大学	平成 10 年 11 月 26-27 日	機器・分析	
	高エネルギー加速器研究機構	平成 11 年 3 月 4-5 日	工作, 低温, 回路・制御, 装置, 計算機	インターネット討論会
平成 11	東北大学	平成 11 年 11 月 11 日	機器・分析	
	分子科学研究所	平成 12 年 3 月 2-3 日	装置, 回路, 極低温, 電子計算機, ガラス工作	インターネット技術討論会
平成 12	福井大学	平成 12 年 9 月 28-29 日	機器・分析	
	東北大学	平成 13 年 3 月 1-2 日	工作, 装置, 回路, 極低温, 情報・ネットワーク, 材料・物性開発, 地球物理観測	
平成 13	大阪大学	平成 13 年 11 月 15-16 日	機器・分析	
	核融合科学研究所	平成 14 年 3 月 14-15 日	工作, 装置, 計測・制御, 低温, 計算機・データ処理	技術部長 大竹 勲
平成 14	東京大学	平成 15 年 3 月 6-7 日	工作, 装置, 回路, 極低温, 情報・ネットワーク, 生物学, 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	
平成 23	信州大学	平成 23 年 9 月 8-9 日	機器分析, 東日本震災関連	
	分子科学研究所	平成 24 年 3 月 8-9 日	機械・ガラス工作, 回路技術, 極低温技術, 情報/ネットワーク, 装置運用	
	神戸大学	平成 24 年 3 月 15-16 日	実験・実習, 地域貢献, 安全衛生	

#### 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に開催する予定である。2011 年度は外部より 2 名の講師 (民間 1 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
平成22年度	21

表3 平成23年度技術研修受入状況(2011.4.1~2012.3.31)

氏名	所属	受入期間	備考
大西 崇文	名古屋大学	23.6.20-6.24	形彫放電加工技術研修
藤崎 聡美	岩手大学	23.8.24-8.26	広報活動の実務研修
武田 洋一	岩手大学	23.8.24-8.26	溶接技術に関する研修
千葉 寿	岩手大学	23.8.24-8.26	レーザー光による量子干渉実験についての研修
福田 高宏	名古屋大学	23.10.11	極低温研修
松下 幸司	名古屋大学	23.11.7-11.8	極低温ヘリウム液化機運転研修
福田 高宏	名古屋大学	23.11.21-11.30	極低温ヘリウム液化機運転研修
松岡 博	名古屋大学	23.11.14-11.18	極低温ヘリウム液化機運転研修
松岡 博	名古屋大学	23.11.25	極低温ヘリウム液化機運転研修
小林 和宏	名古屋大学	23.11.2-11.15	極低温ヘリウム液化機運転研修
小林 和宏	名古屋大学	23.11.21-11.30	極低温ヘリウム液化機運転研修
長山 好夫	核融合科学研究所	24.3.27	フォトエッチングの基礎と展開する加工技術製品例の紹介
井上 晴夫	東洋精密(株)	24.3.27	フォトエッチングの基礎と展開する加工技術製品例の紹介
武田 洋一	東洋精密(株)	24.3.27	フォトエッチングの基礎と展開する加工技術製品例の紹介
石川 秀蔵	名古屋大学	24.3.27	フォトエッチングの基礎と展開する加工技術製品例の紹介
鈴木 和司	名古屋大学	24.3.27	フォトエッチングの基礎と展開する加工技術製品例の紹介
鳥居 龍晴	名古屋大学	24.3.27	フォトエッチングの基礎と展開する加工技術製品例の紹介
松下 幸司	名古屋大学	24.3.27	フォトエッチングの基礎と展開する加工技術製品例の紹介
立花 健二	名古屋大学	24.3.27	フォトエッチングの基礎と展開する加工技術製品例の紹介
大西 崇文	名古屋大学	24.3.27	フォトエッチングの基礎と展開する加工技術製品例の紹介
齋藤 清範	名古屋大学	24.3.27	フォトエッチングの基礎と展開する加工技術製品例の紹介
森木 義隆	名古屋大学	24.3.27	フォトエッチングの基礎と展開する加工技術製品例の紹介
澤木 弘二	名古屋大学	24.3.27	フォトエッチングの基礎と展開する加工技術製品例の紹介
千田 進幸	名古屋大学	24.3.27	フォトエッチングの基礎と展開する加工技術製品例の紹介
野老山貴行	名古屋大学	24.3.27	フォトエッチングの基礎と展開する加工技術製品例の紹介
井上 宙	名古屋大学	24.3.27	フォトエッチングの基礎と展開する加工技術製品例の紹介
河原 真吾	名古屋大学	24.3.27	フォトエッチングの基礎と展開する加工技術製品例の紹介

### 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)
鈴木光一	日本化学会化学技術有功賞 (2007)
吉田久史	日本化学会化学技術有功賞 (2008)
水谷文保	日本化学会化学技術有功賞 (2009)
青山正樹	日本化学会化学技術有功賞 (2012)

## 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リングリスト（[safety@ims.ac.jp](mailto:safety@ims.ac.jp)）も設定しており、各種の質問などに機動的に対応できる体制になっている。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 史料編纂室

「史料編纂室」は、分子科学研究所創設 30 周年を迎えた機会に設立された（平成 18 年 1 月）。分子研創設に至る十数年間の歴史的な資料をはじめ、創設準備室時代の資料、さらには創設十周年を迎えるまでの資料など、「分子研創設の経緯」および「分子研発展の経緯」に関する多数の貴重な史料を収集・整理し、目録を作成、保存箱に保存する等、いわゆる「アーカイブズ活動」を行なっている。

これまで収集された史料を大別すると、以下の通りである。(1) 分子科学の名称が初めて公式に使われた科学研究費申請書、(2) 「日本化学会将来計画委員会」において提案された分子研など新しい研究所の創設に関する議事録、(3) 分子研創設の趣意書、(4) 日本学術会議において「分子研の創設」が勧告された経緯、(5) 勧告の直後に発足した「分子研設立小委員会」と「大学附置研」構想、(6) この構想が学園紛争勃発によって白紙撤回された経緯、(7) あらためて開催された分子研設立小委員会において「全国共同利用研」構想が提案された経緯、(8) 文部省による「分子科学」特定研究費の承認、(9) 分子研準備室時代、(10) 分子研設立第一期（十周年記念まで）の研究態勢の動向や研究成果などが詳しく記載された「分子研レターズ」や「ANNUAL REVIEW」など、定期出版物。

昨年度末から今年度にかけては、以下の史料が寄贈された：井口洋夫元所長より 32 点（寄贈：平 23.7.20）、薬師久弥名誉教授より 7 点（寄贈：平 23.2.17）、西信之名誉教授より 14 点（寄贈：平 23.3.15、平 23.3.30）、技術課（所長秘書）より 1 点（寄贈：平 23.4.20）、筑波技術大学高岩義信氏より 1 点（寄贈：平 23.6）。また、アーカイブズ活動に関する研究会ならびに学会に室員数名が参加し、情報交換を行った。

史料編纂室では、オリジナル史料の保存とともに、「紙コピー」および「デジタル化」の作業も進めている。今後とも総研大の基盤研究機関のアーカイブズ室と連携して、史料の収集・保存・DB（データベース）の共有化の作業を進めていきたい。なお、史料の閲覧は、所内関係者には原則として公開されている（閲覧簿に所属・名前など必要事項を記載して頂いている）。一般の方への史料公開方法については、検討中である。

## 4-4 広報室

「広報室」のミッションは、以下の3つにまとめられよう。第1に、分子科学コミュニティ内の研究者に、分子研の活動や機能を明確に提示し、共同研究・共同利用ならびに情報交換を通じてコミュニティ全体の活性化を図り、分子科学の発展・深化に寄与すること、第2に、広く社会に分子研の研究活動や役割を分かり易く伝え、大学共同利用機関としての分子研の意義を理解して頂くこと、第3に、いわゆるアウトリーチ活動の企画・コーディネートを担当し、一般市民、特に、小学生から高校生までの生徒の皆さんの科学・技術リテラシー向上の一助をなすこと。

上記ミッションに対応する具体的な活動として、下記の業務を行っている。

### 4-4-1 各種出版物の作成・配布

分子研レポート（年1回発刊）、Annual Review（年1回）、および分子研レターズ（年2回）の編集実務、ならびに研究所のパンフレット（日本語版と英語版）および総研大構造・機能分子科学専攻のリーフレットの作成を担当している。パンフレット類に関しては、配布ターゲットにマッチした内容およびラインアップとなるように、整理・改編に取り組んでいる。その一環として、本年度は研究所パンフレットの大幅な改訂を行い、各研究グループの紹介ページの充実を図った。連動して、従来の総研大パンフレットは廃止し、必要な情報のみを簡潔にまとめたリーフレットに移行している。現在、一般向けのパンフレットの作成に着手している。

### 4-4-2 ポスター・チラシの作成・配布

分子研研究会、分子科学フォーラムやオープンキャンパスなどの、研究所全体として実施するイベントのポスター・チラシの作成を行っている。また、岡崎の3研究所が連携して、東岡崎駅構内の広告スペースの利用を平成23年3月から開始しているが、この看板の作成も担当している。2ヶ月に1回程度の頻度で、新しいポスターに変更している。

### 4-4-3 見学対応

岡崎統合事務センターと連携して、研究所を訪れる見学者の対応を行っている。主な見学コースとしては、常設展示室および所内各研究施設等である。前者では広報室員が説明を担当し、後者の場合は説明担当者とスケジュール調整等を行っている。常設展示室は、平成22年5月に公開されたもので、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。受け入れの実数は4-8を参照されたい。

### 4-4-4 プレス対応

分子研で実施された最先端の研究成果をプレスリリースとして報道機関に情報提供する際に、研究者からの情報を資料としてまとめるとともに記者クラブ等への連絡を担当している。他研究機関との共同発表の場合は、当該機関との打ち合わせも行う。本年度は総計で12件のプレスリリースを行った（平成24年2月10日時点）。また、報道各社からの問い合わせの窓口として、研究者の紹介等も行っている。

### 4-4-5 ホームページ管理

ホームページの管理・運営は、広報室が全面的に担当しており、最新の情報を掲載するように不断の努力を続けている。現在、「知りたい情報にすぐアクセスできる」ページ構成とすること、研究所全体の研究活動や役割を分かり

やすく伝えるページを新設すること、各研究者の情報を充実させること等に配慮して、全面的な改訂作業に着手している。英語版の充実も長年の課題であり、並行して進めるように検討している。

#### 4-4-6 アウトリーチ活動

4-5および4-6に記載された事業について、企画・調整・実務を担当している。具体的内容については、各項を参照されたい。また、岡崎3機関アウトリーチ活動連絡委員会に広報室から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（広報誌OKAZAKIの発行等）の分子研での取りまとめを行っている。また、今年度から新たに始まった、愛知県教育委員会主催の「あいち科学の甲子園2011」にも参加協力した。

## 4-5 社会との交流

一般市民の方々に科学の面白さ・意義を伝えるとともに、科学コミュニティの健全な発展を促すような相互交流を醸成するための取り組みは、ますます重要性を増している。分子科学研究所では、このようなアウトリーチ活動の一環として、他機関との連携・共同により国内の広い範囲をカバーする事業、および、岡崎の地域性を重視した事業という2つのタイプを実施している。前者としては、自然科学研究機構シンポジウムならびに大学共同利用機関シンポジウムがあり、後者は分子科学フォーラム・岡崎市民大学講座等である。

### 4-5-1 自然科学研究機構シンポジウム

当シンポジウムは2006年より年2回のペースで実施され、下記のようにこれまでに計12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。

第11回：「宇宙と生命—宇宙に仲間はいるかII—」, ナディアパーク, 2011年6月12日。

第12回：「知的生命の可能性—宇宙に仲間はいるかIII—」, 東京国際フォーラム, 2012年3月20日。

第9回までは、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が、提案・コーディネイトを担当された。第11回は、当初は例年通りに3月のお彼岸の時期に東京での開催を予定していたが、3月11日に東北・関東地域が大震災に見舞われたために中止となり、改めて6月に名古屋で開催されたものである。急遽の変更を受けて中部圏での初の開催となったことから、準備の面で多少の混乱もあったが、周知に対する努力の結果、例年並みの参加者にお集まり頂けた。

本シンポジウムに対する分子科学研究所の関与は次の通りである。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(詳細は「分子研りポート2006」を参照)。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。第11回では、大峯巖所長が「水の揺らめきの世界；揺らぎと反応と生命」というタイトルで講演を行った。また、講演会の開催と併せて、展示コーナーを設けてビデオやパネルを用いた説明を行なっている。今後は、展示内容をさらに充実させるために、常設展示室に設置されている可搬式のグラフィックパネルや模型を有効に利用するとともに、十分な説明要員を確保するために研究者の積極的な参加を促す。

## 4-5-2 大学共同利用機関シンポジウム

本シンポジウムは、自然科学研究機構を含む4つの大学共同利用機関を構成する19の研究機関と宇宙科学研究所が、総合研究大学院大学と合同で開催したものである。各研究機関が「知の拠点群」として果たしている役割と、研究の推進を通じて切り拓かれた科学の広大なフロンティアの現状について、広く一般市民の方に紹介することを目指している。2010年11月20日にベルサール秋葉原にて「万物は流転する」とのテーマのもとに第1回が開催され、2011年11月26日には同会場にて第2回「万物は流転するII」が開催された。分子科学研究所はブース展示に参加し、先端的研究成果や分子科学に関連する基本事項の解説を行った。特に、第2回においては、常設展示室に設置されている920MHz NMRの半立体模型を持ち込んで、研究の現状に関する詳しい説明を行った。

## 4-5-3 分子科学フォーラム

当フォーラムは「分子科学の内容を他の分野の方々や一般市民にも知らせ、また、幅広い科学の話を分子研の研究者が聞き自身の研究の展開に資するように」との趣旨のもとに、1996年より実施されている。豊田理化学研究所と共催となっており、年度毎に年間計画を豊田理化学研究所の理事会に提出している。2008年度よりは、一般市民の方々に科学の面白さ・楽しさを伝える「市民一般公開講座」として新たに位置づけられ、2009年度には、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。この際、講演回数をこれまでの年6回から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。以来、幅広い分野で先導的な立場におられる研究者や技術者を講師としてお招きし、多様なテーマで講演を実施している。

本年度の実施状況は以下の通り。

回	開催日	テーマ	講演者
89	2011. 6.10	宇宙の創生とマルチバース	佐藤 勝彦 (自然科学研究機構長)
90	2011. 8. 6	ビールのアート&サイエンス —麦とホップが生み出すおいしさの秘密—	渡 淳二 (サッポロビール株式会社取締役執行役員)
91	2011.11.28	粘菌の賢さを探る	中垣 俊之 (公立はこだて未来大学教授)
92	2012. 2. 3	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—	平本 昌宏 (分子科学研究所教授)

## 4-5-4 分子研コロキウム

分子研コロキウムは既に800回を超える歴史のあるセミナーであり、元々のコロキウムの趣旨は、全ての教授、准教授(当時は助教授)が参加し、各人の専門分野を越えて学問的な刺激を受ける場を提供することであった。しかし、数年少し前程度からその趣旨が薄れてきており、自分の研究内容に関係するセミナーのみ聴講し、専門外の講演には関知しないとの風潮が少なからず広まってしまった。このような聴講スタイルであれば通常の研究セミナーや学会発表でその目的は達成可能である。コロキウムの立ち上げ当時とは、スタッフの数も研究分野の広がりも大きく異なることは事実であるが、やはり当初の趣旨に立ち回りコロキウムの存在意義を再度高めるべく、2010年度から分子研コロキウムの改革に着手した。分子研に関連する研究分野の最先端で自ら先陣を切って研究をされている方々を講師としてお招きし、多くの教授・准教授が参加できるように、毎月第3金曜日に開催される教授会議終了後にコロキウムを行うことを原則とした。講演者の先生には通常の研究発表よりも研究の背景や今後の展開等の大局的な内容を多

めに話して頂き、講演者・参加者の皆で深く自由に議論できるある種のブレインストーミングの様な場を提供できることを目指している。コロキウム終了後には飲み物を片手にリラックスした雰囲気ですぐに議論を掘り下げるような懇談会も毎回開催している。

以下は2011年度（2月まで）に行われた分子研コロキウムの一覧である。

回	開催日	テーマ	講演者
828	2011. 5.20	Cooling and Trapping of Molecules with Buffer Gases	Prof. John Doyle ( Department of Physics and Harvard-MIT Center for Ultracold Atoms, Harvard University, 京都大学大学院理学研究科客員教授 )
829	2011. 6.17	Kinetic Assembly of Porous Coordination Networks	Prof. Masaki Kawano ( Division of Advanced Materials Science, Pohang University of Science and Technology (POSTECH), Pohang ( South Korea ) )
830	2011. 7.15	「時間」の生命科学	上田 泰己 ( 理化学研究所発生・再生科学総合研究センターシステムバイオロジー研究プロジェクトリーダー )
831	2011.10.24	フォトリック・ナノ構造による光制御の現状——基礎から、大面積レーザ・太陽光発電への展開まで——	野田 進 ( 京都大学工学研究科教授 )
832	2012. 1.16	Direct Observation of Glassy Dynamics with Sub-Nanometer Resolution	Prof. Martin Gruebele ( University of Illinois, Urbana-Champaign )
833	2012. 2. 8	Real Complexity: Dynamics and Kinetics in Ever So Many Dimensions	Prof. R. Stephen Berry ( The University of Chicago )

#### 4-5-5 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

#### 4-5-6 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り組み～	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

分子科学研究所は、愛知県や岡崎市という地域性を重視して、小学校から高等学校までの様々なレベルで理科教育への協力を行ってきている。岡崎市内の高等学校には、文部科学省に応募して採択されたスーパーサイエンスハイスクール（以下SSHと略す）研究指定校、愛知県教育委員会より指定を受けた愛知スーパーハイスクール研究校、さらに、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（SPP）に応募して採択されたSPP実施校など、理科教育の充実を目指して独自の取り組みを行っているところも多い。分子研は、岡崎の3研究所で連携しつつ、もしくは単独で、これらの高校の活動に協力している。一方、小中学校を対象とした事業としては、出前授業・職場体験などが挙げられる。また、教員対象の支援も行っている。各事業について、本年度に実施されたものを中心として、以下に記載する。

### 4-6-1 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が2002～2005年度にSSH指定校となったことを契機として、分子科学研究所は同校のSSH事業に協力してきた。2007年度には、再度、指定を受け、5年間にわたる第二次SSH事業がスタートしている。これまでは、スーパーサイエンス部の支援が主な活動であったが、本年度に同校が「コアSSH」としての指定を受けたのに際して、他校も含む理科教員の研修をお願いしたいとの依頼が分子研に寄せられた。これに対応して、NMRの原理と応用に関する研修会を、2012年2月4日に開催した。県内から8名の高校教員が参加し、午前・午後を費やして講義ならびに実習を受講した。

### 4-6-2 あいち科学技術教育推進協議会

SSH研究指定校、愛知スーパーハイスクール研究校、さらに、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。当協議会は、毎年「科学三昧 in あいち」というイベントを開催している。当イベントには、県内の多数の高校から総数300名以上の参加者が集い、科学や技術についての先進的教育活動の紹介が行われる。第1回は2009年12月24日に岡崎コンファレンスセンターにて開催され、分子研からは「酸化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出展した。第2回は、2010年12月24日にウィルあいち（名古屋市）にて開催された。第3回は、再び岡崎コンファレンスセンターにて2011年12月27日に開催され、この際、分子研では研究所紹介の展示ブースを出展した。また、高校生による英語でのプレゼンテーションに対して、所内の学生・研究者がコメンテーターとして指導・助言を行った。

### 4-6-3 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	冨田 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
104	2011.11. 1	原子のさざ波と不思議な量子の世界	大森 賢治 教授

#### 4-6-4 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の秘密	小川 琢治 教授
美川中	2007. 2.26	生物から学ぶ光と色	小澤 岳昌 助教授
矢作西小	2007.12. 4	原子の世界	櫻井 英博 准教授
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
岩津中	2011. 7.11	電気を流す物の性質、磁界のはたらき	中村 敏和 准教授
河合中	2011.10.17	計算機シミュレーションで見る原子・分子の世界	伊藤 暁 助教授
常磐中	2011.10.19	光の不思議	寺内かえで 技術職員
六ツ美中	2012. 1.17	魔法の物質「触媒」ってなんだろう？	唯 美津木 准教授
竜南中	2012. 1.27	分子と光の秘密	平本 昌宏 教授
矢作北中	2012. 2.14	目で見えないものを見る光	岡本 裕巳 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

#### 4-6-5 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
2011	6	7	豊橋市立猿投台中学校，岡崎市立竜海中学校，岡崎市立常盤中学校，岡崎市立額田中学校，豊橋市立猿投台中学校，岡崎市立竜南中学校，豊田市立藤岡中学校

(2011年度の数値は2月末現在。)

#### 4-6-6 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。

##### (2) 未来の科学者賞

岡崎3機関では，2009年度より理科教育並びに科学の将来の発展に資することを目的とし，豊かな発想や地道な努力の積重ねなど特色のある自由研究を行った児童又は生徒を褒賞するため，岡崎市小中学校理科作品展に出展された自由研究課題の中から，岡崎3機関の各研究所5名ずつの計15名により構成される選考委員会により優秀者を選出し，未来の科学者賞を授与している。賞の運営は一般公開を行う研究所が持ち回りでっており，分子科学研究所においては，2009年10月17日の一般公開日に，選考委員会により選出された小学生8名，中学生2名の計10名の受賞者に対し，トロフィー，表彰状及び記念賞品の贈呈による表彰を行った。

##### (3) 地域連携「生徒作品表彰」

愛知教育大学附属岡崎中学校による写生会が毎年度，岡崎3機関において，「建物の配置や組み合わせの美しい自然科学研究機構を写生する」ことを目的として行われ，同校の生徒に対して岡崎3機関と触れる機会を提供している。この写生会は，2004年度の自然科学研究機構の創設以前より，毎年度受け入れている。この写生会をきっかけに，岡崎3機関を地域において身近な存在として感じてもらう機会として，2011年度から，同校の教育活動の一部である写生会における優秀者を岡崎3機関として表彰し，同校における生徒の教育の賛助となるよう，同校の協力の下，賞状等を贈呈している。2011年度は，9月8日に同校の式方式により表彰を行った。また，岡崎市立三島小学校では親子作品展が2012年2月15日～17日に行われ，同校の協力の下，2012年2月20日に賞状等を贈呈した。

## 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ため、3年に1回の公開となっている。公開日には実験室の公開と講演会が行われ、約2000人の見学者が分子研を訪れる。

回数	実施月日	備考
第1回	1979.11. 9 (Fri)	創設記念一般公開
第2回	1980.11.15 (Sat)	
第3回	1981.11.14 (Sat)	3研究所同時公開
第4回	1985. 5.11 (Sat)	10周年記念一般公開
第5回	1988.11. 5 (Sat)	入場者 1700人
第6回	1991.10.26 (Sat)	入場者 1974人
第7回	1994.11.12 (Sat)	入場者 2700人
第8回	1997.11.15 (Sat)	入場者 2400人
第9回	2000.10.21 (Sat)	入場者 1183人
第10回	2003.10.25 (Sat)	入場者 1600人
第11回	2006.10.21 (Sat)	入場者 2058人
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 明治大学附属中野中学・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	東海大学附属高輪台高等学校 愛知県技術士会 ほか
2011	13	222	愛知教育大学，立命館高等学校，トヨタ紡織株式会社基礎 研究所，愛知県高等学校工業教育研究会化学部会，東海大 学附属高輪台高等学校，新潟県立柏崎高等学校，浜松日体 中学校・高等学校，山梨県立都留高等学校，東京都立科学 技術高等学校，岡崎信用金庫，いちい信用金庫次世代クラ ブ，幸田町教育研究会，社団法人韓国産学研協会

( 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。)

( 2011 年度の数値は，12 月末現在)

個人申込み ( 分子研展示室 )

年度	受入件数	見学者数
2010	13	33
2011	13	35

## 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を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.jsps.go.jp/j-acore/00gaiyou\\_acore.html](http://www.jsps.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50nm、励起光Ti:sapphire（780-920nm 100fs）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0.17nm、格子像分解能0.10nm。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 $\alpha$ 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 <sup>1</sup> 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 <sup>1</sup> 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 <sup>3</sup> 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・長寿命化に向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。

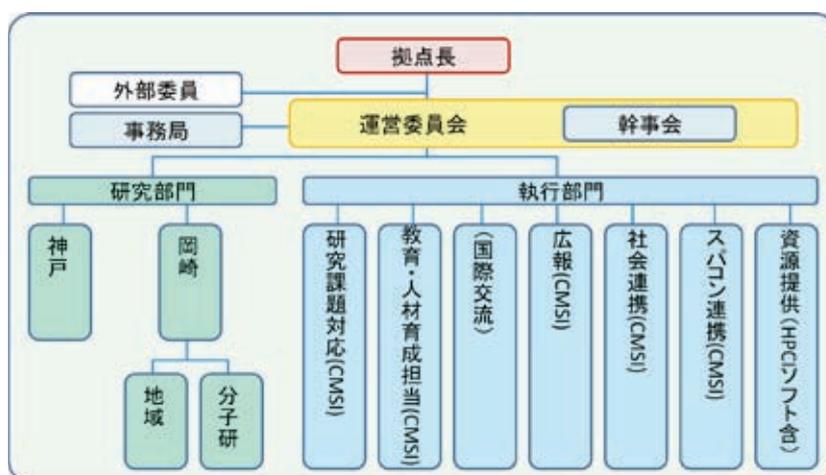


図3 計算分子科学研究拠点（TCCI）体制

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](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](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  $\mu\text{m}$  まで広がった中赤外光スペクトルを発生させた。2  $\mu\text{m}$  と 20  $\mu\text{m}$  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 Rb<sub>2</sub> 分子を用いることが望ましい。極低温の Rb<sub>2</sub> 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。



## 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
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
2010.9. ~ 2011.8.	2011	252	31

## 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。金属内包フラーレン，カーボンナノチューブ，グラフェンナノリボン等を取り上げて，化学修飾あるいはドーピングによる機能化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，高周期元素を骨格にもつ新規な化合物の構造，結合特性，電子特性，反応等を理論と計算および実験と共同して明らかにした。
- c) 密度汎関数理論は，計算コストが低いので相当に大きい分子の大規模計算を可能にしている。しかしこれまでに開発された代表的な汎関数の多くは，超分子，ゲスト-ホスト相互作用，分子認識，自己集合，生理活性，タンパク質の立体構造等で本質的な働きをする非共有結合相互作用をうまく取り扱えない。このために，2次のMøller-Plesset摂動(MP2)法の高並列化アルゴリズムを開発した。巨大な分子を効率的に計算するためには，全系を部分系に分割して取り扱うフラグメント分子軌道(FMO)法や分割統治(DC)法の高速化と高並列化を行い，ナノ分子や生体分子のMP2計算を実行できるようにした。これからの計算化学では，高速化ばかりでなく高精度化が重要になる。すなわち，Schrödinger方程式の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)法を考案して，基底状態および励起状態の高精度計算を可能にした。この計算方法を高速化するのに有効な新しいサンプリング法を開発した。

B-1) 学術論文

M. OKADA, T. NAKAHODO, M. O. ISHITSUKA, H. NIKAWA, T. TSUCHIYA, T. AKASAKA, T. FUJIE, T. YOSHIMURA, Z. SLANINA and S. NAGASE, "Highly Regioselective Synthesis of Bis-Aziridino[60]fullerene with Sulfilimine," *Chem. -Asian J.* **6**, 416-423 (2011).

X. DING, J. GUO, X. FENG, Y. HONSHO, J. -D. GUO, S. SEKI, P. MAITARAD, A. SAEKI, S. NAGASE and D. JIANG, "Synthesis of Metallophthalocyanine Covalent Organic Frameworks that Exhibit High Carrier Mobility and Photoconductivity," *Angew. Chem., Int. Ed.* **50**, 1289-1293 (2011).

- H. KURIHARA, X. LU, Y. IIDUKA, N. MIZOROGI, Z. SLANINA, T. TSUCHIYA, T. AKASAKA and S. NAGASE**, “Sc<sub>2</sub>C<sub>2</sub>@C<sub>80</sub> Rather than Sc<sub>2</sub>@C<sub>82</sub>: Templated Formation of Unexpected C<sub>2v</sub>(5)-C<sub>80</sub> and Temperature-Dependent Dynamic Motion of Internal Sc<sub>2</sub>C<sub>2</sub> Cluster,” *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 2382–2385 (2011).
- S. SATO, S. SEKI, Y. HONSHO, L. WANG, H. NIKAWA, G. LUO, J. LU, M. HARANAKA, T. TSUCHIYA, S. NAGASE and T. AKASAKA**, “Semi-Metallic Single-Component Crystal of Soluble La@C<sub>82</sub> Derivative with High Electron Mobility,” *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 2766–2771 (2011).
- T. YANG, X. ZHAO and S. NAGASE**, “Di-Lanthanide Encapsulated into Large Fullerene C<sub>100</sub>: A DFT Survey,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 5034–5037 (2011).
- T. TANIKAWA, M. SAITO, J. -D. GUO and S. NAGASE**, “Synthesis, Structures and Optical Properties of Trisilasumanenes and Its Related Compounds,” *Org. Biomol. Chem.* **9**, 1731–1735 (2011).
- M. YAMADA, M. MINOWA, S. SATO, Z. SLANINA, T. TSUCHIYA, Y. MAEDA, S. NAGASE and T. AKASAKA**, “Regioselective Cycloaddition of La<sub>2</sub>@I<sub>h</sub>-C<sub>80</sub> with Tetracyanoethylene Oxide: Formation of an Endohedral Dimetallofullerene Adduct Featuring Enhanced Electron-Accepting Character,” *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 3796–3799 (2011).
- J. MIN, J. WON, Y. S. KANG and S. NAGASE**, “Benzimidazole Derivatives in the Electrolyte of New-Generation Organic Dye-Sensitized Solar Cells with an Iodine-Free Redox Mediator,” *J. Photochem. Photobiol., A* **219**, 148–153 (2011).
- Y. MAEDA, K. KOMORIYA, K. SODA, J. HIGA, T. NAKAMURA, M. YAMADA, T. HASEGAWA, T. AKASAKA, T. SAITO, J. LU and S. NAGASE**, “Preparation and Characterization of Transparent and Conductive Thin Films of Single-Walled Carbon Nanotubes,” *Nanoscale* **3**, 1904–1909 (2011).
- M. MARUYAMA, J. -D. GUO, S. NAGASE, E. NAKAMURA and Y. MATSUO**, “Isolation of Planar Four-Membered Aromatic Systems by Using Confined Spaces of Cobalt Pentaary[60]fullerene Complexes,” *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 6890–6893 (2011).
- M. O. ISHITSUKA, S. SANO, H. ENOKI, S. SATO, H. NIKAWA, T. TSUCHIYA, Z. SLANINA, N. MIZOROGI, M. T. H. LIU, T. AKASAKA and S. NAGASE**, “Regioselective Bis-Functionalization of Endohedral Dimetallofullerene, La<sub>2</sub>C<sub>80</sub>: Extremal La–La Distance,” *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 7128–7134 (2011).
- Z. SLANINA, F. UHLIK, S. -L. LEE, L. ADAMOWICZ, T. AKASAKA and S. NAGASE**, “Computed Stabilities in Metallofullerene Series: Al@C<sub>82</sub>, Sc@C<sub>82</sub>, Y@C<sub>82</sub>, and La@C<sub>82</sub>,” *Int. J. Quantum Chem.* **111**, 2712–2718 (2011).
- L. FENG, S. G. RADHAKRISHNAN, N. MIZOROGI, Z. SLANINA, H. NIKAWA, T. TSUCHIYA, T. AKASAKA, S. NAGASE, N. MARTIN and D. M. GULDI**, “Synthesis and Charge-Transfer Chemistry of La<sub>2</sub>@I<sub>h</sub>-C<sub>80</sub>/Sc<sub>3</sub>N@I<sub>h</sub>-C<sub>80</sub>-Zinc Porphyrin Conjugates: Impact of Endohedral Cluster,” *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 7608–7618 (2011).
- X. LU, T. AKASAKA and S. NAGASE**, “Chemistry of Endohedral Metallofullerenes: The Role of Metals,” *Chem. Commun.* (Feature Article) **47**, 5942–5957 (2011).
- L. FENG, Z. SLANINA, S. SATO, K. YOZA, T. TSUCHIYA, N. MIZOROGI, T. AKASAKA, S. NAGASE, N. MARTIN and D. M. GULDI**, “Covalently Linked Porphyrin-La@C<sub>82</sub> Hybrids: Structural Elucidation and Investigation of Intramolecular Interactions,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **50**, 5909–5912 (2011).
- Y. MAEDA, T. TSUCHIYA, X. LU, Y. TAKANO, T. AKASAKA and S. NAGASE**, “Current Progress on the Chemical Functionalization and Supramolecular Chemistry of M@C<sub>82</sub>,” *Nanoscale* **3**, 2421–2429 (2011).

- F. HAJJAJ, K. TASHIRO, H. NIKAWA, N. MIZOROGI, T. AKASAKA, S. NAGASE, K. FURUKAWA, T. KATO and T. AIDA, "Ferromagnetic Spin Coupling between Endohedral Metallofullerene La@C<sub>82</sub> and a Cyclodimeric Copper Porphyrin upon Inclusion," *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 9290–9292 (2011).
- X. GAO, J. L. HODGSON, D. E. JIANG, S. B. ZHANG, S. NAGASE, G. P. MILLER and Z. CHEN, "Open-Shell Singlet Character of Stable Derivatives of Nonacene, Hexacene and Teranthene," *Org. Lett.* **13**, 3316–3319 (2011).
- X. LU, H. NIKAWA, T. KIKUCHI, N. MIZOROGI, Z. SLANINA, T. TSUCHIYA, S. NAGASE and T. AKASAKA, "Radical Derivatives of Insoluble La@C<sub>74</sub>: X-Ray Structures, Metal Positions, and Isomerization," *Angew. Chem., Int. Ed.* **50**, 5909–5912 (2011).
- M. KATOUDA, M. KOBAYASHI, H. NAKAI and S. NAGASE, "Two-Level Hierarchical Parallelization of Second-Order Møller–Plesset Perturbation Calculations in Divide-and-Conquer Method," *J. Comput. Chem.* **32**, 2756–2764 (2011).
- X. LU, Y. LIAN, C. M. BEAVERS, N. MIZOROGI, Z. SLANINA, S. NAGASE and T. AKASAKA, "Crystallographic X-Ray Analyses of Yb@C<sub>2v</sub>(3)-C<sub>80</sub> Reveal a Feasible Rule That Governs the Location of a Rare Metal inside a Medium-Sized Fullerene," *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 10772–10775 (2011).
- G. LUO, X. QIAN, H. LIU, R. QIN, J. XHOU, L. LI, Z. GAO, E. WANG, W. -N. MEI, J. LU, Y. LI and S. NAGASE, "Quasiparticle Energies and Excitonic Effects of the Two-Dimensional Carbon Allotrope Graphdiyne: Theory and Experiment," *Phys. Rev. B* **84**, 075439 (5 pages) (2011).
- T. NAKAHODO, M. O. ISHITUKA, Y. TAKANO, T. TSUCHIYA, T. AKASAKA, M. A. HERRANZ, N. MARTIN, D. M. GULDI and S. NAGASE, "Organosulfur-Based Fullerene Materials," *Phosphorus, Sulfur Silicon Relat. Elem.* **186**, 1308–1311 (2011).
- T. YANG, X. ZHAO, Q. XU, C. ZHOU, L. HE and S. NAGASE, "Non-IPR Endohedral Fullerene Yb@C<sub>76</sub>: Density Functional Theory Characterization," *J. Mater. Chem.* **21**, 12206–12209 (2011).
- T. TSUCHIYA, M. WIELOPOLSKI, N. SAKUMA, N. MIZOROGI, T. AKASAKA, T. KATO, D. M. GULDI and S. NAGASE, "Stable Radical Anions inside Fullerene Cages: Formation of Reversible Electron Transfer Systems," *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 13280–13283 (2011).
- X. DING, L. CHEN, Y. HONSHO, X. FENG, O. SAENGSAWANG, J. -D. GUO, A. SAEKI, S. SEKI, S. IRLE, S. NAGASE, V. PARASUK and D. JIANG, "An n-Channel Two-Dimensional Covalent Organic Framework," *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 14510–14513 (2011).
- K. SAWAI, Y. TAKANO, M. IZQUIERDO, S. FILIPPONE, N. MARTIN, Z. SLANINA, N. MIZOROGI, M. WAELCHLI, T. TSUCHIYA, T. AKASAKA and S. NAGASE, "Enantioselective Synthesis of Endohedral Metallofullerenes," *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 17746–17752 (2011).
- M. SAITO, T. KUWABARA, K. ISHIMURA and S. NAGASE, "Synthesis of a Novel Lithocene that has Aromatic-Like Nature without Nonaromatic Rings," *Chem. –Asian J.* **6**, 2907–2910 (2011).
- H. LEI, J. -D. GUO, J. C. FETTINGER, S. NAGASE and P. P. POWER, "Synthesis, Characterization, and CO Elimination of Ferrio-Substituted Two-Coordinate Germylenes and Stannylenes," *Organometallics* **30**, 6316–6322 (2010).
- S. A. MIAN, X. GAO, S. NAGASE and J. JANG, "Adsorption of Catechol on a Wet Silica Surface: Density Functional Theory Study," *Theor. Chem. Acc.* **130**, 333–339 (2011).

L. WANG, J. ZHENG, J. ZHOU, R. QIN, H. LI, W. -N. MEI, S. NAGASE and J. LU, "Tuning Graphene Nanoribbon Field Effect Transistors via Controlling Doping Level," *Theor. Chem. Acc.* **130**, 483–489 (2011).

Y. OHTSUKA and S. NAGASE, "Projector Monte Carlo Method Based on Slater Determinants: A New Sampling Method for Singlet State Calculations," *Theor. Chem. Acc.* **130**, 501–505 (2011).

G. LUO, L. WANG, H. LI, R. QUI, J. ZHOU, L. LI, Z. GAO, W. -N. MEI, J. LU and S. NAGASE, "Polarized Nonresonant Raman Spectra of Graphene Nanoribbons," *J. Phys. Chem. C* **115**, 24463–24468 (2011).

J. ZHOU, L. WANG, R. QIN, J. ZHENG, W. N. MEI, P. A. DOWBEN, S. NAGASE, Z. GAO and J. LU, "Structure and Electronic and Transport Properties of Transition Metal Intercalated Graphene and Graphene-Hexagonal-Boron-Nitride Bilayer," *J. Phys. Chem. C* **115**, 25273–25280 (2011).

### B-3) 総説, 著書

T. LU, T. AKASAKA and S. NAGASE, "Rare Earth Metals inside Fullerenes—Endohedral Metallofullerenes (EMFs)," in *Rare Earth Coordination Chemistry—Fundamentals and Applications*, C. Huang, Ed., John Wiley, Chapter 7, pp. 273–308 (2010).

山田道夫, 佐藤悟, 赤阪健, 永瀬 茂, 「金属内包フラーレン——その構造と電子的特性を制御する」*化学* **66**, 68–69 (2011).

永瀬 茂, 「ケイ素・ゲルマニウム・スズ・鉛の特徴と炭素との比較」*炭素学——基礎物性から応用展開まで*, 田中一義, 東原秀和, 篠原久典編, 39–46 (2011).

### B-4) 招待講演

S. NAGASE, "Interesting Bonds and Structures Provided by Heavier Main Group Elements and Transition Metals," 2011 Congress of World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2011), Santiago de Compostela (Spain), July 2011.

S. NAGASE, "Interesting Bonds Formed by Heavier Main Group Elements," 7<sup>th</sup> Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VII), Tokyo (Japan), September 2011.

永瀬 茂, 「理論計算と実験のインタープレイ」第22回基礎有機化学討論会, つくば, 2011年9月.

永瀬 茂, 「高周期典型元素化学の特徴——基礎的な理解」第8回有機元素化学セミナー, 京都, 2011年11月.

### B-6) 受賞, 表彰

永瀬 茂, 科学技術分野の文部科学大臣表彰・科学技術賞(研究部門)(2011).

### 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 (2006–2009).

*Theochem*, Editorial Board (2007–2010).

*Comput. Theor. Chem.*, Editorial Board (2011–).

*Chem. Rec.*, Editorial Board (2011–).

#### B-8) 大学での講義, 客員

筑波大学大学院, 集中講義「化学特別講義」2011年1月17日–18日.

城西大学大学院, 集中講義「有機物質設計特論」2011年7月28日–29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。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。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とそのデバイス科学への展開
- 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
- d) 金属クラスターの電子物性

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 理論や計算手法の開発と計算機能力の飛躍的な向上のおかげで，次世代量子デバイス候補となり得るナノ構造体の個々の物性の理解は格段に進んでいる。しかしその一方で，大容量，超高速，超極小，高効率，新規化学反応性等，次世代量子デバイスに課せられた要求レベルは非常に高く，個々の物性の理解と機能性量子デバイス開発の間には未だ大きな隔たりがあることも事実である。この溝を埋めるためには，機能性発現のメカニズムの解明を行い，任意の機能性を物質に付加する方法を見出す必要がある。我々は，ナノ構造体における機能性発現には光誘起電子ダイナミクスが極めて重要な鍵を握ると考える。本研究課題では，ナノ構造体における実時間・実空間電子・電磁場ダイナミクスの第一原理計算を行い，ナノ構造体機能性発現のメカニズムを根源から理解することを目標として研究を進めた。本年はナトリウムクラスターにおけるプラズモン励起の詳細を明らかにした。また，電子ダイナミクス法の超並列化計算に向けたプログラム開発を集中的に行った。
- 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，吸着系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。昨年に引き続き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。更に，OCM 法を第一原理計算と組み合わせ，より実在系に近い表面吸着系の励起状態を含む電子状態を記述することに成功した。
- 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。本年は特に理論計算プログラムの開発を進め，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の詳細を明らかにした。我々の理論では熱緩和の効果を取り込む事ができるが，温度によって励起子ポラリトンの伝播経路が変わるだけでなく，経路そのものをコントロールすることにも成功した。
- d) 金ナノクラスターの超高速電子的緩和過程の詳細を実験グループと共同で明らかにした。対象とする金ナノクラスターの幾何学的構造の影響を受けた特異な緩和過程が起こることを見出した。

#### B-1) 学術論文

**T. YASUIKE and K. NOBUSADA**, “Open-Boundary Cluster Model Implemented in First-Principles Calculations for Electronic Excited States of an Adsorbate-Surface System,” *Phys. Rev. B* **84**, 245408 (8 pages) (2011).

**T. YASUIKE, K. NOBUSADA and M. HAYASHI**, “Collectivity of Plasmonic Excitations in Small Sodium Clusters with Ring and Linear Structures,” *Phys. Rev. A* **83**, 013201 (7 pages) (2011).

**Y. KUBOTA and K. NOBUSADA**, “Exciton–Polariton Transmission in Quantum Dot Waveguides and a New Transmission Path due to Thermal Relaxation,” *J. Chem. Phys.* **134**, 044108 (8 pages) (2011).

**K. WATANABE, Y. MATSUMOTO, T. YASUIKE and K. NOBUSADA**, “Adsorbate-Localized versus Substrate-Mediated Excitation Mechanisms for Generation of Coherent Cs–Cu Stretching Vibration at Cu(111),” *J. Phys. Chem. A* **115**, 9528–9535 (2011).

**M. Y. SFEIR, H. QIAN, K. NOBUSADA and R. JIN**, “Ultrafast Relaxation Dynamics of Rod-Shaped 25-Atom Gold Nanoclusters,” *J. Phys. Chem. C* **115**, 6200–6207 (2011).

**H. HIMENO, K. MIYAJIMA, T. YASUIKE and F. MAFUNE**, “Gas Phase Synthesis of Au Clusters Deposited on Titanium Oxide Clusters and Their Reactivity with CO Molecules,” *J. Phys. Chem. A* **115**, 11479–11485 (2011).

#### B-4) 招待講演

**K. NOBUSADA**, “Photoinduced Electron Dynamics in Nanostructures: Nonuniform and Self-Consistent Light-Matter Interactions,” The Seventh Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VII), Waseda University, Tokyo (Japan), September 2011.

**K. NOBUSADA**, “Nonuniform and Self-Consistent Light-Matter Interaction Theory for Electron Dynamics in Nanostructures,” The 2nd France-Japan Workshop on Nanophotonics, Toba, November 2011.

信定克幸, 「表面吸着系のコヒーレント核振動ダイナミクスの理論」自然科学における階層と全体シンポジウム, 名古屋市, 2011年1月.

信定克幸, 「ナノ構造体における電子・電磁場ダイナミクスの大規模並列化計算」スーパーコンピューターワークショップ 2011, 岡崎市, 2011年1月.

安池智一, 「金属表面吸着種の光誘起コヒーレント振動の誘起メカニズム」第2回表面科学若手研究会, 理化学研究所, 2011年11月.

安池智一, 「複素対称行列の固有値問題に帰着する分子の諸現象について」日本応用数理学会2011年若手の会単独研究会, 早稲田大学, 2011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–).

The Seventh Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics, Local Organizing Committee (2010–2011).

#### 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–.

#### 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 Grant,「有限少数多体系における特異な現象の発見とその解釈」信定克幸 (2001年–2002年).

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

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–2010年).

科研費若手研究(B),「開放系電子状態理論による界面光分子科学の基礎研究」安池智一 (2011年–).

#### C) 研究活動の課題と展望

理論や計算手法の開発と計算能力の飛躍的な向上のおかげで、次世代量子デバイス候補となり得るナノ構造体の個々の物性の理解は格段に進んでいるが、その一方で、次世代量子デバイスに課せられた要求レベルは非常に高く、個々の物性の理解と機能性量子デバイス開発の間には未だ大きな隔たりがあることも事実である。この溝を埋めるためには、機能性発現のメカニズムの解明を行い、任意の機能性を物質に付加する方法を見出す必要がある。我々は、ナノ構造体における機能性発現には光誘起電子ダイナミクスが極めて重要な鍵を握ると考え、ナノ構造体機能性発現のメカニズムを根源から理解するとともに、光エネルギー伝播、超高速スイッチング、量子データ転送、光触媒作用等の光・電子機能を持つ量子デバイスを計算により提案し設計することを目指している。また、より実在系に近い物質系を対象とするためにも、スーパーコンピュータを駆使した数値計算的研究も極めて重要な研究課題と考える。超並列計算に向けた数値計算プログラムの開発も同時に進めている。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、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進めている。

柳 井 毅 (准教授) (2007年1月1日着任)

A-1) 専門領域：量子化学，理論化学，計算化学

A-2) 研究課題：

- a) 密度行列繰り込み群に基づく多参照電子状態理論の開発
- b) F12 相関因子を用いた正準トランスコリレート理論の開発

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、金属化合物の擬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、原子間スケールで擬縮退した電子状態に由来する強い電子相関効果であり、この相関効果の問題の複雑さは分子サイズに対して指数関数的に複雑化し、既存の量子化学計算法ではこの現象を効率よく高精度で計算することができない。これまで、当研究室では、このような距離スケールな強い複雑な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てきた。また、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) を行い、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。本研究では、密度行列繰り込み群を出発して動的電子相関を二次の摂動論から効率よく見積もる DMRG-CASPT2 (Complete-Active-Space Second-order Perturbation Theory) 法を開発した。CASPT2 法は、オリジナルには Roos らによって開発されてきたが、従来法では適用可能な活性化軌道のサイズに限界があったが、本手法はその適用サイズを飛躍的に広げた。DMRG-CASPT2 法を用いて、Cr<sub>2</sub> の解離ポテンシャルの計算に応用し、高精度に実験から見積もられたポテンシャル曲線を再現した。
- b) F12 相関因子を用いた正準トランスコリレート理論を導出し分子系に応用した。量子化学の電子相関計算において、価電子の動的相関は定量的な記述において重要である。一般的には、摂動論、配置間相互作用法、結合クラスター法が用いられるが、これらの計算法の精度は、共通して、計算の基盤となる基底関数のクオリティに高く依存し、また、基底関数の数に対する基底関数誤差の収束は遅いことが知られている。(解析的には  $L^{-3}$  で収束。Lは基底関数の最高次角運動量の量子数。) F12 相関理論は、動的相関の電子カスプを対関数をもちいて解析的にレギュレートする手法として成功しており、近年盛んに研究が進められている。本研究は、この F12 理論の相関因子をハミルトニアンに事前に繰り込み、相関したハミルトニアンを構築する理論を開発した。

B-1) 学術論文

**W. MIZUKAMI, T. NAKAJIMA, K. HIRAO and T. YANAI**, "A Dual-Level Approach to Four-Component Relativistic Density-Functional Theory," *Chem. Phys. Lett.* **508**, 177–181 (2011).

**Y. KURASHIGE and T. YANAI**, "Second-Order Perturbation Theory with a DMRG Self-Consistent Field Reference Function: Theory and Application to the Study of Chromium Dimer," *J. Chem. Phys.* **135**, 094104 (9 pages) (2011).

B-3) 総説, 著書

柳井 毅, 天能精一郎, 平田聡, 中野晴之, 安田耕二と共著, 「第1章 電子状態の計算科学」, 「分子システムの計算科学——電子と原子の織り成す多体系のシミュレーション——[計算科学講座6]」, 共立出版 (2010). ISBN978-4-320-12271-0

B-4) 招待講演

T. YANAI, “Advanced Multireference Method for Molecular Quantum Electronic States,” The 4th Czech-Slovak-Japan Symposium on Theoretical Chemistry, Prague (Czech), May 2011.

T. YANAI, “Advanced multireference methods for molecular strongly-correlated electronic states,” European Seminar on Computational Methods in Quantum Chemistry 2011, Drøbak (Norway), June 2011.

T. YANAI, “Advanced Multireference Quantum Chemistry with Large Active Space,” The Seventh Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics, Tokyo (Japan), September 2011.

T. YANAI, “Efficient multireference methods based on large active space density matrix renormalization group,” Recent Advances in Many-Electron Theories (RAMET) II 2011, Puri (India), December 2011.

柳井 毅, 「密度行列繰り込み群を用いた多参照電子状態計算」, 量子化学ウインタースクール~基礎理論を中心として~(講師) 岡崎コンファレンスセンター, 2011年12月.

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 (2007-2012).

HPCI 戦略プログラム 分野2 「新物質・エネルギー創成」コミュニティメンバー (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, 「機能分子基礎理論」, 2011年12月13日-15日.

B-9) 学位授与

水上 涉, 「Quantum chemistry of  $\pi$  conjugated systems through multireference theory」, 2011年3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) 「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 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(DMRG)」「DMRG-正準変換理論」「DMRG-CASPT2」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であることを実証してきた。本手法の威力を発揮して,未知なる電子状態を解明する理論計算を推し進める。

## 理論分子科学第二研究部門

平 田 文 男 ( 教授 ) ( 1995 年 10 月 16 日 着 任 )

A-1) 専門領域：理論化学，溶液化学

A-2) 研究課題：

- a) 溶液内分子の電子状態に対する溶媒効果と化学反応の理論
- b) 溶液中の集団的密度揺らぎと非平衡化学過程
- c) 生体高分子の溶媒和構造の安定性に関する研究
- d) 界面における液体の統計力学

A-3) 研究活動の概略と主な成果

当研究グループでは統計力学理論（3D-RISM/RISM 理論）に基づき液体・溶液の構造，ダイナミクス，相転移を含む熱力学挙動，およびその中の化学反応を解明する理論の構築を目指して研究を進めている。特に，過去数年の研究において「分子認識の理論」とも呼ぶべき新しい統計力学理論を構築しつつある。分子認識過程には二つの物理化学的要素が伴う。ひとつは蛋白質とリガンドの複合体の熱力学的安定性であり，この過程を律するのは複合体形成前後の自由エネルギー変化である。もうひとつの要素は蛋白質の「構造揺らぎ」である。蛋白質内に基質分子を取り込む過程（分子認識）は単に「鍵と鍵孔」のような機械的な適合過程ではなく，多くの場合，蛋白質の構造揺らぎを伴う。このような蛋白質の構造揺らぎと共役した化学過程を取り扱うために，溶液のダイナミクスと共役した蛋白質の構造揺らぎを記述する理論の発展は今後の重要な課題である。

- a) 電解質水溶液中におけるテロメア DNA の最安定構造：テロメアは特徴的な繰り返し配列を持つ DNA の末端部分で，染色体の末端部分を保護している。そのため癌の増殖や老化などの生命現象に密接に関係している。テロメアは一般的な二重螺旋構造ではなく，陽イオンを中心に配置したグアニン四重構造（G-quadruplex）を形成する。この G-quadruplex 形成において多様なループの可能性があり，いくつかのモデル構造（basket 型，chair 型，hybrid 型，propeller 型）が提案されている。また，中心に配置される陽イオンによって構造が変化することも知られている。Na<sup>+</sup>イオン存在下の溶媒中では basket 型と呼ばれる構造を取るが，KCl 溶液中の構造は，まだ，決定されていない。本研究では 3D-RISM 理論に基づき，KCl 溶液中でのテロメアの安定構造を予測することを目的とした。

まず，3D-RISM 理論がイオン溶液中でのテロメア構造の実験結果を正しく再現できるかどうかを確認するため，NaCl 溶液中でのテロメアの自由エネルギーを計算した。その結果，実験結果と一致して basket 型が最も安定であるという結果が得られた。この結果により我々の手法がテロメアの構造安定性を調べるのに有効である事が確認できた。

そこで，KCl 0.1M 水溶液中での自由エネルギーを求めたところ，chair 型が最も安定であることが分かった。この結果は，その後，崇城大学のグループによる FRET の実験によって確認された。

以上の結果よりテロメアの構造は陽イオンの種類によって変化し，K イオン存在下の溶媒中では chair 型が安定である事が明らかになった。[ *J. Phys. Chem. B* **115**, 2408 (2011) に既報 ]

- b) 理論は薬づくりにどう役立つか——uu-3D-RISM に基づく創薬研究に向けた新たなアプローチ——：本研究では，従来の 3D-RISM 理論を改良して，直接，創薬に応用できる新しい理論を uu-3D-RISM 理論を提案し，その応用例として，Phospholipase A2 に対するアスピリンの結合モードを解析した。このタンパク質は，発熱や痛みのもとになるアラキドン

酸を合成することで知られている。また近年、非ステロイド性の薬として有名なアセチルサリチル酸（アスピリン）も結合することが実験によって明らかにされた。新たな薬の開発にもつながるため、創薬分野でモデルタンパク質の一つとされている。uu-3D-RISM 理論を用いてこのようなタンパク質 - リガンド分子系を解くと、タンパク質の内外におけるリガンド分子の分布関数を求めることができる。分布関数は、その位置にどのくらいの確率でリガンド分子が存在するかを指標を表す関数である。従って、分布関数が大きい値を取る箇所は、そこにリガンドが結合しやすいことを意味する。この分布関数を解析すれば、自動的にリガンド分子がどこにどのように結合するのかが分るのである。

今回は、そのような解析のためのスコア関数を定義し、それに基づいてリガンド分子であるアスピリンの位置および配向を決定した。解析結果、3D-RISM 理論から予測した構造が X 線結晶解析で得られた構造とほぼ一致していることが分かった。[ *J. Chem. Theory Comput.* **7**, 3803 (2011) に既報 ]

スコア関数を用いた解析は、企業などの創薬研究でも同じように行われているが、その多くは物理化学的な根拠を持っていない。言い換えると、多くの場合、鍵と鍵穴のように幾何学的な議論しかしていない。我々の研究の強みは、分布関数という物理化学的に重要な意味を持つ量を基にしていることである。今回のような解析が確立すれば、より確かな創薬研究が可能になると考えている。

#### B-1) 学術論文

**H. TANAKA, N. YOSHIDA, Y. IKUTA, Y. KIYOTA and F. HIRATA**, “RISM-SCF Study of the Solvation Effect on a Nucleophilic Aromatic Substitution between 4-Fluoronitrobenzen and Azide Anion,” *Int. J. Liq. State Sci.* **2**, 15–24 (2010).

**N. YOSHIDA, Y. KIYOTA and F. HIRATA**, “The Electronic-Structure Theory of a Large-Molecular System in Solution: Application to the Intercalation of Proflavine with Solvated DNA,” *J. Mol. Liq.* **159**, 83–92 (2011).

**Y. KIYOTA, N. YOSHIDA and F. HIRATA**, “Affinity of Small Ligands to Myoglobin Studied by the 3D-RISM Theory,” *J. Mol. Liq.* **159**, 93–98 (2011).

**Y. MARUYAMA, T. MATSUSHITA, R. UEOKA and F. HIRATA**, “Solvent and Salt Effects on Structural Stability of Human Telomere,” *J. Phys. Chem. B* **115**, 2408–2416 (2011).

**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. II. Thermodynamic Integration along Reaction Coordinates,” *J. Chem. Phys.* **134**, 44127–44144 (2011).

**T. IMAI, N. MIYASHITA, Y. SUGITA, A. KOVALENKO, F. HIRATA and A. KIDERA**, “Functionality Mapping on Internal Surfaces of Multidrug Transporter AcrB Based on Molecular Theory of Solvation: Implications for Drug Efflux Pathway,” *J. Phys. Chem. B* **115**, 8288–8295 (2011).

**D. J. SINDHIKARA**, “Modular Reweighting Software for Statistical Mechanical Analysis of Biased Equilibrium Data,” *Comput. Phys. Commun.* **182**, 2227–2231 (2011).

**D. J. SINDHIKARA, N. YOSHIDA and M. KATAOKA**, “Solvent Penetration in Photoactive Yellow Protein R52Q Mutant: A Theoretical Study,” *J. Mol. Liq.* **164**, 120–122 (2011).

**Y. KIYOTA, N. YOSHIDA and F. HIRATA**, “A New Approach for Investigating the Molecular Recognition of Protein: Toward Structure-Based Drug Design Based on the 3D-RISM Theory,” *J. Chem. Theory Comput.* **7**, 3803–3815 (2011).

B-3) 総説, 著書

平田文男, 『『次世代スパコン』で何ができるか?——蓮舫議員の疑問に答えて』*日本の科学者* vol. 45(No. 12), 16–21 (2010).

**Y. MARUYAMA, N. YOSHIDA and F. HIRATA**, “Electrolytes in Biomolecular Systems Studied with the 3D-RISM/RISM Theory,” *Interdiscip. Sci. Comput. Life Sci.* **3**, 1–18 (2011).

**S. PHONGPHANPHANEE, N. YOSHIDA and F. HIRATA**, “Molecular Recognition Explored by a Statistical-Mechanics Theory of Liquids,” *Curr. Pharm. Des.* **17**, 1740–1757 (2011).

吉田紀生, 丸山 豊, **S. PHONGPHANPHANEE**, 清田泰臣, 平田文男, 『分子認識の統計力学と生体機能』*生物物理* **51**(5), 222–225 (2011).

B-4) 招待講演

平田文男, 『分子認識の統計力学と生体機能』自然科学研究機構岡崎統合バイオサイエンスセンター「10周年記念シンポジウム」岡崎コンファレンスセンター, 2011年2月.

**F. HIRATA**, “Statistical Mechanics of Molecular Liquids Reveals Elementary Processes in Life Phenomena,” Third Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: —Experiments and Simulations,” Jeju (Korea), February–March 2011.

**F. HIRATA**, “Exploring life phenomena with a theory featuring chemical ‘specificity’ and physical ‘universality,’” Elemental Processes of Life Phenomena, revealed by the RISM/3D-RISM Theory, Okazaki, March 2011.

**F. HIRATA**, “Theory of Molecular Recognition and its Application to Drug Design,” ICCS2011, Singapore (Singapore), June 2011.

**F. HIRATA**, “Exploring life phenomena with a theory featuring chemical ‘specificity’ and physical ‘universality,’” Statistical Mechanics Approaches to Biomolecular Applications, Seoul (Korea), June 2011.

**F. HIRATA**, “Collaboration between computer and computational scientists make high performance computing on the K-computer a reality,” ISC’11 HPC in Asia Workshop, Hamburg (Germany), June 2011.

**F. HIRATA**, “Statistical Mechanics Theory of Molecular Recognition and its Application to Pharmaceutical Design,” Telluride Workshop on Free Energy Simulation, Telluride (U.S.A.), July 2011.

平田文男, 『高速 3D-RISM の開発について』CMSI・計算分子科学研究拠点第2回研究会, 神戸, 2011年8月.

**F. HIRATA**, “Exploring life phenomena with a Statistical Mechanics of Molecular Solution,” 32th International Conference on Solution Chemistry, La Grande Motte (France), August–September 2011.

**F. HIRATA**, “Exploring life phenomena with a theory featuring chemical ‘specificity’ and physical ‘universality,’” Israel-Japan Joint Symposium on Biophysics: Protein Dynamics “From single molecules to whole cell,” Biophysics Society meeting in Japan, Himeji, September 2011.

**F. HIRATA**, “Exploring life phenomena with a Statistical Mechanics of Molecular Solution,” The 71<sup>st</sup> Okazaki International Conference “New perspectives on molecular science of glycoconjugate,” Okazaki, October 2011.

平田文男, “Exploring life phenomena with a Statistical Mechanics of Molecular Solution,” 液体・溶液の微視的構造からダイナミクスまで～最近の研究結果から見えてくるもの～, 愛媛大学, 松山市, 2011年11月.

吉田紀生, 『液体の積分方程式理論に基づく溶液内生体分子の電子状態理論』液体・溶液の微視的構造からダイナミクスまで～最近の研究結果から見えてくるもの～, 愛媛大学, 松山市, 2011年11月.

吉田紀生,「液体の積分方程式理論を用いた溶液内化学過程に関する研究」第34回溶液化学シンポジウム,名古屋大学,名古屋市,2011年11月.

吉田紀生,「QM/MM/3D-RISM 理論の開発とプログラムの高速化」第3回HPCI 戦略プログラム合同研究交流会,計算科学研究機構,神戸市,2011年10月.

**Y. MARUYAMA**, “Accelerating 3D-RISM calculation: Graphics Processing Unit and Massive Parallel Machine,” Elemental Processes of Life Phenomena, Revealed by the RISM/3D-RISM Theory, Okazaki (Japan), 2011年3月.

丸山 豊,「液体の積分方程式理論(3D-RISM 理論)の解法とGPUによる高速化」応用数学会年会,京都(日本)2011年9月.

丸山 豊,「GPUによる3D-RISMの高速化とMD-3DRISMへの応用」液体・溶液の微視的構造からダイナミクスまで~最近の研究結果から見えてくるもの~,愛媛大学,松山市,2011年11月.

**N. YOSHIDA**, “Development of the QM/MM/RISM theory: Application to the intercalation of proflavine with solvated DNA,” Korea-Japan Symposium on “Statistical Mechanics Approaches to Nano/Bio-Sciences,” Sookmyung Women’s University, Seoul (Korea), June 2011.

**Y. MARUYAMA**, “Solvent and Salt Effects on Structural Stability of Human Telomere”, Korea-Japan Symposium on “Statistical Mechanics Approaches to Nano/Bio-Sciences,” Seoul (Korea), June 2011.

**S. PHONGPHANPHANEE**, “Binding of small alkali ions and TEA<sup>+</sup> to KcsA potassium channel study by 3D-RISM,” Korea-Japan Symposium on “Statistical Mechanics Approaches to Nano/Bio-Sciences,” Sookmyung Women’s University, Seoul (Korea), June 2011.

**D. J. SINDHIKARA, N. YOSHIDA, M. KATAOKA and F. HIRATA**, “Solvent penetration in photoactive yellow protein: A theoretical study,” Korea-Japan Symposium on “Statistical Mechanics Approaches to Nano/Bio-Sciences,” Sookmyung Women’s University, Seoul (Korea), June 2011.

#### 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).

吉田紀生,溶液化学研究会奨励賞(2011).

#### 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(2010–2011).

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

国立情報学研究所, 客員教授, 2010 年 4 月 1 日-2012 年 3 月 31 日.

## B-10) 競争的資金

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).

科研費新学術領域研究(公募研究)「DNA の電気伝導性と構造揺らぎに関する理論的研究」吉田紀生 (2009 年-2010 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).

科研費若手研究(B)「DNA の電荷移動における溶媒の役割に関する研究」吉田紀生 (2010 年-2013 年).

科研費新学術領域研究(公募研究)「液体の統計力学と量子力学に基づく ATP 加水分解の自由エネルギー解析」吉田紀生 (2011 年-2012 年).

革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラの構築次世代スーパーコンピュータ戦略分野 2「新物質・エネルギー創成」計算物質科学イニシアティブ「バイオマス利用に向けた酵素反応解析」吉田紀生 (2011 年-2015 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) ダイマー・モット絶縁相から金属相への光励起エネルギーに依存した相転移経路
- b) 三角格子を持つ有機導体におけるストライプ型電荷秩序の融解と非線形伝導
- c) 強く二量化した集積型金属錯体の電荷分離相における分子内軌道と結合した振動状態

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) モット絶縁相をもつ擬 2 次元有機導体にはバンド充填率が本来の 3/4 ではなく、二量体をひとつの単位としてバンド充填率が実質的に 1/2 になるものが多い。したがって模型計算では二量体を単位とすることがしばしば行われる。このモット絶縁体を光照射により金属にする場合、キャリア導入による方法と相互作用を弱める方法がある。これらの異なる相転移経路を記述するには、二量体内の分子自由度が重要であり、バンド充填率が 3/4 の系として扱う必要がある。絶縁相に導く相互作用は二量体に対するオンサイト斥力であるが、それは二量体内の分子間軌道重なりによって変化する。この重なりを決める格子は電子状態によって安定な変位が異なり、光照射により変えられる。格子変位に働く力は光励起エネルギーにほとんど依存しないことを解析的に示した。時間依存シュレディンガー方程式を異なる光励起エネルギーに対して解く。相互作用の弱まり方は吸収光子密度に比例するが、その比例係数は励起エネルギーにほとんど依存しない。しかしキャリアはダイマー間電荷移動励起でのみ高効率で導入されることが、スペクトル重みの変化量からわかった。相転移経路を選ぶことができるのは、励起エネルギーに敏感なキャリア導入が瞬時に起きることと、相互作用は遅く変調することのためである。
- b) 三角格子を持つ擬 2 次元有機導体では、フェルミ準位付近の状態密度を大きく減らして安定化に寄与する二倍周期の電荷秩序と、三角格子に由来する三倍周期の電荷秩序が共存することがある。これらの秩序の起源は異なり、外場に対して一般に異なる応答をする。型の有機塩でサイリスタ現象が発見されてから、非線形伝導に対する電荷秩序の効果が興味を持たれていた。有限バイアスのもとでの電子格子状態を、非平衡グリーン関数を使って求めた。型塩は高温金属相では対称性の高い結晶構造をもつために、電荷がフラストレートした状態にある。低温でストライプ型の 2 倍周期の電荷秩序を安定化するために、正孔密度の増減に対応してそれぞれ逆向きに分子面が回転する。この格子変位が維持される限り、2 倍周期の電荷秩序が残り、電流が流れにくい。十分に大きなバイアスのもとで 2 倍周期由来の構造因子が消えると、この格子変位も消える。しかし三倍周期由来の構造因子は電流が大きく流れても生き残り、実験で観測された状況を再現することが分かった。
- c) 光誘起相転移は本質的に非平衡環境で進むので、過渡的な電子状態と振動状態の関係は平衡におけるものと異なっている。平衡状態において、たとえば分子内の C=C 伸縮振動の周波数は、分子の価数によって変化する。その関係と過渡的な周波数から期待される価数と、実際の分子の価数は一般にずれている。このずれ具合を解析すれば、光照射により吸収されたエネルギーの伝達経路について知見を得られる。このような解析をするため、分子内の軌道自由度と分子間の電荷移動自由度と、それぞれと結合する分子振動と格子振動を取り入れた遍歴電子模型を採用する。電子格子相互作用が効いて電荷分離相になる  $\text{Et}_2\text{Me}_2\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$  を考える。ハートリー・フォック近似の範囲内で、電荷秩序および分子振動と格子振動の周波数を再現できた。分子および二量体をもつ対称性のために、それぞれの振動は分子内電子励起と選択的に結合する。

B-1) 学術論文

**K. YONEMITSU, Y. TANAKA, S. MIYASHITA and N. MAESHIMA**, “Photoinduced Insulator-to-Metal Transition Dynamics in Models for Quasi-Two-Dimensional Organic Conductors,” *Phys. Status Solidi B* **248**, 486–490 (2011).

**Y. TANAKA and K. YONEMITSU**, “Crossover from Bias-Induced to Field-Induced Breakdown in One-Dimensional Band and Mott Insulators Attached to Electrodes,” *Phys. Rev. B* **83**, 085113 (11 pages) (2011).

**K. YONEMITSU**, “Effects of Lattice and Molecular Phonons on Photoinduced Neutral-to-Ionic Transition Dynamics in Tetrathiafulvalene-*p*-Chloranil,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 084707 (7 pages) (2011).

**K. YONEMITSU, S. MIYASHITA and N. MAESHIMA**, “Photoexcitation-Energy-Dependent Transition Pathways from a Dimer Mott Insulator to a Metal,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 084710 (5 pages) (2011).

**Y. TANAKA and K. YONEMITSU**, “Nonlinear Conduction by Melting of Stripe-Type Charge Order in Organic Conductors with Triangular Lattices,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 103702 (4 pages) (2011).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

**N. MAESHIMA, K. HINO and K. YONEMITSU**, “Photoinduced Dynamics of the Multi-Orbital Hubbard Model,” *Phys. Status Solidi C* **8**, 213–216 (2011).

**N. HIRAYAMA, A. ENDO, K. FUJITA, Y. HASEGAWA, N. HATANO, H. NAKAMURA, R. SHIRASAKI and K. YONEMITSU**, “Temperature Distribution in Two-Dimensional Electron Gases under a Strong Magnetic Field,” *J. Electron. Mater.* **40**, 529–532 (2011).

**H. NAKAMURA, N. HATANO, R. SHIRASAKI, N. HIRAYAMA and K. YONEMITSU**, “Quantum Oscillations of Thermoelectric Effects in a Pseudo-one-dimensional Electron Gas with a Spin-orbit Interaction,” *J. Electron. Mater.* **40**, 601–605 (2011).

B-4) 招待講演

米満賢治, 田中康寛, 「絶縁体に電気を流す: ナノとマクロで異なる伝導機構および電気が流れるときの電荷秩序の挙動」, 自然科学研究機構「自然科学における階層と全体」シンポジウム, 名古屋, 2011年1月.

米満賢治, 「光誘起ダイナミクス: 分子内自由度と広域状態の動的相関」, 研究会「固体光誘起状態の非平衡ダイナミクス理論とその今後の展望」, 高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所, 2011年2月.

**K. YONEMITSU**, “Photoinduced Phase Transition Dynamics: Interplay between Correlated Electrons and Molecular Vibrations,” International School and Symposium on Multifunctional Molecule-Based Materials, Argonne (U.S.A.), March 2011.

**K. YONEMITSU**, “Theory of Photoinduced Electron-Phonon-Coupled Dynamics in 2D Organic Systems,” Workshop on Ultrafast Dynamics in Strongly Correlated Systems, Zurich (Switzerland), April 2011.

西岡圭太, 「 $\text{Et}_2\text{Me}_2\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ における電荷分離相の光誘起融解の理論」, 理研シンポジウム「金属dmit 錯体による磁性・伝導性研究の最前線」, 理化学研究所和光キャンパス, 2011年5月.

**K. YONEMITSU**, “Interplay between Correlated Electrons and Quantum Phonons in Organic Compounds,” 4th International Conference on Photoinduced Phase Transitions and Cooperative Phenomena, Wroclaw (Poland), June 2011.

K. YONEMITSU, "Interplay between Correlated Electrons and Quantum Phonons in Photoinduced Insulator-to-Metal Transitions," 14th Korea-Japan Molecular Science Symposium on New Visions for Spectroscopy and Computation: Temporal and Spatial Adventures of Molecular Sciences, Busan (Korea), July 2011.

K. YONEMITSU, "Roles of Molecular Vibrations in Photoinduced Insulator-to-Metal and Neutral-to-Ionic Transitions," 9th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets, Gniezno (Poland), September 2011.

米満賢治, 「三角格子上的有機導体の非線形伝導と選択的秩序融解」, 「材料科学国際週間: Material Science Week 2011」研究会「電子自由度による強誘電体最前線」, 東北大学金属材料研究所, 2011年11月.

田中康寛, 「有機導体  $\theta$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>X の電圧下での秩序の融解と非線形伝導」, 研究会「強相関電子系理論の最前線——若手によるオープン・イノベーション——」, 那智勝浦, 2011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–).

日本物理学会領域5 (光物性分野)領域運営委員 (2011–2012).

##### 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 (2010–2011).

##### 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 (2008–2011).

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 (2008–2010).

##### 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-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, 「物性科学概論」, 2011年7月20日–22日.

#### 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).

科研費基盤研究(C), 「分子性導体の外場誘起非線形現象における階層間結合効果の理論」, 米満賢治 (2011年–2015年).

### C) 研究活動の課題と展望

光誘起相転移では非平衡環境下で多電子とフォノンの相関した状態を扱う難しさに加えて、吸収されたエネルギーが分子内外の電荷移動や振動状態に異なる時間スケールで配分されるという意味で、異なる階層をつなぐ難しさがある。実験や理論でカバーできる時間スケールが広がったことで、後者に焦点をあてた研究が可能になってきた。測定された振動状態から期待される電子状態と実際の電子状態とのずれが、今では広く一般に認識されている。つまり従来の断熱ポテンシャル上を“点”が動く描像ではなく、電子状態や振動状態などみる視点によって位置が違えば“広がった雲”が時間とともに変化し移動する描像に変わってきている。これを理論で記述することは困難であるが、実験のプロープが限られているため、理論研究からの支援が大きな役割を果たしている。分子内の電子および振動状態と、分子間の電子および振動状態の相関をつけるということは、いわば分子科学と物性科学の連携をはかるくらいのテーマである。まだまだ時間をかけて、この相関を明らかにしていこうと思う。

## 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) 励起状態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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 電子遷移にともなう励起状態におけるプロトン移動ダイナミックスの解析を行った。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 に対して適用した。この系に関しては実験研究も行われているが、これまで明らかにされていなかった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ている。とくに、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) 水は、他の液体には見られない多くの熱力学的異常性を示す。また、水の異常性は温度低下とともに増すことも知られている。このような熱力学的異常性の一つに、過冷却状態における、等積比熱には見られない等圧比熱の急激な増加がある。この定圧比熱の特異的温度依存性の分子論的起源について、分子シミュレーションを用いて解析を進め、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。

B-1) 学術論文

**T. YAGASAKI and S. SAITO**, "Energy Relaxation of Intermolecular Motions in Supercooled Water and Ice: A Molecular Dynamics Study," *J. Chem. Phys.* **135**, 244511 (9 pages) (2011).

**J. LIU, W. H. MILLER, G. S. FANOUREGAKIS, S. S. XANTHEAS, S. IMOTO and S. SAITO**, "Insights in Quantum Dynamical Effects in the Infrared Spectroscopy of Liquid Water from a Semiclassical Study with an Ab Initio-Based Flexible and Polarizable Force Field," *J. Chem. Phys.* **135**, 244503 (14 pages) (2011).

**M. HIGASHI and S. SAITO**, "Direct Simulation of Excited-State Intramolecular Proton Transfer and Vibrational Coherence of 10-Hydroxybenzo[h]quinoline in Solution," *J. Phys. Chem. Lett.* **2**, 2366–2371 (2011).

**S. YAMAGUCHI, K. TOMINAGA and S. SAITO**, "Intermolecular Vibrational Mode of the Benzoic Acid Dimer in Solution Observed by Terahertz Time-Domain Spectroscopy," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 14742–14749 (2011).

**T. YAGASAKI and S. SAITO**, "A Novel Method for Analyzing Energy Relaxation in Condensed Phases Using Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulations: Application to the Energy Relaxation of Intermolecular Motions in Liquid Water," *J. Chem. Phys.* **134**, 184503 (9 pages) (2011).

B-3) 総説, 著書

大峯 巖, 斉藤真司, 「水の揺らぎと反応」*化学と工業* **64**, 532–533 (2011).

大峯 巖, 斉藤真司, 松本正和, 「ミクロな水の性質: 揺らぎ, 相転移, 反応」*応用物理* **80**, 0853–0861 (2011).

B-4) 招待講演

斉藤真司, 「水の多次元分光法の理論計算—揺らぎ, 緩和, 物性—」日本分光学会テラヘルツ分光部会, パシフィコ横浜, 横浜, September 2011.

斉藤真司, 「凝縮系ダイナミクス—超高速ダイナミクスから熱力学的性質の起源まで—」分子研研究会, 岡崎, November 2011.

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, 「機能分子基礎理論」2011年11月13日–15日.

B-10) 競争的資金

科研費挑戦的萌芽研究, 「生体分子の構造変化に伴う状態遷移ダイナミクスの解析手法の開発とその応用」 斉藤真司 (2011年度).

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).

C) 研究活動の課題と展望

励起状態反応ダイナミクスの理論研究に関しては,生体分子系における励起エネルギー移動の解明に向けて,電子状態計算を行い,ポテンシャルエネルギー面,相互作用の解析を進める。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行い,水の中でどのようにエネルギー緩和ダイナミクスが進んでいるかを明らかにする。また,過冷却液体の不均一ダイナミクス,とくにFragile-Strong 遷移の起源,生体分子系における状態遷移ダイナミクス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 理論の開発を行った。本年度は，非平衡過程 (Non-equilibrium) の理論の定式化とプログラムの実装を行った。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クロミズムについて研究した。また，三原子分子の分子分光に SAC-CI 法を系統的に応用し，分光定数の精密計算や振動励起状態からの発光スペクトルの詳細な解析を行った。
- b) 有機 EL の発光層の分子として高分子系分子がある。その中で，高度に共役した梯子型分子は電界発光や導電性を示す分子として興味深い。本年度は，梯子型ペンタフェニレン，ビスインデノカルバゾール，ジインドロカルバゾールの光物性について研究した。比較的大きな分子の振動構造を解析するために，重要な振動モードを抽出する方法を試み，実験スペクトルの振動構造の詳細を帰属した。また，窒素置換によって振動子強度の小さな励起状態が安定化し，第一励起状態は強度の小さな状態となっていることが分かった。さらに，発光スペクトルについても同様に，振動構造の解析を行い，その帰属を行った。
- 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， $\text{CH}_4$ ， $\text{NH}_3$ ， $\text{H}_2\text{CO}$  の 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，1D 2D のオージェスペクトルの理論的考察を行った。
- 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。本年度は，金クラスターにおけるメタノールの酸化反応について研究した。メタノールからギ酸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

**O. TAKAHASHI, M. TASHIRO, M. EHARA, K. YAMAZAKI and K. UEDA**, "Molecular Double Core Hole Electron Spectroscopy of Nucleobases," *J. Phys. Chem. A* **115**, 12070–12082 (2011).

**M. TASHIRO, M. EHARA and K. UEDA**, "Auger Decay of Molecular Double Core Hole States," *J. Chem. Phys.* **135**, 022139 (14 pages) (2011).

- N. BERRAH, K. UEDA, K. C. PRINCE, M. TASHIRO and M. EHARA *et al.***, “Double Core-Hole Spectroscopy for Chemical Analysis with an Intense X-Ray Femtosecond Laser,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **108**, 16912–16915 (2011).
- R. FUKUDA, M. EHARA and H. NAKATSUJI**, “Electronic Excited States of Macrocyclic Compounds: Direct SAC-CI Study,” *Procedia Computer Science: Proceedings of the International Conference on Computational Science, ICCS 2011* **4**, 1129–1134 (2011).
- M. EHARA, F. OYAGI, Y. ABE, R. FUKUDA and H. NAKATSUJI**, “Excited-State Geometry and Vibrational Frequency Studied by the Analytical Energy Gradients of the Direct SAC-CI Method I, Application to HAX Type Molecules,” *J. Chem. Phys.* **135**, 044316 (14 pages) (2011).
- Y. MAKITA, K. FURUYOSHI, K. IKEDA, T. FUJITA, S. FUJIWARA, M. EHARA and A. OGAWA**, “Synthesis and Characterization of a CTV-capped Azaphosphatane,” *Tetrahedron Lett.* **52**, 4129–4131 (2011).
- P. POOLMEE, M. EHARA and H. NAKATSUJI**, “Photophysical Properties and Vibrational Structure of Ladder-Type Penta p-Phenylene and Carbazole Derivatives Based on SAC-CI Calculations,” *Theor. Chem. Acc.* **130**, 161–173 (2011).
- O. TAKAHASHI, M. TASHIRO, M. EHARA, K. YAMAZAKI and K. UEDA**, “Theoretical Spectroscopy on  $K^{-2}$ ,  $K^{-1}L^{-1}$ , and  $L^{-2}$  Double Core Hole States of  $\text{SiX}_4$  ( $X = \text{H, F, Cl, and CH}_3$ ) Molecules,” *Chem. Phys.* **384**, 28–35 (2011).
- M. EHARA, T. HORIKAWA, R. FUKUDA, H. NAKATSUJI, T. TANAKA, H. KATO, M. HOSHINO, H. TANAKA, R. FEIFEL and K. UEDA**, “Symmetry and Vibrationally Resolved Absorption Spectra Near the N K Edge of  $\text{N}_2\text{O}$ : Experiment and Theory,” *Phys. Rev. A* **83**, 062506 (12 pages) (2011).
- R. FUKUDA, M. EHARA, H. NAKATSUJI and R. CAMMI**, “Nonequilibrium Solvation for Vertical Photoemission and Photoabsorption Processes by the Symmetry-Adapted Cluster-Configuration Interaction Method in Polarizable Continuum Model,” *J. Chem. Phys.* **134**, 104109 (11 pages) (2011).
- M. EHARA, T. HORIKAWA, R. FUKUDA, H. NAKATSUJI, T. TANAKA, M. HOSHINO, H. TANAKA and K. UEDA**, “Theoretical Spectroscopy of O 1s and N 1s excited states of  $\text{N}_2\text{O}$ ,” *J. Phys.: Conf. Series* **288**, 012024 (1 page) (2011).

#### B-4) 招待講演

- M. EHARA**, “Photophysical Chemistry and Theoretical Spectroscopy: Recent Progress in SAC-CI Approach,” Southeastern Louisiana Univ., Hammond (U.S.A.), March 2011.
- M. EHARA**, “Theoretical Spectroscopy on Photo-Functional Molecules with SAC-CI,” The 4th Japan-Czech-Slovak Symposium, Prague (Czech), May 2011.
- M. EHARA**, “The SAC-CI Method: Theory and Applications,” The 8th Thai Summer School of Computational Chemistry, Chiang Mai (Thailand), September 2011.
- M. EHARA**, “Theoretical Spectroscopy and Photophysical Chemistry Based on Electronic Structure Theory,” ENSCP-IMS joint symposium, Paris (France), November 2011.
- M. EHARA**, “Theoretical Spectroscopy and Photophysical Chemistry by SAC-CI,” Recent Advances in Many-Electron Theory II—2011, Puri (India), December 2011.
- M. EHARA**, “Recent Progress and Applications of SAC-C,” The 5<sup>th</sup> Asian Pacific Conference of Theoretical & Computational Chemistry, Rotorua (New Zealand), December 2011.

**R. FUKUDA**, “Development and Applications of Direct SAC-CI Method,” The 4th Japan-Czech-Slovak Symposium, Prague (Czech), May 2011.

**R. FUKUDA**, “Electronic excited states of macrocyclic compounds: Direct SAC-CI study,” The International Conference on Computational Science 2011; workshop “Large Scale Computational Molecular Science,” Singapore (Singapore), June 2011.

**M. TASHIRO**, “Theoretical Study on Molecular Double Core-Hole States and Their Auger Decay,” International Workshops on Photoionization and Resonant Inelastic X-ray Scattering, Las Vegas (U.S.A.), May 2011.

**M. TASHIRO**, “Theoretical study on molecular double core-hole states and their Auger decay,” International Symposium on (e,2e), Double Photo-ionization & Related Topics: Satellite symposium of XXVII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Dublin (Ireland), August 2011.

#### 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

XII<sup>th</sup> International Congress of Quantum Chemistry, Kyoto, Japan, Local Committee Member (2006).

VII<sup>th</sup> 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

大阪大学大学院工学研究科, 「計算機化学」 2011年 4月 21日-22日.

九州大学大学院工学研究科, 「応用化学特別講義第五」 2011年 10月 24日-25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) シニョリンのマルチパーリク・マルチサーマル分子動力学シミュレーション
- b) クーロンレプリカ交換法の提案
- c) 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，高機能化

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 最近提案したマルチパーリク・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，この方法をアミノ酸 10 残基からなるタンパク質，シニョリンに適用した。これは常温常圧でシート構造をとる。シミュレーションの結果，温度を上げるか圧力をかけることにより，シニョリンがほどけることがわかった。折りたたんでいる割合の温度・圧力依存性からフォールド状態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。これらは実験結果とよく一致した。さらにシニョリンが折りたたむ（あるいはほどける）経路を初めて提唱した。
- b) 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。しかし，この方法では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，新しいレプリカ交換法であるクーロンレプリカ交換法を提案した。この方法では，原子の静電荷パラメータに対しスケールリング因子を設けて，レプリカ間で温度を交換する代わりにこのスケールリング因子の交換をおこなう。これにより原子間の静電相互作用に由来する自由エネルギー障壁を取り除き，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できる。
- c) 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。1つのレプリカについては OPEN MP を用いて並列化し，複数のレプリカ間の並列化には MPI を用いることにより，このプログラムをより高速に並列化した。さらにこのプログラムに「ヘリックス・ストランドレプリカ交換法」を組み込んだ。この手法を用いれば，ヘリックス構造やストランド構造を取りやすくするようにバイアスポテンシャルをかけることにより，従来の手法よりも高いサンプリング効率を実現できると考えている。

B-1) 学術論文

**S. G. ITOH and H. OKUMURA**, "Length Dependence of Polyglycine Conformations in Vacuum," *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 094801 (8 pages) (2011).

**H. OKUMURA**, "Optimization of Partial Multicanonical Molecular Dynamics Simulations Applied to an Alanine Dipeptide in Explicit Water," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 114–126 (2011).

S. G. ITOH, A. DAMJANOVIC and B. R. BROOKS, "pH Replica-Exchange Method Based on Discrete Protonation States," *Proteins: Struct., Funct., Bioinf.* **79**, 3420–3436 (2011).

B-4) 招待講演

H. OKUMURA, "Temperature and pressure denaturation of a protein by all-atom generalized-ensemble molecular dynamics simulations," 2011 Taiwan International Workshop on Biological Physics and Complex Systems, Taipei (Taiwan), July 2011.

S. G. ITOH, " $\alpha/\beta$  transitions of a designed peptide studied by the multicanonical-multioverlap molecular dynamics simulations," 2011 Taiwan International Workshop on Biological Physics and Complex Systems, Taipei (Taiwan), July 2011.

H. OKUMURA, "Protein simulations by new generalized-ensemble molecular dynamics algorithms," The 5th Mini-Symposium on Liquids (MSL2011) Fundamental Problems on Liquids and Related Topics, Okayama (Japan), June 2011.

H. OKUMURA, "Multibaric-multithermal molecular dynamics simulations of alanine dipeptide and chignolin," 2011 NCTS June Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Taipei (Taiwan), June 2011.

S. G. ITOH, "Replica-exchange methods and comparison of their sampling efficiency," 2011 NCTS June Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Taipei (Taiwan), June 2011.

H. OKUMURA, "van der Waals and Coulomb replica-exchange molecular dynamics simulations," The ACP 20th workshop on Recent Development in Simulation Physics, Tokyo (Japan), March 2011.

H. OKUMURA, "Partial multicanonical and multibaric-multithermal molecular dynamics simulations of a peptide," Third Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: —Experiments and Simulations, Jeju (Korea), February 2011.

S. G. ITOH and H. OKUMURA, "Applications of the van der Waals replica-exchange method to an alanine dipeptide," Third Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: —Experiments and Simulations, Jeju (Korea), February 2011.

奥村久土, 「各種統計アンサンブルの生成法, 拡張アンサンブル法」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——, 分子科学研究所, 2011年12月.

奥村久土, 「拡張アンサンブル法を用いたタンパク質の高圧変性の分子動力学シミュレーション」研究会「液体・溶液の微視的構造からダイナミクスまで～最近の研究結果から見えてくるもの～」愛媛大学, 2011年11月.

伊藤 暁, 「溶媒中のタンパク質のための新しいレプリカ交換法」研究会「液体・溶液の微視的構造からダイナミクスまで～最近の研究結果から見えてくるもの～」愛媛大学, 2011年11月.

奥村久土, 「拡張アンサンブル分子動力学法の開発とタンパク質への応用」自然科学研究機構・若手研究者による分野間連携研究プロジェクト(非平衡を制御する科学)研究会, 核融合科学研究所, 2011年9月.

奥村久土, 「拡張アンサンブルシミュレーション手法のペプチドへの応用」Theoretical Molecular Science Meeting between IMS and Kyoto University, 分子科学研究所, 2011年3月.

伊藤 暁, 「Applications of the van der Waals Replica-Exchange Method」Theoretical Molecular Science Meeting between IMS and Kyoto University, 分子科学研究所, 2011年3月.

奥村久土, 「生体系における分子動力学シミュレーション手法の開発——機構内連携を目指して——」自然科学における階層と全体シンポジウム, 名古屋安保ホール, 2011年1月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

分子シミュレーション研究会幹事 (2011-).

学会誌編集委員

分子シミュレーション研究会会誌「アンサンブル」編集委員 (2004-2006).

B-8) 競争的資金

科研費若手研究(B),「新しい分子動力学シミュレーション手法の開発とタンパク質折りたたみ問題への応用」奥村久士 (2011年-2014年).

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

これまでにマルチパーリック・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,クーロン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」を考案した。現在この方法を独自の高速シミュレーションプログラムに組み込んだので,今後大きいタンパク質に応用したい。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およびエネルギー移動過程に関する理論的研究
- b) 分子動力学法によるイオン液体の動的挙動に関する理論的研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 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し，時間依存形式のRISM-SCF法と組み合わせて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てきた。この方法論は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され，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した。その結果より，短パルスレーザーを用いた分光実験による報告例との比較からも，分子内電子移動反応に必要な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ている分子内構造変化が起点となる反応過程とは異なる，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。これらの提案された方法論をさらに，光励起によって引き起こされる溶液内での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に取り組み，時間依存形式での定式化へと進展しているところである。
- b) イオン液体中の構成分子である陽・陰両イオン分子間の相互作用とそれが引き起こす動的挙動の関係について物理化学的側面より研究を進めてきている。イオン間相互作用を分子レベルで理解することに重点を置き，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てきた。研究結果から，イオン間相互作用は多体効果によって生じる分極効果によって大きく影響されることが始めて示された。さらに陽・陰イオンの相互相関を調べることにより，イオン液体中ではいわゆる「かご効果」は分極効果によりその影響の度合いは小さくなることが見出され，イオン液体中でのイオン分子の挙動を制御している原因の一つとなっていることも明らかになった。実験データとの比較・検討も通じて，イオン液体中でのダイナミックスの詳細についてさらにシミュレーションによる研究を遂行しているところである。

B-1) 学術論文

**T. ISHIDA**, "Molecular Dynamics Study of the Dynamical Behavior in Ionic Liquids through Interionic Interactions," *J. Non-Crys. Solids* **357**, 454–462 (2011).

**H. FUKAZAWA, T. ISHIDA and H. SHIROTA**, "Ultrafast Dynamics in 1-Butyl-3-methylimidazolium-Based Ionic Liquids: A Femtosecond Raman-Induced Kerr Effect Spectroscopic Study," *J. Phys. Chem. B* **115**, 4621–4631 (2011).

**H. SHIROTA and T. ISHIDA**, "Microscopic Aspects in Dicationic Ionic Liquids through the Low-Frequency Spectra by Femtosecond Raman-Induced Kerr Effect Spectroscopy," *J. Phys. Chem. B* **115**, 10860–10870 (2011).

## 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).

科研費基盤研究(C),「分子内及び分子間エネルギー移動を起源とする光機能発現の理論的解明」石田干城(2011年-2013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のために提案してきた方法論の精密化と、エネルギー移動過程の解析のために必要な方法論への拡張、また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3つを中心として研究活動を計画し、行った。溶液内励起状態での分子内電子移動反応の研究では理論的方法の拡張により計算効率を改善し、色素分子や生体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。本年度から新たに取り組んでいるエネルギー移動の問題への方法論の拡張・精密化を含めて、金属錯体や生体分子系へとさらに展開していきたい。またイオン液体の研究に関しては、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し、さらにイオン分子のダイナミクスを解析する方法も発展させることができ、理論研究をさらに推し進めることが可能となった。今後、より広範な種類のイオン液体についても物性なども含め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，ナノ光学

A-2) 研究課題：

- a) 先端的な近接場分光法の開発
- b) メソスコピックな構造を持つ有機分子集合体の構造とダイナミクスの観測
- c) 金属微粒子の素励起波動関数のイメージングと微粒子内ダイナミクス
- d) 金属微粒子及びその凝集体，配列体における電場増強効果と相互作用

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，特徴的な光学的性質，励起状態の超高速ダイナミクス等を探るための，近接場時間分解分光装置の開発を行い 並行して試料の測定を行っている。基本的な測定システムは数年前に完成し，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た。現在までに，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，近接場で最短約 17 fs のパルス幅を実現した。また金ナノ微粒子のプラズモンの緩和（約 8 fs）を，近接場領域で実時間観測することに成功した。この手法を基礎として，貴金属ナノ構造その他の試料の励起ダイナミクスを探って行きたい。また，近接場円二色性イメージングの装置開発を進めている。
- b) 所外との共同研究として，LB 膜を生成する機能性高分子化合物等に関して，近接場分光法に基づいた研究を進行中である。ある種の機能性高分子の光重合反応において，貴金属微粒子のプラズモンによる光電場増強効果を用いることで，長波長・低強度の光照射で多光子励起重合反応が進行している可能性を見出し，その詳細を研究している。また機能性高分子膜を有する金属微粒子の，キャラクタリゼーションに関する共同研究を昨年度から開始したが，震災の影響で中断している。
- c) 各種形状金属微粒子の分光及びダイナミクスの測定を，単一微粒子内で空間を分解して行っている。既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いだしていた。この研究を拡張し 所外との共同研究をも積極的に行った。電子線描画による 2 次元金属ナノ構造（ディスク等）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を可視化した。また金ナノディスクを微小開口に近づけると，開口を透過する光が強くなる現象など，興味深い光学特性を見だし，理論解析によりその起源を明らかにした。
- d) 貴金属微粒子を凝集・配列した試料の近接場領域での光学的性質に関する研究を，所外との共同研究で行っている。我々は近接場イメージングによって，微粒子凝集体における微粒子間空隙に生じる強い光電場とその表面増強ラマン散乱への寄与を，初めて実験的に実証することに成功している。これを発展させ，微粒子の形状・サイズと凝集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研究を進めている。金薄膜上に開けた孔（ヴォイド）の集合構造においても，局在した光電場を作ることが可能である

ことも見出した。有用な増強局在光電場を作るには、ナノ構造の制御と観察波長の拡張が重要であり、それを実現するために、電子線描画装置の導入と、フェムト秒で近赤外域広帯域波長可変の近接場励起用光源の導入を進めている。

#### B-1) 学術論文

**S. I. KIM, K. IMURA, S. KIM and H. OKAMOTO**, “Confined Optical Fields in Nanovoid Chain Structures Directly Visualized by Near-Field Optical Imaging,” *J. Phys. Chem. C* **115**, 1548–1555 (2011).

**K. IMURA, K. UENO, H. MISAWA and H. OKAMOTO**, “Anomalous Light Transmission from Plasmonic-Capped Nanoapertures,” *Nano Lett.* **11**, 960–965 (2011).

**A. SAKAMOTO, K. MORI, K. IMURA and H. OKAMOTO**, “Nanoscale Two-Photon Induced Polymerization of Diacetylene Langmuir-Blodgett Film by Near-Field Photoirradiation,” *J. Phys. Chem. C* **115**, 6190–6194 (2011).

**H. OKAMOTO, K. IMURA, T. SHIMADA and M. KITAJIMA**, “Spatial Distribution of Enhanced Optical Fields in Monolayered Assemblies of Metal Nanoparticles: Effects of Interparticle Coupling,” *J. Photochem. Photobiol., A* **221**, 154–159 (2011).

**Y. HARADA, K. IMURA, H. OKAMOTO, Y. NISHIJIMA, K. UENO and H. MISAWA**, “Plasmon-Induced Local Photocurrent Changes in GaAs Photovoltaic Cells Modified with Gold Nanospheres: A Near-Field Imaging Study,” *J. Appl. Phys.* **110**, 104306 (7 pages) (2011).

#### B-3) 総説，著書

**K. IMURA and H. OKAMOTO**, “Near-field optical imaging of wavefunctions and optical fields in plasmonic nanostructures,” in *Progress in Nanophotonics I*, M. Ohtsu, Ed., Springer, pp. 127–160 (2011).

**H. OKAMOTO and K. IMURA**, “Near-field imaging of optical-field structures and plasmon wave functions in metal nanostructures,” in *Advances in Multi-Photon Processes and Spectroscopy, Vol. 20*, Y. Fujimura, Ed., World Scientific, pp. 175–209 (2011).

井村考平，岡本裕巳，「蓋をするとあふれだす光」*O plus E* **33**(5), 437–438 (2011).

#### B-4) 招待講演

岡本裕巳，「金属ナノ構造における増強電場とプラズモン波の近接場イメージング」強光子場科学研究懇談会 平成22年度第1回懇談会，岡崎，2011年1月。

岡本裕巳，「金属ナノ構造における光子場の可視化」日本化学会第91春季年会，横浜，2011年3月。

岡本裕巳，「金属ナノ構造における局在光電場のイメージング」第1回プラズモン化学シンポジウム，東京，2011年6月。

**H. OKAMOTO and K. IMURA**, “Sub-wavelength optical field structures in metal nanostructures,” 2011 Korea-Japan Symposium on Molecular Science, Busan (Korea), July 2011.

**H. OKAMOTO and K. IMURA**, “Nano-Optical Visualization of Enhanced Fields in Metal Nanostructures,” 6th International Symposium on Surface Science (ISSS-6), Tokyo (Japan), December 2011.

#### 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).  
岡本裕巳, 日本化学会学術賞 (2012).

#### 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

北海道大学大学院総合化学院，「化学特別講義」2011年6月23日-24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次元高精度歪み検出系開発」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-2011年)。

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

科学技術振興機構さきがけ研究，「プラズモニク物質の波動関数の光制御とその応用」井村考平(2008年)。

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-2011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-)。

科研費若手研究(B)，「近接場光励起領域近傍の空間分解分光イメージング」成島哲也(2011年-)。

特別研究員奨励費，「超高速時間分解分光法を用いたイオン液体中における光解離反応過程の解明」西山嘉男(2011年-2012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。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た。これまでの研究によって，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や，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等，プラズモンの物理的本質に関わる新たな可能性を見いだしつつある。現在これらを次のフェーズに発展させるべく，測定波長域の拡大や，試料設計・作成のための新装置導入等を進めておりこれが今後の研究の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る装置開発では，20 fsを切る時間分解能で近接場測定が可能となった。これによる光励起直後の励起状態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す。一方，有機分子系では所外との共同研究も行い，他の方法では得難い情報を引き出すこと，微小空間での反応の誘起等が可能になっており，今後もこのような方向を一つの軸として行く。そのための方法論開発の一つとして，近接場円二色性イメージングの開発を行っている。この他にもナノ光学に関わるいくつかの研究萌芽を見出しているが，現時点の体制ではそれらを大きく進展させるのは難しそうである。

## 大 島 康 裕 ( 教 授 )( 2004 年 9 月 1 日 着 任 )

A-1) 専門領域：分子分光学，化学反応動力学

A-2) 研究課題：

- a) 非断熱相互作用による状態分布や量子波束の制御
- b) 超高速分子回転制御に関する実験的および理論的検討
- c) 大振幅な構造変形運動に関する量子波束の生成と観測
- d) 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
- e) 高分解能非線形コヒーレント分光の開発
- f) 分子配向分布の実時間観測法の開発

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いる。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、回転運動に関する励起プロセスの詳細な追跡に利用してきている。ベンゼンや NO 分子を対象とした研究において、量子波束の位相・振幅情報の実験的決定、パルス対励起による回転状態分布の高速制御を実現し、縮重状態におけるコヒーレント励起過程に特有な波動関数の位相関係を明らかにする等の結果を得ている。
- b) 偏光面と遅延間隔を適切に設定した高強度極短パルス対による非断熱回転励起によって、右もしくは左回りに回転する波動関数を生成しうることを理論・実験の両面から明らかにしている。この研究の理論的な発展としてイスラエルのグループと共同研究を行い、古典力学的解析が厳密な量子力学的記述を良く再現することを示した。
- c) 上記 a) の非断熱励起は振動に関しても実現可能である。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、振動波束干渉を実時間領域で観測することにも成功している。NO-Ar については、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解くためのプログラム整備を行ない、実測データを良く再現することを確認した。
- d) 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して、単一縦モードナノ秒パルス光源を利用した高分解能電子スペクトルの測定を行っている。最も結合の弱いベンゼン-He 系については、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。H<sub>2</sub> とのクラスターでは、H<sub>2</sub> の 2 つの水素が入れ替わる運動が存在することを明らかにし、クラスター内での H<sub>2</sub> 分子の平均的な配向が振動状態によって大きく異なることを示唆する結果を得た。また、励起状態において振動前期解離などの緩和過程が存在することも明らかにした。
- e) 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、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進めている。現在 単一縦モードを保持したまま広範囲に波長掃引が可能な半導体レーザーや、チャープしたシード光を増幅するためのファイバーアンプを自作中である。
- f) 分子運動の状態確率分布の時間発展を追跡する「時空間 4 次元イメージング」のための装置の設計と製作を行った。極低温 (< 1 K) のパルス分子ビームを高繰り返し (500 Hz) で生成するノズルソース部、極短パルス光を短焦点で

集光可能な相互作用部，および，解離イオンの速度ベクトルを3次元的に計測するイオンイメージング検出部から構成される真空チャンバーの組み上げをほぼ終了した。

#### B-1) 学術論文

**Y. KHODORKOVSKY, K. KITANO, H. HASEGAWA, Y. OHSHIMA and I. Sh. AVERBUKH**, “Controlling the Sense of Molecular Rotation: Classical vs Quantum Analysis,” *Phys. Rev. A* **83**, 023423 (10 pages) (2011).

**D. BAEK, H. HASEGAWA and Y. OHSHIMA**, “Unveiling the Nonadiabatic Rotational Excitation Process in a Symmetric-Top Molecule Induced by Two Intense Laser Pulses,” *J. Chem. Phys.* **134**, 224302 (10 pages) (2011).

**A. MIZOGUHI, Y. OHSHIMA and Y. ENDO**, “The Study for the Incipient Solvation Process of NaCl in Water: The Observation of the  $\text{NaCl}-(\text{H}_2\text{O})_n$  ( $n = 1, 2,$  and  $3$ ) Complexes by Using Fourier-Transform Microwave Spectroscopy,” *J. Chem. Phys.* **135**, 064307 (11 pages) (2011).

**K. MIZUSE and A. FUJII**, “Infrared Photodissociation Spectroscopy of  $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_6 \cdot \text{M}_m$  ( $\text{M} = \text{Ne}, \text{Ar}, \text{Kr}, \text{Xe}, \text{H}_2, \text{N}_2,$  and  $\text{CH}_4$ ): Messenger-Dependent Balance between  $\text{H}_3\text{O}^+$  and  $\text{H}_5\text{O}_2^+$  Core Isomers,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 7098–7104 (2011).

**K. MIZUSE, J. -L. KUO and A. FUJII**, “Structural Trends of Ionized Water Networks: Infrared Spectroscopy of Water Cluster Radical Cations  $(\text{H}_2\text{O})_n^+$  ( $n = 3-11$ ),” *Chem. Sci.* **2**, 868–876 (2011).

**K. MIZUSE, Y. SUZUKI, N. MIKAMI and A. FUJII**, “Solvation-Induced  $\sigma$ -Complex Structure Formation in the Gas Phase: A Revisit to the Infrared Spectroscopy of  $[\text{C}_6\text{H}_6-(\text{CH}_3\text{OH})_2]^+$ ,” *J. Phys. Chem. A* **115**, 11156–11161 (2011).

**K. MIZUSE and A. FUJII**, “Structural Origin of the Antimagic Number in Protonated Water Clusters  $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ : Spectroscopic Observation of the “Missing” Water Molecule in the Outermost Hydration Shell,” *J. Phys. Chem. Lett.* **2**, 2130–2134 (2011).

#### B-4) 招待講演

大島康裕, 「気相分子集団の空間配向制御」 Chemistry and Fundamental Science, 東京大学, 東京都目黒区, 2011年5月.

**Y. OHSHIMA**, “Quantum-state manipulation of molecular rotation and vibration,” 2011 Korea-Japan Symposium on Molecular Science, Pusan (Korea), July 2011.

**Y. OHSHIMA**, “Spinning and deforming gas-phase molecules by intense ultra-short laser pulses,” The 14th Asian Chemical Congress 2011, Bangkok (Thailand), September 2011.

**K. MIZUSE**, “Infrared spectroscopic characterization of hydrogen-bonded water networks in gas-phase hydrated clusters,” Workshop on Dynamics and Structure of Water: From Gas Phase Clusters to Condensed Phase, Taipei (Taiwan), October 2011.

#### 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, 2012–).
- 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 (2010–2012).
- 日本分光学会理事 (2011–).

### 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-10) 競争的資金

- 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).

科研費研究活動スタート支援,「水とクラスターのコヒーレント分光による動的水素結合構造の研究」,水瀬賢太 (2011年-2012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,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ので,イオンイメージング技術と結合した回転運動の画像化等への展開を目指す。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して,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,実験システムの整備は完了した。今後は,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,開発の最終局面にあるナノ秒チャープ光源が完成次第,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

**H. GOTO, H. KATSUKI, H. IBRAHIM, H. CHIBA and K. OHMORI**, “Strong-Laser-Induced Quantum Interference,” *Nat. Phys.* **7**, 383–385 (2011).

**Y. OKANO, H. KATSUKI, Y. NAKAGAWA, H. TAKAHASHI, K. G. NAKAMURA and K. OHMORI**, “Optical Manipulation of Coherent Phonons in Superconducting  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  Thin Films,” *Faraday Discuss.* **153**, 361–373 (2011). (invited paper)

B-4) 招待講演

大森賢治, 「Single molecule can calculate 1000 times faster than supercomputers」東京大学グローバルCOE プログラム「未来を拓く物理学結集教育研究拠点」セミナー, 東京大学本郷キャンパス, 2011年12月.

**K. OHMORI**, “Single Molecule can Calculate 1000 Times Faster than Supercomputers,” International Symposium on Physics and Applications of Laser Dynamics 2011, Tainan (Taiwan), December 2011.

**K. OHMORI**, “Optically Engineered Quantum States in Ultrafast and Ultracold Systems,” Meet APS Fellow Forum, National Tsing Hua University, Hsinchu (Taiwan), December 2011.

**K. OHMORI**, “Attosecond Quantum Engineering,” Germany-Japan Colloquium “From the Early Universe to the Evolution of Life,” Heidelberg (Germany), December 2011.

大森賢治, 「世界最速スパコンより1000倍速くナノより小さい1分子コンピューター」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」シンポジウム 2011, 東北大学片平キャンパス, 2011年11月.

**K. OHMORI**, “Single Molecule can Calculate 1000 Times Faster than Supercomputers,” Frontier in Molecular Science based on Photo and Material, Paris (France), November 2011.

大森賢治, 「原子のさざ波と不思議な量子の世界」第104回国研セミナー, 分子科学研究所, 2011年11月.

**K. OHMORI**, “Ultrafast Computing with a Femtosecond-Laser-Driven Molecule,” International Workshop on Simulation and Manipulation of Quantum Systems for Information Processing (SMQS-IP), Juelich (Germany), October 2011.

**K. OHMORI**, “Ultrafast Computing with a Femtosecond-Laser-Driven Molecule,” International Workshop “Engineering and Control of Quantum Systems,” Dresden (Germany), October 2011.

**K. OHMORI**, “Ultrafast Computing with a Femtosecond-Laser-Driven Molecule,” International Workshop on Coherence and Decoherence at Ultracold Temperatures, Institute for Advanced Study of Technische Universitat Munchen, Garching/Munich (Germany), September 2011.

**K. OHMORI**, “Coherent Control; Present and Future,” Gordon Research Conference on “Quantum Control of Light and Matter,” Mount Holyoke College, South Hadley (U.S.A.), July–August 2011.

**K. OHMORI**, “Single Molecule Can Calculate 1000 Times Faster than Supercomputers,” Special Seminar at Physics Department of Oxford University, Oxford (U.K.), July 2011.

**K. OHMORI**, “Optical Manipulation of Coherent Phonons in Superconducting  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  Thin Films,” Faraday Discussion 153: Coherence and Control in Chemistry, Leeds (U.K.), July 2011.

**K. OHMORI**, “Single Molecule can Calculate 1000 Times Faster than Supercomputers,” 14th Korea-Japan Joint Symposium on Frontiers of Molecular Science “New Visions for Spectroscopy and Computation: Temporal and Spatial Adventures of Molecular Sciences,” Busan (Korea), July 2011.

大森賢治,「量子シミュレーター」第8回AMO 討論会, 東京大学本郷キャンパス, 2011年 6月.

**K. OHMORI**, “Molecular Eigenstate-Based Information Processing,” Lorentz Center Workshop on “Molecular Logic,” Lorentz Center, Leiden (Netherlands), May–June 2011.

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～極低温分子からバルク固体まで～分子コンピューターの実現に向けて」, Chemistry and Fundamental Science, 東京大学駒場キャンパス, 2011年 5月.

大森賢治,「量子さざ波... 量子の波を光で制御する～極低温原子からバルク固体まで」, 京都大学G-COE セミナー「光・電子理工学コロキウム」, 京都大学桂キャンパス, 2011年 3月.

**K. OHMORI**, “Ultrafast Fourier Transform with a Femtosecond-Laser-Driven Molecule,” Séminaire SYRTE, l’Observatoire de Paris, Paris (France), March 2011.

**K. OHMORI**, “Ultrafast Fourier Transform with a Femtosecond-Laser-Driven Molecule,” Séminaire IPCMS, Université de Strasbourg, Strasbourg (France), March 2011.

**K. OHMORI**, “Ultrafast Fourier Transform with a Femtosecond-Laser-Driven Molecule,” Dynamics and Manipulation of Quantum Systems 2011, Tokyo (Japan), February 2011.

**K. OHMORI**, “Ultrafast Fourier Transform with a Femtosecond-Laser-Driven Molecule,” ERATO Macroscopic Quantum Control Conference on Ultracold Atoms and Molecules, Tokyo (Japan), January 2011.

**H. KATSUKI**, “Optically engineered quantum interference of delocalized excitons in solid parahydrogen,” 11th Tamura Symposium, Osaka Prefecture University, Sakai (Japan), December 2011.

**H. KATSUKI**, “Optically engineered quantum interference of delocalized excitons in solid parahydrogen,” IMS Symposium on “Recent Developments of Spectroscopy and Spatial and Temporal Hierarchical Structures in Molecular Science,” IMS, Okazaki, October 2011.

香月浩之,「アト秒精度で分子の波を制御する」, 第一回光科学異分野横断萌芽研究会, かんぼの宿, 奈良, 2011年 8月.

**H. KATSUKI**, “Ultrafast quantum interference in solid para-hydrogen,” MATRIX2011, University of British Columbia, Vancouver (Canada), July 2011.

香月浩之,「凝縮系量子状態のコヒーレント制御と読み出し」, 第12回エクストリームフォトリクス, 理研, 2011年 6月.

**H. KATSUKI**, “WAVE PACKET INTERFEROMETRY IN SOLID PARA-HYDROGEN,” 15th East Asian Workshop on Chemical Dynamics, POSCO international center, POSTECH, Pohang (Korea), May 2011.

**H. KATSUKI**, “Wave Packet Interferometry in Solid Para-hydrogen,” JSPS Asian CORE Workshop on Next Generation Ultra-Short Pulse Lasers for High Field and Ultrafast Science, RIKEN, Japan, March 2011.

#### 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, 分子科学研究奨励森野基金 (2011).

香月浩之, 文部科学大臣表彰・若手科学者賞 (2011).

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–).  
21<sup>st</sup> International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions 準備委員, 組織委員 (1999).  
The 5<sup>th</sup> East Asian Workshop on Chemical Reactions 組織委員長 (2001).  
分子構造総合討論会実行委員 (1995).  
第19回化学反応討論会実行委員 (2003).  
原子・分子・光科学(AMO) 討論会プログラム委員 (2003–).  
APS March meeting; Focus Topic 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的世界」  
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

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) 内殻共鳴分光による未知の電子状態の研究
- 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：固体中の不純物状態や分子クラスターの研究を進展させて，溶質・溶媒分子系などの局所構造（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。例えば，溶媒分子を溶質（不純物）に近接したスペクトル成分とそれ以外のものに分離して，溶質の周りの局所的な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) 内殻共鳴分光による未知の電子状態の研究：大きなスピン軌道相互作用を持つ2p内殻の共鳴励起を利用することによって，1光子イオン化で4重項状態や1光子励起で3重項励起状態の観測を実現してきた。さらに，同じ双極子対称性を持つ価電子励起と内殻励起の類似性からだけでは解明できない複雑な非断熱遷移を，内殻共鳴による高振動励起状態や異なる双極子対称性の状態への遷移を利用することによって，解明することができた。
- c) 内殻励起の理論的アプローチの開発：本グループで独自開発している軟X線内殻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，仏SOLEIL，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, H. SETOYAMA, E. RÜHL and N. KOSUGI, "Inner-Shell Spectroscopy and Exchange Interaction of Rydberg Electrons Bound by Singly and Doubly Charged Kr and Xe Atoms in Small Clusters," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **183**, 29–35 (2011).

H. YAMANE, T. HATSUI, K. IKETAKI, T. KAJI, M. HIRAMOTO and N. KOSUGI, "Site-Specific Intermolecular Interaction in  $\alpha$ -Phase Crystalline Films of Phthalocyanines Studied by Soft X-Ray Emission Spectroscopy," *J. Chem. Phys.* **135**, 034704 (6 pages) (2011).

H. S. KATO, H. YAMANE, N. KOSUGI and M. KAWAI, "Characterization of an Organic Field-Effect Thin-Film Transistor in Operation Using Fluorescence-Yield X-Ray Absorption Spectroscopy," *Phys. Rev. Lett.* **107**, 147401 (5 pages) (2011).

**K. NISHIZAWA, N. KURAHASHI, K. SEKIGUCHI, T. MIZUNO, Y. OGI, T. HORIO, M. OURA, N. KOSUGI and T. SUZUKI**, “High-Resolution Soft X-Ray Photoelectron Spectroscopy of Liquid Water,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 413–417 (2011).

**J.-C. LIU, C. NICOLAS, Y.-P. SUN, R. FLAMMINI, P. O’KEEFFE, L. AVALDI, P. MORIN, V. KIMBERG, N. KOSUGI, F. GEL’MUKHANOV and C. MIRON**, “Multimode Resonant Auger Scattering from the Ethene Molecule,” *J. Phys. Chem. B* **115**, 5103–5112 (2011).

**O. ENDO, H. OZAKI, R. SUMII, K. AMEMIYA, M. NAKAMURA and N. KOSUGI**, “Orientation of *n*-Alkane in Thin Films on Graphite (0001) Studied using C K-NEXAFS,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **184**, 257–260 (2011).

**O. ENDO, T. HORIKOSHI, N. KATSUMATA, K. OTANI, T. FUJISHIMA, H. GOTO, K. MINAMI, K. AKAIKE, H. OZAKI, R. SUMII, K. AMEMIYA, M. NAKAMURA and N. KOSUGI**, “Incommensurate Crystalline Phase of *n*-Alkane Monolayers on Graphite (0001),” *J. Phys. Chem. C* **115**, 5720–5725 (2011).

### B-3) 総説, 著書

**E. SHIGEMASA and N. KOSUGI**, “Molecular Inner-Shell Spectroscopy: ARPIS Technique and Its Applications,” *Adv. Chem. Phys.* **147**, 75–126 (2011).

### B-4) 招待講演

**N. KOSUGI**, “Inner-Shell Spectroscopy Applied to Photoexcitation Dynamics in Gas and Liquid Phases,” Les journées d’automne 2011 du Groupe Français de Photochimie, Photophysique et Photosciences, Société Chimique de France (フランス化学会光物理化学部会秋季年会), Paris (France), November 2011.

**N. KOSUGI**, “Molecular X-Ray Spectroscopy in Gas, Cluster, Liquid, and Solid Phases. Experiment and Theory,” Institut des Sciences Moléculaires d’Orsay (ISMO), Université Paris-Sud 11, Paris (France), December 2011.

### 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 (2008–2012).

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

SRI シンクロト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-8,9,10,12 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, 2012).

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, 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, 2011).

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

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委員会委員 (2001-2003), 物質構造科学研究所運営協議委員会委員 (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 (1994-2012).

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 (2007-2010), 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 (2010–2012).

フィンランド Oulu 大学物理学科教授選考外部専門委員 (2010).

フランス CNRS ANR 基盤研究審査員 (2010–2012).

フランス UPMC(Paris 6)/CNRS Multi-scale Integrative Chemistry (MiChem) プロジェクト外部審査委員 (2011).

#### 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，「光化学」2011年前期.

京都大学大学院理学研究科，「内殻励起の分子科学」2011年10月.

Erasmus Mundus International Master Course on Surface, Electro, Radiation, and Photo Chemistry, Université Paris-Sud 11, “Basic X-ray Spectroscopy,” 2011年11月.

Erasmus Mundus International Master Course on Surface, Electro, Radiation, and Photo Chemistry, Université Paris-Sud 11, “Quantum Chemistry applied to Molecular X-ray Spectroscopy,” 2011年12月.

#### B-10) 競争的資金

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).

科研費基盤研究(A), 「軟X線分光による液体・溶液の局所電子構造解析法の確立」小杉信博 (2011年–2013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).

科研費若手研究(A), 「軟X線吸収分光法による電極固液界面の局所電子構造の解明」長坂将成, (2011年–2013年).

#### C) 研究活動の課題と展望

本研究グループは、放射光分子科学における新たな方法論、特に局所構造解析に関わる方法論、の開発・確立を目的にしており、これまでわからなかった新しい知見をいくつかの具体例で得ることができたら、また、次の新しい方法論の確立に向かうのを常としている。最近、観測する現象としては、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、溶質・溶媒間や有機分子間の弱い相互作用など、これまで観測が困難とされてきた、より複雑な系に重点をシフトしつつある。その場観測手法や顕微分光法も駆使する必要がある。これらは世界的な放射光研究の最近の動向にも沿っている。これまでアンジュレータ、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を行っている。これらの装置群は国際的な競争力があり、国内のみならず国外の研究者との共同研究にも貢献している。本研究は、以前のUVSOR-I光源の性能では全く不可能であり、UVSOR-IIをさらに高度化したUVSOR-III光源の性能をフルに引き出せるように、UVSOR施設スタッフの協力も得て、今後も継続的に高分解能軟X線分光の最新技術を導入していくことが国際競争上、必須である。

## 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（ $\sim 20$  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23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ータ光を組み合わせ，電子振動励起分子の光イオン化や光解離のダイナミクス，イオンの前期解離ダイナミクスなどに関する研究を行った。レーザー誘起蛍光励起分光やレーザー多光子イオン化分光を起用して，超励起状態から解離生成したイオンまたは中性フラグメントの内部状態の観測を初めて実現した。フラグメントの回転分布から，解離の際のエネルギー分配について議論した。原子の光イオン化における「量子力学的完全実験」を目指し，偏極励起原子の光イオン化ダイナミクスの研究を行った。また，特定の化学結合を選択的に切断したり，特異的な化学反応を起こすような光励起過程を実現するための方法論の開発と実用化を目指している。具体的には可視又は近赤外レーザーで生成する振動励起した水分子に放射光を照射して，振動基底分子の放射光解離とは全く異なる反応分岐比や分解確率を得るという実験を行った。
- c) 軌道放射光施設に分子線光解離装置と正イオン・負イオン同時計測装置を製作し， $CO_2$ ， $SO_2$ ，ハロゲン化メチル，フロンなど20種余の分子についてイオン対を生成する過程を初めて見いだした。また，同施設の直入射分光器ラインに2次元掃引光電子分光装置を建設し， $NO$ ， $C_2H_2$ ， $OCS$ ， $SO_2$ ， $CS_2$ ， $HI$  等の2次元光電子スペクトルを測定した。さらに，アンジュレータ斜入射分光器ラインで， $OCS$  や  $H_2O$  の極端紫外励起状態の緩和過程で放出される可視・紫外発光を検出し，蛍光分散および蛍光励起スペクトルを測定した。以上，得られた負イオン解離効率曲線，2次元光電子スペクトル，蛍光スペクトル等から，超励起状態のポテンシャルエネルギー曲面を計算しイオン化状態との電子的結合を評価したり，自動イオン化や前期解離のダイナミクスおよび分子の2電子励起状態や解離性イオン化状態の特質などについて考察した。

B-1) 学術論文

**K. OKADA, T. NAKASHIMA, M. SAKAI, A. SUEMITSU, C. HUANG, H. YAGI, H. KATAYANAGI, K. MITSUKE and K. TABAYASHI**, “Dissociative Photoionization of Perfluorocyclobutane and *cis*-1,1,2,2,3,4-Hexafluorocyclobutane,” *J. Phys.: Conf. Series* **288**, 012021 (7 pages) (2011).

**K. MITSUKE, D. BASHYAL and K. NAKAJIMA**, “Efficient Dye-Sensitized Solar Cells Made from Titania Nanoparticles Powder, VP TiO<sub>2</sub> P90,” *Pure and Applied Chemistry International Conference PACCON2011*, 457–460 (2011).

**K. NAKAJIMA, K. OHTA, H. KATAYANAGI and K. MITSUKE**, “Photoexcitation and Electron Injection Processes in Azo Dyes Adsorbed on Nanocrystalline TiO<sub>2</sub> Films,” *Chem. Phys. Lett.* **510**, 228–233 (2011).

**H. KATAYANAGI and K. MITSUKE**, “Mass-Analyzed Velocity Map Imaging of Doubly Charged Photofragments from C<sub>70</sub>,” *J. Chem. Phys.* **135**, 144307 (8 pages) (2011).

B-2) 総説, 著書

見附孝一郎, 小林かおり, 「分子の構造とスペクトル」, 「プラズマ原子分子過程ハンドブック」第3章, pp. 29–48 (2011).

B-4) 招待講演

見附孝一郎, 「C<sub>60</sub> または C<sub>70</sub> ビームから生成する炭素クラスターイオンの速度画像観測」, 分子研研究会「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」, 分子科学研究所, 岡崎, 2011年1月.

**K. MITSUKE**, “Velocity Map Imaging for Photoionization of Fullerenes and Polycyclic Aromatic Hydrocarbons,” The 14th Asian Chemical Congress (14ACC), Bangkok (Thailand), September 2011.

見附孝一郎, 「アゾ色素から酸化チタンナノ粒子への光誘起電子移動」, UVSOR ユーザーズミーティング, 分子科学研究所, 岡崎, 2011年11月.

B-6) 受賞, 表彰

見附孝一郎, 日本化学会欧文誌 BCSJ 賞 (2001).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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).

*ISRN Physical Chemistry*, Editorial Board of Open Access International Journal (2011-).

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, 「極端紫外光分光学」2011年12月5日-7日.

#### B-10) 競争的資金

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).

光科学技術研究振興財団研究助成, 「ナノ分子場中の原子と光の相互作用——金属内包フラーレンに軟X線巨大共鳴は存在するか?」見附孝一郎 (2002年-2003年).

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。

## 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) シンクロトロン光源 UVSOR の性能向上に向けた開発研究を継続している。2000年以降の断続的な加速器改良により、電子ビーム強度及び輝度の向上、電子ビーム強度を一定に保つトップアップ入射の導入などに成功し、低エネルギー放射光源としては世界最高水準の光源性能を実現した。さらに、高輝度放射光発生のために真空封止アンジュレータ2台、可変偏光型アンジュレータ2台を設計・建設し、稼働させた。
- b) 自由電子レーザーに関する研究を継続している。蓄積リング自由電子レーザーとして世界最高の出力を記録した。また、共振器型自由電子レーザーに関する基礎研究を進め、レーザー発振のダイナミクスやフィードバック制御に関する先駆的な成果を上げた。外部レーザーを用いた真空紫外領域でのコヒーレント高調波発生に関する研究では、可変偏光性や出力飽和などに関する先駆的な成果を上げた。
- 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。この手法により一様磁場中から準単色放射光を発生することに世界に先駆けて成功した。電子パルス上に形成された密度構造の時間発展に関するビームダイナミクス研究により先駆的な成果を上げた。
- 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。
- e) 光陰極を用いた電子源の開発に着手した。直線加速器を用いた自由電子レーザー計画への応用と偏極電子ビームを用いた生命の起源に関する研究への応用を目指している。

B-1) 学術論文

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 (2010).

M. KATOH, M. ADACHI, H. ZEN, J. YAMAZAKI, K. HAYASHI, A. MOCHIHASHI, M. SHIMADA and M. HOSAKA, "Full Energy Injection and Top-up Operation at UVSOR-II," *AIP Conf. Proc.* **1234**, 531 (2010).

M. ADACHI, M. KATOH, H. ZEN, T. TANIKAWA, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, N. YAMAMOTO and Y. TAIRA, "Status and Prospects of Coherent Light Source Developments at UVSOR-II," *AIP Conf. Proc.* **1234**, 492 (2010).

**Y. TAIRA, M. ADACHI, H. ZEN, T. TANIKAWA, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, N. YAMAMOTO, K. SODA and M. KATOH**, “Feasibility Study of Ultra-Short Gamma-Ray Pulse Generation by Laser-Compton Scattering in an Electron Storage Ring,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A* **637**, 5116–5119 (2011).

**N. YAMAMOTO, M. SHIMADA, M. ADACHI, H. ZEN, T. TANIKAWA, Y. TAIRA, S. KIMURA, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, T. TAKAHASHI and M. KATOH**, “Ultra-Short Coherent Terahertz Radiation from Ultra-Short Dips in Electron Bunches Circulating in a Storage Ring,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A* **637**, 5112–5115 (2011).

**Y. TAIRA, M. ADACHI, H. ZEN, T. TANIKAWA, N. YAMAMOTO, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, K. SODA and M. KATOH**, “Generation of Energy-Tunable and Ultrashort-Pulse Gamma Ray via Inverse Compton Scattering in an Electron Storage Ring,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A* **652**, 696–700 (2011).

#### B-2) 国際会議のプロシーディングス

**M. KATOH**, “Radiation from Laser-Modulated and Laser-Sliced Electron Bunches in UVSOR-II,” *Proc. 32nd Internat. Free Electron Laser Conf.*, 183–187 (2010).

**T. TANIKAWA, M. ADACHI, M. KATOH, J. YAMAZAKI, H. ZEN, M. HOSAKA, Y. TAIRA and N. YAMAMOTO**, “Saturation Phenomena of VUV-CHG at UVSOR-II,” *Proc. 32nd Internat. Free Electron Laser Conf.*, 306–309 (2010).

**H. ZEN, M. ADACHI, M. KATOH, T. TANIKAWA, Y. TAIRA, N. YAMAMOTO and M. HOSAKA**, “Numerical Study on Coherent Harmonic Generation Free Electron Laser Seeded by Chirped External Laser,” *Proc. 32nd Internat. Free Electron Laser Conf.*, 286–289 (2010).

**C. EVAIN, M. -E. COUPRIE, S. BIELAWSKI, C. SZWAJ, M. HOSAKA, A. MOCHIHASHI and M. KATOH**, “Control of Instability Induced by a Detuning in FEL Oscillator,” *Proc. 32nd Internat. Free Electron Laser Conf.*, 215–218 (2010).

**Y. TAIRA, N. YAMAMOTO, M. HOSAKA, K. SODA, M. ADACHI, H. ZEN, T. TANIKAWA and M. KATOH**, “Development of Pulse Width Measurement Techniques in a Picosecond Range of Ultra-short Gamma-Ray Pulses,” *Proc. 2nd Internat. Particle Accelerator Conf.*, 1473–1475 (2011).

**T. TANIKAWA, M. ADACHI, M. KATOH, J. YAMAZAKI, H. ZEN, M. HOSAKA, Y. TAIRA and N. YAMAMOTO**, “Saturation Effect of VUV Coherent Harmonic Generation at UVSOR-II,” *Proc. 2nd Internat. Particle Accelerator Conf.*, 3098–3100 (2011).

#### B-3) 総説，著書

**M. KATOH**, “Upgrades of UVSOR Accelerators,” *J. Particle Soc. Jpn.* **7**, No. 3, 184–191 (2010).

**M. KATOH**, “Future Plan of UVSOR,” *J. Jpn. Soc. Synchrotron Rad. Res.* **24**, No. 4, 175–181 (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).

谷川貴紀, 第24回日本放射光学会年会 JSR11 学生発表賞 (2011).

## B-7) 学会および社会的活動

### 学会の組織委員等

日本加速器科学研究発表会世話人 (2001-2003).

日本加速器学会設立準備委員会委員 (2003).

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-).

### 学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集委員 (2000-2002).

## 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-).

科研費基盤研究(B),「超狭帯域真空紫外コヒーレント放射光源の開発」加藤政博 (2011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が，放射光輝度をさらに向上させる改造計画を進める。2012年春に加速器の改造を実施する予定である。偏向磁石を複合機能型に置き換え，また，パルス六極磁石による高度な入射方式を導入する。さらに，真空封止型アンジュレータ1台を設置する。ハードウェア設計は完了し，製作が進行中である。

自由電子レーザーに関しては，増幅率の向上を目指した光クライストロンの更新を進めており，現在立上調整中である。今後，発振波長を真空紫外領域まで拡張することを目指すとともに，可視紫外域での広範囲波長可変レーザーとしての実用化を目指して技術開発を進める。また，共振器内逆コンプトン散乱による高効率単色ガンマ線生成などへの応用も目指す。これらと並行して，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継続する。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のための基礎研究である。

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る。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進める。偏光可変性や極短パルス特性を活かした利用法の開拓を行う。また、同じく新たな量子ビーム源として、スピン偏極電子源の開発を進める。生体物質への照射などを手始めに、将来的には逆光電子分光なども視野に入れながら、応用を強く意識して開発を進める。

## 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) 物質科学に向けた低エネルギー放射光を使った新しい分光法の開発
- c) 新しい量子ビームを使った分析技術の開発

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が現れる固体・薄膜について，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。

結晶異方性が高い磁気転移温度の起源と成っている  $CeT_2Al_{10}$  ( $T = Fe, Ru, Os$ ) の電子構造

重い電子系  $CeIn_3$  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

低温・高圧下で異常な伝導を示す  $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$  の高圧下テラヘルツ分光

巨大磁気抵抗物質電子ドープ EuO 単結晶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

- 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 軌道対称性・波数分離角度分解光電子分光 (BL7U)，三次元角度分解光電子分光 (BL5U)，高圧下赤外・テラヘルツ顕微分光 (BL6B) は順調に結果を出している。現在，BL1B にテラヘルツコヒーレント放射光を利用するビームラインを設置し，BL1U のコヒーレント高次高調波と組み合わせたテラヘルツポンプ・光電子プローブ分光などの新しい分光法の開発を進め，物質科学への応用を図る。
- c) 新しい量子ビームを使った分析技術の開発：高エネルギー加速器研究機構で開発中の新規光源コンパクト ERL からの大強度テラヘルツ光を使った近接場分光や励起光としての利用，また，加藤グループと共同して，スピン偏極電子源を使った高エネルギー分解能スピン・角度分解逆光電子分光法の開発を進めている。

B-1) 学術論文

S. KIMURA, T. IIZUKA, H. MIYAZAKI, A. IRIZAWA, Y. MURO and T. TAKABATAKE, "Electronic-Structure-Driven Magnetic Ordering in a Kondo Semiconductor  $CeOs_2Al_{10}$ ," *Phys. Rev. Lett.* **106**, 056404 (4 pages) (2011).

S. KIMURA, T. IIZUKA, H. MIYAZAKI, T. HAJIRI, M. MATSUNAMI, T. MORI, A. IRIZAWA, Y. MURO, J. KAJINO and T. TAKABATAKE, "Optical Study of Charge Instability in  $CeRu_2Al_{10}$  in Comparison with  $CeOs_2Al_{10}$  and  $CeFe_2Al_{10}$ ," *Phys. Rev. B* **84**, 165125 (7 pages) (2011).

- S. KIMURA, Y. MURO and T. TAKABATAKE**, “Anisotropic Electronic Structure of the Kondo Semiconductor  $\text{CeFe}_2\text{Al}_{10}$  Studied by Optical Conductivity,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 033702 (4 pages) (2011).
- Y. ZHANG, L. X. YANG, M. XU, Z. R. YE, F. CHEN, C. HE, H. C. XU, J. JIANG, B. P. XIE, J. J. YING, X. F. WANG, X. H. CHEN, J. HU, M. MATSUNAMI, S. KIMURA and D. L. FENG**, “Nodeless Superconducting Gap in  $\text{A}_x\text{Fe}_2\text{Se}_2$  ( $A = \text{K, Cs}$ ) Revealed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy,” *Nat. Mater.* **10**, 273–277 (2011).
- T. HIRAHARA, G. BIHLMAYER, Y. SAKAMOTO, M. YAMADA, H. MIYAZAKI, S. KIMURA, S. BLUGEL and S. HASEGAWA**, “Interfacing 2D and 3D Topological Insulators:  $\text{Bi}(111)$  Bilayer on  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ,” *Phys. Rev. Lett.* **107**, 166801 (5 pages) (2011).
- S. R. PARK, W. S. JUNG, G. R. HAN, Y. K. KIM, C. KIM, D. J. SONG, Y. Y. KOH, S. KIMURA, K. D. LEE, N. HUR, J. Y. KIM, B. K. CHO, Y. S. KWON, J. H. HAN and C. KIM**, “Intrinsic Quasi-Particle Dynamics of Topological Metallic States,” *New J. Phys.* **13**, 013008 (11 pages) (2011).
- S. TANAKA, M. MATSUNAMI and S. KIMURA**, “Observation of Anomalous Peaks in the Photoelectron Spectra of Highly Oriented Pyrolytic Graphite: Folding of the Band due to the Surface Charge Density Wave Transition,” *Phys. Rev. B* **84**, 121411(R) (5 pages) (2011).
- F. NAKAMURA, Y. KOUSA, A. A. TASKIN, Y. TAKEICHI, A. NISHIDE, A. KAKIZAKI, M. D’ANGELO, P. LEFEVRE, F. BERTRAN, A. TALEB-IBRAHIMI, F. KOMORI, S. KIMURA, H. KONDO, Y. ANDO and I. MATSUDA**, “Topological Transition in  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  Studied as a Function of Sb Doping,” *Phys. Rev. B* **84**, 235308 (8 pages) (2011).
- M. MATSUNAMI, M. TAGUCHI, A. CHAINANI, R. EGUCHI, M. OURA, A. SAKAI, S. NAKATSUJI and S. SHIN**, “Kondo Resonance in  $\text{PrTi}_2\text{Al}_{20}$ : Photoemission Spectroscopy and Single-Impurity Anderson Model,” *Phys. Rev. B* **84**, 193101 (4 pages) (2011).
- H. YAMAOKA, T. KAMBE, T. SATO, Y. ISHIDA, M. MATSUNAMI, R. EGUCHI, Y. SENBA and H. OHASHI**, “Electronic State of Organic Molecular Magnet: Soft X-Ray Spectroscopy Study of  $\alpha$ -TDAE- $\text{C}_{60}$  Single Crystal,” *Phys. Rev. B* **84**, 161404(R) (4 pages) (2011).
- H. OKAMURA, R. KITAMURA, M. MATSUNAMI, H. SUGAWARA, H. HARIMA, H. SATO, T. MORIWAKI, Y. IKEMOTO and T. NANBA**, “Optical Conductivity and Electronic Structure of  $\text{CeRu}_4\text{Sb}_{12}$  under High Pressure,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 084718 (9 pages) (2011).
- P. A. BHOBE, A. CHAINANI, M. TAGUCHI, R. EGUCHI, M. MATSUNAMI, T. OHTSUKI, K. ISHIZAKA, M. OKAWA, M. OURA, Y. SENBA, H. OHASHI, M. ISOBE, Y. UEDA and S. SHIN**, “Electronic Structure of an Antiferromagnetic Metal:  $\text{CaCrO}_3$ ,” *Phys. Rev. B* **83**, 165132 (7 pages) (2011).
- H. YAMAOKA, I. JARRIGE, N. TSUJII, M. IMAI, J. LIN, M. MATSUNAMI, R. EGUCHI, M. ARITA, K. SHIMADA, H. NAMATAME, M. TANIGUCHI, M. TAGUCHI, Y. SENBA, H. OHASHI, N. HIRAOKA, H. ISHII and K. D. TSUEI**, “Electronic Structure of  $\text{YbGa}_{1.15}\text{Si}_{0.85}$  and  $\text{YbGa}_x\text{Ge}_{2-x}$  Probed by Resonant X-Ray Emission and Photoelectron Spectroscopies,” *Phys. Rev. B* **83**, 104525 (10 pages) (2011).
- T. OHTSUKI, A. CHAINANI, R. EGUCHI, M. MATSUNAMI, Y. TAKATA, M. TAGUCHI, Y. NISHINO, K. TAMASAKU, M. YABASHI, T. ISHIKAWA, M. OURA, Y. SENBA, H. OHASHI, T. HASEGAWA and S. SHIN**, “Role of Ti 3d Carriers in Mediating the Ferromagnetism of Co:  $\text{TiO}_2$  Anatase Thin Films,” *Phys. Rev. Lett.* **106**, 047602 (4 pages) (2011).

**K. ISHIZAKA, T. KISS, T. YAMAMOTO, Y. ISHIDA, T. SAITOH, M. MATSUNAMI, R. EGUCHI, T. OHTSUKI, A. KOSUGE, T. KANAI, M. NOHARA, H. TAKAGI, S. WATANABE and S. SHIN**, “Femtosecond Core-Level Photoemission Spectroscopy on 1T-TaS<sub>2</sub> Using a 60-eV Laser Source,” *Phys. Rev. B* **83**, 081104(R) (4 pages) (2011).

**K. IMURA, S. KANEMATSU, K. MATSUBAYASHI, H. S. SUZUKI, K. DEGUCHI and N. K. SATO**, “Discontinuous Transition from a Real Bound State to Virtual Bound State in a Mixed-Valence State of SmS,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 113704 (4 pages) (2011).

**Y. R. JANG, J. B. HONG, B. H. MIN, M. A. JUNG, Y. Y. SONG, H. J. OH, K. J. LEE, M. H. JUNG, S. KANEMATSU, K. IMURA, K. DEGUCHI, N. K. SATO and Y. S. KWON**, “Interplay of the Superconductivity and Magnetism in Eu<sub>0.7</sub>Na<sub>0.3</sub>Fe<sub>2</sub>As<sub>1.4</sub>P<sub>0.6</sub>,” *Supercond. Sci. Technol.* **24**, 085017 (9 pages) (2011).

#### B-2) 国際会議のプロシーディングス

**N. YAMAMOTO, M. SHIMADA, M. ADACHI, H. ZEN, T. TANIKAWA, Y. TAIRA, S. KIMURA, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, T. TAKAHASHI and M. KATOH**, “Ultrashort coherent terahertz radiation from ultrashort dipoles in electron bunches circulating in a storage ring,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A* **637**, S112–S115 (2011).

**N. K. SATO, K. DEGUCHI, K. IMURA, N. KABEYA, N. TAMURA and K. YAMAMOTO**, “Correlation of Ferromagnetism and Superconductivity in UCoGe,” *AIP Conf. Proc.* **1347**, 132–137 (2011).

**K. DEGUCHI, T. FURUKAWA, S. BAN, K. IMURA, K. MATSUBAYASHI and N. K. SATO**, “Construction of a Magnetometer Using a Piezo Actuator,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, SA108 (3 pages) (2011).

**N. KABEYA, K. IMURA, K. DEGUCHI and N. K. SATO**, “Thermal Expansion Measurements Using the Strain Gauge Technique with Kelvin Double Bridge,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, SA098 (3 pages) (2011).

**K. IMURA, S. KANEMATSU, K. DEGUCHI, H. S. SUZUKI, K. MATSUBAYASHI and N. K. SATO**, “Thermoelectric Power Investigation on SmS,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, SA077 (3 pages) (2011).

#### B-3) 総説, 著書

木村真一, 「固体中の電子は人間社会と同じ?」 「放射光が解き明かす脅威のナノ世界」 講談社ブルーバックス, pp. 119–121 (2011).

松波雅治, 「光電子分光と光反射分光を組み合わせた強相関電子系の研究」 *放射光* **24**, 109–112 (2011).

#### B-4) 招待講演

**S. KIMURA**, “Novel Kondo semiconductors CeM<sub>2</sub>Al<sub>10</sub> (M = Fe, Ru, Os): Anisotropic Kondo effect and CDW-driven magnetic ordering,” SFB/TRR seminar, Stuttgart University, Stuttgart (Germany), March 2011.

**S. KIMURA**, “Novel Kondo semiconductors CeM<sub>2</sub>Al<sub>10</sub> (M = Fe, Ru, Os): Anisotropic Kondo effect and CDW-driven magnetic ordering,” *Berichte aus der Physik*, Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe, Dresden (Germany), March 2011.

**S. KIMURA**, “Infrared and Terahertz Synchrotron Radiation,” SESAME-JSPS School, Amman (Jordan), November 2011.

松波雅治, 「光電子分光と光反射分光を組み合わせた強相関電子系の研究」 第24回日本放射光学会年会・合同シンポジウム, つくば, 2011年1月.

松波雅治, 木村真一, 「UVSORにおける低エネルギーアンジュレータビームラインの現状」 ISSP-Workshop 「東京大学アウトステーション(SPring-8 BL07LSU)での物性研究の新展開」 柏, 2011年3月.

木村真一,「強相関希土類化合物の量子臨界点近傍の電子状態の低エネルギー分光研究」物性研究所談話会, 柏, 2011年9月.

木村真一,「固体の機能性を生み出す電子構造の分光研究」名工大 - 自然科学研究機構合同講演会第三回講演会, 名古屋, 2011年10月.

木村真一,「大強度テラヘルツ光の利用」第18回FELとHigh Power Radiation研究会, 岡崎, 2011年12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, 第5回日本放射光学会若手奨励賞(2001).

松波雅治, 第15回日本放射光学会奨励賞(2011).

#### 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

7<sup>th</sup> International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources, Member of International Advisory Committee (Melbourne, Australia, November 2013).

The 11<sup>th</sup> International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation, Member of Scientific Program Committee (Lyon, France, July 2012).

6<sup>th</sup> International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources, Member of International Advisory Committee (Trieste, Italy, September 2011).

第25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(2011).

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).

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

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

5<sup>th</sup> 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).

3<sup>rd</sup> 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).

4<sup>th</sup> 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 (2009–2010, 2011–2012).

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 (2009–2010, 2011–2012).

(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 (2003–2010).

(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 11<sup>th</sup> 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 4<sup>th</sup> 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

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「物性科学概論」2011年7月.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「極端紫外光分光光学」2011年12月.

東京大学物性研究所, 嘱託研究員, 1995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).

科学技術振興事業団さきがけ研究21,「赤外磁気光学イメージング分光による局所電子構造」木村真一(1999年-2002年).

#### C) 研究活動の課題と展望

物質の電子構造を明確にすることは、物性の理解を深め、新しい機能性を創りだすのに重要である。そのため、電子構造を観測するための重要な手段の1つとして、放射光の高輝度性とエネルギー・偏光可変性を使った新しい分光法である3次元角度分解光電子分光(BL5U)軌道対称性・波数分離角度分解光電子分光(BL7U)低温高圧下赤外・テラヘルツ分光(BL6B)を開発して、機能性固体の電子構造研究を行ってきた。今後は、さらに詳細な電子構造を調べることを目的として、高エネルギー分解能スピン・角度分解逆光電子分光やテラヘルツポンプ・光電子プローブ分光の開発を進め、物質科学へ展開していきたい。

## 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
- d) 発光分光法による短波長強レーザー場中の原子分子過程の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 我々の専用ビームライン BL6U 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 / 秒以上の性能を有しており、低エネルギー領域における世界最先端ビームラインの一つである。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、更には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い、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。2010年度からは、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が出来るように、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。
- b) 高い検出効率を誇る、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。特に、これまで直接的な観測がなされていなかった、分子の内殻電子二つが1光子の吸収により放出される過程について、異なる原子サイトから二電子が放出される過程が存在することを明らかにした。これらの実験研究は、従来 KEK-PF やドイツの放射光施設 BESSY で行われてきたが、2010年度後半から、フランスの放射光施設 SOLEIL においても国際共同研究を行っている。なお、磁気ボトル型分析器ではエネルギー分解能が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を進めている。
- d) 日本のX線自由電子レーザー（XFEL）、SACLA の試験加速器として SPring-8 サイトに建設された SCSS において、極端紫外領域の強レーザー光に曝された原子分子の挙動について、発光分光法に基づく実験研究を進めている。ごく最近、EUV-FEL 光により励起された原子が集団として振る舞う量子光学効果、超蛍光の観測に成功した。He 原子の共鳴励起に相当する、波長 53.7 nm の EUV-FEL 光を高濃度の He 原子に照射した場合、可視領域の蛍光が、通常の蛍光寿命よりも遙かに短い、最小 10 ps 以下のパルス幅を有する超蛍光として観測された。希ガスクラスタや分子、或いは凝縮系を観測対象とした、X線を含む短波長領域での超蛍光の観測を目指した共同研究が現在進行中である。

B-1) 学術論文

P. LABLANQUIE, F. PENENT, J. PALAUDOUX, L. ANDRIC, P. SELLES, S. CARNIATO, K. BUČAR, M. ŽITNIK, M. HUTTULA, J. H. D. ELAND, E. SHIGEMASA, K. SOEJIMA, Y. HIKOSAKA, I. H. SUZUKI, M. NAKANO and K. ITO, “Properties of Hollow Molecules Probed by Single-Photon Double Ionization,” *Phys. Rev. Lett.* **106**, 063003 (4 pages) (2011).

I. H. SUZUKI, Y. HIKOSAKA, E. SHIGEMASA, P. LABLANQUIE, F. PENENT, K. SOEJIMA, M. NAKANO, N. KOUCHI and K. ITO, “Decay Pathways after Xe 3d Inner Shell Ionization Using a Multi-Electron Coincidence Technique,” *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **44**, 075003 (7 pages) (2011).

L. ISHIKAWA, T. ODAGIRI, K. YACHI, N. OHNO, T. TSUCHIDA, M. KITAJIMA and N. KOUCHI, “Doubly Excited States of H<sub>2</sub> as Studied by Angle-Resolved Electron Energy Loss Spectroscopy in Coincidence with Detecting Lyman- $\alpha$  Photons,” *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **44**, 065203 (8 pages) (2011).

Y. HIKOSAKA, P. LABLANQUIE, F. PENENT, J. PALAUDOUX, L. ANDRIC, K. SOEJIMA, E. SHIGEMASA, I. H. SUZUKI, M. NAKANO and K. ITO, “Energy Correlation among Three Photoelectrons Emitted in Core-Valence-Valence Triple Photoionization of Ne,” *Phys. Rev. Lett.* **107**, 113005 (5 pages) (2011).

P. LABLANQUIE, S-M. HUTTULA, M. HUTTULA, L. ANDRIC, J. PALAUDOUX, J. H. D. ELAND, Y. HIKOSAKA, E. SHIGEMASA, K. ITO and F. PENENT, “Multi-Electron Spectroscopy: Auger Decays of the Argon 2s Hole,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 18355–18364 (2011).

M. NAGASONO, J. R. HARRIES, H. IWAYAMA, T. TOGASHI, K. TONO, M. YABASHI, Y. SENBA, H. OHASHI, T. ISHIKAWA and E. SHIGEMASA, “Observation of Free-Electron-Laser-Induced Collective Spontaneous Emission (Super-Fluorescence),” *Phys. Rev. Lett.* **107**, 193603 (4 pages) (2011).

A. HISHIKAWA, M. FUSHITANI, Y. HIKOSAKA, A. MATSUDA, C.-N. LIU, T. MORISHITA, E. SHIGEMASA, M. NAGASONO, K. TONO, T. TOGASHI, H. OHASHI, H. KIMURA, Y. SENBA, M. YABASHI and T. ISHIKAWA, “Enhanced Nonlinear Double Excitation of He in Intense Extreme Ultraviolet Laser Fields,” *Phys. Rev. Lett.* **107**, 243003 (4 pages) (2011).

B-4) 招待講演

繁政英治, 「極紫外自由電子レーザー場中の原子分子過程」日本分光学会中国四国支部総会講演会, 東広島, 2011年12月.

繁政英治, 「極紫外強レーザー場中の原子分子過程」第18回FELとHigh Power Radiation研究会, 岡崎, 2011年12月.

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, 2010–2011).

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).  
第25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 (2011).

#### 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

総合研究大学院大学物理科学研究科,「光化学」2011年6月14日-9月20日.

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

BL6Uでは、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の、SPring-8では実施出来ない1250 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。また、FELの出現によって可能となった、EUVからX線領域における強レーザー場中の原子分子の非線形過程に関して、発光分光法に基づく実験研究を継続する。短波長領域での原子分子ダイナミクスが、近赤外域で確立されつつある描像で解釈できるのかは未知であり、強レーザー場に対する原子分子過程の本質的理解を得たい。

## 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:YVO<sub>4</sub> 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），バルク擬位相整合（QPM）素子：大口径周期分極反転 MgO:LiNbO<sub>3</sub>（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，YVO<sub>4</sub> 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。特にレーザー科学発展の中で生じたパルスギャップ領域の開拓に関する貢献，パルスギャップレーザーによる新現象の解明などが期待できる。
- 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。これまでもエッジ励起セラミック Yb:YAG マイクロチップレーザーによる高平均出力動作，手のひらサイズ高輝度温度ジャイアントパルスマイクロチップレーザー，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。また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

**J. AKIYAMA, Y. SATO and T. TAIRA**, “Laser Demonstration of Diode-Pumped Nd<sup>3+</sup>-Doped Fluorapatite Anisotropic Ceramics,” *Appl. Phys. Express* **4**, 022703 (3 pages) (2011).

**N. PAVEL, M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “Composite, All-Ceramics, High-Peak Power Nd:YAG/Cr<sup>4+</sup>:YAG Monolithic Micro-Laser with Multiple-Beam Output for Engine Ignition,” *Opt. Express* **19**, 9378–9384 (2011).

**Y. SATO, T. TAIRA, V. SMIRNOV, L. GLEBOVA and L. GLEBOV**, “Continuous-Wave Diode-Pumped Laser Action of Nd<sup>3+</sup>-Doped Photo-Thermo-Refractive Glass,” *Opt. Lett.* **36**, 2257–2259 (2011).

**Y. SATO and T. TAIRA**, “Variation of the Stimulated Emission Cross Section in Nd:YAG Caused by the Structural Changes of Russell-Saunders Manifolds,” *Opt. Mater. Express* **1**, 514–522 (2011).

**R. BHANDARI and T. TAIRA**, “> 6 MW Peak Power at 532 nm from Passively Q-Switched Nd:YAG/Cr<sup>4+</sup>:YAG Microchip Laser,” *Opt. Express* **19**, 19135–19141 (2011).

**R. BHANDARI and T. TAIRA**, “Megawatt Level UV Output from [110] Cr<sup>4+</sup>:YAG Passively Q-Switched Microchip Laser,” *Opt. Express* **19**, 22510–22514 (2011).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

**P. LOISEAU, T. TAIRA and G. AKA**, “Review and Evaluation of the Nonlinear Capabilities of RECOB (RE = Y, Gd) Oxyborate Crystals for SHG,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics (ASSP)*, ATuB08 (2011).

**T. TAIRA**, “Anisotropic Laser Ceramics Toward Giant Micro-Photonics,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics (ASSP)*, ATuE1 (2011). (Invited)

**J. AKIYAMA and T. TAIRA**, “Fabrication of Rare Earth Patterned Laser Ceramics by Use of Gradient Magnetic Field,” *OSA Topical Meeting on Advances in Optical Materials (AIOM)*, AIWA3 (2011).

**Y. SATO and T. TAIRA**, “Influence of Nd<sup>3+</sup> Concentration on Laser Transitions in Nd:YAG,” *OSA Topical Meeting on Advances in Optical Materials (AIOM)*, AIThA6 (2011).

**N. PAVEL, M. TSUNEKANE, K. KANEHARA and T. TAIRA**, “Composite All-Ceramics, Passively Q-Switched Nd:YAG/Cr<sup>4+</sup>:YAG Monolithic Micro-Laser with Two-Beam Output for Multi-Point Ignition,” *The Conference on Lasers and Electro Optics (CLEO 2011)*, CMP1 (2011). (OSA Press Release)

**Y. SATO and T. TAIRA**, “Detailed Fluorescent Study of Nd:YAG Dependent on Doping Concentration,” *The Conference on Lasers and Electro Optics (CLEO 2011)*, CMP6 (2011).

**J. AKIYAMA and T. TAIRA**, “First Demonstration of Rare-Earth-Doped Anisotropic Ceramic Laser,” *CLEO/Europe 2011*, CA1.1 SUN (2011).

**N. PAVEL, M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “Passively Q-Switched Nd:YAG/Cr<sup>4+</sup>:YAG All-Ceramics, Composite, Monolithic Micro-Lasers with Multi-Beam Output for Laser Ignition,” *CLEO/Europe 2011*, CA7.1 MON (2011).

**R. BHANDARI and T. TAIRA**, “6MW Peak Power at 532 nm by Using Linearly Polarized Passively Q-Switched Microchip Laser,” *CLEO/Europe 2011*, CA7.6 MON (2011).

**S. JOLY and T. TAIRA**, “Novel Method for Pulse Control in Nd:YVO<sub>4</sub>/Cr<sup>4+</sup>:YAG Passively Q-Switched Microchip Laser,” *CLEO/Europe 2011*, CA8.1 TUE (2011).

**P. LOISEAU, T. TAIRA and G. AKA**, “SHG Capabilities of RECOB (RE = Y, Gd) Oxyborate Crystals,” *CLEO/Europe 2011*, CE.P.21 WED (2011).

- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Characterization of High-Energy Optical-Parametric Oscillation by Using Periodically Poled Mg-Doped Congruent LiTaO<sub>3</sub>,” *CLEO/Europe 2011*, CD9.4 THU (2011).
- T. TAIRA**, “Giant Microphotonics: Large Aperture PPMGLN,” *Journées Nationales des Cristaux pour l’Optique (JNCO)*, JNCO\_6, 55-58 (2011). (Invited)
- T. TAIRA**, “Large Aperture QPM devices for Giant Micro-Photonics,” 20th International Laser Physics Workshop (LPHYS’11), Seminar 4.3.1 (2011). (Invited)
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Fabrication of Slant Quasi Phase Matching Structure in Mg-Doped Congruent LiNbO<sub>3</sub>,” *2011 Nonlinear Optics (NLO)*, NMA4 (2011).
- R. BHANDARI and T. TAIRA**, “Megawatt Level UV Output from <110> Cr<sup>4+</sup>:YAG Passively Q-Switched Microchip Laser,” *2011 Nonlinear Optics (NLO)*, NME2 (2011).
- S. HAYASHII, H. SAKAI, T. TAIRA, H. MINAMIDE and K. KAWASE**, “High Power, Single Longitudinal Mode Terahertz Wave Generation Pumped by a Microchip Nd:YAG Laser,” *2011 Nonlinear Optics (NLO)*, NWE23 (2011).
- T. TAIRA**, “Large Aperture QPM Devices Toward Giant Micro-Photonics,” *22nd General Congress of the International Commission for Optics (ICO-22)*, IAPD 1-2286226 (2011). (Keynote)
- M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “Laser Performance of Composite Nd:YAG/Cr:YAG Ceramics for Laser Ignition,” *IQEC/CLEO Pacific Rim 2011*, 4220-CT-7 (2011).
- T. TAIRA**, “Ceramic Lasers and Laser Materials Toward Giant Micro-Photonics,” *2nd EOS Topical Meeting on Lasers (ETML’11)*, 4644 (2011). (Invited)
- T. TAIRA**, “Promise on Microchip Lasers for Peening—Giant Micro-Photonics—,” *The 3rd International Conference on Laser Peening and Related Phenomena*, 11PM2-2 (2011). (Invited)
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Comparative Study on the Temperature Dependent Emission Cross Section of Nd:YAG, Nd:YVO<sub>4</sub>, and Nd:GdVO<sub>4</sub>,” *Frontiers in Optics 2011, The 95<sup>th</sup> OSA Annual Meeting*, FthB4 (2011).
- Y. SATO, J. AKIYAMA and T. TAIRA**, “Spin–Orbit Momentum Controlled Anisotropic Laser Ceramics,” *Pacific-Rim Laser Damage 2011: Optical Materials for High Power Lasers*, 8206-62 (2011). (Invited Paper)
- T. TAIRA**, “Domain Controlling for Anisotropic Laser Ceramics,” *7th Laser Ceramics Symposium* (2011). (Invited)

### B-3) 総説 , 著書

- T. TAIRA and G. AKA**, “Introduction: Advances in Optical Materials (AIOM) Feature,” *Opt. Mater. Express* **1**, 523–524 (2011).
- T. TAIRA**, “Domain-Controlled Laser Ceramics Toward Giant Micro-Photonics,” *Opt. Mater. Express* **1**, 1040–1050 (2011).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Large-Aperture, Axis-Slant Quasi-Phase Matching Device Using Mg-Doped Congruent LiNbO<sub>3</sub>,” *Opt. Mater. Express* **1**, 1376–1382 (2011).
- B. BOULANGER, S. T. CUNDIFF, D. J. GAUTHIER, M. KARLSSON, Y. LU, R. A. NORWOOD, D. SKRYABIN and T. TAIRA**, “Focus Issue Introduction: Nonlinear Optics,” *Opt. Mater. Express* **1**, 1393–1398 (2011).
- 平等拓範, 「6.1.1 レーザーとレーザー光」 「6.1.2 固体レーザーと応用上の特質」 「6.2.2 ビーム計測」 「6.3.4 波長変換」 「7.2.6 マイクロ固体フォトニクス」 「光エレクトロニクスとその応用」 日本学術振興会光エレクトロニクス第130委員会編, オーム社, pp. 177–189, pp. 189–222, pp. 247–266, pp. 289–314, pp. 422–442 (2011).
- N. PAVEL, M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “All-Poly-Crystalline Ceramics Nd:YAG/Cr<sup>4+</sup>:YAG Monolithic Micro-Lasers with Multiple-Beam Output,” in *Laser Pulses / Book 1*, ISBN 978-953-307-429-0, INTECH; Croatia, Chapter 4, 59–82 (2011).

平等拓範,「第3章 固体レーザー材料」,「第4章 固体レーザー装置」,「先端固体レーザー」,レーザー学会編,オーム社, pp. 33–96, pp. 97–147 (2011).

B-4) 招待講演

平等拓範,「ジャイアントマイクロフォトニクス」株式会社リコー, 仙台, 2010年12月.

平等拓範,「マイクロ固体フォトニクス研究の現状」,理研セミナー,理化学研究所仙台支所, 仙台, 2010年12月.

**M. TSUNEKANE, N. KIDO, K. KANEHARA and T. TAIRA**, “Microlaser for Ignition of Automobile Engines,” 31<sup>st</sup> Annual Meeting of The Laser Society of Japan, The University of Electro-Communications, Tokyo (Japan), January 2011.

**T. TAIRA**, “Anisotropic Laser Ceramics toward Giant Micro-Photonics,” OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics (ASSP), Istanbul (Turkey), February 2011.

平等拓範,「The Art of Age Microchip Lasers—toward Giant Micro-Photonics—」『光の日』公開シンポジウム2011, 学術振興会第130委員会, 東京理科大学森戸記念館, 2011年3月.

**M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “Next Generation of Ignition by Micro Solid-State Laser,” Extended Abstracts, 58th Spring Meeting for Jpn. Society of Appl. Phys., Kanagawa (Japan), March 2011.

**J. AKIYAMA and T. TAIRA**, “Laser Oscillation with Anisotropic Ceramics,” Extended Abstracts, 58th Spring Meeting for Jpn. Society of Appl. Phys., Kanagawa (Japan), March 2011.

**T. TAIRA**, “Giant Micro-Photonics,” The 1<sup>st</sup> Japan-Grenoble/Lyon Workshop in Nanophotonics, Institut Néel, Grenoble (France), June 2011.

**T. TAIRA**, “Anisotropic Ceramic Lasers toward Giant Micro-Photonics,” Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris (ENSCP), Pierre & Marie Curie University (Paris VI University), Paris (France), June 2011.

**T. TAIRA**, “Ceramic Lasers toward Giant Micro-Photonics,” Institut Néel, Grenoble (France), June 2011.

**T. TAIRA**, “Giant Microphotonics: Large Aperture PPMgLN,” Journées Nationales des Cristaux pour l’Optique (JNCO) 2011, Marseille (France), July 2011.

**T. TAIRA**, “Large Aperture QPM Devices for Giant Micro-Photonics,” 20th International Laser Physics Workshop (LPHYS’11), Sarajevo (Bosnia and Herzegovina), July 2011.

**T. TAIRA**, “Large Aperture QPM Devices toward Giant Micro-Photonics,” The 22nd General Congress of the International Commission for Optics ICO22, Puebla (Mexico), August 2011. (Keynote).

**T. TAIRA**, “Ceramic Lasers and Laser Materials toward Giant Micro-Photonics,” 2nd EOS Topical Meeting on Lasers (ETML’11), Hotel la Residenza, Capri (Italy) September 2011.

**T. TAIRA**, “Promise on Microchip Lasers for Peening—Giant Micro-Photonics—,” The 3rd International Conference on Laser Peening and Related Phenomena, Osaka International Convention Center, Osaka (Japan), October 2011.

**Y. SATO, J. AKIYAMA and T. TAIRA**, “Spin–Orbit Momentum Controlled Anisotropic Laser Ceramics,” Pacific-Rim Laser Damage 2011: Optical Materials for High Power Lasers, Shanghai (China), November 2011.

**T. TAIRA**, “Domain Controlling for Anisotropic Laser Ceramics,” 7th Laser Ceramics Symposium, Singapore (Singapore), November 2011.

**T. TAIRA**, “Laser Ignition for Engine,” Workshop on Transparent Ceramics for Photonic Applications, Singapore (Singapore), November 2011.

#### B-5) 特許出願

特願 2011-012645,「レーザ点火装置」ニコライ パベル, 平等拓範, 常包正樹, 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)2011年.

特願 2011-028685,「透光性多結晶材料とその製造方法」平等拓範, 秋山順, 浅井滋生(自然科学研究機構, 科学技術振興機構)2011年.

特願 2011-113610,「受動Q スイッチ型固体レーザ装置」平等拓範, ジョリー シモン, バンダリ ラケシュ(自然科学研究機構)2011年.

特願 2011-171664,「固体レーザ装置」平等拓範, コウ ウエイベン(自然科学研究機構)2011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).

平等拓範, 他, 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).

平等拓範, 他,(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).

平等拓範, 米国電気電子学会(IEEE)シニア・メンバー (2011).

#### 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-).

(独)新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)評価委員 (2005-2006), 技術委員 (2011-).

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ニクス」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 (2008–).  
応用物理学会日本光学会レーザーディスプレイ技術研究グループ顧問 (2008–).  
レーザー学会「マイクロ固体フォトニクスの新展開」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 (2010–2011).  
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).  
23<sup>rd</sup> 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 (2006–2011).  
3<sup>rd</sup> 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).  
3<sup>rd</sup> 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).  
4<sup>th</sup> 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).  
4<sup>th</sup> 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 (2010–2011).  
Advances in Optical Materials (AIOM 2011), 国際会議プログラム委員会委員 (2010–2011).  
CLEO 2011: Science & Innovations 2: Solid-State, Liquid and Gas Lasers, 国際会議諮問委員 (2010–2011).  
IQEC/CLEO Pacific Rim 2011, Ultrafast Optics and Photonics, 国際会議分科委員会諮問委員 (2010–2011).

Laser Ceramics Symposium (7th LCS): International Symposium on Transparent Ceramics for Photonic Applications, 国際会議国際諮問委員 (2011).

Pacific Rim Laser Damage Symposium—Optical Materials for High Power Lasers, 国際委員会委員 (2011).

Advances in Optical Materials (AIOM 2012), 国際会議プログラム委員会委員 (2011–2012).

4th International Conference on “Smart Materials, Structures and Systems” (CIMTEC 2012), Symposium F “Smart & Adaptive Optics,” 国際会議国際諮問委員 (2011–).

Advanced Laser & Photon Source, 実行委員およびプログラム委員 (2011–).

5th EPS Europhoton Conference on “Solid-State and Fiber and Waveguide Coherent Light Sources,” 国際会議分科委員 (2011–).

(社)レーザー学会, 国際会議 Optics & Photonics International 2012, “Advanced Laser & Photon Source,” 実行委員会およびプログラム委員会委員 (2011–).

Laser Damage of SPIE, プログラム委員 (2011–).

(社)レーザー学会学術講演会第32回年次大会プログラム委員 (2011–).

Int. Conf. “Micro- to Nano-Photonics III —ROMOPTO 2012,” 国際会議プログラム委員 (2011–).

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 (2008–2010).

日本学術振興会光エレクトロニクス第130委員会委員 (2007–2010), 幹事 (2008–).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2011–).

日本学術振興会生体ひかりイメージング技術と応用第185委員会委員 (2011–).

学会誌編集委員

*Journal of Optical Materials*, ELSEVIER, 編集委員会委員 (2010–).

*Journal of Optical Materials Express*, The Optical Society (OSA), シニア編集委員会委員 (2010–).

その他

愛知県産業労働部愛知県若手奨励賞審査員 (2007–2010).

日本原子力研究開発機構研究系職員採用試験研究業績評価委員会委員 (2008–2010).

日本原子力研究開発機構特定課題推進員(任期付研究員)採用試験研究業績評価委員会委員 (2011).

#### B-8) 大学での講義, 客員

豊橋技術科学大学ナノフォトンクス情報テクノロジーリサーチセンター, 客員教授, 2011年.

仏国ジョゼフ・フーリエ大学, 客員教授, 2011年.

#### 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)「高出力小型固体レーザーによる広帯域赤外光発生に関する研究」平等拓範 (1999年–2001年).

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

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-2009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ー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-2011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-).

科研費基盤研究(C),「超短パルス発生への適用を目指した傾斜型擬似位相整合デバイスの研究」石月秀貴(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ニクスの基礎研究」平等拓範(2011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(2011年).

(株)リコー,「高出力レーザー光源の研究」平等拓範(2011年).

#### C) 研究活動の課題と展望

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

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基本波（800 nm）と二倍波（400 nm）を空気またアルゴンガス中に集光し，2 μm から 20 μm まで波長帯域の広がった超短光パルスを発生させることに成功した。パルスエネルギーは 250 nJ 程度であり，一般的な非線形分光に使用するには十分なエネルギーである。
- b) 前述の研究によって発生した広帯域中赤外光パルスのパルス幅を測定する実験を行った。2 μm から 20 μm まで波長帯域の広がったコヒーレント光について，すべての波長領域の光について位相関係を求めることは容易ではない。本研究では，発生と同様に空気を非線形媒質として，参照光パルスと中赤外光の相互相関スペクトルを測定する手法をとった。空気を非線形媒質として使用することにより，広帯域な位相整合が可能となり，広帯域中赤外光に対応することができた。この方法によって，測定されたパルス幅は 10.8 fs となった。中赤外光パルスの中心波長は 4.4 μm であり 単一サイクルよりも短いパルスとなっていることがわかった。また 中赤外光パルスの位相の安定性を計測し，さらにその位相制御の実験を行った。中赤外光パルスを発生させるために使用しているチタンサファイアレーザーの基本波と二倍波との遅延時間を制御することで，中赤外光パルスの位相を自在に制御できることを示した。
- 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。ベンゼン（C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>）や二硫化炭素（CS<sub>2</sub>）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。この研究は，前職の理化学研究所で行われた研究であり，分子研では，今後，前述の赤外光パルス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

**T. FUJI, Y.-I. SUZUKI, T. HORIO and T. SUZUKI**, “Excited-State Dynamics of CS<sub>2</sub> Studied by Photoelectron Imaging with a Time Resolution of 22 fs,” *Chem. –Asian J.* **6**, 3028–3034 (2011).

**Y.-I. SUZUKI, T. HORIO, T. FUJI and T. SUZUKI**, “Time-Resolved Photoelectron Imaging of S<sub>2</sub> → S<sub>1</sub> Internal Conversion in Benzene and Toluene,” *J. Chem. Phys.* **134**, 184313 (8 pages) (2011).

**Y. NOMURA, Y. ITO, A. OZAWA, X.-Y. WANG, C.-T. CHEN, S. SHIN, S. WATANABE and Y. KOBAYASHI**, “Coherent Quasi-cw 153 nm Light Source at 33 MHz Repetition Rate,” *Opt. Lett.* **36**, 1758–1760 (2011).

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 resolved photoelectron imaging of polyatomic molecules with 15 fs UV pulses,” *PQE-2011* p. 182 (2011).

**T. FUJI and Y. NOMURA**, “Ultrabroadband mid-infrared source based on four-wave mixing in gases,” *LPHYS2011 Seminar* 5.3.4 (2011).

**T. FUJI and Y. NOMURA**, “Ultrabroadband mid-infrared source based on four-wave rectification in gases,” *Ultrafast Optics 2011 We03* (2011).

**Y. NOMURA, Y. ITO, A. OZAWA, X.-Y. WANG, C.-T. CHEN, S. SHIN, S. WATANABE and Y. KOBAYASHI**, “Coherent Quasi-cw 153 nm Light Generated at 33 MHz Repetition Rate,” *CLEO: 2011—Laser Applications to Photonic Applications CMJ4* (2011).

**N. KUSE, Y. NOMURA, A. OZAWA, M. KUWATA-GONOKAMI and Y. KOBAYASHI**, “Passive synchronization of repetition and offset frequency between two mode-locked Yb-doped fiber lasers,” *CLEO: 2011—Laser Applications to Photonic Applications JThB121* (2011).

B-4) 招待講演

**T. FUJI**, “Time resolved photoelectron imaging of polyatomic molecules with 15 fs UV pulses,” *PQE-2011, Snowbird (U.S.A.)*, January 2011.

**T. FUJI**, “Ultrabroadband mid-infrared source based on four-wave mixing in gases,” *LPHYS2011, Sarajevo (Bosnia and Herzegovina)*, July 2011.

藤 貴夫, 「単一サイクル中赤外光パルス発生」理研シンポジウム, 和光, 2011年12月.

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).

HILAS 国際会議プログラム委員 (2012).

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-.

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-2011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の極端紫外光源の開発およびその応用」野村雄高 (2010年).

豊秋奨学会海外渡航旅費助成,「153 nmにおけるコヒーレントな高繰り返し準連続光源」野村雄高 (2011年).

C) 研究活動の課題と展望

ファイブレ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。本年度は，当面の目標としていた，3-20  $\mu\text{m}$  にわたる広帯域な赤外光を発生させることに成功した。今後は，この光源の特徴をいかした新しいタイプの分光法を開発し，分子科学の発展や，生物，医療など異分野へ応用していくことを考えている。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 ~ 2011年3月31日)\*)

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：

- 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）
- 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
- 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

2011年の1月から3月までは、メンバーのすべてが転出のための全力の努力を払った。その中で、以下の成果が昨年に引き続き得られた。

- 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 m<sup>2</sup>/gに及ぶMesoporous Carbon Nano-Dendrite (MCND)を発表したが、更にこれを燃料電池電極へ応用し、高い性能発揮に対する検討を行った。また、企業に依頼して白金担持体陽極の評価を行った結果、世界最高の性能が得られた。
- 銅アセチリド化合物を真空中で100~200 °C程度に加熱し、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が、これが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。
- 新規錯体 [CrCyclam(CC-5-methyl-4'5'-ethylene-dithio-TTF)<sub>2</sub>]<sup>+</sup> (1<sup>+</sup>) 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)[X]<sub>2</sub>(MeCN)(PhCl)<sub>2</sub> (X = ClO<sub>4</sub><sup>-</sup>, BF<sub>4</sub><sup>-</sup>) を得ることに成功した。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

**J. NISHIJO, K. JUDAI and N. NISHI**, "Weakferromagnetism and Strong Spin-Spin Interaction Mediated by the Mixed-Valence Ethynyl-TTF Type Ligand," *Inorg. Chem.* **50**, 3464–3470 (2011).

**K. JUDAI, S. NUMAO, J. NISHIJO and N. NISHI**, "In Situ Preparation and Catalytic Activation of Copper Nano-Particles from Acetylide Molecules," *J. Mol. Catal. A: Chem.* **347**, 28–33 (2011).

Y. SUGANUMA, Y. KOWAKA, N. ASHIZAWA, N. NAKAYAMA, H. GOTO, T. ISHIMOTO, U. NAGASHIMA, T. UEDA, T. YAMANAKA, N. NISHI and M. BABA, "Mode-Selective Internal Conversion of Perylene," *Mol. Phys.* **109**, 1831–1840 (2011).

B-4) 招待講演

西 信之, 「大学連携研究設備ネットワークの現状と将来構想」第14回全国国立大学機器分析センター会議, 沖縄県那覇市マリエールオークパイン, 2011年1月.

B-6) 受賞, 表彰

西 信之, 井上學術賞 (1991).

西 信之, 日本化学会學術賞 (1997).

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

学協会役員等

日本化学会化学技術賞等選考委員会委員 (2010–2011).

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(2011年).

共同研究(日産自動車(株))西 信之(2011年).

共同研究(新日鐵化学(株))西 信之(2011年).

#### C) 研究活動の課題と展望

研究室は2011年3月までで解散となったが、それぞれのメンバーがそれぞれの環境で新たな活動を展開している。

特に、西は化学および自動車会社と協力して分子研で開発したグラフェン壁を持つメソ多孔性炭素ナノ樹枝状態(MCND)の連続合成法を2011年8月に開発し、燃料電池メーカーへの供給体制の整備と更なる大型製造設備の設計にあたっている。

\* ) 2011年3月31日退職

2011年4月1日名古屋工業大学プロジェクト教授,東京工業大学特任教授

## 横山利彦(教授)(2002年1月1日着任)

A-1) 専門領域：表面磁性，X線分光学，磁気光学

A-2) 研究課題：

- a) X線磁気円二色性・磁気光学 Kerr 効果などの分光学的手法を用いた磁性薄膜の表面磁性
- b) 一光子・二光子紫外光電子円二色性および光電子顕微鏡法の方法論開発
- c) X線吸収微細構造法を用いた固体の熱的性質

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，NH<sub>3</sub>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。
- c) Invar合金は古くから熱膨張のない物質として知られており，さまざまな実用がなされているが，極低温での非熱膨張の起源を，シンクロトロン放射光を用いた広域X線吸収微細構造分光（EXAFS）法と経路積分有効ポテンシャル計算により，格子振動の量子揺らぎに依ることを解明した。プレスリリースを行い，科学新聞1面と日刊工業新聞に掲載された。

B-1) 学術論文

**H. WANG, S. HAMANAKA, T. YOKOYAMA, H. YOSHIKAWA and K. AWAGA**, "In-situ XAFS Studies of Mn<sub>12</sub> Molecular-Cluster Batteries: Super-Reduced Mn<sub>12</sub> Clusters in Solid-State Electrochemistry," *Chem. -Asian J.* **6**, 1074–1079 (2011).

**T. YOKOYAMA and K. EGUCHI**, "Anharmonicity and Quantum Effects in Thermal Expansion of an Invar Alloy," *Phys. Rev. Lett.* **107**, 065901 (4 pages) (2011).

**Y. MATSUMOTO, S. SAKAI, S. ENTANI, Y. TAKAGI, T. NAKAGAWA, H. NARAMOTO, P. AVRAMOV and T. YOKOYAMA**, "Ferromagnetic Interlayer Coupling in C<sub>60</sub>-Co Compound/Ni Bilayer Structure," *Chem. Phys. Lett.* **511**, 68–72 (2011).

**N. KAWASAKI, H. WANG, R. NAKANISHI, S. HAMANAKA, R. KITaura, H. SHINOHARA, T. YOKOYAMA, H. YOSHIKAWA and K. AWAGA**, "Nanohybridization of Polyoxometalate Clusters and Single-Wall Carbon Nanotubes: Applications in Molecular Cluster Batteries," *Angew. Chem., Int. Ed.* **50**, 3471–3474 (2011).

A. SAITO, T. TANAKA, Y. TAKAGI, H. HOSOKAWA, H. NOTSU, G. OHZEKI, Y. TANAKA, Y. KOHMURA, M. AKAI-KASAYA, T. ISHIKAWA, Y. KUWAHARA, S. KIKUTA and M. AONO, "Direct Observation of X-Ray Induced Atomic Motion Using Scanning Tunneling Microscope Combined with Synchrotron Radiation," *J. Nanosci. Nanotechnol.* **11**, 2873–2881 (2011).

B-3) 総説, 著書

横山利彦, 「放射光 - その磁性研究への展開」まぐね(Magnetics Jpn.)**6**, 240–247 (2011).

B-4) 招待講演

T. NAKAGAWA, "Threshold Photoemission Magnetic Circular Dichroism," Open Seminar, Max Planck Institute of Microstructure Physics, Halle (Germany), August 2011.

T. YOKOYAMA, "Anharmonicity and quantum effects in thermal expansion of an invar alloy studied by EXAFS and path-integral simulations," Photon Factory SAC meeting, Tsukuba (Japan), October 2011.

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 (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

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, 2011–).

日本放射光学会編集幹事 (2005–2006).

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

学会の組織委員等

第14回 XAFS 討論会実行委員長プログラム委員長 (2011).

XAFS 討論会プログラム委員 (1998–2011).

第15回 X線吸収微細構造国際会議プログラム委員 (2011).

第11回 X線吸収微細構造国際会議プログラム委員 (2000).

日本放射光学会年会組織委員 (2005), プログラム委員 (2005, 2011).

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 (2003-2009), 同化学材料分科会主査 (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「分子スピンの総括班事務局」(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 (2007.4-2012.3).

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, 「物性科学概論」2011年7月20日-22日.

京都大学大学院理学研究科化学専攻, 連携客員教授, 2011年-.

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(B), 「レーザー誘起光電子顕微鏡による磁性薄膜のフェムト秒イメージング」中川剛志 (2011年-2012年).

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, 富士フイルム株式会社, 「無機機能性材料の固体構造解析」横山利彦 (2003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-).

受託研究, 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」横山利彦(2011年-).

C) 研究活動の課題と展望

2002年1月着任以降, 磁性薄膜の表面分子科学的制御と新しい磁気光学分光法の開発を主テーマとして研究グループをスタートさせた。磁性薄膜・ナノワイヤ・ナノドットの磁氣的性質, および分子吸着などの表面化学的な処理による新しい現象の発見とその起源の解明などを目指し, 超高真空表面磁気光学 Kerr 効果法, 高磁場(7 T)極低温(5 K)X線磁気円二色性法(UVSOR 利用), 磁氣的第二高調波発生法(フェムト秒 Ti:Sapphire レーザー使用), 極低温超高真空走査トンネル顕微鏡などの手法を展開している。また, 紫外光励起光電子放出による磁気円二色性が仕事関数しきい値近傍で極端に増大する現象を発見し, 紫外磁気円二色性光電子顕微鏡を世界に先駆けて開発し, さらにはこれまで全く研究されていなかった二光子光電子磁気円二色性法の初観測に成功し, 極めて有効な手法として今後の発展が期待できることが示せた。

昨年度から, 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レキュラーインプリンティング表面の設計と触媒反応制御
- c) Ce 系酸化物固溶体を用いたメタンリフォーミング触媒の開発とその特性解明
- d) 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
- e) 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) Ru 単核錯体，Ir ダイマー，Mn<sub>4</sub> 核オキソクラスター，Ru<sub>3</sub> 核カルボニルクラスターなどの金属錯体を酸化物表面の水酸基と選択的に反応させることによって，酸化物固体表面上に新しい固定化金属錯体を創製した。FT-IR，固体 NMR，XPS，TGA，UV/vis，ラマン分光，XAFS 等の手法により，表面に形成される固定化金属錯体の配位構造を明らかにし，またその触媒特性を検討した。
- b) 酸化物表面に固定化した金属錯体の配位子を鋳型分子とした表面モレキュラーインプリンティング触媒の設計・調製を行い，水素移動反応に鋳型分子の形状に応じた形状選択性を示す表面モレキュラーインプリンティング Ru 単核錯体を創製した。
- c) Ce 系酸化物固溶体表面に担持した Ni 触媒を調製し，そのメタンスチームリフォーミング反応特性と触媒活性構造の相関を明らかにした。
- d) Pt 及び PtCo 合金ナノ粒子カソード触媒について，in-situ 時間分解 QXAFS 法を用いて，燃料電池作動条件下での MEA 中の Pt 及び PtCo 合金触媒の酸化状態，局所配位構造の変化を観察し，燃料電池発電過程における触媒構造速度論を解明した。
- e) SPring-8 の X 線マイクロビームを用いた走査型空間分解 XAFS により，メタンスチームリフォーミング反応に活性な Ce 系酸化物固溶体担持 Ni 触媒の 1 粒子の局所配位構造解析に成功した。

B-1) 学術論文

**Z. WENG, S. MURATSUGU, N. ISHIGURO, S. OHKOSHI and M. TADA**, "Preparation of Surface Molecularly Imprinted Ru-Complex Catalysts for Asymmetric Transfer Hydrogenation in Water Media," *Dalton Trans.* **40**, 2338–2347 (2011).

**M. TADA, N. ISHIGURO, T. URUGA, H. TANIDA, Y. TERADA, S. NAGAMATSU, S. OHKOSHI and Y. IWASAWA**, "μ-XAFS of a Single Particle of a Practical NiO<sub>x</sub>/Ce<sub>2</sub>Zr<sub>2</sub>O<sub>y</sub> Catalyst," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 14910–14913 (2011) [Front Cover of Issue 33].

**Y. UEMURA, Y. INADA, K. K. BANDO, T. SASAKI, N. KAMIUCHI, K. EGUCHI, A. YAGISHITA, M. NOMURA, M. TADA and Y. IWASAWA**, "Core-Shell Phase Separation and Structural Transformation of Pt<sub>3</sub>Sn Alloy Nanoparticles Supported on γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> in the Reduction and Oxidation Processes Characterized by in-situ Time-Resolved XAFS," *J. Phys. Chem. C* **115**, 5823–5833 (2011).

Y. UEMURA, Y. INADA, K. K. BANDO, T. SASAKI, N. KAMIUCHI, K. EGUCHI, A. YAGISHITA, M. NOMURA, M. TADA and Y. IWASAWA, "In situ Time-Resolved XAFS Study on the Structural Transformation and Phase Separation of Pt<sub>3</sub>Sn and PtSn Alloy Nanoparticles on Carbon in the Oxidation Process," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 15833–15844 (2011).

S. MURATSUGU, K. SODEYAMA, F. KITAMURA, S. TSUKADA, M. TADA, S. TSUNEYUKI and H. NISHIHARA, "Normal and Inverted Redox Potentials and Structural Changes Tuned by Medium Effects in [M<sub>2</sub>Mo(η<sup>5</sup>-C<sub>5</sub>Me<sub>5</sub>)<sub>2</sub>(S<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>)<sub>2</sub>(CO)<sub>2</sub>] (M: Co, Rh)," *Chem. Sci.* **2**, 1960–1968 (2011).

#### B-3) 総説, 著書

M. TADA and Y. IWASAWA, "Molecular Imprinted Metal Complexes for Design of Catalytic Structures," in *Model Systems in Catalysis: From Single Crystals and Size Selected Clusters to Supported Enzyme Mimics*, Springer, p. 475–493 (2010).

唯美津木, 「安全・環境を支える放射光」 「放射光が解き明かす驚異のナノ世界」 講談社ブルーバックス, 241–243 (2011).

唯美津木, 「表面固定化金属錯体を利用したモレキュラーインプリンティング触媒」 *化学工業* **62-6**, 28–34 (2011).

唯美津木, 岩澤康裕, 「Re/ゼオライトおよびRe-Pt/ゼオライト」 「触媒調製ハンドブック」 NTS 出版, 14–15 (2011).

唯美津木, 「クラスター触媒」 *表面技術* **62-10**, 491–495 (2011).

M. TADA, "Selective Oxidation Catalysis on Rhenium-Oxide Catalysts," *RSC SPR Catalysis Volume 23*, 316–349 (2011).

唯美津木, 「触媒」 一粒の構造を捉える!? —— 極細X線ビームが解き明かす触媒の謎」 *化学* **6**, 33–36 (2011).

唯美津木, 「X線マイクロビームを用いた触媒粒子の顕微XAFS構造解析」 *SPring-8 利用者情報* **16**, 250–254 (2011).

#### B-4) 招待講演

M. TADA, "Design of Molecularly Imprinted Ru-Complex Catalysts for Shape-Selective Catalysis," The Molecular Materials Meeting (M3), Singapore International Conference on "Big Ideas in Molecular Materials," Singapore (Singapore), January 2011 (Keynote lecture).

唯美津木, 「固定化錯体を基盤とした触媒表面の設計」 化学技術戦略推進機構萌芽技術奨励講演会, 東京, 2011年1月.

唯美津木, 「エックス線吸収微細構造法で探る固体触媒の化学変化」 第5回分子科学シンポジウム, 岡崎, 2011年6月.

M. TADA, "CH<sub>4</sub> Activation and In-situ Space-resolved XAFS Analysis of Ni-supported Ce<sub>2</sub>Zr<sub>2</sub>O<sub>x</sub> Solid-Solution Catalysts," Japan-Korea Molecular Science Symposium, Pusang (Korea), July 2011.

M. TADA, "In-situ XAFS Study for Heterogeneous Catalysts," 2011 Gordon Research Conference on X-ray Science, Waterville (U.S.A.), August 2011.

M. TADA, "Design of Molecularly Imprinted Metal-Complex Catalysts for Selective Catalysis," EuropaCat X, Glasgow (U.K.), August 2011 (Keynote lecture).

M. TADA, "Time/Space-Resolved XAFS Characterization of Heterogeneous Catalysts," 15th International Symposium on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis, Berlin (Germany), September 2011 (Keynote lecture).

M. TADA, "Preparation and Catalysis of Oxide-Supported Metal Complexes," 3rd Asian Conference on Coordination Chemistry, New Delhi (India), October 2011.

唯美津木, 「In-situ 時間・空間分解XAFSによる触媒構造解析」 第7回日本表面化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, 大阪, 2011年11月.

M. TADA, “Advanced Design of Heterogeneous Catalyst Surfaces,” Germany-Japan Round Table— From the early universe to the evolution of life —, Heidelberg (Germany), December 2011.

#### B-6) 受賞, 表彰

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

M. TADA, 18<sup>th</sup> 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, 5<sup>th</sup> 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, 2<sup>nd</sup> 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).

石黒 志, 第14回XAFS 討論会学生講演賞 (2011).

#### 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 (2010-2011).

触媒学会代議員 (2011).

日本放射光学会幹事 (2011-2013).

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).
- 第14回XAFS 討論会実行委員会委員 (2011).
- International Association of Colloid and Interface Scientists, Conference 2012 Program Committee Member (2011–2012).

#### 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–).
- Journal of Molecular and Engineering Materials*, Editorial Board Member (2011–).
- Journal of Molecular and Engineering Materials*, Associate Editor (2011–).

#### 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ル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).

先端研究助成基金助成金(最先端・次世代研究開発支援プログラム)「低炭素社会基盤構築に資するイノベティブ物質変換」唯美津木(2011年-2014年).

C) 研究活動の課題と展望

必要な物質を限られた資源から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、金属錯体の酸化物表面固定化、表面空間修飾、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の設計法を用いて、固体表面上に電子的、立体的に制御された新しい金属錯体触媒活性構造とその上の選択的反応空間を同時構築する触媒表面の設計を目指している。同時に、調製した固定化金属錯体触媒の構造を固体NMRやXAFSなどの手法によって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、硬X線放射光を用いたin-situ時間分解XAFS、X線マイクロビームを用いたin-situ空間分解顕微XAFS法の開発に取り組んでおり、触媒反応が効率良く進行するその場(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 ~ 2011年3月31日)\*)

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体の研究

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 $\theta$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>X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。 $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>X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 $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub>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、相関時間が長い事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ローデ応答が観測されない事で裏付けられた。この他、 $\alpha'$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>IBr<sub>2</sub>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 $\alpha'$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>IBr<sub>2</sub>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

R. SWIETLIK, D. JANKOWSKI, M. FOURMIGUE and K. YAKUSHI, "Infrared and Raman Studies of the Anion Ordering Transitions in Paramagnetic Organometallic Radical Cation Salts [Cp<sub>2</sub>Mo(dmit)]X (X = PF<sub>6</sub>, SbF<sub>6</sub>)," *Vib. Spectrosc.* **55**, 1965–200 (2011).

R. B. MORGUNOV, A. I. DMITRIEV, A. S. CHERNEN'KAYA, K. YAKUSHI, K. YAMAMOTO and Y. TANIMOTO, "Spin Dynamics of Charge Carriers in the Process of Their Localization in  $\alpha'$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>IBr<sub>2</sub> Single Crystals," *J. Exp. Theor. Phys.* **111**, 857 (8 pages) (2011).

**T. YAMAMOTO, M. TAMURA, T. FUKUNAGA, A. FUKAYA, R. KATO and K. YAKUSHI**, “Vibrational Spectra of [Pd(dmit)<sub>2</sub>] Dimer [dmit = 1,3-dithiole-2-thione-4,5-dithiolate] — Methodology for Examining Charge, Intermolecular Interaction and Orbital —,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 074717 (16 pages) (2011).

**K. YAMAMOTO, A. A. KOWALSKA, Y. YUE and K. YAKUSHI**, “Vibronic Activation of Molecular Vibrational Overtones in the Infrared Spectra of Charge-Ordered Organic Conductors,” *Phys. Rev. B* **84**, 064306 (13 pages) (2011).

B-4) 招待講演

**K. YAMAMOTO**, “Nonlinear optical study of ferroelectric organic conductors,” International School and Workshop on Electronic Crystal (ECRYS 2011), Cargese (France), August 2011.

B-6) 受賞, 表彰

山本 薫, ISCOM2007 ( International Symposium on Crystalline Organic Metals, superconductors, and ferromagnets ) Poster Prize (2007).

山本 薫, 日本物理学会第16回論文賞 (2011).

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

北海道大学理学系研究科, 「振動分光法による電荷秩序状態の研究」2011年1月.

B-10) 競争的資金

科研費特定領域研究(B), 「 $\pi$ -d および  $\pi$  電子系分子導体の磁性・電気伝導性の研究」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)」 $\alpha'$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>IBr<sub>2</sub> 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 $\alpha'$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>IBr<sub>2</sub>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 $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>X<sub>2</sub>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 の拡張ハバードモデル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 $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub>,  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>2</sub>Br と $\alpha'$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>IBr<sub>2</sub>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。

\* ) 2011年3月31日退職

2011年4月1日豊田理化学研究所フェロー

## 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に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力下の 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, Y. SUGISHIMA, H. FUJIWARA and T. NAKAMURA**, “Photo-Induced Triplet States of Photoconductive TTF-Derivatives Including a Fluorescent Group,” *Chem. Lett.* **40**, 292–294 (2011).

**Y. FUNASAKO, T. MOCHIDA, T. INAGAKI, T. SAKURAI, H. OHTA, K. FURUKAWA and T. NAKAMURA**, “Magnetic Memory Based on Magnetic Alignment of a Paramagnetic Ionic Liquid near Room Temperature,” *Chem. Commun.* **47**, 4475–4477 (2011).

**K. FURUKAWA, K. SUGIURA, F. IWASE and T. NAKAMURA**, “Structural Investigation of the Spin-Singlet Phase in (TMTTF)<sub>2</sub>I,” *Phys. Rev. B* **83**, 184419 (5 pages) (2011).

**F. IWASE, K. SUGIURA, K. FURUKAWA and T. NAKAMURA**, “<sup>13</sup>C NMR Study of the Magnetic Properties of the Quasi-One-Dimensional Conductor (TMTTF)<sub>2</sub>SbF<sub>6</sub>,” *Phys. Rev. B* **84**, 115140 (7 pages) (2011).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

**M. ITOI, Y. ISHII, H. KITANO, S. TAKEKOSHI, K. MATSUBAYASHI, Y. UWATOKO and T. NAKAMURA**, “Completely Hydrostatic Pressure Effect of Anisotropic Resistivity in the 1-D Organic Conductor (TMTTF)<sub>2</sub>SbF<sub>6</sub>,” *Phys. C* **470**, S594–S595 (2010).

B-4) 招待講演

中村敏和,「分子科学研究所におけるESR研究」第27回ESR応用計測研究会 2010年度ルミネッセンス年代測定研究会, 海洋研究開発機構横浜研究所三好講堂, 2011年3月.

T. NAKAMURA, “Pulsed ESR Study on Material and Biofunctional Spin Science,” International Workshop “Advanced ESR Studies for New Frontiers in Biofunctional Spin Science and Technology” (AEBST 2011), Takigawa Memorial Hall, Kobe University, Kobe (Japan), November 2011.

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).

東京大学物性研究所物質設計評価施設運営委員会委員 (2011–).

電子スピンスイェンス学会担当理事 (2004–2005).

電子スピンスイェンス学会運営理事 (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回電子スピンスイェンス学会年会(名古屋)プログラム委員 (2010).

学会誌編集委員

電子スピンスイェンス学会編集委員 (2003).

電子スピンスイェンス学会編集委員長 (2004–2005).

電子スピンスイェンス学会編集アドバイザー (2006–).

B-8) 大学での講義, 客員

新潟大学大学院自然科学研究科,「先端科学技術総論」2011年8月4日–5日.

B-9) 学位授与

杉浦晃一,「擬一次元導体TMTTF塩の電子物性研究: 温度-圧力相図の統一的理解」2011年3月, 修士(理学)

#### 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ダイナミクス研究」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)」「シアロバクテリア由来光化学II複合体の高磁場 ESRによる研究」中村敏和 (2008年-2009年).

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。有機導体など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、生体関連試料を含む分子性物質の機能性に関する研究を行っている。多周波(X-, Q-, W-bands)・パルス二重共鳴法(ELDOR, ENDOR)を用いた他に類を見ない磁気共鳴分光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、分子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) 二次元高分子の創出と機能開拓
- b) 多孔性共役高分子による蛍光発光及び蓄電システムの構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 18 電子を有する大環状ポルフィリンを用い，共有結合で二次元高分子骨格に織り込み，紫外から近赤外まで幅広い波長領域にわたって光を吸収し，極めて高い光伝導性を持つ二次元高分子の合成に成功した（イギリス王立化学協会誌 *Chem. Commun.* 2011）。また，フタロシアニン誘導体をモノマーとして用い，縮合反応により二次元高分子を合成した。フタロシアニンはお互いに真上に来るようにスタックしているため，極めて大きなキャリア移動度（ $1.6 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{S}^{-1}$ ）を示した。フタロシアニン二次元高分子は紫外から近赤外まで幅広い波長領域の光を効率よく捕集することができ，新しい光エネルギー変換材料として大いに注目されている（ドイツ化学会誌 *Angew. Chem., Int. Ed.* 2011）。さらに，二次元骨格のエッジ部位に電子吸引力分子を導入することで，新規な n 型二次元高分子の合成に成功した。スタックによりカラム構造が形成され，高い電子移動度（ $0.6 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{S}^{-1}$ ）を示した。この場合，光を照射すると，高い光伝導性を誘起できる。この成果は，n 型二次元高分子の初めての例として注目されている（アメリカ化学会誌 *J. Am. Chem. Soc.* 2011, Highlighted by *Chemical and Engineering News*）。さらに，二次元高分子の細孔構造を自由自在に制御してつくる手法を開拓した（*Nature Communications* 2011）。この手法を用いることでポア表面に様々な官能基を導入することができる。また，設計した通りにその量をコントロールすることができ，テーラード細孔の構築に新しい道を開いた（科学新聞，化学工業日報，日経産業新聞，日刊工業新聞，日経バイオテク online，Nanotech Japan トピックス，フランス大使館科学技術部メルマガ等に記事報道）。
- b) アザ縮環構造を有する共役多孔性高分子は多くの窒素原子を内包しており，合成条件により，細孔サイズを約 1 ナノメートルにコントロールしてつくることができる。この縮環共役多孔性高分子は電気伝導性を示し，電極材料として適している。実際，スーパーキャパシタの蓄電特性を検討したところ，電気容量がなんと 1 グラム当たり 946 ファラッドという極めて大きな値を示した。従来の炭素材料である活性炭やカーボンナノチューブ，グラフェンなどに比べて，電気容量を 6 倍にも向上することに成功した。これによって，エネルギー密度と出力密度を著しく向上することができた。さらに，アザ縮環共役多孔性高分子は極めて速い充放電特性を持ち，短時間で充放電できる特徴を持ち合わせている。化学的に安定な縮環構造のため，何度も充放電することができる。実際，1 万回充放電を繰り返しても，電気容量の減衰は全く観察されず，極めて安定して長く使うことができることが分かった。本研究成果は，蓄電システムのキー物質である電極材料を提供するものであり，技術革新に貢献することが期待されている（ドイツ化学会誌 *Angew. Chem., Int. Ed.* 2011, Evaluated as VIP, Highlighted by *Nature Nanotechnology*, *Nano Werk*，日刊工業新聞，科学新聞，DIME 誌）。また，多孔性共役高分子を用いて極めて高い蛍光発光効率を有する新規な高分子を創製した（アメリカ化学会誌 *J. Am. Chem. Soc.* 2011, Highlighted by *ACS Noteworthy Chemistry*）。

B-1) 学術論文

- X. FENG, L. CHEN, Y. DONG and D. JIANG**, “Porphyrin-Based Two-Dimensional Covalent Organic Frameworks: Synchronized Synthetic Control of Macroscopic Structures and Pore Parameters,” *Chem. Commun.* **47**, 1979–1981 (2011).
- X. DING, J. GUO, X. FENG, Y. HONSHO, J. GUO, S. SEKI, P. MAITARAD, A. SAEKI, S. NAGASE and D. JIANG**, “Synthesis of Metallophthalocyanine Covalent Organic Frameworks That Exhibit High Carrier Mobility and Photoconductivity,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **50**, 1289–1293 (2011).
- L. CHEN, Y. YANG, Z. GUO and D. JIANG**, “Highly Efficient Activation of Molecular Oxygen with Nanoporous Metalloporphyrin Frameworks in Heterogeneous Systems,” *Adv. Mater.* **23**, 3149–3154 (2011).
- Y. KOU, Y. XU, Z. GUO and D. JIANG**, “Supercapacitive Energy Storage and Electric Power Supply Using an Aza-Fused Conjugated Microporous Framework,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **50**, 8753–8757 (2011). (VIP)
- X. DING, L. CHEN, Y. HONSHO, X. FENG, O. SAENGSAWANG, J. GUO, A. SAEKI, S. SEKI, S. IRLE, S. NAGASE, P. VUDHICHAI and D. JIANG**, “An *n*-Channel Two-Dimensional Covalent Organic Framework,” *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 14510–14513 (2011).
- A. NAGAI, Z. GUO, X. FENG, S. JIN, X. CHEN, X. DING and D. JIANG**, “Pore Surface Engineering in Covalent Organic Frameworks,” *Nat. Commun.* **2**, 536 (doi: 10.1038/ncomms1542) (2011).
- Y. XU, L. CHEN, Z. GUO, A. NAGAI and D. JIANG**, “Light-Emitting Conjugated Polymers with Microporous Network Architecture: Interweaving Scaffold Promotes Electronic Conjugation, Facilitates Exciton Migration, and Improves Luminescence,” *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 17622–17625 (2011).

B-3) 総説, 著書

- D. JIANG, X. DING and J. GUO**, “Two-Dimensional Semiconductive  $\pi$ -Electronic Frameworks,” in *Supramolecular Soft Matter: Applications in Materials and Organic Electronics*, John Wiley & Sons, Inc.; Hoboken, NJ, U.S.A., Chapter 8 (2011).

B-4) 招待講演

- D. JIANG**, “Design and Functions of Two-Dimensional Porous Macromolecules,” Beijing-Guangzhou-Hongkong Symposium on Polymer, Guangzhou (China), January 2011.
- D. JIANG**, “Design and Functions of Two-dimensional Macromolecules and Organic Frameworks,” FAPS-PC2011, Beijing (China), May 2011.
- D. JIANG**, “Two-dimensional Macromolecules: Design, Precise Synthesis, and Applications,” 2011 National Polymer Symposium of China, Dalian (China), September 2011.
- D. JIANG**, “Pore Surface Engineering in Covalent Organic Frameworks,” China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Beijing (China), October 2011.
- D. JIANG**, “Design and Precise Synthesis of  $\pi$ -Electronic Two-Dimensional Macromolecules,” The 10th International Symposium on Functional  $\pi$ -Electron Systems (F- $\pi$ -10), Beijing (China), October 2011.

#### 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  $\pi$ -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).

China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Beijing Normal University, Changchun, October 6–9, Organizer (2011).

#### B-10) 競争的資金

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

『ゼロ』から出発しやっとなんか出てきた。二次元高分子及び多孔性共役ポリマーがどのようなサイエンスを秘められているのか、メンバーと日々悩んでそして楽しく。

## 西村 勝之 (准教授) (2006年4月1日着任)

A-1) 専門領域：固体核磁気共鳴，構造生物学

A-2) 研究課題：

- a) 膜表在型タンパク質ヒト由来 PLC- $\delta$ 1 PH ドメインの生化学的解析
- b) 膜表在型タンパク質ヒト由来 PLC- $\delta$ 1 PH ドメインの NMR による解析
- c) 常磁性固体用  $^2\text{H}$  QCPMG NMR による分子運動解析
- d) 920MHz 超高磁場固体 NMR 用試料温度調節機能付き MAS プロープの開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 昨年度確立した膜表在性タンパク質 (ヒト由来 PLC- $\delta$ 1 PH ドメイン ;hPH) の機能発現機構を解明するため，野生型および部位特異的変異導入 hPH のゲルシフトアッセイによる基質結合活性解析を行った。その結果，hPH に特徴的に存在する  $\alpha$ 2 ヘリックスの二次構造変調が，基質結合を著しく阻害することが明らかとなり，さらに基質結合部位と  $\alpha$ 2 ヘリックスとの相互作用を媒介する残基の同定に成功した。これは 基質とは直接結合しない  $\alpha$ 2 ヘリックスが，hPH の機能発現に極めて重要であることを示す初めての結果である。
- b) hPH に関して特定のアミノ酸残基の部位特異的同位体標識試料および，その欠損株を用いて信号帰属を行い， $\text{IP}_3$  の結合に伴う PH ドメイン全体構造の変化を溶液 NMR で解析した。PLC- $\delta$ 1 の PH ドメインが特徴的に持つ  $\alpha$ 2 ヘリックスは，PH ドメインの  $\text{PIP}_2$  への結合の際，脂質膜表面に非特異的脂質結合することによって脂質結合を保持する補助的な役割を果たすと考えられていた。本  $\alpha$ 2 ヘリックスは  $\text{IP}_3$  非結合状態では不均一であるが， $\text{IP}_3$  結合に伴い，構造が均一化すること，さらに  $\text{IP}_3$  結合を安定化させる役割を担うことが新たに判明した。その結果，同タンパク質の新たな機能発現機構モデルの構築に成功した。
- c)  $^2\text{H}$  NMR はナノ秒～秒程度のタイムスケールの分子運動を調べるのに有効な手法である。最近我々は常磁性物質において  $^2\text{H}$  NMR を高感度測定する QCPMG 法を開発した。本研究ではこれを分子運動の解析に適用するため，常磁性  $\text{CoSiF}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  結晶を用いて  $^2\text{H}$  QCPMG NMR の温度依存性を測定した。スペクトルシミュレーションの結果，常磁性化合物においても QCPMG 法の適用により解析可能な運動速度領域が広がることが分かった。
- 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 プロープの開発を 2009 年度から行っており，プロープ本体の開発は完了していた。本年度は昨年度から行っていた運用に必要な周辺機器の開発および設置を完了し，外部公開を開始した。

B-1) 学術論文

T. IJIMA and K. NISHIMURA, “ $^2\text{H}$  Quadrupolar Carr-Purcell-Meiboom-Gill NMR for Paramagnetic Solids,” *Chem. Phys. Lett.* **514**, 181–186 (2011).

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統合生命科学教育プログラム, 「Structural analysis of biomolecules by solid-state NMR spectroscopy (生体分子科学)」, 2011年11月29日.

## 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

昨年度の夏から実験棟の耐震改修のため臨時実験室に移転することになり, 研究室所有の分光器の停止を強いられた。今年度は初夏に耐震改修後の部屋へ移転をしたがNMR分光器を移設後, ハード, ソフトの双方において実に多くのトラブルに見舞われ, 機器の修理や再セッティングなどに多くの時間を浪費することになってしまった。一方, ナノセンターからの依頼でこれまで開発してきた 920MHz NMR 用の温度可変 MAS プローブは周辺機器の設置も終わり, ようやく外部公開を開始することができた。今後機器の利用が促進されることを望む。また, 着任以来研究を行っている膜表面タンパク質の研究がようやく実を結び始めた。新たに発見した現象を含め, 今後これらの研究成果をまとめ, 多くの時間を費やした膜表面タンパク質の研究法を確立したいと考えている。

## 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) 有機半導体のドーピングによるpn制御と高効率有機薄膜太陽電池の開発
- b) 第3分子導入による普遍的な共蒸着膜のナノ構造制御

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 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から，有機半導体のドーピングによるpn制御を行っている。今回，典型的な有機半導体であるC<sub>60</sub>とメタルフリーフタロシアニンについて，ドーピングによるpn制御とpnホモ接合の形成技術を確立した。n型化ドーパントとしてCs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>およびCa，p型化ドーパントとしてMoO<sub>3</sub>およびV<sub>2</sub>O<sub>5</sub>を見いだした。今回の結果は，ほぼすべての有機半導体に対して，pn制御，pnホモ接合形成が一般的に可能であることを示している。

高抵抗の有機薄膜太陽電池には，アモルファスシリコン太陽電池に用いられる，pinエネルギー構造が適していると考え，pnホモ接合C<sub>60</sub>セルの中間にIntrinsic層としてふるまう，アクセプター性とドナー性の2種のドーパントを同時にドーブ（クロスドーブ）した中間層を挿入することを試み，C<sub>60</sub>単独セルで動作確認した。

単独の有機半導体では，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<sub>60</sub>にドナー有機半導体を混合した共蒸着膜に対して，pn制御，および，pn，pinホモ接合などの形成を試み，有機薄膜太陽電池に対して，最適な接合構造を探っている。今回，典型的な共蒸着層の組み合わせである，チオフェン誘導体：C<sub>60</sub>およびフタロシアニン：C<sub>60</sub>共蒸着膜においてpn制御技術を確立した。その結果，低抵抗p型層，n型層，pnホモ接合，ハイドーブp<sup>+</sup>/n<sup>+</sup>オーミック接合，p型，n型ショットキー接合が自由自在に作製できるようになった。その結果，ドーピングのみでタンデム接合セルを作製することに成功した。

今後，以上の様々な接合を組み合わせ，光を充分吸収できる厚膜共蒸着セルで，pnホモ接合，pin接合，タンデム接合などを持つ高効率セルに展開する。

- b) 伝導度(σ)はキャリア濃度(n)とキャリア移動度(μ)の積で表される[σ = enμ]。セル抵抗を減少させて効率向上につなげるには，nとμの双方を増大する必要がある。上述成果(a)のドーピング技術は，共蒸着膜のキャリア濃度(n)の増大に対応する。一方，共蒸着のナノ構造制御による，光生成ホールおよび電子のルート形成は，共蒸着膜のキャリア移動度(μ)の増大に対応する。

今回，共蒸着中の第3分子の導入によって，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た。第3分子として，液体で，基板加熱下で，基板に付着しない有機分子を共蒸着中に3元蒸着によって共蒸着させた。

検討したすべての共蒸着分子の組み合わせにおいて，例外なく光電流の顕著な増大が観測された。共蒸着膜は，通常分子レベル混合となるが，第3分子導入によって各成分の結晶化が促進されて，相分離を起こし，光生成電子とホールのルートが形成されるようになり光電流増大につながったことを確認した。今後，第3分子の蒸着速度，基板温度，

基板への入射角度等のパラメータの精密コントロールによって、セル性能を飛躍的に向上できると考えている。  
本研究は、有機薄膜太陽電池の第一人者である米国ロチェスター大 Ching Tang 教授との共同研究である。

#### B-1) 学術論文

**M. HIRAMOTO, K. KITADA, K. IKETAKI and T. KAJI**, “Near Infrared Light Driven Organic p-i-n Solar Cells Incorporating Phthalocyanine J-Aggregate,” *Appl. Phys. Lett.* **98**, 023302 (3 pages) (2011).

**K. IKETAKI, T. KAJI, S. NAKAO and M. HIRAMOTO**, “Structural Studies of the Codeposited *i*-Layer of ZnPc:C<sub>60</sub> p-i-n Solar Cells,” *Phys. Status Solidi C* **8**, 637–639 (2011).

**M. KUBO, K. IKETAKI, T. KAJI and M. HIRAMOTO**, “Conduction Type Control of Fullerene Films From n- to p-Type by Molybdenum Oxide Doping,” *Appl. Phys. Lett.* **98**, 073311 (3 pages) (2011).

**T. KAJI, M. ZHANG, S. NAKAO, K. IKETAKI, K. YOKOYAMA, C. W. TANG and M. HIRAMOTO**, “Co-Evaporant Induced Crystalline Donor:Acceptor Blends in Organic Solar Cells,” *Adv. Mater.* **23**, 3320–3325 (2011).

**H. YAMANE, T. HATSUI, K. IKETAKI, T. KAJI, M. HIRAMOTO and N. KOSUGI**, “Site-Specific Intermolecular Interaction in  $\alpha$ -Phase Crystalline Films of Phthalocyanines Studied by Soft X-Ray Emission Spectroscopy,” *J. Chem. Phys.* **135**, 034704 (6 pages) (2011).

**M. KUBO, T. KAJI and M. HIRAMOTO**, “pn-Homojunction Formation in Single Fullerene Films,” *AIP Advances* **1**, 032177 (2011).

**N. ISHIYAMA, M. KUBO, T. KAJI and M. HIRAMOTO**, “Doping-Based Control of the Energetic Structure of Photovoltaic Co-Deposited Films,” *Appl. Phys. Lett.* **99**, 133301 (3 pages) (2011).

#### B-3) 総説，著書

平本昌宏, 「炭素物質を共蒸着層に用いる太陽電池の特性」, 「炭素学——基礎物性から応用展開まで」, 田中一義, 東原秀和, 篠原久典, 編集, 化学同人, 第14章5. 2節, pp. 460–470 (2011).

平本昌宏, 「低分子型有機太陽電池の耐久性向上・長寿命化に向けた取り組み」, 「有機デバイス・材料の耐久性向上および長寿命化技術」, 情報機構(株) pp. 142–146 (2011).

平本昌宏, 「有機薄膜太陽電池の高効率化に向けた革新的取り組み——J 会合体を用いた近赤外利用技術——」, 特集: 次世代太陽電池開発の最前線, 月刊 ケミカルエンジニアリング, 化学工業社(株) **56**, 34–37 (2011).

平本昌宏, 「有機太陽電池の動作原理」, 実用化に動き出した有機薄膜太陽電池の研究開発最前線, 工業材料, **59**(9), 23–26 (2011).

嘉治寿彦, 平本昌宏, 「Co-evaporant induced crystalline donor:acceptor blends in organic solar cells」, *Interface Newsletter 2011* (界面科学技術機構会誌) 界面科学技術機構 (2011) ( *Advanced Materials*, **23**, 3320–3325 (2011) より転載 )

#### B-4) 招待講演

**M. HIRAMOTO**, “Organic p-i-n Cell Solar Cells Incorporating Seven-nine Purified Fullerene,” UK-Japan Nanoelectronics Workshop (by British Embassy, Tokyo, and National Institute for Material Science (NIMS)), February 2011.

**M. HIRAMOTO**, “Photovoltaic Energy Development—Organic Thin-film Solar Cells—,” Chimie Paristech—IMS 2<sup>nd</sup> Joint Symposium: “Frontier in Molecular Science based on Photo and Material,” Chimie Paristech, Paris (France), November 2011.

T. KAJI, "Co-evaporant induced crystallization of donor:acceptor blends in organic solar cells," BIT's 1st Annual World Congress of Nano-S&T, Dalian (China), October 2011.

平本昌宏,「低分子系有機薄膜太陽電池」金沢大学理工研究域「サステナブルエネルギー研究センター」第1回有機薄膜太陽電池部門, 金沢大学イノベーション創成センター・セミナー室, 2011年1月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の基礎」さきがけ「太陽光と光電変換機能」研究領域第3回領域会議, 八ヶ岳国際ホテル, 2011年1月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の基礎と最近の進展」第40回記念フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム, 名城大学天白キャンパス, 2011年3月.

平本昌宏,「高効率有機薄膜太陽電池の実現に向けて」分子科学研究所 - 豊田中央研究所研究交流会, 豊田中央研究所, 2011年6月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池におけるバルク接合界面」第5回分子科学会シンポジウム「埋没界面が分子科学に何をもたらすか」岡崎コンファレンスセンター, 2011年6月.

平本昌宏, 基礎講座「有機薄膜太陽電池の基礎」日本学術振興会第175委員会, 第8回「次世代の太陽光発電システム」シンポジウム, 岐阜じゅうろくプラザ, 2011年7月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池における光電変換」ソニー株式会社先端マテリアル研究所(厚木第2テクノロジーセンター) 2011年7月.

平本昌宏,「有機太陽電池の最前線——無機の発想を有機に——」先端ナノデバイス・材料テクノロジー第151委員会平成23年度第1回研究会ナノ・ハイスループット分科会, 大阪大学先端科学イノベーションセンター, 2011年8月.

平本昌宏, 嘉治寿彦(代理)「有機太陽電池のためのバンドギャップサイエンス」2011年秋季第72回応用物理学会シンポジウム「太陽電池技術の最新の動向」29p-M-6, 山形大学小白川キャンパス, 2011年8月.

平本昌宏,「実用化・市場投入ステージに入った有機薄膜太陽電池」2011年秋季第72回応用物理学会, 特定テーマ「有機太陽電池」(有機分子・バイオエレクトロニクス分科内総合講演)1p-L-1, 山形大学小白川キャンパス, 2011年9月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の開発」名古屋工業大学 - 分子科学研究所合同講演会, 名古屋工業大学23号館, 2011年10月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の効率10% 越えのためのシナリオ」有機デバイス研究会第87研究会「有機薄膜太陽電池の進展」北九州工業高等専門学校, 2011年10月.

平本昌宏,「有機太陽電池のためのバンドギャップサイエンス」2011年度後期物性研究所短期研究会「エネルギー変換の物性科学」東京大学物性研究所第一会議室, 2011年11月.

嘉治寿彦,「共蒸発分子により誘起する有機太陽電池のドナー:アクセプター混合層の結晶化」第2回 共役系有機エレクトロニクス材料の開発・応用に関する研究会, 名古屋大学, 2011年12月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の基礎と応用」PV-Japan 2011 SEMI-Tutorial「太陽光発電技術(有機太陽電池コース)東京, 幕張メッセ国際会議場302会議室, 2011年12月.

平本昌宏,「実用化ステージに入った有機薄膜太陽電池」第5回有機エレクトロニクス研究会講演会——有機系太陽電池の現状と将来展望——, 福岡市, リファレンス駅東ビル7F D会場, 2011年12月.

平本昌宏,「有機太陽電池:基礎から応用展望まで」第15回NAIST 科学技術セミナー「グリーン・デバイス・テクノロジー」奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科大講義室, 2011年12月.

B-5) 特許出願

特願 2011-088465, 「有機混合膜の共蒸着液体を用いた結晶化法」 嘉治寿彦, 平本昌宏(自然科学研究機構) 2011年.

B-6) 受賞, 表彰

嘉治寿彦, 第31回(2011年秋季)応用物理学会講演奨励賞 (2011).

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).

東京大学物性研究所2011年度後期短期研究会「エネルギー変換の物性科学」オーガナイザーメンバー (2011).

有機薄膜太陽電池研究会代表 (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-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(ソニー(株))「有機光電変換に関する研究」平本昌宏 (2011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、CREST 研究員4名(久保,新村,横山,能岡)を雇用している。現在、嘉治助教,石山(博士3年次),中尾研究員,杉原(秘書)と私の5名とあわせ、9名のグループで研究を行っている。有機半導体の電気物性を精密に評価するには、空気からの酸素、水の影響を除くことが非常に重要で、クリーンルーム内にグローブボックス内蔵蒸着装置1台を増強し合計3台とした。他の4蒸着源蒸着装置4台とあわせ、各研究者が1つの蒸着装置を常時使用できる態勢を整え、研究の効率化をはかっている。2週に1度、1日かけて研究報告とディスカッションを密に行っている。今年度、A-3に記した、基礎的に重要な成果をいくつか得ることができ、研究室のactivity が着実に上がっている。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、研究室のHPをさらに充実させ、積極的な広報を通じて、学生の確保につなげることが重要である。

有機薄膜太陽電池は、2011年6月に、三菱化学より効率10%が報告され、実用化のステージに達した。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。有機半導体の超高純度化とドーピングによる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、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、1V 程度の開放端電圧を示す、新しい有機半導体の開発。なお、項目の達成のためには合成グループとの連携が必要で、産総研と東大との共同研究を行っている。2014年度のCREST 終了までに、低分子系有機太陽電池の効率15%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) 我々は、カーボンナノチューブの短いセクションである芳香族ベルトの合成に取り組んでいる。芳香族ベルトは、ナノチューブ発見以前の1983年に興味深い合成ターゲットとして提案された。それ以来、多くの合成化学者が挑戦し続けているが、未だ完成の報告はない。芳香族ベルトの合成が困難な理由は、非平面による歪みが大きいことと、HOMO-LUMO ギャップが小さいため不安定であることが考えられる。我々はDFT計算により、比較的小さな歪みエネルギーと適切なHOMO-LUMO ギャップをもったベルトを設計した。最近その前駆体の合成が完了し、ベルトの完成に近づきつつある。その過程で、偶然に芳香族サドルと呼ぶべき、鞍型の極端に平面性を失った新ベンゼノイド化合物を得ることができた。これは[8]サーキュレンと呼ばれる化合物の誘導体で、以前にこの分子構造が報告されたことはなかった。1983年に[7]サーキュレンが報告されて以来、いくつかのグループが[8]サーキュレンの合成を目指したが、歪みの大きさのため完成することはなかった。今回合成した[8]サーキュレン誘導体はオレンジ色の固体で、サイクリックボルタンメトリーにより可逆の1電子酸化が観測された。単結晶X線構造解析では、3次元の相互作用していることが分かった。このため、この化合物はユニークな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

**T. IWAMOTO, Y. WATANABE, Y. SAKAMOTO, T. SUZUKI and S. YAMAGO**, "Selective and Random Syntheses of [n]Cycloparaphenylenes ( $n = 8-13$ ) and Size Dependence of Their Electronic Properties," *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 8354-8361 (2011).

B-4) 招待講演

鈴木敏泰, 「フッ素系有機n型半導体の開発」第22回有機エレクトロニクス研究センター講演会, 山形大学, 2011年12月.

**T. SUZUKI**, "Perfluorinated Aromatic Compounds as Organic n-Type Semiconductors," *Advances in Organic Materials: A Symposium in Honor of Fred Wudl's 70th Birthday*, Santa Barbara (U.S.A.), January 2011.

#### 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

2010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 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, 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 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) 多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・エネルギー移動

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) これまでターピリジン・ピピリジンをメチレン鎖で結合した二成分結合型配位子を用いて単核錯体の合成を行ってきたが，これを複核錯体に拡張するため，ターピリジン二単位とフタラジンまたはピリダジンを結合した三成分結合型二核化配位子を開発した。これらの配位子はコバルト(II)，ニッケル(II)塩と反応して期待通りの(等核)二核錯体を形成したが，アニオン性架橋配位子に関して強い選択性があり，コバルトではOH，ニッケルではCl架橋の錯体だけが安定に単離できることがわかった。また，コバルト二核錯体は酸の添加により一方のコバルトが脱離して単核錯体を与えることがわかった。
- b) 金属フタロシアニンを増感剤とするキノンの光還元反応について調べた。反応の初期速度はキノンの還元電位と相関があり，光反応率が光励起電子移動の効率に依存していることを示唆している。また，前年に合成した高溶解性フタロシアニン骨格を利用して，フタロシアニン・キノンプール結合化合物の合成に成功した。
- c) 分子の構造変化に伴う動的な電子・エネルギー移動の制御を目指して，ピンセット型ポルフィリン二量体を合成した。ポルフィリンはピンセットの両端にそれぞれ位置しており，別の金属を挿入(または一方だけに金属挿入)することで，分子の構造変化に伴う電子・エネルギー移動の効率変化を狙ったものである。トリメチレン鎖・ジエチレングリコール鎖で連結した分子を合成し，亜鉛・フリーベース二量体について励起エネルギー移動を調べた結果，定常状態ではスタック型二量体(キサンテン架橋)，完全に伸長した二量体(trans-シクロヘキサンジアミン架橋)の中間の構造をとっており，ジエチレングリコール連結体の方がポルフィリン間の距離が若干近いことがわかった。

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 70<sup>th</sup> 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，「基礎電子化学」2011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)，「人工キノプ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

還元反応の触媒とするため第一遷移金属の新規錯体を探索しているが，三成分連結型配位子を用いた錯体で特異な反応性が見られつつあり，今後の発展につながると期待している。成果欄で述べた単核錯体の選択的生成は，異種金属を近傍に配置した複核錯体の合成に活用できるとともに，金属脱離後の空きサイトが残された金属イオンに対して有効な反応場として機能することも期待できる(予備的成果がすでに得られている) ただ，現在用いている三成分連結型配位子は，錯体の構造が堅固であるため，金属・架橋アニオンに対する選り好みが多い。触媒反応を円滑に行わせるためには，錯体上の配位子交換や配位構造の変化も重要な要素となるため，もう少し自由度の高い錯体を設計していくことが今後追求すべき課題である。

課題(c)については，現状ではまだ平衡状態での平均構造を観測しているに過ぎないが，今後外部刺激による非平衡状態での挙動を追求して行く予定である。分子運動を外部刺激によって積極的に制御できれば，新しい光・化学エネルギー変換系への発展が可能であると期待している。

## 櫻井英博(准教授)(2004年4月1日着任)

A-1) 専門領域：有機化学

A-2) 研究課題：

- a) お椀型共役化合物「バッキーボウル」の合成手法の開発と物性評価
- b) 金属ナノクラスターを触媒とする新規反応の開発
- 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「バッキーボウル」は、フラレン・単一組成カーボンナノチューブ合成達成への鍵物質として、あるいはそれ自身の特異な物理的性質を利用した新規物質の基本骨格として魅力的な化合物群である。我々はバッキーボウルの「シンプル」かつ「エレガント」な合成経路を確立し、さらに合成した化合物の物性や錯体触媒への応用を目指している。今年度は、昨年度に確立した  $C_3$  対称官能化バッキーボウルの一般的合成に加え、1～3置換の全ての位置異性体の合成に取り組み、その合成、単離に成功した。現在はその基礎的物性測定を行っており、応用を指向した分子設計の指針が得られるものと期待される。また一部のバッキーボウルについては、そのおわん構造に由来するいくつかの興味深い現象を観測しており、例えば、金属内包フラレンへの分子間電子移動反応が、フラレンの曲率と近いおわん構造を有するバッキーボウルにのみ観測されることを見出している。また、含窒素ヘテロバッキーボウルの合成ならびにX線結晶構造解析にも成功した。これは窒素を含むバッキーボウルの初めての合成例になる。またそのボウル反転障壁が計算科学で予測された値と同程度の約 40 kcal/mol 程度であり、室温付近では反転は完全に抑えられていることも明らかにした。
- 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。今年度の主な成果としては以下のような研究が挙げられる。マグネタイト/金コンポジットを水溶性高分子ポリビニルピロリドンで保護した擬均一系触媒が、アルコールの空気酸化反応に対して高い活性を示し、さらに磁石程度の弱い磁場によって容易に回収、再利用が可能であることを明らかにした。ポリビニルピロリドン保護金クラスターが、環状2級アミンの酸素化反応に対する高い触媒活性を示し、室温、空気中などの極めて穏やかな反応条件下、*N*-無保護ラクタムが高収率で得られることを見出した。昨年度から注目して検討している金-パラジウムなどの2原子系合金クラスターに関して、合金系でのみ進行する反応を探索した結果、Au/Pd系において、芳香族塩素化物とアリールボロン酸とのカップリング反応が水中、室温で進行し、さらにその反応メカニズムが、従来の鈴木-宮浦反応とは全く異なるものであり、炭素-ホウ素結合のメタセシス型反応が含まれていることを見出した。同条件ではAuまたはPd単独のクラスターをもちいても反応は全く進行しない。
- c) 当研究室によって既に開発されているパラジウムナノクラスター条件を用いたクロスカップリング反応が、ポリケトンポリマー合成に極めて有効であることを見出した。通常の鈴木-宮浦カップリングで用いられるパラジウムホスフィン錯体では低分子量の高分子しか得られないのに対し、当該条件を用いると、分子量が1万を超えるポリマーを調製できる。

B-1) 学術論文

- H. KITAHARA and H. SAKURAI**, “Catalytic Activity of Gold Nanoclusters in Intramolecular Hydroamination of Alkenes and Alkynes with Toluenesulfonamide under Aerobic and Basic Conditions,” *J. Organomet. Chem.* **696**, 442–449 (2011).
- H. W. CHEN, A. MURUGADOSS, T. S. A. HOR and H. SAKURAI**, “Magnetically Recoverable Magnetite/Gold Catalyst Stabilized by Poly(*N*-vinyl-2-pyrrolidone) for Aerobic Oxidation of Alcohols,” *Molecules* **16**, 149–161 (2011).
- D. VIJAY, H. SAKURAI and G. N. SASTRY**, “The Impact of Basis Set Superposition Error on the Structure of  $\pi$ - $\pi$  Dimers,” *Int. J. Quantum Chem.* **111**, 1893–1901 (2011).
- S. YUDHA S., R. N. DHITAL and H. SAKURAI**, “Gold- and Gold-Palladium/Poly(1-vinylpyrrolidin-2-one) Nanoclusters as Quasi-Homogeneous Catalysts for Aerobic Oxidation of Glycerol,” *Tetrahedron Lett.* **52**, 2633–2637 (2011).
- P. PREEDASURIYACHAI, W. CHAVASIRI and H. SAKURAI**, “Aerobic Oxidation of Cyclic Amines to Lactams Catalyzed by PVP-stabilized Nanogold,” *Synlett* 1121–1124 (2011).
- A. MURUGADOSS and H. SAKURAI**, “Chitosan-Stabilized Gold, Gold-Palladium, and Gold-Platinum Nanoclusters as Efficient Catalysts for Aerobic Oxidation of Alcohols,” *J. Mol. Catal. A: Chem.* **341**, 1–6 (2011).
- K. MAEYAMA, T. TSUKAMOTO, M. SUZUKI, S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI**, “Synthesis of Aromatic Polyketones Bearing 1,1'-Binaphthyl-2,2'-dioxy Units through Suzuki-Miyaura Coupling Polymerization,” *Chem. Lett.* **40**, 1445–1446 (2011).

B-3) 総説, 著書

- S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI**, “Synthesis of Sumanene and Related Buckybowls,” *Chem. Lett.* **40**, 122–128 (2011).
- T. TSUKUDA, H. TSUNOYAMA and H. SAKURAI**, “Synthesis of Sumanene and Related Buckybowls,” *Chem. –Asian J.* **6**, 736–748 (2011).
- H. TSUNOYAMA, Y. LIU, T. AKITA, N. ICHIKUNI, H. SAKURAI, S. XIE and T. TSUKUDA**, “Size-Controlled Synthesis of Gold Clusters as Efficient Catalysts for Aerobic Oxidation,” *Catal. Surv. Asia* **15**, 230–239 (2011).

B-4) 招待講演

- H. SAKURAI**, “Matrix Effect in the *quasi*-Homogeneous Nanogold Catalyst,” The Science Forum 2011, Chulalongkorn University, Bangkok (Thailand), March 2011.
- H. SAKURAI**, “Chemistry of Buckybowls: Bowl-Shaped Aromatic Compounds,” Department Seminar, Khon Kaen University, Khon Kaen (Thailand), March 2011.
- H. SAKURAI**, “Chemistry of Buckybowls: Bowl-Shaped Aromatic Compounds,” Department Seminar, NANOTEC, Bangkok (Thailand), March 2011.
- H. SAKURAI**, “Chemistry of Buckybowls: Bowl-Shaped Aromatic Compounds,” Department Seminar, Chiang Mai University, Chiang Mai (Thailand), March 2011.
- H. SAKURAI**, “Colloidal nanogold as a catalyst for intramolecular heterocyclization under aerobic conditions,” 241st ACS National Meeting, Anaheim (U.S.A.), March 2011.
- H. SAKURAI**, “Matrix Effect in the *quasi*-Homogeneous Nanogold Catalyst,” PERCH-CIC VII, Pattaya (Thailand), May 2011.

東林修平, 櫻井英博, 「バッキーボールにおけるキラリティ」シンポジウム「モレキュラーキラリティ2011」東京, 2011年5月.

**H. SAKURAI**, “Synthesis of Sumanene and Related Buckybowls,” Department Seminar, Mahidol University, Bangkok (Thailand), July 2011.

**H. SAKURAI**, “Homogeneous Nano-Sized Gold as a Unique Catalyst under Ambient Condition,” Department Seminar, Suranaree University of Technology, Nakhon Ratchasima (Thailand), September 2011.

**H. SAKURAI**, “Bimetallic Gold/Palladium Nanoclusters Catalyze the Suzuki-Miyaura-Type Reaction of Chloroarene at Room Temperature,” 14th Asian Vhemical Congress, Bangkok (Thailand), September 2011.

**H. SAKURAI**, “Synthetic Strategy to Construct  $C_3$  Symmetric Buckybowls, Bowl-Shaped Aromatic Compounds,” Department Seminar, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai (China), October 2011.

**H. SAKURAI**, “Synthesis of Sumanene and Related Buckybowls,” Department Seminar, East China University of Science and Technology, Shanghai (China), October 2011.

**H. SAKURAI**, “Unique Reactivity of Gold/Palladium Bimetallic Nanoclusters toward the Suzuki-Miyaura-Type Coupling Reaction,” 7th IUPAC International Symposium on Novel Materials and their Synthesis and 21th International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers, Shanghai (China), October 2011.

**H. SAKURAI**, “Matrix Effect in the *quasi*-Homogeneous Nanogold Catalyst,” International Conference on Advanced Materials and Nanotechnology, Kathmandu (Nepal), October 2011.

**H. SAKURAI**, “Colloidal Nanogold as a Unique *quasi*-Homogeneous Catalyst,” Department Seminar, Dongguk University, Seoul (Korea), November 2011.

**H. SAKURAI**, “Colloidal Nanogold as a Unique *quasi*-Homogeneous Catalyst,” Department Seminar, Korea Research Institute of Chemical Technology, Daejeon (Korea), November 2011.

**H. SAKURAI**, “Synthesis of Sumanene and Related Buckybowls,” Department Seminar, Ewha Women’s University, Seoul (Korea), October 2011.

**H. SAKURAI**, “Contribution to Nanoscience from Organic Synthesis: Nano(Bucky)bowls and Metal Nanoclusters,” Pohang University of Science and Technology, Pohang (Korea), October 2011.

**H. SAKURAI**, “Contribution to Nanoscience from Organic Synthesis: Nano(Bucky)bowls and Metal Nanoclusters,” Korea Advanced Institute of Science and Technology, Daejeon (Korea), October 2011.

**H. SAKURAI**, “Colloidal Nanogold as a Unique *quasi*-Homogeneous Catalyst,” Department Seminar, Institute of Materials Research and Engineering, Singapore (Singapore), November 2011.

**H. SAKURAI**, “Colloidal Nanogold as a Unique *quasi*-Homogeneous Catalyst,” Department Seminar, Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta (Indonesia), November 2011.

**H. SAKURAI**, “Colloidal Nanogold as a Unique *quasi*-Homogeneous Catalyst,” Department Seminar, University of Malaya, Kuala Lumpur (Malaysia), November 2011.

#### 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 (2008–2011).

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–2011年.

総合研究大学院大学物理科学研究科，「錯体触媒化学」2011年後期.

## 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).

科研費基盤研究(B)「官能化バッキーボウルの合成と機能発現」櫻井英博 (2011年–2013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 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<sub>3</sub>対称曲面 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、昨年度までで築いてきた基本的な方法論開発を終了し、ここ数年のうちに、およその成果は発表できると思われる。研究ステージはいよいよ合目的な分子デザインとその実践的合成へ移りつつある。外部研究者を中心とした物性評価に関する共同研究も順調に進み、そのフィードバックを基にした分子デザインが極めて重要である。また計算科学との協同も重要である。もちろん、合成化学は最先端の難しい領域に突入しており、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の現在の我々自身の興味は、多元素系の合金クラスターにシフトしつつある。合金クラスターの最大の魅力は、従来の常識を覆す新反応が見つかることであるが、分子研ならではの切り口として、本質的な反応過程を理解する努力をしていきたい。環境調和型触媒開発、バイオ分野への応用など、国際共同研究を中心としたプロジェクトも同時に進めて行く予定である。

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。JENESYS プログラムは今年度で一旦終了となるが、後継プログラムや、JENESYS プログラムを通じてスタートした国際共同研究を充実させ、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) 量子効果素子回路の単一分子内集積化法の開拓
- b) 単一長鎖分子ワイヤの伝導特性の系統的解明
- c) 基板表面に設置した巨大分子系の実空間構造解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 本研究では、「単一巨大分子骨格内に量子効果素子回路をまるごと集積化」するための逐次精密合成プロセスの開拓を目指している。昨年度までに、単電荷トンネル素子の基本構成モジュール群 [トンネル接合, 静電接合, 量子井戸, 多端子型クーロン島, ワイヤ, アンカーユニット] が一通り揃ったので,今年度は素子構築に取りかかった。手始めは、三端子型の基本量子スイッチング素子である単電荷トンネルトランジスタである。その構成モジュール [トンネル接合 ×2, 静電接合 ×1, 三端子型クーロン島 ×1, ワイヤユニット] を逐次接合し, 単電荷トンネルトランジスタ構造を内蔵した大型分子 (サイズ: 8 nm × 3 nm, 分子量: 5,293) の合成に成功した。ついで、三端子型の単電荷ターンスタイル構造を内蔵する分子 [トンネル接合 ×4, 静電接合 ×1, 三端子型クーロン島 ×1, ワイヤユニット] の合成にも成功した。さらに、4端子型の単電荷ポンプ構造を有する分子 [トンネル接合 ×3, 静電接合 ×2, 三端子型クーロン島 ×2, ワイヤユニット] の合成についてもほぼ完了している。
- b) 単一分子鎖レベルの電荷輸送特性の解明と制御法の開拓を 阪大・多田・山田 G と実施している。本年度は 特に「トンネル伝導からポーラロン伝導へと転移する境界鎖長領域 (5–6 nm)」近傍における伝導度の温度依存性を系統的に計測した。その結果を理論予想 (産総研・浅井 G) と比較検討することにより, 単一分子伝導の実態の解明を進めている。さらにその発展系として, 各種機能サイトを導入した長鎖分子ワイヤの伝導特性を評価するため, 発光中心や磁性中心を導入した長鎖分子鎖の合成を京大・田中 (一) G と実施した。
- c) 巨大分子系の「基板上に設置した状態での分子形状」や「局所的電子構造 (特にトンネル/静電接合部分)」を個別分子レベルで解析するため, 走査プローブ顕微鏡を用いた研究を横浜・市立大の横山 G と実施している。真空蒸着が不可な大型分子の場合, 「孤立吸着分子の良質な試料」の作成が最初の難関となる。当研究室の分子群の場合, 一般的なパルスジェット法を用いても良質な試料を得るのは困難であったが, エレクトロスプレー法を用いることで良質な試料を再現性よく得られるようになった。現在, 120 nm 級 (被覆型チオフェン 288 量体, 分子量: 86,184) までの分子ワイヤについて, 単一分子の高分解能 STM 観測を達成した。今後, a) 項で合成した多端子系巨大分子について, 各種の局所分光法の適用を行う。

B-1) 学術論文

SK. LEE, R. YAMADA, H. TADA and S. TANAKA, "Mechanism of Electrical Conduction through Single Oligothiophene Molecules," *Funct. Mater. Lett.* **3**, 245–248 (2010).

## 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), 「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

二端子タイプの機能集積化巨大分子の合成については、おおそ目処が立ってきた。今後は、多端子系に研究の主眼を移すことになる。ますます、合成、単一分子物性計測、そして実験結果の理論解析は困難となるであろうが、実際には「普通では得られない非典型的なブツ」の合成を達成すると、そいつが「ほんの少しだけ前代未聞の指針」を教示してくれるので、なんとかなるものである。これは、ロールプレイングゲームで「モンスターとの戦闘を介して経験値を取得する」と同じ原理である(違つかも) 但し、リセットは効かないので要注意。はてさて、どこまで行けるか。行けるところまで行ってみよう。

## 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) 分子性伝導体や赤外線吸収色素への応用が期待されるジシアノピラジン環を含むジチオレート金属錯体の分子構造をX線結晶構造解析により決定した。その結果，アニオン分子はほぼ平面で，平面四配位型の配位構造を形成しており，層状にスタックしていることが明らかになった。
- b) 我々は，以前より，1,2,5-チアジアゾール環を含む化合物の結晶構造において，van der Waals半径の和より短い分子間S...N相互作用による二量体や分子テープなど興味ある分子集合体構造を見出してきた。しかしながら，このような分子間相互作用はこれまでにほとんど調べられていない。そこで，モデル化合物として1,2,5-チアジアゾール二量体を用いて量子化学的手法によりこの相互作用を詳細に検討した。その結果，S...N相互作用の引力は主に分散力であることを明らかにした。MP2法によるS...N相互作用の結合エネルギーは約1.7 kcal/molで，二量体の最適構造におけるS...N距離はほぼ実測値を再現した。

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 $\pi$ 電子系内に，水素結合などの分子間の弱い相互作用を導入し，種々の分子集合体を設計・構築するという方法論には，無限の可能性が秘められていることを示している。今後は，水素結合のみならず，ヘテロ原子間相互作用・C-H... $\pi$ 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，格子状多孔性有機超分子構造体の構築に取り組みたい。また，ハロゲン原子と窒素原子あるいは $\pi$ 電子系との間のノンコバレントな相互作用(C-X...N, C-X... $\pi$ )は結晶工学上有用なツールとなり得る可能性を秘めているが，水素結合系と比較してその報告例は少ない。そこでこれを用いた分子集合体設計にも注

目している。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。最後に、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 タンパク質の構造機能相関の解明を目的とし, Aer2 タンパク質の X 線結晶構造解析を行った。アミノ酸配列から推定される Aer2 のドメイン構造は, N 末から HAMP, PAS, HAMP, MCP の各ドメインが連続していると考えられている。本年度の研究では, HAMP-PAS-HAMP ドメイン部分, および PAS-HAMP ドメイン部分の結晶構造解析に成功した。N 末および PAS ドメインの後方に存在する HAMP ドメインはそれぞれ, 三つおよび二つの HAMP ユニットが連結した poly-HAMP 構造を有している。HAMP ドメインと PAS ドメインは直線状に連結されており, 両者の間で直接的なタンパク質間相互作用は存在していないことが分かった。酸素センサーの本体として機能するヘムは, PAS ドメイン中に存在している。本研究において構造決定した Aer2 は, いずれの場合もシアン結合型である。ヘム鉄に配位した CN<sup>-</sup> には Trp283 が相互作用していることが分かった。シアン結合型を酸素結合型のモデルとして考えることができるとすれば, Aer2 に酸素が結合した場合には, ヘムに結合した酸素分子に Trp283 が水素結合しているものと推定される。Trp283L 変異体は, 安定な酸素結合型を形成しないことが分かった。このことから, Trp283 が酸素と水素結合を形成し, 酸素結合型 Aer2 の安定化に寄与しているというモデルは妥当なものであると考えられる。Trp283 は, PAS ドメインの下流に存在する HAMP ドメインとのリンカーに連結している PAS ドメインの最も C 末側の β シート中に存在している。したがって, ヘムに対する酸素分子の結合の有無, すなわち Trp283 と酸素間での水素結合の有無が, Trp283 のコンフォメーション変化を誘起し, そのコンフォメーション変化がダイレクトに C 末側 HAMP ドメインならびに MCP ドメインのコンフォメーション変化へと繋がることにより分子間シグナル伝達反応が進行しているものと考えられる。
- 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は, 乳酸菌中で過剰なヘムを感知し, ヘム排出に関与するタンパク質群の発現制御を行っている転写調節因子 HrtR (以前の名称では YgfC) タンパク質の X 線結晶構造解析を行うとともに, ヘム分子による HrtR の機能制御機構の解明を行った。HrtR はホモダイマーとして存在しており, その全体構造は, 転写調節因子 TetR ファミリーの構造に類似しており, N 末領域には DNA 結合ドメインを, C 末領域にはヘム結合ドメインを有していた。本研究では, ヘムを結合したホロ型, およびヘムを結合していないアポ型, 両方の構造を決定した。ヘムは, His72 および His149 を軸配位子として HrtR に結合し, 6 配位構造

を取ることが分かった。HtrR の標的 DNA 配列の同定にも成功し、アポ型 HtrR のみが標的 DNA に結合可能であることを明らかにした。標的 DNA と複合体を形成した HtrR にヘムを添加すると、HtrR が DNA から解離することが分かった。これらの結果と、X線結晶構造解析により得られた構造情報を総合し、ヘム分子による HtrR の機能制御分子機構の解明を行った。その結果、HtrR にヘムが結合することにより、HtrR ヘム結合ドメインの最も N 末側に存在しているヘリックス・ループ・ヘリック構造部分にコイル・ヘリックス転移が誘起され、さらにこの構造変化により DNA 結合ドメイン全体の相対配置が変化することにより HtrR の DNA 結合能が失われることを明らかにした。

#### B-1) 学術論文

**N. FUJIEDA, T. IKEDA, M. MURATA, S. YANAGISAWA, S. AONO, K. OKUBO, S. NAGANO, T. OGURA, S. HIROTA, S. FUKUZUMI, Y. NAKAMURA, Y. HATA and S. ITO**, “Post-Translational His-Cys Cross-Linkage Formation in Tyrosinase Induced by Copper(II)-Peroxo Species,” *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 1180–1183 (2011).

**E. PINAKOULAKI, C. KOUTSOUPAKIS, H. SAWAI, A. PAVLOU, Y. KATO, Y. ASANO and S. AONO**, “Aldoxime Dehydratase: Probing the Heme Environment Involved in the Synthesis of the Carbon–Nitrogen Triple Bond,” *J. Phys. Chem. B* **115**, 13012–13018 (2011).

#### B-4) 招待講演

**S. AONO**, “Structure and function of oxygen sensor proteins adopting a heme-containing PAS domain as a sensor for aerotaxis control,” 3rd Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences Experiments and Simulations, Jeju (Korea), March 2011.

**S. AONO**, “Biological Sensing and Signal Transduction Systems with a Heme,” 15th International Conference on Biological Inorganic Chemistry (ICBIC-15), Vancouver (Canada), August 2011.

青野重利, 「ヘムをシグナル分子とする生体機能制御の分子機構」第108回触媒学会, 北見, 2011年9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).

ノバルティス科学振興財団研究奨励金,「ガス分子により駆動される生体内シグナル伝達の分子機構解明」青野重利 (2010年).

野田産業科学研究所研究助成,「ヘムをシグナル分子とする*Lactococcus lactis*における遺伝子発現制御」青野重利 (2011年).

科研費挑戦的萌芽研究,「環境汚染物質検出用の高感度蛍光プローブを装備したホーミングセルの創製」青野重利 (2011年-2012年).

科研費基盤研究(B),「ガス分子による生体機能制御に関与するセンサータンパク質の構造と機能」青野重利 (2011年-2013年).

## C) 研究活動の課題と展望

当研究室では,酸素,一酸化炭素などの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。これらの研究に加え,本年度からはヘム分子がエフェクター分子として機能し,細胞内ヘム濃度の恒常性維持に関与している転写調節因子に関する研究にも取り組み始めた。本研究は,細胞中における遷移金属イオン濃度の恒常性維持機構の解明という,大きな研究目標への出発点ともいえる研究である。今後は,構造生物学的,ならびに生化学・分子生物学的な実験手法を活用し,ヘムを含む遷移金属イオンの細胞内濃度恒常性維持に関与するタンパク質群の構造機能相関解明を進めて行きたいと考えている。

## 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) モルテン・グロビュール状態オレイン酸複合体の抗腫瘍活性
- b) OspA のフォールディング機構
- c) ミニシャペロンの分子シャペロン活性とアミロイド形成
- d) GroEL/GroES 複合体の構造揺らぎと生物機能
- e) GroEL/GroES 複合体形成の熱力学的解析

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  $\alpha$  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  $\alpha$  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，安定なモルテン・グロビュール状態を形成する他の蛋白質 (イヌ乳リゾチーム，アポ・ミオグロビン， $\beta_2$  ミクログロブリン) とオレイン酸との複合体を作製し，それらの抗腫瘍細胞活性を調べた。その結果，作製した複合体は  $\alpha$  ラクトアルブミン - オレイン酸複合体と同様な抗腫瘍細胞活性を示した。モルテン・グロビュール状態の蛋白質とオレイン酸との複合体の抗腫瘍活性は，オレイン酸によりもたらされており，蛋白質部分はオレイン酸を選択的に腫瘍細胞に導く担体 (carrier) として働いていると考えられる。
- b) 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  $\beta$  シート領域を持つ特徴的な双ドメイン蛋白質であり， $\beta$  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。昨年蛍光と円二色性ストップフローを用いた解析から，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。これに基づいて N 末端と C 末端ドメインを単独でそれぞれ作製し，それらの巻き戻り過程を調べた。N 末端ドメイン単独ではアンフォールディング速度が加速し，安定性が減少していることが明らかになった。
- c) 大腸菌シャペロニン GroEL の頂上ドメインを遺伝子工学的に単離した蛋白質はミニシャペロンと呼ばれ，それ自身で独立に折り畳まる。ミニシャペロンは，天然条件下では， $\beta_2$  ミクログロブリンのアミロイド形成を抑制するなど，不完全ながらも分子シャペロンとしての働きを有する。しかし，ミニシャペロンの一次配列を Trovato 等が開発した PASTA で解析すると，アミロイド形成能の高い領域の存在することがわかった。そこで，チオフラビン T 結合に伴う蛍光測定，透過型電顕観察等の手法を用いて，さまざまな条件下でアミロイド形成を調べた。その結果，酸性条件下では，ミニシャペロン自身がアミロイド線維を形成することが明らかとなった。また，酸性条件下で  $\beta_2$  ミクログロブリンも共存させると，反応初期には  $\beta_2$  ミクログロブリンのアミロイドを抑制する分子シャペロンとしての働きも有するので，ミニシャペロンはそれ自身アミロイド形成能を持ちながら分子シャペロンとしても働く二面性を持っている。
- d) 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。昨年は，GroES 単独での H/D 交換反応を TROSY-NMR 法を用いて追跡した (20 mM KCl, 25 mM リン酸緩衝液, pH 6.5, 25 °C)。その結果，GroES 複合体のコア領域の交換反応は追跡できたが，モバイルループ領域は交換が速く追跡が不可能であった。交換速度の速いアミド水素の交換反応を解

析するため、天然条件下で水素交換反応を行った後、DMSO 停止 H/D 交換二次元 NMR 法と 920 MHz NMR 装置を用いて、各反応時間における残存アミド・プロトン強度を測定した。また、重水素化 DMSO 中の GroES の約 70 個のアミド水素の帰属を終えており、これらの帰属に基づいて各アミド水素の H/D 交換反応を解析している。

- e) ADP や ATP 等のヌクレオチド存在下では、GroEL は GroES と 1:1 の複合体を形成して分子シャペロンとしての完全な機能を発現する。しかし、GroEL と GroES の結合の熱力学パラメータについては、未だ十分に知られてはいない。<sup>15</sup>N 標識した GroES7 量体の二次元 HSQC NMR スペクトルは、GroES モバイルループにあるアミド水素の明確なクロスピークを示すが、ADP 存在下で GroEL と結合するとクロスピークが消失する。この性質を利用して、GroEL と GroES との結合の熱力学的解析を行っている。また、分子研に設置されている超高感度滴定型熱量計を用いた結合の熱力学的解析も合わせて行い、二次元 NMR を用いた結果と比較する。

#### B-1) 学術論文

**J. CHEN, K. MAKABE, T. NAKAMURA, T. INOBE and K. KUWAJIMA**, “Dissecting a Bimolecular Process of MgATP<sup>2-</sup> Binding to the Chaperonin GroEL,” *J. Mol. Biol.* **410**, 343–356 (2011).

**T. RATHNAYAKA, M. TAWA, T. NAKAMURA, S. SOHYA, K. KUWAJIMA, M. YOHDA and Y. KURODA**, “Solubilization and Folding of a Fully Active Recombinant *Gaussia* Luciferase with Native Disulfide Bonds by Using a SEP-Tag,” *Biochim. Biophys. Acta, Proteins Proteomics* **1814**, 1775–1778 (2011).

#### B-4) 招待講演

**A. MUKAIYAMA, K. MAKI, T. NAKAMURA, K. MAKABE, Y. GOTO and K. KUWAJIMA**, “Folding mechanism of  $\beta_2$ -microglobulin and its relationship to dialysis-related amyloidosis,” 3rd Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences—Experiments and Simulations, Lotte Hotel Jeju, Jeju (Korea), February–March 2011.

**T. NAKAMURA, K. MAKABE, T. AIZAWA, K. KAWANO, M. DEMURA and K. KUWAJIMA**, “NMR and biological studies of anti-tumor complex between oleic acid and protein in the molten globule state,” 3rd Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences—Experiments and Simulations, Lotte Hotel Jeju, Jeju (Korea), February–March 2011.

**J. CHEN, K. MAKABE and K. KUWAJIMA**, “Dissecting a bimolecular process of ATP binding to the chaperonin GroEL,” 3rd Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences—Experiments and Simulations, Lotte Hotel Jeju, Jeju (Korea), February–March 2011.

**C. KOBAYASHI, T. OROGUCHI, M. IKEGUCHI, T. NAKAMURA, K. MAKABE, K. KUWAJIMA and S. SAITO**, “A theoretical study of unfolding pathway of canine milk lysozyme,” 3rd Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences—Experiments and Simulations, Lotte Hotel Jeju, Jeju (Korea), February–March 2011.

**K. MAKABE, S. KOIDE and K. KUWAJIMA**, “Structure and folding of a  $\beta$ -sheet rich model protein,” 3rd Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences—Experiments and Simulations, Lotte Hotel Jeju, Jeju (Korea), February–March 2011.

**K. KUWAJIMA**, “Molecular Mechanisms of the *Escherichia coli* Chaperonin Function,” The 3rd Asia Pacific Protein Association (APPA) Conference in conjunction with the 3rd Symposium of the Chinese Protein Society (CPS), Shanghai University, Shanghai (China), May 2011.

**K. KUWAJIMA**, “Molecular Mechanisms of the *Escherichia coli* Chaperonin Function,” The 11th KIAS Conference on Protein Structure and Function, Korea Institute for Advanced Study (KIAS), Seoul (Korea), October 2011.

M. CHANDAK, "Dynamic structural fluctuation of free heptameric GroES studied by the use of hydrogen-exchange technique and 2D NMR," 総合研究大学院大学第8回生命科学リトリート, ヤマハリゾートつま恋, 掛川市, 2011年12月.

B-5) 特許出願

特願 2011-238611, 「球状蛋白質の準安定状態を用いた抗癌細胞作用のある分子の作成」桑島邦博, 中村敬, 真壁幸樹(大学共同利用機関法人自然科学研究機構) 2011年.

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 (2009-2010).

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 (2004-2011).

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 $\alpha$ 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。昨年の研究からモルテン・グロビュール状態を示す他の蛋白質、イヌ乳リゾチーム、アポミオグロビン、 $\beta_2$ ミクログロブリンなどでも、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の発現されることが明らかとなった。モルテン・グロビュール状態にある蛋白質は、オレイン酸を腫瘍細胞選択的に運ぶ担体として働いていると考えられる。この仮説が正しいならば、オレイン酸のみならず、抗がん剤をモルテン・グロビュール状態の蛋白質に結合させ、腫瘍細胞選択的にこれを導入することが可能と考えられる。今後このような観点からも研究に取り組みたい。既に、TROSY-NMR法とDMSO停止H/D交換二次元NMR法を用いて、遊離7量体GroESのH/D交換プロフィールを得ている。DMSO停止H/D交換二次元NMR法を用いることにより、GroEL/GroES複合体中のGroES部分の水素交換反応を追跡し、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・分子生物学的手法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) コピキチンが Lys48 を介して連結された重合体は、プロテアソームによるタンパク質分解の目印として機能している。これまで、Lys48 連結型のコピキチン 2 量体については、分子表面の疎水性領域がドメイン間相互作用により遮蔽された閉構造が主に形成されているものと報告されてきた。本研究では、試験管内酵素反応を工夫することによって調製した野生型コピキチン 2 量体と、2 つのイソペプチド結合を介して環状構造を形成したコピキチン 2 量体の立体構造解析を行った。コピキチンの単量体と環状 2 量体をそれぞれ開構造と閉構造のモデルとして、野生型 2 量体との NMR 化学シフトを比較した結果、Lys48 を介して連結された野生型コピキチン 2 量体の 75% は、pH7.0 において開構造を形成していることが示された。さらに、溶液 pH を下げるにつれて開構造の占める割合は増大し、pH4.5 では専ら開構造のみとなった。すなわち、Lys48 を介して連結されたコピキチン 2 量体は、従来考えられていたのとは異なり、水溶液中で疎水表面を露出した開構造を専ら呈していることが明らかとなった。
- b) 免疫グロブリン G (IgG) の Fc 領域には N 型糖鎖が結合している。この糖鎖上の  $\alpha$ 1,6 フコース残基を欠損させると、Fc $\gamma$  レセプター IIIa (Fc $\gamma$ RIIIa) に対する IgG-Fc の親和性が有意に増大し、その結果、NK 細胞を介した抗体依存性細胞障害活性 ADCC が劇的に向上することが示されている。我々は 細胞外領域のみからなる可溶性 Fc $\gamma$ RIIIa (sFc $\gamma$ RIIIa) と Fc の非フコシル体の複合体の結晶構造を 2.2 Å 分解能で決定することに成功した。これにより、Fc と sFc $\gamma$ RIIIa の複合体は、タンパク質間相互作用のみならず、糖鎖とタンパク質の間の相互作用、さらには糖鎖同士の相互作用により安定化されていることが明らかとなった。しかしながら、Fc の糖鎖がフコシル化されると sFc $\gamma$ RIIIa の Asn162 糖鎖に対して立体障害を生じることが示された。このことが、フコースの除去に伴って IgG の Fc $\gamma$ RIIIa への親和性が増大し、ADCC 活性が向上することの理由の 1 つである。また、これまで我々は NMR 解析により、Fc 非フコシル体の Tyr296 はレセプター非存在下では複数のコンフォメーションをとっていることを示していたが、本研究で明らかにした複合体中では、Tyr296 の側鎖芳香環が sFc $\gamma$ RIIIa の糖鎖と Lys128 に挟まれるかたちで複合体の安定化に寄与していた。これに対して、フコシル化された Fc では、フコースが Tyr296 と分子内で相互作用してその動きを拘束しており、Fc と sFc $\gamma$ RIIIa との相互作用に対して抑制的にはたらくている。このこともフコースの除去に伴って Fc $\gamma$ RIIIa との親和性が向上する要因であると考えられる。本研究により、IgG の Fc 上のフコース残基は、糖鎖間の相互作用およびアミノ酸残基の運動性を制御することによって、ADCC 活性に劇的な影響を与えていることが示された。
- c) タンパク質の 4 次構造の動態を解明することは、その機能発現機構やサブユニット会合機構を理解するうえで重要である。我々は、タンパク質の重水素標識を利用した中性子小角散乱 (SANS) 法により、ホモオリゴマータンパク質のサブユニット交換の速度論解析を行う方法を開発した。具体的には、重水素標識を施したプロテアソーム  $\alpha$ 7 サブユニットのホモ 14 量体を調製し、これを非標識 14 量体と混合した後の SANS プロファイルの経時変化を追跡した。速度論解析の結果、交換可能なサブユニットはホモ 14 量体中で 2 つのみに限られ、それらのサブユニット交換は 2 段階の過程からなっ

ていることが示された。これまではプロテアソームの  $\alpha 7$  サブユニットは、ホモ 14 量体中で等価な構造をしているとみなされていたが、サブユニット交換の速度論解析からその 4 次構造の非対称性が浮かび上がってきた。本方法は今後様々なオリゴマータンパク質に応用可能であり、4 次構造の揺らぎに関する有用な知見をもたらすことが期待される。また、アミロイド  $\beta$  ( $A\beta$ ) がガングリオシド GM1 のクラスター上で  $\alpha$  ヘリックス構造から  $\beta$  構造へと転移する過程に関する構造的知見を得るため、NMR 法と真空紫外円二色法による構造解析を行った。これにより、 $A\beta$  が GM1 ミセル上に高密度に存在している条件下では、C 末端部での分子間相互作用を介した  $\beta$  構造形成が促されることが示された。

#### B-1) 学術論文

**M. YAGI-UTSUMI, K. MATSUO, K. YANAGISAWA, K. GEKKO and K. KATO**, “Spectroscopic Characterization of Intermolecular Interaction of  $A\beta$  Molecules Promoted on GM1 Micelles,” *Int. J. Alzheimer’s Dis.* **2011**, e925073 (8 pages) (2011).

**M. KANAGAWA, T. SATOH, A. IKEDA, Y. NAKANO, H. YAGI, K. KATO, K. KOJIMA-AIKAWA and Y. YAMAGUCHI**, “Crystal Structures of Human Secretory Proteins ZG16p and ZG16b Reveal a Jacalin-Related  $\beta$ -Prism Fold,” *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **404**, 201–205 (2011).

**N. SRIWILAIJAROEN, S. KONDO, H. YAGI, N. TAKEMAE, T. SAITO, H. HIRAMATSU, K. KATO and Y. SUZUKI**, “N-Glycans from Porcine Trachea and Lung: Predominant NeuAc $\alpha$ 2-6Gal Could Be a Selective Pressure for Influenza Variants in Favor of Human-Type Receptor,” *PLoS ONE* **6**, e16302 (8 pages) (2011).

**K. ASAMITSU, Y. HIBI, K. IMAI, A. F. B. VICTORIANO, E. KURIMOTO, K. KATO and T. OKAMOTO**, “Functional Characterization of Human Cyclin T1 N-Terminal Region for Human Immunodeficiency Virus-1 Tat Transcriptional Activation,” *J. Mol. Biol.* **410**, 887–895 (2011).

**Y. KAMIYA, S. YAMAMOTO, Y. CHIBA, Y. JIGAMI and K. KATO**, “Overexpression of a Homogeneous Oligosaccharide with  $^{13}\text{C}$  Labeling by Genetically Engineered Yeast Strain,” *J. Biomol. NMR* **50**, 397–401 (2011).

**S. YAMAMOTO, T. YAMAGUCHI, M. ERDÉLYI, C. GRIESINGER and K. KATO**, “Paramagnetic Lanthanide Tagging for NMR Conformational Analyses of N-Linked Oligosaccharides,” *Chem. –Eur. J.* **17**, 9280–9282 (2011).

**S. HANASHIMA, K. KATO and Y. YAMAGUCHI**, “ $^{13}\text{C}$ -NMR Quantification of Proton Exchange at LewisX Hydroxyl Groups in Water,” *Chem. Commun.* **47**, 10800–10802 (2011).

**M. SUGIYAMA, E. KURIMOTO, H. YAGI, K. MORI, T. FUKUNAGA, M. HIRAI, G. ZACCAI and K. KATO**, “Kinetic Asymmetry of Subunit Exchange of Homooligomeric Protein as Revealed by Deuteration-Assisted Small-Angle Neutron Scattering,” *Biophys. J.* **101**, 2037–2042 (2011).

**T. HIRANO, O. SERVE, M. YAGI-UTSUMI, E. TAKEMOTO, T. HIROMOTO, T. SATOH, T. MIZUSHIMA and K. KATO**, “Conformational Dynamics of Wild-Type Lys-48-Linked Diubiquitin in Solution,” *J. Biol. Chem.* **286**, 37496–37502 (2011).

**T. MIZUSHIMA, H. YAGI, E. TAKEMOTO, M. SHIBATA-KOYAMA, Y. ISODA, S. IIDA, K. MASUDA, M. SATOH and K. KATO**, “Structural Basis for Improved Efficacy of Therapeutic Antibodies on Defucosylation of Their Fc Glycans,” *Genes Cells* **16**, 1071–1080 (2011).

**H. YAGI, E. OHNO, S. KONDO, A. YOSHIDA and K. KATO**, “Development and Application of Multidimensional HPLC Mapping Method for O-Linked Oligosaccharides,” *Biomolecules* **1**, 48–62 (2011).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

**Y. UEKUSA, M. KAMIHARA-ISHIJIMA, O. SUGIMOTO, T. ISHII, S. KUMAZAWA, K. NAKAMURA, K. TANJI, K. KATO, A. NAITO and T. NAKAYAMA**, “The study of catechin-phospholipid membranes interaction by solution and solid-state NMR spectroscopy,” *Proceedings of The 4th International Conference on O-CHA (Tea) Culture and Science (ICOS 2010)*, HB-P-28 (2011).

B-3) 総説, 著書

**K. KATO**, “Systematic structural analyses of glycoconjugates: NMR and sugar library approaches,” *高分子* **60**, 116 (2011).  
**O. SERVE, Y. KAMIYA and K. KATO**, “Redox-dependent chaperoning, following PDI footsteps,” in *Protein Folding*, E. C. Walters, Ed., NOVA Science Publishers, 489–500 (2011).

加藤晃一, 「920MHz超高磁場NMR装置を用いた神経変性疾患関連タンパク質の構造解析」*Nanotech Japan Bulletin*, **Vol. 4**, No. 2 (2011).

**Y. KAMIYA, M. YAGI-UTSUMI, H. YAGI and K. KATO**, “Structural and molecular basis of carbohydrate–protein interaction systems as potential therapeutic targets,” *Curr. Pharm. Des.* **17**, 1672–1684 (2011).

高橋禮子, 近藤幸子, 加藤晃一, 「多次元糖鎖マップ法とウェブアプリケーション“ GALAXY ”」*「生物薬科学実験講座 第4巻 糖質 II」糖タンパク質実験法* 川寄敏祐編, 廣川書店, 64–76 (2011).

矢木宏和, 加藤晃一, 「多次元HPLC マッピングによる糖タンパク質糖鎖の定量的プロファイリング」*「バイオ医薬品開発における糖鎖技術」* 早川堯夫, 掛樋一晃, 平林淳監修, シーエムシー出版, 242–252 (2011).

B-4) 招待講演

**K. KATO**, “Sugar–protein interaction systems as potential therapeutic targets,” 98<sup>th</sup> Indian Science Congress, Chennai (India), January 2011.

**H. YAGI, N. TAKAHASHI and K. KATO**, “Development of multi-dimensional HPLC mapping for N-glycans and its application for functional glycomics,” 98<sup>th</sup> Indian Science Congress, Chennai (India), January 2011.

**T. YAMAGUCHI, S. YAMAMOTO, M. ERDÉLYI, C. GRIESINGER and K. KATO**, “NMR conformational analysis of N-linked oligosaccharides by paramagnetic tagging,” 98<sup>th</sup> Indian Science Congress, Chennai (India), January 2011.

加藤晃一, 「抗体医薬の開発に向けた多次元HPLC法およびNMR法による糖鎖解析技術」*技術情報協会セミナー「バイオ / 抗体医薬品における特性解析技術と免疫原性評価法」* 東京, 2011年1月.

**K. KATO**, “Structural Glycomic Approaches to Molecular Recognition Events on Cell Surfaces,” IX<sup>th</sup> International Symposium on “Biochemical Roles of Eukaryotic Cell Surface Macromolecules,” Trivandrum (India), January 2011.

**K. KATO, H. YAGI, Y. KAMIYA, M. NISHIO, T. YAMAGUCHI, S. YAMAMOTO, M. YAGI-UTSUMI and T. MIZUSHIMA**, “A systematic approach to structural glycobiology,” Third Korea-Japan Seminar on Biomolecular Sciences-Experiments and Simulations, Jeju (Korea), February 2011.

加藤晃一, 「複合糖質の構造生物学」*岡崎統合バイオサイエンスセンター10周年記念シンポジウム*, 岡崎, 2011年2月.

矢木真穂, 「ガングリオシドクラスターに結合したアミロイドβペプチドのNMR構造解析」*立命館グローバル・イノベーション研究機構「蛋白質のフォールディングおよびフォールディング病発症機構の解明のための統合研究」* セミナー, 草津, 2011年3月.

加藤晃一,「天然及び非天然変性状態にあるタンパク質のNMR 研究の実際」新学術領域研究「天然変性タンパク質の分子認識と機能発現」第二回若手育成講習会,大阪,2011年4月.

加藤晃一,「糖鎖によるタンパク質の運命と機能の制御」第27回日本DDS学会,東京,2011年6月.

加藤晃一,「Molecular mechanisms underlying neurodegenerative disorders as studied by NMR spectroscopy(NMR で探る神経変性疾患の分子メカニズム)」第8回原子・分子・光科学(AMO)討論会,東京,2011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23年度合同班会議,夕張,2011年6月.

矢木真穂,加藤晃一,「ガングリオシドクラスターを舞台とするアミロイドβの構造転移と分子間相互作用」第11回日本蛋白質科学会年会,大阪,2011年6月.

矢木真穂,「GM1クラスターを舞台とするアミロイドβの重合開始機構」第12回若手NMR研究会,滋賀,2011年6月.

神谷由紀子,「糖タンパク質の細胞内運命決定機構の構造基盤」生化学若い研究者の会第3回名古屋支部セミナー,名古屋,2011年8月.

加藤晃一,「糖鎖が広げるタンパク質の世界」科学技術振興機構研究開発戦略センター俯瞰ワークショップ「構造生命科学」東京,2011年9月.

**K. KATO**, “Structural and molecular basis of carbohydrate-protein interaction systems as potential therapeutic targets,” The 31<sup>st</sup> Naito Conference: Glycan Expression and Regulation [II] Metabolites, Stress Response, Microdomains, and Beyond, Sapporo, September 2011.

**K. KATO**, “Conformational fluctuations of oligomeric proteins involved in the ubiquitin-proteasome system,” The 49<sup>th</sup> Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Himeji, September 2011.

**K. KATO**, “Structural and dynamics views of the ubiquitin-proteasome system,” The 11<sup>th</sup> KIAS Conference on Protein Structure and Function, Seoul (Korea), October 2011.

**K. KATO**, “A Systematic Approach for Structural Glycoproteomics,” The 23<sup>rd</sup> Annual Meeting of the Korean Society for Molecular and Cellular Biology, Seoul (Korea), October 2011.

**K. KATO, H. YAGI, T. YAMAGUCHI, S. YAMAMOTO, Y. KAMIYA and M. YAGI-UTSUMI**, “NMR analyses of carbohydrate-protein interaction systems as potential therapeutic targets,” Glycobiology Japan-Netherlands Joint Seminar 2011, Nagoya, October 2011.

**K. KATO**, “Structural views of functional and pathological roles of sugar chains,” The 71<sup>st</sup> Okazaki Conference on “New perspectives on molecular science of glycoconjugates,” Okazaki, October 2011.

**K. KATO**, “Structural views of biological functions of sugar chains,” Shenyang Pharmaceutical University Special Seminar, Shenyang (China), October 2011.

**M. YAGI-UTSUMI**, “Conformational transition and intermolecular interaction of amyloid β molecules promoted on GM1 clusters,” Shenyang Pharmaceutical University Special Seminar, Shenyang (China), October 2011.

西尾美穂,神谷由紀子,佐藤匡史,内海真穂,加藤晃一,「レクチンとカルシウム結合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」糖鎖科学名古屋拠点第9回若手のカフォーラム,岐阜,2011年10月.

**Y. KAMIYA**, “Molecular basis of glycoprotein-fate determination through interactions with intracellular lectins,” Global COE Mini-Symposium: Toward Systems Glycobiology “Biosynthesis and catabolism of glycoproteins,” Nagoya, November 2011.

加藤晃一,「多次元HPLC法およびNMR法による糖鎖解析技術」技術情報協会セミナー「抗体/バイオ医薬品における各種分析手法とバリデーション」東京,2011年11月.

加藤晃一,「IgGとFc $\gamma$ レセプターIIIの相互作用における糖鎖の役割」第9回糖鎖科学コンソーシアムシンポジウム,名古屋,2011年11月.

加藤晃一,「第3の生命鎖=糖鎖の分子科学」計算分子科学研究拠点第1回実験化学との交流シンポジウム,京都,2011年11月.

神谷由紀子,「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」2011年度特定領域「タンパク質の社会」全体班会議,大分,2011年11月.

#### B-6) 受賞,表彰

加藤晃一,日本薬学会奨励賞(2000).

神谷由紀子,特定領域研究「タンパク質の社会」全体班会議ポスター優秀賞(2008).

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).

加藤晃一,日本薬学会学術振興賞(2011).

矢木真穂,第11回蛋白質科学会年会若手奨励賞(2011).

山本さよこ,The International Symposium on Nuclear Magnetic Resonance 2011 (ISNMR 2011) 若手ポスター賞(2011).

加藤晃一,第48回ベルツ賞(2011).

#### B-7) 学会および社会的活動

##### 学協会役員等

日本バイオイメージング学会評議員(1995-).

日本生化学会評議員(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-).

##### 学会の組織委員等

The 71st Okazaki Conference "New perspectives on molecular science of glycoconjugates" 組織委員(2011).

##### 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-).

生物系特定産業技術研究支援センターイノベーション創出基礎的研究推進事業書類審査専門委員(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-).

*Glycobiology*, Editorial board member (2011-).

#### 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」2011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」2011年.

理化学研究所, 客員研究員, 2009年4月-.

総合研究大学院大学統合生命科学教育プログラム, 「生体分子科学」2011年.

国立長寿医療研究センター認知症先進医療開発センター, 客員研究員, 2011年4月-.

#### B-10) 競争的資金

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).

科学技術振興機構プラザ育成研究調査, 「糖鎖ライブラリーを活用したグライコミクス解析システムの開発」加藤晃一 (2004年).

経済産業省中部経済産業局地域新生コンソーシアム研究開発事業, 「糖鎖ライブラリーを活用した新規マイクロアレーの開発」加藤晃一 (2004年-2005年)

特定非営利活動法人バイオものづくり中部, 「糖鎖分科会」加藤晃一 (2005年-2006年).

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「揺らぎが機能を決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(研究活動スタート支援) 「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-2010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-).

科研費研究活動スタート支援 「アミロイド線維末端の特異構造の解明に基づく線維伸長メカニズムの理解」 矢木真穂 (2011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 受容体 IIIa との結合状態の構造解析」 加藤晃一 (2011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 (2011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 (2011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 (2011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 (2011年).

#### C) 研究活動の課題と展望

生命システムを構成する分子集団の原子レベルでのミクロな振る舞いが, 一定の秩序のもとに自己組織化して細胞の活動を制御し, 精神活動をはじめとする高次生体機能を発動する仕組みを統合的に理解することを模索する。そのために, 生体高分子の局所的なダイナミクスへの摂動が, 巨視的な構造・機能の変化へと展開する仕組みを解明するための, 適切なモデル系の構築とアプローチ法の開発に力を注ぐ。特に, 糖鎖が担う生命情報を解読するために, その分子動態を精密に解析するための分光学的実験手法を理論的アプローチと統合し, より複雑な糖鎖認識システムへと研究対象を拡張することを目指す。一方, 生体分子の自己組織化のメカニズムを理解するために, アミロイド形成やプロテアソームの4次構造形成を対象として, 新たな実験手法の開発を行いつつ, 秩序ある分子集合体の構築原理を理解することを目指した研究を展開する。さらに, 神経変性疾患のように, 生命システムの秩序の破綻がもたらす病気のメカニズムの解明を目指した研究も一層推進する。

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) 高原子価ヘム酵素反応中間体の機能発現の分子機構の研究
- b) サレン錯体による混合原子価状態の電子構造の研究
- c) 白血球の抗菌に関わる酵素反応中間体の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 高原子価鉄オキソ錯体は，さまざまな酸化反応に関わる金属酵素の活性種であると考えられている。例えばオキソ鉄4価ポルフィリン 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。オキソ鉄4価ポルフィリン カチオンラジカル錯体は，不活性な炭化水素類を酸化できるため高い酸化還元電位を持っていると考えられてきた。しかし錯体の不安定性からその電気化学的特性は明らかになっていなかった。我々は，低温での電気化学測定を可能にするため，セルの開発を行った。その結果，さまざまなオキソ鉄4価ポルフィリン カチオンラジカル錯体の電気化学測定に成功した。実験の結果，オキソ鉄4価ポルフィリン カチオンラジカル錯体は，予想外に酸化電位が低いことがわかった。また，酸化還元電位から酸化反応の反応機構を詳細に解明することができた。
- b) サレン錯体は，合成の容易さやその物性の多様性から光学材料，磁性材料，不斉酸化触媒など広く利用されている。我々は，サレン錯体を用いて生体内の金属酵素や Jacobsen 触媒と呼ばれる不斉エポキシ化触媒の反応活性種や反応機構の研究を行ってきた。今回我々は，マンガン3価およびニッケル2価サレン錯体の一電子酸化生成物の研究を行った。その結果，金属イオンは酸化を受けず，配位子のサレンのフェノール基が一電子酸化を受けたマンガン3価およびニッケル2価サレンラジカル錯体を生成していることが見いだした。サレンは分子内に2つのフェノール基を有しているため，そこから生成したサレンラジカル錯体は混合原子価状態となる。混合原子価状態に由来する吸収を正しく帰属するため，非対称なサレン錯体を合成した。非対称サレン錯体を一電子酸化すると，先に記した対称サレン錯体と同様にサレンラジカル錯体を生成した。対象なサレンラジカル錯体の分光学的データと比較することにより混合原子価由来のピークを正確に帰属することができた。
- c) 生体内の白血球は，外部から細菌などが体内に侵入すると細菌を取り囲み，白血球中のミエロペルオキシダーゼという酵素が塩素イオンから次亜塩素酸を作り出し細菌を撃退している。ミエロペルオキシダーゼがどのようにして次亜塩素酸を作り出しているかは未解明である。これまでの研究で，酵素が過酸化水素と反応して，高原子価オキソヘム錯体を形成することが知られていて，これが塩素イオンを酸化して次亜塩素酸を合成していると考えられている。我々は，高原子価オキソヘム錯体のモデルとなるオキソ鉄4価ポルフィリン カチオンラジカル錯体を合成し，塩素イオンとの反応を研究した。電子供与性の強いオキソ鉄4価ポルフィリン カチオンラジカル錯体は塩素イオンを添加しても反応はまったく起こらないが，電子吸引性の強いオキソ鉄4価ポルフィリン カチオンラジカル錯体では塩素イオンと迅速に反応することを見いだした。反応生成物を解析した結果，オキソ鉄4価ポルフィリン錯体を生成していることがわかった。さらに反応過程を速度論的手法により研究を行った結果，反応中間体として鉄3価次亜塩素酸錯体を經由し，それがラジカル的に分解してオキソ鉄4価ポルフィリン錯体を生成していることを提案することができた。

B-1) 学術論文

**T. KURAHASHI and H. FUJII**, “One-Electron Oxidation of Electronically-Diverse Manganese(III) and Nickel(II) Salen Complexes: Transition from Localized to Delocalized Mixed-Valence Ligand Radicals,” *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 8307–8316 (2011).

**A. TAKAHASHI, T. KURAHASHI and H. FUJII**, “Redox Potentials of Oxoiron(IV) Porphyrin  $\pi$ -Cation Radical Complexes: Participation of Electron Transfer Process in Oxygenation Reactions,” *Inorg. Chem.* **50**, 6922–6928 (2011).

**Z. CONG, T. KURAHASHI and H. FUJII**, “Oxidation of Chloride Ion and Subsequent Chlorination of Organic Compounds by Oxoiron(IV) Porphyrin  $\pi$ -Cation Radical Complexes,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **50**, 9935–9939 (2011).

B-4) 招待講演

**H. FUJII**, “ $^{13}\text{C}$  and  $^{15}\text{N}$  NMR Spectroscopy of Heme-Bound Cyanide ( $^{13}\text{C}^{15}\text{N}$ ) in Ferric Heme Proteins,” 241<sup>st</sup> ACS National Meeting, Anaheim (U.S.A.), March 2011.

**H. FUJII**, “Functional Role of Unique Heme  $d_1$  in Nitrite Reduction by Heme-Containing Nitrite Reductase,” Japan-Korea Seminars on Biomolecular Sciences—Experiments and Simulations, Jeju (Korea), February–March 2011.

藤井 浩, 「金属酵素による酸素活性化機構と酵素機能の関わり」山形大学, 山形, 2011年9月.

藤井 浩, 「金属酵素による酸素活性化機構と酵素機能の関わり」山手イブニングセミナー, 岡崎統合バイオサイエンスセンター, 岡崎, 2011年12月.

B-6) 受賞, 表彰

高橋昭博, 日本化学会学生講演賞 (2007).

高橋昭博, 第41回酸化反応討論会ポスター賞 (2008).

王 春蘭, 第44回酸化反応討論会ポスター賞 (2011).

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–.

山形大学大学院理学専攻化学研究科, 集中講義「物質生命化学特別講義」2011年9月8日–9日.

B-10) 競争的資金

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(B), 「立体構造にもとづく基質結合サイトの再構築による酵素反応選択性の制御」藤井 浩 (2004年–2007年).

大幸財団海外学術交流助成金, 「第3回ポルフィリンとフタロシアニンに関する国際会議での研究発表」藤井 浩 (2004年).

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).

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(C),「高原子価マンガノキソ錯体の精密反応制御」倉橋拓也 (2011年-2015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～2011年3月31日)\* )

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<sub>2</sub>/Si 表面上および単原子ステップ TiO<sub>2</sub> 単結晶表面上に形成した脂質二重膜中での斜入射照明法による1分子追跡を行った。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<sub>2</sub> 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 TiO<sub>2</sub>(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を示された。
- b) 培養型プレーナーパッチクランプ法による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ばって素子開発を進める方針とした。プレーナーパッチクランプによる神経細胞ネットワークでの電流計測は世界的にも興味を集めているが成功例はまだない。成功させるためには，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。安定電極の開発と，両面エンボスによる細胞位置固定のマイクロパタン構造の形成により，安定動作のできる素子開発に成功した。レーザー刺激電流計測とカプサイシン刺激による TRPV1 チャンネル電流計測において，ホールセルモードでは，ピペットパッチクランプに匹敵する性能であることを確認した。

B-1) 学術論文

A. ANDO, H. UNO, T. ASANO, T. URISU and S. HAMAGUCHI, "Arrangement of PC12 Cells on a Silicon Chip via Extracellular Matrix (ECM) Layer Patterning by Atmospheric Pressure Plasmas," *Plasma Fusion Res.* **6**, 1306155 (4 pages) (2011).

A. ANDO, T. ASANO, T. URISU and S. HAMAGUCHI, "Micro-Pattern Formation of Extracellular Matrix (ECM) Layers by Atmospheric-Pressure Plasmas and Cell Culture on the Patterned ECMs," *J. Phys. D: Appl. Phys.* **44**, 482002 (5 pages) (2011).

R. TERO, G. SAZAKI, T. UJIHARA and T. URISU, "Anomalous Diffusion in Supported Lipid Bilayers Induced by Oxide Surface Nanostructures," *Langmuir* **27**, 9662–9665 (2011).

A. SUMINO, T. DEWA, T. TAKEUCHI, R. SUGIURA, N. SASAKI, N. MISAWA, R. TERO, T. URISU, A. T. GARDINER, R. J. COGDELL, H. HASHIMOTO and M. NANGO, "Construction and Structural Analysis of Tethered Lipid Bulayer Containg Photosynthetic Antenna Proteins for Functional Analysis," *Biomacromolecules* **12**, 2850–2858 (2011).

M. TAKEUCHI, Y. NAGAOKA, T. YAMADA, H. TAKAKURA and T. OZAWA, "Ratiometric Bioluminescence Indicators for Monitoring Cyclic Adenosine 3',5'-Monophosphate in Live Cells Based on Luciferase-Fragment Complementation," *Anal. Chem.* **82**, 9306–9313 (2010).

B-4) 招待講演

宇理須恒雄,「ナノメーシシ ナノテクの医療応用」S- 匠ナノメーシシプロジェクト終了報告会, くにびきメッセ国際会議場, 島根, 2011年 3月.

宇理須恒雄,「神経細胞ネットワーク素子の開発——ナノメーシシからの発想——」第60回高分子討論会, 岡山大学津島キャンパス, 岡山, 2011年 9月.

B-5) 特許出願

特願 2011-278445,「プレーナーパッチクランプ装置, 該装置用電極部及び細胞イオンチャンネル電流計測方法」宇理須恒雄, Wang Zhihong, 宇野秀隆, Obuliraju Senthil Kumar (独立行政法人科学技術振興機構) 2011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・自由電子レーザープロセス技術調査専門委員会委員 (1997–1999).

放射線利用振興協会, 放射線利用技術指導研究員 (1997.11.18–20).

日本原子力研究所, 研究囑託 (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 23<sup>rd</sup>, 24<sup>th</sup>, 25<sup>th</sup> Annual International Symposium on Microlithography, 論文委員 (1997, 1998, 1999).  
レーザー学会第19回年次大会プログラム委員 (1998–1999).  
レーザー学会第23回年次大会プログラム委員 (2002–2003).  
UK-JAPAN International Seminar, 組織委員長 (1999, 2000).  
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)コスモロジー研究振興財団第16回研究助成,「二酸化チタン上に形成した脂質二重膜への表面特性の影響およびUV  
照射効果」手老龍吾(2005年-2006年).
- (財)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

手老は2010年9月に豊橋技術科学大学に異動し,宇理須は定年後4月より名古屋大学に特任教授として異動した。異動後  
も分子科学研究所で進めていたテーマ,[A-2(a)(手老),A-2(b)宇理須]を引き続き研究をさせていただいております。分子  
研在籍中に発案し暖かくご支援いただいた研究テーマをより大きくたくましく育て,社会に還元することをめざします。

\* ) 2011年3月31日退職

2011年4月1日名古屋大学特任教授

## 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) 時間分解赤外分光法による古細菌型ロドプシンの光誘起構造変化の解明
- b) 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
- c) 全反射赤外分光法による  $Mg^{2+}$  輸送体 MgtE のイオン選択機構の解明
- d) 低収量生体試料の効率的な時間分解計測を可能にするマイクロ流体ミキサーの開発
- e) 体内時計の調節に関わる光受容タンパク質メラノプシンの機能発現機構の解明
- f) 各種イオンチャネルタンパク質の解析に向けた大量発現系の構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 古細菌型ロドプシンは光駆動プロトンポンプとして機能するバクテリオロドプシンや塩化物イオンポンプであるハロロドプシンなどがあり、最近ではオプトジェネティクス分野で利用が進んでいる光開閉チャネルであるチャンネルロドプシンなど、細胞膜のイオン透過に重要な役割を果たすものが知られている。一方、これらのイオン輸送過程の分子機構はバクテリオロドプシン以外ではあまりよく分かっていないのが現状である。時間分解赤外分光計測を適用することでタンパク質の構造変化を解明することを目指した研究を進めている。今年度は、ハロロドプシンについて解析が進んでおり、光反応中間体での構造変化をタンパク質骨格の amide A (N-H 伸縮) から明らかにした研究について論文執筆中である。
- b) 金ナノ粒子や金薄膜などを利用した表面増強分光法が近年着目を集めている。全反射赤外分光計測用のシリコンブリズム表面に ~10 nm 程度の厚みで金薄膜を形成させ、膜タンパク質であるハロロドプシンの表面増強赤外分光計測を試みている。これまでに測定に最適な厚みが ~10 nm 程度であることを確認し、金薄膜上へのハロロドプシンの固定を His タグと Ni-NTA との錯体形成を利用することで実現している。N 末および C 末に His タグを導入したハロロドプシンや  $\beta$  シート構造を欠落した変異体などを用いて増強赤外吸収バンドの帰属を進めている。
- c) MgtE は、細胞内  $Mg^{2+}$  イオン濃度の恒常性維持に関わる膜輸送蛋白質であり、 $Mg^{2+}$  濃度依存的なゲート開閉により輸送活性調節を行っている。 $Mg^{2+}$  に対する MgtE の高いイオン選択性の分子機構を明らかにすることを目的として、脂質二重膜に再構成した MgtE に対して、 $Mg^{2+}$  もしくは  $Ca^{2+}$  を含んだ緩衝液を交換することでイオン交換誘起赤外差スペクトルを全反射赤外分光法 (ATR-FTIR) を用いて測定を行っている。また、変異体についても同様の測定を行うことで  $Mg^{2+}$  結合サイトの同定も行い、加えて野生型に滴定実験を行うことで、膜貫通ドメインに存在する  $Mg^{2+}$  結合サイトにおいては  $Mg^{2+}$  の方が  $Ca^{2+}$  よりも約 30 倍高い親和性を持っていることを明らかにした。
- d) 生体分子の分子機構を明らかにするためには、刻一刻と変化するコンフォメーションを実時間観察することが重要である。しかし、溶液の混合によって反応を開始する既存の方法では大量の試料を必要とするために対象にできる生体試料が限定されてしまう。そこで新規のマイクロ流体連続フローミキサーを装置開発室と共に開発し、顕微分光法と組み合わせることによって、試料の消費量を抑制した新規の計測系を構築している。現在、蛍光分子が高效率で混合されていることを蛍光顕微鏡で確認しており、蛍光標識した低収量生体試料 (特に膜蛋白質) の機能発現に伴うダイナミクスあるいは自己組織化の実時間観察へと展開していく予定である。
- e) 動物は外界の光情報を、視覚のみならず体内時計の調節にも用いている。近年、メラノプシンという光受容タンパク質が、ヒトやマウスにおける体内時計の光による調節に関わることが明らかになった。しかし試料調製の困難さから

これまでメラノプシンがどのように光情報を受容し・伝達するのかは不明であった。今年度は比較的試料調製が容易な頭索類ナメクジウオのメラノプシンに対して、さらに試料調製を容易にするため、様々な変異を導入して発現量を上げる試みを行った。その結果、野生型と比べて10倍近くにまで発現量を上げることに成功した。現在、その変異体を用いて赤外分光解析に取り組むと共に、同じ変異をヒトやマウスのメラノプシンにも導入することを試みている。

- f) イオンチャネルは、様々な細胞特に神経細胞が機能するために重要な役割を果たす膜タンパク質である。近年様々なイオンチャネルの構造解析が爆発的に進展しているが、解析が進んでいないチャネルや詳細がわかっていないメカニズムが残されている。今年度は、各種哺乳培養細胞を用いて様々なイオンチャネルタンパク質の大量発現系を構築する試みを行った。その結果、光を受容してチャネルが開閉するチャネルロドプシンの各種変異体の中で、よく発現するものを見出すことに成功した。また、その機能不全が不整脈などにかかわるイオンチャネル KCNQ の発現系の構築にも現在取り組んでいる。

#### B-1) 学術論文

**Y. FURUTANI, T. MURATA and H. KANDORI**, “Sodium or Lithium Ion-Binding-Induced Structural Changes in the K-Ring of V-ATPase from *Enterococcus hirae* Revealed by ATR-FTIR Spectroscopy,” *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 2860–2863 (2011).

**A. NAKATSUMA, T. YAMASHITA, K. SASAKI, A. KAWANABE, K. INOUE, Y. FURUTANI, Y. SHICHIDA and H. KANDORI**, “Chimeric Microbial Rhodopsins Containing the Third Cytoplasmic Loop of Bovine Rhodopsin,” *Biophys. J.* **100**, 1874–1882 (2011).

**J. SASAKI, H. TAKAHASHI, Y. FURUTANI, H. KANDORI and J. L. SPUDICH**, “Sensory Rhodopsin-I as a Bidirectional Switch: Opposite Conformational Changes from the Same Photoisomerization,” *Biophys. J.* **100**, 2178–2183 (2011).

**T. KONUMA, T. KIMURA, S. MATSUMOTO, Y. GOTO, T. FUJISAWA, A. R. FERSHT and S. TAKAHASHI**, “Time-Resolved Small-Angle X-Ray Scattering Study of the Folding Dynamics of Barnase,” *J. Mol. Biol.* **405**, 1284–1294 (2011).

**X. ZHANG, V. Q. LAM, Y. MOU, T. KIMURA, J. CHUNG, S. CHANDRASEKAR, J. R. WINKLER, S. L. MAYO and S. O. SHAN**, “Direct Visualization Reveals Dynamics of a Transient Intermediate during Protein Assembly,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **108**, 6450–6455 (2011).

#### B-3) 総説, 著書

**A. KAWANABE, Y. FURUTANI, K.-H. JUNG and H. KANDORI**, “An inward proton transport using Anabaena sensory rhodopsin,” *J. Microbiol.* **49**, 1–6 (2011).

古谷祐詞, 「全反射赤外分光法による膜タンパク質の構造機能相関研究の現状と展望」*化学と工業* **64**, 694–695 (2011).

**S. TAKAHASHI and T. KIMURA**, “Watching Dynamics of Events in Protein Folding in the Time Domain from Submilliseconds to Seconds: Continuous-Flow Rapid-Mixing Infrared Spectroscopy,” in *Protein Folding and Misfolding: Shining Light by Infrared Spectroscopy*, 91–116 (2011).

#### B-4) 招待講演

**Y. FURUTANI**, “FTIR Studies of Membrane Proteins,” The Winter School of Soken-dai/Asian CORE Program “Frontiers of Molecular Science—Life, Material, Energy, and Space,” Okazaki Conference Center, Okazaki, August 2011.

**Y. FURUTANI**, “Ion-binding-induced Structural Changes in Membrane Proteins Studied by ATR-FTIR Spectroscopy,” Third Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: —Experiments and Simulations, Lotte Hotel Jeju, Jeju (Korea), February 2011.

古谷祐詞,「イオン輸送タンパク質の分子科学」分子科学研究所 - 豊田中央研究所研究交流会, 豊田中央研究所, 長久手, 2011年6月.

古谷祐詞,「膜タンパク質のエネルギー変換および情報変換の分子機構」自然科学研究機構教育研究評議会(第28回)自然科学研究機構, 東京, 2011年6月.

**Y. FURUTANI**, “Ion-protein interactions studied by ATR-FTIR spectroscopy,” 14th Asian Chemical Congress, Bangkok (Thailand), August 2011.

**Y. FURUTANI and T. KIMURA**, “Development of stopped-flow attenuated total reflection FTIR spectroscopy for detecting dynamic structural changes in ion transporters,” The 49th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan (Symposium), University of HYOGO, Himeji (Japan), September 2011.

**Y. FURUTANI**, “Stimulus-induced difference infrared spectroscopy for receptor and transporter proteins in cell membrane,” Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing (China), October 2011.

**Y. FURUTANI**, “Stimulus-induced difference infrared spectroscopy for receptor and transporter proteins in cell membrane,” Henan University, Kaifeng (China), October 2011.

**Y. FURUTANI**, “Stimulus-induced difference infrared spectroscopy for receptor and transporter proteins in cell membrane,” 河南省物理学会第9次会員代表大会, Kaifeng (China), October 2011.

**Y. FURUTANI**, “Stimulus-induced difference infrared spectroscopy for receptor and transporter proteins in cell membrane,” College of Life Sciences Henan Normal University, Xinxiang (China), October 2011.

古谷祐詞,「偏光時間分解赤外分光法による高次分子システムではたらく水分子の構造変化解析への挑戦」特定領域研究「高次系分子科学」第12回ミニ公開シンポジウム, 松風園三谷温泉, 蒲郡, 2011年10月.

古谷祐詞,「赤外線でタンパク質内部の水素結合構造を語る」平成23年度生物構造学研究会「蛋白質中の水素・水分子の役割 - 中性子構造生物学の展望 -」テクノ交流館リコティ, 東海村, 2011年12月.

古谷祐詞,「赤外分光計測によるタンパク質研究の現状と未来」生物物理化学研究会シンポジウム「光といのち」名古屋工業大学, 名古屋, 2011年12月.

塚本寿夫,「光受容タンパク質ロドプシンの機能調節メカニズム」生化学若い研究者の会名古屋支部セミナー, 名古屋大学, 2011年8月.

#### 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

##### 学協会役員等

日本生物物理学会委員 (2010-2011).

日本生物物理学会分野別専門委員 (2010, 2011).

日本物理学会領域12運営委員 生物物理 (2011-2012).

日本化学会東海支部代議員 (2011).

##### 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).

自然科学研究機構平成22年度「若手研究者による分野間連携研究プロジェクト」膜輸送蛋白質によるイオン選択・透過・輸送の分子科学」古谷祐詞(2010年).

自然科学研究機構平成23年度「若手研究者による分野間連携研究プロジェクト」イオンチャネル蛋白質のイオン認識および開閉制御の分子機構解明」古谷祐詞(2011年).

科学技術振興機構さきがけ研究「様々な光エネルギー変換系における水分子の構造・機能相関解明」古谷祐詞(2011年-2014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).

科研費若手研究(A)「低収量生体分子の時間分解計測を目指したマイクロ流体ミキサーの開発」木村哲就(2011年-2013年).

## C) 研究活動の課題と展望

イオン輸送タンパク質や受容体などの膜タンパク質の機能発現の分子機構解明を赤外分光法などの各種分光法によって解明することを目的に研究を進めている。本年度から特任助教の塚本博士が加わり、培養細胞を用いることでGタンパク質共役型受容体(GPCR)の一種であるメラノプシンの機能的発現系の構築に成功しつつある。また、イオンチャネルについても生理研の久保義弘教授らとの共同研究を進めている。助教の木村博士も若手研究(A)の支援を受けて、低収量生体試料の効率的な時間分解計測を可能にするマイクロ流体ミキサーの開発を本格化させている。来年度は、バクテリオロドプシンやハロロドプシンの時間分解赤外分光計測やMg輸送タンパク質MgtEのイオン結合部位の赤外分光解析などの結果を原著論文にまとめる。大学院生の郭浩が博士論文研究として進めている金薄膜による表面増強効果によるハロロドプシンの赤外分光解析についても研究結果をまとめる予定である。今後の課題としては、ストップフロー法による時間分解赤外分光計測系の最適化、顕微赤外イメージングによる生細胞の動態観察などがある。

## 錯体触媒研究部門

魚 住 泰 広 (教授) (2000年4月1日着任)

A-1) 専門領域：有機合成化学，有機金属化学

A-2) 研究課題：

- a) 完全水系メディア中での触媒反応
- b) 高機能ハイブリッド金属錯体触媒・金属ナノ触媒の設計・開発
- c) 新しい遷移金属錯体の創製

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) パラジウム錯体触媒，ロジウム錯体触媒などを両親媒性高分子によって機能修飾することで，これら遷移金属錯体触媒有機変換工程の多くを完全水系メディア中で実施することに成功した。水中不均一での高立体選択的触媒反応の開発を世界にさきがけて成功した。
- b) 高分子分散型ナノ粒子金属触媒（有機高分子 - 金属粒子のハイブリッド），メソポーラスシリカ担持分子性遷移金属錯体（無機担体 - 有機金属のハイブリッド），金属架橋高分子の自己集積触媒（架橋構造と触媒機能のハイブリッド）を開発した。マイクロ流路内の層流界面での自己集積錯体触媒膜の創製に成功した。
- c) 新しいピンサー錯体の合成方法論を確立した。新方法論によって従来には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。なかでもピンサー錯体分子が自発的に集積することで形成する分子集合体の三次元高次構造に立脚した新しい触媒機能システムの開拓に注力しつつある。すなわち単一の錯体分子としては触媒活性を示さない（あるいは極めて低活性な）モノマー分子がベシクル等の高次構造を化学結合を介さない自己集積によって形成し，その高次構造アーキテクチャーによって初めて高度な触媒機能が駆動されるシステムの開発を進めている。

B-1) 学術論文

**Y. OE and Y. UOZUMI**, "Tandem Olefin Migration-Aldol Condensation in Water with an Amphiphilic Resin-Supported Ruthenium Complex," *Synlett* 787–790 (2011).

**G. HAMASAKA, T. MUTO and Y. UOZUMI**, "Molecular-Architecture-Based Administration of Catalysis in Water: Self-Assembly of an Amphiphilic Palladium Pincer Complex," *Angew. Chem., Int. Ed.* **50**, 4876–4878 (2011).

**A. OHTAKA, R. KUROKI, T. TERATANI, T. SHINAGAWA, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI, O. SHIMOMURA and R. NOMURA**, "Recovery of In Situ-Generated Pd Nanoparticles with Linear Polystyrene," *Green Sus. Chem.* **1**, 19–25 (2011).

**Y. HIRAI and Y. UOZUMI**, "C–N and C–S Bond Forming Cross Coupling in Water with Amphiphilic Resin-Supported Palladium Complexes," *Chem. Lett.* **40**, 934–935 (2011).

**H. OHTA, Y. UOZUMI and Y. M. A. YAMADA**, "Highly Active Copper-Network Catalyst for the Direct Aldol Reaction," *Chem. –Asian J.* **6**, 2545–2549 (2011).

**G. HAMASAKA, T. MUTO and Y. UOZUMI**, "A Novel Amphiphilic Pincer Palladium Complex: Design, Preparation and Self-Assembling Behavior," *Dalton Trans.* **40**, 8859–8868 (2011).

**H. OHTA, Y. YUYAMA, Y. UOZUMI and Y. M. A. YAMADA**, “In-Water Dehydrative Alkylation of Ammonia and Amines with Alcohols by a Polymeric Bimetallic Catalyst,” *Org. Lett.* **13**, 3892–3895 (2011).

**S. M. SARKER, Y. UOZUMI and Y. M. A. YAMADA**, “A Highly Active and Reusable Self-Assembled Poly (Imidazole/Palladium) Catalyst: Allylic Arylation/Alkenylation,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **50**, 9437–9441 (2011).

B-4) 招待講演

魚住泰広, 「水中での触媒の有機化学合成」水科学ワークショップ「水を知る, 水を活かす, 水を創る」埼玉, 2010年12月.

**Y. UOZUMI**, “Asymmetric Suzuki-Miyaura coupling,” 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, Honolulu (U.S.A.), December 2010.

**Y. UOZUMI**, “Instantaneous cross-coupling using catalytic membrane-installed microchannel devices,” 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, Honolulu (U.S.A.), December 2010.

**Y. UOZUMI**, “Heterogeneous catalytic asymmetric synthesis in water with polymeric palladium complexes,” 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, Honolulu (U.S.A.), December 2010.

**Y. UOZUMI**, “New Aspects of Polymeric Palladium Catalysts,” A Mini Symposium of Homogenous Catalysis in Wuhan University, Wuhan (China), January 2011.

**Y. UOZUMI**, “Organic Reactions in Water with Polymeric Palladium Complexes,” Seminar to the Centre for Sustainable Chemical Processes, Durham (U.K.), March 2011.

**Y. UOZUMI**, “Water: As a Medium of Organic Transformations,” The 14<sup>th</sup> Asian Chemical Congress, Bangkok (Thailand), September 2011.

**Y. UOZUMI**, “Efficient Organic Transformations in Water with Polymer-Supported Transition Metal Catalysts,” The 14<sup>th</sup> Asian Chemical Congress, Bangkok (Thailand), September 2011.

**Y. UOZUMI**, “Catalytic Organic Transformation in Water,” The 14<sup>th</sup> Asian Chemical Congress, Bangkok (Thailand), September 2011.

魚住泰広, 「水中での有機分子変換を実現する高分子担持遷移金属触媒」第8回触媒相模セミナー, 神奈川, 2011年11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・サステイナブル・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).

コンピナトリアル・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 誌アドバイザー - 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ーボード (2010–).

The Chemical Record 編集委員 (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-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).

科学技術振興機構CREST研究,「反応媒体駆動原理の確立と革新的触媒プロセスの開発」魚住泰広(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の不斉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の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リ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、2012年2月に終了予定である。一方、環境調和型触媒反応開発からの発展としてCRETS研究「元素戦略」に採択され課題研究が2011年10月から開始されている。独自に開発してきた触媒の固定化手法を利用する「元素循環戦略」、および水中触媒機能発現において確立しつつある不均一系による触媒の高活性システムを適用した「元素減量戦略」が柱となる課題研究となる。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-CREST, 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すべく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) 炭素 - 水素結合から CO<sub>2</sub> へのヒドリド供給によるギ酸生成。初めての再生可能有機ヒドリド試薬。
- b) Ru- アンミン錯体からのプロトン解離と共役した電子移動反応による Ru- アミノラジカル錯体生成と、その酸化体を活性種とする触媒的なアルコール酸化反応。
- c) NAD/NADH 型の酸化還元能を有する配位子を持つ単核 Ru 錯体の光誘起 2, 4, 6 電子還元反応。
- d) 水の 4 電子酸化反応による酸素発生の前段階としての酸素 - 酸素生成過程の検出に初めて成功。

B-1) 学術論文

**T. TERATANI, T. KOIZUMI, T. YAMAMOTO, K. TANAKA and T. KANBARA**, “Deprotonation/Protonation of Coordinated Secondary Thioamide Units of Pincer Ruthenium Complexes: Modulation of Voltammetric and Spectroscopic Characterization of the Pincer Complexes,” *Dalton Trans.* **40**, 1–8 (2011).

**T. WADA, J. T. MUCKERMAN, E. FUJITA and K. TANAKA**, “Substituents Dependent Capability of Bis(ruthenium-dioxolene-terpyridine) Complexes toward Water Oxidation,” *Dalton Trans.* **40**, 2225–2233 (2011).

**H. OZAWA, T. HINI, H. OHTSU, T. WADA and K. TANAKA**, “A New Type of Electrochemical Oxidation of Alcohols Mediated with a Ruthenium-Dioxolene-Amine Complex in Neutral Water,” *Inorg. Chim. Acta* **366**, 298–302 (2011).

**S. K. PADHI and K. TANAKA**, “Proton-Induced Dynamic Equilibrium between Cyclometalated Ruthenium rNHC (Remote N-Heterocyclic Carbene) Tautomers with an NAD<sup>+</sup>/NADH Function,” *Inorg. Chem.* **50**, 5321–5323 (2011).

**S. K. PADHI and K. TANAKA**, “Photo- and Electrochemical Redox Behavior of Cyclometalated Ru(II) Complexes Having a 3-Phenylbenzo[*b*][1,6]naphthyridine Ligand,” *Inorg. Chem.* **50**, 10718–10723 (2011).

B-4) 招待講演

**K. TANAKA**, “Currents Status and Future Prospects of Coordination Chemistry, Water Oxidation by Dinuclear Ru Complexes,” Okazaki, January 2011.

**K. TANAKA**, “Catalytic Evolution of O<sub>2</sub> through Coupling of Two Oxo Group Generated by Activation of Water Molecules on Ru Dimers,” The 3<sup>rd</sup> Japan-Korea Joint Symposium on Transition Metal Complexes, Okinawa, February 2011.

**K. TANAKA**, “Ruthenium-Polypyridyl Complexes Aimed at Light-to-Chemical Energy Converter,” The 18<sup>th</sup> Annual Meeting for Korean Society of Photoscience & International Symposium on Artificial Photosynthesis, Sogang University, Seoul (Korea), June 2011.

**K. TANAKA**, “Photo-Induced Multi-Electron Transfer and Water Oxidation Aimed to Build a Sustainable Society,” France-Japan Coordination Chemistry Symposium, Rennes (France), June–July 2011.

**K. TANAKA**, “Metal Complexes Aimed at Energy Conversion from Solar to Chemical one, and from Chemical to Electrical one,” The 3<sup>rd</sup> Asian Conference on Coordination Chemistry, New Delhi (India), October 2011.

#### 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–).

日本化学会錯体・有機金属ディビジョン主査 (2006–2010).

##### 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

自然エネルギーの固定・貯蔵・輸送に引き続いた他のエネルギー形態へのエネルギー変換反応の開発は持続性社会の形成にとって、最も合理的なアプローチだと思われる。その実現にとって二酸化炭素の多電子還元による触媒的な有機物生成は、第一のステップである。二酸化炭素は金属と $\eta^1$ -CO<sub>2</sub>付加体を形成すると、プロトン源存在下では速やかに金属-CO錯体を与える。一方、二酸化炭素還元条件下では金属-CO結合の還元的開裂が起こり、COが発生する。したがって、CO<sub>2</sub>由来の金属-CO結合を開裂させることなくC1源として有機合成を行うためには、再生可能な求核試薬の開発が必要不可欠である。我々は、その観点からNAD/NADH型の酸化還元能を有する金属錯体の開発を行い、再生可能な有機ヒドリド試薬合成を行っている。

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。

## 正岡重行(准教授)(2011年2月1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水の四電子酸化反応
- b) 安価な金属イオンを利用した水からの水素発生反応
- c) 金属錯体の界面集積化と機能開発

### A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ルテニウム単核錯体を触媒とする水の四電子酸化反応の触媒反応機構を、紫外可視吸収スペクトルの経時変化の特異値分解および DFT/TDDFT 計算を駆使して解明した。その結果、触媒の3電子酸化体を經由した機構で反応が進行していることが判明し、さらにその3電子酸化体が酸素-酸素結合生成に重要な役割を果たしていることが分かった。
- b) 有機配位子上にプロトン授受サイトを有する金属錯体触媒を合成し、水溶液中におけるプロトン授受プロセスを制御することにより、水溶液中、高い水素発生触媒能を有する鉄錯体を作りだすことに成功した。これまでに、水素発生触媒として有意な活性が認められている金属錯体は、白金、ロジウムなどの貴金属を用いたものが主であったため、将来の実用化を考えると、安価でクラーク数の高い元素を用いた本研究成果は大きな進歩であるといえる。
- c) 生体膜などの自然界のナノ構造体にならい、本来相互作用を示さないルテニウム二核錯体に、対イオンとして水にも油にもなじむ性質をもつ脂質陰イオンを導入した。その結果、世界で初めて、本来並ぶことのない2種のルテニウム錯体が脂質陰イオンによって規則的に配列させられた超分子ナノ構造体が構築できた。

### B-1) 学術論文

**K. YAMAUCHI, S. MASAOKA and K. SAKAI**, "Stability of Pt(II)-Based H<sub>2</sub>-Evolving Catalysts against H<sub>2</sub> in Aqueous Solution," *Dalton Trans.* **40**, 12447–12449 (2011).

**K. KOBAYASHI, M. ISHIKUBO, K. KANAIZUKA, K. KOSUGE, S. MASAOKA, K. SAKAI, K. NOZAKI and M. HAGA**, "Proton-Induced Tuning of Metal–Metal Communication in Rack-Type Dinuclear Ru Complexes Containing Benzimidazolyl Moieties," *Chem. –Eur. J.* **17**, 6954–6963 (2011).

**M. HIRAHARA, S. MASAOKA and K. SAKAI**, "Syntheses, Characterization, and Photochemical Properties of Amidate-Bridged Pt(bpy) Dimers Tethered to Ru(bpy)<sub>3</sub><sup>2+</sup> Derivatives," *Dalton Trans.* **40**, 3967–3978 (2011).

**G. AJAYAKUMAR, M. KOBAYASHI, S. MASAOKA and K. SAKAI**, "Light-Induced Charge Separation and Photocatalytic Hydrogen Evolution from Water using Ru<sup>II</sup>Pt<sup>II</sup>-Based Molecular Devices: Effects of Introducing Additional Donor and/or Acceptor Sites," *Dalton Trans.* **40**, 3955–3966 (2011).

**M. OGAWA, G. AJAYAKUMAR, S. MASAOKA, H.-B. KRAATZ and K. SAKAI**, "Platinum(II)-Based Hydrogen-Evolving Catalysts Linked to Multipendant Viologen Acceptors: Experimental and DFT Indications for Bimolecular Pathways," *Chem. –Eur. J.* **17**, 1148–1162 (2011).

### B-3) 総説, 著書

正岡重行, 「水の四電子酸化とパラダイムシフト」, *化学と工業* **64**(11), 890 (2011).

正岡重行, 「水の可視光完全分解を可能にする高活性酸素発生触媒の創製」, *化学経済* **9**, 65 (2011).

正岡重行, 「高効率水酸化のための金属錯体触媒」, *光触媒* **34**, 24–27 (2011).

吉田将己, 正岡重行, 酒井 健, 「ルテニウム単核錯体を触媒とする水からの酸素発生反応」, *有機合成化学協会誌* **69**, 370–378 (2011).

正岡重行, 「“いいとこ取り”で酸素発生」, *月刊「化学」* **66**(1), 61–62 (2011).

### B-4) 招待講演

正岡重行, 「人工光合成を志向した金属錯体化学」, 錯体化学若手の会中部東海地区勉強会, 名古屋工業大学, 2011年11月.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする水の分解反応」, 第5回名古屋大学物質科学フロンティアセミナー, 名古屋大学, 2011年10月.

S. MASAOKA, “Oxygen Evolution from Water Catalyzed by Mononuclear Aquaruthenium Complexes,” 3rd Asian Conference of Coordination Chemistry (ACCC-3), New Delhi (India), October 2011.

正岡重行, 「高効率水酸化のための金属錯体触媒」, 光機能材料研究会第32回講演会, 東京大学駒場キャンパス, 2011年5月.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする水の分解反応」, 日本化学会第91春季年会若い世代の特別講演会, 神奈川大学横浜キャンパス, 2011年3月. (震災のため講演会は中止)

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする水の分解反応」, 九州錯体化学懇談会第239回例会, 九州大学箱崎キャンパス, 2011年3月.

正岡重行, 「金属錯体触媒を用いた人工光合成への挑戦」, 第10回化学・材料研究セミナー, 九州大学箱崎キャンパス, 2011年1月.

### B-6) 受賞, 表彰

正岡重行, 若い世代の特別講演会講演賞 (2011).

正岡重行, 第53回錯体化学討論会ポスター賞 (2003).

正岡重行, 日本化学会第83回春季年会学生講演賞 (2003).

### B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

錯体化学会若手部会事務局 (2006).

錯体化学会若手部会九州支部世話人 (2006–2010).

学会の組織委員等

錯体化学若手の会夏の学校2008主催 (2008).

分子情報科学若手セミナー主催 (2006).

### B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究「光エネルギーと物質変換」領域, 「水の可視光完全分解を可能にする高活性酸素発生触媒の創製」, 正岡重行 (2009年–2012年).

科研費若手研究(B), 「水の分解反応に対する非貴金属系高活性金属錯体触媒の創製」, 正岡重行 (2009年–2010年).

科学技術振興機構重点地域研究開発推進プログラム「シーズ発掘試験A(発掘型)」,「有機-無機複合型超高活性酸素発生錯体触媒の創製」, 正岡重行 (2009年).

九州大学教育研究プログラム・研究拠点形成プロジェクト,「混合原子価2核錯体を用いた量子セルオートマトン材料の開発」, 正岡重行 (2009年).

(財)鉄鋼業環境保全技術開発基金第29回環境助成研究,「鉄-硫黄系金属錯体を用いた安価高活性水素発生触媒の創成」, 正岡重行 (2008年-2009年).

(財)日産科学振興財団環境研究助成,「水の完全光分解を実現可能とする高活性酸素発生触媒の創成」, 正岡重行 (2008年).  
科研費若手研究(B),「高度に組織化された球状水素発生触媒の創製」, 正岡重行 (2006年-2007年).

科研費特別研究員奨励費,「ナノスケールのd- $\pi$  複合共役電子システムの構築と分子デバイスへの応用」, 正岡重行 (2002年-2003年).

### C) 研究活動の課題と展望

エネルギー問題の解決は,人類が直面している最重要課題の一つである。本研究グループの目的は,太陽光エネルギーを貯蔵可能な化学エネルギーに変換する次世代の科学技術「人工光合成」の達成に向けて,金属錯体化学の立場から貢献することである。具体的には,水を四電子酸化して電子を取り出す反応系の構築,可視光のエネルギーを用いて水などの小分子を効率良く活性化する手法の開拓,水中プロトンの活性化と反応性制御,水中ラジカル形成と反応性制御,水の光化学的活性化を促進するための特異反応場の構築,を主題として研究を進めている。以上の研究により構築された触媒システムの反応機構を詳細に解明し,新たな触媒設計へとフィードバックさせることを繰り返し,高機能触媒の創製を目指す。将来,人類がエネルギー問題から解放される社会の到来を夢見て,人工光合成研究の発展に専心している。



## 7．点検評価と課題

昨年度に引き続き 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。また外国人運営顧問である Stephen Berry 教授（Chicago University, USA）と Peter Wolynes 教授（Rice University, USA）に研究活動評価等をお願いした。

Graham Fleming 教授は光化学研究の世界的リーダーであるのみならず、現在 UC, Berkeley 校の研究担当副学長を兼務されている。また Lawrence Berkeley National Laboratory (LBL) の副所長も務められた経験があり、世界の研究の動向、研究の運営、施策に精通している。Fleming 教授は 2011 年 10 月に約一週間、分子研に滞在し、各研究リーダー（PI；教授および准教授）からのヒヤリングを行い、また各研究室を訪問し実際の実験のようす、装置の現状などを視察した。前年度からの分を含めると、Fleming 教授による研究所全 PI のヒヤリングと評価が完了した。また Stephen Berry 教授は理論化学の先導者の一人であり、米国科学アカデミーの副会長を務めるなど、世界の科学動向に詳しい米国科学界の長老である。2 月 7 日から 5 日間分子研に滞在し、相当数の研究グループ PI からの研究ヒヤリングをおこなった。

両教授の、ヒヤリング、研究室訪問、分子研の運営・将来計画の検討にもとづく評価、提言は、本 7 章にレポートとして掲載してある（ここに公開されているもの以外に、所長宛に非公開の個別 PI 評価がある）。そこには、全体の研究レベルは相当高い水準にあり、特に、世界的に見ても飛び抜けたレベルにある研究グループが相当数あることが示されている。しかし、所内研究グループ間（研究所外との専門的な協力研究は盛んだが）の共同研究が少ないこと、それが領域を乗り越えた大きな研究の展開を阻んでいる可能性があるのではないかと指摘がなされている。これに対して Fleming 教授からは、研究所内共同研究を盛んにする施策等、パークレイ校の研究改革の経験に基づく提言をいただいている。

これらの評価以外にも、各年度末（1～2 月）に、グループリーダー（PI 教授および准教授）による研究発表会（所長ヒヤリング）を実施してきた。今年は、2012 年度予算の決定が遅くなったため、この 4 月に、研究顧問の柳田敏雄特任教授にも参加いただき、ヒヤリングを実施した。

（大峯 巖）

## 7-1 外国人運営顧問による点検評価

### 7-1-1 Stephen Berry 外国人運営顧問

原文

#### Review and Comments

##### Institute for Molecular Science

##### Okazaki, Japan

February 2012

Overall, the Institute is in healthy condition, with active, able researchers carrying out interesting and important research. The Institute is doing very well in terms of its impact on the scientific world, as measured by the citations of its publications. It is among the most cited institutions in Japan, comparable with the leading research universities.

There are issues that need to be addressed, of which the Director and faculty are acutely aware. The most pressing is probably the retirements of several of the senior faculty, some already carried out and others imminent. To maintain its current strength, the IMS must of course bring in new faculty who are at least as able as those retiring. This opens the possibility for expanding the scope of areas of its research, of which we shall say more later.

#### Specific Research Areas and Facilities

##### The Accelerator Light Source UVSOR: Masahiro Katoh

This facility is unique in Japan and is one of only a few comparable light sources in the world. It provides pulses of electromagnetic radiation in the far ultraviolet and soft X-ray region, up to almost 100 eV per photon, a spectral range especially useful for exciting characteristic spectra such as inner-shell excitations, of molecules and solids. It probably also has the capability, with its short pulses, to enable investigation of biological processes at the molecular level, such as detecting intermediate states with modest lifetimes in the processes of protein folding. UVSOR has been going steadily through a series of upgrades, which increase its versatility and power. The coherent beams it can produce are going to open new capabilities to study quantum properties of molecules and solids that have heretofore been unobservable.

##### Total Reflection Fourier Transform Infrared Spectroscopy: Yuji Furutani and Tetsunari Kimura

This is experimental molecular biology in as sophisticated form as can be found. The methods developed have remarkable sensitivity, at the level required to study the intermolecular interactions that are the targets of this research. Understanding precisely how ions, in this case particularly  $Mg^{++}$  ions, bind to specific sites of proteins is the result of very careful, highly sensitive infrared measurements, and, more specifically, of information virtually hidden in those spectra. Using spectral differences requires exceptional stability, which this group maintains in its spectra, and, as a result, the information that emerges is powerful, specific and unambiguous. The work is now being extended from cation binding to anion binding, and to surface spectroscopy.

##### Electronic Structure and Behavior in Nanostructures and Surfaces: Katsuyuki Nobusada

The Nobusada group is doing some very dramatic, daring work on the interaction of light and matter. A large part of the work deals with nanoparticles and very concentrated light fields, well below the traditional diffraction limit. This may prove to be a

powerful probe of the way the behavior of small particles of matter sometimes very different from that of the same substance in bulk form. The use of optical probes to study materials and phenomena at the nanoscale is an exciting and potentially very important direction for research. The work being done by this group seems to be quite innovative. The investigation of “dressed” gold clusters is a unique part of a global effort to understand the chemical and especially the catalytic properties of small gold clusters generally. The study of adsorbates on surfaces seems to open new ideas and to challenge some traditional concepts.

#### **Attosecond Quantum Engineering: Kenji Ohmori**

This is a project that I find extremely appealing to me personally. The idea of investigating the collapse of the wave function as a result of a measurement, and specifically of exploring whether the measurement process could be treated as a process of decoherence, is probing very deeply into the roots of quantum mechanics. I don't know whether it will succeed, but the important thing is the depth and subtlety of the conceptual thinking, and the very sophisticated experimental means being developed to probe the problem. The work is of course also very intimately related to quantum control and quantum computing, which is another major aspect of the research being done by this group. I am not sure whether the work on solid para-hydrogen molecules will encounter an unforeseen symmetry breaking as a result of the quadrupole-quadrupole interactions between the molecules. This is a phenomenon that has been overlooked in the literature on solid hydrogen, and should be investigated. The quantum simulation may turn out to be a very powerful tool and certainly should be continued vigorously.

#### **Molecular Dynamics Simulations of Proteins and Peptides: Hisashi Okumura**

The simulations carried out and planned in this project are making very interesting advances and suggest a number of concepts and directions that might even move the work further into new ground. The multi-canonical and especially multi-baric simulations suggest that the work could be extended to include small proteins that occur specifically in species that thrive under conditions of very high pressures, e.g. deep-ocean species. A comparison of the pressure variation of the behavior of a few of these proteins with those already studied, particularly proteins found in species living at atmospheric pressure, would be valuable. Another thought that comes to mind is the possibility of including in the analyses based on backbone angles information on the correlation of the angles  $\psi$  and  $\phi$  of adjacent amino acids, in contrast to the single-molecule  $\phi$ - $\psi$  correlations usually made. Such correlations have been explored by K. Freed and collaborators. Overall, the simulations being done by this group are providing valuable information regarding the way proteins can explore their available configurational space, and, as the future plans become real work with new information, will undoubtedly lead to new insights into disease-related protein behavior, and also to more powerful means to study proteins by simulation. The work is really on the threshold of addressing real proteins.

#### **Theoretical Studies on Ultrafast and Heterogeneous Dynamics in Condensed Phases: Shinji Saito**

The work of the Saito group is theoretical but closely connected to experimental work. For example, the studies of the motional dynamics and heat capacities of water at different temperatures and frequencies are closely linked to experiment. Yet the theoretical studies are revealing information about the kinds of motions that go on in water and ice that experiments cannot yet reveal, except by inferential treatment of experimental results, such as the pump-probe studies. Some processes, such as the intermolecular relaxation in water, a very subtle and complex process, does allow comparison of theoretical results with frequency-resolved measurements over a wide frequency or time scale. One particularly interesting and perhaps unexpected finding from this group was the apparently

anomalous behavior of the heat capacity of water at constant pressure. Relating the heat capacity and underlying dynamics to the relative importance of hydrogen bond formation and breaking in water, and to its intermolecular motion, is a major step toward our understanding of this most complex substance. Another important contribution in the same general area is the elucidation of the structure of supercooled water and other supercooled liquids. This group also is doing interesting work on protein reaction pathways, a subject that deserves much more attention.

#### **Structural Studies of Heme-Based Proteins: Shigetoshi Aono**

This work addresses both small-molecule binding to proteins and interactions of heme with nucleic acids and proteins. The focus is on the connection between the nature of the activity and binding and the specific structural forms taken on by the interacting species. The work has strong implications for conversion of carbon monoxide to carbon dioxide and to release of hydrogen, as well as to the *in-vivo* biological processes involving these species. The investigations rely on kinetic measurements, and on structure determinations, and give significant insights into a class of biological functions.

#### **Biomolecular Functions: Koichi Kato**

The Kato group is investigating the area that probably presents the greatest new challenge in molecular biology, the understanding of saccharides and glycoproteins at the molecular level. Because of their flexibility and large structural changes during their functioning, this class of biomolecules is much more difficult to understand than are proteins or nucleic acids. It is truly work at the frontier, at just the right time to go into this field. IMS has the experimental capabilities to contribute very significantly to this broad subject right now, as the area opens to research. Of course the powerful NMR facility of IMS is one of the most important of those capabilities. Building a “sugar library” is an excellent thing to be doing now, to advance this field. It will, among other things, probably enable us to begin to understand the way lectins act as sensor molecules. Simulations of saccharides is another frontier area in which this group is working. The various studies of systems with and without metal atoms is giving new insights into functionality of biomolecules, as is the study of fucosylation.

#### **Heterogeneous Catalysis: Mizuki Tada**

The Tada group studies metallic and metal-based catalysts, based heavily on x-ray methods as well as on traditional kinetic studies. The role of the support of the catalyst is one of the components investigated in this group’s research. The x-ray probes enable the group to study structural details and changes that occur at the various stages of a catalyzed reaction, even from the earliest stages of deposition of the catalyst, through release of the product. The group has found a way to protect and preserve a catalyst that, heretofore, was degraded during its use. One particularly notable contribution in this reviewer’s view is the investigation, apparently very successful, of nanoparticle composites of Cerium and Zirconium for conversion of methane and water to carbon monoxide and hydrogen. Finding effective ways to produce hydrogen is currently a major challenge, notably to have hydrogen available as a carbon-free fuel. (Of course in the process studied here, there is a challenge to determine what to do with the CO produced.)

#### **Enzymatic Catalysis: Yasuhiro Uozumi**

This group is studying kinetic processes of organic and biological molecules from several perspectives. Some of the work is

focused on atomic and molecular catalysts behavior; some deals with reactions in microtubules, especially involving membranes separating aqueous and lipid flows. Still another aspect concerns catalysis involving vesicles. A unifying theme of this group's work is the study of systems involving both hydrophilic and hydrophobic components or aspects, which means that the work deals very much with phenomena at interfaces. This is a challenging area that has been far less studied than processes in homogeneous environments. The work clearly will have important applications in medical treatment methods, as well as enhancing our understanding of the functioning of real cellular systems, for which interfacial phenomena are ubiquitous.

### **Suggestions of Possible New Directions for Research at the Institute for Molecular Science**

Offering suggestions for new scientific efforts necessarily involves the very personal tastes and preferences of whoever is offering such advice. With this clearly understood, we can go ahead with some possible areas and subjects that could enrich the research program of the IMS.

One area that comes to mind immediately is a broad study of emergence and complexity. We know very well that simple components, even just atoms, can combine to make systems capable of behavior far more complex than that of which the simple elements are capable. In effect, we see hierarchies of complexity as atoms build molecules, molecules build complex assemblies, those in turn build living cells, and so on. But there is an underlying deep question that science has yet to address: if we know the properties of the elementary units that assemble to compose an emergent structure, how can we infer from that knowledge about the simple components what capabilities will be possible for the emergent structures they form at the next level of complexity? Can we predict even the crystal structure that a binary compound will have when two elements form that compound? Can we predict whether a small set of amino acids can arrange into a sequence that will find its way to a specific structure? This is an approach to complexity that has yet to be explored. It might be useful to bring in ideas from network theory, for example, to help move ahead with this problem.

Another area that might be explored at IMS, one not far from some of the work going on now, would be to develop an understanding, both from theory and from experiment, of how and why very small assemblages of atoms, atomic clusters of a few or a few tens or even hundreds of atoms, sometimes behave dramatically differently from their corresponding bulk material. For example, bulk gold is a nearly inert material, yet gold clusters are remarkably effective catalysts. Another pair of examples are clusters of atoms of Gallium and of Tin. While conventional wisdom and almost all experience shows that small particles melt at temperatures well below the melting point of the corresponding bulk material, clusters of gallium and of tin melt at temperatures *higher* than their bulk melting temperatures. The broad question here is simply, "What makes small clusters of atoms or molecules behave significantly different from their bulk counterparts?"

A third direction that could be pursued at IMS would involve studies of proteins. In particular, there are two commonly accepted beliefs about proteins which are very probably unsound, possibly quite wrong in some cases. One is the belief that the active form of a protein is structurally unique. There is apparently evidence that different samples of what is ostensibly the same enzyme gives different reaction rates, even under supposedly identical conditions. This suggests that there could be more than one active form of such an enzyme. The other is the supposition that the native form (if there is a unique one) is the free energy minimum structure for that protein. The native form must be the most kinetically accessible form under the conditions in which the protein functions; it need not be the state of lowest free energy at all. In fact, the prion phenomenon is a demonstration that the belief is almost certainly

wrong. To address these questions, one must investigate the kinetics of protein folding (in the second case) and the kinetics of protein activity for the first case. A related question regarding folding is the question of the degree of uniqueness of successful folding pathways. Given the enormous variety of proteins, this reviewer is inclined to suppose that there are examples ranging from proteins with nearly unique folding pathways, to proteins with an enormous variety of potentially successful folding pathways. The challenge this raises is the question of how one can count the number of potentially successful folding pathways any given protein has. Kinetic results already indicate that some proteins do find a growing multiplicity of folding pathways as their temperature goes up. But just finding a way to count folding pathways would already be an advance.

Prepared by R. Stephen Berry

February, March 2012

訳文

評価ならびにコメント

分子科学研究所訪問：2012年2月

分子科学研究所は全体として健全な状態にあり、活発で有能な研究者達が興味深く、かつ重要な研究に従事している。発表論文の被引用回数という切り口から見ても、本研究所の科学界への大きな影響力は明らかである。当研究所は日本における最も被引用回数の多い研究所の1つであり、主要な研究大学にも優に匹敵する。

その一方で、所長や教授陣が対処の必要性を強く感じている問題点も存在する。最も差し迫った問題は何人かのベテラン教授の退職であろう。何人かはすでに職を退き、他の何人かについても退職が目前に迫っている。分子科学研究所（分子研）が現在の実力を維持するためには、少なくとも退職される教授陣に匹敵する能力を持つ新たな研究者を迎え入れる必要がある。後でも触れるように、新たな研究者を迎え入れることによって現在の研究領域をさらに拡大する可能性が開ける。

研究分野および研究施設

加速器光源 UVSOR：加藤政博

日本では唯一の設備であるばかりでなく、世界的に見てもこれに類似する光源を有する施設は数カ所しか存在しない。UVSORは、1光子あたり100 eVに達するエネルギーを有する極端紫外および軟X線領域の電磁放射パルスを生じ、このスペクトル領域は分子や固体の内殻励起など、特徴的なスペクトルの励起に適している。短パルスを生じることから、生物学的過程の分子レベルでの研究にも利用可能になると考えられる。たとえば、タンパク質折り畳み過程の途上で生成するある程度の寿命を持つ中間状態の検出が可能になる可能性がある。UVSORは一連の高度化を通して着実に能力が強化されつつあり、多用途性とパワーが一段と向上している。UVSORにより発生可能となったコヒーレント放射光は分子と固体の量子特性の研究において、従来は観測不能であった事象の研究に新たな可能性を開くものである。

全反射型フーリエ変換赤外分光法：古谷祐詞，木村哲就

本グループの研究は、知りうる限り最も洗練された実験的分子生物学の形態である。同グループの開発した方法は

驚くべき感度を持ち、研究の対象である分子間相互作用を調べるために必要なレベルを満たしている。イオン（ここでは特に  $Mg^{2+}$  イオン）がタンパク質の特定のサイトにどのようにして結合するかを正確に理解するためには、非常に感度を高めた赤外測定を細心の注意を払って実施する必要がある、さらには実質的にスペクトルに完全に埋もれてしまった情報を抽出する努力が必要である。差スペクトルを利用するためには並外れたシステムの安定性が必要となる。同グループのスペクトルはこの条件を満たしており、抽出される強力かつ詳細な情報は議論の余地を残さない。同グループの研究はカチオン結合からアニオン結合へ拡張されつつあり、さらに表面分光学を包含しようとしている。

#### ナノ構造体及び表面の電子状態とその動的振る舞い：信定克幸

信定グループは、光と物質の相互作用に関する非常に印象的かつ大胆な研究を行っている。研究の軸は、ナノ粒子と通常の回折限界以下に凝集局在化した光との相互作用を対象としている。同じ物質でも非常に小さな粒子になるとバルクとは非常に異なった挙動を示すことがあるが、同グループの手法は、この挙動に関しての強力な研究方法となる可能性がある。光プローブを使用して物質と現象をナノスケールで調べる手法は刺激的であるばかりでなく、潜在的に将来の研究への重要な方向性を示すものと考えられ、同グループが実施している研究は非常に革新性に富んでいる。小さな金クラスターの化学的特性、特に触媒としての特性の理解へ向けた研究は現在の世界の趨勢であるが、信定グループの「衣を纏った」金クラスターの研究は其中でも異彩を放つものである。表面吸着種の研究は、新たなアイデアを切り開き、これまでの既成概念に挑戦しているように思える。

#### アト秒量子エンジニアリング：大森賢治

評者の個人的な感想を言わせてもらえるならば、これは非常に魅力的なプロジェクトである。測定の結果として生ずる波動関数の収縮の研究、その中でも測定過程をデコヒーレンス過程として捉えることが可能であるか否かの研究は、量子力学の本質に深く切り込んでいくことに他ならない。研究が成功するか否かは分からないにせよ、重要なのは深く鋭い概念的思考であり、その問題を探索するための非常に洗練された実験手法である。当然ながら、本研究は量子コントロールと量子コンピューティングとも密接に関連しており、これも本グループによって成される研究の重要な側面となる。固体パラ水素分子を対象として研究を行い、分子同士の四重極 - 四重極相互作用の結果として生ずる未知の対称性の破れを発見できるか否かについて、私自身は確信が持てない。しかし、この現象は固体水素に関する文献の中では見逃されてきた視点であり、研究されるべき問題である。量子シミュレーションは非常に強力なツールとなる可能性を持っており、さらに強力に推進されるべきである。

#### タンパク質とペプチドの分子動力学シミュレーション：奥村久士

本プロジェクトにおいて計画かつ実行されているシミュレーションは非常に興味深い発展を遂げつつあり、多くの思考概念と方向性について示唆を与えている。その結果として、本研究は新たな地平を切り開く可能性も秘めている。マルチカノニカルシミュレーション、中でもマルチバーリックシミュレーションは、本研究を超高圧環境下で生息する生物種——たとえば深海生物——に特徴的な小型タンパク質を対象にした研究にまで拡張できる可能性を示唆している。このようなタンパク質の圧力変動に対する挙動を、すでに調べられているタンパク質（特に大気圧下で生存する生物種のタンパク質）を比較することは価値のある研究である。思い浮かぶ可能性のもう一つの例として、1 残基中の  $\phi$ - $\psi$  相関（こちらは普通に行われている）とは対照的に、主鎖の角度情報に基づいて、隣接するアミノ酸の成す二面角  $\psi$  および  $\phi$  の相関を解析に含めることである。このような相関は K. Freed と共同研究者によって研究されてい

る。全体として、本グループによるシミュレーションはタンパク質が取りうる構造空間を探索する方法に関して有用な知見を提供しつつある。さらに将来計画が実施されて新たな情報が提供されるならば、疾病に関連したタンパク質の挙動に新たな知見が得られることが確実と考えられるばかりでなく、シミュレーションを用いるタンパク質研究にさらに強力なツールが得られることになる。本研究は、シミュレーションが実際のタンパク質の問題に回答する新時代の正に入口に立つものである。

#### 凝縮系における高速および不均一ダイナミクスの理論研究：斉藤真司

斎藤グループの研究は本質的に理論的なものであるが、実験とも密接に関連している。たとえば、異なる温度と周波数における水の振動ダイナミクスと熱容量の研究は実験と密接に結びついている。しかし、水中・氷中で起こるある種の運動について、理論的研究は実験では分からない情報を明らかにしてくれる（ポンプ・プローブ法による研究のように、実験結果から推測する例外的な事例はあるにせよ）。水中での分子間緩和のような幾つかの過程においては、たとえそれが非常に微妙かつ複雑な過程であっても、広い周波数と時間スケールで周波数分解測定を実施することにより理論と実験の比較が可能となる。同グループがもたらした特に興味深い、そして大方の予想を覆す知見の一つとして、定圧下における水の比熱（等圧比熱）の一見異常と思われる挙動を挙げることができる。比熱とその根底にある動力学を、水中における水素結合の生成と解離の相対的重要度および分子間運動に関連付けることによって、水という最も複雑な物質の理解へ向けた重要な前進が得られるのである。この分野におけるもう一つの重要な貢献として、過冷却水と過冷却液体の構造解明を挙げるができる。本グループはタンパク質の反応経路——さらに多くの注目に値する主題である——についても興味深い研究を行っている。

#### ヘムタンパク質の構造的な研究：青野重利

ヘムタンパク質への小分子の結合、DNA や他のタンパク質とヘムタンパク質との相互作用に関する研究に取り組んでいる。研究の主眼は、構造機能相関の解明に置かれている。本研究は一酸化炭素から二酸化炭素への変換と水素の放出という問題に強く関連しており、さらに、これらの分子種が関与する生体内で生物学的過程とも関係している。反応速度論的解析、構造解析などに強く依存する研究であり、一連の生物学的機能について重要な洞察を与えてくれる。

#### 生体分子機能：加藤晃一

加藤グループの研究領域は、分子生物学における新たな課題の中でおそらく最も困難な挑戦、すなわち、糖鎖と糖タンパク質の分子レベルでの理解を目的としている。このクラスの生体分子は柔軟性が高くその機能発現の過程で大規模な構造変化を伴うため、タンパク質や核酸と比較しても理解がはるかに困難である。まさに最先端の研究であると同時に、今がこの分野へ踏み込むべきタイミングなのである。この分野での研究が開始されたならば、分子研は広大な分野の研究に直ちに多大な貢献をできる実験面での設備と能力を備えている。分子研の強力な NMR 施設が、このような能力の重要な一翼であることは言うまでもない。この分野を推進するためには、「糖鎖ライブラリ」の構築こそが、今まさに実行すべきことなのである。糖鎖ライブラリは、他の手法に加え、レクチンがどのような方法でセンサー分子として機能するのかの理解を可能にしてくれるだろう。糖鎖の分子シミュレーションも同グループが取り組む最先端研究分野の一つである。フコシル化の研究が良い例であるように、金属原子を含む系と含まない系の様々な研究は生体分子の機能性に関する新たな知見を示してくれる。

不均一系触媒：唯美津木

唯グループは金属触媒および金属をベースとする触媒を研究しており、従来からの速度論的研究に加えてX線(XAFS)を重要な手法として用いている。本グループの研究では、触媒反応における担体の役割も重要な要素として注目しており、解析法としてX線を使用することによって担体へ触媒が付着する最初の段階から、生成物が離脱する最終段階に至るそれぞれの触媒反応の段階における構造の詳細および変化を調べることができる。これまで、触媒は使用による劣化が避けられなかったが、本グループは触媒を保護し、保存する手法を見つけ出した。本評者の観点から見て特記すべき本グループの貢献は、セリウムとジルコニウムのナノコンポジットがメタンおよび水を一酸化炭素と水素へ変換する過程の研究であり、明らかな成功例と言うことができる。効率的に水素を生成する方法——特に炭素フリーの燃料として取り出す方法——の探索は目下の重要課題である。(当然ながら、本グループが研究しているプロセスの中では、生成するCOをどう利用するのが重要な課題となる。)

酵素的触媒：魚住泰広

本グループは、有機/生物分子の動的過程を複数の視点から研究している。その中には、原子および分子の触媒挙動に注目した研究、微小管内での触媒反応(特に膜による水相/油層の隔離を伴う)に関連した研究が含まれており、それとは別な視点として、ベシクルが関与する触媒も研究の対象としている。本グループの研究全体を包括する主題は、親水性要素と疎水性要素の両者を備える、あるいは両方の特性を備えた系の研究であり、したがって、界面を取り扱う研究が主体となっている。界面を含む系の研究は均一系の研究と比較してはるかに少なく、かつ困難な課題を含んでいる。この領域の研究は明らかに医学における治療法に直結した重要な応用を含むばかりでなく、実際の細胞系の機能(界面現象があらゆる場面に現れる)の知識を深める意味でも重要である。

分子研が目指す新たな研究の方向性への提言

科学研究へ向けて何らかの示唆を与えようとするれば、それが誰であっても必然的に個人のセンスや好みを反映したものにならざるを得ない。この事実をよく理解された上で、分子研の研究プログラムを更に豊かにする可能性を持つ研究領域と研究課題について議論を進めたいと考える。

まず最初に心に浮かぶのは発生と複雑系に関連した広大な分野である。我々がよく知っているように、たとえ原子のように単純な要素であっても、それらが集まってシステムを形成すれば個々の要素からはとても考えられない複雑な挙動を示す。原子が分子を構成し、分子がより複雑な集合体を作りだし、さらにそれらが生物の細胞などを紡ぎ出すといった複雑性の階層構造を成すことは我々が実際に目にしている所である。しかし、科学がまだ回答を与えていない根源的な問題がここに存在する：複雑な構造を作り出す個々の基本単位の特性が分かっているとしたときに、単純な要素に関するそれらの知識から複雑さの次のレベルを構成する複雑な構造の特性をどのようにして推測できるのかという問いである。二つの元素が2元化合物を作り出したとき、我々はその化合物がどのような結晶構造を取るのかを予測できるであろうか。あるいは、アミノ酸の小規模な組み合わせを与えられたとして、それが特定の構造を持つ配列にまで成長できるか否かを予測できるであろうか。これが、これから取り組まなければならない複雑性の問題であり、解決へ向けて歩を進めるためには、たとえば、ネットワーク理論などから新たなアイデアを取り入れるのが有効と思われる。

分子研において探索が可能であろうもう一つの領域は、現在すでに実行されている研究領域の幾つかとは比較的近

い関係にある。具体的には、非常に規模の小さな原子集合体——数個から数十、あるいは数百個レベルの原子から構成される原子クラスターなど——が対応する巨視的なバルク材料とは劇的に異なる挙動を示すことがあるが、それらがどのようにして起こり、またなぜ起こるのかという理由を理論的および実験的研究を通して理解を深めることである。たとえば、バルクとしての金はほとんど活性を示さないにもかかわらず、金のクラスターは驚くほど効果的な触媒として機能する。このような対比の良い例として、ガリウム原子クラスターとスズ原子クラスターを挙げることができる。我々の常識から言えば、そして大部分の実験が示しているように、小型粒子はバルク材料の融点よりもはるかに低い温度で融解する。しかし、ガリウムとスズのクラスターはバルク材料の融点よりも高い温度に達したときに始めて溶融が起こる。幅広い問いかけを端的に述べると、「何故、原子あるいは分子の小規模なクラスターは対応するバルク材料と著しく異なる挙動を示すのか」となる。

分子研が追求すべき第3の方向性はタンパク質の研究に関連している。特にタンパク質については、現在の二通りの考え方が一般的に受け入れられているが、これらの考え方は根拠が薄弱であり、場合によっては完全な誤りと思われる。その一つは、タンパク質の活性型は構造的に固有なものであるという考えである。表面的には同じ酵素の異なる二つのサンプルが、例え同一と考えられる条件下においても、異なる反応速度を与えるという明白な証拠が存在するのである。このような酵素には複数の活性型が存在するものと考えられる。他の一つは、天然型（一意に定まる天然型が存在するものとして）がそのタンパク質の最も自由エネルギーの低い形態であるという考え方である。天然型は、そのタンパク質が機能する条件下において最も反応論的に利用しやすい形態でなければならないが、エネルギーが一番低い状態である必要性はない。実際、プリオン現象はこの考え方がほぼ確実に間違っていることの証左と思われる。これらの疑問に答えるためには、第2のケースではタンパク質折り畳みの速度論的研究が必要であり、第1のケースではタンパク質活性の動力学的研究が必要となる。うまく折り畳める経路がどの程度まで一意に定まるのか、というのもタンパク質の折り畳みに関連した疑問点である。タンパク質の多種多様さを思うと、本評者などは、ほぼ一意に定まった経路で折り畳まれるタンパク質の例から、多種多様な経路で折り畳みが可能なタンパク質に至るまで、多数のケースが存在するのではないかと考えてしまう。あるタンパク質について、成功する可能性のある折り畳み経路の数をどのようにカウントするのか、という疑問に対する課題も当然発生する。動力学的な研究がすでに示しているように、ある種のタンパク質は温度の上昇と共にますます多くの折り畳み経路を見つけ出す。折り畳み経路をカウントする方法を見つけ出すこと自体が一つの前進となるだろう。

作成：R. Stephen Berry

2012年2月，3月

## 7-2 研究顧問による点検評価

### 7-2-1 Graham R. Fleming 研究顧問

原文

#### Report on Visit to IMS

October 15–21, 2011

#### General Comments

IMS has many spectacular achievements to its credit over its 36 year history. After its inception, it rapidly became an international center for molecular science. Today, with the great growth of multidisciplinary science worldwide, the much stronger connection of bioscience to physical science, and new imperatives in renewable energy and sustainable practices in many other areas, IMS has both large opportunities and large challenges.

The IMS leadership has made significant progress toward the creation of a strategic plan for the Institute that recognizes and accepts these challenges, and brings IMS' current strengths to bear on the opportunities. In my view, to fully capitalize on these opportunities, IMS will need some substantive changes in the way it works. An important step has already been taken by Director General Ohmine in the plan to create 'Independent Young Research Leaders.' Many leading institutions worldwide have found that a program that gives highly talented young people freedom to work with multiple collaborators has the potential to transform the multidisciplinary activity and, as a bonus, attracts the most creative and adventurous young scientists.

A second change would, I believe, be high beneficial: I have, over my many years of visits to IMS, wondered if the rule prohibiting promotion from Associate to Full Professor internally was overly rigid. In this visit, I became convinced that it is. I believe that IMS would gain significantly in the quality, engagement, and overall contributions to the Institute if, in relatively rare cases, promotion from Associate to Full Professor were possible at IMS. With the potential for a full and fulfilling career at IMS, Associate Professors will become more engaged in the success and direction of the Institute. I also believe this would help to make IMS' more than the sum of its parts. I take up this topic in the next paragraph.

During my visit, I heard 23 presentations and visited a small number of labs over 2 ½ days. The quality of the work presented was in general very good and, in some cases, was of a top quality international standard. By and large, the work described the efforts of individual small groups with little evidence of the kind of synergies that should be possible in an institute focused on molecular science. I believe that to really capitalize on the ambitious plans laid out for IMS, such synergies will be essential. Research collaborations, both domestic and overseas, are an important component of the strategic plan. From a personal perspective, I would find it very helpful for my next visit for each presentation to begin with a brief description of the international context for the research to be presented.

#### Discussion of Free Electron Laser

I have separated out the discussion of whether to propose construction of a Free Electron Laser (FEL) at IMS from the general discussion because of the cost and complexity of such a project. The remarkable successes of the LCLS at SLAC have highlighted both the potential and the drawbacks of the highly expensive machines that can only accommodate one or two user groups at a time. Very long waiting times for access and low probability of successful requests for time are the result with consequent dissatisfaction

for many of the potential users. Specifically, I believe that the IMS group needs to do much more to build a convincing science case and see if there is a substantial user community for the machine they have in mind.

### Specific Research Presentations

During the visit, I heard presentations in Life and Coordination-Complex Molecular Science, Photo-Molecular Science, Materials Molecular Science and Theoretical and Computational Molecular Science. I am grateful for the care and thoughtfulness that had gone into all the presentations, which were uniformly interesting and informative. It is clear from both last year's and this year's talks that IMS has a talented and productive faculty. Many of the groups are quite small and clearly greater access to good quality students is a top priority for IMS.

The range of material presented would stretch anyone's technical expertise and as a consequence, I will not provide detailed technical assessments of the individual research programs.

### Suggestions for Next Visit

As the strategic plan for IMS is developed and refined, I believe a series of group discussions on how the various aspects of the plan will be implemented would be very valuable.

An update on FEL plans would also be useful. Finally, as I noted earlier, provision of the international context would be helpful for each technical presentation.

Graham R. Fleming  
Vice Chancellor for Research  
University of California Berkeley  
November 1, 2011

---

訳文

分子研訪問リポート

2011年10月15日～21日

### 総評

分子研は、その創設後、短期間のうちに分子科学における国際的拠点となり、36年間にわたり輝かしい成果を挙げてきた。今日では、世界的な境界領域分野における科学の大きな発展、物理科学と生命科学の融合、ならびに再生可能エネルギーや持続可能な取組みが求められているといったような状況下、分子研は大きな可能性と挑戦の時期を迎えている。

このような挑戦を認識・受容する研究所としての戦略的プラン確立に向けた研究所の取組みは、大きな進展を遂げるとともに、その機会を逸さないよう研究所として注力している。私見では、このような機会を最大限に利用するためには、分子研はいくつかの点においてその運営方法を大きく変える必要があるであろう。大峯所長による「若手独立フェロー」制度の創設計画により、その第一歩は既に踏み出されている。高い能力を有する若手に、複数の共同研

研究者とともに自由に研究を実施させることが、多くの面で活性化をもたらすとともに、付随的な効果として、創造的で野心的な若手研究者を引きつけることは、世界の多くの主要研究所において明らかとなっている。

私は、次に述べるような第二の変革が、研究所にとって非常に有益であると信じている。これまでに分子研に何度も訪れてきた際に、私は准教授から教授への内部昇進を禁止しているルールが、あまりにも厳密すぎるのではないかと危惧していた。今回の訪問において、この危惧について確信するに至った。分子研において、たとえ非常に稀な例としてであっても、准教授から教授への昇進を可能とするならば、質的な面、一体感、研究所への貢献といった点で分子研が得るものは大きいと信じる。さらに、このような変革は、研究所を、各研究グループの単純な足し合わせ以上のものとする助けになると信じるものでもある。この点に関し、次項でさらに取り上げる。

今回の訪問に際し、2日半かけて23の研究グループからの発表を聞き、さらにいくつか研究室を訪問した。発表された研究の質は、総体的に非常にすぐれたものであり、それらのうちいくつかは世界標準でみてもトップレベルのものであった。全般的にみて、今回の発表では小さい各研究グループの努力の成果が述べられ、分子科学に焦点をあてた研究所において可能であるべき相乗効果については、ほとんど見受けられなかった。分子研が展開する野心的な計画を真に生かすためには、そのような相乗効果は必須のものである。国内および国際的な共同研究はいずれも、研究所の戦略的計画の中における重要な要素である。個人的見解としては、次回に私が分子研を訪問した際には、各研究グループからの発表が、研究の国際的な位置づけを簡単に説明することから始まるとありがたい。

#### 自由電子レーザーに関する議論

分子研に自由電子レーザー(FEL)を建設することを提案すべきか否かに関する議論については、そのようなプロジェクトのコストならびに複雑さ故に、一般的な議論とは分けて議論した。SLACに設置されているLCLSの大いなる成功は、一度に1~2グループしか利用することができない、非常に高価な機器がもつ潜在能力と欠点を合わせて露呈している。利用するためには非常に長い待ち時間が必要であること、およびマシンタイム獲得が非常に困難であることは、潜在的な多くの利用者にとって、必然的に大きな不満となる。分子研は、確実な科学の事例を築くことに注力し、導入を考えている機器を必要とする利用者コミュニティが本当に存在するのかどうか見極めることが必要である。

#### 特定分野の研究発表

今回の訪問では、生命・錯体分子科学、光分子科学、物質分子科学、ならびに理論・計算分子科学分野における研究成果を聞くことができた。注意深く、かつ思慮深いものであったすべての発表(これらは興味深く、かつ有益であった)に感謝申し上げる。昨年度と今年度の発表から判断しても、分子研が、才能があり、生産性の高い教員を擁していることは明らかである。多くの研究グループが極めて小規模であり、優秀な学生を獲得することは、分子研にとっての最優先事項である。

発表された内容は、非常に多岐にわたる研究分野に広がっており、それぞれの研究内容について詳細に専門的な評価をすることはできない。

次回の訪問に向けての提言

分子研の戦略的将来計画が策定され、磨きをかけられているので、計画にあるそれぞれの項目をどのように実現するかについて、一連のグループディスカッションを行うことが非常に有効であろう。

FEL 計画の改訂も有益であろう。最後に、前にも述べたように、国際的な位置づけを与えることが、各自の研究発表において有効である。

Graham R. Fleming

カリフォルニア大学バークレー校

研究担当副学長

2011年11月1日

## 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、共同利用設備として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、施設の充実が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。国内外の超大型の放射光施設やスーパーコンピュータ拠点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 施設は 2003 年の光源加速器高度化 (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増設, トップアップ運転 (一定ビーム強度運転) 導入により, 1 GeV 以下の低エネルギーシンクロトロン光源としては世界的にも最高水準の高性能光源となった。さらに, 光源加速器で唯一建設来手つかずの装置である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, 電子ビーム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高度化改造計画が, 2011 年から 2012 年にかけて進行中である。この改造に合わせて, アンジュレータ 1 台が増設され, 周長 50 m の小型光源に合計 6 台ものアンジュレータが稼働することになる。

ビームラインはスクラップアンドビルトにより数を絞り込み, 競争力のあるビームラインを中心に重点的に整備を進めており, 現在は 12 本が稼働している。このうち 2 本の偏光可変型アンジュレータビームラインは世界的にも最高水準の性能を誇り, 固体の光電子分光による研究に威力を発揮している。また, 2 本の真空封止型アンジュレータビームラインは気体や液体の特徴ある分光研究に利用されている。2012 年に設置されるアンジュレータビームラインには国内では初めてとなる軟 X 線顕微分光装置が組み込まれ, UVSOR の高輝度特性を活かした研究が展開される予定である。

新しい光源技術の開発として, レーザーと電子ビームを用いた光発生とその利用法に関する研究を, 文部科学省の受託研究として進めており, 装置の整備が順調に進んでいる。2012 年にはコヒーレントなテラヘルツ光・真空紫外光の試験利用を開始する。

光源加速器の高度化は 2012 年度の改造で一段落し, その後はより高い光源安定性の実現へ向けた改良・技術開発へ重心を移す。また, 老朽化の進んでいる一部のビームラインについては, 整理統合の可能性も排除せず更新・高度化の検討を進め, 段階的に実施する。

上記のように既存設備の性能を世界最高水準に維持し高度な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。

- 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が, 需要, 予算, 敷地, 加速器技術の進展, 他施設の動向なども考慮しつつ, 計画を練り, 最適なものを選択する必要がある。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。これらのうち iii) については, 既存加速器を運用しつつ整備を進めることができる可能性があること, 現在進めているレーザーと電子ビームを用いた光発生技術を活かせる可能性があること, などの利点もあり, 今後, 優先的に検討を進める。

## 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、現在の専任教授・准教授は、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。平成23年度においては、ナノ計測研究部門に横山利彦教授、岡本裕巳教授、ナノ構造研究部門に加藤晃一教授（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、西村勝之准教授がナノ構造研究部門に併任している。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、平成21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23年度の外部委員は、冨田博一大阪大学大学院基礎工学研究科教授、山口芳樹理化学研究所チームリーダー、馬場嘉信名古屋大学大学院工学研究科教授、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レベルの装置である。本機の機能を縦横に活用して、タンパク（中でも膜タンパク糖タンパクのような難結晶性複合タンパク）、固体ナノ触媒、有機-無機複合コンポジット、CNT及びフラレン類縁体の精密構造研究、海洋性巨大天然分子などのナノサイズ分子構造体の高次構造や動的挙動の精密解析などに対して、ナノネットを通して共同利用に供されている。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、新たに西村准教授が温度可変固体プローブを開発し、共同利用供与を始めた。さらに、今年度から、東日本大震災復興支援の一環として、東京農工大の朝倉哲郎教授の高速 MAS プローブ開発（本来は NIMS にて行う予定であった研究）を行っている。一方、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より公開されている。これにより 920MHz NMR がさらに有効に利用できるようになった。

高磁場 NMR 装置の追加導入も検討されている。新規導入がなされた場合に、機器センターの高磁場電子スピン共鳴装置とともに磁気共鳴センター（仮称）として組織再編することも視野に入れている状況である。

平成 19 年度から実施してきたナノネット事業は平成 23 年度末で終了する。平成 24 年度予算において、文部科学省ナノテクノロジー・プラットフォーム事業が認められ、10 年間継続される予定である。今回は、ナノネットのような地域連携ではなく、分野連携となり、分子科学研究所は、分子・物質合成・解析領域の代表機関として事業に主体的に参画していく所存であり、ナノセンターがセンター機関の機能をもつことを想定している。

## 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。

これまでの所内、特にレーザーセンター内と光分子科学研究領域内における議論、及び所外委員を含むセンター運営委員会等の席において、レーザーセンターの機能・ミッションに関しても議論を重ねてきた。そこでの意見として、高いポテンシャルを持つ部門間の有機的な繋がりを考え、高い視点から見た共有点や一致点（例えば光による時間・空間を分解する研究手法）を探ること、レーザーを使って新しい実験の方法論を作っていくことが必要ではないか、という議論があった。またそれに向けて、レーザーセンターを光分子科学に関わる研究者が幅広く議論を行う場として有効活用することが必要との意見もあった。前者はまさに数年前の組織再編時に掲げた理想に沿うものであり、それに向けてレーザーセンターを議論の場として有効活用して行く必要があると考えている。エクストリーム・フォトリソグラフィーの活動としての所内セミナーの開催時に、そのような機会を持つことを試行している。

平成 23 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プ、マイクロスコープ、制御法に至る統合的な研究手法を開発することを目的としている。これらの開発研究により、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 年度からは実際に、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。この延長線上には、将来的に、放射光とレーザーの技術を総合した大規模な新規の研究施設を建設する構想も持っておく価値はあろう。国内外の類似の施設建設の動きを考慮すると、分子研において取り組むとすれば、レーザーに線形加速器を組み合わせたコヒーレント光源の建設が考えられる。想定される利用実験に関する十分な議論も尽くす必要がある。これらの構想を含め将来的には、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、行う必要があると考えている。

## 8-3-2 共同研究の状況

平成 23 年度は、下記のような共同研究とその成果があった。

### 1)「高出力レーザー新材料の基礎研究」

高輝度光発生を目的として、物質・材料の微細な秩序領域であるマイクロドメインをマクロな領域で構造制御する手法の探索を行っている。コンポン研との共同研究では固体レーザーの発光中心である希土類の 4f 電子のスピンおよび軌道角運動量の磁気異方性増強効果を利用し、従来不可能とされてきた異方性レーザーセラミックスの配向制御、及びそれをを用いたレーザー発振を実証した。これにかかる研究成果は、すでに幾つか論文となっているが、近く更に複数の論文として投稿される予定である。

### 2)「遠・中赤外超広帯域コヒーレント光の時間領域測定」

フィラメンテーションを使った波長変換によって、10 fs 程度の単一サイクル中赤外光パルスが発生されている。単一サイクルパルスは、キャリア・エンベロープ位相も含めて評価することが重要である。香川大学の鶴町准教授と協力して、テラヘルツ波を計測する手法を応用した新しい超短光パルスの評価法の開発を進めている。研究成果の一部は国際会議で発表し、論文として投稿中である。

## 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。その他、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、構造解析機器、物性測定機器、分光計測機器、および液体窒素・ヘリウム等の寒剤供給装置と、多様な機器の維持・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（併任）のほか、9名の専任技術職員と2名の事務支援員が配置されている。機器センターの技術職員は、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。

分子研の明大寺地区では平成21～22年度に実験棟の改修が行われ、その期間は機器センターの機器も一次的な移動を余儀なくされていた。平成23年3月の工事終了後、その他の建物も含めて全面的な部屋割りの見直しが行われた。機器センターでも、装置の配置を抜本的に見直し、1) 寒剤供給と物性測定機器（ESR, SQUID）は極低温棟、2) ナノ秒レーザー関連はレーザーセンター棟1階、3) ピコ秒レーザーシステムは実験棟地下、4) X線回折や分光計測機器は南実験棟、という集約化を図った。特に、南実験棟S101号室には、高感度蛍光分光光度計、可視紫外分光光度計、顕微ラマン分光装置、蛍光X線分析装置を集中して配置した。今後、さらに南実験棟には所外利用者のための待合スペースも整備することを計画している。

本年度は、明大寺地区のヘリウム液化装置の新規設置が行われた。平成21年に旧液化装置が修復不能の故障となつて以来、更新作業が進行していたが、平成23年10月末に設置が完了した。これまでは山手地区の液化装置のみで明大寺地区の供給もカバーするというぎりぎりの状態が続いてきたが、ようやくして余裕のある供給体制が確立できる見込みとなった。また、総合研究大学院大学からの予算措置によって、旧型の400 MHz NMR を新品（JEOL JNM-SCS400）に更新した。平成23年8月に設置が終了し、順調に稼働している。本装置導入の目的は、総研大生などの若手研究者に最新機器を自ら利用する機会を与え、先端的研究を主体的に進める一助とすることである。今後、この方向で有効に活用されることを期待したい。さらに、設備の老朽化への対応や既設装置の高度化への要求などによって、できるだけ速やかな更新・導入が望まれていた機器類を、所長よりの特別な予算措置によって年度末までに納入できる見込みとなった。この主なものとしては、有機微量元素分析装置、SQUID 極低磁場オプション、ESR CW-ENDOR オプションがある。

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23年度の所外施設利用件数は平成24年1月末現在で77件である（平成22年度は60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「機器センターたより No. 4」に掲載した。また、施設利用者から報告された論文タイトルや雑誌名等の情報も同様に掲載している。

次年度からは、前述の920 MHz NMR や高分解能分析電子顕微鏡に加えて、X線光電子分光器、集束イオンビーム加工装置、走査型電子顕微鏡、の計5装置が、機器センターに移管されることとなった。これらの機器は、ナノテクノロジー・ネットワークプロジェクトによって導入・運営されてきたものであるが、当プロジェクトが本年度で一旦終了することを受けて移管されるものである。この措置は、研究所全体として大規模装置を効率的に運用するという観点から、比較的汎用性の高い装置群を集中的かつ定期的に管理する体制の構築を目指したものであり、機器センターがその任にあたるべき施設と位置付けられたことによる。このような状況に対応して、研究所外のコミュニティの方々から広くご意見を頂く必要性がますます増加するものと考えられる。そこで、機器センターの運営委員会が現在まで

は所内委員のみで構成されていたものを、所外委員も含めた構成に変更することとした。運営委員会規則の施行も行われており、次年度から新体制で運営に関する議論を行う。当会議では、施設利用の審査を行うほか、施設利用の在り方やセンターの将来計画について、所内外の意見を集約しつつ方向性を定める。

機器センターの今後であるが、国家全体の厳しい財務状況を考慮すると、汎用機器の配置や利用を明確な戦略のもとに進めることが不可欠となるのは言をまたない。実際、現在の所有機器の多くが10年以上前に導入されたもので老朽化が進み、かなり高額な修理を頻繁に実施せざるを得ない状況になっている。全てを同時に更新することは予算的な制約からほぼ不可能であり、緊急性・使用頻度を考慮して順次更新を進めるプランを策定して、分子研全体の設備マスタープランへ組み込む必要がある。この点で、どのような機器ラインアップを維持するか再検討すべきであり、機器の利用形態を考慮すると、次の3つのタイプに階層化することが有用と思われる。

- 1) 比較的多数のグループ（特に研究所内）が研究を遂行していく上で不可欠な共通基盤の機器。これらの維持は、特に人事流動の活発な分子研において各グループが類似の装置をそれぞれ新たに用意する必要がない環境作りの面で最重要である。所内利用者には利便性を図りつつ相応の維持費負担をお願いする必要がある。また、オペレーターとして、技術職員ばかりでなく技術支援員等に対応することも検討する。一方、使用頻度や維持経費の点で負担が大きいと判断されたものは見直しの対象とし、所内特定グループや他機関へも含めた移設などにより有効に利用してもらうことも検討すべきである。
- 2) 当機器センターとしての特色ある測定機器。汎用機器をベースとしつつ改良を加えることによってオリジナル性の高いシステムを開発し、それを共同利用に供する取り組みを強化すべきである。その際、技術職員が積極的に関与して技術力を高めることが重要である。所外の研究者の要請・提案を取り込みつつ連携して進めるとともに、所内研究者の積極的な関与も求める。当センター内のみならず、例えば、UVSOR やレーザーセンター等と共同して取り組むことも効果的と考えられる。所内技術職員の連携協力が技術を支えるのに不可欠である。コミュニティ全体から提案を求める体制づくりも必要となろう。また、各種プロジェクトに適切な装置の時間貸しをすることによって維持費の一部を捻出するなどの工夫も必要であろう。
- 3) 国際的な水準での先端的機器。分子科学の発展・深化を強力に推進する研究拠点としての分子研の役割を体現する施設として、UVSOR や計算科学研究センターと同様に、機器センターも機能する必要がある。高磁場 NMR 装置や ESR 装置は、国際的な競争力を有する先端的機器群であり、研究所全体として明確に位置付けを行い、利用・運営体制を整備することによって、このミッションに対応すべきである。国外からの利用にも対応するため、技術職員には国際性が求められる。2) と同様に、所外コミュニティからの要請・提案と、所内研究者の積極的な関与が不可欠である。特に、新規ユーザーの開拓は、分子科学の新領域形成へと繋がると期待されるものであり、これまで分子研との繋がりがあまり深くはなかった研究者層・学協会との積極的な連携を模索することにも取り組む。先端的機器は不断の性能更新が宿命であるが、全ての面でトップたることは不可能であるので、意識して差別化を行い、分子研ならではの機器集合体を構成することに留意する。

## 8-5 装置開発室

装置開発室は、分子科学分野の研究者と協力し最先端の研究に必要となる装置や技術を開発すること、日常の実験研究において必要となる装置や部品類の設計・製作に迅速に対応する、という二つの役割を担っている。製作依頼件数は年間 300 件近くに及ぶ。新しい装置の開発では技術職員が研究者と密接に連携し、また、日常の実験研究で必要となる工作依頼などについては、機械加工技能を持つ技術支援員が中心となり、対応している。

分子研外部からの製作・開発依頼を受け入れる「施設利用」を平成 17 年度より分子研の共同利用の一環として開始し、年間 10 件程度を受け入れている。施設の活動の一部として定着してきており、今後、本格的に運用するにあたって、受入れ方式を見直し、分子科学の発展への寄与、装置開発室の技術力向上への寄与、装置開発室の保有する技術の特徴を活かせること、の 3 点を考慮し、受入れに関する審査を行う方針である。

装置開発室は大きく機械工作を担当するメカトロニクスセクションと電子回路工作を担当するエレクトロニクスセクションに分かれている。メカトロニクスセクションでは従来の機械加工技術の超精密化に向けた取り組みに加え、近年では、フォトリソグラフィ、ホットエンボス加工などによる超微細加工技術の習得に取り組んでいる。エレクトロニクスセクションでは、高速化や多機能化が進む電子回路の需要にこたえるために、プログラマブル論理回路素子を用いたカスタム IC の開発、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取り組んでいる。

装置開発室の業務の基盤である依頼業務、すなわち、分子研内外からの装置の製作や開発の依頼に応える業務に加えて、装置開発室職員が技術力向上を目指して自主的に研究計画を立案し遂行するような研究開発を「将来技術開発プロジェクト」と位置付け、研究の現場における需要を意識しつつ、装置開発室で保有する技術をさらに伸ばす仕組みとして展開していきたいと考えている。

装置開発室の設備については、創設から 30 年が経過し、老朽化、性能不足、精度低下などが進み、設備の更新は急務となっている。今後、装置開発室の将来計画・将来像の検討を進めながら、その方向性を強く意識しつつ、日常の実験研究を支えるための基盤的設備、先端技術習得のための先進設備、双方の更新・導入を進める。また、他機関の保有する設備の利用も積極的に検討する。これまでの利用経験から、利用申請などの手続きに時間がかかるなどの問題も明らかになってきており、効果的な利用・活用の方法を調査・検討する。

## 8-6 計算科学研究センター

計算科学研究センターは、2000年度の電子計算機センターから計算科学研究センターへの組織改組にともない、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いる。2011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、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、特に設備の運用等について記す。

2012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2012年2月明大寺地区に設置され、後者は2008年3月に更新されて山手地区に設置されている。両シミュレータは、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社製のPRIMERGYとSGI社製のUV1000から構成される共有メモリ型スカラ計算機で、両サーバは同一体系のCPU (Intel Xeon) 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。これらに加え、京コンピュータと同じアーキテクチャの富士通社製PRIMEHPC FX10があり、システム全体として総演算性能149 Tflopsで総メモリ容量43 TByte超である。PRIMERGYは、16 CPUコア/64 GB構成のノード162台と16CPUコア/128GB構成のノード162台からなるPCクラスタである。前者が40 GB/sで後者は80 GB/sのバンド幅で演算ノード間が相互接続され、大規模な分子動力学計算などノードをまたがる並列ジョブを高速で実行することができる。特に後者においては、vSMPを導入することで複数ノードを仮想的に1ノードの共有メモリシステムとして運用できる機構を有する。UV1000は576 CPUコア/9 TBを有するNUMA型の共有メモリシステムであり、ジョブ作業領域用に実効容量400 TBおよび総理論読み出し性能12 GB/sを有する高速磁気ディスク装置が装備され、大規模で高精度な量子化学計算を可能とする。この2サーバで1000 TBの容量の外部磁気ディスクを共有し、NFSより高速なパラレルNFSが使用できる。PRIMEHPC FX10は、16CPUコア/32GBの96ノードが富士通独自のTofuインターコネクで連結されたシステムである。京コンピュータと互換性があり、京コンピュータのプログラム開発やデータ解析等への活用が期待される。

一方、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にも性能を発揮する。ファイルサーバは、128 TByteのディスクを装備し、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っている。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。2013年2月以降に「高性能分子シミュレータ」を更新するために、2011年9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。

ハードウェアに加え、利用者が分子科学の計算をすぐに始められるようにソフトウェアについても整備を行っている。量子化学分野においては、Gaussian 09, Gamess, Molpro, Molcas, Turbomole, 分子動力学分野では、Amber, NAMD, Gromacsがインストールされている。これらを使った計算は全体の約半数を占めている。さらに、量子化学データベース研究会の活動を支援し、同会から提供された量子化学文献データベースをホームページから検索できるよう

にしている。これまでに合計 113,007 件のデータが収録され、世界 84 力国から利用されている。

共同利用に関しては、2011 年度は 170 の研究グループにより、総数 666 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。また、世界をリードする計算科学研究を本センターから発信していくことができるよう、大規模ユーザのために施設利用 S を設定し、2011 年度は 5 件の利用グループに従来の共同利用の枠を超えた超大規模計算環境を提供してきた。近年、共同利用における利用者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において、とくにナノサイエンスに関わるアプリケーション開発「ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」において重要な役割の一端を担っている。また、昨年度より、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された。この中で、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: Computational Materials Science Initiative）が物性科学分野、分子科学分野、材料科学分野により構成され、CMSI の戦略機関の一つとして分子科学研究所が参加し戦略プログラムを推進している。HPCI 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し、昨年度よりコンピュータ資源の一部（20% 未満）を提供・協力している。さらに、ハード・ソフトでの協力以外にも、分野振興および人材育成に関して、スーパーコンピュータワークショップ「バイオサイエンスに対する計算分子科学からのアプローチ」と 2 つのウィンタースクール「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～」と「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～」を開催した。

平成 23 年度 システム構成（2012 年 2 月以降）

#### 超高速分子シミュレータシステム

クラスタ演算サーバ	
	型番：富士通 PRIMERGY
	OS：Linux
	CPUCore 数：5184（16CPUCore × 162 ノード × 2 システム）
	総理論性能：120.2TFLOPS（371.2GFLOPS × 162 ノード × 2 システム）
	総メモリ容量：31.1TB（64GB × 162 ノード + 128GB × 162 ノード）
高速 I/O 演算サーバ	
	型番：SGI UV1000
	OS：Linux
	CPUCore 数：576
	総理論性能：6.1TFLOPS（6.4GFLOPS/CPUCore）
	総メモリ容量：9.2TB
	ディスク容量：400TB（/work）
「京」用開発サーバ	
	型番：富士通 PRIMEHPC FX10
	OS：Linux
	CPUCore 数：1536（16CPUCore × 96 ノード）
	総メモリ容量：3.0TB（32GB × 96 ノード）
	ディスク容量：48TB（/k/home）

外部磁気ディスク装置	
	型番：PANASAS PAS12，PAS11
	総ディスク容量：1000TB
高速ネットワーク装置	
	型番：Force10 Z9000

#### 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

## 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。

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23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—環境のセンシングと配偶子制御」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。

## 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 齋藤 一夫 東北大理教授 ジョージ・ポーター 英国王立研究所教授化学部長			(九州大学長)

## 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	~'81.7.22											
石塚 直隆	名大学長	'81.9.1~			~'87.7.21								
飯島 宗一	名大学長												
植村 泰忠	東大理教授, 東京理大教授												
神田 慶也	九大学長												
小谷 正雄	東京理科大学長												
小松 登	豊田中研所長		~'84.5.15										
齋藤 一夫	東北大理教授, 国際基督敎大教授		~'84.3.31										
榊 米一郎	豊橋技科大学長												
島村 修	相模中央研最高顧問 理事												
田島弥太郎	遺伝研所長												
馬場 宏明	北大芯電研所長												
福井 謙一	京大工教授, 京都市織大学長, 基礎化学研究所長												
藤巻 正生	お茶女大家政教授, お茶女大学長												
向坊 隆	東大名誉教授												
森 大吉郎	宇宙研所長		'83.11.25 死亡										
亀谷 哲治	星薬科大学長												
角戸 正夫	姫路工大学長												
本多 波雄	豊橋技科大学長		'84.4.16~										

氏名	所属	第1期 '83.5.31 ~ '83.6.1	第2期 '85.5.31 ~ '83.6.1	第3期 '87.5.31 ~ '85.6.1	第4期 '89.5.31 ~ '87.6.1	第5期 '91.5.31 ~ '89.6.1	第6期 '93.5.31 ~ '91.6.1	第7期 '95.5.31 ~ '93.6.1	第8期 '97.5.31 ~ '95.6.1	第9期 '99.5.31 ~ '97.6.1	第10期 '01.5.31 ~ '99.6.1	第11期 '03.5.31 ~ '01.6.1	第12期 '04.3.31 ~ '03.6.1
田中 郁三	東工大理工学部学部長，学位授与機構長												
中嶋 貞雄	東大物性研所長		'84.2.16~										
小田 稔	宇宙研所長												
斎藤 喜彦	慶應大理工教授												
森田 正俊	豊田中研代表取締役												
伊東 椒	東北大理教授，徳島文理大薬教授												
鈴木 進	東北大金材研所長												
豊沢 豊	東大物性研所長，中央大理工教授												
平野 龍一	東大名誉教授												
藤田 栄一	大阪薬科大学長，京大名誉教授												
西原 春夫	早稲田大学総長												
倉田 道夫	三菱瓦斯化学(株)顧問												
朽津 耕三	長岡技科大教授，城西大理教授												
田丸 謙二	東京理科大理工教授												
早川 幸男	名大学長				'87.7.22~		'92.2.5 死亡						
千原 秀昭	阪大理教授(社)化学情報協会専務理事												
米澤貞次郎	近畿大理工学総合研教授，近畿大理工教授												
赤池 弘次	統計数理研究所長												
三ヶ月 章	日本学術振興会学術相談役，東大名誉教授												
伊藤 昌壽	東レ(株)相談役最高顧問												
佐々木 慎一	サイエンスクリエイト(株)常任顧問												
佐野 博敏	東京都立大学長												
櫻井 英樹	東北大理学部長，東北大理教授												
松永 義夫	神奈川大理教授												
秋本 俊一	学士院会員												

氏名	所属	第1期 '83.6.1～ '85.5.31	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 昇	(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	2011. 4. 1 ～ 2013.3.31
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					
WOLYNES, Peter 米国ライス大学教授					
BERRY, Recharad Stephen 米国シカゴ大学名誉教授					(～2012.3.31)

## 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		○	○	○	
吉原經太郎 分子研教授		○			
霜田 光一 東大理教授			○	○	
武内 次夫 豊橋技科大教授			○	○	
山本 常信 京大理教授			○	○	
岩村 秀 分子研教授			○		
坂田 忠良 分子研助教授			○		
木下 実 東大物性研助教授				○	
黒田 晴雄 東大理教授				○	○
山下 雄也 名大工教授				○	○
高谷 秀正 分子研助教授				○	
花崎 一郎 分子研教授				○	○
安積 徹 東北大理助教授					○
志田 忠正 京大理助教授					○
鈴木 洋 上智大理工教授					○
伊達 宗行 阪大理教授					○
田仲 二郎 名大理教授					○
千原 秀昭 阪大理教授					○
土屋 莊次 東大教養助教授					○
永沢 満 名大工教授					○
務台 潔 東大教養助教授					○
藤田純之佑 名大理教授					○
塚田 捷 分子研助教授					○

## 9-7 運営協議員(1981～2004)

会長(議長) 人・人事選考部会に属する運営協議員  
 (副) 副会長(副議長) 共・共同研究専門委員会

氏名	所 属	第1期 '81.5.1～ '83.4.30	第2期 '83.5.1～ '85.4.30	第3期 '85.5.1～ '87.4.30	第4期 '87.5.1～ '89.4.30	第5期 '89.5.1～ '91.4.30	第6期 '91.5.1～ '93.4.30	第7期 '93.5.1～ '95.4.30	第8期 '95.5.1～ '97.4.30	第9期 '97.5.1～ '99.4.30	第10期 '99.5.1～ '01.4.30	第11期 '01.5.1～ '03.4.30	第12期 '03.5.1～ '04.3.31
伊藤 憲昭	名大工教授	共											
大野 公男	北大理教授	人											
角戸 正夫	阪大蛋白研所長 (副)	(副)											
朽津 耕三	東大理教授	人	人										
鈴木 洋	上智大理工教授												
千原 秀昭	阪大理教授	人											
土屋 莊次	東大教養学教授	共 (共~82.4.30)											
豊沢 豊	東大物性研教授	人		人	(副)人								
廣田 襄	京大理教授	人 (人~82.3.31)											
米澤貞次郎	京大工教授	共 (共~82.5.1~)											
井口 洋夫	分子研教授	人	人	人	人 ~87.5.31								
岩村 秀	分子研教授	人・共	人	人	人・共								
木村 克美	分子研教授	共	共	人・共	人・共	( '90.1.29~ 共	( '90.1.29~ 人・共	人・共					
花崎 一郎	分子研教授			人									
廣田 榮治	分子研教授	人	人	人		( ~90.1.16)							
藤山 常毅	分子研教授												
諸熊 奎治	分子研教授	(82.4.30死亡)	人	人	共	人	人 ( ~92.2.14)						
吉原經太郎	分子研教授	人・共 (共~82.4.30)	人	人	共	人							
田中 郁三	分子研教授(客員) (東大理教授)	人・共	人・共	人・共	人	人							
笛野 高之	分子研教授(客員) (阪大基礎工教授)		人	人	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
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										
伊藤 光男	東北大理教授		○	○(副)人									
木村 雅男	北大理教授		○										
黒田 晴雄	東大理教授		○										
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	○	○	○	○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)		○		○	○	○人	○					
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	○人								
細矢 治夫	お茶女子理教授			○人	○人								
又賀 昇	阪大基礎工教授			○共	○~'88.3.31								
松永 義夫	北大理教授			○人	○人	○人	○	○人	○人		○'00.4.1~	◎	◎
北川 禎三	分子研教授			○共	○人・共	○人・共	○	○人	○人		◎		
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	東大理教授				○人	○人							
原田 義也	東大教養学教授				○人	○(副)人							
松尾 拓	九工大教授				○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						
葉師 久彌	分子研教授				○'88.9.1~	○共	○人	○人	○共	○共	○人	○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
木田茂夫	分子研教授				~'88.3.31	人	人	'94.4.1~	人	人	~'00.3.31		
岩田未廣	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	東北大金属材料研教授					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	人	(副)					
伊藤公一	大阪市立大理教授					人	人	人					
小川禎一郎	九大総合理工教授					共	共	共					
小尾欣一	東工大理教授					共	共	共					
京極好正	阪大蛋白研教授					人	人	人					
田中晃二	分子研教授					~'92.4.1							
齋藤修二	分子研教授												
川崎昌博	北大電子科学研教授							人	(副)人				
近藤保	東大理教授							人	共				
斎藤軍治	京大理教授							共	人				
塚田捷	東大理教授							人	共				
山口兆	阪大理教授							共	共				
宇理須恆雄	分子研教授							共	(~'94.5.1~)				
中村晃	分子研教授												
小杉信博	分子研教授								人	共			
渡辺芳人	分子研教授								共	共			
大澤映二	豊橋技術科大工教授												
生越久靖	福井高専校長												
小谷正博	学習院大理教授								人	共			
西信之	分子研教授								人	共			
三上直彦	東北大院理教授								人	共			
岡田正	阪大院基礎工教授								人	共			
加藤重樹	京大理教授								人	共			

氏名	所属	第1期 '81.5.1~ '83.4.30	第2期 '83.5.1~ '85.4.30	第3期 '85.5.1~ '87.4.30	第4期 '87.5.1~ '89.4.30	第5期 '89.5.1~ '91.4.30	第6期 '91.5.1~ '93.4.30	第7期 '93.5.1~ '95.4.30	第8期 '95.5.1~ '97.4.30	第9期 '97.5.1~ '99.4.30	第10期 '99.5.1~ '01.4.30	第11期 '01.5.1~ '03.4.30	第12期 '03.5.1~ '04.3.31
小谷野猪之助 関一彦	姫路工業大理工教授 名古屋大物質科学国際研 究七教授									○共 ○人	○共 ○人		
田中武彦	九大院理教授									○人 ○(副)	○人 ○(副)		
篠野嘉彦	九大院総合理工教授									○(副) ○人	○(副) ○人		
小林速男	分子研教授									○人	○人	○共	○共
阿知波次次	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											○	○
濱口宏夫	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)	○人
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	○人
阿久津秀雄	阪大蛋白研教授											○	○
宇田川康夫	東北大多元研教授											○(副)人	○(副)人
太田信廣	北大電子科学研教授											○人	○人
川合眞紀	理化学研主任研究員											○	○
神茂好	九大有機化学基礎七 教授											○人	○人
菅原正	東大院総合文化教授											○共	○共
魚住泰広	分子研教授											○'02.4.1~	○
西川恵子	千葉大院自然科学教授												○
岡本裕巳	分子研教授												○人
加藤隆子	核融合科学研教授												○

## 9-8 運営会議委員（2004～）

議長 人 - 人事選考部に属する委員  
 (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	第4期 2010.4.1～ 2012.3.31
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	共
小杉 信博 分子研教授	人		人	人・共
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~		人
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	人
薬師 久彌 分子研教授	人	共 '07.4.1~	共	
齊藤 真司 分子研教授				人
大島 康裕 分子研教授				
魚住 泰広 分子研教授				共
青野 重利 分子研教授(岡崎統合バイオ)				人・共
榎 敏明 東工大院理工教授		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	人
篠原 久典 名大院理教授				共
富宅喜代一 神戸大院理名誉教授			(副)人	(副)人
山下 正廣 東大院理教授			人	人
渡辺 芳人 名大副総長, 教授				
山縣ゆり子 熊本大院薬教授				
上村 大輔 神奈川大理工教授				
山内 薫 東大院理教授				
森 健彦 東工大院理工教授				人
佃 達哉 東大院理教授				人

## 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る者

3 前項第 7 号の委員の任期は、2 年とし、再任を妨げない。

#### (委員長)

第 3 条 委員会に委員長を置き、研究所長をもって充てる。

2 委員長に事故があるときは、研究総主幹がその職務を代行する。

#### (招集)

第 4 条 委員会は、委員長が招集し、その議長となる。

#### (点検評価委員会の任務)

第 5 条 委員会は、次に掲げる事項について企画、検討及び実施する。

- 一 自己点検・評価及び外部評価の基本方針に関すること。
- 二 自己点検・評価及び外部評価の実施に関すること。
- 三 自己点検・評価報告書及び外部評価報告書の作成及び公表に関すること。
- 四 独立行政法人大学評価・学位授与機構が行う評価に係る諸事業への対応に関すること。
- 五 その他自己点検・評価及び外部評価に関すること。

(点検評価事項)

第6条 委員会は、次の各号に掲げる事項について点検評価を行うものとする。

- 一 研究所の在り方、目標及び将来計画に関すること。
- 二 研究目標及び研究活動に関すること。
- 三 大学等との共同研究体制及びその活動に関すること。
- 四 大学院教育協力及び研究者の養成に関すること。
- 五 研究教育職員組織に関すること。
- 六 研究支援及び事務処理に関すること。
- 七 国立大学法人総合研究大学院大学との関係及び協力に関すること。
- 八 施設設備等研究環境及び安全に関すること。
- 九 国際共同研究に関すること。
- 十 社会との連携に関すること。
- 十一 学術団体との連携に関すること。
- 十二 管理運営に関すること。
- 十三 学術情報体制に関すること。
- 十四 研究成果等の公開に関すること。
- 十五 財政に関すること。
- 十六 点検評価体制に関すること。
- 十七 その他委員会が必要と認める事項

2 前項各号に掲げる事項に係る具体的な点検評価項目は、委員会が別に定める。

(専門委員会)

第7条 委員会に、専門的事項について調査審議するため、専門委員会を置くことができる。

2 専門委員会に関し必要な事項は、委員会が別に定める。

(点検評価の実施)

第8条 自己点検・評価又は外部評価は、毎年度実施する。

(点検評価結果の公表)

第9条 研究所長は、委員会が取りまとめた点検評価の結果を、原則として公表する。ただし、個人情報に係る事項、その他委員会において公表することが適当でないと認められた事項については、この限りではない。

(点検評価結果への対応)

第10条 研究所長は、委員会が行った点検評価の結果に基づき、改善が必要と認められるものについては、その改善に努めるものとする。

(庶務)

第 11 条 委員会の庶務は、岡崎統合事務センター総務部総務課において処理する。

(雑則)

第 12 条 この規則に定めるもののほか、委員会の運営に関し必要な事項は、委員会の議を経て研究所長が定める。

附則

- 1 この規則は、平成 16 年 4 月 1 日から施行する。
- 2 この規則施行後、第 2 条第 2 項第 7 号により選出された最初の委員の任期は、同条第 3 項の規定にかかわらず、平成 18 年 3 月 31 日までとする。

## 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。）が必要と認めたる者

2 前項第 3 号、第 4 号及び第 5 号の委員の任期は、1 年とし、再任を妨げない。ただし、補欠の委員の任期は、前任者の残任期間とする。

3 前項の委員は、研究所長が委嘱する。

#### (委員長)

第 3 条 委員会は、研究所長が招集し、その委員長となる。

#### (専門委員会)

第 4 条 委員会に、専門的な事項等を調査検討させるため、専門委員会を置くことができる。

#### (委員以外の者の出席)

第 5 条 委員長は、必要に応じて、委員以外の者を委員会に出席させ、意見を聴取することができる。

#### (庶務)

第 6 条 委員会の庶務は、岡崎統合事務センター総務部総務課において処理する。

#### 附則

1 この規則は、平成 16 年 4 月 1 日から施行する。

2 この規則施行の後最初の任命に係る委員の任期は第 2 条第 2 項の規定にかかわらず平成 17 年 3 月 31 日までとする。

#### 附則

この規則は、平成 19 年 4 月 1 日から施行する。

## 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 24 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、生体刺激のセンシング等の多様な生命現象の解明を目指して、生命機能分子の分子的理解に基づいた研究を行う。

新分野創成センター・ブレインサイエンス研究分野においては、本センターから申請し、採択された新学術領域（包括脳）終了後の計画について、我が国の脳研究の在り方を踏まえながら検討する。脳研究における新しい分野開拓について、若手を中心にブレインストーミングを行いながら将来計画を立案する。また、ニホンザル及びマarmoセットの発生工学を含むサルを用いた実験的脳研究課題を募集し、高次脳機能の解析とその分子生物学的基盤を探索する研究施設「認知ゲノミクス基盤研究センター（仮称）」の設置実現に向け、実績を積み上げる。

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3次元・4次元画像化を進める。情報科学と科学計測の融合を目指した新分野「画像科学」の創成に向け、引き続き、「画像科学コミュニティー」から課題を募集し、実績を積み上げる。情報交換や情報収集を行う。また、研究会/シンポジウム開催等の活動を通して、コミュニティーの拡大を図り、「画像科学」の創成を図る。

更に、新たな研究分野として「宇宙と生命」に関する研究分野の設置に向けて、情報交換や情報収集を行う。

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、アルマ望遠鏡によるミリ波/サブミリ波天文学研究、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 の現地試験を実施し、主焦点広視野分光器の検討を進める。波面補償光学を利用した次世代装置の検討を進める。

米国ハワイ州マウナケア山に次世代超大型光学赤外線望遠鏡 TMT（口径 30 m）を国際協力により実現することをめざし、国際協議をさらに継続し、核心技術の開発実証を開始する。

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。平成 25 年から運用を開始する新しいスーパーコンピュータの調達手続きを継続し、年度末までに導入を完了する。

アルマ計画において、受信機の製作を進める。また、本格運用を開始する。

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、暦要項を広く社会に公表する。

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、閉構造ダイバータの更なる整備によって、粒子制御能力の向上を図るための研究を進め、更なるイオン温度の向上や高性能定常プラズマの実現を目指した実験の基盤を構築する。精度の高い計測と数値解析を組み合わせた学術研究を進め、高性能プラズマの振舞いの物理機構の解明を図る。

プラズマシミュレータ（スーパーコンピュータ）のレベルアップにより、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等の一連の理論・シミュレーション研究の向上を図る。特に、電磁流体力学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、連結階層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。更に基本設計に向けて必要となる機器構成材料や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、基礎学術・学際研究の推進を図る。

##### （基礎生物学研究所）

生殖や発生、多様性の獲得、環境応答のしくみ、行動など高次機能の制御を含めた生物の営みのしくみを解明するために、遺伝子、細胞内小器官、細胞、組織の役割、生物共生の機構などについて、新規モデル生物の開発や光学顕微鏡、次世代 DNA シーケンサーなど最先端研究手法を用いることによって世界を先導する独創的な研究の推進を図る。

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さらに充実させ、変異体リソースやデータベースの拡充、及び小型魚類の変異遺伝子スクリーニング系の提供を行う。また、生物遺伝資源のバックアップ体制の整備と連携して、3D マイクロ CT 等の新規分析機器を導入し研究拠点機能を強化する。

生物学研究のリソースとして必要不可欠な生物遺伝資源の安定した一時保存、提供、リソース回復等を行うとともに、貴重な生物遺伝資源の毀損・消失を回避し、円滑な研究活動を実施するためのバックアップ体制の運用を開始する。

##### （生理学研究所）

生体機能を担う分子の動作メカニズム及びその生体機能への統合、生体恒常性維持の発達とその分子・細胞メカニズム及びそれらの破綻による病態等に関する研究を進める。

前年度に引き続き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。特に、機能的磁気共鳴画像装置（fMRI）2台の同時計測による対人関係における脳機能等の研究を一層推進する。

ウィルスベクターを用いた遺伝子発現操作によって特定神経回路機能を可逆的に操作して機能を解析する研究手法の確立に向けた研究を推進する。脳神経系障害や神経疾患の病態と代償・回復メカニズムとブレイン・マシン・インターフェースの開発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に関する研究を進める。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。さらに、機能に基盤をおいた革新的コネクティブ技術によって神経結合を網羅的に解析する技術を応用した研究を開始する。

#### （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、機能性分子の電子過程の解析と理論設計、溶液や生体高分子等の複雑系の構造・反応ダイナミクスに関する研究をさらに進めると同時に、ナノ構造体の近接場分光の理論的研究を行う。

光分子科学研究領域が中心となって、分子科学研究への適用を意識したレーザー光源やコヒーレント放射光源と、それらを駆使した先端的な光計測法の開発を継続して進める。それらを用いた気相・凝縮系・ナノ物質等の励起ダイナミクスの解明制御、各状態分析等の研究を行う。

物質分子科学研究領域が中心となって、有機太陽電池素子・機能性有機化合物・分子性触媒などの創成・開発、有機伝導体の新規物性探索、及び、分子性物質の機能物性評価のための新規分光的手法の開発等の研究を行う。

生命・錯体分子科学研究領域が中心となって、人工光合成系開発を指向した無機小分子の多電子還元反応系の開発、生体膜でのプロトン移動を伴った電子移動反応での電子とプロトンの移動経路の解明、高効率分子触媒開発によるフロー法を用いた高速分子変換反応の開発等の研究を行う。

#### （2）研究実施体制等の整備に関する目標を達成するための措置

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構成員の拡充を図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は、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及び「認知ゲノミクス基盤研究センター（仮称）」の設置に向けた準備組織を整備する。イメージングサイエンス研究分野では、関係する国内外の研究者との連携を深め、自然現象のイメージング化の研究を推進する体制をさらに充実させる。

#### 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、引き続き双方向型共同研究における連携強化や一般共同研究を通じた大学支援を進め、中核拠点として大学と核融合科学研究所の研究活性化に貢献する。

基礎生物学研究所では、我が国の生物学研究に必要な不可欠な良質の生物遺伝資源を安定的に提供する中核拠点としてバックアップ体制の運用を開始する。

生理学研究所では、脳科学・生理学に必要な動物やツールの開発・供給及び先端的研究機器の共同利用を通じて学術ネットワークの中核拠点としての役割を果たす。

分子科学研究所では、化学分野における先端的研究設備を利用した共同研究を推進するとともに、そのノウハウを大学でも活かせるように、大学内外での相互利用を支援する取組みを開始する。

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、次世代超大型光学赤外線望遠鏡 TMT 実現のための国際連携を強化する。

アルマ望遠鏡の本格運用開始に伴い、サブミリ波天文学の東アジアの拠点としてアルマ東アジア地域センターにおける国際共同利用・共同研究を継続して進める。

将来の太陽観測衛星、月探査衛星等の搭載機器をはじめ、種々の観測装置の共同開発、共同利用を全国の大学等と協力して進める。地上の望遠鏡や「ひので」、「かくや」などの衛星によって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、海外を含めた共同研究者コミュニティと議論し、実験参加及びデータ利用の促進を、引き続き図る。これにより、国内外との共同研究をさらに推進する。

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、大型計算機の共同利用環境の整備、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。

炉工学研究の拠点として、材料・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。

核融合分野の世界的研究拠点として、国際熱核融合実験炉及び「幅広いアプローチ」を含む国内外の連携研究を大学と共に積極的に推進する。

##### （基礎生物学研究所）

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いて、生物遺伝資源バックアップ体制整備と連携して設備の強化を行い、共同利用・共同研究の推進を図る。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、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所との学術交流シンポジウム等を通じて、国際共同研究の核としての活動を行う。

### (生理学研究所)

分子から個体そして社会活動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発展させ、データ解析手法の開発も行う。特に、革新的なコネクティクス技術を応用した研究を開始する。

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)を用いた共同利用、共同研究を一層推進する。

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。疾病対策を一層強化し、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。また、ゲノム情報に基づき、特定の遺伝的特性を有する個体・家系の保存を開始する。

課題を設定して重点的に進める計画共同研究として、引き続き遺伝子改変ラット・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、加速器高度化改造を進め、更なる高輝度化、トップアップ運転高精度化の実現を目指す。また、顕微分光ビームラインを建設し、供用開始に向けて整備を進める。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、レーザー波形整形を応用したコヒーレントシンクロトロン光源の実用化を目指す。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中心になって、高磁場NMRなどの先端的分光計測・構造機能物性評価設備の充実と共同利用支援の強化を図る。

計算科学研究所において、新規汎用コンピュータの導入準備を進めるとともに、新しく導入したスーパーコンピュータを駆使し理論・計算分子科学研究を推進する。

### (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、計測器貸出制度を利用者の意見を反映させて更に拡充させると共に、一般共同研究のカテゴリーとして新たに創設した複数の大学が参画する「ネットワーク型」の活用を図る。

基礎生物学研究所では、生物機能解析センターに研究・運営を支援する研究員を配置し、共同研究の質の向上を行う。

生理学研究所では、多次元共同脳科学推進センターで萌芽的な研究分野の開拓を目指す活動を行い、それによって軌道に乗った研究課題については脳機能計測・支援センターにおいて推進していくという観点に立って、両センターの改組を行い共同利用・共同研究の実施体制を整備する。

分子科学研究所では、随時申請や通年申請等の共同利用に関する利便性向上の取組みの効果を検証し、必要に応じて見直すとともに、申請手続の電子化、簡素化を進める。

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、本格運用を開始し、共同利用・共同研究を推進する。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、国際エネルギー機関実施協定や研究所間協定等に基づき、国際的な共同利用、共同研究を総合的に推進する。

基礎生物学研究所では、各種国際コンファレンスでの議論の成果を基盤に、所内外の研究者の参加による新たな国際共同研究を開始する。

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、「分子研国際共同研究」を継続して実施する。アジア地域及び欧米の分子科学分野での国際研究交流・共同研究・研究集会を柔軟に実施する。

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、参画6大学附属研究センター間の連携を一層強化し、核融合プラズマ・工学分野における重要課題の解明を進める。

基礎生物学研究所では、植物科学最先端研究拠点ネットワークで導入した機器のうち、次世代DNAシーケンサーの一層の活用を進めるとともに、植物変異体表現型の画像配信システムを整備し、共同利用に供する。また、藻類培養装置の運用を開始し、この装置を共同利用・共同研究に供するための準備を行う。

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。特に、霊長類への遺伝子導入実験を行う共同利用研究を推進し、さらにウィルスベクターの開発・提供を行う拠点形成を開始する。

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、「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」プロジェクト等を通じ、継続的に先端的分光計測・構造機能物性評価設備の効率的な運用と支援を図る。

### 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平成23年度まで実施した「組織的な大学院教育改革推進プログラム」事業を発展させ、新たに特別経費によるプロジェクト「広い視野を備えた物理科学研究者を育成するためのコース別大学院教育プログラム」を推進する。また、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引き続き進める。

生命科学研究所及び物理科学研究科の基盤機関である基礎生物学研究所、生理学研究所及び分子科学研究所においては、生命科学の多様化に対応できる分野横断的な研究者の育成を目指し、異なる研究科と専攻を横断する「統合生命科学教育プログラム」をさらに充実させ、研究者の育成を行う。また、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」を引き続き推進する。

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協力の実施を図る。

(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や野辺山45m電波望遠鏡を利用した観測実習(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)、学部学生、大学院生一般を対象とした「N体シミュレーションの学校」(国立天文台)、大学院生を含む東アジア若手研究者招聘事業(分子科学研究所)、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、国立シンガポール大学と協力し、シンガポールでアジアの若手研究者を対象にした小型魚類の発生遺伝学及びイメージング技法に関する「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、広報誌を活用するとともに、プレスリリースを積極的に行い、社会に向けた最新の研究成果や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、国立天文台での施設常時公開や定例観望会(月2回)の実施など、地域の特性を活かしつつ、自治体、公民館、理科教育研究会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、医学生理学教材の開発及び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、民間等との共同研究や受託研究等を適切に受け入れると共に、研究で得られた成果を公開し、その普及を促進する。知的財産等の創出として特許出願を支援し、特許収支を考慮した登録特許の管理(評価・PR・維持)を実施する。

(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)やプリンストン大学(米国)等との国際的な共同研究を積極的に実施する。

また、国際戦略に基づくアクションプランを策定する。

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の掲載やウェブによる応募受付システムの採用(国立天文台)を検討し、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、就業規則等の必要な文書について英文化を計画的に進める。

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。また、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とともに、研究者交流の活性化を図る。

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、各分野の特徴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。

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アクションプランを計画的に実施する。そのために、機構内に男女共同参画推進委員会を設置する。本年度は、意識改革のための講演会の開催、就労支援環境の整備の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進める。

事務職員について、大学や研究機関等との人事交流を行い、事務局と各機関間の人事異動を推進するとともに、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)は終了したが、引き続き人件費削減を行う。

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とともに、節減できた事例については、各機関の契約担当者間で情報共有できる仕組みを構築する。

3 資産の運用管理の改善に関する目標を達成するための措置

引き続き、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を公開した Web ページの情報内容の充実を図り、有効活用を促進する。

「自然科学研究機構野辺山研修所」の整備・運営を引き続き行う。

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」を全国のあらゆる自然科学分野の研究者のための共同利用施設として運営する。また、生理学研究所伊根実験室施設を転用して設置した「自然科学研究機構伊根実験室」を生理学分野に限らず、全国の自然科学分野の大学等の研究者を対象とした臨海実験施設として、共同利用を開始するとともに、その利用可能性を追求し、今後の共同利用の方向性を探っていく。

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、外部評価を実施する。

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、一般社会へ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、生理学研究所実験棟の改修を行い、また環境への影響が少なく安全性の高い将来の核融合発電の実現に向けた学術研究を推進するため、大型ヘリカル実験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。