

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、平成23年度まで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、平成24年度より文科省「ナノテクノロジープラットフォーム」事業の「分子・物質合成」プラットフォームの代表機関として、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、後者については、共同利用設備の安定的な運営を助成し、分子スケールナノサイエンスセンターの共同利用設備をすべて機器センターに集約し、予算面では運営費交付金一般経費に頼るばかりでなく、組織的に適切な外部資金等を新たに獲得して、予算減を補うようにする方向で検討が進んでいる。

(3)『研究者の国際ネットワーク構築に関する事業』としては、個人ベースの萌芽的な取り組みと組織ベースの国際共同研究拠点の形成がある。従来からの外国人顧問制度、客員外国人制度、招へい外国人制度、国際研究集会（岡崎コンファレンスなど）を実施すると同時に、第1期中期計画期間から独自の分子研国際共同プログラムを進めてきた。このプログラムは個人ベースの国際共同研究のきっかけ（萌芽的国際共同）を作るものである。さらに国際共同研究拠点として組織ベースで取り組むために、第2期中期計画期間においては、自然科学研究機構としての運営費交付金特別経費で「自然科学研究における国際的学術拠点の形成事業」がスタートした。分子科学研究所では、「分子科学国際共同研究拠点の形成」による新たな取組の検討とその準備（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。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きた。これらの事業については、現在、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。後者はEXODASS事業と呼ぶことにした。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、及び、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 101 の機関が参加している。平成 25 年 3 月 2 日現在、登録機器数は 543 台、うち外部公開設備は 338 台、学内専用設備は 205 台となっている。ユーザー総数は、8,784 名である。本年度も平成 22 年度から引き続き、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。特に、共同研究においては、大学間での相互利用（特に地域内）を促進する上で効果的なプログラムとなるように配慮し、講習会・ワークショップ等の実施も可とすることとした。

本ネットワークの周辺状況として留意すべきは、文部科学省が平成 23 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。平成 23 年度 6 大学、本年度は 1 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。以上の現状を踏まえて、各大学における汎用設備の管理体制構築の取組に対する連携・支援の第一歩として、登録・予約・課金を行っているシステムのソースコード公開の権利を製作・管理業者から買い取った。これは、当システムソースコードを各国立大学に無償提供することにより、各大学でシステムを移植並びにカスタマイズが可能となるようにしたものである。今後は、地域代表校やサポートセンター整備事業該当校などとの意見交換を継続し、連携・支援の具体的プラン策定を行う。

また、ハードウェアの動作安定性を向上させるため、サーバーハード本体を 2 台体制とし、1 台のサーバーには複数の OS を同時稼働させられる環境を構築、独立に 2 系統のウェブサーバーとデータベースが稼働可能なシステム構成に更新した。インターネットからのアクセスをこの 2 つのサーバーに振り分けることにより、負荷分散及びハード障害対策を図った。

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」

「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)

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

これらの課題の成果は、既に *Science* 誌, *Nature Physics* 誌, *Physical Review Letters* 誌, 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、フンボルト賞、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、国際光学会フェロー表彰、文部科学大臣表彰若手科学者賞、日本化学会学術賞、日本化学会進歩賞、日本分光学会奨励賞、光科学技術研究振興財団研究表彰、英国王立化学会 PCCP 賞など、多くの権威ある表彰の対象となってきた。また、マイクロチップレーザーの開発では、産業界との共同研究が進展した。

この他に、両研究所の研究打合せや成果報告のため、毎年 2 回、定期的に理研・分子研合同シンポジウムを開催している。平成 17 年度は、4 月に理化学研究所にて第 1 回の合同研究会を開催した。この研究会では、各参加グループのリーダーがそれまでの研究成果を紹介した上で今後の研究計画を披露し、これを中心に議論を行った。これに対して、11 月には「分子イメージングとスペクトロスコピーの接点」を主題とした研究会を行い、より突っ込んだ議論を進めた。平成 18 年度は、4 月に理化学研究所にて第 3 回理研・分子研合同シンポジウムを開催した。このシンポジウムでは特に「エクストリーム波長の発生と応用」をテーマとし、テラヘルツ光やフェムト秒 X 線の発生と利用について議論した。さらに、11 月には「コヒーレント光科学」を主題とした第 4 回の研究会を行い、この方面における所外の研究者にも講演を依頼し、より突っ込んだ議論を進めた。平成 19 年度は、4 月に理化学研究所にて「バイオイメージング」をテーマに第 5 回シンポジウムを開催した。ここでは、高感度レーザー顕微鏡やテラヘルツ分光を利用した生体系のイメージングについて議論した。さらに、11 月には「先端光源開発と量子科学への応用」を主題とした第 6 回シンポジウムを行い、高強度超短パルスレーザーを始めとする先端レーザー光源の開発と、それらを原子分子クラスターあるいは表面ダイナミックスの観察や制御へと応用した研究成果と今後の展望について議論した。平成 20 年度は、5 月に理化学研究所にて「イメージング」をテーマに第 7 回シンポジウムを開催した。ここでは、超高速分子イメージング；生体分子イメージング；テラヘルツイメージングについて議論した。さらに、11 月には「Ultrafast meets ultracold」を主題とした第 8 回シンポジウムを行い、超高速コヒーレント制御や極低温分子の生成、およびそれらの融合が生み出す新しい科学に関する研究成果と将来展望について議論した。平成 21 年度は、5 月に理化学研究所にて「光で繋ぐ理研の基礎科学」をテーマに第 9 回シンポジウムを開催した。ここでは、これまでに本事業によって推進された理研の光科学研究の成果を総括するとともに、今後の展開についての意見交換が行われた。

さらに、11月には蒲郡にて分子科学研究所が主催で「凝縮系における量子的世界」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。東日本大震災の影響や夏場の電力事情等も考慮し、発表者は理研及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てきた。平成24年度は、理研が光拠点シンポジウムの幹事業務やエクストリームフォトンクス事業の中間評価等で忙しかったため、合同シンポジウムは開催しなかった。

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。

光分子科学フォーラム開催一覧（平成24年度）

回	開催日	テーマ	講演者
38	2012. 4.25	Filtering, Trapping and Cooling of Polar Molecules	Christian Somme (分子科学研究所研究員)
39	2012. 6.25	Hybrid Quantum Circuit with a Superconducting Qubit Coupled to a Spin Ensemble	久保 結丸 (フランス・原子エネルギー研究機構サクレ研究所博士研究員)
40	2012. 7. 5	Bose-Einstein Condensation of Erbium	相川 清隆 (オーストリア・インスブルック大学博士研究員)
41	2012. 7.12	Analysis and Control of Photon-Induced Processes	Eckart Rühl (Physikalische Chemie, Freie Universität Berlin, Germany)
42	2012. 7.18	温度 1.5 K における単一タンパク質分光——低温用対物レンズの開発と緑色蛍光タンパク質の構造変化の研究——	藤原 正規 (分子科学研究所助教)
43	2012. 8.24	Quantum Dynamics of a Single, Mobile Spin Impurity	福原 武 (ドイツ・マックスプランク量子光学研究所)
44	2012.10. 2	Intense Laser-Molecule Interaction: Orienting Chiral Molecules and Looking into Attosecond Electron Dynamics	竹本 典生 (イスラエル・ワイツマン研究所博士研究員)
45	2012.10.22	Geometry, Modes and Control of Light in Nanoparticles	Francesco Papoff (Senior Lecturer, Univ. of Strathclyde, Glasgow)
46	2013. 2. 8	Ultrafast Coherent Transfer of Angular Momentum by Tuning the Envelope of a Light Pulse	樋口 卓也 (東京大学理学系研究科物理学専攻特任研究員)
47	2013. 2.20	Laser Desorption Synchrotron Ionization (LDSI) Mass Spectrometry for Analysis of Organic Molecules from Surfaces	Suet Yi Liu (Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, U.S.A.)

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24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（平成24年度から各研究所2名ずつに増員された）。また外部からの任期付き客員教授1名及び実動部隊としての博士研究員若干名を公募し、上述のようなイメージングコンテンツの新たな表示法や、イメージからの特徴抽出の手法等の開発を推進することとなった。現在客員教授及び特任助教、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た。また、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、平成24年度は9件のプロジェクト研究と3件の研究会が採択された。

(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ーをアピールすることを目的として、立花氏が企画して実現したもので、当日は約600名収容の会場がほぼ満席となる参加があった。このシンポジウムの中で、「21世紀はイメージング・サイエンスの時代」と称して、イメージングを主題とするパネルディスカッションが組まれた。ここにはパネラーとして「イメージング・サイエンス」小委員会委員を中心とする講師によって、5研究所全てから、各研究所で行われているイメージング関連の研究の例が紹介され、最後に講師が集まりパネルディスカッションが開かれた。このシンポジウムの記録の出版は諸々の事情で遅れていたが、平成20年度にクバプロから出版された。

平成18年12月5日 - 8日には、第16回国際土岐コンファレンス（核融合科学を中心とする国際研究集会）が核融合研究所主催で土岐市において開催された。この会議ではサブテーマが“Advanced Imaging and Plasma Diagnostics”とされ、プラズマ科学に限らず、天文学、生物学、原子・分子科学を含む広い分野におけるイメージング一般に関するシンポジウムとポスターセッションが企画された。分子科学研究所からも、数名が参加し、講演及びポスター発表を行った。また平成19年8月23日 - 24日には、「画像計測研究会2007」が核融合科学研究所一般共同研究の一環として、核融合科学研究所において開催された。平成20年11月10日 - 13日には、第39回生理研国際シンポジウムとして、“Frontiers of Biological Imaging—Synergy of the Advanced Techniques”が開催され、機構内のイメージングに関わる研究者も数名（分子研1名）が講演を行った。平成22年3月21日には、再び立花隆氏のコーディネートによる自然科学研究機構シンポジウム（東京で開催）において、イメージングサイエンスを取り上げた。平成22年12月

28日には、核融合科学研究所において、イメージングサイエンス研究分野所属の研究教育職員と様々な関連分野の全国から研究者が集まり、「画像科学シンポジウム」が開催された。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、基生研パ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

本プロジェクトでは、分子スケールから固体物質や生体分子にわたる物性や機能発現の解析に加え、分子の集団運動と反応との関係、生体分子における揺らぎの下で起こる確実な機能発現や多様な状態・構造変化間の相関などに関する理論・計算および実験研究により分子システムの物性・機能の解明、階層を貫く分子ダイナミクスの解析・観測法の開拓に関する国際研究拠点形成を目指す。そのための活動の一環として、10月には分子研シンポジウム“Molecular Functional Dynamics: Fundamental to Life Activity”を開催するとともに、理論・計算科学に関するセミナーを開催した。さらに、理論および計算分子科学に関する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。

以上の国際研究拠点形成活動に加え、自然界における階層と全体の向けた取り組みとして、天文学や核融合科学の分野で行われている計算科学研究に関する方法論的および概念的な共通項を探るとともに、他分野のアイデアの導入による共同研究も進めている。さらに、今年度は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などに関する国際シンポジウム“Second International Symposium on Hierarchy and Holism”を開催した。

分子研シンポジウム 平成24年10月26日

理論計算分子科学セミナー 10回

第6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24年12月11日～14日

第2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24年12月17日、18日

天文台・核融合研・分子研合同国際シンポジウム 平成25年2月19日～21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。とくに日本をはじめとする一部のアジア諸国では学術、産業、経済などさまざまな分野において既に欧米のキャッチアップを終え、第三の極を確立しつつある。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。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年度からは上記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」（IMS アジアコア事業）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る。一方、平成24年度からは東アジアとの学術交流は、国内研究機関との学術交流や共同利用と比較して時間的にも予算的にも大きな差異がないことから、東アジア地域との学術交流・研究会開催は原則として通常の共同利用における研究会申請において取り扱うこととしたが、とくに上述4研究機関の学術交流・大学院生教育に資する事業に対しては一定の支援を実施した。平成24年度研究集会として、「Japan-China Joint Symposium on Functional Supramolecular Architectures」（平成25年1月；岡崎）、「Korea-Japan Seminar on Biomolecular Sciences-Experiments and Simulations」（平成25年2月；韓国）が開催された。また教育・研究集会としては、平成25年1月に「The Winter School of Asian-Core Program（Busan, Korea）」がKAIST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。

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)

平成19年度から平成23年度にかけて、分子科学研究所は、名古屋大学、名古屋工業大学、豊田工業大学の愛知県内機関と連携して、文部科学省の先端研究施設共用イノベーション創出事業・ナノテクノロジーネットワークプロジェクトを受託し、中部地区ナノテク総合支援事業を展開した。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た。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が推進できるよう努めた。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た。5年間の利用件数・利用日数は表1に、外部利用者の発表論文等の件数を表2に示した。所外利用者の利用件数は354件、利用日数は延べ2923日、発表原著論文数321報を数えた。また、本プロジェクトは民間企業の利用も受け付けており、その利用も56件/5年、655日/5年に昇った（いずれも内数）。

ナノネット事業はこのように大きな成果を挙げることができ、平成24年度からは文部科学省ナノテクノロジー・プラットフォームプログラムを10年の予定で受け入れており、引き続きナノテク関係の共同利用を実施している。

表1 ナノネット事業分子科学研究所利用件数・利用日数

年度	協力研究		施設利用		技術代行		所外計		所内利用		合計	
	件数	日数	件数	日数	件数	件数	日数	日数	件数	日数	件数	日数
H19	41	460	16	122	2	18	59	600	42	313	101	913
H20	49	260	26	277	11	133	86	670	44	227	130	897
H21	27	200	27	208	19	294	73	702	58	331	131	1033
H22	21	123	18	80	22	146	61	349	75	435	136	784
H23	31	167	22	119	22	316	75	602	63	387	138	989
合計	169	1210	109	806	76	907	354	2923	282	1693	636	4616

表2 ナノネット外部発表件数

年度	原著論文		プレス・総説		学会発表		特許	
	和文	英文	国内	国外	国内	国際	国内	国際
H19	6	74	0	0	81	32	0	0
H20	9	90	4	0	119	61	5	0
H21	1	69	3	7	118	56	0	1
H22	3	38	4	2	61	36	3	1
H23	2	29	2	0	75	41	6	1
合計	21	300	13	9	454	226	14	3

5-6 ナノテクノロジープラットフォームプログラム

「分子・物質合成プラットフォーム」(文部科学省)

平成 24 年度 7 月より、文部科学省「ナノテクノロジープラットフォームプログラム」が開始された。この事業は、ナノテクノロジーに関する最先端の研究設備とその活用のノウハウを有する機関が緊密に連携して、全国的な設備の共用体制を共同で構築するものである。本事業を通じて、産学官の多様な利用者による設備の共同利用を促進し、産業界や研究現場が有する技術的課題の解決へのアプローチを提供するとともに、産学官連携や異分野融合を推進することを目的としている。本プラットフォームは、ナノテクノロジー関連科学技術において基本となる 3 つの技術領域、微細構造解析、微細加工、分子・物質合成から成る。分子科学研究所は、分子・物質合成プラットフォームの代表機関として本事業に参画することとなった。

分子・物質合成プラットフォームの参加機関は、千歳科学技術大学、東北大学、物質・材料研究機構、北陸先端科学技術大学院大学、信州大学、名古屋大学、名古屋工業大学、大阪大学、奈良先端科学技術大学院大学、九州大学と自然科学研究機構分子科学研究所である。本プラットフォームは、ナノテクノロジー分子・物質合成に要求される先端機器群を供給し、産官学の研究者を問わず、また、設備利用に留まらず、合成に関するノウハウの提供、データの解析等も含めた総合的な支援を実施する予定である。また、10 年にわたって最先端研究ニーズに応えるため、成果公開型支援の利用料だけでなく、成果非公開型支援による収入を獲得し、そして、利用者の成果が新しい利用者を呼び、全国から多くの先端研究者が自ずから集う先端ナノテク分子・物質合成拠点を形成し、支援者と利用者双方の若手を育成できる環境を構築することを目標にしている。

表 1 には平成 24 年度の支援一覧を示した。平成 25 年度からは、放射光利用支援として、走査型透過軟 X 線顕微鏡と高磁場極低温 X 線磁気円二色性、分子物性支援として SQUID、汎用型 ESR 2 機、フォトリソグラフィーなどを追加する予定である。表 2 には平成 24 年度の採択課題一覧、表 3 には平成 24 年度の採択・実施件数を示した。

表 1 平成 24 年度支援装置・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
高分解能透過分析電子顕微鏡支援	ナノ粒子などの構造および電子状態解析のための電界放出型エネルギーフィルター高分解能透過電子顕微鏡。JEOLJEM-3200，粒子像分解能 0.17 nm，格子像分解能 0.10 nm。走査像観察，nm 領域の元素分析，液体窒素冷却も可能。	大島康裕教授	光分子科学研究領域
集束イオンビーム加工と走査電子顕微鏡支援	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。	大島康裕教授	光分子科学研究領域
920MHz NMR 支援	920MHz NMR による難結晶性蛋白，固体ナノ触媒，有機 - 無機複合コンポジット，カーボンナノチューブ，巨大天然分子などの精密構造解析支援。現状世界最高性能の 920MHz NMR。固体，多次元，3 重共鳴にも対応。	大島康裕教授 加藤晃一教授 西村勝之准教授	光分子科学研究領域 生命環境研究領域 物質分子科学研究領域
X 線光電子分光支援	汎用の X 線光電子分光器（Al,Mg-K α 線利用）を提供。施設利用として気軽に利用いただける。	小杉信博教授	光分子科学研究領域

電子スピン共鳴支援	電子スピンの分布や相互作用，ダイナミクスの解析支援。 Bruker 社製 E680 にて，多周波数（X-, Q-, W- band），多種測定（CW・パルス，多重共鳴，低温など）を提供。	大島康裕教授 中村敏和准教授	光分子科学研究 領域 物質分子科学研究 研究領域
顕微ラマン分光支援	顕微ラマン分光システムによる分子構造，局所結晶構造解析を支援。コンフォーカル光学系＋冷却 CCD による高空間分解能，高感度観測。488 nm から 785 nm までの励起波長選択，ヘリウム温度までの試料冷却が可能。	大島康裕教授 山本浩史教授	光分子科学研究 領域 物質分子科学研究 研究領域
FT 遠赤外分光支援	FT-IR 分光器による遠赤外スペクトル測定支援。格子フォノン，分子ねじれ振動などの集団運動や分子間水素結合，配位結合等の弱い結合による光学モードを検出。	大島康裕教授 山本浩史教授	光分子科学研究 領域 物質分子科学研究 研究領域
有機薄膜太陽電池の作製評価支援	有機半導体を用いた有機薄膜太陽電池の作製・評価を支援。結晶析出昇華精製装置による有機半導体の超高純度化，真空蒸着装置によるセル作製，擬似太陽光源を用いた太陽電池特性評価，光電流アクションスペクトル，等の測定が可能。 また，SEM，XPS，AFM 等による，有機半導体薄膜の評価が可能。	平本昌宏教授	分子スケールナ ノサイエンスセ ンター
分子性伝導体・有機トランジスタ作製評価支援	分子性伝導体や有機分子を用いたトランジスタの作製・評価を支援。電気分解による単結晶成長，レーザー加工によるデバイス作製，低温・磁場下における輸送特性測定および顕微反射赤外による物性の評価が可能。	山本浩史教授	物質分子科学研究 研究領域
分子触媒支援	分子触媒の調製，構造解析。	唯美津木准教授	物質分子科学研究 研究領域
有機合成支援	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。 合成実施の際は誓約書が必要（施設利用）	櫻井英博准教授	分子スケールナ ノサイエンスセ ンター
錯体合成支援	金属と有機配位子が結合した金属錯体は，多様な物理・化学的性質を有しており，今後有用な機能を開発できる化合物群である。本支援では，金属と有機化合物双方に関する知識・経験を駆使して，新規機能を持つ金属錯体の設計・合成・評価を行う。 合成実施の際は誓約書が必要（施設利用）	永田 央准教授	分子スケールナ ノサイエンスセ ンター
量子化学計算支援	機能性ナノ分子の励起状態やナノ微粒子触媒の反応機構に関する電子状態計算。	江原正博教授	計算科学研究セ ンター

表2 2012年度(平成24年度)採択課題一覧 分子科学研究所担当分

(1) 協力研究

課 題 名 (前期)	支援装置	代 表 者
920MHz 超高磁場 NMR 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 β ペプチドの重合開始機構の構造生物学的基盤の解明	NMR	国立長寿医療センター研究所認知症先進医療開発センター 柳澤 勝彦
マイクロ波印可下での非平衡過程における結晶構造挙動観察	TEM	核融合科学研究所 高山 定次
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
SiC 表面分解法により作製したカーボンナノチューブの電気的特性に関する研究	TEM	名城大学理工学部 丸山 隆浩
ガスソース法による単層カーボンナノチューブ成長の低圧力化・低成長温度化に関する研究	SEM/FIB	名城大学理工学部 丸山 隆浩
表面分解法によるカーボンナノチューブの表面処理による構造制御	ESCA	名城大学理工学部 丸山 隆浩
単層カーボンナノチューブの高効率生成に関する研究	顕微ラマン	名城大学理工学部 丸山 隆浩
課 題 名 (後期)	支援装置	代 表 者
単層カーボンナノチューブの高効率生成に関する研究	顕微ラマン	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
スマネンおよびスマネントリオンのイオン種の赤外吸収測定と電子-分子振動相互作用の解析	有機合成	埼玉大学大学院理工学研究科 坂本 章
Pd/USY ゼオライトを触媒とした高選択的かつ高効率の C-C 結合生成反応の開発	有機合成	鳥取大学大学院工学研究科 奥村 和
920MHz 超高磁場 NMR によるアミロイド β ペプチドの重合開始機構の構造生物学的基盤の解明	NMR	国立長寿医療センター研究所認知症先進医療開発センター 柳澤 勝彦
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
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および精密構造決定	NMR	東京大学大学院工学系研究科 佐藤 宗太
お椀型芳香族分子の電子状態制御	有機合成	東北大学大学院理学研究科 平郡 諭
強相関有機半導体デバイスにおける高周波スピン物性	分子伝導体	東京大学物性研究所 木俣 基
バッキーボール分子のレーザー分光研究	有機合成	京都大学大学院理学研究科 馬場 正昭
酸化亜鉛薄膜及び第 Ⅲ 族元素ドーパ酸化亜鉛薄膜の化学組成評価とキャリア濃度測定	有機薄膜	城西大学理学部 見附孝一郎

(2) 施設利用

課 題 名 (前期)	支援装置	代 表 者
46 億年前のナノ結晶生成過程の再現実験	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
超高磁場 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
シリコンナノカプセルの構造解析	TEM	大阪大学基礎工学研究科 畠田 博一
グラフェン壁を持つメソ多孔性炭素の空孔内への金属担持	TEM	金沢大学理工研究域物質化学系 太田 明雄
高出力パルスマグネトロンスパッタ (HIPIMS) を用いたナノ構造制御成膜法により作製した高機能性薄膜の物性評価	SEM/FIB	(株)アヤボ 塚本 恵三
高出力パルスマグネトロンスパッタ (HIPIMS) を用いたナノ構造制御成膜法により作製した高機能性薄膜の物性評価	TEM	(株)アヤボ 塚本 恵三
高出力パルスマグネトロンスパッタ (HIPIMS) を用いたナノ構造制御成膜法により作製した高機能性薄膜の物性評価	ESCA	(株)アヤボ 塚本 恵三
無機及び有機材料による透明導電膜の開発および評価	SEM/FIB	積水ナノコートテクノロジー(株) 澤田石哲郎
1,6-anhydro- β -maltose-NaSC 包接体の構造解析	NMR	明星大学理工学部 田代 充
固体電気化学におけるブルシアンブルー類似体の電子状態計測	ESCA	名古屋大学大学院理学研究科 吉川 浩史
TEM 像に基づく酸化亜鉛薄膜の膜質の検討	TEM	城西大学理学部 見附孝一郎
電荷整列相転移を起こす (EDO-TTF) $_2$ PF $_6$ における Raman 分光	顕微ラマン	東京工業大学火山流体研究センター 石川 忠彦
木質バイオマスのイオンビーム処理による全処理方法の研究	顕微ラマン	光産業創成大学院大学 富樫 万理
木質バイオマスのイオンビーム処理による全処理方法の研究	SEM/FIB	光産業創成大学院大学 富樫 万理
窒化硼素ドーピング化合物の構造と物性	顕微ラマン	兵庫県立大学大学院物質理学研究科 小林 本忠
Pt 触媒を用いた単層カーボンナノチューブ成長に関する研究	顕微ラマン	名城大学理工学部 丸山 隆浩
新規ナノマテリアルの物性評価	顕微ラマン	法政大学生命科学部 緒方 啓典

分子性超伝導体 β'' -型 (ET) ₂ (ReO ₄) における電荷不均一性の起源の研究	顕微ラマン	大阪大学大学院理学研究科	山本 貴
多層グラフェン壁を持つマソ多孔性炭素への金属担持	顕微ラマン	金沢大学理工研究域物質科学系	西 信之
新規機能性錯体分子の構造と光学的性質	FT 分光	静岡大学理学部	仁科 直子
多層グラフェン壁を持つマソ多孔性炭素への金属担持	SEM/FIB	金沢大学理工研究域物質科学系	西 信之
TEM 像に基づく酸化亜鉛薄膜の膜質の検討	SEM/FIB	城西大学理学部	見附孝一郎
課 題 名 (後期)			
電荷整列相転移を起こす (EDO-TTF) ₂ PF ₆ における Raman 分光		支援装置	
木質バイオマスのイオンビーム処理による全処理方法の研究		代 表 者	
木質バイオマスのイオンビーム処理による全処理方法の研究		顕微ラマン	東京工業大学火山流体研究センター 石川 忠彦
窒化硼素ドーピング化合物の構造と物性		顕微ラマン	光産業創成大学院大学 富樫 万理
		SEM/FIB	光産業創成大学院大学 富樫 万理
		顕微ラマン	兵庫県立大学大学院物質理学研究科 小林 本忠
Pt 触媒を用いた単層カーボンナノチューブ成長に関する研究		顕微ラマン	名城大学理工学部 丸山 隆浩
新規ナノマテリアルの物性評価		顕微ラマン	法政大学生命科学部 緒方 啓典
多層グラフェン壁を持つマソ多孔性炭素への金属担持		顕微ラマン	金沢大学理工研究域物質科学系 西 信之
新規機能性錯体分子の構造と光学的性質		FT 分光	静岡大学理学部 仁科 直子
宇宙のナノ結晶の観察と再現実験による生成過程の解明と物性値の決定		TEM	東北大学理学研究科 木村 勇気
振動分光法を用いた骨マトリックスの分子構造解析とコラーゲン架橋不安定化の機構解明		顕微ラマン	愛媛大学大学院医学系研究科 今村 健志
振動分光法を用いた骨マトリックスの分子構造解析とコラーゲン架橋不安定化の機構解明		FT 分光	愛媛大学大学院医学系研究科 今村 健志
結晶成長を通じたカーボンナノチューブの構造制御		TEM	名城大学理工学部 丸山 隆浩
結晶成長を通じた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
結晶成長を通じた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
金クラスターにおける構造変遷の解明		TEM	東京理科大学理学部 根岸 雄一
光合成酸素発生中心マンガנקラスターの多周波 ESR 研究		電子スピン	東北大学多元物質科学研究所 松岡 秀人
多層グラフェン壁を持つマソ多孔性炭素への金属担持		SEM/FIB	金沢大学理工研究域物質科学系 西 信之
イオンチャンネルバイオセンサーの PMMA 基板上微細孔の FIB による断面形状計測		SEM/FIB	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
有機ならびに酸化物半導体層のホール効果測定による電気的性質評価		有機薄膜	豊橋技術科学大学機械工学系 伊崎 昌伸
液中レーザー照射によるレーザードーブに関する研究		TEM	名古屋工業大学大学院工学研究科 小野 晋吾
液中レーザー照射によるレーザードーブに関する研究		SEM/FIB	名古屋工業大学大学院工学研究科 小野 晋吾
液中レーザー照射によるレーザードーブに関する研究		顕微ラマン	名古屋工業大学大学院工学研究科 小野 晋吾
液中レーザー照射によるレーザードーブに関する研究		ESCA	名古屋工業大学大学院工学研究科 小野 晋吾
液中レーザー照射によるレーザードーブに関する研究		FT 分光	名古屋工業大学大学院工学研究科 小野 晋吾
チエノアセン系有機伝導体の振動分光		顕微ラマン	東京工業大学大学院理工学研究科 森 健彦
RxE ₂ O-TTF 系電荷移動錯体の電子状態に関する分光学的研究		顕微ラマン	京都大学低温物質科学研究センター 石川 学
有機電荷移動錯体における歪誘起相変化の分光学的研究		顕微ラマン	千葉大学大学院工学研究科 酒井 正俊
振動分光法を用いた強相関有機伝導体の電子状態の研究		顕微ラマン	岡山大学大学院自然科学研究科 近藤 隆祐
金属アセチリドナノワイヤーおよびコアシェルナノ粒子の結晶構造・原子配置の評価		TEM	日本大学文理学部 十代 健
高分子金属錯体の局所構造解析および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
水熱合成法で作製したシリコンナノマテリアルの構造解析		TEM	大阪大学大学院基礎工学研究科 多田 博一
単一磁性鉄ナノクラスターの光誘起相転移現象の研究		顕微ラマン	九州大学先端物質化学研究所 姜 舜徹
無機及び有機材料による透明導電膜の開発および評価		SEM/FIB	積水ナノコートテクノロジー(株) 澤田石哲郎
金属 TCNQ 塩が示す可逆的ヨウ素吸蔵能の評価		顕微ラマン	神戸大学大学院理学研究科 持田 智行
有機・無機半導体界面の構造設計による界面ポテンシャルの制御		有機薄膜	京都大学大学院エネルギー科学研究科 佐川 尚
無機及び有機材料による透明導電膜の開発および評価		TEM	積水ナノコートテクノロジー(株) 澤田石哲郎
ラクダ抗体 VHH の NMR シグナルの帰属		NMR	山形大学大学院理工学研究科 真壁 幸樹
金属アセチリドナノワイヤーおよびコアシェルナノ粒子の結晶構造・原子配置の評価		顕微ラマン	日本大学文理学部 十代 健
一次元ロジウム - ジオキソレン錯体の原子価状態の解明		ESCA	兵庫県立大学大学院物質理学研究科 満身 稔
宇宙のナノ結晶の観察と再現実験による生成過程の解明と物性値の決定		SEM/FIB	東北大学理学研究科 木村 勇気
グラフェン壁を持つメソ多孔性炭素の空孔内への金属担持		TEM	金沢大学理工研究域物質化学系 太田 明雄

(3) 技術代行

課 題 名 (前期)	支援装置	代 表 者
ディラック電子系分子性導体への静電キャリア注入を目的とした電界効果トランジスタの作製および物性評価	分子伝導体 東邦大学理学部	田 嶋 尚 也
分子性導体へのスピン流注入を目的としたスピンポンピング素子の作製および評価	分子伝導体 東北大学金属材料研究所	齊 藤 英 治
ダイマーマット絶縁体における光誘起モット絶縁体 - 金属転移および有機誘電体のテラヘルツ波誘電性制御を目的とした試料作製	分子伝導体 東京大学大学院新領域創成科学研究科	岡 本 博
自己キャリアドープ型 TTF 誘導体の W-band ESR 測定による電子状態研究	電子スピン 物質・材料研究機構先端の共通技術部門	小 林 由 佳
スピンラベルされたプリオンタンパク質のパルス Q-band ELDOR による構造解析	電子スピン 北海道大学大学院獣医学研究科	稲 波 修
高感度磁気レセプター模倣材料の時間分解 ESR 測定による機能性メカニズムの解明	電子スピン 富山大学富山発先端ライフサイエンス若手育成拠点	岡 芳 美
単分子型光誘起伝導性物質の時間分解 ESR による光伝導機構の解明	電子スピン 大阪府立大学大学院理学系研究科	藤 原 秀 紀
新規三重項カルベンのパルス ESR 測定による同定	電子スピン 広島大学大学院理学研究科	山 本 陽 介

表 3 2012 年度 (平成 24 年度) 利用件数一覧 (12 月末現在 予定含む) 分子科学研究所担当分

	技術相談	協力研究	施設利用	技術代行	所内 (外部あり)
採択件数	—	19	66	25	66
利用件数	32	11	43	22	66
利用日数	76	84	193	133	383

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ている(統括責任者:常行真司東大教授)。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ている。

(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、以下のとおりである。

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。尚、平成25年度からは、材料科学が第5部会として独立する予定である。

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）
	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）
第3部会	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）
	機能性分子設計-光機能分子と非線形外場応答分子の光物性 代表者：江原 正博（分子研）
	太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算 代表者：山下 晃一（東大院工）
第4部会	バイオマス利用のための酵素反応解析 代表者：吉田 紀生（九大高理）

図2 TCCIで支援する特別支援課題

TCCIとしては、分子科学の分野において計算科学技術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。この内、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、以下、本稿では、主にTCCIにおける平成24年度の分野振興活動の報告を行う。

5-7-2 TCCIの活動について

(1) 推進体制について

今年度の推進体制を図3に示す。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。支援を行う研究員・教員の配置を図4に示す。図3の右側が、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5）。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。

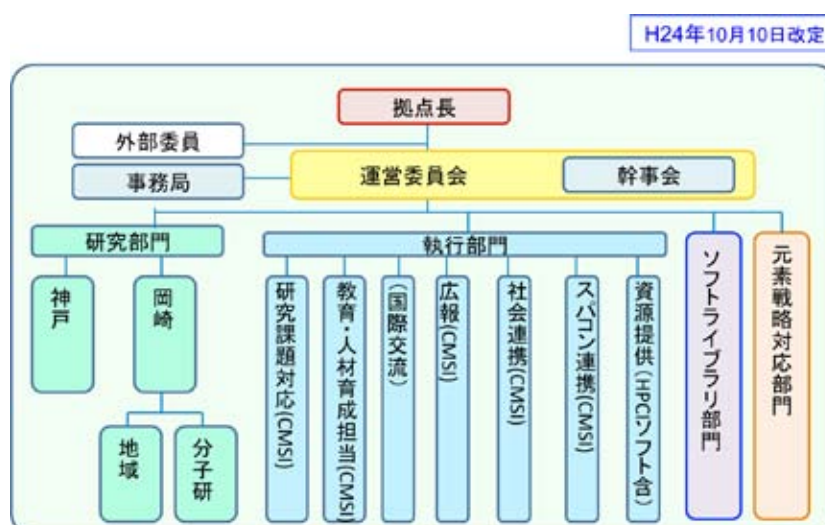


図3 計算分子科学研究拠点（TCCI）体制



*:教員

図4 CMSI 研究員・教員配置

H24年5月12日改定	
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、斉藤、江原、榊、佐藤、田中
幹事会(2ヶ月に1回) (運営委員会の一部)	○高塚、斉藤(主幹会議担当)、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	(改めて設置)
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、佐藤
スパコン連携	○斉藤
資源提供	○江原

図5 TCCI の委員会など

今年度、正式なプロジェクトとして発足した「新・元素戦略」への支援を行うための「元素戦略対応部門」と、平成23年度で終了した「次世代ナノ統合シミュレーションソフトの研究開発」(ナノ統合)の成果であるナノ統合ソフトも含め、分子科学アプリの普及対応のための「ソフトライブラリ部門」を創設した。

(2) 平成24年度の活動について

サイエンスロードマップについて

汎用計算機として世界最高速のスーパーコンピュータ「京」は、平成24年9月28日に共用が開始されたばかりであるが、文部科学省では、次々世代スパコン開発を目指した「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」という調査研究プロジェクトを開始した。これは、平成23年度、京に関係する有志で次々世代スパコン設計に向けてまとめた計算科学ロードマップ白書(サイエンスロードマップ)が評価され、文部科学省の正式調査研究として始まったものである。この調査研究にTCCIからも参加し、平成32年度頃までを見通した分子科学の将来像についてまとめを行っている。このまとめた結果をコミュニティの皆様にご披露すべく、日本化学会第93春季年会特別企画として「超巨大計算機時代の化学」を、3月25日(月)13:30～16:30 立命館大学びわこ・くさつキャンパ

スにて開催する予定である。文部科学省では、本調査研究の結果に基づき、次々世代のスーパーコンピュータの開発を開始する計画である。

人材育成・教育

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。特に、超並列化技術国際ワークショップのために米国アルゴンヌ国立研究所から招聘した Jeff Hammond 博士には、国際ワークショップ以外でも、豊橋技術科学大学、分子研、理研 AICS でセミナー講演をお願いし、参加者に、米国での最新状況と日本の状況とを比較できる機会を提供した。

また、懸案となっていた関係大学間での計算科学に関する教育コースの単位互換については、実施可能なものから開始した。

行事名	開催日程	場所
第52回分子科学若手の会 夏の学校	2012年8月20日(月)～24 日(金)	東京大学本郷キャンパス
	講師7名、参加者103名、特別企画を中心に支援	
第16回分子シミュレーション夏の 学校	2012年9月6日(木)～8日 (土)	慶應義塾 立科山荘
	講師3名、ポスター発表15名、参加者約50名	
TCCI ウィンターカレッジ (分子シミュレーション)	2012年12月11日(火)～14 日(金)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター
	講師15名、参加者91名(内、民間企業9名)	
TCCI ウィンターカレッジ (量子化学)	2012年12月17日(月)、 18日(火)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター
	講師5名、参加者48名	
第2回超並列化技術国際ワー クショップ	2013年1月28日(月)	早稲田大学理工学部
	講師5名、参加者46名(内、民間企業5名)	

図 6 人材育成・教育
CMSI 人材育成・教育の一環として企画・実施

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 3 回研究会：TCCI の全体シンポジウムである第 3 回研究会を岡崎コンファレンスセンターで開催した。今年度は、若手研究員全員が発表する企画で、若手の成長を再確認する場となった。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 2 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。今年も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。早速、ご講演頂いた研究者との共同研究の話も持ち上がっている。
- TCCI 第 2 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としているが、今回は、卒業生からも意見を聞くことも企画し、4 人の卒業生に講演をお願いした。共通の課題の一つは、社内の関係者に計算化学に関する理解を深めて頂くことであった。今年度も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が継続していることが感じられる。

行事名	開催日程	場所
TCCI第3回研究会	2012年10月9日(火)～10日(水)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター (岡崎市)
	参加者数:82名(内、民間企業4名)	
TCCI第2回 実験化学との交流シン ポジウム	2012年11月16日(金)～17日(土)	京都大学 福井謙一記念研究セン ター (京都市)
	参加者数:85名(内、民間企業5名)	
TCCI第2回 産学連携シンポジウム	2013年1月24日(木)午後	大阪大学中之島センター (大阪市)
	参加者数:58名(内、民間企業28名)	
日本化学会第93春季年 会特別企画「超巨大計 算機時代の化学」	2013年3月25日(月)午後	立命館大学びわこ・くさつキャンパス (草津市)

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% の提供を開始している。センターの計算機システムの更新にともない、今年度からは、より多くの計算機パワーを提供することが可能となった。今後も継続していく予定である。

分子科学アプリの普及に向けて

平成 23 年度で終了したナノ統合で開発されたナノ統合ソフトを含む分子科学アプリの民間企業の利用に向けて、計算科学振興財団のスーパーコンピュータへ分子科学アプリをインストールするなどの連携を進めた。

5-7-3 今後の課題と取組みについて

平成 24 年 9 月から、京の本格利用が開始されている。この世界最速のスーパーコンピュータを利用した成果も、少しずつ見通しが見えて来ている。今後は、その成果を分かり易くマスメディアなどを通して国民に報告していくことも課題である。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し、成果創出・報告のお手伝いを今後も行っていく予定である(図8)。

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継続して活動して行く所存である。

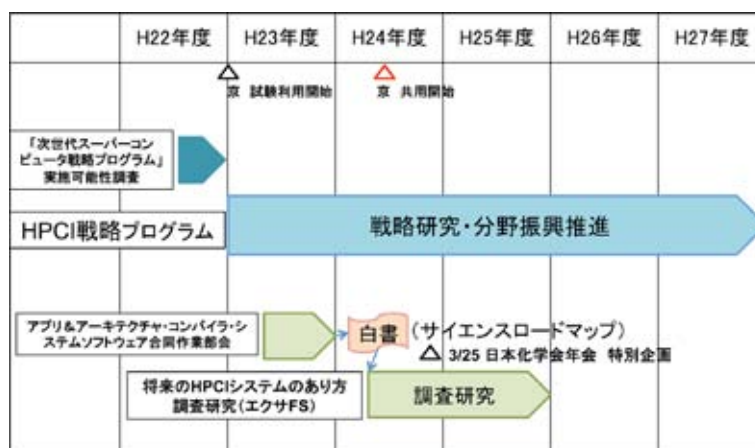


図8 TCCI 研究計画

5-8 最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム (文部科学省)

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

この光拠点事業の公募に対して、分子科学研究所は、大阪大学、京都大学、日本原子力研究開発機構とともに、「融合光新創生ネットワーク」と題したネットワーク拠点を申請し、採択された(http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/20/07/08072808/003.htm)。本年度で5年目を迎えるが、これまで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てきた。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 24 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

世界最大 OPO 出力 540 mJ の 10mm 厚 PPMgLN の作製に成功他、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推進した。

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、QUADRA-IR 開発のための要素技術として、赤外コヒーレント光源を改良し、新しい評価方法を開発した。全帯域でほぼ位相が揃っている、パルス幅 6.9 fs のパルス発生と、電場の直接測定に成功した。

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フォトリック結晶レーザーが有効であることが期待される。今年度も昨年度に引き続き、野田グループとの研究交流を通じて、フォトリック結晶レーザーの将来的な導入に向けた準備を進めた。また、極低温リユードベリ原子を用いた超高速量子シミュレーターの開発において、極低温リユードベリ原子研究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、コヒーレント制御技術を孤立分子や分子クラスターに適用するための研究開発では、10 mJ クラスの出力を有し、周波数チャープを能動的に制御可能な、新規コヒーレントナノ秒パルス光源の開発に成功した。この光源は、今後、孤立分子や分子クラスターのポピュレーション移動を制御する上での重要な基盤装置となることが期待される。

時空間分解顕微分光技術の開発では、超高速近接場光学測定系の更なる最適化を進め、より装置の安定性、特性、柔軟性を向上させた。特に、分散補償光学系の調整と可変形鏡の最適化により、15 fs のパルス幅を近接場プローブ先

端で実現した。これを用いて、金ナノロッドの位相緩和を時間領域で直接観測し、その空間分解計測を行ったところ、ナノロッド上の位置によって位相緩和速度に差があることが観察された。

(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、大森教授が名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻および独フライブルグ大学物理学科で講義を行った。

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、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ワークショップ「ジャイアントマイクロフォトンクスを目指して」を開催した。

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、2008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、2008年度より5年計画で実施した。電子蓄積リングと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するものであった。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。

2013年3月の研究終了までに、コヒーレント放射光の発生とその利用のための装置群の構築を完了した。蓄積リングを改造し、専用のスペースを創出し、そこに、レーザー装置、アンジュレータ装置、専用ビームラインを建設した。開発した装置群の試験運転を行うとともに、試験的な利用実験を実施した。放射光リングを用いたコヒーレント放射光発生という独自の技術を基礎にしたこれらの装置群は、今後さらに実用段階へと開発改良を進めたのち、最終的には共同利用への展開を目指す。

なお、本研究開発プログラムには合計5名の博士研究員と総研大や参画機関である名古屋大学の大学院生・学部学生6名が参加した。特に博士課程の大学院生2名は関連研究テーマで学位を取得するとともに、量子ビーム関連研究機関で研究活動を継続しており、本研究の目的の一つである、当該分野の若手研究者の育成、ということにも十分貢献できたと考えている。

5-10 東アジア若手研究者交流プログラム（EXODASS プログラム）

5-10-1 全体趣旨

本事業は、2008年より5年間、JSPS並びにJASSOによって実施された、東アジアサミット参加国より青少年を日本に招へいする交流計画（JENESYSプログラム）の後継プログラムとして、分子研独自事業として、2011年度より開始されたプログラムであり、今年度は第2期に相当する。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）、オーストラリア、ニュージーランド、インドのこれまでのJENESYS対象国に加え、アジアコアプログラム等を通じて分子研と既に多くの交流実績のある中国、韓国、台湾を、本プログラムより加えることとした。この変更により、これまでJENESYSプログラムで問題となっていた国籍問題（例えばシンガポールの大学に所属していても国籍が中国の場合参加できない、など）が解決され、より多くのアジアの若手研究者に門戸が開かれた。同種のプログラムはすでに通算7期目となり、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2期では、原則として分子研の全ての研究グループを受入対象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とおりである：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）。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8カ国、29名の応募が集まり、またその提案内容も充実していたため、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、7カ国9名を最終的に採択した。内訳はタイ2名、マレーシア、ベトナム、インドネシア、シンガポール各1名のこれまでの参加国に加え、新規参加国から、台湾2名、韓国1名の参加を得た。またキャリアの内訳は、博士研究員2名、博士課程学生7名と、大学院生中心の構成となった。

招へいは、2012年10月～2013年1月にかけて実施され、各研究者に応じて、30～90日の期間での研究プログラムが組まれた。また11月30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。

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プログラムの今後の展開があるかどうかについては不透明であるが、本独自事業の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。