「分子研リポート 2012」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　2012 年度の実施状況 38
3-3-3　共同利用研究実施件数一覧 61
3-4　国際交流と国際共同研究 62
3-4-1　外国人客員部門等及び国際交流 62
3-4-2　岡崎コンファレンス 66
3-4-3　分子科学研究所国際共同研究 68
3-4-4　日韓共同研究 69

3-5　大学院教育 70
3-5-1　特別共同利用研究員 70
3-5-2　総合研究大学院大学二専攻 71
3-5-3　オープンキャンパス・分子研シンポジウム 75
3-5-4　夏の体験入学 75
3-5-5　総研大アジア冬の学校 77
3-5-6　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教育プログラム 78
3-5-7　統合生命科学教育プログラム 79

4．研究支援等 81
4-1　技術課 82
4-1-1　技術研究会 82
4-1-2　技術研修 84
4-1-3　人事 85
4-1-4　受賞 86
4-2　安全衛生管理室 88
4-3　史料編纂室 89
4-4　広報室 90
4-5　社会との交流 92
4-5-1　自然科学研究機構シンポジウム 92
4-5-2　大学共同利用機関シンポジウム 93
4-5-3　分子科学フォーラム 93
4-5-4　分子研コロキウム 94
4-5-5　岡崎市民大学講座 95
4-5-6　その他 95
4-6　理科教育への協力 96
4-6-1　スーパーサイエンスハイスクール 96
4-6-2　あいち科学技術教育推進協議会 96
4-6-3　国研セミナー 97
4-6-4　小中学校での出前授業 98
4-6-5　職場体験学習 99
4-6-6　その他 99
4-7　一般公開 101
4-8　見学者受け入れ 102

5．各種事業 105
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） 107
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） 108
5-3　分野間連携（自然科学研究機構） 110
5-3-1　概要 110
5-3-2　イメージング・サイエンス 110
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 112
5-4　アジア研究教育拠点事業 113
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） 114
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） 115

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）....120
5-7-1 はじめに....120
5-7-2 TCCI の活動について....121
5-7-3 今後の課題と取組みについて....124
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）....125
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）....127
5-10 東アジア若手研究者交流プログラム（EXODASS プログラム）....128
5-10-1 全体趣旨....128
5-10-2 分子研主催プロジェクト課題について....128
5-10-3 実施状況....128

６．研究領域の現状....131
6-1 論文発表状況....131
6-2 理論・計算分子科学研究領域....132
理論分子科学第一研究部門....132
理論分子科学第二研究部門....141
計算分子科学研究部門....147
理論・計算分子科学研究部門....159
6-3 光分子科学研究領域....164
光分子科学第一研究部門....164
光分子科学第二研究部門....172
光分子科学第三研究部門....176
光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設）....184
光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）....187
光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）....193
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）....196
6-4 物質分子科学研究領域....209
電子構造研究部門....209
電子物性研究部門....219
分子機能研究部門....227
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）....232
安全衛生管理室....248
6-5 生命・錯体分子科学研究領域....250
生体分子機能研究部門....250
生体分子情報研究部門....269
錯体触媒研究部門....277
錯体物性研究部門....281

７．点検評価と課題....291
7-1 研究顧問による点検評価....292
7-1-1 Graham R. Fleming 研究顧問....292
7-2 UVSOR の点検評価....295
7-2-1 Adam Hitchcock 教授....295

８．研究施設の現状と将来計画 309
8-1　極端紫外光研究施設（UVSOR） 310
8-2　分子スケールナノサイエンスセンター 311
8-3　分子制御レーザー開発研究センター 312
8-4　機器センター 315
8-5　装置開発室 317
8-6　計算科学研究センター 318
8-7　岡崎統合バイオサイエンスセンター 321

９．資料 323
9-1　評議員（1976 ～ 1981） 323
9-2　評議員（1981 ～ 2004） 324
9-3　運営顧問（2004 ～） 328
9-4　外国人評議員（1976 ～ 2004） 329
9-5　外国人運営顧問（2004 ～） 330
9-6　運営に関する委員会委員（1975 ～ 1981） 331
9-7　運営協議員（1981 ～ 2004） 332
9-8　運営会議委員（2004 ～） 336
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 338
9-10 自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則 339
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 342
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 25 年度） 343

1．序　　言

分子科学とは，豊かな自然において多様な物質循環，エネルギー変換を司っている「分子」についての知識を深め，卓越した機能をもつ分子系を創成することを目指す学問です。分子科学研究所は，そのような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。国際的な中核共同研究センターとして，国内外の分子科学研究を先導すると同時に，生命科学・天文科学などをふくむ，分子が関与する広汎な関連分野と協同して，科学の新たな研究領域を創出することも目標としており，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。

このリポートには，2012年における各研究グループと，所としての活動状況が述べてあります。分子研では（１）「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ジェクト」, 2012年７月からは「ナノテクノロジープラットフォーム」,（３)理研との共同による「エクストリームフォトニクス研究」，（４)「量子ビーム基盤技術開発プログラム」，（５)「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きました。このJENESYS Programのポスト Programとして，現在分子研独自のEXODASSプログラムを実施し，新たな展開を計っています。

2011年３月末の西，薬師，宇理須教授，2012年３月末の永瀬，平田，田中教授に続き，2013年３月末に桑島教授が定年を迎えられ退職されました。また唯准教授が名古屋大学教授，また永田准教授が名城大学教授として転出しました。これらの先生方は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。さらに助教を含めると，2012年度に15名の教員が転出したことになります。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。

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定めるため，多くのPIと一緒に新しい研究の方向を模索してきました。その結果の一つとして，分子スケールナノサイエンスセンターを改組し新たに「協奏分子システム研究センター」が2013年４月から発足しました。(http://cimos.ims.ac.jp）これは，自然界で多重の階層を越えて機能している分子システムの知恵に学び,「柔軟かつ堅牢で卓越した機能をもつ分子システム」を構築することを目的とした研究センターです。秋山教授（2012月４月に教授に着任）をセンター長として，専任，３教授，２准教授，２特任准教授（若手独立フェロー)，さらに兼任（務）である３教授，３准教授の構成員で出発しました。最終的に

は分子科学研究所の約半分の所員が関わる大きな研究センターとなります。

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として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していただいてきました。Fleming 教授は 2012 年 10 月に 5 日間にわたり，新任研究グループのヒヤリングをおこない，また研究所の在り方などに種々の提言を，また，カナダ国マクマスター大学 Adam Hitchcock 教授に UVSOR の研究・運営評価をして頂きました。

岡崎から次世代の核となる学問を生みだす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。

2013 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またがる分子科学の研究を推進するための中核として，広く研究者の共同利用に供することを目的として設立された大学共同利用機関である。物質観・自然観の基礎を培う研究機関として，広く物質科学の諸分野に共通の知識と方法論を提供することを意図している。

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

2-2　沿　　革

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

1965. 12.13　日本学術会議は,「分子科学研究所」（仮称）の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
1973. 10.31　学術審議会は,「分子科学研究所」（仮称）を緊急に設立することが適当である旨, 文部大臣に報告した。
1974.　4.11　文部大臣裁定により，東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室（室長：井口洋夫前東京大学物性研究所教授，定員３名）及び分子科学研究所創設準備会議（座長：山下次郎前東京大学物性研究所長，学識経験者 35 人により構成）が設置された。
1974.　7.　6　分子科学研究所創設準備会議において，研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
1975.　4.22　国立学校設置法の一部を改正する法律（昭 50 年法律第 27 号）により「分子科学研究所」が創設され，初代所長に赤松秀雄前横浜国立大学工学部長が任命された。 同時に，分子構造研究系（分子構造学第一研究部門，同第二研究部門），電子構造研究系（基礎電子化学研究部門），分子集団研究系（物性化学研究部門，分子集団研究部門），機器センター，装置開発室，管理部（庶務課，会計課，施設課，技術課）が設置された。
1975. 12.22　外国人評議員の設置が制度化された。
1976.　5.10　理論研究系（分子基礎理論第一研究部門, 同第二研究部門), 相関領域研究系（相関分子科学研究部門），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^2）が竣工した。
1977.　4.18　相関領域研究系相関分子科学研究部門が廃止され，相関領域研究系（相関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^2）が竣工した。
1978.　3.11　装置開発棟（1,260 m^2），機器センター棟（1,053 m^2），化学試料棟（1,063 m^2）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^2）が竣工した。
1979.　3.24　実験棟第２期工事（3,742 m^2），極低温センター棟（1,444 m^2）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^2）が竣工した。
1983. 3.30　極端紫外光実験棟第２期工事（1,463 m^2）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^2）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，相関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^2）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^2）が竣工した。
1995. 3.31　相関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　相関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^2）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^2）が竣工した。
2002. 4. 1　相関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^2）が竣工した。
2004. 3. 1　山手５号館（NMR）（664 m^2）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^2）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。岡崎国立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。

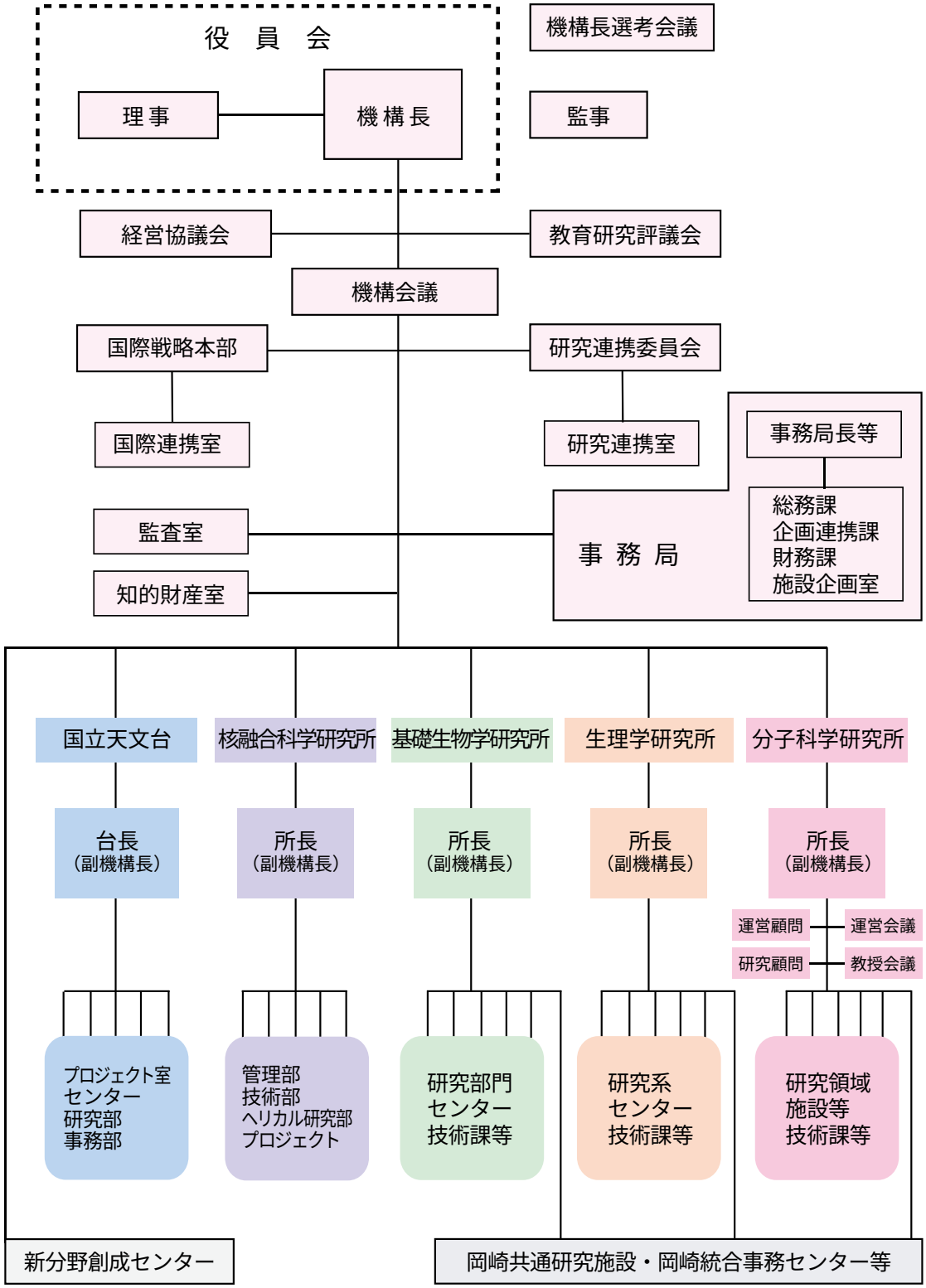
2010. 3.30　実験棟改修第１期工事（耐震及び全面改修）が竣工した。

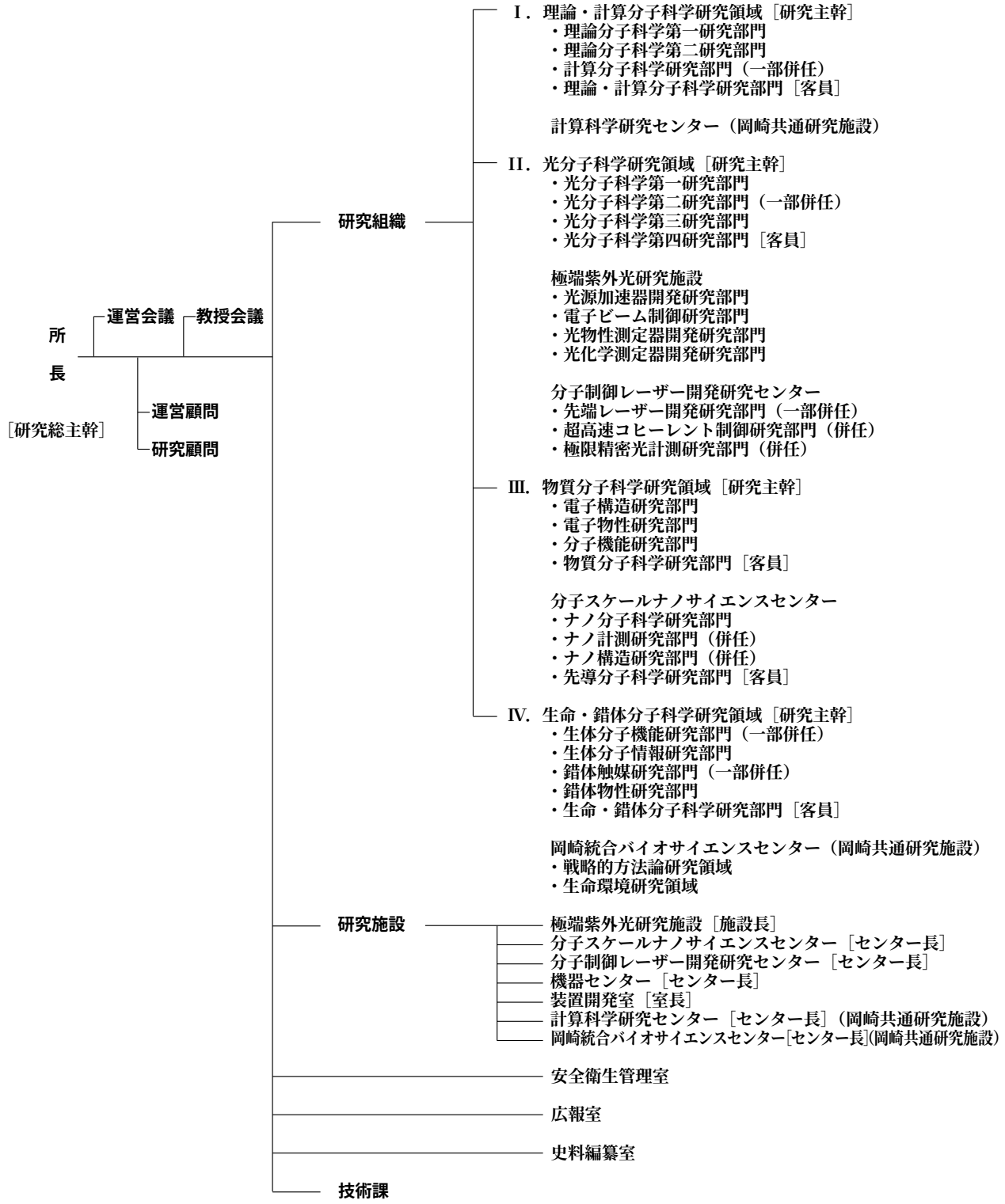
2010. 4. 1　第七代研究所長に大峯巖京都大学福井謙一記念研究センターリサーチリーダーが任命された。

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，①所長選考，②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①，②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①については，所長の諮問組織で審議するのは不適当なため，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②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）の最初の 3 年間は，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 名で運用することとした。

外国人運営顧問（2012 年度）

WOLYNES, Peter G.	米国ライス大学教授
WALMSLEY, Ian A.	英国オックスフォード大学副学長

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とおりである。

研究顧問（2012 年度）

FLEMING, Graham	カリフォルニア大学バークリ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 2012.4-2014.3）（◎：議長　○：副議長）

	朝倉清高	北海道大学触媒化学研究センター教授
	上村大輔	神奈川大学理学部教授
○	神取秀樹	名古屋工業大学大学院工学研究科教授
	河野裕彦	東北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
	寺嵜亨	九州大学大学院理学研究院教授
	水谷泰久	大阪大学大学院理学研究科教授
	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
	山内薫	東京大学大学院理学系研究科教授
	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
	加藤晃一	岡崎統合バイオサイエンスセンター教授
	加藤政博	極端紫外光研究施設教授
◎	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
	山本浩史	物質分子科学研究領域教授
	横山利彦	物質分子科学研究領域教授

2-4-4　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，助教候補者及び特任准教授（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会長より所長に答申され，所長は教授会議（後述）でその結果を報告し，可否の投票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はいるが，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（2012年度）（○：部会長）

神　取　秀　樹　（名工大院教授）	青　野　重　利　（統合バイオ教授）
佃　　達　哉　（東大院教授）	魚　住　泰　広　（分子研教授）
寺　嵜　　亨　（九大院教授）	大　島　康　裕　（分子研教授）
水　谷　泰　久　（阪大院教授）	○大　森　賢　治　（分子研教授）
森　　健　彦　（東工大院教授）	齊　藤　真　司　（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（2012年度）（○：委員長）

鹿野田　一　司　（東大院教授）	岡　本　裕　巳　（分子研教授）
北　川　　進　（京大特定拠点教授）	小　杉　信　博　（分子研教授）
河　野　裕　彦　（東北大院教授）	唯　　美津木　（分子研准教授）
武　田　　定　（北大院教授）	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（2012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　（理研先任研究員）

（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）　　小　杉　信　博　（分子研教授）
齊　藤　真　司　（分子研教授）　　村　橋　哲　郎　（分子研教授）
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当たっては，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	2012.10.2, 10.10, 10.12, 10.24~10.26
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	2013.1.23
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	—

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	委員会規則	2013.3.4
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		2012.10.2
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	2012.8.7, 2013.2.18
機器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。	センター長 センターの研究教育職員 センター以外の分子研の研究教育職員若干名 職員以外の研究者若干名	委員会規則	2012.8.30, 2013.3.7
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	2012.9.14
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	委員会規則 管理規則	2012.6.11, 12.13
図書委員会	購入図書の選定。他			―
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		―
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	2012.4.13, (メール審議) 7.31, 10.31, 2013.1.11 (持ち回り審議)
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		2012.4.11, 5.10, 6.5, 7.6, 9.3, 9.27, 11.1, 12.7, 2013.1.7, 3.6

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	2012.4.17, 5.15, 6.19, 7.17, 9.18, 10.16, 11.20, 12.18, 2013. 1.15, 2.19, 3.19
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	2012.9.7
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	2013.3.27
岡崎情報ネットワーク管理運営専門委員会	岡崎情報ネットワークの日常の管理。将来における岡崎情報ネットワークの整備，運用等について調査研究。	次長（技術担当） 教授１ 技術職員３ 室長が必要と認めた者１	委員会規則	2012.4.26, 6.21, 9.13, 11.15, 2013.1.23, 3.4
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	2012.8.7, 2013.1.31
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	2012.9.5
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	2013.2.22
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	2012.4.17, 5.15, 6.19, 7.17, 8.22, 9.18, 10.16, 11.20, 12.18, 2013.1.15, 2.19, 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	2012.9.18
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	2012.7.3, 12.14, 2013.2.27

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	2013.2.20
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	2012.8.2, 2013.3.13
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	2012.7.31
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	2012.6.26
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	2012.10.19
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	2012.7.23
岡崎南ロータリークラブとの交流委員会	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		2012.6.5, 6.12, 8.2, 11.6, 11.20
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	2012.11.28
アイソトープ実験センター山手地区実験施設放射線安全委員会	山手地区実験施設における放射線障害の防止に関し必要な事項を企画審議する。	研究教育職員３ 技術課長	センター山手地区実験施設放射線障害予防規則	2012.11.28
岡崎山手地区連絡協議会	岡崎山手地区における建物の円滑な管理及び環境整備等を協議する。	教授３ 技術課長	協議会規則	2012.5.9, 7.11, 9.12, 11.14, 12.19, 2013.1.9, 3.13
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	2012.7.30, 11.21, 2013.3.14
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	2013.3.13
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	2012.5.31, 10.25, 2013.2.28

設置根拠の欄　岡崎３機関が定めた規則，略式で記載。記載なきは規定文なし。

2-5　構成員

2-5-1　構成員*

大　峯　　巖	所　長
小　杉　信　博	研究総主幹（併）
長　倉　三　郎	特別顧問，名誉教授
井　口　洋　夫	特別顧問，名誉教授
伊　藤　光　男	特別顧問，名誉教授
茅　　幸　二	特別顧問，名誉教授
中　村　宏　樹	特別顧問，名誉教授
岩　田　末　廣	名誉教授
岩　村　　秀	名誉教授
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
田　中　晃　二	名誉教授
永　瀬　　茂	名誉教授
西　　信　之	名誉教授
花　崎　一　郎	名誉教授
平　田　文　男	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）　齊　藤　真　司

理論分子科学第一研究部門

信　定　克　幸	准教授
安　池　智　一	助　教
飯　田　健　二	研究員（IMS フェロー）
柳　井　　毅	准教授
倉　重　佑　輝	助　教
CHALUPSKY, Jakub	研究員（IMS フェロー）

理論分子科学第二研究部門

田　中　康　寛	助　教

計算分子科学研究部門

齊　藤　真　司	教　授
BAGCHI, Biman	外国人研究職員（Indian Institute of Science） '12.4.15 ～ 7.15
金　　鋼	助　教
小　野　純　一	研究員（IMS フェロー）
東　　雅　大	学振特別研究員
野　田　真　史	特任研究員

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	特任助教（分子科学研究所特別研究員）
奥　村　久　士	准教授（兼）（計算科学研究センター）
伊　藤　　暁	助　教
森　　義　治	特任助教（分子科学研究所特別研究員）
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）
石　村　和　也	特任研究員
榮　　慶　丈	特任研究員（名古屋大学大学院理学研究科）
河　津　　励	特任研究員（金沢大学理工研究域）
NIE, Qingmiao	特任研究員（名古屋大学大学院工学研究科）
西　澤　宏　晃	特任研究員（早稲田大学理工学術院）
水　口　朋　子	特任研究員（京都大学化学研究所）

理論・計算分子科学研究部門（客員研究部門）

長谷川　淳　也	教　授（北大触媒化学研究センター）
安　藤　耕　司	准教授（京大院理）
森　下　徹　也	准教授（産総研）
鹿　野　　豊	特任准教授（若手独立フェロー）
石　﨑　章　仁	特任准教授（若手独立フェロー）

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	特任助教（分子科学研究所特別研究員）
小　若　泰　之	研究員
大　島　康　裕	教　授
水　瀬　賢　太	助　教
藤　原　正　規	特任助教（分子科学研究所特別研究員）
林　　雅　人	研究員

光分子科学第二研究部門

大　森　賢　治	教　授
武　井　宣　幸	助　教
後　藤　　悠	研究員
SOMMER, Christian	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
湯　澤　勇　人	研究員（IMS フェロー）
片　柳　英　樹	助　教

光分子科学第四研究部門（客員研究部門）

近　藤　　寛	教　授（慶應大理工）
野　田　　進	教　授（京大院工）

伊　藤　　敦　　教　授（東海大工）
坪　内　雅　明　　准教授（日原研）

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
髙　木　康　多	助　教
才　田　隆　広	特任研究員
WANG, Heng	特任研究員
唯　　美津木	准教授
邨　次　　智	助　教
MAITY, Niladri	研究員
ZHANG, Shenghong	研究員
KITYAKARN, Sutasinee	研究員
早　出　　彩	特任研究員

電子物性研究部門

山　本　浩　史	教　授
須　田　理　行	助　教
中　村　敏　和	准教授
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
XU, Yanhong	研究員
NI, Huagang	特別訪問研究員
西　村　勝　之	准教授
飯　島　隆　広	助　教
谷　生　道　一	特任助教（分子科学研究所特別研究員）

物質分子科学研究部門（客員研究部門）

安　倍　　学	教　授（広大院理）
加　藤　立　久	教　授（京大高等教育機構）
朝　倉　哲　郎	教　授（東京農工大工）

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）
加　藤　晃　一	教　授（兼）（岡崎統合バイオサイエンスセンター）
山　口　拓　実	助　教
藤　井　　浩	准教授（兼）（岡崎統合バイオサイエンスセンター）
倉　橋　拓　也	助　教

生体分子情報研究部門

秋　山　修　志	教　授
向　山　　厚	助　教

古　谷　祐　詞　　准教授
木　村　哲　就　　助　教
塚　本　寿　夫　　特任助教（分子科学研究所特別研究員）
稲　熊　あすみ　　研究員

錯体触媒研究部門
魚　住　泰　広　　教　授
大　迫　隆　男　　助　教
浜　坂　　剛　　助　教
永　長　　誠　　研究員
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
湯　山　喜　也　　特別訪問研究員
大　野　　綾　　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
村　橋　哲　郎　　教　授
山　本　浩　二　　助　教
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）
笹　井　宏　明　　教　授（阪大産業科学研）
植　村　卓　史　　准教授（京大院工）
須　藤　雄　気　　准教授（名大院理）

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
新　井　秀　実　　研究員

電子ビーム制御研究部門
大　東　琢　治　　助　教
許　斐　太　郎　　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
KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika　特別訪問研究員
YOUSEF, Ibraheem　特別訪問研究員
飯　塚　拓　也　　特別協力研究員

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

金　子　　靖	特任専門員

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
黒　田　康　弘	研究員
永　田　　央	准教授
櫻　井　英　博	准教授
東　林　修　平	助　教
杉　石　露　佳	研究員(IMS フェロー)
森　田　悠　紀	研究員
DHITAL, Raghu Nath	研究員
PANDA, Gautam	学振外国人招へい研究者　'11.9.26 ～ '12.7.25
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

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
KAUSAS, Arvydas	研究員
佐　藤　庸　一	特任研究員
常　包　正　樹	特任研究員
BHANDARI, Rakesh	特任研究員
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)　魚　住　泰　広

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	特任助教(分子科学研究所特別研究員)	
北　辻　千　展	特任研究員	
桑　島　邦　博	教　授	
中　村　　敬	特任助教(分子科学研究所特別研究員)	
CHEN, Jin	専門研究職員(特任助教)	
藤　井　　浩	准教授	
倉　橋　拓　也	助　教(兼)	
CONG, Zhiqi	研究員	

生命環境研究領域

加　藤　晃　一	教　授	
山　口　拓　実	助　教(兼)	
矢　木　真　穂	特任助教	
柳　　浩太郎	研究員(IMS フェロー)	
植　草　義　徳	研究員	
BOONSRI, Pornthip	特別協力研究員	

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	
PIECUCH, Piotr	外国人研究職員（Michigan State University）	'12.7.13 ～ 8.15 '13.2.1 ～ 3.31
福　田　良　一	助　教(兼)	
奥　村　久　士	准教授	
伊　藤　　暁	助　教(兼)	
石　田　干　城	助　教(兼)	
大　野　人　侍	助　教	
石　谷　隆　広	特任専門員	

技術課 課長 鈴井光一

機器開発技術班 班長 青山正樹

機器開発技術一係

水谷伸雄	係長
矢野隆行	主任

機器開発技術二係

近藤聖彦	主任
高田紀子	技術職員

電子機器・ガラス機器開発技術班 班長 吉田久史

電子機器開発技術係

内山功一	主任
豊田朋範	技術職員

ガラス機器開発技術係

永田正明	係長

光技術班 班長 堀米利夫

極端紫外光技術一係

蓮本正美	係長
近藤直範	技術職員

極端紫外光技術二係

山崎潤一郎	係長
林　憲志	主任

極端紫外光技術三係

酒井雅弘	主任

光計測技術係

岡野泰彬	技術職員
千葉　寿	技術職員（委嘱）（岩手大技術部）

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　髙　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

＊　整理日付は2013年1月1日現在。ただし，外国人研究者で2012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。

(2)　創立以来の人事異動状況（2013 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	47	76	260	154	2	13	215
転出者数	6	35	61	220	118	0	7	209
現　　員	1	12(2)	15	40	36(1)	2	6	6

（　）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	142	150
現　　員	8	5

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	12

＊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

2013.1.1

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		1(4)	2(3)	7	10(7)		10(7)
光分子科学研究領域		4(3)	0(2)	6	10(5)		10(5)
物質分子科学研究領域		2(3)	4	6	12(3)		12(3)
生命・錯体分子科学研究領域		3(4)	2(5)	9	14(9)		14(9)
研究施設		2(7)	7(2)	12	21(9)		21(9)
技術課						36(1)	36(1)
小計	1	12(21)	15(12)	40	68(33)	36(1)	104(34)
岡崎統合バイオサイエンスセンター		3	1	(3)	4(3)		4(3)
計算科学研究センター		1(1)	1	(4)	2(5)		2(5)
合計	1	16(22)	17(12)	40(7)	74(41)	36(1)	110(42)

（　）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	2008 年度	2009 年度	2010 年度	2011 年度	2012 年度
人件費	1,187,815	1,207,802	1,224,363	1,187,453	1,126,099
運営費，設備費	2,200,634	2,090,047	2,125,872	2,983,850	2,133,268
施設費	0	607,060	575,589	0	31,269
合計	3,388,449	3,904,909	3,925,824	4,171,303	3,290,636

寄付金

区　分	2008 年度	2009 年度	2010 年度	2011 年度	2012 年度
件数（件）	62	43	4	10	11
金額（千円）	16,455	26,770	12,870	7,409	13,340

共通研究施設を除く

科学研究費補助金

区　分	2008 年度	2009 年度	2010 年度	2011 年度	2012 年度
件数（件）	64	74	64	58	62
金額（千円）	291,835	334,961	381,763	312,600	236,800

岡崎共通研究施設を除く
間接経費を含む
分担金を除く，補助金課題は交付決定額で集計
基金及び一部基金化課題は，当該年度の受領額を計上

2012 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		0	0	0
新学術領域研究	領域	3	2	5
新学術領域研究	課題	0	0	0
特定領域研究		0	0	0
挑戦的萌芽研究		10	2	12
若手研究	（S）	0	0	0
若手研究	（A）	6	0	6
若手研究	（B）	13	1	14
基盤研究	（S）	1	0	1
基盤研究	（A）	4	0	4
基盤研究	（B）	8	3	11
基盤研究	（C）	9	0	9
特別研究員奨励費		3	0	3
特別研究員奨励費	外国人	1	0	1
研究活動スタート支援		3	1	4
奨励研究		1	0	1
合計		62	9	71

＊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		0	0	0
新学術領域研究	領域	9,600	25,000	34,600
新学術領域研究	課題	0	0	0
特定領域研究		0	0	0
挑戦的萌芽研究		14,400	3,000	17,400
若手研究	（S）	0	0	0
若手研究	（A）	37,900	0	37,900
若手研究	（B）	17,900	600	18,500
基盤研究	（S）	11,000	0	11,000
基盤研究	（A）	41,400	0	41,400
基盤研究	（B）	32,300	14,100	46,400
基盤研究	（C）	12,300	0	12,300
特別研究員奨励費		1,600	0	1,600
特別研究員奨励費	外国人	600	0	600
研究活動スタート支援		3,300	1,200	4,500
奨励研究		500	0	500
合計		182,800	43,900	226,700

＊間接経費を除く
＊分担金を除く
＊補助金課題は交付決定額で集計
＊基金及び一部基金化課題は，当該年度の受領額を計上

共同研究

区　分	2008 年度	2009 年度	2010 年度	2011 年度	2012 年度
件数（件）	21	15	10	5	9
金額（千円）	51,430	33,292	29,982	27,730	41,025

2012 年 12 月 31 日現在

受託研究

区　分	2008 年度	2009 年度	2010 年度	2011 年度	2012 年度
国	5	4	4	4	4
独立行政法人	15	20	22	22	24
大学等	3	3	1	1	1
民間企業他	0	0	0	0	1
合計件数（件）	23	27	27	27	30
合計金額（千円）	813,550	755,710	919,914	828,934	880,026

（岡崎共通研究施設を含む）
2012 年 12 月 31 日現在

2-7　岡崎共通施設

2-7-1　岡崎情報図書館

岡崎情報図書館は機構（岡崎３機関）の共通施設として３研究所の図書，雑誌等を収集・整理・保存し，機構（岡崎３機関）の職員や共同利用研究者等の利用に供している。

現在（2012.12）岡崎情報図書館は雑誌 1,504 種（和 292，洋 1,212），単行本 95,665 冊（和 13,094，洋 82,571）を所蔵している。

また，学術雑誌の電子ジャーナル化の趨勢にいち早く対応するよう努めており，現在，機構（岡崎３機関）として約 9,000 誌の電子ジャーナルが機構内部からアクセスできるようになっている。

岡崎情報図書館では専用電子計算機を利用して，図書の貸出しや返却の処理，単行本並びに雑誌の検索等のサービスを行っている。このほか Web of Science，SciFinder 等のデータベース検索や学術文献検索システムによるオンライン情報検索のサービスも行っている。また，ライブラリーカードを使用することによって，岡崎情報図書館は 24 時間利用できる体制になっている。

2-7-2　岡崎コンファレンスセンター

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

岡崎３機関内の公募によって「岡崎コンファレンスセンター」と命名された建物は，延べ床面積 2,863 m^2，鉄筋コンクリート造２階建てで，大型スクリーン及びAV機器等を備えた 200 余名が参加可能な大会議室，120 名の中会議室，100 名の小会議室などが設けられている。中・小会議室はそれぞれ会議等の目的に応じて２分割して使用することもできる。

2-7-3　岡崎共同利用研究者宿泊施設

自然科学研究機構岡崎３機関には，日本全国及び世界各国の大学や研究機関から共同利用研究等のために訪れる研究者のために三島ロッジ及び明大寺ロッジという共同利用研究者宿泊施設がある。施設概要は下記のとおりで，宿泊の申込みは，訪問する研究室の承認を得て，web 上の専用ロッジ予約システムで予約する。空室状況も同システムで確認することができる。また，明大寺ロッジでは総合研究大学院大学に所属する留学生用にも８室を割り当てている。

三島ロッジ	室数　シングル：60室　ツイン：14室　ファミリー：20室
	共同設備：炊事場，洗濯室，公衆電話，情報コンセント
明大寺ロッジ	室数　シングル：14室　ファミリー：３室

2-7-4　職員会館

職員会館は機構（岡崎３機関）の福利厚生施設として建てられ，多様な面にて日常の活動に供している。

地下	トレーニングルーム
１階	食堂
２階	大会議室，特別食堂，生協

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，研究所にお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，レーザー素子・レーザー利用装置，環境調和型触媒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23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８件（他機関から年度中に譲渡されたものを含む，実出願７件），平成24年度は，個人有０件，機構有４件（実出願３件）であった（平成25年１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，所外の分子科学及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及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年度からは，このような取組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諸国の拠点大学及び公募で選考された若手研究者と大学院学生を招へいし，人材の育成に努めている。

分子科学研究所は，また大学共同利用機関を基盤機関とする総合研究大学院大学・物理科学研究科に属し，構造分子科学専攻と機能分子科学専攻の二つの大学院専攻を持ち，他の大学院では整備されていない各種の高度な大型の研究施設・実験設備を活用して特色のある大学院教育を行っている。総合研究大学院大学としての分子科学研究所の２専攻では，分子科学における最先端の基礎研究を行うとともに，学生の研究課題に応じて，複数指導体制を採用し，研究活動に密着した学生セミナー，国際シンポジウム，共同研究等を通して若手研究者育成のための大学院教育を行っている。さらに，他大学の大学院生や学部学生に対しても，それぞれ受託大学院生（特別共同利用研究員制度による），体験入学者として受け入れ，先端的な研究施設を用いて積極的な教育研究活動を行っている。総合研究大学院大学への入学資格は，修士の学位をもつ方，大学を卒業して企業等で研究に従事し，修士の学位と同等と認められる方を対象者とした博士後期課程に加えて，平成18年度より学部卒を対象とした５年一貫制博士課程を導入している。入学試験は原則として毎年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　　分子及びその集合体（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及び機能を量子力学，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，擬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，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

2，外場誘起非線形現象，秩序形成及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　　分子及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に関する理論・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（若手独立フェロー）

研究目的　　多重階層分子システムの物性と動力学に関する理論・計算科学的研究

研究課題　1，ミクロスケールとマクロスケールをつなぐ理論基盤の探索

2，分子及び分子集合体における光物性の理論的研究

3，凝縮相化学反応過程の量子動力学理論

4，分子システムの環境適応性の分子理論

理論・計算分子科学研究部門（客員）

研究目的　1，複雑分子系の電子状態と化学反応に関する理論的研究

2，分子及び分子集合体における量子移動過程に関する理論的研究

3，分子動力学（MD）計算によるナノ物質の物性解明および新しい MD 手法の開発

研究課題　1, 凝集系における分子の励起状態を記述する波動関数理論の開発
2, 酵素と触媒の反応機構に関する理論的研究
3, 生体分子における長距離電子移動経路解析
4, 水素ダイナミクスにおける量子効果の理論とシミュレーション
5, MD 計算における自由エネルギー計算手法の改良とナノ物質への応用

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，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，並びに，分子構造や反応ダイナミックス研究への適用

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・分子及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，それに関る動的プロセスの解明及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,「フォトニック結晶」「フォトニックナノ構造」の物理的基礎と応用
2, 放射光X線を用いた表面化学反応の研究
3, 放射線の生物作用におけるフリーラジカルの研究
4, X線顕微鏡の開発とその生物観察への応用

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・テラヘルツ分光及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ニクスの研究
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奇磁性薄膜の創製・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　　分子性固体の物性と機能

研究課題　1, 分子を使った新しいエレクトロニクスの開発

2, 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た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：「バッキーボウル」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。新しい錯体合成法を開発することで新たな結合構造を持つ金属錯体を創製し，その機能を開拓する。また，金属錯体の特性を生かしてエネルギー・環境問題軽減のための高効率有機化合物変換反応，水中での有機化合物の分子変換，無機小分子の変換と機構解明を行う

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

6, 複合糖質およびタンパク質の構造・ダイナミクス・相互作用に関する研究

生体分子情報研究部門

研究目的　溶液散乱と結晶構造解析を相補的に駆使した動的構造解析，また赤外，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の開発により，生物時計システムや細胞内情報伝達を担う膜タンパク質の分子機構を解明する

研究課題　1，タンパク質時計の計時機構解明

2，溶液散乱と結晶構造解析を相補的に駆使した動的構造解析

3，赤外差分光計測による膜タンパク質の構造機能相関解明

4，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

5，イオンチャネル及び 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　新しい結合構造を持つ金属錯体の設計と合成，金属錯体を反応場とする有機分子や無機分子の高効率変換

研究課題　1，新しい結合構造を持つ無機，及び有機金属錯体の合成と構造解明

2，有機金属錯体の素反応機構解明

3，金属錯体を用いた小分子の高効率変換反応の開発

4，エネルギーの高効率利用を指向した金属触媒反応の開発

生命・錯体分子科学研究部門（客員）

研究目的　1，金属と有機配位子により高機能錯体触媒やナノ多孔性金属錯体を合成し，それらを合成場や集積場として複素環の直接化学修飾や高分子材料の精密構造制御合成を行う

2，レチナールを発色団とした光受容分子の機能発現機構の解明とそれを基盤とした光操作ツールの開発

研究課題　1，レチナールタンパク質分子の単離・精製・分光解析と，同タンパク質分子による細胞・個体の光操作

2，金属錯体を用いた新規 C–H 結合活性化反応の探索並びに金属錯体ナノ空間を用いた精密高分子合成

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-III 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及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～ 23 年度には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，平成 24 年度以降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受託し，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，電子スピン共鳴，顕微 Raman，FT 遠赤外分光などの共通機器に加え，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，①テラヘルツから軟Ｘ線にいたる先端光源の開発；②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ニ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，新規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，及び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及び非機械加工を含むマイクロ・ナノ加工技術の高度化，並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並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。さらに，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。これらの活動に加え，「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム分野２（新物質・エネルギー創成）」のプロジェクト研究に対し，研究の場・計算機資源を提供する。

岡崎統合バイオサイエンスセンター（岡崎共通研究施設）

目　的　　岡崎統合バイオサイエンスセンターは，分子科学，基礎生物学，生理科学などの学際領域にまたがる諸問題に対し，総合的な観点と方法論を適用，駆使するとともに，生命現象の基本に関する諸問題を分子レベルから，細胞，組織，個体レベルまで統合的に捉えた独創的研究により，新しいバイオサイエンスを切り開くことを目的としている。

3-3　共同利用研究

3-3-1　共同利用研究の概要

大学共同利用機関の重要な機能として，所外の分子科学及び関連分野の研究者との共同利用研究を積極的に推進している。そのために共同利用研究者宿泊施設を用意し，運営会議で採択されたテーマには，旅費及び研究費の一部を支給する。次の６つのカテゴリーに分類して実施している。(公募は前期・後期（年２回)，関係機関に送付)。

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 24 年度は，協力研究の特別枠に東北大学をはじめ，４研究室，19 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)　岡崎コンファレンス：将来展望，研究の新展開の議論を主旨とする小規模な国際研究集会。

(6)　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。

(7)　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　2012 年度の実施状況

(1)　課題研究

課　題　名	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	分子科学研究所	加藤　政博

(2)　協力研究

課　題　名（通年）	代　表　者	
二成分金属ナノクラスターの構造及び物性の解明	東京理科大学理学部	根岸　雄一
非対象分子型量子ドットセルオートマトンの動作解析と理論設計	工学院大学基礎・教養教育部門	徳永　　健
対イオン共有による電解質溶液中の同符号巨大分子間相互作用	九州大学大学院理学研究院	秋山　　良
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
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とナノスケール光導波路の試作	埼玉大学大学院理工学研究科	坂本　　章
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
時間分解テラヘルツ分光法による分子の低振動ダイナミクスの実時間観測と機構解明	(独)日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門	近藤　正人
励起三重項分子の構造とスピンダイナミクス	京都大学大学院理学研究科	馬場　正昭
透過型軟Ｘ線 XAFS による反応活性界面の研究	慶應義塾大学理工学部	近藤　　寛
ナノカーボンにおける光誘起転位・解離反応の動力学シミュレーション	東北大学大学院理学研究科	河野　裕彦
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
高効率 AlGaAs/SiO_2 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

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	鶴町　徳昭
コヒーレントシンクロトロン放射光の電場検出	横浜国立大学大学院工学研究院	片山　郁文
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
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
アルカリドープしたエキゾチックナノカーボンの *in situ* 高分解能光電子分光	東京工業大学原子炉工学研究所	尾上　順
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	名古屋工業大学若手研究イノベータ養成センター	宮崎　秀俊
新規テトラセン誘導体を用いた共蒸着 p-i-n 型有機薄膜太陽電池	東京大学大学院理学系研究科	松尾　豊
希土類－有機ハイブリッド集光アンテナのナノスペース配列	島根大学教育学部	西山　桂
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
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
金クラスターで標識した DNA の電子顕微鏡によるシーケンシング	自然科学研究機構生理学研究所	永山　國昭
固体担持触媒を用いたい有機合成反応の開発と応用	琉球大学理学部	鈴鹿　俊雅

課　題　名（前期）	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
水，水溶液，および生体高分子における動的相互作用の解明	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
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
量子スピン系の ESR 測定及び強磁場磁化測定	神戸大学自然科学系先端融合研究環分子フォトサイエンス研究センター	太田　仁
周期分極反転素子の短パルス波長変換応用	東京農工大学大学院工学研究院	芦原　聡
オージェ終状態を選別した内殻励起 *cis*- ヘキサフルロシクロブタンの解離過程	広島大学大学院理学研究科	岡田　和正
光電子分光による和鉄（日本刀）の酸化プロセスのその場観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤　孝寛
低分子型有機薄膜太陽電池の性能向上に関する研究	立命館大学理工学部	服藤　憲司
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
グループⅡ型シャペロニンの構造変化及びタンパク質フォールディングの速度論的解析	東京農工大学大学院共生科学技術研究院	養王田正文
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	太田　信廣
気相イオンの極低温冷却と NMR 分光への応用	神戸大学	冨宅喜代一
組換え Gaussia Luciferase 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
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
OspA の巻き戻り機構の解明	山形大学大学院理工学研究科	真壁　幸樹
金薄膜上に化学吸着させたクラウンエーテル—金属イオン包接錯体の赤外分光	広島大学大学院理学研究科	井口　佳哉
多核サンドイッチ化合物およびその類縁体の合成と性状解明	大阪大学大学院工学研究科	生越　専介
プロテアソームの分子集合と蛋白質分解機構	富山大学先端ライフサイエンス拠点	伊野部智由
pH 依存的な ERp44-Ero1α 間の相互作用制御機構の解明	九州大学生体防御医学研究所	稲葉　謙次
電子励起状態計算を用いた液体・固体の遠紫外スペクトルの帰属研究	関西学院大学理工学部	尾崎　幸洋
有機化合物を主体とする分子性キラル磁性体の合成及び電気磁気光学効果の検証	城西大学理学部	秋田　素子
近赤外色素の物性研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宇野　英満
ポルフィリンダブルデッカー型単分子磁石の分子配列評価	大阪大学大学院理学研究科	田中　大輔
蛍光偏光解消を利用したヘム依存性制御蛋白質の機能解析	北海道大学大学院理学研究院	石森浩一郎
DMRG 法による化学反応過程の理論的研究	京都大学福井謙一記念研究センター	諸熊　奎治
設計した金属タンパク質の CO_2 還元機能の測定	名古屋工業大学工学部	田中　俊樹

[共同利用研究特別プロジェクト（震災対応）]

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
新寄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

課　題　名（後期）	代　表　者	
水，水溶液，および生体高分子における動的相互作用の解明	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
遠紫外における高分子骨格の電子励起状態の研究	関西学院大学理工学部	尾崎　幸洋
非線形量子ダイナミクスとデコヒーレンスとの関係	茨城大学工学部	和田　達明
高励起における励起子ポラリトン凝縮の変遷	情報・システム研究機構国立情報学研究所	堀切　智之

人工原子と量子細線を用いた人工分子設計のためのモデリング	岡山大学大学院自然科学研究科	廣川　真男
ラゲールガウスモードを用いた弱測定	高知工科大学システム工学群	小林　弘和
気相イオンの極低温冷却と NMR 分光への応用	神戸大学	冨宅喜代一
Extended Electronic States in Crystalline Assemblies of Nucleosides	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	RIEDLEIN, Rainer
質量選別・運動量画像計測法による *cis*- ヘキサ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
有機化合物を主体とする分子性キラル磁性体の合成及び電気磁気光学効果の検証	城西大学理学部	秋田　素子
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
量子スピン系の ESR 測定及び強磁場磁化測定	神戸大学自然科学系先端融合研究環分子フォトサイエンス研究センター	太田　　仁
分子の内殻イオン化・オージェ過程の研究	新潟大学理学部	彦坂　泰正
オージェ終状態を選別した内殻励起 *cis*- ヘキサフルロシクロブタンの解離過程	広島大学大学院理学研究科	岡田　和正
光電子分光による和鉄（日本刀）の酸化プロセスのその場観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤　孝寛
サマリウム系価数揺動化合物における光学特性の研究	名古屋大学大学院理学研究科	井村敬一郎
赤外分光法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
低分子型有機薄膜太陽電池の性能向上に関する研究	立命館大学理工学部	服藤　憲司
ポルフィリンダブルデッカー型単分子磁石の分子配列評価	大阪大学大学院理学研究科	田中　大輔
近赤外色素の物性研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宇野　英満
塩化ノルボルネンの環化三量化反応における立体制御機構の解明	立教大学理学部	山中　正浩
多核サンドイッチ化合物およびその類縁体の合成と性状解明	大阪大学大学院工学研究科	生越　専介
ヘム結晶化酵素の分子機構解明	大阪大学大学院理学研究科	石川　春人
OspA の巻き戻り機構の解明	山形大学大学院理工学研究科	真壁　幸樹
組換え Gaussia Luciferase 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
プロテアソームの分子集合と蛋白質分解機構	富山大学先端ライフサイエンス拠点	伊野部智由
小胞体品質管理に関与するマンノシダーゼ様タンパク質の機能発現機構の解明	京都大学再生医科学研究所	細川　暢子
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	太田　信廣
コヒーレントテラヘルツ光発生における励起光源のパルス幅最適化	(独)理化学研究所テラヘルツ光研究プログラム	林　伸一郎
Yb:YAG 結晶の光学的性質の研究	千葉大学環境リモートセンシング研究センター	竹内　延夫
ピコ秒レーザーパルスエネルギー付加による超音速流れ制御に関する基礎研究	名古屋大学大学院工学研究科	佐宗　章弘
ショートパルスレーザーを用いたレーザー点火に関する研究	大阪大学大学院工学研究科	赤松　史光
高輝度マイクロチップレーザーのプラズマ計測応用	自然科学研究機構核融合科学研究所	安原　　亮
生体内銅イオンの輸送を担うタンパク質間相互作用の制御メカニズム	慶應義塾大学理工学部	古川　良明
塩基を非天然骨格に導入した人工核酸の立体構造解析	名古屋大学大学院工学研究科	浅沼　浩之
水中での反応における触媒活性種 3R システム構築	大阪工業大学工学部	大高　　敦
超広帯域コヒーレント赤外光を使った高分子の分子振動分光	香川大学工学部	中西　俊介
ZnO ナノロッド中の H の固体 NMR による評価	大阪工業大学	佐々　誠彦
金属ナノパーティクルを用いる高活性触媒の開発	奈良工業高等専門学校	嶋田　豊司
紫外光電子分光測定によるバナジウム酸化膜の電子状態に関する研究	東海大学工学部	沖村　邦雄
金ナノ粒子・シリコンナノポア複合構造の光学的評価	慶應義塾大学理工学部	斎木　敏治
設計した金属タンパク質の CO_2 還元機能の測定	名古屋工業大学工学部	田中　俊樹
複合パルスを用いたスピン・エコー法の改良	近畿大学大学院総合理工学研究科	坂東　将光
金薄膜上に化学吸着させたクラウンエーテル—金属イオン包接錯体の赤外分光	広島大学大学院理学研究科	井口　佳哉
電気化学的測定法を用いたヘムセンサータンパク質の機能解析	東京工業大学大学院生命理工学研究科	朝倉　則行
有機半導体のキャリアスピンダイナミクス	新潟大学大学院自然科学系	生駒　忠昭
pH 依存的な ERp44-Ero1α 間の相互作用制御機構の解明	九州大学生体防御医学研究所	稲葉　謙次
ヘム取込み系におけるヘム結合タンパク質の構造機能相関解明	大阪大学大学院工学研究科	林　　高史
銅タンパク質生合成における翻訳後修飾反応の分子機構解明	大阪大学大学院工学研究科	伊東　　忍

[共同利用研究特別プロジェクト（震災対応）]

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
新寄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

(3) 研究会

① 【アジア連携分子研研究会】
溶液・ソフトマターの新局面：実験及び理論研究手法の開拓と新規物性探索への展開
Recent Development of Experimental and Theoretical Methodology on Liquids and Soft Matters: Basic Properties and Applications to Novel Devices
2012 年 6 月 1 日（金）～ 2 日（土） 分子科学研究所　研究棟 201 号室

6 月 1 日（金）

13:00　趣旨説明　西山　桂 （島根大教）
座長　墨　智成
セッション (1)　計算科学のいま：方法論の開発から応用へ

13:10　宮田竜彦（愛媛大院理工）
MD/3D-RISM 法を用いた自由エネルギー計算

13:35　横川大輔（名大院理）
量子化学的手法に基づく分子間ポテンシャルの構築

14:00　奥村久士（分子研）
マルチバーリック・マルチサーマル分子動力学シミュレーションによるタンパク質の温度・圧力変性

14:25　ポスター発表 (1)　うち冒頭５分は口頭プレビュー
座長　高椋利幸
セッション (2)　溶液の構造・反応場としての利用

14:50　冨田恒之（東海大理）
機能性セラミックス合成のための溶液プロセス

15:15　佐藤高彰（信州大繊維）
小角散乱法を用いた蛋白質溶液への多面的アプローチ――蛋白質間相互作用から立体構造予測まで――
座長　加藤　稔

15:40　吉田亨次（福岡大理）
細孔水の構造とダイナミクス

16:05　高椋利幸（佐賀大院工）
分子性液体の特性に依存したイオン液体の会合体形成

16:30　ポスター発表 (2)
座長　佐藤高彰
セッション (3)　レーザーを使って観る・作る

17:00　塚田真也（島根大教育）
不規則性を有する強誘電体の相転移～光散乱による観測～

17:25　城田秀明（千葉大院融合科学）
フェムト秒ラマン誘起カー効果分光法でみるテラヘルツ領域の分子運動
座長　西山　桂

17:50　三浦篤志（台湾・交通大）
光圧が誘起する分子集合・結晶化の時空間分解分光とイメージング

6 月 2 日（土）

座長　勝本之晶
セッション (4)　溶液・ソフトマターの基礎物性と機能発現

9:30　西山　桂（島根大教育）
溶液中における小さな有機分子の自己組織化を利用した発光デバイス合成プロセス

9:55　山口　毅（名大院工）
ポリマー系電解液のワルデン則：緩和スペクトルからのアプローチ

10:20　原田　聖（島根大教育）
キラル希土類錯体の円偏光発光特性評価と新規偏光発光材料への応用
座長　吉田亨次
セッション (5)　高分子から生体系まで

11:05　勝本之晶（広島大院理）
アクリルアミド系高分子の微細構造と巨視的溶液物性の相関

11:30　加藤　稔（立命館大薬）
タンパク質の構造物性――モデルペプチドの高圧研究からのアプローチ
座長　吉田紀生
セッション (6)　生体系のこれから

13:30　原野雄一（阪大蛋白研）
生体分子の水和熱力学量計算に向けた形態計測法的アプローチ

13:55　墨　智成（豊橋技科大院工）
バクテリア Ⅳ 型線毛モーターの粘着脱離動力学

座長　原野雄一

14:20　伊藤　暁（分子研）
クーロンレプリカ交換法の Aβ(29-42) への応用

14:45　吉田紀生（九大院理）
3D-RISM による KcsA チャネル中のカチオン結合モード解析

15:10　吉田紀生・西山　桂
会議総括――溶液・ソフトマター研究の将来展望――

② 【分子研研究会】レーザー分光および磁気測定による分子構造探求の新展開
2012 年 7 月 30 日（月）～ 31 日（火） 分子科学研究所　研究棟 201 号室

7 月 30 日（月）

13:00 - 13:10　馬場正昭（京大理）
「 Opening Address 」

13:10 - 13:30　大島康裕（分子研）
「レーザー分光および磁気測定による分子構造探求の新展開」

13:30 - 13:50　国重沙知（京大院理）
「ベンゼン重水素置換異性体の高分解能レーザー分光」

13:50 - 14:10　林　雅人（分子研）
「ベンゼンを含むクラスターの高分解能紫外分光」「ベンゼンを含むクラスターの高分解能紫外分光」

司会　水瀬賢太

14:10 - 14:30　三枝洋之（横浜市大院生命ナノシステム科学）
「気相振動分光法による核酸塩基分子の立体構造解析」

14:30 - 14:50　飯森俊文（北大電子科学研究所）
「レーザー光による有機導体の電気伝導と磁化における光誘起変化」

14:50 - 15:10　藤田 渉（首都大院理工）
「有機分子磁性体における磁気相転移と分子構造変化」

15:10 - 15:30　石元孝佳（九大稲盛フロンティア研究センター）
「ベンゼン分子の分光定数と H/D 同位体効果」

Coffee Break

司会　石元孝佳

15:50 - 16:10　川島雪生（横浜市大院生命ナノシステム科学）
「水六量体アニオンクラスターの徐冷法によるシミュレーション」

16:10 - 16:30　小山田隆行（横浜市大院生命ナノシステム科学）
「ビリアル定理に基づいた多成分系分子軌道法による陽電子化合物の研究」

16:30 - 16:50　山田健太（横浜市大院生命ナノシステム科学）
「ab initio QM/MM 法における効率的な長距離静電相互作用計算のための仮想点電荷エワルド法」

17:10 - 17:30　立川仁典（横浜市大院生命ナノシステム科学）
「量子多成分系分子理論の最近の展開 : 量子・熱ゆらぎを考慮した低障壁水素結合系の理論的解明」

17:30 - 17:50　長嶋雲兵（産総研ナノシステム研究）
「ゼオライト鋳型炭素の水素吸着サイトの温度依存性」

18:00 - 20:00　懇親会

7 月 31 日（土）

司会 加藤立久

9:00 - 9:20　中村敏和（分子研）
「共同研究の観点から見た分子研の ESR 環境」

9:20 - 9:40　柏本史郎（北大院工）
「準結晶中の磁気秩序とスローダイナミックス」

9:40 - 10:00　松岡秀人（東北大多元物質科学研究所）
「多周波 ESR 法を用いた光合成研究」

10:00 - 10:20　大胡惠樹（東邦大医）
「外部刺激応答型ヘムモデルの構造と物性」

Coffee Break

10:40 - 11:00　岡 芳美（富山大先端ライフサイエンス拠点）
「渡り鳥の高感度磁気研究レセプターを模倣した人工光誘起ラジカルペア・システム」

11:00 - 11:20　太田雅壽（新潟大工）
「長石を用いたＸ線吸収線量評価」

11:20 - 11:40　塩見大輔（大阪市大院理）
「キラリティをもつ分子磁性体の磁気測定――縦磁化検出による円偏波 ESR の試み――」

11:40 - 12:00　鐘本勝一（大阪市大院理）
「ESR 遷移によって誘起される有機半導体ダイオードにおける分極電流」

Lunch Break

司会 鐘本勝一

13:20 - 13:40　池上崇久（島根大院総合理工）
「嵩高い置換基を有するフタロシアニン－ salen 融合型二核形成配位子とその金属錯体の合成と性質」

13:40 - 14:00　満身 稔（兵庫県立大院物質理学）
「キラル一次元ロジウム (I)- セミキノナト錯体の磁気特性の解明」

14:00 - 14:20　酒巻大輔（京大院工）
「特異な立体構造を有する芳香族アミンを用いた高スピン分子の開発」

14:20 - 14:40　古川 貢（分子研）
「機能性物質のアドバンスド ESR」

14:40 - 15:00　倉橋拓也（分子研）
「不斉サレンマンガン触媒から生成する高原子価錯体の分光・磁気測定研究」

15:00 - 15:20　藤井 浩（分子研）
「生体内における常磁性金属イオンと有機ラジカルとの磁気的相互作用について」

15:20 - 15:40　加藤立久（京大高等教育研究開発推進機構）
「共同利用 ESR 測定で得た研究結果」

15:40 - 16:00　全体討論

③ 【分子研研究会】新しい光の創成と物質科学――精密計測と操作への展開

2012 年 10 月 11 日（木）～ 12 日（金） 岡崎コンファレンスセンター　小会議室

10 月 11 日（木）

13:20 - 13:25　開会の辞

13:25 - 13:45　加藤政博（分子研）
小型放射光施設 UVSOR の現状と将来計画

13:45 - 14:10　保坂将人（名大）
UVSOR におけるコヒーレントシンクロトロン光源の開発

14:10 - 14:35　芦田昌明（阪大）
超広帯域赤外時間領域分光法

14:35 - 15:00　芦原　聡（農工大）
赤外振動遷移における量子干渉の操作

15:00 - 15:15　（コーヒーブレーク）

15:15 - 15:40　永井正也（阪大）
高強度ピコ秒電場パルスによる物質制御に向けて

15:40 - 16:05　田中拓男（理研）
３次元メタマテリアルの自己組織化作製法

16:05 - 16:30　宮丸文章（信州大）
テラヘルツ領域のメタマテリアル

16:30 - 16:45　（コーヒーブレーク）

16:45 - 17:10　長谷宗明（筑波大）
フォノン周波数コム

17:10 - 17:35　桂川眞幸（電通大）
最も簡便なアト秒パルスの発生法

17:35 - 18:00　熊倉光孝（福井大）
原子波の光学的位相制御とその応用

18:30　懇親会

10 月 12 日（金）

9:00 - 9:25　尾松孝茂（千葉大）
トポロジカル光波とカイラリティー

9:25 - 9:50　越野和樹（東医歯大）
単一マイクロ波光子の決定論的下方変換：超伝導回路 QED による実現

9:50 - 10:15　清水亮介（電通大）
周波数無相関２光子状態の直接生成と４光子量子干渉

10:15 - 10:30　（コーヒーブレーク）

10:30 - 10:55　木村真一（分子研）
先端放射光を用いた物質科学

10:55 - 11:20　久保　敦（筑波大）
波束運動の動的パラメーターの実験的決定

11:20 - 11:45　早瀬潤子（慶大）
ダイヤモンド超薄膜中窒素空孔中心の光学特性

11:45 - 12:15　枝松圭一（東北大）
光で探る測定と擾乱の不確定性関係――ハイゼンベルグと小澤の不等式――

12:15 - 13:15　（昼食）
13:15 - 13:40　石川顕一（東大）
アト秒・フェムト秒極端紫外光によるヘリウム原子のイオン化
13:40 - 14:05　板谷治郎（東大）
高強度赤外 OPCPA による「水の窓」高次高調波発生
14:05 - 14:30　藤　貴夫（分子研）
超短光パルスの振動電場を測定する新しい方法
14:30 - 14:55　大村英樹（産総研）
分子トンネルイオン化の量子制御を利用したレーザー場フーリエ合成
14:55 - 15:10　（コーヒーブレーク）
15:10 - 15:35　櫛引俊宏（防衛医大）
光音響技術を用いた分子イメージング――光音響顕微鏡の創製
15:35 - 16:00　木下俊哉（京大）
低次元光格子中の BEC
16:00 - 16:25　三代木伸二（東大）
KAGRA 重力波望遠鏡の設計と建設状況
16:25 - 16:50　菱川明栄（名大）
EUV/X 線自由電子レーザー場における原子過程
17:05　UVSOR 見学

④ 【アジア連携分子研研究会】
Workshop of Quantum Dynamics and Quantum Walks
2012 年 11 月 24 日（土）～ 26 日（月） 岡崎コンファレンスセンター

11 月 24 日（土）
9:25- 9:30　Opening Remark　Chair: Etsuo Segawa
9:30-10:30　Jingbo Wang (The University of Western Australia)
[Invited Talk] Quantum walks, physical implementation and potential applications
10:30-11:30　Norio Konno (Yokohama National University)
[Invited Talk] A universality class of quantum walks on graphs
11:30-12:00　Tatsuya Tate (Nagoya University)
Asymptotics of quantum walks on the line
12:00-13:30　Lunch
13:30-15:00　Poster Session
2nd Session　Chair: Jingbo Wang
15:00-15:30　Fabrice Debbasch (UPMC)
Quantum walks with random coefficients and relativistic stochastic processes
15:30-16:00　Clement Ampadu
Convergent Behavior of the Pauli Quantum Walk on the Line
16:00-16:30　Coffee Break
3rd Session　Chair: Nobuaki Obata
16:30-17:00　Iwao Sato (Oyama National College of Technology)
On the cube of the transition matrix of a discrete-time quantum walk on a graph
17:00-17:30　Tetsuji Taniguchi (Matsue College of Technology)
On the smallest eigenvalue of graphs and Hoffman graphs
17:30-18:00　Hyoung-In Lee (Research Institute of Mathematics)
Dynamics of cascaded decays associated with negative-binomial probability
18:00-18:30　Sho Suda (International Christian University)
Complex mutually unbiased bases and Sic-POVMs from the viewpoint of complex spherical designs and association schemes

11 月 25 日（日）
4th Session　Chair: Peng Xue
9:30-10:30　Andreas Schreiber (University of Paderborn)
[Invited Talk] Time multiplexed photonic quantum walks
10:30-11:30　Ivan Kassal (University of Queensland)
[Invited Talk] Modelling photosynthesis with quantum walks
11:30-12:00　Peter Rohde (Macquarie University)
Optical multi-walker quantum walks
12:00-13:30　Lunch
5th Session　Chair: Ivan Kassal
13:30-14:00　Leo Matsuoka (Japan Atomic Energy Agency)
Implementation of continuous-time quantum walk in a diatomic molecule by a train of non-resonant optical pulses

14:00-14:30 Salvador Venegas-Andraca (Tecnolegico de Monterrey)
[Invited Talk] Quantum image processing:motivation, definitions and quantum-walk based morphological operators (Teleconference)

14:30-15:00 Armando Perez (Universidad de Valencia & IFIC)
Controlling quantum walks with the help of dispersion relations

15:00-15:30 Christopher Cedzich (Leibnitz University Hannover)
Quantum Walks with electric fields

15:30-16:00 Ozgur Mustecaplioglu (Koc University)
Quantum Walk in optical lattices

16:00-16:30 Coffee Break

6th Session Chair: Ozgur Mustecaplioglu

16:30-17:30 Dieter Meschede (University of Bonn)
[Invited Talk] Electric Quantum Walks

17:30-18:30 Nobuyuki Takei (Institute for Molecular Science)
[Invited Talk] Ultrafast coherent control of an ultracold Rydberg gas

19:30 Banquet

11 月 26 日（月）

7th Session Chair: Norio Konno

9:30-10:30 Philippe Blanchard (Bielefeld University)
[Invited Talk] Decoherence in Infinite Quantum Systems

10:30-11:30 Peng Xue (Southeast University)
[Invited Talk] Implementing quantum walks

11:30-12:00 Carlo Di Franco (Queen's University Belfast)
Two-dimensional quantum walk with reduced experimental resources

12:00-13:30 Lunch

8th Session Chair: Yutaka Shikano

13:30-14:00 Ramij Rahaman (University of Gdansk)
Dual benefit of continuous variable quantum games

14:00-14:30 Pawel Kurzynski (Centre for Quantum Technologies)
Quantum walk as a generalized measuring device

14:30-17:00 Free Discussion

⑤ 【分子研研究会】生物物質科学の展望

2013 年 1 月 10 日（木）～ 11 日（金） 分子科学研究所 研究棟 201 号室

1 月 10 日（木）

13:20 はじめに 加藤礼三（理研）

振動分光（座長：森）

13:30 神取秀樹（名古屋工業大学大学院工学研究科）
光受容タンパク質におけるエネルギー変換・情報変換

14:10 小倉尚志（兵庫県立大学大学院生命理学研究科）
チトクロム *c* 酸化酵素によるプロトンポンプ反応の研究：時間分解赤外および共鳴ラマン分光法

14:50-15:05 休憩

生体系における揺らぎ（座長：鹿野田）

15:05 寺嶋正秀（京都大学大学院理学研究科）
生体機能と揺らぎ・ダイナミクス

15:45 足立伸一（高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所）
時間分解Ｘ線回折・散乱法から見たタンパク質の構造ゆらぎとダイナミクス

16:25-16:40 休憩

Ｘ線構造解析（座長：澤）

16:40 城 宜嗣（理化学研究所城生体金属科学研究室）
生体反応場の特異性――呼吸酵素の分子進化を例に――

17:20 沈 建仁（岡山大学大学院自然科学研究科）
光合成水分解反応の構造基盤

18:30 懇親会

1 月 11 日（金）

測定手法の開発（座長：佐々木）

9:00 福間剛士（金沢大学理工研究域電子情報学系）
液中周波数変調 AFM を用いた生体試料の液中サブナノスケール観察

9:40　原田慈久（東京大学物性研究所）
水と生体分子の高分解能軟Ｘ線吸収・発光分光

10:20-10:35　休憩

計算科学（座長：石原）

10:35　長岡正隆（名古屋大学大学院情報科学研究科）
タンパク質における緩和と反応の統計的アプローチ

11:15　宮崎　剛（物質材料研究機構理論計算科学ユニット）
複雑生体系に対する全原子第一原理計算

11:55-13:20　昼食

化学的アプローチ（座長：加藤）

13:20　中島　洋（名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻）
シグナルトランスデューサーの化学――機能解明と応用――

14:00　大胡惠樹（東邦大学医学部）
外場応答ヘムモデルによる生体とマテリアルへのアプローチ

14:40　藤井　浩（分子科学研究所）
金属酵素の活性部位の電子構造と酵素反応

15:20　終わりに　森　初果（東大）

⑥ 【学協会連携分子研研究会】
無機化学の現状と未来：若い世代が切り開く新しいサイエンス

2013 年 1 月 17 日（木）～ 19 日（土） 分子科学研究所　研究棟 201 号室，岡崎コンファレンスセンター　小会議室

1 月 17 日（木）

16:00-16:10　開会の挨拶と趣旨説明　北川　進（京大 iCeMS）

錯体及び有機金属化学の現在と将来　座長北川　進（京大 iCeMS）

16:10-16:40　田中晃二（京大 iCeMS）
「水の酸化反応における酸素－酸素結合生成での金属イオンの役割」

16:40-17:10　山本陽介（広大院理）
「典型元素化学・有機金属化学の研究動向と将来展望」

1 月 18 日（金）

無機物性材料　座長山下正廣（東北大院理）

9:30-10:00　陰山　洋（京大院工）
「酸化物の配位コントロール」

10:00-10:30　福村知昭（東大院理）
「酸化物薄膜合成と物質・物性探索」

10:30-10:50　休憩

化学機能材料　座長北川　宏（京大院理）

10:50-11:20　石井和之（東大生産研）
「光で機能するポルフィリン」

11:20-11:50　本橋輝樹（北大院工）
「遷移金属酸化物における新規酸素貯蔵材料の開発と応用展開」

11:50-13:40　昼食

多孔性材料　座長西原　寛（東大院理）

13:40-14:10　山内悠輔（NIMS ／ JST- さきがけ）
「機能性無機材料としてのナノ多孔体」

14:10-14:40　横井俊之（東工大資源研）
「新原理によるシリカ系規則性多孔体の合成」

14:40-15:00　休憩

触媒材料　座長田中晃二（京大 iCeMS）

15:00-15:30　阿部　竜（京大院工／最先端次世代プロ）
「人工光合成実現のための新規可視光応答型光触媒系」

15:30-16:00　唯美津木（分子研／総研大）
「Ce 系複合酸化物固溶体－金属界面でのメタンリフォーミング」

16:00-16:30　小倉賢（東大生産研／京大触媒電池元素戦略ユニット）
「多孔質シリカを配位子とする活性サイトと空間触媒科学」

16:30-17:00　柴田直哉（東大総研／ JST-PRESTO）
「原子分解能走査型透過電子顕微鏡法の新しい展開」

18:00-20:00　懇親会

1月19日（土）

	ナノ粒子　座長加藤昌子（北大院理）
9:30-10:00	山内美穂（九大 I2CNER ／ JST-CREST） 「金属元素を利用したナノ機能化学」
10:00-10:30	小俣孝久（阪大院工） 「コロイダル量子ドットの合成と物性」
10:30-10:50	休憩
	錯体材料　座長山本陽介（広大院理）
10:50-11:20	杉本　学（熊大院自然科学） 「錯体化学をメイン・フィールドとする理論計算化学の挑戦」
11:20-11:50	村橋哲郎（分子研） 「有機金属錯体の構造次元性拡張」
11:50-12:00	閉会の挨拶　田中晃二（京大 iCeMS）

⑦ 【アジア連携分子研研究会】
The 6th Japan–China Joint Symposium on Functional Supramolecular Architectures
2013年1月18日（金）～21日（月）　岡崎コンファレンスセンター

1月18日（金）

15:00	Registration
18:00	Welcome Reception at OCC

1月19日（土）

	Opening Address: Hiromitsu MAEDA
	Chairperson: Hiromitsu MAEDA (9:00 ~ 10:10)
9:00 ~ 9:35	Yuguo MA (Peking University) Self-Assembly Mediated by Arene-Perfluoroarene Interactions
9:35 ~ 10:10	Hiroshi SHINOKUBO (Nagoya University) Organometallic Route to Novel Porphyrins
10:10 ~ 10:30	Coffee Break
	Chairperson: Wenping HU (10:30 ~ 11:40)
10:30 ~ 11:05	Takahiro TSUCHIYA (Tsukuba University) Construction of Supramolecular Systems Based on Endohedral Metallofullerenes
11:05 ~ 11:40	Yanhou GENG (Changchun Institute of Applied Chemistry, CAS) Conjugated Polymers Based on Dithienocarbazoles
11:40 ~ 13:00	Lunch
	Chairperson: Shu SEKI (13:00 ~ 14:10)
13:00 ~ 13:35	Aiko FUKAZAWA (Nagoya University) Intramolecular Alkyne Cyclization for New Ring-Fused π-Electron Systems
13:35 ~ 14:10	Zengqi XIE (South China University of Technology) Supramolecular Optoelectronic Materials Based on Perylene Bisimides
14:10 ~ 14:30	Coffee Break
	Chairperson: Changchun WANG (14:30 ~ 15:40)
14:30 ~ 15:05	Zhishan BO (Beijing Normal University) Polymethacrylate Based Polymer Solar Cells
15:05 ~ 15:40	Shu SEKI (Osaka University) Nano-Scale Charge Carrier Transport in Organic Semiconductor Materials and Their Interfaces Probed by Microwaves
15:40 ~ 16:00	Coffee Break
	Chairperson: Chunru WANG (16:00 ~ 17:45)
16:00 ~ 16:35	Yohei YAMAMOTO (Tsukuba University) Self-Assembly of π-Conjugated Molecules and Polymers into Electroactive Nanomaterials
16:35 ~ 17:10	Yanchun HAN (Changchun Institute of Applied Chemistry, CAS) Detection of Explosives with Xeogel Film from Conjugated Carbazole-Based Dendrimer
17:10 ~ 17:45	Hiromitsu MAEDA (Ritsumeikan University) Supramolecular Assemblies Based on Interionic Interactions
18:00 ~ 20:00	Poster Section and Buffet Party at OCC

1月20日（日）

	Chairperson: Zhishan BO (9:00 ~ 10:10)
9:00 ~ 9:35	Kazuki SADA (Hokkaido University) De Novo Design of Thermo-Responsive Polymer Systems via Supramolecular Interaction

9:35 ~ 10:10	Feng YAN (Soochow University) Imidazolium-Based Ionomer Polyelectrolytes for Proton-Exchange & Anion-Exchange Membrane Applications
10:10 ~ 10:30	Coffee Break
	Chairperson: Yanchun HAN (10:30 ~ 11:40)
10:30 ~ 11:05	Hiroko YAMADA (Nara Institute of Science and Technology) In-situ Photochemical Conversion of Diketone Precursors to Acene Derivatives for Latent Functional Materials
11:05 ~ 11:40	Changchun WANG (Fudan University) Magnetic Multifunctional Composite Microspheres for Biomedical Applications
11:40 ~ 13:00	Photo and Lunch
	Chairperson: Kazuki SADA (13:00 ~ 14:10)
13:00 ~ 13:35	Huaping XU (Tsinghua University) Selenium-Containing Polymers: A Promising New Biomaterial
13:35 ~ 14:10	Tetsuro MURAHASHI (Institute for Molecular Science) Redox-Switchable Metal Assembling and Ligand Coupling in Tetranuclear Palladium Sandwich Frameworks
14:10 ~ 14:30	Coffee Break
	Chairperson: Hiroshi SHINOKUBO (14:30 ~ 15:40)
14:30 ~ 15:05	Wusong JIN (Donghua University) Functional Self-Assembled Soft Materials from Molecular Graphenes
15:05 ~ 15:40	Shiki YAGAI (Chiba University) Molecular Design Toward Highly Organized Artificial Dye Assemblies
15:40 ~ 16:00	Coffee Break
	Chairperson: Yuguo MA (16:00 ~ 17:45)
16:00 ~ 16:35	Donglin JIANG (Institute for Molecular Science) Two-Dimensional Polymers and Covalent Organic Frameworks: The Molecular Drive to Designable Periodic Organic Polymer Structure
16:35 ~ 17:10	Takashi NAKANISHI (National Institute for Materials Science) Alkylated π-Conjugated Molecules Based Non-Assembled, Non-Volatile Functional Liquids at Room Temperature
17:10 ~ 17:45	Wenping HU (Institute of Chemistry, CAS) High Performance Organic Semiconductors, Micro- and Nanometer Sized Crystals and Devices
19:00 ~	Banquet

1 月 21 日（月）

	Chairperson: Yanhou GENG (9:30 ~ 11:15)
9:30 ~ 10:05	Chunru WANG (Institute of Chemistry, CAS) Fullerene Application on Polymer Solar Cells
10:05 ~ 10:40	Shigeyuki MASAOKA (Institute for Molecular Science) Water Oxidation Catalyzed by Mono- and Multinuclear Metal Complexes
10:40 ~ 11:15	Zhen LI (Wuhan University) The Design, Synthesis and Properties of Some New Blue Fluorophores with Aggregation-Induced Emission
	Closing Remark: Shu SEKI and Zhishan BO

⑧ 【分子研研究会】生体配位化学の最前線と展望
2013 年 2 月 5 日（火）～ 6 日（水） 分子科学研究所 研究棟 201 号室

2 月 5 日（火）

13:00–15:00	**DL 伊東 忍（阪大院工）**
	荘司 長三（名大院理） **「蛋白質の誤作動を利用する触媒システム開発と新規機能への展開」(20)**
	澤井 仁美（分子研岡崎統合バイオ） **「ヘムセンサー蛋白質を介した細胞内ヘムの恒常性維持機構」(20)**
	中島 洋（名大院理） **「金属タンパク質のダイナミクスを利用する機能の創出」(20)**
	藤枝 伸宇（阪大院工） **「配位子としてのタンパク質」(20)**
	小野田 晃（阪大院工） **「金属酵素の機能エッセンスに着眼する：鉄二核中心の機能化をめざしたアプローチ」(20)**
	松尾 貴史（奈良先端大） **「タンパク質の二面性に着目した人工タンパク質の創成」(20)**
15:15–17:25	**DL 青野重利（分子研岡崎統合バイオ）**
	藤井 浩（分子研岡崎統合バイオ） **「軸配位子による高原子価鉄オキソヘム錯体の反応性の制御機構」(20)**

松井　敏高（東北大多元研）
「ヘムタンパク質におけるユニークな酸素活性化」(20)

杉本　秀樹（阪大院工）
「金属置換型バイオインスパイアード触媒：有機合成への展開」(20)

多喜　正泰（京大院人間・環境）
「分子状酸素活性化機構に基づいた銅一価蛍光プローブの開発」(20)

上野　隆史（東工大院生命理工）
「細胞・金属・空間」(25)

舩橋　靖博（阪大院理）
「金属酵素モデルの最前線と展望」(25)

17:30–18:20　座長：齋藤正男（東北大多元研）

鈴木　正樹（金沢大理工）
「非ヘム型酸化酵素の機能モデル錯体の創製」(50)

18:45–20:45　懇親会

2 月 6 日（水）

9:00–11:30　DL　城　宜嗣（理研）

引地　史郎（神奈川大工）
「Bio-inspired 酸化触媒の開発を目指して」(25)

小寺　政人（同志社大工）
「自然に学ぶ高性能酸化触媒の開発」(25)

真島　和志（阪大院基礎工）
「エタノールアミドが生体内で用いられる化学的理由」(25)

田中健太郎（名大院理）
「バイオインスパイアードな分子組織化学：精密組織化およびメゾフェーズへの展開」(25)

小島　隆彦（筑波大院数理）
「ルテニウム (IV) －オキソ錯体による基質酸化反応」(25)

樋口　恒彦（名市大薬）
「ヘムおよび関連構造の新機能発現を目指して」(25)

11:30–12:20　座長　渡辺芳人（名大院理）

成田　吉徳（九大先導研）
「金属酵素活性中心化学モデルから分子触媒へ」(50)

13:20–15:50　DL　林　高史（阪大院工）

菊地　和也（阪大院工）
「分子イメージングプローブの設計に使える機能原理」(25)

廣田　　俊（奈良先端大）
「ヘムタンパク質の多量化：タンパク質変性と機能化」(25)

城　　宜嗣（理研）
「呼吸酵素の分子進化における構造機能変換」(25)

小倉　尚志（兵庫県立大理）
「生体配位化学における高解像度の虫眼鏡：振動分光法」(25)

高妻　孝光（茨城大理）
「金属タンパク質の構造と機能から海洋生物無機化学へのパラダイムシフト」(25)

吉澤　一成（九大先導研）
「量子化学計算による生物無機化学の研究」(25)

16:00–16：50　座長　増田秀樹（名工大工）

巽　　和行（名大院理）
「クラスター活性部位を持つ金属酵素：化学の挑戦」(50)

⑨ 【学協会連携分子研研究会】
先端的レーザー分光技術による分子科学の新展開
2013 年 2 月 12 日（火）～ 13 日（水）　岡崎コンファレンスセンター

2 月 12 日（火）

13:00–13:10　開会の辞

13:10–14:00　武井宣幸（分子研）
「極低温リュードベリ原子の超高速コヒーレント制御」

14:00–14:40　多田康平（神戸大院理）
「分子線・磁場効果を併用した硝酸ラジカル NO_3 の超高分解能レーザー分光」

14:40–15:10　宍戸龍之介（東北大院理）
「プロトン付加トリメチルアミン・水クラスター $((CH_3)_3N)_n$–H^+–H_2O (n = 1–3) の赤外分光～魔法数付近のクラスター構造とその解離チャンネル～」

15:10–15:30　休憩

15:30–16:20　野村雄高（分子研）
「新しい赤外コヒーレント光源の開発」
16:20–17:00　三浦　瞬（東大院理）
「数サイクル強レーザーパルスによる分子解離ダイナミクス：搬送波包絡線位相依存性」
17:00–17:40　三宅伸一郎（分子研）
「コヒーレント分布操作を目指した新規高輝度狭帯域レーザーの開発」

2 月 13 日（水）
9:00– 9:50　宮内直弥（学習院大院理）
「共振増強液滴ラマンスペクトルの入射波長依存性」
9:50–10:30　相賀則宏（京大院理）
「可視光応答型光触媒 $BiVO_4$ 表面のホールトラップサイトにおける電子格子相互作用の観測」
10:30–10:50　休憩
10:50–11:40　乙須拓洋（理研）
「二次元蛍光相関分光で観る蛋白質自発ゆらぎ」
11:40–12:30　中曽根祐介（京大院理）
「過渡回折格子法による蛋白質反応の時間分解検出」
12:30–13:40　昼食
13:40–14:30　水野　操（阪大院理）
「紫外共鳴ラマン分光法によるタンパク質の高速ダイナミクス観測」
14:30–15:20　横野牧生（神戸大院理）
「時間分解蛍光分光法による光合成反応中心間の相互作用の解析：光捕集・光防御機構にあわせた相互作用の変化」
15:20–15:30　閉会の辞

⑩ 【分子研研究会】金属錯体機能の根源を探る～分子構造とその変化様式の探求最前線
2013 年 3 月 13 日（水）～ 14 日（木） 分子科学研究所　実験棟 301 － 303 号室

3 月 13 日（水）
13:00-13:10　研究会趣旨説明　村橋　哲郎（分子科学研究所）
セッション I：座長　黒田　孝義（近畿大学）
13:10-13:55　西原　寛（東京大学理）
「錯体分子ワイヤ・ネットワークの界面配位プログラミング合成と電子機能」
13:55-14:25　若手講演　堀毛　悟史（京都大学工）
「配位高分子構造のダイナミックスが誘起するイオン伝導機能」
14:25-14:50　写真撮影，コーヒーブレイク
セッション II：座長　水田　勉　（広島大学）
14:50-15:35　栗原　正人・冨樫　貴成（山形大学理）
「古典的錯体であったシュウ酸銀に秘められていた機能，今それが産業界が待望する高機能銀ナノ微粒子に生まれ変わる！」
15:35-16:20　佃　達哉（東京大学理）
「新しい界面構造に基づく金属クラスターの有機修飾」
セッション III：座長　村橋　哲郎（分子科学研究所）
16:20-16:50　若手講演　山下　誠（中央大学理工）
「含ホウ素多座配位子を有する金属錯体の構造と機能」
16:50-17:35　小澤　文幸（京都大学化学研究所）
「ホスファアルケン配位錯体の構造と反応」
18:00-20:00　懇親会

3 月 14 日（木）
セッション IV：座長　正岡　重行（分子科学研究所）
9:30-10:00　若手講演　砂田　祐輔（九州大学先導化学研究所）
「配位不飽和性を鍵とする高反応性鉄錯体の開発」
10:00-10:30　若手講演　佐藤　俊介（豊田中央研究所）
「金属錯体を用いた CO_2 光還元反応」
10:30-10:45　コーヒーブレイク
セッション V: 座長　中沢　浩（大阪市立大学）
10:45-11:30　酒井　健（九州大学理）
「分子性触媒を基盤とした水可視光分解系の開拓」
11:30-12:15　山下　正廣（東北大学理）
「単分子量子磁石を用いた量子分子スピントロニクスの最前線」
12:15-12:20　閉会挨拶　伊東　忍（大阪大学）

(4) 若手研究会等

課題名	提案代表者	
「第 52 回分子科学若手の会夏の学校講義内容検討会」及び「第 1 回分子科学若手シンポジウム」	東北大学大学院理学研究科	山崎　馨

(5) 岡崎コンファレンス

課題名	提案代表者	
量子コヒーレンスの極限制御	自然科学研究機構分子科学研究所	大島　康裕

(6) UVSOR 施設利用

（前期）

L 殻 XANES による Mo/H-MFI 系 MTB 触媒の Mo 活性種の高耐久条件の検討	埼玉工業大学工学部	有谷　博文
地球マントル物質中における Al の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本　知之
AlGdN の Al1s 及び Gd3d 内殻からの発光・励起スペクトル測定	福井大学大学院工学研究科	福井　一俊
XAFS による炭素化ポーラスシリコン発光サイトの構造解析	名古屋大学エコトピア科学研究所	吉田　朋子
LTA 型ナノゼオライトの処理過程での局所構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平　敦
XAFS 法を用いたハイドロキシアパタイト中のカルシウムの状態分析	福岡大学理学部	栗崎　敏
真空紫外励起による酸化物結晶における希土類イオンのホスト増感	秋田大学工学資源学研究科	小玉　展宏
有機無機ハイブリッド物質における真空紫外光照射発光増大現象の解明	山形大学理学部	北浦　守
BL3B の整備（基本特性）	山形大学理学部	北浦　守
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
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
AlGaN 混晶の深い価電子帯領域からの発光励起測定	福井大学大学院工学研究科	福井　一俊
BL3B の整備（基本特性）	福井大学大学院工学研究科	福井　一俊
新規可視・紫外蛍光材料の探索と発光機構の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相　武利
アミノ酸蒸着膜の真空紫外発光スペクトル測定	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川　和道
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
強相関系 Co ペロブスカイト酸化物の電子状態解析	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
実験・理論を併用した XANES スペクトル分析による Li 二次電池正極材料の電子構造解析	(独)産業技術総合研究所	奥村　豊旗
重い電子系 $CaCu_3Ru_4O_{12}$ の角度分解光電子分光	弘前大学理工学研究科	任　皓駿
角度分解光電子分光法によるトポロジカル絶縁体超薄膜のフェルミ準位制御	東京大学大学院理学系研究科	平原　徹
軟X線光電子分光による遷移金属リン化物表面のキャラクタリゼーション	立教大学理学部	枝元　一之
高圧合成 MS_2 (M = Fe, Co, Ni, Cu) および $Fe_{2-x}V_{1+x}Al$ 単結晶の電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	曽田　一雄
歪み超格子半導体における周期「乱れ」がキャリアダイナミクスに及ぼす影響	名古屋大学大学院工学研究科	宇治原　徹
高分解能角度分解光電子分光法によるゲルマニウム－錫混晶薄膜の電子状態評価	名古屋大学大学院工学研究科	中塚　理
$FeSb_2$ で観測される巨大ゼーベック係数における高濃度近藤効果の役割の解明	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内　恒博
３元系ハーフホイスラー合金薄膜におけるトポロジカル絶縁体的電子状態の直接観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤　孝寛
角度分解光電子分光を用いた第３元素ドープによる EuO の機能性向上の解明	名古屋工業大学	宮崎　秀俊
BL5U の整備	分子科学研究所	木村　真一
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
VUV 吸収スペクトルによるアモルファス半導体の光劣化評価	岐阜大学工学部	林　浩司
20 〜 250 eV 領域におけるアミノ酸蒸着膜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
超イオン導電体におけるコヒーレントイオン伝導の研究	東北学院大学工学部	淡野　照義
鉛フリー圧電体の遠赤外スペクトル	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
トポロジカル絶縁体の低エネルギー高分解能角度分解光電子分光	東北大学原子分子材料科学高等研究機構	高橋　隆
パイ電子共役系有機薄膜における電子格子相互作用の検出	千葉大学大学院融合科学研究科	解良　聡
低励起エネルギー角度分解光電子分光による擬一次元有機導体の電子状態の研究	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤　孝寛
Circular Dichroism ARPES Studies on Bulk Inversion Symmetry Broken Materials	分子科学研究所	木村　真一

Polarization Dependent ARPES Study on Low-Dimensional Iron-Chalcogenide Materials	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
強相関 Yb 化合物の３次元角度分解光電子分光	分子科学研究所	松波　雅治
新規オージェ・フリー発光の時間分解測定	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
太陽ライマン α 光偏光観測ロケット実験（CLASP）のフライト品評価	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 (II)	福井大学大学院工学研究科	福井　一俊
マイクロ波照射 TiO_2 の電子状態の解析	京都大学エネルギー理工学研究所	全　炳俊
3 〜 30 eV 領域におけるアミノ酸蒸着膜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
金属／有機半導体の界面電子構造における分子の吸着距離の役割	岩手大学大学院工学研究科	細貝　拓也
角度分解紫外光電子分光法によるフッ素化有機分子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
金属単結晶上の有機半導体薄膜における分子基板間相互作用の解明	千葉大学大学院融合科学研究科	解良　聡
有機トランジスタ及び有機太陽電池のヘテロ界面電子構造の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
BL8B の整備	分子科学研究所	木村　真一
有機薄膜への光照射によって生じる表面起電力の観測	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
２つの吸収端を利用した「水の窓」域アト秒ミラーの研究	大阪市立大学大学院工学研究科	熊谷　寛

（後期）

L 殻 XANES による Mo/H-MFI 系 MTB 触媒の Mo 活性種の高耐久条件の検討	埼玉工業大学工学部	有谷　博文
地球マントル物質中における Al の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本　知之
AlGdN の Al1s 及び Gd3d 内殻からの発光・励起スペクトル測定	福井大学大学院工学研究科	福井　一俊
XAFS による炭素化ポーラスシリコン発光サイトの構造解析	名古屋大学エコトピア科学研究所	吉田　朋子
XAFS 法を用いたハイドロキシアパタイト中のカルシウムの状態分析	福岡大学理学部	栗崎　敏
真空紫外励起による酸化物結晶における希土類イオンのホスト増感	秋田大学工学資源学研究科	小玉　展宏
有機無機ハイブリッド物質における真空紫外光照射発光増大現象の解明	山形大学理学部	北浦　守
BL3B の整備（基本特性）	山形大学理学部	北浦　守
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
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
AlGaN 混晶の深い価電子帯領域からの発光励起測定	福井大学大学院工学研究科	福井　一俊
BL3B の整備（基本特性）	福井大学大学院工学研究科	福井　一俊
新規可視・紫外蛍光材料の探索と発光機構の解明	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相　武利
アミノ酸蒸着膜の真空紫外発光スペクトル測定	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川　和道
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
強相関系 Co ペロブスカイト酸化物の電子状態解析	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
実験・理論を併用した XANES スペクトル分析による Li 二次電池正極材料の電子構造解析	(独)産業技術総合研究所	奥村　豊旗
重い電子系 $CaCu_3Ru_4O_{12}$ の角度分解光電子分光	弘前大学理工学研究科	任　皓駿
角度分解光電子分光法によるトポロジカル絶縁体超薄膜のフェルミ準位制御	東京大学大学院理学系研究科	平原　徹
軟X線光電子分光による遷移金属リン化物表面のキャラクタリゼーション	立教大学理学部	枝元　一之
高圧合成 MS_2 (M = Fe, Co, Ni, Cu) および $Fe_{2-x}V_{1+x}Al$ 単結晶の電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	曽田　一雄
歪み超格子半導体における周期「乱れ」がキャリアダイナミクスに及ぼす影響	名古屋大学大学院工学研究科	宇治原　徹
高分解能角度分解光電子分光法によるゲルマニウム－錫混晶薄膜の電子状態評価	名古屋大学大学院工学研究科	中塚　理
$FeSb_2$ で観測される巨大ゼーベック係数における高濃度近藤効果の役割の解明	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内　恒博
３元系ハーフホイスラー合金薄膜におけるトポロジカル絶縁体的電子状態の直接観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤　孝寛
角度分解光電子分光を用いた第３元素ドープによる EuO の機能性向上の解明	名古屋工業大学	宮崎　秀俊
BL5U の整備	分子科学研究所	木村　真一
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
VUV 吸収スペクトルによるアモルファス半導体の光劣化評価	岐阜大学工学部	林　浩司
20 〜 250eV 領域におけるアミノ酸蒸着膜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
超イオン 導電体におけるコヒーレントイオン伝導の研究	東北学院大学工学部	淡野　照義

鉛フリー圧電体の遠赤外スペクトル	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
トポロジカル絶縁体の低エネルギー高分解能角度分解光電子分光	東北大学原子分子材料科学高等研究機構	高橋　　隆
パイ電子共役系有機薄膜における電子格子相互作用の検出	千葉大学大学院融合科学研究科	解良　　聡
低励起エネルギー角度分解光電子分光による擬一次元有機導体の電子状態の研究	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤　孝寛
Circular Dichroism ARPES Studies on Bulk Inversion Symmetry Broken Materials	分子科学研究所	木村　真一
Polarization Dependent ARPES Study on Low-Dimensional Iron-Chalcogenide Materials	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
強相関 Yb 化合物の３次元角度分解光電子分光	分子科学研究所	松波　雅治
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
太陽ライマン α 光偏光観測ロケット実験（CLASP）のフライト品評価	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 (II)	福井大学大学院工学研究科	福井　一俊
3 〜 30 eV 領域におけるアミノ酸蒸着膜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
金属／有機半導体の界面電子構造における分子の吸着距離の役割	岩手大学大学院工学研究科	細貝　拓也
角度分解紫外光電子分光法によるフッ素化有機分子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
金属単結晶上の有機半導体薄膜における分子基板間相互作用の解明	千葉大学大学院融合科学研究科	解良　　聡
有機トランジスタ及び有機太陽電池のヘテロ界面電子構造の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
BL8B の整備	分子科学研究所	木村　真一
有機薄膜への光照射によって生じる表面起電力の観測	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
廃ガラスから合成したゼオライトの局所構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平　　敦
XAFS 測定による Fe 添加非晶質リン酸カルシウムの局所構造解析	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
蛍光法を用いた人工ゼオライト中における交換カオチンの局所構造解析	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
軟Ｘ線吸収分光法を用いた酸化物材料の欠陥の研究	九州シンクロトロン光研究センター	小林　英一
太陽光発電用ワイドギャップ半導体の光学特性	岐阜大学工学部	山家　光男
水・イオン液体表面での光イオン化と光反応	九州大学大学院総合理工学研究院	原田　　明
Ｘ線吸収・磁気円二色性分光による吸着磁性分子／グラフェン系の磁気交換結合の研究	日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター	大伴真名歩
FeCo/Ag(116) 薄膜における量子井戸状態由来の磁気異方性	分子科学研究所	横山　利彦
バナジウムフタロシアニンの磁気特性に関する研究	分子科学研究所	横山　利彦
XMCD による Ni 薄膜上の鉄フタロシアニン単分子膜の磁気モーメントの定量的測定	分子科学研究所	高木　康多
巨大磁気異方性と保磁力を持つ単層磁性薄膜の XMCD による研究	分子科学研究所	中川　剛志
VUV 照射により液滴から生成する発光スペクトルの測定	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	下條　竜夫
放射光を用いた赤外イメージングシステムの構築	分子科学研究所	木村　真一
高輝度放射光を用いた顕微分光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
低エネルギー高分解能角度分解光電子分光法による Bi 超薄膜の半金属半導体転移の研究	東京大学大学院理学系研究科	平原　　徹
微小ギャップ半導体中の intrinsic な電子状態の観測	分子科学研究所	木村　真一
電荷・磁気秩序を示す希土類・遷移金属化合物の３次元低エネルギー光電子分光	立命館大学理工学部	今田　　真
グラフェンおよび単結晶グラファイトの低エネルギー光電子分光	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
新規オージェ・フリー発光の時間分解測定	山形大学理学部	大西　彰正
機能性含フッ素ポリイミド薄膜の真空紫外域における光学特性評価	明治大学理工学部	松本　皓永
真空紫外領域におけるフッ化物材料の光伝導特性評価	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野　晋吾
アルカリハライド中の CsI 微結晶の緩和励起子発光	大阪電気通信大学工学部	大野　宣人
真空紫外固体レーザーの開発に向けたフッ化物材料の発光特性の研究	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	猿倉　信彦
Electronic Structure of Amino Acids Assembly Studies by UPS	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga rasika
鉄ニクタイド超伝導体における真空紫外領域分光	大阪大学大学院理学研究科	宮坂　茂樹
軟Ｘ線吸収分光法による立方晶 AlN 薄膜の構造解析	九州大学大学院総合理工学研究院	冨永　亜希
真空紫外励起による無機蛍光体の発光特性と発光機構の解明	学習院大学理学部	稲熊　宜之

(7) 施設利用

① 機器センター

(通年)

キラル銅錯体と分子磁性体の金属錯体複合系の磁性測定	東京理科大学理学部	秋津 貴城
光誘起相転移を示す金属錯体の微小結晶構造解析と磁気的物性解明	九州大学先導物質化学研究所	姜 舜徹
ヘムタンパク質の反応性を制御するポルフィリン立体構造因子の究明	千葉大学大学院薬学研究院	根矢 三郎
MgB_2 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
窒化硼素ドーピング化合物の構造と物性	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	小林 本忠
新規分子磁性体の結晶構造と磁気的性質	首都大学東京大学院理工学研究科	藤田 渉
NiFe ナノ粒子，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
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	名城大学理工学部	丸山 隆浩
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
外部刺激応答性を利用した新規機能性物質の開発	東邦大学医学部	大胡 惠樹
新規ナノマテリアルの物性評価	法政大学生命科学部	緒方 啓典
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
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
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
水環境中天然有機物（NOM）および下水２次処理水中有機物（EfOM）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
有機デバイスに用いる有機半導体材料の構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	芦沢 実
Ｘ線結晶構造解析による分子構造の決定	豊橋技術科学大学	藤澤 郁英
誘電体－磁性体ハイブリッド素子の磁気的特性	秋田工業高等専門学校物質工学科	丸山 耕一
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
新規ポリオキソメタレート錯体の合成とその電気化学的酸化還元反応メカニズムの解明	高知大学教育研究部	上田 忠治
南極の陸上に生育する光合成生物の乾燥時における光阻害防御の光波長依存特性の研究	情報・システム研究機構国立極地研究所	小杉真貴子

(前期)

結晶構造解析による分子間相互作用の見積りと固相電子移動過程の相関	静岡大学工学部	嶋植田一正
NO センシング材料の磁気的評価	名古屋工業大学大学院未来材料創成工学研究科	小澤 智宏
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	田渕 克彦
アルカリ金属ドープポリアセチレンラジカルポリマーのスピン状態および磁気状態の観測	広島大学大学院理学研究科	井上 克也
アルキルエチレンジアミン系イオン液体中での遷移金属イオンの選択的相互作用	奈良女子大学大学院人間文化研究科	飯田 雅康
新奇電子供与体を成分とする分子性導体の低温物性・構造に関する研究	愛媛大学大学院理工学研究科	白旗 崇
有機ラジカル結晶の低温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
酸化物磁性薄膜および多孔体の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
高感度 ESR 法による光合成タンパクの構造研究	東北大学多元物質科学研究所	松岡 秀人
sp 電子系準結晶の磁気特性	北海道大学大学院工学研究院	柏本 史郎
非天然金属中心を有するヘム及びノンヘム人工鉄含有タンパク質変異体の電子状態解析	大阪大学大学院工学研究科	小野田 晃
ガラス基板へのレーザードープに関する研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 晋吾
フタロシアニン金属錯体の磁気特性の研究	島根大学総合理工学部	池上 崇久
メカノケミカル重合によるセルロース高機能化材料の創製	静岡県立大学環境科学研究所	坂口 眞人
カビ胞子の生存に係わるフリーラジカル信号の同定	名古屋大学大学院工学研究科	石川 健治
高等植物グリコペプチドホルモン CLV3 のコンフォメーション解析	自然科学研究機構基礎生物学研究所	松林 嘉克
多層グラフェン壁を持つメソ多孔性炭素への金属担持	金沢大学理工研究域	西 信之
GPCR －リガンド相互作用の熱力学的解析	九州大学大学院薬学研究院	白石 充典
多環式芳香族炭化水素のＸ線結晶構造解析	兵庫県立大学大学院工学研究科	北村 千寿
新規機能性錯体分子の構造と光学的性質	静岡大学理学部	仁科 直子
金ナノクラスターの近赤外発光分析	早稲田大学理工学術院	井村 考平
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	大阪大学大学院理学研究科	山本 貴
新規物質 Ag_2CoO_2 の磁性に関する研究	大阪大学大学院理学研究科	高見 剛

共役系高分子の磁気特性に関する研究	室蘭工業大学大学院工学研究科	馬渡　康輝
側鎖に嵩高い光学活性基を有する π 共役系ラセン高分子の溶媒及び温度依存症	室蘭工業大学大学院工学研究科	馬渡　康輝
タンパク質空間における金属イオンのレドックス挙動とタンパク質構造との相関関係の解明	奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科	松尾　貴史
磁気的フラストレーションを持つ層状二次元ネットワーク錯体の磁化緩和ダイナミクス	東邦大学理学部	加知　千裕
金属イオンと光合成光補集タンパク質との相互作用の検出	茨城大学理学部	大友　征宇
２段階スピン転移を示すスピンクロスオーバー錯体の光誘起準安定相の構造解析	神戸大学大学院理学研究科	高橋　一志
光合成蛋白質の耐熱化機構の解析	神戸大学自然科学系先端融合研究環	木村　行宏

（後期）

新規機能性錯体分子の構造と光学的性質	静岡大学理学部	仁科　直子
Ag_xCoO_2 の磁性と $LaCoO_3$ のスピン転移に関する研究	大阪大学大学院理学研究科	高見　剛
多層グラフェン壁を持つメソ多孔性炭素へのシリコン担持	金沢大学理工研究域	西　信之
非平面 π 共役系分子の結晶構造解析による分子間相互作用の見積りと電子移動経路の相関	静岡大学工学部	植田　一正
金属イオンと光合成光補集タンパク質との相互作用の検出	茨城大学理学部	大友　征宇
酸化物磁性薄膜および多孔体の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
蛍光を有する磁気ナノビーズの開発及び計測における応用	静岡大学創造科学技術大学院	朴　龍洙
コイ血液由来の糖鎖（ペンタオース）の NMR スペクトル（ROESY）の測定	三重大学大学院生物資源学研究科	青木　恭彦
新機能性有機結晶の低温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
ガラス基板へのレーザードープに関する研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野　晋吾
Pd-Si-RE（希土類）系新規準結晶関連合金の磁気特性	北海道大学大学院工学研究院	柏本　史郎
ナノ粒子化に伴う木質セルロースの高機能化	静岡県立大学環境科学研究所	坂口　眞人
ポリエチレン系アイオノマーの熱分析	岐阜大学工学部	三輪　洋平
微粒子レーザープロセス	東北大学多元物質科学研究所	佐藤　俊一
高等植物グリコペプチドホルモン CLV3 のコンフォメーション解析	自然科学研究機構基礎生物学研究所	松林　嘉克
光合成蛋白質の耐熱化機構の解析	神戸大学大学院農学研究科	木村　行宏
アルカリ金属ドープポリアセチレンラジカルポリマーのスピン状態および磁気状態の観測	広島大学大学院理学研究科	井上　克也
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
キラルアカセン誘導体金属錯体の微小単結晶のＸ線構造解析	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
逆ペロブスカイト型化合物 $(TSF)_3[(Mo_6X_{14})X]$ (X = Cl, Br) の極低温構造解析	名城大学農学部	平松　孝章
一次元ロジウム－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
非天然金属中心を有するヘム及びノンヘム人工鉄含有タンパク質変異体の電子状態解析	大阪大学大学院工学研究科	小野田　晃
哺乳類トランスポーター蛋白質と基質・阻害剤の分子間相互作用の解析	京都大学大学院医学研究科	野村　紀通
金属酸化物ナノ粒子集合体の磁気特性解析	大阪大学産業科学研究所	真嶋　哲朗
ランタン型二核金属錯体の磁気特性の研究	島根大学大学院総合理工学研究科	池上　崇久

②　装置開発室

（前期）

マイクロ波イメージング	自然科学研究機構核融合科学研究所	長山　好夫
高磁界超伝導線材の臨界電流特性における真性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	菱沼　良光
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	山﨑　優一
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，20ch 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
多チャンネル光神経電子集積回路素子の PMMA 基板開発とマイクロ流路開発	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
高電圧高速パルススイッチの製作	名古屋大学大学院理学研究科	菱川　明栄
高温高圧超音速ジェットパルスノズルの開発	京都大学大学院理学研究科	馬場　正昭

（後期）

マイクロ波イメージング	自然科学研究機構核融合科学研究所	長山　好夫
高磁界超伝導線材の臨界電流特性における真性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	菱沼　良光
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	山﨑　優一
イオンファネルを利用した，効率的イオン輸送システムの開発 ～イオンファネル駆動のための RF 電源の製作～	広島大学大学院理学研究科	井口　佳哉
分子読み取りグラフェンデバイス	横浜国立大学大学院工学研究院	荻野　俊郎
光サンプリング時間分解のイメージング法の開発	京都工芸繊維大学	永原　哲彦
光神経電子集積回路素子の 20 チャンネル電子回路をふくむシークエンサー制御機構の開発	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
光神経電子集積回路素子の 20ch–500 点細胞播種用 PMMA 基板開発とマイクロ流路開発	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
多チャンネル光神経電子集積回路素子開発──DXL 位置合わせ精度向上──	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

③　計算機利用

2- ハロ酸脱ハロゲン化酵素と耐熱性システイン合成酵素の反応機構解析	長浜バイオ大学バイオサイエンス学部	中村　　卓
４量体型サルコシン酸化酵素の基質と生成物のチャネルの動力学的解析	北里大学理学部	米田　茂隆
5d 金属原子を含む多核核錯体の電子状態	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 シークエンシングに関する量子化学計算	大阪大学大学院基礎工学研究科	土井謙太郎
Hras-GTP 複合体における GTP の加水分解のメカニズムを分子動力学法により解明しようとする研究	東京薬科大学情報教育研究センター	宮川　　毅
K^+ チャネルにおけるイオンの透過パターンの濃度依存性とイオン選択性の発現機構の理論的解析	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	黒田　　裕
UVSOR におけるコヒーレント光源の開発	分子科学研究所	加藤　政博
π 電子系新規有機材料の物理・化学的性質に関する理論計算	東京大学大学院理学系研究科	松尾　　豊
アミロイド形成中間体の構造解析	千葉工業大学工学部	山本　典史
イオンチャネルの基準振動解析	分子科学研究所	古谷　祐詞
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
エナンチオ選択的な触媒反応の反応機構の研究	東北大学理学部	Gridnev Ilya
カーボンナノチューブと有機分子の相互作用の研究	大阪大学大学院理学研究科	小川　琢治
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
ガラス転移とジャミング転移の数値的研究	筑波大学大学院数理物質科学研究科	宮崎　州正
キネシン分子モーターの１分子顕微解析による神経変性メカニズムの解明 ――遺伝性痙性対麻痺の１型を引き起こす分子モーターの変異――	千葉大学大学院医学薬学府	川口　憲治
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とルテニウムカルボニル錯体による C(sp3)-H 活性化機構の解明	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
クラスター，錯体及び固体における磁性の理論	横浜国立大学工学研究院	Hannes Raebiger
ケイ素クラスターの構造と物性研究	群馬大学大学院工学研究科	津留崎陽大
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
コヒーレント分光を用いた分子クラスターにおける動的構造の解明	分子科学研究所	水瀬　賢太
コンピューターシミュレーションによる核酸の構造安定性の解析と RNA 高次構造予測法の開発	甲南大学先端生命工学研究所	杉本　直己
コンピュータシミュレーションによる，和漢薬有効成分化合物の機能解析	富山大学和漢医薬学総合研究所	梅嵜　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+ 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	千葉大学大学院薬学研究院	佐藤　慶治
スターバースト π 共役系分子の電子励起状態の構造とエネルギーの理論的解明	静岡大学理学部	三井　正明
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和ダイナミクス挙動と結晶性セルロース結合タンパク質との相互作用	宮崎大学工学部	湯井　敏文
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
タンパク質の酵素反応と機能の分子シミュレーション	京都大学大学院理学研究科	林　重彦
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
タンパク質折りたたみ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
ドープ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系研究科	今村　岳
ナイロン加水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・バイオ物質の電子状態・構造・機能の相関	東京大学大学院工学系研究科	押山　淳
ナノカーボンの光誘起転位・解離反応の動力学シミュレーション	東北大学大学院理学研究科	河野　裕彦
ナノネットワーク炭素系物質の構造と電子状態についての第一原理的研究	筑波大学大学院数理物質科学研究科	岡田　晋
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	早稲田大学大学院先進理工学研究科	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
パーキンソン病の原因タンパク質 α シヌクレインの凝集に関する分子動力学的研究	東京大学大学院工学系研究科	田畑　仁
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 σ － π 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
ボウル型共役化合物の物性調査	分子科学研究所	櫻井　英博
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	加藤太一郎
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
レーザ誘起ブレー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
異方的な場における，分子の磁場や光応答機構の解析，および新規理論の構築	東京工業大学生命理工学部	中田　浩弥
液固体ヘリウム中の原子分光	富山大学理学部	森脇　喜紀
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	愛媛大学大学院理工学研究科	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	東北大学大学院理学研究科	大野　公一
加水分解酵素と基質の相互作用に関する研究	明星大学理工学部	松本　一嗣
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
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系研究科	星　健夫
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
革新的量子計算科学の創造と大規模シミュレーション	量子化学研究協会	中辻　博
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
含ヘテロ原子有機化合物の反応性に関する理論研究	高知大学大学院総合人間自然科学研究科	金野　大助
含ホウ素 PBP ピンサー金属錯体の反応性の解明	中央大学理工学部	山下　誠
幾何学的フラストレートした強相関電子系における伝導特性の数値的研究	東京大学物性研究所	服部　一匡
機能性物質の機能発現メカニズム解明研究	分子科学研究所	古川　貢
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	星薬科大学化学研究室	坂田　健
擬１次元 1/4 充填有機分子性固体 $(EDO\text{-}TTF)_2PF_6$ 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
金属カチオン－ π 系ならびに重金属含有生体分子系の量子化学計算	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	金沢大学大学院理工研究域	小田　竜樹
金属錯体および生体関連分子の構造・反応・分子間相互作用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
金属錯体と DNA の相互作用	中央大学理工学部	千喜良　誠
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
固体表面と生体分子の相互作用に関する研究	横浜国立大学大学院工学研究院	荻野　俊郎
光化学系 II におけるキノン電子受容体の酸化還元電位制御機構	名古屋大学大学院理学研究科	野口　巧
光合成酸素発生中心 $CaMn_4O_5$ クラスターの構造，電子－スピン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
光受容タンパク質反応初期過程における超高速構造ダイナミクスの解明	(独)理化学研究所	倉持　光
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
高圧氷の物性研究	岡山大学理学部	田中　秀樹
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
高精度量子化学計算によるナノサイズ超分子の分子機能の解明	(独)理化学研究所	中嶋　隆人
高分子電解質膜の分子シミュレーション	(独)産業技術総合研究所	崔　隆基
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創成シミュレーション工学	礒部　雅晴
志賀毒素等，疾病に関わるタンパク質の分子動力学シミュレーション	国立国際医療研究センター	尾又　一実
軸不斉ユニットをもつキロオプティカルスピン系の開発	北里大学理学部	長谷川真士
実験的手法，分子動力学シミュレーションと量子化学計算とを用いた蛋白質の構造変化の解析	名古屋大学大学院理学研究科	槇　亙介
重原子を含む化合物の基底・励起電子状態と分子物性に関する量子化学計算	首都大学東京大学院理工学研究科	波田　雅彦
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
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
新型リチウムとナトリウムイオン電池材料の第一原理計算	東京大学大学院工学系研究科	山田　淳夫
人工原子・分子系における相対論効果と電子相関	早稲田大学先進理工学部	武田京三郎
水，水溶液，および生体高分子における動的相互作用の解明	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永　圭介
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
制限酵素，EcoRV の DNA 結合と切断反応における金属イオンと水の溶媒和での役割	九州工業大学大学院情報工学研究院	入佐　正幸
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
生体分子に対する分子動力学の遂行と時系列解析	奈良女子大学研究院自然科学系	戸田　幹人
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	北海道大学触媒化学研究センター	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
遷移金属触媒を用いた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
相対論的モデル内殻ポテンシャルと FMO 法の連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	お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科	森　寛敏
多環式芳香族炭化水素の構造および光物性評価	名古屋大学大学院理学研究科	川澄　克光
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
大規模複雑系の基底状態並びに励起状態に関する量子化学シミュレーション	名古屋大学大学院理学研究科	横川　大輔
大規模分子動力学シミュレーションと溶液理論による F1 モータータンパク質の機能発現における水和効果の研究	京都大学化学研究所	松林　伸幸
大規模量子化学計算プログラムの開発	分子科学研究所	石村　和也
第一原理および古典分子動力学計算によるアルミノホウケイ酸ガラスのモデリング	千葉大学大学院工学研究科	大窪　貴洋
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
第一原理的手法によるナノ・バイオ関連物質の形成に関する研究	三重大学大学院工学研究科	秋山　亨
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
第一原理量子論による遷移金属酸化物ベースの抵抗変化型メモリの動作機構の理論的解明	筑波大学計算科学研究センター	白石　賢二
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殻の緩和に対する水の分子間ポテンシャルの異方性の影響の検討	徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部	吉田　健
低原子価ケイ素およびゲルマニウムを配位原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	渡邉　孝仁
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
二次元高分子構造のシミュレーション	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
半導体ナノ構造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
反応経路自動探索法を用いた触媒反応および酵素反応機構の量子化学的系統解析	北海道大学大学院理学研究院	前田　理
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
氷の融解過程に関するシミュレーション	名古屋大学大学院理学研究科	望月　建爾
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
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
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
分子および金属クラスターの構造と電子状態の理論研究	千葉工業大学教育センター	松澤　秀則
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メディア学部	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解析シミュレーション	名古屋大学大学院工学研究科	笹井　理生
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	分子科学研究所	岩田　末廣
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粗視化シミュレーション手法の開発	岐阜大学工学部	寺尾　貴道
分子性導体における分子振動と電子および水素自由度との結合の量子化学計算による解析	分子科学研究所	山本　薫
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	金沢大学大学院理工研究域	齋藤　大明
分子動力学計算およびハイブリッド QM/MM 計算による生物機能メカニズムの計算科学的解析	兵庫県立大学大学院生命理学研究科	舘野　賢
分子内および分子間電子移動の分子軌道による研究	神奈川大学理学部	田仲　二朗
芳香族分子およびクラスターにおける光励起反応機構の振動分光による構造論的研究	東京工業大学資源化学研究所	宮崎　充彦
密度汎関数法による金属クラスター上での酸化反応および水素化反応の機構解明	豊田工業大学クラスター研究室	市橋　正彦
密度汎関数法に基づくナトリウムイオン電池正極材料におけるホスト・ゲスト反応の解析	名古屋工業大学大学院工学研究科	中山　将伸
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
薬剤の純溶媒および混合溶媒中における溶解度推算に関する新規アプローチ	近畿大学生物理工学部	藤澤　雅夫
薬物と飲食物に含まれる生理活性物質との相互作用解析	福岡大学薬学部	池田　浩人
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
有機デバイスの特性向上に向けた非晶質有機半導体材料の幾何・電子構造計算	山形大学大学院理工学研究科	横山　大輔
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
有機分子添加剤を活用した連続スーパーシリル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	赤倉松次郎
溶媒抽出によるランタノイド／アクチノイド相互分離の為の溶液中錯体構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	奥村　森
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	分子科学研究所	浜坂　剛
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	京都大学大学院工学研究科	佐藤　啓文

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	横浜市立大学大学院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)理化学研究所	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
有機金属錯体の結合性の解明	分子科学研究所	村橋　哲郎
第一原理分子動力学法の開発と種々の分光スペクトルのシミュレーション	京都大学大学院理学研究科	谷村　吉隆
量子力学／分子力学混合法（QM/MM 法）及び量子化学計算（ab initio 分子軌道法及び密度汎関数法）を用いた生体関連分子の構造，物性及び反応機構の解明	筑波大学 システム情報系	栢沼　　愛
磁性分子の電子状態の理論的研究	明治大学理工学部	村岡　　梓
生体分子のマルチコピーマルチスケールシミュレーション	(独)理化学研究所	森次　　圭

(計算物質科学イニシアティブ利用枠)

バイオマス利用のための酵素反応解析	九州大学理学部	吉田　紀生
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
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
密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究	東京大学大学院工学系研究科	押山　　淳
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
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
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
量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究	東京大学物性研究所	川島　直輝

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 ～ '05		'06		'07		'08		'09		'10		'11		'12		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	102	820	1	8	2	29	2	22	1	28	0	0	1	13	1	11	人数：登録人数
協力研究	3,560	4,819	84	208	91	219	90	200	119	412	122	316	108	292	123	325	〃
招へい協力研究	195	197	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	〃
所長招へい	3,701	3,701	162	162	132	132	159	159	148	148	148	148	78	78	89	89	人数：旅費支給者
研究会	298	4,821	13	310	9	198	4	105	5	110	6	137	4	105	10	144	〃
若手研究会等	—	—	—	—	—	—	1	12	1	10	1	14	1	11	1	19	〃
岡崎コンファレンス	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	1	29	〃
施設利用 I	1,749	3,967	47	86	59	120	72	177	60	179	66	166	98	266	107	279	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)	4,302	14,000	142	538	145	595	147	656	171	676	170	666	190	668	183	680	〃
合計	13,907	32,325	449	1,312	438	1,293	475	1,331	505	1,563	513	1,447	480	1,433	515	1,576	
経費	545,194		—		—		—		—		—		—		—		千円

＊施設利用 II は '00 より電子計算機施設利用　　('12 年度の数値は，2013.1.31 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 ～ '05		'06		'07		'08		'09		'10		'11		'12		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	4	4	6	6	人数：旅費支給者
研究会	34	603	3	37	2	55	2	18	2	44	1	1	2	68	4	63	〃
施設利用	2,417	11,937	113	494	145	678	156	708	147	660	140	659	139	682	135	696	件数：許可件数 人数：許可人数
合計	2,873	14,144	116	531	161	747	159	727	149	704	141	660	145	754	145	765	
経費	230,477		—		—		—		—		—		—		—		千円

('12 年度の数値は，2013.1.31 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
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
11	2	3	32	11	94	142
合計	84	58	448	249	1,057	1,896

＊ 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
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
11	15	2	7	17	33	17	0	51	142
合計	240	63	130	169	324	303	38	629	1,896

表３　海外からの研究者（2012年度）

１．外国人運営顧問			
WOLYNES, Peter	アメリカ	ライス大学教授	
２．分子科学研究所外国人研究職員			
BAGCHI, Biman	インド	Indian Institute of Science, Professor	'12. 4.15–'12. 7.15
PIECUCH, Piotr	アメリカ	Michigan State University, Professor	'12. 7.13–'12. 8.15
			'13. 2. 1–'13. 3.31
３．日本学術振興会招へい外国人研究者等			
TAN, Qitao	中国	Shanghai Chempartner Co. Ltd., Director	'10. 8. 5–'12. 8. 4
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			
AKA, Gerard Philippe	フランス	Ecole Nationale Superieure de Chimie Paris 教授	'12. 4.14–'12. 4.30
CHOU, Ming-hsien	台湾	HC Photonics Corp 社長兼最高経営責任者	'12. 4.19–'12. 4.20
RUEHL, Eckart Gunther Adolf	ドイツ	Freie Universitat Berlin 教授	'12. 6.24–'12. 7.19
JO, Jihee	韓国	Chosun university 学部学生	'12. 7. 2–'12. 8.31
			'13. 1.28–'13. 2.28
LIM, Jong Kuk	韓国	Chosun University 助教授	'12. 7. 2–'12. 8.31
			'13. 1.28–'13. 2.28
WU, Yang	中国	donghua University 大学院生	'12. 7.19–'12. 9.30
KWON, Yong Seung	韓国	成均館大学教授	'12. 8.16–'12. 8.23
			'13. 1.21–'13. 1.24
MIN, Byeon Hun	韓国	Sungkyunkwan University 研究員	'12. 8.16–'12. 8.23
SONG, Yun Young	韓国	成均館大学教授	'12. 8.16–'12. 8.23
ATCHALEEYA, Jinasan	タイ	Mahidol University 大学院生	'12. 8.31–'12.11.24
KUMAR, Sudipta Manna	インド	Central Drug Research institute 大学院生	'12. 9.30–'12.12.28
ROUSSEL, Eleonore	フランス	Lille University of Science and Technology 大学院生	'12.12. 2–'12.12.20
			'13. 3.17–'13. 4. 2
SZWAJ, Christophe	フランス	Universite des Sciences et Technologies de Lill 講師	'12.12. 2–'12.12.20
PAWEENA, Pongpipatt	タイ	Chulalongkorn University 大学院生	'12.12. 3–'13. 2.28
DONG, Yuping	中国	Beijing Institute of Technology 教授	'13. 2.20–'13. 2.24
ARRUNA, Dario	オーストラリア	University of Tasmania 博士研究員	'13. 2.25–'13. 3. 9
LOISEAU, Pascal Jerome	フランス	Ecole Nationale Superieure de Chimie de Paris 准教授	'13. 2.26–'13. 3.15
ILAS, Simon	フランス	Ecole National Superieure de Chimie de pari 大学院生	'13. 2.26–'13. 3.15
YIN, Gung-chian	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 助教	'13. 3. 5–'13. 3. 9
HSU, Yao-jane	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 准教授	'13. 3. 5–'13. 3. 9
WEI, Der-hsin	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 准教授	'13. 3. 5–'13. 3. 9
KUSWIK, Piort	ドイツ	Max-planck-institut ポスドク研究員	'13. 3. 7–'13. 4. 1
KEMLIN, Vincent	フランス	Institut NEEL Universite Jopseph 大学院生	'13. 3.10–'13. 3.16
SIKORA, Marcin	ドイツ	Max-plank-Institut ポスドク研究員	'13. 3.11–'13. 3.19
CHIOU, Jau-wern	台湾	National University of Kaohsiung 准教授	'13. 3.17–'13. 3.23
PENENT, Francis Jean	フランス	Laboratore de Chimie Physique 主任研究員	'13. 3.17–'13. 3.22
PONG, Way-faung	台湾	Tam Kang University 教授	'13. 3.17–'13. 3.22
WANG, Yu-fu	台湾	Tamkang University 大学院生	'13. 3.17–'13. 3.23
ROUSSEL, Eleonore	フランス	Lille University of Science and Technology 大学院生	'13. 3.17–'13. 4. 2
DABROWSKI, Maciej	ドイツ	Max-Plank-Institut fur Mikrostrukturphysik 大学院生	'13. 3.19–'13. 3.29
RASSCH, Juriane	ドイツ	The Karksruhe Institute of Tchnology ポスドク研究員	'13. 3.21–'13. 4. 1
THOMA, Petra	ドイツ	The Karksruhe Institute of Tchnology ポスドク研究員	'13. 3.21–'13. 4. 1
５．所長招へい協力研究員			
TOMAS, Ebbesen	フランス	Institut Universitaire de France ISIS, CNRS et Universite de Strasbourg 教授	'12. 5.30–'12. 6. 2
SCHOLES, Gregory	カナダ	University of Toronto Department of Chemistry 教授	'12. 6.13–'12. 6.23
SHINOBU, Ai	イスラエル	Hebrew University 大学院生	'12.10. 1–'12.10. 1
PRIOR, Yahiam	イスラエル	Weizmann Institute 教授	'12.11. 4–'12.11. 6
AVERBUKH, Ilya sh.	イスラエル	Weizmann Institute 教授	'12.11. 4–'12.11. 6

SILBERBERG, Yaron	イスラエル	Weizmann Institute 教授	'12.11. 4–'12.11. 6
岡　武史	アメリカ	The University of Cicago 名誉教授	'12.11. 6–'12.11. 7
鳥谷部　洋一	ドイツ	Ludwing-maximilians-University 研究員	'13. 1.21–'13. 1.25
6．特別訪問研究員			
SARKAR, Shaheen Md.	バングラディシュ	理化学研究所特別研究員	'12. 4. 1–'13. 3.31
BAEK, Heeyoel	韓国	理化学研究所大学院生	'12. 4. 1–'13. 3.31
NI, Huagang	中国	浙江理工大学准教授	'12. 6.15–'12. 9.12
KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika	スリランカ	千葉大学特任助教	'12. 8. 1–'13. 3.31
YOUSEF, Ibraheem	ヨルダン	SESAME Synchrotron 研究員	'13. 1.25–'13. 2.23
7．特別協力研究員			
BOONSRI, Pornthip	タイ		'12. 4. 1–'12. 7.31
8．招へい研究員			
LELOUP, Valentin	フランス	Ecole National Superieure de Chimie Chimie Paris Tech 大学院生	'12. 4. 1–'12. 5.31
			'12. 6. 1–'12. 6.30
			'12. 7. 1–'12. 8.31
服部　素之	アメリカ	Oregon Health and Science University 博士研究員	'12. 4.11–'12. 4.11
RUNGNIM, Chompoonut	タイ	Chulalongkorn University 大学院生	'12. 4.20–'12. 5. 1
VOLETY, Srinivas	インド	Center for Cellular and Molecular Biology, Technical officer	'12. 4.27–'12. 6. 1
WIESNER, Karoline	イギリス	University of Bristol 准教授	'12. 6.24–'12. 7. 1
TAN, Si-hui	シンガポール	Agency For Science Technology and Research 博士研究員相当	'12. 6.24–'12. 7. 1
SKRZYPCZYK, Paul	イギリス	University of Cambridge 博士研究員相当	'12. 6.24–'12. 6.30
久保　結丸	フランス	Commissariat a l'Energie Atomique 博士研究員	'12. 6.25–'12. 6.26
DAHLSTEN, Oscar	シンガポール	National University of Singapore, Research Fellow	'12. 6.26–'12. 6.30
相川　清隆	オーストリア	University of Innsbruck ポスドク研究員	'12. 7. 2–'12. 7. 7
北川　拓也	アメリカ	Harvard University 大学院生	'12. 7.13–'12. 7.14
渡辺　悠樹	アメリカ	University of California, Barkley 大学院生	'12. 8. 9–'12. 8. 9
ZHU, Tong	中国	Shenyang pharmaceutical University 大学院生	'12. 8.22–'12. 8.29
			'12.11. 7–'12.11.10
中谷　直輝	アメリカ	Princeton University ポスドク	'12. 9.13–'12. 9.13
MAYANGSARI, Tirta Rona	インドネシア	Institut Teknologi Bandung 大学院生	'12.10. 1–'12.11.14
			'12.11.15–'12.12.28
GOYAL, Megha	インド	Indian Institute of Technology Delhi 大学院生	'12.10. 1–'12.11. 9
TSAI, I-chang	台湾	National University of Kaohsiung 大学院生	'12.10. 1–'12.11.11
			'12.11.12–'12.12.22
TRAN, Quang Thuong	ベトナム	Hanoi University of Science and Technology 講師	'12.10. 8–'12.11. 7
			'12.11. 8–'12.12. 8
BAGCHI, Biman	インド	Indian Institute of Science 教授	'12.10.24–'12.10.30
SUDTO, Kanokorn	タイ	Kasetsart University 大学院生	'12.10.30–'12.11.30
			'12.12. 1–'12.12.31
WANG, Yu-ting	台湾	National Chiao Tung University 大学院生	'12.11. 1–'12.12.15
			'12.12.16–'13. 1.29
LEE, Eun	韓国	Sungkyunkwan University 大学院生	'12.11. 2–'12.12.15
			'12.12.16–'13. 1.27
PRANEENARARAT, Thanit	タイ	Chulalongkorn University 講師	'12.11. 2–'12.12. 1
GOUK, Shiou Wah Darren	マレーシア	University of Malaya 大学院生	'12.11. 5–'12.12.12
			'12.12.13–'12.12.27
YANG, Daiwen	シンガポール	National University of Singapore 教授	'12.11. 6–'12.11.10
LAX.FAWZI, Nicolas	アメリカ	Laboratory of Chemical Physics ポスドク研究員	'12.11. 6–'12.11.14
NIELSEN, Niels Christian	デンマーク	University of Aarhus 教授	'12.11. 6–'12.11.11
SHRESTHA, Pravesh	韓国	Yonsei University 大学院生	'12.11. 7–'12.11.11
LEE , Inhwan	タイ	Yonsei University 大学院生	'12.11. 7–'12.11.11
OH, Daeseok	韓国	Yonsei University 大学院生	'12.11. 7–'12.11.11
HUANG, Taihuang	台湾	Institute of Biomedical Sciences Research Fellow	'12.11. 7–'12.11.10
CHOI, Sooho	韓国	Yonsei University 大学院生	'12.11. 7–'12.11.11

LEE, Weontae	韓国	Yonsei University 教授	'12.11. 7–'12.11.11
YUN , Ji-hye	韓国	Yonsei University 大学院生	'12.11. 7–'12.11.11
JUNG, Youngjin	韓国	Yonsei University 大学院生	'12.11. 7–'12.11.11
MOON, Sunjin	韓国	Yonsei University 大学院生	'12.11. 7–'12.11.11
MINGJIE , Zhang	中国	Hong kong University 教授	'12.11. 7–'12.11.11
LEE, Dongju	韓国	Yonsei University 大学院生	'12.11. 7–'12.11.11
TIAN, Changlin	中国	University of Science and Technology of China 教授	'12.11. 7–'12.11.11
KIM, Heeyoun	韓国	Yonsei University 大学院生	'12.11. 7–'12.11.11
CHEN, Lipeng	中国	Southwest University 大学院生	'12.11.11–'12.12. 4
LEVITT, Malcolm.harris	イギリス	South University School of Chemistry 教授	'12.11.13–'12.11.14
嶋　盛吾	ドイツ	Max-Planck-InstitutePRESTO researcher	'12.11.13–'12.11.14
CHIANG, Hsin-lin	台湾	中央研究院物理研究所兼任助理	'12.11.29–'12.12.20
HU, Chin-kun	タイ	The LSCP, Academia Sinica 教授	'12.12. 7–'12.12.15
			'13. 2.18–'13. 2.21
渡辺　峻一郎	イギリス	University of Cambridge 研究員	'12.12.11–'12.12.11
後藤　振一郎	イギリス	Lancaster University シニア研究員	'12.12.26–'12.12.26
大坪　嘉之	フランス	Synchrotoron SOLEIL ポスドク研究員	'12.12.27–'12.12.27
AHN, Tae Kyu	韓国	Sungkyunkwan University 准教授	'13. 1.15–'13. 1.17
KRSTIC, Predrag	アメリカ	University of Tennessee Knoxville JICS(Senior Research Scientist) 教授	'13. 2.18–'13. 2.21
柴田 幹大	アメリカ	MAX Planck Florida Institute for Neurosience ポスドク研究員	'13. 3.26–'13. 3.26
9．岡崎コンファレンス			
JOCHIM, Selim	ドイツ	Physikalisches Institut 教授	'13. 1. 2–'13. 1.11
PUPILLO, Guido	フランス	ISIS Laboratoire de Physique Quantique, Directeur	'13. 1. 4–'13. 1.11
HOMMELHOF, Peter	ドイツ	University of Erlangen-Nuremberg Erwin-Rommel-Str 教授	'13. 1. 5–'13. 1.11
CAMPBELL, Wesley C.	アメリカ	University of California Los Angeles, Assistant Professor	'13. 1. 6–'13. 1.11
ENGEL, Gregory S.	アメリカ	The University of Chicago 准教授	'13. 1. 6–'13. 1.11

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）	2012. 9.28	2016. 9.27	自然科学部長	所長
韓国化学会 物理化学ディビジョン	韓国	分子科学研究所と韓国化学会物理化学ディビジョンとの日韓分子科学合同シンポジウムに関する覚書	日韓の分子科学分野の先導的研究者が集まるシンポジウムを定期的に開催し，両国の分子科学の発展に資する	2010.11.29	2014.11.28	物理化学ディビジョン長	所長
中央研究院 原子與分子科学研究所	台湾	分子科学研究所と中央研究院原子與分子科学研究所との間の分子科学における協力に関する覚書	共同研究（物質関連分子科学，原子，分子との光科学，理論と計算の分子科学）	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

（2012.12.31 現在）

3-4-2　岡崎コンファレンス

分子科学研究所では，1976 年（1975 年研究所創設の翌年）より 2000 年まで全国の分子科学研究者からの申請を受けて小規模国際研究集会「岡崎コンファレンス」を年２～３回，合計 65 回開催し，それぞれの分野で世界トップクラスの研究者を数名招へいし，情報を相互に交換することによって分子科学研究所における研究活動を核にした当該分野の研究を国際的に最高レベルに高める努力をしてきた。これは大学共同利用機関としての重要な活動であり，予算的にも文部省から特別に支えられていた。しかし，1997 年以降，COE という考え方が大学共同利用機関以外の国立大学等にも広く適用されるところとなり，大学共同利用機関として行う公募型の「岡崎コンファレンス」は，予算的には新しく認定されるようになった COE 各機関がそれぞれ行う独自企画の中規模の国際シンポジウムの予算に切り替わった。これに伴い，分子科学研究所主催で「岡崎 COE コンファレンス」を開催することになった。一方，所外の分子科学研究者は分子科学研究所に申請するのではなく，所属している各 COE 機関から文部省に申請することになった。しかし，「岡崎コンファレンス」では可能であった助手クラスを含む若手研究者からは事実上提案できなくなるなど，各 COE 機関が行う中規模国際研究集会は小規模国際研究集会「岡崎コンファレンス」が果たしてきた役割を発展的に解消するものにはなり得なかった。その後，COE は認定機関だけのものではないなどの考えからいろいろな COE 予算枠が生み出され，その中で国際研究集会は，2004 年からの法人化に伴い日本学術振興会において一本化され，全国的に募集・選考が行われることになった。ただし，この枠はシリーズになっている大規模国際会議を日本に誘致したりする際にも申請できるなど，公募内容がかなり異なっている。一方，法人化後，各法人で小～中規模の国際研究集会が独自の判断で開催できるようになり，分子科学研究所が属する自然科学研究機構や総合研究大学院大学でその枠が整備されつつある。ただし，所属している複数の機関がお互い連携して開催するのが主たる目的となっている。

以上のように，全国の分子科学研究者からの申請に基づく「岡崎コンファレンス」を引き継ぐような小規模国際研究集会の枠組みをこれまで探索してきたが，継続的に開催していくためには分子研独自の事業として運営費交付金を使うしか方策がないことがわかった。その検討結果を受けて，「岡崎コンファレンス」を再開することを決断し，平成 18 年度に 6 年半ぶりに第 66 回岡崎コンファレンスを開催した。また平成 19 年度から平成 23 年度まで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た。平成 24 年度開催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。平成 24 年度は下記の第 72 回岡崎コンファレンスを開催した。

会 議 名：第 72 回岡崎コンファレンス
“Ultimate Control of Coherence”
（コヒーレンスの極限制御）
期　　間：2013 年 1 月 8 日（火）～ 10 日（木）
場　　所：岡崎コンファレンスセンター
組織委員：大森賢司（分子研），大島康裕（分子研）
内　　容：

ミクロなシステムの量子状態を観測・制御する研究は，近年まさに爆発的に進展している。その現状を俯瞰し今後の展開を議論する目的で，頭記の岡崎コンファレンスを開催した。国内 15 名（内 1 名は急病にてキャンセル）・国外

５名の招待講演者による口頭講演と，２３件のポスター発表を実施し，総計 59 名の参加者が討論を行った。

今回の岡崎コンファレンスの最大の特徴は，若手（全て 30 歳台）ながら突出した研究業績を挙げている研究者を海外から招聘したことであり，このような研究者を積極的にサポートする海外の体制は日本でも多いに参考になると思われる。国内招待講演者は，まさに分野を先導する壮年研究者から新進気鋭の若手までと年齢層的にバラエティーに富んだメンバーであった。議論の対象も極めて多岐に亘り，このような多様な領域における第一線の研究を一堂に集めて，コヒーレンスの生成・観測・制御に関する一般原理について集中的に議論する研究会は極めて珍しく，分野を超えた認識を共有できるようになったことは大変に有意義であったと評価された。

January 8 (Tue.)

13:00-13:10	Welcome address
13:10-13:55	**Prof. Hidetoshi Katori** *(Univ. Tokyo & RIKEN)*
	“Optical lattice clocks at Riken”
13:55-14:35	**Dr. Kazuhiro Hayasaka** *(NICT)*
	“New implementations of a single-ion optical clock”
14:35-14:50	Coffee break
14:50-15:35	**Prof. Seigo Tarucha** *(Univ. Tokyo)*
	“Generation and detection of quantum coherence and entanglement with quantum nanostructures”
15:35-16:15	**Prof. Shin Inouye** *(Univ. Tokyo)*
	“Experiments on ultracold KRb molecules”
16:15-16:30	Coffee break
16:30-17:15	**Prof. Wesley C. Campbell** *(UCLA)*
	“Emergence and frustration of magnetism in a trapped ion quantum simulator”
17:15-18:00	**Prof. Yoshiro Takahashi** *(Kyoto Univ.)*
	“Quantum simulation using ultracold ytterbium atoms in an optical lattice”
18:00-20:00	Poster Session (with light meal and drink)

January 9 (Wed.)

9:00 - 9:45	**Prof. Guido Pupillo** *(Univ. Strasbourg)*
	“Rydberg-dressed atoms under control: Many-body phases to molecular cooling”
9:45-10:25	**Prof. Nobuyuki Takei** *(IMS)*
	“Ultrafast coherent control of an ultracold Rydberg gas”
10:25-10:40	Coffee break
10:40-11:25	**Prof. Selim Jochim** *(MPI, Heidelberg)*
	“One, two, many: From few- to many-body physics with ultracold atoms”
11:25-12:05	**Prof. Norikazu Mizuochi** *(Osaka Univ.)*
	“Single spin coherence of NV center in diamond at room temperature”
12:05-13:15	Group Photo/Lunch
13:15-14:00	**Prof. Makoto Kuwata-Gonokami** *(Univ. Tokyo)*
	“Exciton Bose-Einstein condensation in a bulk semiconductor crystal”
14:00-14:40	**Prof. Yutaka Shikano** *(IMS)*
	“Exciton-polariton condensation in high excitation density regime”
14:40-14:55	Coffee break
14:55-15:40	**Prof. Yasunobu Nakamura** *(Univ. Tokyo)*
	“Coherent control in superconducting circuits”
15:40-16:20	**Prof. Atsushi Kubo** *(Univ. Tsukuba)*
	“Ultrafast dynamics of surface plasmon wave packet”
16:20-16:35	Coffee break
16:35-17:20	**Prof. Peter Hommelhoff** *(MPI, Garching)*
	“Strong field physics at a nanoscale metal tip: Controlling matter wave interference on attosecond time scales”
17:20-18:00	**Prof. Jiro Itatani** *(Univ. Tokyo)*
	“Generation of sub-two-cycle, phase-stable, intense IR pulses in a BiBO-based OPCPA for high harmonic generation in the water window”
18:30-20:30	Conference dinner

January 10 (Thu.)

9:30-10:10	**Prof. Reika Kanya** *(Univ. Tokyo)*
	“Observation of laser-assisted electron scattering and diffraction in femtosecond intense laser fields”
10:10-10:50	**Prof. Satoshi Ashihara** *(Tokyo Univ. Agriculture & Technology)*
	“Coherent control of vibrational excitations with shaped mid-IR pulses”
10:50-11:05	Coffee break
11:05-11:50	**Prof. Greg Engel** *(Univ. Chicago)*
	“Imaging quantum effects in biological systems to elucidate design principles of coherent energy transfer”
11:50-12:30	**Prof. Akihito Ishizaki** *(IMS)*
	“What do we learn about light harvesting systems from long-lived electronic coherence?”
12:30-12:40	Concluding remark

3-4-3　分子科学研究所国際共同研究

分子科学研究所は，創設以来多くの国際共同研究を主催するとともに客員を始めとする多数の外国人研究者を受け入れ，国際共同研究事業を積極的に推進し，国際的に開かれた研究所として高い評価を得ている。近年，科学研究のグローバル化が進み，また，東アジア地区における科学研究の急速な活性化の流れの中で，21 世紀にふさわしい国際共同研究拠点としての体制を構築することが急務となっている。

このような状況に鑑み，平成 16 年度，分子科学研究所は「物質分子科学」,「光分子科学」,「化学反応ダイナミックス」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，①海外の教授，准教授クラスの研究者の 10 日間程度の招聘，②分子研側からの共同研究に関わる教員の海外出張，③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 度 10 件，平成 20 年度９件，平成 21 年度 12 件，平成 22 年度 13 件，平成 23 年度 13 件，本年度 11 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。

2012 年度実施状況

代表者	研　究　課　題　名	相手国
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
横山　利彦	微斜面基板上の FeCo 合金薄膜の磁気特性	ドイツ トルコ
岡本　裕巳	ハイブリッド金属ナノロッドのプラズモン特性	韓国
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似位相整合に関する研究	フランス
繁政　英治	高分解能電子分光法で探る内殻励起状態の脱励起ダイナミクス	フランス
加藤　晃一	超高磁場 NMR を活用したタンパク質翻訳後修飾の研究	韓国
櫻井　英博	官能化バッキーボウルの合成と物性研究	ドイツ　韓国 インド　タイ
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
江　　東林	二次元高分子の合成と機能開拓	中国
木村　真一	3d，4f 電子を有する強相関系の電子状態の光学的・光電的研究	韓国
小杉　信博	走査型透過Ｘ線顕微鏡（STXM）の開発研究	カナダ ドイツ アメリカ

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書が交わされ，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。またこの覚書は 2004 年から 4 年ごとに更新を行っている。なお，韓国側の組織体制の都合上，この覚書の中の日韓合同シンポジウムに関しては，2006 年に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ている。

日韓合同シンポジウムは第 1 回を 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 月に第 11 回合同シンポジウム「分子科学の最前線」を分子科学研究所で開催した。このシンポジウムは，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。その後，第 12 回シンポジウム「光分子科学の最前線」（済州島，2007 7 月），第 13 回シンポジウム「物質分子科学・生命分子科学における化学ダイナミクス」（淡路島，2009 年 7 月），第 14 回シンポジウム“New Visions for Spectroscopy & Computation: Temporal and Spatial Adventures of Molecular Science”（釜山，2011 年 7 月）を開催してきた。次回のシンポジウムは，2013 年 7 月に神戸で開催する予定である。これらの継続的なシンポジウムを通して，日韓両国からの研究者による最新の研究が紹介されるとともに，活発な討論，研究交流が進められている。

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きた。現在，研究所として国際連携活動の在り方を検討している。韓国からの招聘に関しては，国際連携事業の中での招聘活動の一つとして，より柔軟に推進・発展させていくこととした。

3-5　大学院教育

3-5-1　特別共同利用研究員

分子科学研究所は，分子科学に関する研究の中核として，共同利用に供するとともに，研究者の養成についても各大学の要請に応じて，大学院における教育に協力し，学生の研究指導を行っている。また，特別共同利用研究員の受入状況は以下の表で示すとおりであり，研究所のもつ独自の大学院制度（総合研究大学院大学）と調和のとれたものとなっている。

特別共同利用研究員（1991年度までは受託大学院生，1992年度から1996年度までは特別研究学生）受入状況(年度別)

所　　属	1977～2002	03	04	05	06	07	08	09	10	11	12
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										1
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	5										
東京大学	31					2	4	3	3	1	1
東京工業大学	34	6	2								
お茶の水女子大学	6										
横浜国立大学	1									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	78	2			3	4	6	6	4	11	12
愛知教育大学					1						
名古屋工業大学	15		2							2	1
豊橋技術科学大学	30	7	2				1				
三重大学	7										
京都大学	40			2	1	1	1	2			1
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	26						1				2
神戸大学	5					1					
奈良教育大学	1										
奈良女子大学	4										
島根大学	1										
岡山大学	15			1							
広島大学	36	1	1								
山口大学	1										
愛媛大学	3	5	1								
高知大学	2										
九州大学	44	1								2	1

佐賀大学	13										
長崎大学			2								
熊本大学	6										
宮崎大学	6										
琉球大学	1										
北陸先端科学技術大学院大学	4		2							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	3
大阪市立大学	4										
大阪府立大学	2										
姫路工業大学	1										
学習院大学	1										
北里大学	2										
慶應義塾大学	9										
上智大学	1										
立教大学											1
中央大学									1		
東海大学	3										
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	11	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	6
計	560	26	17	14	16	17	17	17	17	27	30

＊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，さらに分子及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（2012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	9	19
機能分子科学専攻	9	8	21
計	17	17	40

在籍学生数（2012年12月現在） 単位：人　（年度別）

入学年度専攻		2007	2008	2009	2010	2011	2012	計	定　員
構造分子科学専攻	５年一貫	0	1	2	1	1	2	7	2
	博士後期	1	1	0	4	0	4	10	3
機能分子科学専攻	５年一貫	1	1	1	2	2	2	9	2
	博士後期	0	0	2	2	4	5	13	3

学位取得状況　単位：人　（年度別）

専　攻	1991 ～ 2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	74(11)	6	3	7	5	5(1)	7	5	2	2	4	120(12)
機能分子科学専攻	64(10)	1	5(4)	4	5	1	4	2(1)	5	1	2	94(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 ～ 2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012
構造分子科学専攻	98	7	7	8	11(1)	8(1)	5(1)	5(3)	5(1)	1(1)	6(2)
機能分子科学専攻	89	6	6	7	4	5(1)	5(2)	7(2)	4(2)	6(2)	8(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		
	1989-2010年度	2011年度	2012年度	1989-2010年度	2011年度	2012年度
中　国	22		3	6	1	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			3		
フィリピン				2		
ベトナム				1	1	
タイ				1	1	2

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～'10年度	'11年度	'12年度	'89～'10年度	'11年度	'12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		1	6
信州大学	3			1			4
岐阜大学						1	1
静岡大学	2			1			3
名古屋大学	2		1	6	1		10
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	13(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	2
岡山大学	3		1	2			6
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	2
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		1	4
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	34(2)		4(1)	21(2)	3(1)	3	65(6)

＊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（2012 年 12 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	合計
教　授	9	9	18
准教授	20	10	30
講　師	3	5	8
助　教	14	12	26
大学・公的機関等研究職	19	22	41
民間企業	27	23	50
その他	24	20	44
計	116	101	217

3-5-3　オープンキャンパス・分子研シンポジウム

2012年6月1日（金）午後～2日（土）午前まで分子研シンポジウム2012を開催し，引き続き2日（土）午後に分子研オープンキャンパス2012を開催した。本事業は全国の大学院生，学部学生及び若手研究者を対象に，分子研で行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いただ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6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6名の先生方に講演をお願いした。参加登録者数は，所内は掌握していないが，所外からは70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26名，修士課程29名，博士課程3名，教員・研究者9名，民間3名であり，あわせて合計70名であった。昨年度と比較すると，学部学生の参加者が増加した。所内からも多くの参加を得た。

参加者数まとめ

	学部学生	修士課程	博士課程	教員・その他	民　間	合　計
北海道	0	1	0	0	0	1
東　北	0	0	1	0	0	1
関　東	14	18	0	3	1	36
甲信越	2	0	0	0	0	2
東　海	2	0	1	0	1	4
近　畿	6	6	1	5	1	19
山　陰	0	4	0	0	0	4
九州・沖縄	2	0	0	1	0	3
合　計	26	29	3	9	3	70

3-5-4　夏の体験入学

2012年8月6日（月）～9日（木）の4日間，分子科学研究所において「総研大夏の体験入学」（第9回）を開催した。本事業は，他大学の学部学生・大学院生に対して，分子研の研究室での体験学習を通じて，総研大及び分子研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を知ってもらい，分子研や総研大への理解を深め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」として例年，特定教育研究経費の予算補助を受けており，総研大物理科学研究科の主催行事として2004年から毎年開催している。今回で9回目の開催となった。広く全国の大学に広報活動を行い，参加者を募集したところ，定員を大幅に超える応募を受け，選考の結果，32名の学生（学部学生25名，大学院修士課程学生4名，専門学校生3名）に参加いただいた。

実施スケジュールは以下のとおりである。

８月６日（月）：オリエンテーション，計算科学研究センターと UVSOR の見学
交流会
８月７日（火），８日（水）：配属研究室にて研究体験
８月９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とおりである。

	所属	学年	体験内容	対応教員
1	慶應義塾大学大学院	修士１年	量子論におけるダイナミクスとは何であるかを紙と鉛筆・計算機を駆使して体感しよう！	信定　准教授
2	山形大学大学院	修士１年	NMR を用いてタンパク質のかたちと動きを実感する	加藤（晃）教授
3	豊田工業大学大学院	修士１年	クラスター触媒を用いた反応の一例を体験	櫻井　准教授
4	山口大学大学院	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
5	横浜市立大学	学部５年	緑色蛍光蛋白質の巻き戻りを調べてみよう	桑島　教授
6	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
7	名古屋大学	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	日本大学	学部４年	光で分子を回してみよう！	大島　教授
9	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
10	東京理科大学	学部４年	原子や分子の光電効果，理論計算による帰属を体験してみよう	小杉　教授
11	法政大学	学部４年	金属錯体で学ぶ人工光合成	正岡　准教授
12	京都大学	学部３年	『スピン転移物質の合成』に関する体験入学プログラム	江　准教授
13	京都大学	学部３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
14	京都大学	学部３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
15	京都大学	学部３年	有機半導体セキシチオフェンの合成	鈴木　准教授
16	京都大学	学部３年	ナノの金属ロッドを作って波動関数を見る	岡本　教授
17	京都大学	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
18	京都大学	学部３年	膜タンパク質の分子機構に赤外分光＆顕微計測で迫る！	古谷　准教授
19	京都大学	学部３年	金属錯体で学ぶ人工光合成	正岡　准教授
20	京都大学	学部３年	計算化学のハッキング体験学習	柳井　准教授
21	京都大学	学部３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
22	京都大学	学部３年	光合成モデル化合物の合成	永田　准教授
23	京都大学	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
24	京都大学	学部３年	金属酵素モデルを用いた酵素研究の体験	藤井　准教授
25	東京大学	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
26	名古屋大学	学部３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

27	早稲田大学	学部３年	光シンセサイザー ――マイクロ固体フォトニクスからのアプローチ――	平等　准教授
28	東京工業大学	学部３年	タンパク質で生物時計を作ってみよう	秋山　教授
29	早稲田大学	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
30	群馬工業高等専門学校	１年	光合成モデル化合物の合成	永田　准教授
31	群馬工業高等専門学校	１年	光合成モデル化合物の合成	永田　准教授
32	群馬工業高等専門学校	１年	原子や分子の光電効果，理論計算による帰属を体験してみよう	繁政　准教授

3-5-5　総研大アジア冬の学校

2013年1月14日（月・祝）から17日（木）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及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９回目である。海外からの応募は107名あり，そのうち27名を受け入れた。その国籍別の内訳はタイ16名，韓国１名，中国７名，台湾１名，インドネシア１名，マレーシア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20名（国籍は日本, 中国, 台湾, タイ), 合計47名であった。今回は, テーマを“ Frontiers in Photo-Molecular Science ”とし, 光分子科学にある程度内容をしぼりこんだ講義を行った。なお，プログラムの詳細は下記のとおりである。

January 14

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

January 15

9:30-11:00:　**Prof. Toshi Nagata** (IMS)
Building Photosynthesis from Synthetic Organic Molecules
11:00-11:10:　Break
11:10-12:40:　**Prof. Toshi Nagata** (IMS)
Building Photosynthesis from Synthetic Organic Molecules
12:40-14:00:　Lunch
14:00-15:30:　**Prof. Hiromi Okamoto** (IMS)
Near-Field Microscopy and Plasmons in Metal Nanostructures
15:30-15:40:　Break
15:40-17:10:　**Prof. Hiromi Okamoto** (IMS)
Near-Field Microscopy and Plasmons in Metal Nanostructures
17:30-19:00:　**Poster Session**

January 16

9:30-11:00:　**Prof. Akihito Ishizaki** (IMS)
Photosynthetic Light Harvesting: Recent Advances in Theoretical and Experimental Studies
11:00-11:10:　Break
11:10-12:40:　**Prof. Akihito Ishizaki** (IMS)
Photosynthetic Light Harvesting: Recent Advances in Theoretical and Experimental Studies

January 17

9:30-11:00:	**Prof. Takunori Taira** (IMS)
	Solid-State Photonics toward Giant Micro-Photonics
11:00-11:10:	Break
11:10-12:40:	**Prof. Takunori Taira** (IMS)
	Solid-State Photonics toward Giant Micro-Photonics
12:40-14:00:	Lunch
14:00-15:30:	**Prof. Andrius Baltuška** (Vienna University of Technology)
	Principles and Applications of High-Energy Femtosecond Parametric Mid-IR Sources
15:30-15:40:	Break
15:40-17:10:	**Prof. Andrius Baltuška** (Vienna University of Technology)
	Principles and Applications of High-Energy Femtosecond Parametric Mid-IR Sources
17:30-19:00:	Banquet

3-5-6　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教育プログラム

2009 年度に文部科学省事業の「組織的な大学院教育改革推進プログラム」として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，3 年間のプログラムとして，2011 年度まで実施された。分子科学研究所が直接関わる構造分子科学専攻，機能分子科学専攻を含む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大学院教育が行われている。当該プログラムでは，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た。当該プログラムは 2011 年度をもって終了したが，これを継続する位置づけのものとして 2012 年度から，特別経費（概算要求）事業「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」を実施することとなった。これには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 3 専攻の参加を得ることとなった。

上記の目的のため，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（本プログラムの概要スキームを図に示す）。物理科学研究科及び高エネルギー加速器科学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。国内外の最先端研究室等へのインターンシップを体系化し，広い視野と国際性を涵養する取組も行っている。また，両研究科所属の各専攻を擁する基盤機関は国内外に分散しており，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。本プログラムでは両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物理科学学生セミナーなど，積極的な取り組みが行われている。

本プログラムは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となったことから，履修既定や単位認定法などの実務的作業・調整が進められている。

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 年間の予定で分野・専攻横断型の「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。

2012 年度の本プログラムの活動を以下に要約する。

(1)　講義

講義は原則英語で行われ，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。本年度は，前年度の 5 科目（「統合生命科学入門」，「生体分子科学」，「数理生物学演習」，「イメージング科学」，「統合生命科学シリーズ」）に，「生体分子シミュレーション入門」，「統合進化学」及び「分子細胞生物学 II」の 3 科目を新たに加えた。

(2)　「学生企画型共同研究（IRC grant）」

本企画は 2012 年度が初めての実施であった。ここでは，大学院生自らが創造性にとみ，分野横断的かつ専攻をまたいだ共同研究を企画，遂行するもので，将来の研究費申請のシミュレーションでもある。2011 年度終盤に申請を受け付け，8 件の応募中 5 件を採用した（このうち 1 件に機能分子科学専攻の大学院生 1 名が参加）。研究成果は 2012 年度生命科学リトリート（ヤマハリゾートつま恋）で発表された。

(3)　統合生命科学サマースクール（岡崎統合バイオサイエンスセンターと本プログラム共催）

本年度は生理科学専攻の富永真琴教授がオーガナイザーで「温度生物学 : 植物からヒトまで」というタイトルで 8 月に開催された。多くの参加者があり，また若手からの活発な議論があり盛会であった。

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思決定のための委員会が存在していたが，安全衛生の実際の執行は技術課が一部を担当したものの，専門に執行する組織はなかった。現在，安全衛生管理室には，専任の助教と事務支援員, 十名弱の兼任の職員を配置し，執行組織として，多くの施策を実行している。担当職員は，安全衛生を維持するのに必要な資格を全て取得し任務にあたっている。

広報室は，法人化と共に設置した部門であり，法人化する前は，単に研究活動報告や要覧誌の発行などを研究教育職員が分担で行っていただけであった。法人化以降は国民に，より積極的に研究所で行っている研究内容を分かりやすく紹介することに重点を置くようになった。例えば，分子研ウェブサイトでは，より一般に親しめるコンテンツ制作に努め, 事業内容を紹介する動画の制作や展示室を設置し, 見学者に公開している。また, 分子研における研究トピックの発信やプレスリリースを積極的に行うために，広報室は研究部門との連携をより強めて活動している。

史料編纂室は，法人化後に設置された支援組織としては一番新しい。法人化後まもなく迎えた創立 30 周年記念行事の中で分子研設立の経緯を残すことの重要性が認識された。このため，総研大葉山高等研究センターを中心に発足した「大学共同利用機関の歴史」研究プロジェクトに参加する形で史料編纂室を発足させた。分子研設立の経緯と共に, 過去に所員が行ってきた研究，分子科学コミュニティの形成過程などの歴史を整理・記録し，今後は広報室と協力しながら公開することを目指している。

4-1　技術課

技術課は，所長に直属した技術職員の組織で，2011 年 4 月 1 日の構成員は，7 班 15 係の総勢 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等高圧ガスの知識，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	
	分子科学研究所	昭和 55 年 2 月	機械，回路，電子計算機	
昭和 55	高エネルギー物理学研究所	昭和 55 年 10 月 24 日	機械	
	分子科学研究所	昭和 56 年 1 月 30 日	機械，回路，電子計算機，低温	低温分科会を創設 技術課長　内田　章
昭和 56	分子科学研究所	昭和 56 年 7 月	機械，回路，電子計算機，低温	
	高エネルギー物理学研究所	昭和 56 年 1 月 30 日	機械	
昭和 57	高エネルギー物理学研究所	昭和 58 年 3 月 17-18 日	機械，回路，電子計算機，低温	技術部長　馬場　斉 ３研究機関持ち回り開催が始まる
昭和 58	分子科学研究所	昭和 59 年 3 月 2-3 日	機械，回路，電子計算機，低温	
昭和 59	名古屋大学プラズマ研究所	昭和 59 年 11 月 15-16 日	機械，ガラス , セラミック，低温回路，電子計算機，装置技術	実行委員長　藤若　節也
昭和 60	高エネルギー物理学研究所	昭和 61 年 3 月 19-20 日	機械，計測制御，低温，電子計算機，装置技術	技術部長　山口　博司
昭和 61	分子科学研究所	昭和 62 年 3 月 19-20 日	機械，回路，電子計算機，低温	
昭和 62	名古屋大学プラズマ研究所	昭和 63 年 3 月 29-30 日	機械，回路，低温，電子計算機，装置技術	
昭和 63	高エネルギー物理学研究所	平成元年 3 月 23-24 日	機械，計測制御，低温，電子計算機，装置技術	技術部長　阿部　實
平成元	分子科学研究所	平成 2 年 3 月 19-20 日	機械，回路，低温，電子計算機，総合技術	２ヶ所で懇談会
平成 2	核融合科学研究所	平成 3 年 3 月 19-20 日	機械，低温，計測制御，電子計算機，装置技術	
平成 3	高エネルギー物理学研究所	平成 4 年 2 月 6-7 日	機械，低温，計測制御，電子計算機，装置技術	
平成 4	分子科学研究所	平成 5 年 3 月 11-12 日	装置 I，装置 II，低温，電子計算機	実行委員長　酒井　楠雄 ３研究機関代表者会議
平成 5	核融合科学研究所	平成 6 年 3 月 23-24 日	機械，低温，計測制御，電子計算機，装置技術	技術部長　村井　勝治 研究所間討論会
平成 6	高エネルギー物理学研究所	平成 7 年 2 月 16-17 日	機械，低温，計測制御，電子計算機，装置技術	技術部長　三国　晃 研究所間討論会
平成 7	分子科学研究所	平成 8 年 3 月 18-19 日	機械，回路，計測制御，電子計算機，化学分析	技術課長　酒井　楠雄 研究所間懇談会　化学分析を創設
平成 8	国立天文台・電気通信大学共催	平成 8 年 9 月 19-20 日	計測・制御，装置・回路計算機・データ処理	初めての分散開催
	大阪大学産業科学研究所	平成 8 年 11 月 14-15 日	機器分析	
	名古屋大学理学部	平成 9 年 2 月 6-7 日	装置開発 A,B，ガラス工作	
	北海道大学理学部	平 9 年 2 月 27-28 日	低温	
平成 9	核融合科学研究所	平成 9 年 9 月 11-12 日	機械，回路，低温，電子計算機，装置技術	
	静岡大学	平成 9 年 11 月 27-28 日	機器分析	工学部，情報学部，電子工学研究所各技術部の共催
平成 10	名古屋工業大学	平成 10 年 11 月 26-27 日	機器・分析	
	高エネルギー加速器研究機構	平成 11 年 3 月 4-5 日	工作，低温，回路・制御，装置，計算機	インターネット討論会
平成 11	東北大学	平成 11 年 11 月 11 日	機器・分析	
	分子科学研究所	平成 12 年 3 月 2-3 日	装置，回路，極低温，電子計算機，ガラス工作	インターネット技術討論会
平成 12	福井大学	平成 12 年 9 月 28-29 日	機器・分析	
	東北大学	平成 13 年 3 月 1-2 日	工作，装置，回路，極低温，情報・ネットワーク，材料・物性開発，地球物理観測	
平成 13	大阪大学	平成 13 年 11 月 15-16 日	機器・分析	
	核融合科学研究所	平成 14 年 3 月 14-15 日	工作，装置，計測･制御，低温，計算機･データ処理	技術部長　大竹　勲
平成 14	東京大学	平成 15 年 3 月 6-7 日	工作，装置，回路，極低温，情報・ネットワーク，生物科学，機器・分析，地球物理観測，文化財保存，教育実験・実習	
平成 15	三重大学	平成 15 年 11 月 20-21 日	機器・分析	
	高エネルギー加速器研究機構	平成 16 年 2 月 26-27 日	工作，低温，回路・制御，装置，計算機	技術部長　三国　晃

平成 16	佐賀大学	平成 16 年 9 月 16-17 日	機器分析を主とし全分野	
	大阪大学	平成 17 年 3 月 3-4 日	工作，装置，回路・計測制御，低温，情報ネットワーク，生物科学，教育実験･演習･実習	
平成 17	岩手大学	平成 17 年 9 月 15-16 日	機器・分析	
	分子科学研究所	平成 18 年 3 月 2-3 日	機械・ガラス工作，回路，低温，計算機，装置	技術課長　加藤　清則
平成 18	広島大学	平成 18 年 9 月 14-15 日	安全衛生，計測制御，機器・分析など全分野	
	名古屋大学	平成 19 年 3 月 1-2 日	機械･ガラス工作，装置技術，回路･計測･制御，低温，情報ネットワーク，生物，分析・環境，実験・実習	
平成 19	富山大学	平成 19 年 8 月 23-24 日	機器・分析	
	核融合科学研究所	平成 20 年 3 月 10-11 日	工作･低温，装置，計測･制御，計算機･データ処理	技術部長　山内　健治
平成 20	愛媛大学	平成 20 年 9 月 25-26 日	機器・分析	
	京都大学	平成 21 年 3 月 9-10 日	機械・ガラス工作，装置，回路・計測・制御，低温，情報ネットワーク，生態・農林水産，医学･実験動物，分析･物性，実験･実習・地域貢献，建築・土木，環境・安全	
平成 21	琉球大学	平成 22 年 3 月 4-5 日	機器分析，実験・実習，地域貢献，安全衛生	
	高エネルギー加速器研究機構	平成 22 年 3 月 18-19 日	機械，低温，計測・制御・回路，装置，情報・ネットワーク	
平成 22	東京工業大学	平成 22 年 9 月 2-3 日	機器分析，実験・実習，地域貢献，安全衛生	
	熊本大学	平成 23 年 3 月 17-18 日	機械・ガラス工作，装置，回路・計測・制御，低温，情報ネットワーク，生態・農林水産，医学･実験動物，分析･物性，実験･実習・地域貢献，建築・土木，環境・安全	
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	
平成 24	大分大学	平成 24 年 9 月 6-9 日	機器・分析	
	愛媛大学	平成 25 年 3 月 7-8 日	機械・材料，電気・電子・通信，情報，建築・土木・資源，化学・物性評価，特殊・大型実験・自然観測，極低温，生物・農林水産，生命科学，実験・実習，地域貢献・技術者養成，施設管理，安全衛生管理	

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。2012 年度は外部より 6 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
平成 23 年度	28

表３　平成 24 年度技術研修受入状況（2012.4.1 ～ 2013.3.31）

氏　　名	所　　属	受入期間	備　　考
阿部　慶子	一関工業高等専門学校	23.8.27–8.31	ワイヤ放電加工機の取り扱い実習
岡田　則夫	国立天文台	23.8.30	共同開発セミナー「超精密加工技術」
三ツ井健司	国立天文台	23.8.30	共同開発セミナー「超精密加工技術」
雨宮　健太	高エネルギー加速器研究機構	24.2.6	放射光ビームライン技術の最前線
間瀬　一彦	高エネルギー加速器研究機構	24.2.6	放射光ビームライン技術の最前線
原　　玲丞	(株)トヤマ	24.2.6	放射光ビームライン技術の最前線
有田　将司	広島大学	24.2.6	放射光ビームライン技術の最前線
豊島　章雄	高エネルギー加速器研究機構	24.2.6	放射光ビームライン技術の最前線
田中　宏和	高エネルギー加速器研究機構	24.2.6	放射光ビームライン技術の最前線
鳥居　龍晴	名古屋大学全学技術センター（理学）	24.2.6	放射光ビームライン技術の最前線
石川　秀蔵	名古屋大学全学技術センター（理学）	24.2.6	放射光ビームライン技術の最前線
鈴木　和司	名古屋大学全学技術センター（理学）	24.2.6	放射光ビームライン技術の最前線
岡本　　渉	シンクロトロン光研究センター	24.2.6	放射光ビームライン技術の最前線
真野　篤志	シンクロトロン光研究センター	24.2.6	放射光ビームライン技術の最前線
高野　　琢	シンクロトロン光研究センター	24.2.6	放射光ビームライン技術の最前線

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, 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	
2012 年 3 月 31 日	転出	学術支援班	
2012 年 3 月 31 日	転出	光技術班	名古屋大学

4-1-4　受賞

早坂啓一（1995 年定年退官）	日本化学会化学研究技術有功賞（1986）
	低温工学協会功労賞（1991）
酒井楠雄（2004 年定年退官）	日本化学会化学技術有功賞（1995）
加藤清則（2008 年定年退職）	日本化学会化学技術有功賞（1997）
西本史雄（2002 年辞職）	日本化学会化学技術有功賞（1999）
山中孝弥	日本化学会化学技術有功賞（2004）
石村和也	WATOC2005 Best Poster Diamond Certificate（2005）
堀米利夫	日本化学会化学技術有功賞（2005）
鈴井光一	日本化学会化学技術有功賞（2007）

吉田久史	**日本化学会化学技術有功賞（2008）**
水谷文保	**日本化学会化学技術有功賞（2009）**
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。雇い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に対しては，英文の安全衛生講習会テキストならびに英語版講習会 DVD を作成し，これらの教材を用いた安全衛生教育を行っている。

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）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（2006 年 1 月）。分子研創設（1975）に至る十数年間の歴史的な資料をはじめ，創設後の数多くの貴重な史料の収集・整理・保存など，一連のアーカイブズ活動を行ってきている。分子研関係者から寄せられた多数の史料の寄贈に感謝したい。なお, 史料編纂室のメンバーは, 木村克美（名誉教授 2006–), 鈴木さとみ（2007–), 南野智（2007–), 薬師久弥（室長, 2006–2011), 大島康裕（室長，2011– ）である。

これまで収集された史料を大別すると，次のようである。(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設立に関わる議事録，(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) 勧告直後に発足した分子研設立小委員会の議事録および「大学附置研」構想，(6) 前記の構想が学園紛争勃発によって白紙撤回された経緯，(7) 再出発した分子研設立小委員会において提案された「全国共同利用研」構想とその経緯，(8) 文部省による「分子科学」特定研究費の承認，(9) 分子研準備室の時代，(10) 分子研設立第一期（十周年記念まで）の研究態勢の動向と研究成果などを詳しく記載した定期出版物（分子研レターズや ANNUAL REVIEW など)。

最近寄贈された史料は以下の通り。(1) 吉原經太郎（分子研名誉教授）より論文等の別刷一式，(2) 諸熊奎治（分子研名誉教授）より “ ANNUAL REVIEW ”（INSTITUTE FOR MOLECULAR SCIENCE, 1999）1 冊，(3) 山崎巖（北大名誉教授, 元分子研機器センター助教授）より,「十年のあゆみ」（分子研創設 10 周年記念冊子, 1985.5.),「機器センター所蔵機器リスト」（第 6 版，1986.7.),「緊急電話連絡のしおり」（環境・安全委員会，1983.10.)，(4) 水野均（前事務センター課長補佐）より「時の動き」（冊子，政府の窓，昭 58.11.15),「赤松秀雄氏訃報」（新聞記事),「分子研創設披露式等実施要項」,「創設披露式招待出席者名簿」（昭 54.11.8),「一般公開ポスター：分子科学への招待」,「分子研－岡崎国立共同研究機関」（冊子，昭 50.4),「分子研，大学院設置構想」（冊子，昭 58.8.),「岡崎国立共同研究機構・分子研一般公開配布資料」（冊子，昭 63.11)。

分子研アーカイブズ活動にとって総研大基盤研究所との連携と交流が大きな役割を果たしている。自然科学系アーカイブズ研究会などに定期的に参加し，情報交換を行っている。

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・技術リテラシィ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。なお，平成 24 年度より，研究教育職員数名から構成される広報ワーキンググループが立ち上げられた。所長を交えて定期的に広報業務の全体的な方向性を議論し，その上で，広報室と連携して具体的対応にあたっている。

4-4-1　各種出版物の作成・配布

分子研リポート（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。研究所パンフレットは平成 24 年度に大幅な改訂を行い，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た。本年度は，一般公開の実施に合わせて，分子科学自体と研究所を分かり易く紹介する一般向けのリーフレットの作成を行った。

4-4-2　ポスター・チラシの作成・配布

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 11 件のプレスリリースを行った（平成 25 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，広報担当ワーキンググループとともに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も参加し，岡崎３研究所で協力して行うアウトリーチ活動の分子研での取りまとめを行っている。

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14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」，学術総合センター一橋記念講堂，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―宇宙に仲間はいるのか―」，学術総合センター一橋記念講堂，2010年10月10日。

第11回：「宇宙と生命―宇宙に仲間はいるのか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―宇宙に仲間はいるのかIII―」，東京国際フォーラム，2012年3月20日。

第13回：「日本のエネルギーは大丈夫か？　～ $E = mc^2$ は人類を滅ぼすのか，救うのか……～」，吹上げホール，2012年9月29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「分子研リポート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。第14回は，2013年3月20日に「分子が拓くグリーン未来」というタイトルで，講演会全体の企画を分子科学研究所が中心となって行う予定である。

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きている。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の有効利用や展示物の新規導入を行い，合わせて，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」，2012 年 11 月 17 日には東京国際フォーラムにて第３回「万物は流転する～誕生の謎」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ている。例えば，常設展示室に設置されている 920MHz NMR の半立体模型（第２回）や大型スクリーンに投影したスーパーコンピューターによるシミュレーション CG（第３回）を用いて，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。本年度は，分子研の一般公開開催に際して特別講演会を当フォーラムの一環として実施した。他の３回については通常通りの実施であり，どの回も 100 名以上（内２回は会場の収容可能人数を超える 200 名以上）の参加者があり，一般向けの公開講座として広く認知され，地域に定着してきたものと評価される。

本年度の実施状況は以下の通り。

回	開催日	テーマ	講演者
93	2012. 5.11	ノーベル化学賞を受賞して	鈴木　　章 （北海道大学名誉教授）
94	2012. 7.11	宇宙に終わりはあるか	村山　　斉 （東京大学国際高等研究所カブリ数物連携宇宙研究機構機構長）
95	2012.10.20	マイクロレーザーが拓く，次世代火力発電・自動車エンジン タンパク質の奏でる生体リズム ～生物はどのようにして時間をはかるのか？～ 植物から学べ！　人工光合成	平等　拓範 （分子科学研究所准教授） 秋山　修志 （分子科学研究所教授） 正岡　重行 （分子科学研究所准教授）
96	2013. 2. 8	現代の食品工業における技術革新	宮島　清一 （宮島醤油株式会社 代表取締役社長）

4-5-4　分子研コロキウム

分子研コロキウムは既に800回を越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返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ー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更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2012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
834	2012. 3.22	固体系量子情報の非局所化	樽茶　清悟 （東京大学大学院工学系研究科教授）
835	2012. 5.18	柔らかい多孔性配位高分子結晶（PCP/MOF）の化学	北川　　進 （京都大学大学院工学研究科教授）
836	2012. 5.31	Coupling Chemical Landscapes to the Vacuum Electromagnetic Field	Prof. Thomas W. Ebbesen (ISIS, University of Strasbourg and CNRS, Strasbourg, France)
837	2012. 6.15	Water in Chemistry and Biology : Unique Features of H_2O	Prof. Biman Bagchi （Indian Institute of Science）
838	2012. 6.22	Lessons from Nature about Solar Light Harvesting	Prof. Gregory D. Scholes （トロント大学）
839	2012. 7.20	統計力学と熱力学の関係性 ～情報科学の視点を入れて～	鹿野　　豊 （分子科学研究所若手独立フェロー（特任准教授））
840	2012. 9.25	Ultrafast Chemical Dynamics from Raman Spectroscopy	Prof. Siva Umapathy （Indian Institute of Science）
841	2012. 9.27	What Do We Learn about Photosynthetic Light Harvesting from Long-Lived Electronic Coherence?	石崎　章仁 （分子科学研究所若手独立フェロー（特任准教授））
842	2012.11.16	Structural Basis for Light-Gated Cation Conductance by Channelrhodopsin	濡木　　理 （東京大学大学院理学系研究科教授）
843	2013. 1.18	Structural Science of Nanocarbon Molecules: A Synthetic Approach from Organic Chemistry	磯部　寛之 （東北大学大学院理学研究科教授）
844	2013. 2.15	Local Coupled-Cluster Methods for Chemical Reaction Pathways Involving Large Molecular Systems	Prof. R. Piotr Piecuch （Michigan State University）

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	物の性質は何できまるか
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	吉原經太郎	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 24 年度は隔年で開催される「岡崎ものづくりフェア 2012」へ大学・研究機関として参加出展した。

(2)　コミュニティサテライトオフィス講演会

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

開催日	テーマ	講　師
2009. 1.15	分子を活用する近未来技術～分子科学研究所が関与するエネルギー問題や環境問題等への取組み～	西　　信之　教　授
2010. 1.19	次世代の太陽電池について	平本　昌宏　教　授

4-6　理科教育への協力

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，2011 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，2012 年 2 月 4 日には NMR の原理と応用に関する研修会を実施し，県内から 8 名の高校教員が参加して午前・午後を費やして講義ならびに実習を受講した。本年度は，2013 年 3 月 9 日に，「分子を探る，放射光の科学」として UVSOR において研修会を実施予定である。

岡崎高校への支援としては，「Tea’n’Talk」と題して 20 名程度の生徒と英語で語り合うイベントに，当研究所の外国人博士研究員が講師として参加した。現在の研究から留学生活の実情までを英語で紹介した後，自由なディスカッションを実施した。周到に用意された内容で高度な研究も分かり易く説明されていたことが，高校サイドから高く評価された。また，全ての参加者から活発に質問があり，英語コミュニケーション研修として大変に有意義であったとの評価も受けた。

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「酸化物半導体薄膜を利用した光波干渉と光発電」「デスクトップ電子顕微鏡で観るナノの世界」と題した 2 つの体験型ブースを出展した。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。第 4 回も同じく岡崎コンファレンスセンターにて，2012 年 12 月 26 日に実施された。研究所紹介の展示ブースでは，3D 分子シミュレーションにインタラクティブに参加できる体験展示や，大型スクリーンに投影したスーパーコンピューターによるシミュレーション CG を出展した。また第 3 回同様に，所内の学生・研究者がプレゼンテーションに対する指導・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	吉原經太郎　教　授
12	1987. 9.26	コンピュータで探る分子の世界	柏木　　浩　助教授
15	1988. 7. 2	目で見る低温実験・発光現象と光酸化現象	木村　克美　教　授
18	1988.10.29	人工光合成とは何か	坂田　忠良　助教授
21	1989. 6.24	星間分子と水――生命を育む分子環境――	西　　信之　助教授
24	1989.10.21	常温での超伝導は実現できるか	那須奎一郎　助教授
27	1990. 6.23	目で見る結晶の生成と溶解 ――計算機による実験（ビデオ）――	大瀧　仁志　教　授
30	1990.10.20	電気と化学	井口　洋夫　所　長
33	1991. 6.22	自己秩序形成の分子科学 ――分子はどのようにしてリズムやパターンを作り出すか――	花崎　一郎　教　授
37	1991.12.14	からだと酸素，そしてエネルギー：その分子科学	北川　禎三　教　授
39	1992. 7. 7	サッカーボール分子の世界	加藤　立久　助教授
42	1992.11.13	炭酸ガスの化学的な利用法	田中　晃二　教　授
45	1993. 6.22	化学反応はどのように進むか？	正畠　宏祐　助教授
48	1993.10. 1	宇宙にひろがる分子の世界	齋藤　修二　教　授
51	1994. 6.21	分子の動き	伊藤　光男　所　長
54	1995. 6.20	生体内で活躍する鉄イオン――国境なき科学の世界――	渡辺　芳人　教　授
57	1996. 6.28	分子を積み上げて超伝導体を作る話	小林　速男　教　授
60	1997. 6.13	生体系と水の分子科学	平田　文男　教　授
63	1998. 6.12	電子シンクロトロン放射光による半導体の超微細加工 ――ナノプロセスとナノ化学――（UVSOR 見学）	宇理須恆雄　教　授
66	1999. 6. 8	レーザー光で，何が見える？　何ができる？	猿倉　信彦　助教授
69	2000. 6. 6	マイクロチップレーザーの可能性	平等　拓範　助教授
72	2001. 6. 5	ナノメートルの世界を創る・視る	夛田　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
105	2012. 6. 5	電気はどうして流れるのか	中村　敏和　准教授

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	計算機シュミレーションで見る原子・分子の世界	伊藤　　暁　助　　教
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
額田中	2012. 6.21	植物から学ぶ人工光合成	正岡　重行　准 教 授
岩津中	2012. 6.29	魔法の物質「触媒」ってなんだろう？	唯　美津木　准 教 授
甲山中	2012. 7.11	分子と光の秘密	平本　昌宏　教　授
竜南中	2012.10.19	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
矢作中	2012.11. 8	光と分子	長坂　将成　助　　教
城北中	2013. 2.12	小さすぎる世界を覗いてみよう	鹿野　　豊　特任准教授

岡崎市立小豆坂小学校（親子おもしろ科学教室）

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

4-6-5　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	豊田市立猿投台中学校，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，岡崎市立竜南中学校，豊田市立藤岡中学校
2012	4	12	岡崎市立竜海中学校，岡崎市立岩津中学校，岡崎市立美川中学校，岡崎市立額田中学校

4-6-6　その他

(1)　岡崎市小中学校理科作品展

岡崎の３研究所は，岡崎市小中学校理科作品展に輪番（原則として３年に１回）でブース出展を行っている。分子科学研究所は，2007 年にパネル展示のほか，子どもたち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 年には，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。2012 年には，一般公開の宣伝とともに，3D 分子シミュレーションにインタラクティブに参加できる展示を行い，多くの子どもたちに参加して頂いた。

(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行っており，分子科学研究所

においては，2012年10月20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。2012年度は，7月に同校の式方式により表彰を行った。また，岡崎市立竜海中学校では，夏休み自由研究における理科作品の優秀者を10月に，さらに，岡崎市立三島小学校では，親子作品展における優秀者を2月に，いずれも同校の協力の下，岡崎3機関として表彰した。

4-7　一般公開

研究所で行われている最先端の研究について広く一般の方々に理解を深めて頂くとともに，科学の面白さを体感しより身近に感じて頂くために，一般公開を開催している。現在では，岡崎市にある３つの研究所が輪番で公開を実施しているので，３年に１回の公開となっている。

2012 年は分子研の公開の年にあたり，「行こう！　分子探しの旅へ」をメインテーマに 10 月 20 日（土）に実施された。今回の一般公開では，見学者の利便性を考慮して会場を「計算機センター１階」「実験棟」「UVSOR」「岡崎コンファレンスセンター」の４ヶ所に集約した。特に，実験棟４階の計 10 スパンのスペースならびにコンファレンスセンターの中会議室とホワイエに，総計 29 の展示を集中して配置した。そのうちの半数近くが見学者の方々が実験したり物を作ったりパソコンを操作したりできる体験型のものであった。また，見学者の動線も配慮しつつ幾つかの研究施設（スパコン，UVSOR，極短パルスレーザー，NMR 等）を選択して見学用に公開した。さらに，市民公開講座分子科学フォーラム特別版として，所内３名の研究者が各自の研究を解説する講演を行った。一般公開とのコラボレーション企画として，「ひらめき☆ときめきサイエンス～ようこそ大学の研究室へ～」ならびに「女性科学者とおしゃべりしよう！　資生堂サイエンスカフェ in 分子研」も同時開催した。新しい取り組みとして，磁気カードを用いたタッチラリーを実施した。入場者数の正確な把握や，見学者の時間的推移の追跡が可能となり，今後の運営方針を考える上で有用な情報となった。今回の総来場者数が 1,100 名強と前回までよりもかなり少な目であった点に関しては，周知の方法について再検討が必要であろうと考えられ，次回への検討課題である。

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
第 13 回	2012.10.20 (Sat)	入場者　1126 人

4-8　見学者受け入れ

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

団体申込み

年度	受入件数	見学者数	見学受入機関名
1990	10	250	(財)レーザー技術総合研究所 東京工業大学理学部応用物理学科　ほか
1991	3	110	静岡県新材料応用研究会 名古屋大学工学部電気・電子工学科　ほか
1992	7	162	三重大学技術職員研修会 慶応義塾大学理工学部化学科　ほか
1993	9	211	(財)名古屋産業科学研究所超伝導調査研究会 東京工業大学化学科　ほか
1994	7	145	(社)日本化学工業界技術部 慶応義塾大学理工学部化学科　ほか
1995	4	122	日本電気工業会名古屋支部 静岡県高等学校理科研究会　ほか
1996	7	180	(財)新機能素子研究開発協会 明治大学付属中野中学・高等学校　ほか
1997	9	436	(財)科学技術交流財団 慶応義塾大学理工学部化学科　ほか
1998	6	184	東京地方裁判所司法修習生 開成高等学校　ほか
1999	8	206	愛知県商工部 愛知県高等学校視聴覚教育研究協議会　ほか
2000	12	225	(財)衛星通信教育振興協会 東京農工大学　ほか
2001	8	196	中部経済産業局統計調査員協会 愛知県立豊田西高等学校　ほか
2002	5	118	関西工業教育協会 静岡県立浜松西高等学校　ほか
2003	8	146	中部経済連合会 愛知県立一宮高等学校　ほか
2004	11	198	中部電力（株） 立命館高等学校　ほか
2005	10	317	自動車技術会中部支部 慶熙大学（Kyung hee University）　ほか
2006	8	144	山梨県立都留高等学校 西三河地区理科教育研究会　ほか
2007	9	349	(社)電気学会 愛知県立安城南高等学校　ほか
2008	14	294	自動車技術会中部支部 愛知県立岡崎北高等学校　ほか
2009	8	154	東京都立科学技術高等学校 (株)デンソー技研センター　ほか

2010	18	401	東海大学付属高輪台高等学校 愛知県技術士会　ほか
2011	13	222	山梨県立都留高等学校 トヨタ紡織株式会社基礎研究所　ほか
2012	14	200	愛知県がんセンター，愛知教育大学，立命館高等学校，株式会社デンソー基礎研究所，東海大学付属高輪台高等学校，東京都立科学技術高等学校，福井県立藤島高等学校，幸田町教育研究会，岡崎信用金庫，岡崎市，埼玉大学

（2003年度から2006年度までの見学者数には，職場体験の参加者数を含む。）

個人申込み（分子研展示室）

年度	受入件数	見学者数
2010	13	33
2011	13	35
2012	3	9

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ニクス連携事業，研究設備ネットワーク事業）は平成 22 年度からの第２期中期計画の開始において相当予算削減された上で一般経費化された。なお，スーパーコンピュータ共同利用事業の特別経費については第１期中期計画期間の段階からすでに一般経費化されている。これら事業の継続は認められているが，今後も運営費交付金一般経費の予算削減は続くと予想され，第１期中期計画期間と同じ水準での事業実施は困難である。すべての事業の精査を行い，重点化するなど事業を絞り込むこと，また，新たな事業に機動的に取り組むことが必要である。

（１）『先端的な研究を推進する拠点事業』としては，UVSOR 共同利用事業（放射光分子科学），エクストリームフォトニクス連携事業（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エアの研究開発」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勘案し，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，ハードウエ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を同時稼動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ニクス」（文部科学省）

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

(1) 「光を造る」

「光波特性制御マイクロチップレーザーの開発」（平等）

(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クスの観察や制御へと応用した研究成果と今後の展望について議論した。平成 20 年度は，５月に理化学研究所にて「イメージング」をテーマに第７回シンポジウムを開催した。ここでは，超高速分子イメージング；生体分子イメージング；テラヘルツイメージングについて議論した。さらに，11 月には「Ultrafast meets ultracold」を主題とした第８回シンポジウムを行い，超高速コヒーレント制御や極低温分子の生成，およびそれらの融合が生み出す新しい科学に関する研究成果と将来展望について議論した。平成 21 年度は，５月に理化学研究所にて「光で繋ぐ理研の基礎科学」をテーマに第９回シンポジウムを開催した。ここでは，これまでに本事業によって推進された理研の光科学研究の成果を総括するとともに，今後の展開についての意見交換が行われた。

さらに，11月には蒲郡にて分子科学研究所が主催で「凝縮系における量子の世界」と題した第10回シンポジウムを行い，固体やナノ構造体の量子性を対象にした新しい研究領域の可能性について議論した。平成22年度は，10月に理化学研究所にて「顕微分光技術と生物科学との接点」をテーマに第11回シンポジウムを開催した。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ニ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 amd 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ー研究所博士研究員）
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，他分野のアイディ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-Kα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的 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
バッキーボウ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族元素ドープ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　夛田　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-maltoso-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プ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 $(EDO\text{-}TTF)_2PF_6$ 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　冨樫　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　冨樫　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）	支援装置	代　表　者	
電荷整列相転移を起こす $(EDO\text{-}TTF)_2PF_6$ 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	冨樫　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	冨樫　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
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ンクラスターの多周波 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	伊﨑　昌伸
液中レーザー照射によるレーザードープに関する研究	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プに関する研究	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プに関する研究	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プに関する研究	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プに関する研究	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
RxEDO-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	尹田　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	九州大学先導物質化学研究所	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
ダイマーモ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・材料研究機構先端的共通技術部門　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動力学 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：斉藤　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）
	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）
第４部会	太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算 代表者：山下　晃一（東大院工）
	バイオマス利用のための酵素反応解析 代表者：吉田　紀生（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。

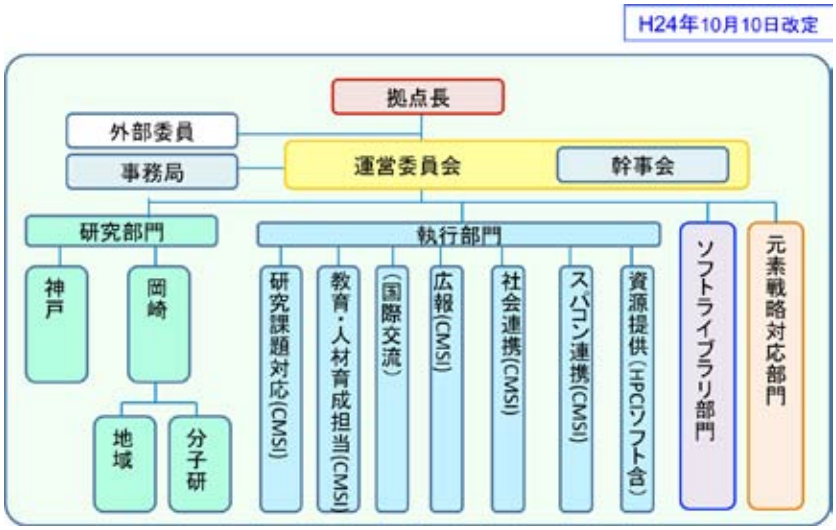


図３　計算分子科学研究拠点（TCCI）体制

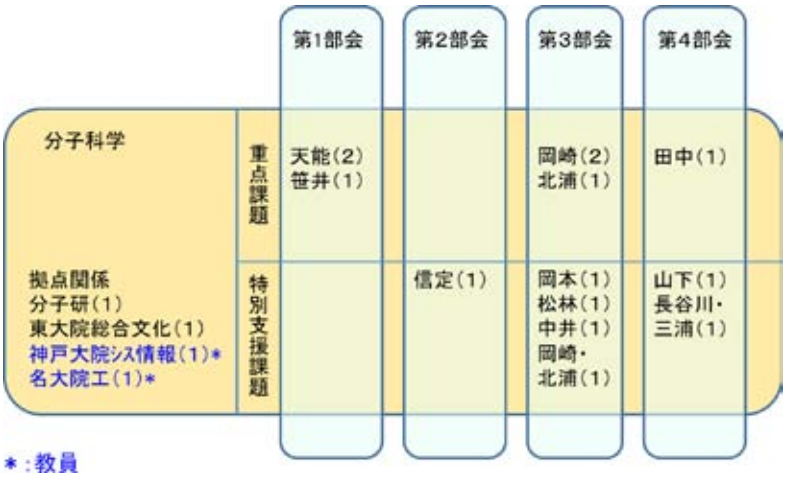


図 4　CMSI 研究員・教員配置

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

①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。

②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
CSMI 人材育成・教育の一環として企画・実施

③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・意見交換を通し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

④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。

⑤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。

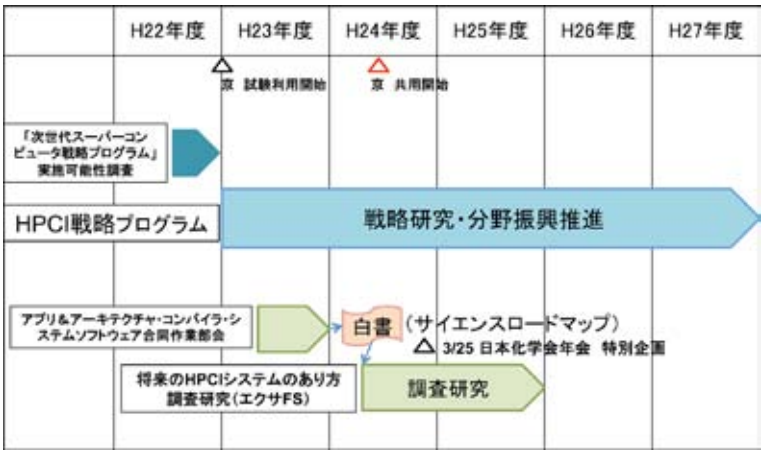


図８　TCCI 研究計画

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ニ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，フォトニ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，極低温リュ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，極低温リュ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 Weidemueller 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ニクスを目指して」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，橋渡し的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。

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
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
2011.9. ～ 2012.8.	2012	266	59

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～ 2012 年 3 月 31 日）*)

A-1) 専門領域：理論化学，計算化学

A-2) 研究課題：

a) 高周期元素の特性を利用した分子設計と反応

b) 分子のサイズと形状を利用した分子設計と反応

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 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。

b) 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，ナノグラフェン等のナノカーボン系を取り上げて，化学修飾あるいはドーピングによる機能化と伝導性を理論と計算あるいは実験と共同して明らかにした。

B-1) 学術論文

H. KURIHARA, X. LU, Y. IIDUKA, H. NIKAWA, N. MIZOROGI, Z. SLANINA, T. TSUCHIYA, S. NAGASE and T. AKASAKA, "X-Ray Structures of $Sc_2C_2@C_{2n}$ (n = 40, 41, 42): In-Depth Understanding of the Core-Shell Interplay in Carbide Cluster Metallofullerenes," *Inorg. Chem.* **51**, 746–750 (2012).

H. KURIHARA, X. LU, Y. IIDUKA, N. MIZOROGI, Z. SLANINA, T. TSUCHIYA, S. NAGASE and T. AKASAKA, "$Sc_2@C_{3v}(8)$-C_{82} vs. $Sc_2C_2@C_{3v}(8)$-C_{82}: Drastic Effect of C_2 Capture on the Redox Properties of Scandium Metallofullerenes," *Chem. Commun.* **48**, 1290–1292 (2012).

S. SATO, H. NIKAWA, S. SEKI, L. WANG, G. LUO, J. LU, M. HARANAKA, T. TSUCHIYA, S. NAGASE and T. AKASAKA, "A Co-Crystal Composed of the Paramagnetic Endohedral Metallofullerene $La@C_{82}$ and a Nickel Porphyrin with High Electronic Mobility," *Angew. Chem., Int. Ed.* **51**, 1589–1591 (2012).

H. KURIHARA, X. LU, Y. IIDUKA, H. NIKAWA, N. MIZOROGI, Z. SLANINA, T. TSUCHIYA, S. NAGASE and T. AKASAKA, "Chemical Understanding of Carbide Cluster Metallofullerenes: A Case Study on $Sc_2C_2@C_{2v}(5)$-C_{80} with Complete X-Ray Crystallographic Characterizations," *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 3139–3144 (2012).

X. ZHAO, W. -Y. GAO, T. YANG, J. -J. ZHENG, L. -S. LI, L. HE, R. -J. GAO and S. NAGASE, "Violating the Isolated Pentagon Rule (IPR): Endohedral Non-IPR C_{98} Cages of $Gd_2@C_{98}$," *Inorg. Chem.* **51**, 2039–2045 (2012).

H. -X. YEONG, S. -H. ZHANG, H. -W. XI, J. -D. GUO, K. H. LIM, S. NAGASE and C. -W. SO, "An Amidinate-Stabilized Germatrisilacyclobutadiene Ylide," *Chem. –Eur. J.* **18**, 2685–2691 (2012).

S. KARTHIKEYAN and S. NAGASE, "Origins of the Stability of Imidazole–Imidazole, Benzene–Imidazole, and Benzene–Indole Dimers: CCSDS(T)/CBS and SAPT Calculations," *J. Phys. Chem. A* 1**16**, 1694–1700 (2012).

M. SAITO, Y. HASHIMOTO, T. TAJIMA, K. ISHIMURA, S. NAGASE and M. MINOURA, "Molecular Structure of Dibenzo[*a*,*e*]pentalenen Anion Radical and its Electronic State," *Chem. –Asian. J.* **7**, 480–483 (2012).

Y. MAEDA, M. YAMADA, T. HASEGAWA, T. AKASAKA, J. LUO and S. NAGASE, "Interaction of Single-Walled Carbon Nanotubes with Amine," *NANO* **7**, 1130001 (10 pages) (2012).

H. KURIHARA, Y. IIDUKA, Y. RUBIN, M. WAELCHLI, N. MIZOROGI, Z. SLANINA, T. TSUCHIYA, S. NAGHASE and T. AKASAKA, "Unexpected Formation of a $Sc_3C_2@C_{80}$ Bisfulleroid Derivative," *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 4092–4095 (2012).

T. AGOU, Y. SUGIYAMA, T. SASAMORI, H. SAKAI, Y. FURUKAWA, N. TAKAGI, J. -D. GUO, S. NAGASE, D. HASHIZUME and N. TOKITOH, "Synthesis of Kinetically Stabilized 1,2-Dihydorodisilenes," *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 4120–4123 (2012).

X. LU, T. AKASAKA and S. NAGASE, "Soluble and Tubular Higher Fullerenes that Encapsulate Metals," *Angew. Chem., Int. Ed.* **51**, 2812–2814 (2012).

R. QUHE, J. ZHENG, G. LUO, Q. LIU, R. QIN, J. ZHOU, D. YU, S. NAGASE, W. -N. MEI, Z. GAO and J. LU, "Tunable and Sizable Band Gap of Single Layer Graphene Sandwiched between Hexagonal Boron Nitride," *NPG Asia Materials* **4**, e6 (10 pages) (2012).

N. KANO, A. FURUTA, T. KANBE, J. YOSHINO, Y. SHIBATA, T. KAWASHIMA, N. MIZOROGI and S. NAGASE, "2,2'-Diborylazobenzenes with Double N–B Coordination: Control of Fluorescent Properties by Substituents and Redox Reactions," *Eur. J. Inorg. Chem.* 1584–1587 (2012).

C. A. CAPUTO, J. -D. GUO, S. NAGASE, J. C. FETTINGER and P. P. POWER, "Reversible and Irreversible Higher-Order Cycloaddition Reactions of Polyolefins with a Multiple-Bonded Heavier Group 13 Alkene Analogue: Contrasting the Behavior of Systems with π–π, π–π* and π–n_+ Frontier Molecular Orbital Symmetry," *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 7155–7164 (2012).

M. SUZUKI, X. LU, S. SATO, H. NIKAWA, N. MIZOROGI, Z. SLANINA, T. TSUCHIYA, S. NAGASE and T. AKASAKA, "Where Does the Metal Cation Stay in Gd@C_{2v}(9)-C_{82}? A Single-Crystal X-Ray Diffraction Study," *Inorg. Chem.* **51**, 5270–5273 (2012).

C. XU, G. LUO, Q. LIU, J. ZHENG, Z. ZHANG, S. NAGASE, Z. GAO and J. LU, "Giant Magnetoresistance in Silicene Nanoribbons," *Nanoscale* **4**, 3111–3117 (2012).

Z. D. BROWN, J. -D. GUO, S. NAGASE and P. P. POWER, "Experimental and Computational Study of Auxiliary Molecular Effects on the Mechanism of the Addition of Hydrazines to a Low-Valent Germanium Complex," *Organometallics* **31**, 3768–3772 (2012).

X. LU, K. NAKAJIMA, Y. IIDUKA, H. NIKAWA, T. TSUCHIYA, N. MIZOROGI, Z. SLANINA, S. NAGASE and T. AKASAKA, "The Long-Believed $Sc_2@C_{2v}$(17)-C_{84} is Actually $Sc_2C_2@C_{2v}$(9)-C_{82}: Unambiguous Structure Assignment and Chemical Functionalization," *Angew. Chem., Int. Ed.* **51**, 5889–5892 (2012).

Q. ZHENG, G. LUO, Q. LIU, R. QUHE, J. ZHENG, K. TANG, Z. GAO, S. NAGASE and J. LU, "Structural and Electronic Properties of Bilayer and Trilayer Graphdiyne," *Nanoscale* **4**, 3990–3996 (2012).

B-3) 総説，著書

永瀬　茂,「大きい分子の量子化学計算――多重結合分子と金属内包フラーレンを例として」, CSJ カレントレビュー 08「巨大分子系の計算化学――超大型計算機時代の理論化学の新展開」, 日本化学会篇, 化学同人, 100–105 (2012).

Z. SLANINA, F. UHLIK, S. -L. LEE, T. AKASAKA and S. NAGASE, "Stability Computation for Fullerenes and Metallofullenes," in *Handbook of Carbon Nano Materials*, F. D'Souza and K. M. Kadish, Eds., World Scientific, **Vol. 4**, pp. 381–429 (2012).

Y. MAEDA, T. AKASAK and S. NAGASE, "Endohedral Metallofullerene Functionalization," in *Advances in Carbon Nanomaterials: Science and Applications*, N. Tagmatarchis Ed., Pan Stanford Publishing, pp. 269–298 (2012).

B-4) 招待講演

永瀬　茂,「実験とのインタープレイ」, 第22回神奈川大学シンポジウム(計算化学最前線), 平塚, 2012年3月.

＊) 2012年3月31日退職

2012年4月1日京都大学福井謙一記念研究センターシニアリサーチフェロー

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) 金属クラスターにおけるプラズモン励起の解明

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) 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，その一方で依然として個々の物性の理解と機能性量子デバイス開発の間には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を解明するためのナノ光応答理論の開発とその理論に基づく第一原理計算手法の開発を行い，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。本年度は，実在系ナノ構造体の電子・電磁場ダイナミクスを扱うための超並列計算プログラムの開発を中心に進め，京コンピュータ（神戸理研）において約 20 万コアの計算にも成功した。引き続き，ナトリウムクラスターや C_{60} 分子から構成されるナノ構造体の電子・電磁場ダイナミクスの計算を行った。

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）理論を開発してきた。本年度は，OCM 理論と有限温度密度汎関数理論を融合し，電極反応の解明を行った。

c) プラズモンと呼ばれる電子の集団運動に対応する電子励起を持つプラズモニック物質が注目を浴びている。電子運動の集団性に起因してプラズモニック物質は極めて鋭敏な光応答特性を持ち，様々な光学過程の増感剤として働くことが期待されている。本研究課題では，ナトリウムクラスターにおける電子の集団ダイナミクスを時間依存密度汎関数理論に基づく電子ダイナミクス法によって追跡し，遷移密度に基づく集団性指標を用いて集団性の発現機構を定量的に明らかにした。また，ピラジン分子をナトリウムクラスターに吸着させると，クラスターのプラズモン励起によってピラジン分子のラマン散乱が著しく増強されることを見出した。従来のナノ粒子に対するプラズモン増強機構の議論では，増強度の振動モード依存性を説明できなかったが，分子振動とプラズモンに対応する電子ダイナミクスの相関の観点から明快な説明を与えることにも成功した。

d) 金ナノクラスターや金・銅複合ナノクラスターの電子物性の研究を，国内外の実験グループと共同で行った。より具体的には，金クラスターへの銅原子ドーピングやリガンドの変化に対するクラスターの安定性に関する詳細な研究を行った。

B-1) 学術論文

A. DAS, T. LI, K. NOBUSADA, Q. ZENG, N. L. ROSI and R. JIN, "Total Structure and Optical Properties of a Phosphine/Thiolate-Protected Au_{24} Nanocluster," *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 20286–20289 (2012).

W. KURASHIGE, M. YAMAGUCHI, K. NOBUSADA and Y. NEGISHI, "Ligand-Induced Stability of Gold Nanoclusters: Thiolate versus Selenolate," *J. Phys. Chem. Lett.* **3**, 2649–2652 (2012).

M. NODA, T. YASUIKE, K. NOBUSADA and M. HAYASHI, "Enhanced Raman Spectrum of Pyrazine with the Aid of Resonant Electron Dynamics in a Nearby Cluster," *Chem. Phys. Lett.* **550**, 52–57 (2012).

Y. NEGISHI, K. MUNAKATA, W. OHGAKE and K. NOBUSADA, "Effect of Copper Doping on Electronic Structure, Geometric Structure, and Stability of Thiolate-Protected Au_{25} Nanoclusters," *J. Phys. Chem. Lett.* **3**, 2209–2214 (2012).

Y. NEGISHI, K. IGARASHI, K. MUNAKATA, W. OHGAKE and K. NOBUSADA, "Palladium Doping of Magic Gold Cluster $Au_{38}(SC_2H_4Ph)_{24}$: Formation of $Pd_2Au_{36}(SC_2H_4Ph)_{24}$ with Higher Stability than $Au_{38}(SC_2H_4Ph)_{24}$," *Chem. Commun.* **48**, 660–662 (2012).

B-3) 総説，著書

安池智一,「開放系電子状態理論の開発と応用：界面分子の光励起過程研究に向けて」, 分子シミュレーション研究会会誌 *アンサンブル* **14**, 6 (2012).

B-4) 招待講演

K. NOBUSADA, "Near-Field Excitation in Nanostructure Arrays: Electron and Electromagnetic Field Fully-Coupled Dynamics," The 2nd Sweden-Japan Workshop on Nanophotonics and Related Technologies, Kista (Sweden), June 2012.

K. NOBUSADA, "Near-Field Excitation Dynamics in Nanostructures: Nonuniform and Self-Consistent Light Matter Interaction," Material Simulation in Petaflops era 2012, ISSP, Kashiwa (Japan), July 2012.

信定克幸，野田真史,「超並列計算に向けた電子・電磁場ダイナミクス法のプログラム開発」, 先駆的計算科学に関するフォーラム2012（京コンピュータ利用に向けた分子科学分野での取り組み), 九州大学情報基盤研究開発センター , 2012年 2月.

信定克幸,「近接場光ナノ空間反応場形成と光エネルギー変換」, TCCI 第2回実験化学との交流シンポジウム, 京都大学福井謙一記念研究センター , 2012年 11月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会領域1（原子・分子分野）世話人 (2003–2004).

科学技術振興機構地域振興事業評価委員会専門委員 (2005–2006).

文部科学省科学技術・学術審議会専門委員 (2006–2008).

理論化学討論会第3期世話人 (2009–).

次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム　運営委員会委員, 戦略課題小委員会（第2部会）委員, 人材育成・教育小委員会委員 (2011–).

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).

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– .

総合研究大学院大学物理科学研究科 ,「構造分子基礎理論」, 2012年 7月 23日–25日.

京都大学実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点ユニット , 拠点准教授 , 2012年 9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ッ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–).

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

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

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

科研費若手研究 (B),「表面吸着分子の開放系電子状態理論の開発と応用」, 安池智一 (2007年–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

半導体シリコンに代表される電子デバイスではなく，光と電子のダイナミクスに起因する光・電子機能性を持ったデバイスは，次世代量子デバイス候補の一つになると期待できる。我々のグループでは，ナノ分子構造体が持つ合成柔軟性と高機能多様性発現の可能性に注目し，理論的・計算科学的な観点から光・電子機能性量子デバイスの開発行うことを目標としている。そのためには，双極子近似に基づく従前の光応答理論を超えたナノ光応答理論の構築と，実在系ナノ分子構造体を扱う為の大規模計算プログラムの開発が必須である。これらの理論と計算科学的手法を用いて，ナノ分子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，広帯域・高効率太陽光エネルギー変換，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す。また，より実在系に近い物質系を対象とするためには，スーパーコンピュータを積極的に利用した超並列数値計算的研究への展開も極めて重要な研究課題である。一方，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は，現状ではほとんど開発されていない。この現状を踏まえ，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・電磁場・核ダイナミクスの研究も進めている。

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) 光合成系 II 酸素発生中心への応用

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が持たれている一方で，理論的な取り扱いはチャレンジングな問題（多参照問題）である。多参照電子状態を正しく記述するためのキーとなる物理は，原子間スケールで擬縮退した電子状態に由来する強い電子相関効果であり，この相関効果の問題の複雑さは分子サイズに対して指数関数的に複雑化し，既存の量子化学計算法ではこの現象を効率よく高精度で計算することができない。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_2 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ンテシャル曲線を再現した。

b) 光合成系 II 酸素発生中心における水分解反応は Kok サイクルと呼ばれる光照射に合わせた反応サイクル「$S_0 \rightarrow S_1 \rightarrow S_2 \rightarrow S_3 \rightarrow S_4 (\rightarrow S_0)$」に沿って起こるとされており，反応中心の Mn_4Ca クラスターは各ステップで Mn 酸化数を変化させ，最終的に水を分解するのに必要な電位を蓄えると予測される。ゆえに各ステップにおける Mn イオンの酸化状態の同定は反応機構を推測する上で重要な要素であり，XANES，XES や EPR，ENDOR などの分光実験と他の実験事実との相補的解析により様々な考察がなされてきたが，複数の同種金属が存在する事によりスペクトルが複雑になりその同定には曖昧さが残る。よって多配置理論を用いた量子化学計算により任意の構造における Mn イオンの個々の酸化状態の決定を行う。また，2011 年に光合成系 II のX線結晶解析が 1.9 Å の高分解能で達成されたことにより，酸素発生中心における水分解反応機構の解明は急速な進展を見せている。しかし，X線回折により得られた構造（XRD 構造）は EXAFS から予測された構造とは結合長など大きく異なる部分があり，密度汎関数理論から予測された構造（QM/MM 構造）が後者を支持した事や，以前から Mn_4Ca クラスターのX線回折測定ではX線照射ダメージにより Mn が 2 価へと還元され構造歪みを伴う可能性が指摘されていたことから，その構造の妥当性は未だ議論となっている。以上の背景から，本研究ではマンガンの $3d$ 軌道と架橋酸素の $2p$ 軌道の計 35 軌道からなる活性軌道空間内の多配置効果を考慮した DMRG-CASSCF 法により Mn_4Ca クラスターの高精度な波動関数を計算し個々の Mn の酸化状態の解析を

行った。また分光実験により同定され，現時点で正しいとされる S1 中間状態の酸化状態（$Mn2^{III}$ $Mn3^{IV}$ $Mn4^{IV}$ $Mn5^{III}$）を再現するか否かを指標とした構造の妥当性の検討を行った。解析の結果，QM/MM 構造における基底状態は妥当な酸化状態（$Mn2^{III}$ $Mn3^{IV}$ $Mn4^{IV}$ $Mn5^{III}$）を再現したのに対し，XRD 構造においては O9,10 から Mn4,5 への電荷移動状態（$Mn2^{III}$ $Mn3^{IV}$ $Mn4^{III}$ $Mn5^{II}$）が基底状態となった。励起状態計算をあわせて行った結果，この電荷移動状態は QM/MM 構造において基底状態より約 30 kcal/mol 高いエネルギーを持つ励起状態として存在することが確認され，参照となる（$Mn2^{III}$ $Mn3^{IV}$ $Mn4^{IV}$ $Mn5^{III}$）とは明らかに異なる電子状態である事が示された。

B-1) 学術論文

T. YANAI and T. SHIOZAKI, “Canonical Transcorrelated Theory with Projected Slater-Type Geminals,” *J. Chem. Phys.* **136**, 084107 (9 pages) (2012).

T. YANAI, Y. KURASHIGE, E. NEUSCAMMAN and G. K.-L. CHAN, “Extended Implementation of Canonical Transformation Theory: Parallelization and a New Level-Shifted Condition,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14**, 7809–7820 (2012).

W. MIZUKAMI, Y. KURASHIGE and T. YANAI, “More π Electrons Make a Difference: Emergence of Many Radicals on Graphene Nanoribbons Studied by Ab Initio DMRG Theory,” *J. Chem. Theory Comput.* **9**, 401–407 (2012).

B-4) 招待講演

T. YANAI, “Density Matrix Renormalization Group and Associated Dynamic Correlation Methods: Theory and Applications,” The XIVth International Congress of Quantum Chemistry, Boulder (U.S.A.), June 2012.

柳井　毅,「密度行列繰り込み群法を用いた量子化学計算」, 研究室セミナー , 日本原子力研究開発機構町田研究室, 2012 年 1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」, 2012 年 7月 23日–25日.

B-10) 競争的資金

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

科学技術振興機構CREST 研究,「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」, 柳井　毅, 研究分担 (2008年度–2009年度).

科研費基盤研究(C),「高精度多参照理論による大規模π共役系の強相関的な多電子励起状態の解析法と応用」, 柳井　毅 (2009年度–2011年度).

C)　研究活動の課題と展望

当該研究活動で当面課題とする問題は，多参照な電子状態(電子が強く相関する状態)であり，理論的な取り扱い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～ 2012 年 3 月 31 日）*)

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および揺らぎに関する研究

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，およびその中で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きた。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) ATP 加水分解反応から出てくるエネルギーの物理的起源：ATP 加水分解反応によって作り出されるエネルギーが生命体の活動の源泉になっていることは良く知られているが，ATP がどのようにしてエネルギーを作り出すかということについては，40年以上にもわたって生物物理あるいは生化学の分野で大きな論争が繰り広げられてきた。その論争の一方の側の主張は「ATP は自分自身の化学結合の中に大きなエネルギーを蓄えている」という考え，すなわち「ATP 高エネルギー」説である。この主張の主役は量子化学者達であった。一方，多くの実験科学者達は，その物理的起源として，水和自由エネルギーが大きく関わっていることを主張してきた。そのうちの一人，P. George 教授は ATP のモデル物質として量子化学計算でも使われるピロリン酸（二リン酸）を対象にその加水分解反応前後の水和自由エネルギーを実験的に決定し，その４つの解離状態（リン酸からプロトンがとれて負の電荷を持った状態）のどの状態についても，反応前の物質の方が反応後の物質よりも 7~8 キロカロリー高い自由エネルギー状態にあることを証明した。そして，その結果から，ATP が作り出すエネルギーは「反応前後の分子の水和自由エネルギーの差」に起因するという主張を行ったのである。不幸なことに，George 教授の主張は量子化学の「権威」の前に否定され，現在にいたるまで，「ATP 高エネルギー」物質説が定説として生物や生化学の教科書で紹介されてきた。

我々は本研究において，これまで平田グループで開発してきた 3D-RISM/SCF 理論を用いて，この問題に挑戦した。すなわち，ピロリン酸の加水分解反応前後の結合エネルギー（電子状態変化に伴うエネルギー変化）および水和自由エネルギー変化を 3D-RISM/SCF 理論を用いて計算し，下記の結果および結論を得た。

① 3D-RISM/SCF による計算結果は，ピロリン酸の４つの解離状態に関して，ほぼ，定量的に George 教授の実験結果と一致し，ATP が作り出すエネルギーは「反応前後の分子の水和自由エネルギーの差に起因する」という George 教授の

結論を支持している。

②真空中での量子化学計算の結果は，4つの解離状態で全く異なっており，中には，エネルギーを作り出すどころか，反応が起きるためには大量のエネルギーを必要（吸熱反応）とする場合もある。この結果は「ATP 高エネルギー物質」説を完全に否定している。［*J. Chem. Theory Comput.* **8**, 2239 (2012) に既報］

b) GPU を使った 3D-RISM/RISM プログラムの高速化：我々が開発した 3D-RISM/RISM 理論は，現在，AMBER や GAMESS などのスタンダードな分子科学計算パッケージに組み込まれ，分子科学分野に大きな影響を与えているだけでなく，MOE という医療，創薬関係のパッケージに組み込まれ，実際の創薬の現場における応用の期待が高まりつつある。しかし，現在の 3D-RISM/RISM の計算速度は大量（10 万規模）の薬剤候補化合物を短時間にスクリーニングするほど高くはない。（K-computer を全ノード使えば，1 万の化合物のスクリーニングをおそらく 1 時間以内に終了することができると思われる。）従来のワークステーションのように誰でもアクセスできる高性能マシンで性能を発揮する 3D-RISM/RISM プログラムを開発する必要がある。「誰でもアクセスできる高性能マシン」として，現在，最も大きな期待を集めているのが，GPU（Graphics Processing Unit）というマシン（正確には，ワークステーションなどに組み込んで使う「加速演算素子」のようなもの）であり，我々は本研究において，3D-RISM/RISM プログラムの GPU 版を開発した。［*J. Chem. Theory Comput.* **8**, 3015 (2012) に既報］

B-1) 学術論文

D. SINDHIARA, N. YOSHIDA and F. HIRATA, “Placevent: An Algorithm for Predicting of Explicit Solvent Atom Distribution—Application to HIV-1 Protease and F-ATP Synthase,” *J. Comput. Chem.* **33**, 1536–1543 (2012).

Y. MARUYAMA and F. HIRATA, “Modified Anderson Method for Accelerating 3D-RISM Calculations Using Graphics Processing Unit,” *J. Chem. Theory Comput.* **8**, 3015–3021 (2012).

J. HONG, N. YOSHIDA, S.-H. CHONG, C. LEE, S. HAM and F. HIRATA, “Elucidating the Molecular Origin of Hydrolysis Energy of Pyrophosphate in Water,” *J. Chem. Theory Comput.* **8**, 2239–2246 (2012).

B-3) 総説，著書

平田文男,「新しい分子統計力学・統計的動力学記述法」, CSJ カレントレビュー 08「巨大分子系の計算化学――超大型計算機時代の理論化学の新展開」, 第7章, 化学同人 (2012).

吉田紀生，丸山　豊，清田泰臣，今井隆志，平田文男,「水と生体分子のハーモニー」, CSJ カレントレビュー 08「巨大分子系の計算化学――超大型計算機時代の理論化学の新展開」, 第15章, 化学同人 (2012).

B-4) 招待講演

F. HIRATA, “From Statistical Mechanics of Lquids to Biomolecular Science,” Lecture in “Sokendai Asian Winter-School,” Okazaki Conference Center, January 2012.

F. HIRATA, “From Statistical Mechanics of Liquids to Biomolecular Science,” Lecture in “Protein Folding Winterschool,” High1 Resort, Jeongseon-gun (Korea), February 2012.

F. HIRATA, “Exploring life phenomena with a statistical mechanics of molecular liquids,” The Internatinal Conference on Statistical Mechanics of Molecualr Liquids: From Water to Biomolecules, Okazaki Conference Center, February 2012.

平田文男,「溶液化学で解き明かす生命現象の不思議」, 電気化学会第79回大会シンポジウム「溶液化学の新しい展開」, アクトシティ浜松, 2012年3月.

B-6) 受賞，表彰

平田文男, 日本化学会学術賞 (2001).

佐藤啓文, 日本化学会進歩賞 (2002).

鄭　誠虎, 日本物理学会若手奨励賞 (2008).

清田泰臣, 溶液化学シンポジウムポスター賞 (2010).

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).

学会誌編集委員

Phys. Chem. Commun., Advisary Board.

Theoretical and Computational Chemistry, 編集委員.

Condensed Matter Physics, Editorial Board.

J. Chem. Phys., Editorial Board (2007–2010).

Journal of Molecular Liquids, Editor-in-Chief (2012–).

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エアの研究開発」拠点長 (2006–2012).

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–2012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–2013年).

＊）2012 年 3 月 31 日退職

2012 年 4 月 1 日立命館大学生命科学部客員教授

米　満　賢　治（准教授）（1996 年 2 月 1 日～ 2012 年 3 月 31 日）*)

A-1) 専門領域：物性理論

A-2) 研究課題：

a) 集積型金属錯体の電荷分離相と電荷均一相の振動状態に対する分子内電子励起効果

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 光誘起相転移の前駆となる過渡状態は平衡状態から大きく離れている。したがって，過渡的な分子の価数を予測するときに，分子の価数に敏感な電子励起を観測するのと，分子振動の振動数を測定するのとでは，平衡状態で得られた経験則を使う限り，異なる結果を導いてしまう。超高速変化の初期過程では断熱ポテンシャルに沿って運動は起こらず，電子状態と振動状態の個別の情報と相関の解析が重要である。この観点から $Et_2Me_2Sb[Pd(dmit)_2]_2$ の電荷分離相とモット・ハバード相における，振動状態とその光誘起時間変化を調べた。電子相を説明するには，二量体を単位とすれば十分である。しかし，電子相によって異なる分子振動の振動数を説明するには，分子内の軌道自由度に由来した電子励起による分子振動のソフト化を考える必要がある。二量体内の様々な分子振動がそれぞれ異なる電子励起と結合することが示された。また，光励起後における分子振動の振動数の時間変化から，非断熱的挙動が明らかになった。

B-1) 学術論文

K. YONEMITSU, “Theory of Photoinduced Phase Transitions in Molecular Conductors: Interplay between Correlated Electrons, Lattice Phonons and Molecular Vibrations,” *Crystals* **2**, 56–77 (2012).

H. UEMURA, N. MAESHIMA, K. YONEMITSU and H. OKAMOTO, “Dimerization-Induced Spin-Charge Coupling in One-Dimensional Mott Insulators Revealed by Femtosecond Reflection Spectroscopy of Rb-Tetracyanoquinodimethane Salts,” *Phys. Rev. B* **85**, 125112 (7 pages) (2012).

K. YONEMITSU, “Roles of Molecular Vibrations in Photoinduced Insulator-to-Metal and Neutral-to-Ionic Transitions,” *Phys. Status Solidi B* **249**, 975–978 (2012).

K. NISHIOKA, K. NASU and K. YONEMITSU, “Two-Pulse Excitation for Efficient Formation of an sp^3 Nanodomain with Frozen Shear in a Graphite Crystal,” *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 205402 (6 pages) (2012).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. YONEMITSU, N. MAESHIMA and Y. TANAKA, “Interplay between Correlated Electrons and Quantum Phonons in Charge-Ordered and Mott-Insulating Organic Compounds,” *Acta Physica Polonica A* **121**, 372–374 (2012).

Y. TANAKA and K. YONEMITSU, “Theory of Nonlinear Conduction for Charge-Ordered States in Quasi-Two-Dimensional Organic Conductors,” *Phys. Status Solidi C* **9**, 1186–1188 (2012).

K. NISHIOKA and K. YONEMITSU, “Theory of Photoinduced Melting of Charge Order in $Et_2Me_2Sb[Pd(dmit)_2]_2$,” *Phys. Status Solidi C* **9**, 1213–1215 (2012).

M. MIYAZAKI, K. YAMAJI, T. YANAGISAWA and K. YONEMITSU, "Renormalization of Hopping Integrals in Coexistence Phase of Stripe and *d*-Wave Superconductivity in Two-Dimensional Hubbard Model," *Physics Procedia* **27**, 64–67 (2012).

N. HIRAYAMA, A. ENDO, K. FUJITA, Y. HASEGAWA, N. HATANO, H. NAKAMURA, R. SHIRASAKI and K. YONEMITSU, "Transport-Coefficient Dependence of Current-Induced Cooling Effect in a Two-Dimensional Electron Gas," *J. Electron. Mater.* **41**, 1535–1539 (2012).

B-4) 招待講演

K. YONEMITSU, "Out-of-Equilibrium Electron–Phonon Correlations during Photoinduced Melting of Charge Order in Molecular Conductors," International Conference on Electronic States and Phases Induced by Electric or Optical Impacts, Orsay (France), September 2012.

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

日本学術振興会研究開発専門委員会「ナノ物質量子相の科学」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, 2011–2012).

学会誌編集委員

日本物理学会誌, 編集委員 (1998–1999).

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

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C),「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

電荷・スピン・フォノン・軌道の自由度，分子内―分子間の自由度などが絡み合って多様な電子相を生み出す強相関電子系では，フェルミ準位から遠い軌道の電子群を励起することで，新たな物質状態を発現する可能性がある。これらを時間軸極限パルスにより限界光駆動したときの物質変換ダイナミクスを理論的に研究する。限界的状況では既存模型に含まれない自由度が主な役割を演じるので，その挙動を説明できる多電子模型がまだ存在しない。既存の理論によらないものを新たに構築する必要がある。平衡状態でのみ意味をもつ既存模型を使った計算の枠組みを越え，繰り込まれる前の複雑多電子系からの解析を提案するとともに，そこで期待される新奇な現象を予測しようと思う。

＊）2012 年 4 月 1 日中央大学理工学部教授

計算分子科学研究部門

斉　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) 溶液中の振動エネルギー緩和，生体分子における励起状態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) 光合成系では，発色団で吸収された光エネルギーが励起エネルギー移動により効率よく活性中心へと伝達される。しかし，高効率エネルギー移動はどのように達成されているのか，すなわち，各色素のエネルギーレベルがどのように決まり，それらは振動・構造揺らぎの影響をどの程度受けているのかは明らかにされていない。その解明に向けて，Fenna-Matthews-Olson（FMO）タンパク質に含まれるバクテリオクロロフィルの溶液中の電子励起状態の解析を行った。

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，エネルギー緩和機構などの新たな知見を明らかにした。

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た解析を進め，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。また，高次非線形分光法のアイディアを展開し，多時間相関関数を利用した動的不均一性の解析を進めている。その結果，Fragile 液体では，中性子散乱で決定される α- 緩和時間よりも遅い時間スケールの不均一ダイナミクスを見出した。さらに，Fragile 液体から Strong 液体まで数種類の過冷却液体の不均一ダイナミクスを系統的に解析し，Fragile の性質の強い液体では α- 緩和時間と不均一ダイナミクスの寿命の分離がより大きいことを明らかにした。

B-1) 学術論文

N. YAMAMOTO, O. KAMBARA, K. YAMAMOTO, A. TAMURA, S. SAITO and K. TOMINAGA, “Temperature and Hydration Dependence of Low-Frequency Spectra of Poly-L-Glutamic Acid with Different Secondary Structures Studied by Terahertz Time-Domain Spectroscopy,” *Soft Matter* **8**, 1997–2006 (2012).

K. OHTA, J. TAYAMA, S. SAITO and K. TOMINAGA, “Vibrational Frequency Fluctuation of Ions in Aqueous Solutions Studied by Three-Pulse Infrared Photon Echo Method,” *Acc. Chem. Res.* **45**, 1982–1991 (2012).

B-3) 総説，著書

斉藤真司,「凝縮系の揺らぎ，緩和と分光法」, CSJ カレントレビュー 08「巨大分子系の計算化学――超大型計算機時代の理論化学の新展開」, 76–81 (2012).

斉藤真司,「二次元赤外分光法の理論および水の分子間ダイナミックスの解析」, *日本赤外線学会誌* **80**, 22–30 (2012).

K. OHTA, J. TAYAMA, S. SAITO and K. TOMINAGA, "Solvation Dynamics of Vibrational State in Hydrogen-Bonding Solvents Vibrational Frequency Fluctuation Studied by Three-Pulse Infrared Photon Echo Method," in *Ultrafast Infrared Vibrational Spectroscopy*, M. D. Fayer, Ed., CRC Press (2012).

B-4) 招待講演

S. SAITO, "Dynamics of liquid water: Energy relaxation and fluctuation," 4th Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations," Nara, January 2012.

S. SAITO, "Chemical Reaction, Fluctuation, and Relaxation in Liquids," Marie Curie IRSES meeting on 1st International Workshop on Computer Simulations of Thermally Excited Molecules and Materials by First Principles, Nagoya, March 2012.

斉藤真司,「凝縮系ダイナミックス」, 日本化学会春季年会, 慶應義塾大学, 横浜, 2012 年 3 月.

S. SAITO, "Dynamics of liquid water: Energy relaxations and fluctuations," Recent advances in studies of molecular processes at liquid interfaces, 244th ACS National Meeting & Exposition, Philadelphia (U.S.A.), August 2012.

S. SAITO, "Dynamics of Liquid and Supercooled Water," Indo-Japan Bilateral Collaborative Seminar on Recent Advances in Spectroscopy and Microscopy: Fundamentals and Applications to Materials and Biology, Hyderabad (India), November 2012.

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,「生体分子シミュレーション入門」, 2012 年 10 月 31 日.

神戸大学大学院理学研究科,「量子化学特論」, 2012 年 10 月 11 日–12 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ックスの解析手法の開発とその応用」, 斉藤真司 (2011年度).

科研費若手研究(A),「ガラス形成液体における動的不均一性とその時空間構造の理論解析」, 金　鋼 (2011年度–2014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ックス理論の構築」, 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ッ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ックスの理論研究に関しては，水の分子内・分子間ダイナミックスの解析を行い，水の中でどのようにエネルギー緩和ダイナミッ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ックス，とくにFragile-Strong 遷移の起源を解析する。さらに，これまで我々が高速および不均一ダイナミクスを解析するために展開してきた方法論を生体分子系等に発展させ，それらの系における構造変化・遍歴ダイナミクスと生体分子の機能の関係等を明らかにしていきたい。

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，理論触媒化学

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) 電子束縛状態の電子状態理論は様々な方法が開発されているが，共鳴状態を記述する方法は未だ発展段階にあり，有用な理論の開発が期待される。我々は，その一つの可能性である複素吸収ポテンシャル（Complex Absorbing Potential，CAP）を用いた SAC-CI 法—CAP/SAC-CI 法を開発した。CAP を用いた方法はこれまで大規模系には適用が困難であったが，project スキームによって大規模系への応用を可能とし，生体分子など様々な π 共役系の共鳴状態に適用した。この理論ではハミルトニアンに複素部を導入し，その強さを変化させることにより共鳴状態を求める。まず方法論の詳細と，ホルムアルデヒドの電子付加状態の π 共鳴状態に応用し，電子透過スペクトルに観測された振動構造を解析した結果を報告した。

b) フラーレン C_{60} の励起状態はこれまで半経験的方法や基礎的な汎関数に基づく TDDFT 法などによる研究が行われているが，十分に電子相関を考慮した研究はなされていない。我々は，Coupled Cluster 法に基づく励起状態の高精度理論によって，フラーレン C_{60} の励起状態の精密な理論計算を行い，新しい帰属を提案した。また，光異性化や水の四電子酸化の触媒活性を示すルテニウム化合物の電子スペクトルについて研究し，ルテニウムの酸化状態に応じて吸収スペクトルが変化するメカニズムを明らかにした。その他，アルカンの遠紫外領域の光吸収，青色発光を示す有機 EL 分子の光物性，シンナメート分子の水素結合による励起緩和の変化などについて研究を行った。

c) X 線自由電子レーザーや同時計測法の進展により，これまで観測ができなかった２サイトの内殻二電子イオン化状態（tsDCH）や内殻二電子イオン化サテライトの観測が可能となった。実験との協力研究によって，これらの状態の解析を行った。さらに，tsDCH 状態に付随する原子間緩和エネルギー（Interatomic Relaxation Energy）の意味について検討し，２つのコアホールの間の相互作用について鎖状の分子や分極するユニットを有する分子について緩和エネルギーの性質を明らかにした。また，窒素分子やアセチレンにおける tsDCH 状態からのオージェ過程を理論的に解析し，同時計測法で得られた一次元および二次元のオージェスペクトルの結果の解析を行った。

d) 微粒子触媒は特異的な反応性を示し，新しい有用な化成品合成反応として期待される。しかし，その反応場は電子的にも複雑であり，理論モデルが鍵となる。本年度は，金・パラジウム合金クラスターにおける Ullmann カップリング反応について研究した。反応性を制御する酸化的付加のステップを検討し，金やパラジウムのみのクラスターでは反応が進行しないのに対し，合金クラスターでは反応性が進行するメカニズムを理論的に明らかにした。

B-1) 学術論文

M. EHARA, P. PIECUCH, J. J. LUTZ and J. R. GOUR, "Symmetry-Adapted Cluster-Configuration Interaction and Equation-of-Motion Coupled Cluster Studies of Electronically Excited States of Copper Tetrachloride and Copper Tetrabromide Dianions," *Chem. Phys.* **399**, 94–110 (2012).

S. SURAMITR, S. PHALINYOT, P. WOLSCHANN, S. HANNONGBUA, R. FUKUDA and M. EHARA, "Photophysical Properties and Photochemistry of *EE*-, *ZE*-, and *ZZ*-1,4-diethoxy-2,5-bis [2-(thien-2-yl)ethyenyl] benzene in Solution: Theory and Experiment," *J. Phys. Chem. A* **116**, 924–937 (2012).

K. BOBUATONG, S. KARANJIT, R. FUKUDA, M. EHARA and H. SAKURAI, "Aerobic Oxidation of Methanol to Formic Acid on Au_{20}^- Cluster: Theoretical Study on Reaction Mechanism," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14**, 3103–3111 (2012).

M. TASHIRO, K. UEDA and M. EHARA, "Double Core-Hole Shake-up Satellite Spectra of N_2 and CO Molecules," *Chem. Phys. Lett.* **521**, 45–51 (2012).

Y. MAKITA, K. IKEDA, K. SUGIMOTO, T. FUJITA, T. DANNO, K. BOBUATONG, M. EHARA, S. FUJIWARA and A. OGAWA, "Enhancement of Catalytic Reactivity of Zinc(II) Complex by a Cyclotriveratrylene-Capped Structure," *J. Organomet. Chem.* **706-707**, 26–29 (2012).

S. YAMANAKA, K. KANDA, T. SAITO, Y. KITAGAWA, T. KAWAKAMI, M. EHARA, M. OKUMURA, H. NAKAMURA and K. YAMAGUCHI, "Does B3LYP Correctly Describe Megnetism of Manganese Complexes with Various Oxidation Numbers and Various Structural Motifs?" *Chem. Phys. Lett.* **519-520**, 134–140 (2012).

R. FUKUDA and M. EHARA, "Excited States and Electronic Spectra of Annulated Dinuclear Free-Base Phthalocyanines," *J. Chem. Phys.* **136**, 114304 (15 pages) (2012).

D. SHIMADA, R. KUSAKA, Y. INOKUCHI, M. EHARA and T. EBATA, "Nonradiative Decay Dynamics of Methyl 4-Hydroxycinnamate and Its Hydrated Complex Revealed by Picosecond Pump–Probe Spectroscopy," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14**, 8999–9005 (2012).

S. K. PADHI, R. FUKUDA, M. EHARA and K. TANAKA, "Photo-Isomerization and Proton-Coupled Electron Transfer (PCET) Promoted Water Oxidation by Mononuclear Cyclometalated Ruthenium Catalysts," *Inorg. Chem.* **51**, 5386–5392 (2012).

S. K. PADHI, R. FUKUDA, M. EHARA and K. TANAKA, "A Comparative Study of C^N and N^C Type Cyclometalated Ruthenium Complexes with an NAD^+/NADH Function," *Inorg. Chem.* **51**, 8091–8102 (2012).

M. EHARA and T. SOMMERFELD, "CAP/SAC-CI Method for Calculating Resonance States of Metastable Anions," *Chem. Phys. Lett.* **537**, 107–112 (2012).

R. FUKUDA and M. EHARA, "Electronic Excitations of C_{60} Fullerene Calculated Using the Ab Initio Cluster Expansion Method," *J. Chem. Phys.* **137**, 134304 (7 pages) (2012).

R. FUKUDA, R. CHIDTHONG, R. CAMMI and M. EHARA, "Optical Absorption and Fluorescence of PRODAN in Solution: Quantum Chemical Study Based on the SAC-CI Method," *Chem. Phys. Lett.* **552**, 53–57 (2012).

N. V. KRYZHEVOI, M. TASHIRO, M. EHARA and L. S. CEDERBAUM, "Interatomic Relaxation Effects in Double Core Ionization of Chain Molecules," *J. Chem. Phys.* **137**, 154316 (10 pages) (2012).

Y. MORISAWA, S. TACHIBANA, M. EHARA and Y. OZAKI, "Elucidating Electronic Transitions from σ Orbitals of Liquid *n*- and Branched Alkanes by Far-Ultraviolet Spectroscopy and Quantum Chemical Calculations," *J. Phys. Chem. A* **116**, 11957–11964 (2012).

M. TASHIRO, M. NAKANO, M. EHARA, F. PENENT, L. ANDIC, J. PALAUDOUX, K. ITO, Y. HIKOSAKA, N. KOUCHI and P. LABLANQUIE, "Auger Decay of Molecular Double-Core Hole and Its Satellite States—Comparison of Experiment and Calculation," *J. Chem. Phys.* **137**, 224306 (8 pages) (2012).

S. NAMUANGRUK, R. FUKUDA, M. EHARA, J. MEEPRASERT, T. KHANASA, S. MORADA, T. KAEWIN, S. JUNGSUTTIWONG, T. SUDYOADSUK and V. PROMARAK, "D–D–π–A-Type Organic Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells with a Potential of Direct Electron Injection and High Extinction Coefficient: Synthesis, Characterization, and Theoretical Investigation," *J. Phys. Chem. C* **116**, 25653–25663 (2012).

R. N. DHITAL, C. KAMONSATIKUL, E. SOMSOOK, K. BOBUATONG, M. EHARA, S. KARANJIT and H. SAKURAI, "Low Temperature Carbon–Chlorine Bond Activation by Bimetallic Gold/Palladium Alloy Nanoclusters: An Application to Ullmann Coupling," *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 20250–20253 (2012).

B-3) 総説，著書

江原正博,福田 良一,「高精度電子状態理論による光機能分子の物性化学」, *未来材料*, エヌ・ティー・エス, 2月号, 15–22 (2012).

B-4) 招待講演

M. EHARA, "Recent Developments and Applications of SAC-CI", The 1st International Workshop on "Computer Simulations of Thermally Excited Molecules and Materials by First Principles," Nagoya (Japan), March 2012.

M. EHARA, "Recent Developments of SAC-CI and Its Applications to Molecular Spectroscopy," The 31st European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS), Cluj-Napoca (Romania), August 2012. (Plenary Talk)

江原正博,「理論・計算科学による元素戦略」, 分子科学シンポジウム, 東京, 2012年6月.

江原正博,「Au および Au/Pd クラスターによる多彩な触媒反応の反応経路」, シンポジウム化学反応経路探索のニューフロンティア2012, 東京, 2012年9月.

M. TASHIRO, "Theoretical Study on Auger Decay of Molecular Double Core-Hole State," The 12th International Conference on Electron Spectroscopy and Structure (ICESS-12), Saint-Malo (France), September 2012.

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–).

日本化学会東海支部常任幹事 (2011–2012).

学会の組織委員等

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

The VIIth Congress of International Society for Theoretical Chemical Physics, Organization Committee (2008–2011).

第3回分子科学討論会実行委員 (2009).

The Vth Japan-Czech-Slovakia (JCS) Symposium on Theoretical Chemistry, Nara, Japan, Organization Committee (2012–2013).

学会誌編集委員

J. Comput. Chem., Editor (2012–).

その他

元素戦略プロジェクト「実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点」 電子論グループ・リーダー (2012–).

HPCI 戦略プログラム分野2「新物質・エネルギー創成」CMSI 計算物質科学イニシアティブ　企画室委員 (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 (2008–2011).

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」, 2012年5月10日–11日.

総合研究大学院大学物理学研究科,「構造分子基礎理論」, 2012年7月23日–25日.

京都大学実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点ユニット, 拠点教授, 2012年10月15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(計画研究),「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」, 江原正博, 研究分担 (2008年–2012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).

科研費基盤研究(B),「強相関電子状態と電子共鳴状態の基礎理論の開発と複雑な量子状態への応用」, 江原正博 (2012年–2014年).

元素戦略プロジェクト「実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点」, 江原正博 (2012年–).

科研費若手研究(B),「内殻軌道から2つの電子が電離した分子に関する理論的研究」, 田代基慶 (2011年–2014年).

C) 研究活動の課題と展望

高精度電子状態理論を基盤とし，光の関わる化学現象や微粒子およびバルク触媒を研究し，新しい化学概念を構築することを目的としている。近年，電子状態理論の大規模化が進展し，ナノ材料やバイオ系への応用研究が展開している。しかし，複雑な電子状態や固体表面などに対して信頼性のある情報を提供できる理論は必ずしも確立しておらず，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。理論的には，高機能化と大規模化の観点から我々の方法を発展させるとともに，固体表面の反応を高精度に記述する理論を開発する。理論分光では，内殻励起状態の研究を進め，多電子イオン化状態を研究する方法を開発し，新しい分子分光の解釈や提案を行う。また，光機能性分子の電子過程の研究では，励起状態における構造緩和や電子移動過程について検討する。表面ー分子系の電子状態を適切に表現できる方法を確立し，微粒子触媒，バルク触媒，表面光化学を理論的に解析する。元素戦略プロジェクトで重要課題である自動車触媒や化成品合成触媒に関する研究を実施する。

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) レプリカ置換法の提案

b) 新しい自由エネルギー計算手法の開発

c) 能勢・ポアンカレ熱浴，能勢・フーバー熱浴におけるポテンシャルカットオフの効果

d) 生体分子の分子動力学シミュレーションプログラム GEMB の高速化

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 新しい拡張アンサンブル分子シミュレーション手法であるレプリカ置換法を提案した。この手法では２つのレプリカ間だけで温度を交換するのではなく，２つ以上のレプリカ間で温度を置換する。さらに効率よくレプリカの置換を行うために従来のメトロポリス判定法ではなく最近提案された諏訪･藤堂法を用いる。この手法を２重井戸型ポテンシャル中の粒子，メチオニンエンケファリン，C ペプチドに応用した。その結果，レプリカ置換法はレプリカ交換法よりも温度をより効率よく入れ替えるだけでなく，構造空間もより効率よくサンプルできることが分かった。

b) 自由エネルギーは系の熱力学的安定性の評価に重要な量である。熱力学的積分法は自由エネルギーの計算によく用いられているが，シミュレーションの後に数値積分が必要であり，またエルゴード性の破れが問題になることもある。そこで最近，反応座標を自由エネルギー面上の力学変数として扱う手法［mean force dynamics（MFD)］が導入され，より効率の高い自由エネルギー計算が試みられている。最近，我々は自由エネルギープロファイルの対数をとることにより，より効率の良い新しい MFD 法を提案した。この手法を真空中のグリシンジペプチド分子に適用したところ，熱力学的積分法と同精度の結果が約 13% の計算量で得られた。

c) 能勢・ポアンカレ熱浴を用いるとカノニカルアンサンブルにおけるシンプレクティック分子動力学シミュレーションを実行できる。シンプレクティック解法においてはポテンシャルエネルギーの連続性が必要なので能勢・ポアンカレ熱浴におけるカットオフの影響を調べた。カットオフ２階微分可能なスイッチング関数を用いた場合ではハミルトニアンはよく保存するのに対し，１階微分可能かそれ以下ではハミルトニアンは保存しなく，瞬間温度が時間とともに増大しまうことを示した。これはハミルトニアンが増えると実質的に設定温度の値を大きく設定したことに相当しまうからである。一方，能勢･フーバー熱浴ではハミルトニアンが保存しなくても温度は正しく制御できることを示した。

d) これまで独自の高速分子動力学シミュレーションプログラム Generalized-Ensemble Molecular Biophysics（GEMB）プログラムを開発してきた。このプログラムには以下のような特徴がある。

(1) 拡張アンサンブル分子動力学法により多くの構造を効率よく探索できる。

(2) シンプレクティック解法を用いているのでシミュレーションを安定に実行できる。

(3) 多時間ステップ法を使って高速にシミュレーションを行う。

(4) OPEN MP と MPI の両方を用いたハイブリッド並列化により高速に計算できる。

今年はパーティクルメッシュエバルト法を導入してこのプログラムをさらに高速化した。

B-1) 学術論文

H. NOMURA, T. KODA and H. OKUMURA, "Probing a Non-Biaxial Behavior of Infinitely Thin Hard Platelets," *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**, 114003 (6 pages) (2012).

H. OKUMURA, "Temperature and Pressure Denaturation of Chignolin: Folding and Unfolding Simulation by Multibaric-Multithermal Molecular Dynamics Method," *Proteins: Struct., Funct., Bioinf.* **80**, 2397–2416 (2012).

T. MORISHITA, S. G. ITOH, H. OKUMURA and M. MIKAMI, "Free-Energy Calculation via Mean-Force Dynamics Using a Logarithmic Energy Landscape," *Phys. Rev. E* **85**, 066702 (5 pages) (2012).

B-3) 総説，著書

H. OKUMURA, S. G. ITOH and Y. OKAMOTO, "Generalized-Ensemble Algorithms for Simulations of Complex Molecular Systems," in *Practical Aspects of Computational Chemistry II An Overview of the Last Two Decades and Current Trends*, J. Leszczynski and M. K. Shukla, Eds. Springer; Dordrecht, pp. 69–101 (2012).

B-4) 招待講演

H. OKUMURA, "Helix-strand replica-exchange molecular dynamics method and its application," 2012 NCTS November Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Taipei (Taiwan), November 2012.

S. G. ITOH, "Coulomb replica-exchange method and its applications," 2012 NCTS November Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Taipei (Taiwan), November 2012.

H. OKUMURA, "Generalized-ensemble Molecular Dynamics Simulations for Temperature and Pressure Denaturation of a Protein," Indo-Japan Workshop on Recent Advances in Spectroscopy and Microscopy: Fundamentals and Applications to Materials and Biology, Hyderabad (India), November 2012.

H. OKUMURA, "All-Atom Generalized-Ensemble Molecular Dynamics Simulations of Proteins," 5th Japan-Russia International Workshop: Molecular Simulation Studies in Material and Biological Research, Moscow (Russia), September 2012.

H. OKUMURA, "Multibaric-multithermal molecular dynamics simulations for temperature and pressure denaturation of a protein," The 17th Biophysics Conference of Biophysical Society of Republic of China, Taipei (Taiwan), May 2012.

H. OKUMURA, "New type of the Hamiltonian replica-exchange molecular dynamics method," 2012 NCTS Spring Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Taipei (Taiwan), April 2012.

H. OKUMURA, "Molecular dynamics simulations with generalized-ensemble algorithms," Winter School of Asian Core Program, Beijing (China), February 2012.

H. OKUMURA, "New generalized-ensemble molecular dynamics simulations for proteins and peptides," Seminar at Computer Chemistry Unit Cell of Chulalongkorn University, Bangkok (Thailand), January 2012.

H. OKUMURA, "Temperature and pressure denaturation of a protein and peptide by multibaric-multithermal molecular dynamics simulations," 4th Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences—Experiments and Simulations, Nara (Japan), January 2012.

奥村久士,「各種統計アンサンブルの生成法，拡張アンサンブル法」, 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―, 分子科学研究所, 2012年12月.

奥村久士,「マルチバーリック・マルチサーマル分子動力学シミュレーションによるタンパク質の温度・圧力変性」, アジア連携分子研研究会「溶液・ソフトマターの新局面：実験及び理論研究手法の開拓と新規物性探索への展開」, 分子科学研究所, 2012年6月.

伊藤　暁,「クーロンレプリカ交換法のAβ(29-42)への応用」, アジア連携分子研研究会「溶液・ソフトマターの新局面：実験及び理論研究手法の開拓と新規物性探索への展開」, 分子科学研究所, 2012年6月.

奥村久士,「タンパク質シミュレーションのための新しい拡張アンサンブル分子動力学法」, 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（非平衡を制御する科学）第二回研究会, 鳥取大学, 2012年3月.

奥村久士,「拡張アンサンブル分子動力学法によるタンパク質の温度・圧力変性」, 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, 2012年2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-10) 競争的資金

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,「天文学と連携した分子動力学シミュレーションのための新しい数値積分法の開発」, 奥村久士 (2012年度).

科研費若手研究（B),「計算機シミュレーションで探るアミロイドベータペプチドの多量体形成過程」, 伊藤　暁 (2012年度–2014年度).

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年度–2014年度).

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年度–2007年度).

C) 研究活動の課題と展望

生体分子のシミュレーションではレプリカ交換法とともにハミルトニアンレプリカ交換法もよく使われる。通常のレプリカ交換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，ハミルトニアンレプリカ交換法ではタンパク質内の相互作用に関わるパラメータだけを交換することで，レプリカの増大を抑えることができる。今年度レプリカ交換法に代わりうるレプリカ置換法を提案したので，現在ハミルトニアンレプリカ交換法のレプリカ置換版，すなわちハミルトニアンレプリカ置換法の開発に取り組んでいる。

アルツハイマー病はアミロイドベータペプチド（Aβ）と呼ばれるペプチドが凝集して不溶性のアミロイド線維を形成することで引き起こされると考えられている。このアミロイド線維はAβの多量体が多数あつまって構成されおり，アミロイド線維形成の初期段階としてAβの多量体形成がおこる。我々が開発したレプリカ置換法あるいはハミルトニアンレプリカ置換法を用いて，Aβの多量体形成過程を今後原子レベルで明らかにしたい。

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) これまでに提案，改良・発展をさせてきた時間依存形式の 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などの研究に応用し，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てきた。その結果から，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生体分子や遷移金属錯体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理論化学的，及び物理化学的側面より研究を進めてきている。分子レベルでのイオン間相互作用の理解に重点を置き，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ている。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を始めて示し，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した。さらに，イオン液体が示す特有の挙動の一つである室温付近でのガラス性挙動に関連して，動的不均一性などの研究を長時間シミュレーションの結果をもとにした解析により進めているところである。これらの研究成果と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研究を進めているところである。

B-3) 総説，著書

T. ISHIDA, “The Unique Physical and Chemical Properties of Ionic Liquids through Interionic Interactions: Theoretical Investigation with Molecular Dynamics Simulations,” in *Handbook of Ionic Liquids: Properties, Applications and Hazards*, Mun, J. and Sim, H., Eds., Nova Science Publishers Inc.; Hauppauge, NY, pp. 395–417 (2012).

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ックス」, 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とイオン液体中でのイオン間エネルギー相関に関する研究への応用，及び，ダイナミックスの分子動力学法による解析など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，生体分子や遷移金属錯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を可能にし，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・精密化とイオン液体中でのイオン間エネルギー相関を含めて，さらに展開をしていきたい。またイオン液体の動的挙動の研究に関しては，イオン分子のダイナミックスを解析する方法も発展させることができて，イオン液体の本質的な理解に向けて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統一した視点から物性などを理解できることを目指し研究を進めていきたい。

理論・計算分子科学研究部門

鹿　野　　豊（若手独立フェロー（特任准教授））（2012 年 2 月 16 日着任）

A-1) 専門領域：光物性物理学，量子光学

A-2) 研究課題：

a) 非平衡凝縮体の生成および検出

b) ハイブリッド量子系における制御理論

c) 光信号増幅の技術開発

d) 平衡状態の情報科学的見地からの再定義

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 半導体中のマイクロ共振器系における共振器ポラリトンはそのフォトルミネッセンスを検出することから凝縮体を形成することが知られている。これが平衡状態に近い系で知られているボーズ・アインシュタイン凝縮体として捉えられるかどうか問題であった。低密度励起領域では，近似的にボーズ・アインシュタイン凝縮体として解釈しても問題でないということを明らかにし，高密度励起領域では，従来のレーザー発振とは違う領域が存在することを理論的に予言し，実験でもその理論予言がサポートされる結果を得た。

b) 近年，量子情報処理を中心に注目されている異なる物理系に実現された有限次元の量子力学系をハイブリッド量子系と呼ぶ。近年，実験に成功されたダイアモンド中の窒素・格子欠陥中心と超伝導量子ビットとの結合系において，そのマグノン制御のための条件を明らかにした。

c) １分子光検出などで必須の技術である微弱信号の増幅技術を量子力学の干渉効果をうまく用いることにより明らかにすることが出来た。具体的には，ビームプロファイルをガウスモードではなく非ガウスモードを用いることにより，より大きな効果の信号増幅が出来ることを示した。

d) 熱力学と統計力学はどちらもマクロな物理を取り扱う理論であるがその対応関係は明確になっていなかった。そこで，平衡状態において情報科学的見地を用いて操作論的に統計力学を定義し直し，もともと操作論的に定義されてきた熱力学との対応関係を情報理論的エントロピーを用いて明らかにした。

B-1) 学術論文

Y. SUSA, Y. SHIKANO and A. HOSOYA, “Optimal Probe Wavefunction of Weak-Value Amplification,” *Phy. Rev. A* **85**, 052110 (7 pages) (2012).

H. KOBAYASHI, G. PUENTES and Y. SHIKANO, “Extracting Joint Weak Values from Two-Dimensional Spatial Displacements,” *Phys. Rev. A* **86**, 053805 (4 pages) (2012).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. SHIKANO, “The counterfactual process in weak values,” *Phys. Scr.* **T151**, 014015 (2012).

Y. SHIKANO, J. HORIKAWA and T. WADA, “The discrete-time quantum walk as a stochastic process in quantum mechanics,” *Phys. Scr.* **T151**, 014016 (2012).

B-3) 総説，著書

Y. SHIKANO, *Time in Weak Value and Discrete Time Quantum Walk*, LAP Lambert Academic Publishing, Germany (2012).

Y. SHIKANO, "Theory of "Weak Value" and Quantum Mechanical Measurements," in *Measurements in Quantum Mechanics*, M. R. Pahlavani, Ed., InTech, Croatia, pp. 75–100 (2012).

Y. SHIKANO, "Special issue on quantum walks," *Quant. Inf. Proc.* **11**, 1013–1014 (2012).

B-4) 招待講演

鹿野　豊, "On the usefulness of Weak-Value amplication," **AMO 討論会**, **和光**, **2012年6月**.

B-8) 大学での講義，客員

チャップマン大学, **客員助教**, **2011年11月**–.

C) 研究活動の課題と展望

これまではそれぞれの物理スケールを固定した解析を行ってきた。しかし，今後の課題としては，これらを有機的に組み合わせるような手法を構築しなければならない。例えば，平衡熱力学は理想気体の分子運動論にもともとは立脚していたはずであるが，そのミクロスケールの物理現象を捨象することにより，抽象的理論が展開されてきた。マクロな機能の発現を狙う理論の構築やミクロの素過程の理解のためには，これらの物理スケールを超えた解析が必須になるであろう。そのための現象論的結果を半導体レーザーと共振器ポラリトン凝縮体との対応関係を調べることにより手がかりを得たと思われる。

石　崎　章　仁（若手独立フェロー（特任准教授））（2012 年 3 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：理論物理化学

A-2) 研究課題：

a) 凝縮相化学反応過程の量子動力学理論

b) 分子システムの環境適応性に関する理論

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 光合成色素タンパク質複合体のような凝縮系における電子移動／電子励起移動ダイナミクスの実験研究は，巨視的な分子アンサンブルにレーザーを照射することでなされ，その理論解析には統計力学に基づく古典および量子マスター方程式が用いられ一定の成功を収めてきた。そこでは電子励起を取り巻く環境としてのタンパク質は揺動・散逸を引き起こすだけの化学的には無個性な熱浴として扱われ，その分子個性や機能的側面が議論されることは皆無であった。本プロジェクトでは「光合成光捕獲系における電子／電子励起を好ましい方向に効率よく移動させるには電子／電子励起とそのダイナミクスそしてそれを取り巻く局所的なタンパク質環境・アミノ酸残基はどうあるべきか？」という物理化学原理の模索に取り組むべく新規量子動力学理論開発の取り組みを開始した。

b) 光合成光捕獲系における色素の電子励起エネルギー移動を議論する上で，色素分子とタンパク質環境との相互作用によって形成される色素分子の励起エネルギー「地形」は重要な枠割を果たし，電子励起がエネルキー地形の勾配に従って拡散するという描像で議論されてきた。このエネルギー地形は *in vitro* のサンプルを用いた分光実験とX線結晶構造の情報により決定され，また色素の電子状態の揺らぎとタンパク質の局所的な歪みの間には線形応答論が成り立つことが前提とされてきた。しかし，そのような議論では環境変動に応じた「高い効率で起こるエネルギー移動」と「過剰摂取したエネルギーを熱放出させる制御機構」という一見相反する２つの機構の自律的スイッチング・環境適応性を説明できない。本プロジェクトでは，光合成エネルギー移動過程の環境適応性を生み出す因果関係のループを明らかにすべく，色素タンパク質複合体の局所的な歪みが誘起するコンフォメーション変化，それに伴う色素の再配置・エネルギー地形変化の可能性の検討を統計力学的モデルに基づいて開始した。

B-1) 学術論文

G. S. SCHLAU-COHEN, A. ISHIZAKI, T. R. CALHOUN, N. S. GINSBERG, M. BALLOTTARI, R. BASSI and G. R. FLEMING, “Elucidations of Timescales and Origins of Quantum Electronic Coherence in LHCII,” *Nat. Chem.* **4**, 389–395 (2012).

S. HOYER, A. ISHIZAKI and K. B. WHALEY, “Spatial Propagation of Excitonic Coherence Enables a Quantum Ratchet for Electronic Energy Transfer,” *Phys. Rev. E* **86**, 041911 (14 pages) (2012).

K. MARUYAMA, D. BURGARTH, A. ISHIZAKI, K. B. WHALEY and T. TAKUI, “Application of Indirect Hamiltonian Tomography to Complex Systems with Short Coherence Times,” *Quantum Infor. Comput.* **12**, 0763–0774 (2012).

J. M. DAWLATY, A. ISHIZAKI, A. D. KUMAR and G. R. FLEMING, “Microscopic Quantum Coherence in Photosynthetic Light Harvesting Antenna,” *Phil. Trans. R. Soc. A* **370**, 3672–3691 (2012).

B-3) 総説，著書

A. ISHIZAKI and G. R. FLEMING, “Quantum coherence in photosynthetic light harvesting,” *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **3**, 333–361 (2012).

B-4) 招待講演

A. ISHIZAKI, “Quantum coherence in photosynthetic light harvesting,” Workshop on Coherent Energy Transport and Optimization in Photosynthesis, Nanyang Technological University, Singapore (Singapore), December 2012.（スケジュール不具合のため取消）

石﨑章仁,「What do we learn about photosynthetic light harvesting from long-lived electronic coherence?」, 第 841回分子研コロキウム, 分子科学研究所, 岡崎, 2012年 9月.

A. ISHIZAKI, “On the generalized/multichromophoric Förster theories,” Institute for Scientific Interchange, Turin (Italy) July 2012.

石﨑章仁,「What can we learn about photosynthetic light harvesting from long-lived quantum coherence in electronic energy transfer?」, 第9回AMO 討論会, 理化学研究所, 和光, 2012年 6月.

A. ISHIZAKI, “What do we learn about photosynthetic light harvesting from long-lived electronic quantum coherence?” School of Materials Science and Engineering, Nanyang Technological University, Singapore (Singapore), May 2012.

A. ISHIZAKI, “Quantum coherence and its interplay with protein environments in photosynthetic electronic energy transfer,” Special Seminar of a candidate for Assistant Professor, Department of Chemistry, University of California Berkeley, Berkeley (U.S.A.), January 2012.（分子研着任のため辞退）

A. ISHIZAKI, “Quantum coherence and its interplay with protein environments in photosynthesis,” Department of Chemistry, Stanford University, Stanford (U.S.A.), January 2012.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

ベルギー王国 the 22th Solvay Conference on Chemistry, Scientific Secretary (2010).

B-10) 競争的資金

科研費研究活動スタート支援,「光合成エネルギー移動ダイナミクスを制御するタンパク質構造の揺らぎと変化について」, 石﨑章仁 (2012年–2014年).

ドイツ連邦共和国Short-term Fellowship at Wissenschaftskolleg zu Berlin, “Bridging Quanta, Molecules, and Life: Theoretical investigation of responsive and autonomous behaviors of molecular systems,” Akihito Ishizaki (2012年–2013年).

日本学術振興会海外特別研究員事業,「光合成複合体における超高速エネルギー移動の量子力学的機構の解明」, 石﨑章仁 (2008年–2010年).

科研費特別研究員奨励費,「超高速非線形分光による凝縮相中分子および分子集合体の量子動力学の理論的解析」, 石﨑章仁 (2006年–2008年).

C)　研究活動の課題と展望

帰国し1年が経過しようとしている。当面の大きな課題は，光合成光捕獲系の色素電子状態・電子励起エネルギー移動だけに注視してきた従来の理論物理化学を越えて，その環境適応性というダイナミックで自律的な分子機構を理解することである。多重の階層を跨ぐかもしれない問題の複雑さと現在の研究グループの規模を鑑みて，この数年は将来の定量的で詳細な大規模研究への展開に備えた理論の枠組み構築に重心を置くことになる。また，研究の広がりを実現させるためにはグループの拡充も重要な課題となる。高性能コンピュータに基づく種々の計算技術が発達した現在においても，理論研究を新しい方向に向かわせる原動力はやはり何気ない談話や遠慮ない議論，人であろう。

6-3　光分子科学研究領域

光分子科学第一研究部門

岡　本　裕　巳（教授）（2000 年 11 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：分子分光学，物理化学

A-2) 研究課題：

a) 先端的な近接場分光法の開発

b) メソスコピックな構造を持つ有機分子集合体の近接場計測

c) 金属ナノ構造におけるプラズモン波，増強電場のイメージングと近接場相互作用

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。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。現在この手法を洗練させ，貴金属ナノ構造その他の試料の励起ダイナミクス研究に適用する方向で研究を継続している。また，近接場円二色性イメージングの装置開発を進めており，基本的な測定が可能となった。２次元のキラルな構造を持つ金属ナノ構造体を電子線描画法で作成して近接場円二色性イメージを測定し，局所的に大きな円二色性信号が得られる等，興味深い結果が得られつつある。この手法についても更に精度を向上させ，様々な系に適用する予定である。

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近接場光重合について検討している。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一昨年度から開始したが，震災の影響で中断している。

c) 各種形状金属ナノ構造体の分光及びダイナミクスの測定を，単一ナノ構造内で空間を分解して行っている。貴金属微粒子の近接場分光測定により，プラズモンモードの波動関数の二乗振幅に対応するイメージが得られることを以前に見いだし，所外との共同研究も積極的に行いその展開を図った。最近では例えば，金薄膜上に開けた幅の狭い長方形の空孔（ナノロッドの反転した構造に対応する）中に，ナノロッドにおけるプラズモン波と同様，プラズモンに起因する定在波が立つことを，近接場光学像により示した。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，多くの所外との共同研究も含め進めている。我々は以前に，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を実証したが，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。最近では例えば，球状微粒子の有限直鎖状配列構造において，粒子数が多くなると増強電場が配列の両端近傍に集中することなどを近接場光学像で示し，微粒子プラズモン間の相互作用の結果としてそれを解釈した。また，ナノロッドと球状微粒子の相互作用による特徴的な増強電場の可視化を行った。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，フェムト秒で可視～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た。

B-1) 学術論文

H. J. WU, Y. NISHIYAMA, T. NARUSHIMA, K. IMURA and H. OKAMOTO, "Sub-20-fs Time-Resolved Measurements in an Apertured Near-Field Optical Microscope Combined with a Pulse-Shaping Technique," *Appl. Phys. Express* **5**, 062002 (3 pages) (2012).

B-3) 総説，著書

岡本裕巳,「近接場光学顕微鏡」, 大学院講義物理化学（第2版), III. 固体の化学と物性, 小谷，幸田，染田，阿波賀 編, 東京科学同人, pp. 272–278 (2012).

井村考平，岡本裕巳,「金属ナノ構造における局在プラズモンモードの動的近接場イメージング」, *レーザー研究* **40**, 571–578 (2012).

B-4) 招待講演

岡本裕巳,「金属ナノ構造における光反応場のナノ光 学イメージング」, 日本化学会第92春季年会, 日吉, 2012年3月.

岡本裕巳,「ナノ光学の手法による貴金属ナノ構造の物理化学的特性の研究」, 日本化学会第92春季年会, 日吉, 2012年3月.

岡本裕巳,「動的近接場分光法とプラズモン」, 電気化学会第79回大会, 浜松, 2012年3月.

岡本裕巳,「近接場光学顕微鏡とプラズモン物質の光子場イメージング」, 日本顕微鏡学会第68回学術講演会, つくば, 2012年5月.

B-6) 受賞，表彰

岡本裕巳, 光科学技術研究振興財団研究者表彰 (1994).

岡本裕巳, 分子科学研究奨励森野基金 (1999).

井村考平, 応用物理学会講演奨励賞 (2004).

井村考平, ナノオプティクス賞 (2005).

井村考平, 分子構造総合討論会奨励賞 (2005).

井村考平, 光科学技術研究振興財団研究者表彰 (2007).

井村考平, 日本化学会進歩賞 (2007).

井村考平, 日本分光学会賞（奨励賞) (2007).

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).

成島哲也, Yamada Conference LXVI Best poster award (Young Scientist) (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 (2001–2012).

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).

Yamada Conference LXVI: International Conference on the Nanostructure-Enhanced Photo-Energy Conversion, Programming Committee (2012).

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).

文部科学省研究振興局科学研究費補助金における評価に関する委員会（理工系委員会）委員（評価者） (2010–2012).

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 (2010–2012).

総合研究大学院大学物理科学研究科研究科長 (2012–).

B-8) 大学での講義，客員

埼玉大学大学院理工学研究科,「化学特論I」, 2012年11月12日–13日.

B-9) 学位授与

WU, Huijun, “Excited-State Dynamics of Metal Nanostructures Studied by Ultrafast Near-Field Spectroscopy,” 2012年9月，博士（理学).

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),「メゾスコピック領域における金微粒子を用いた空間的エネルギー伝播の直接観測」, 井村考平 (2004年–2006年).

倉田記念日立科学技術財団倉田奨励金,「時空間コヒーレンス観測に向けた超高速近接場分光システムの開発」, 岡本裕巳 (2005年).

科研費萌芽研究,「近接場分光法による素励起の波動関数イメージング」, 岡本裕巳 (2005年–2007年).

科研費特定領域研究「極微構造反応」(公募研究),「極微構造における素励起の時空間コヒーレンスの超高時間分解近接場分光」, 岡本裕巳 (2005年–2007年).

科研費基盤研究(A),「ナノ微粒子系の波動関数と励起状態の動的挙動」, 岡本裕巳 (2006年–2010年).

科研費若手研究(A),「励起と検出の時空間を制御した時間分解近接場分光手法の構築」, 井村考平 (2006年–2010年).

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

科研費特定領域研究「光一分子強結合場」(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,「プラズモニッ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。金属ナノ構造体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, 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, これらを次のフェーズに発展させつつある。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, 10 fs に迫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に向け, 努力を続けている。今一つの方法論開発として, 近接場円二色性イメージングの開発を行っている。最近貴金属ナノ構造の局所的な円二色性の分布を観測することに成功し, ナノ構造体の光学活性の起源について興味深い実験的情報を得ることができた。キラルなプラズモンに対するユニークで強力な実験手法を提供する他, 今後様々なナノ構造光学活性物質や, スピンと光の相互作用に関しても有力な実験手法になることを期待している。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
g) 高強度パルスによるテラヘルツ分光

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 高強度な極短パルス光と分子との相互作用によって量子状態分布を非断熱的に移動する手法の開発を行なってきた。特に，状態選択的プローブを利用した独自の実験的方法論により，回転運動に関する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た。理論的研究は，イスラエルのグループとの共同研究である。
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。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_2 とのクラスターでは，H_2 がほぼ自由に回転していることを明らかにし，内部回転に対するポテンシャル障壁の値を推定した。また，励起状態における緩和速度をスペクトル線幅から定量的に見積もった。
e) コヒーレント状態分布移動の新手法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た。さらに，当分光法を実現しうる新奇なコヒーレント光源として，単一縦モード半導体レーザーからの出力を位相変調し，ファイバーアンプにて適当な強度まで前置増幅した後，パラメトリック増幅にて周波数チャープした高強度ナノ秒パルス光を出力するシステムを製作した。8 ns のパルス幅の間に 500 MHz 周波数が変化し，出力は 1 パルスあたり 20 mJ 以上という性能が実現された。
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。装置の組み上げは完了し，イオンイメージの取得が可能な状況となっている。現在，データ取得ならびに画像解析のためのプログラム整備を進めている。

g) **原子力研究機構関西研究所と共同として，高強度のテラヘルツパルスを利用した時間分解分光ならびに定常状態分光を行っている。シリコン固体中でのキャリアダイナミックスや電解質溶液中でのイオン周辺の液体構造について新規な知見が得られた。**

B-1) **学術論文**

M. TSUBOUCHI, M. NAGAI and Y. OHSHIMA, "Terahertz Tomography of Photo-Induced Carrier Based on Pump-Probe Spectroscopy in Counter-Propagation Geometry," *Opt. Lett.* **37**, 3528–3530 (2012).

H. AKAGI, T. KASAJIMA, T. KUMADA, R. ITAKURA, A. YOKOYAMA, H. HASEGAWA and Y. OHSHIMA, "Isotope-Selective Ionization Utilizing Molecular Alignment and Non-Resonant Multiphoton Ionization," *Appl. Phys. B* **109**, 75–80 (2012).

K. MIZUSE and A. FUJII, "Tuning of the Internal Energy and Isomer Distribution in Small Protonated Water Clusters $H^+(H_2O)_{4–8}$: An Application of the Inert Gas Messenger Technique," *J. Phys. Chem. A* **116**, 4868–4877 (2012).

B-3) **総説，著書**

水瀬賢太,「**複雑な分子系の理解に向けた気相クラスターイオンの分光研究**」, ***分光研究*** **61**, 148–158 (2012).

B-4) **招待講演**

Y. OHSHIMA, "Coherent excitation of molecular motion by intense ultrafast laser pulses," IMS Japan—WIS Workshop, Rehovot (Israel), February 2012.

Y. OHSHIMA, "Coherent excitation of molecular motion by intense ultrafast laser pulses," Seminar at Department of Chemistry, Vancouver (Canada), April 2012.

Y. OHSHIMA, "Coherent rotational/vibrational excitation by intense ultrafast laser pulses," Seminar at Physikalisch-Chemisches Institut, Heidelberg (Germany), June 2012.

Y. OHSHIMA, "Coherent rotational/vibrational excitation by intense ultrafast laser pulses," Seminar at Department of Molecular Physics, FHI-MPG, Berlin (Germany), June 2012.

Y. OHSHIMA, "Time- and frequency-domain investigation of intermolecular vibration in gas-phase molecular clusters," Gas phase spectroscopy symposium, Deajeon (Korea), August 2012.

大島康裕,「**高強度レーザー場によって誘起される分子振動・回転のコヒーレント光ダイナミクス**」, **九重分光関連セミナー２０１２**, **ホテルやまなみ荘**, **大分県玖珠郡九重町**, **2012年7月**.

大島康裕,「**高強度レーザー場によって誘起される分子振動・回転のコヒーレント光ダイナミクス**」, **第6回分子科学討論会**, **東京大学**, **東京都文京区**, **2012年9月**.

水瀬賢太,「**複雑な分子系の理解に向けた気相クラスターの分光研究**」, **第2回光科学異分野横断萌芽研究会**, **岡崎**, **2012年8月**.

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, 2012–).

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-8) 大学での講義，客員

総合研究大学院大学物理科学研究科,「分子分光学」, 2012年7月11日–13日.

B-10) 競争的資金

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,「水和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，より複雑なクラスターへと研究対象を拡大していく。既に，π 水素結合の典型であるベンゼン－水について高分解能電子スペクトルの測定に着手したところである。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，ついにナノ秒チャープ光源が完成したので，新規な断熱分布移動の実現に速やかに着手する。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
f) 超高速量子シミュレーターの開発

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。

f) 極低温リュードベリ原子集団の多体相互作用を，超短パルスレーザーで実時間観測し制御するための新しい実験手法を開発した。

B-4) 招待講演

大森賢治,「アト秒時空量子エンジニアリング；物質がもつ波の性質を光で完璧に制御する」, 第3回豊田理研懇話会,（公財）豊田理化学研究所オープンコミュニティ , 2012年12月.

K. OHMORI, “Optically Engineered Quantum States in Ultrafast and Ultracold Systems,” Physics Colloquium, University of Freiburg, Freiburg (Germany), December 2012.

K. OHMORI, “Optically Engineered Quantum States in Ultrafast and Ultracold Systems,” ESF Research Conference in Partnership with LFUI on “Cold and Ultracold Molecules,” Universitätszentrum Obergurgl, Obergurgl (Austria), November 2012.

K. OHMORI, “Optically Engineered Quantum States in Ultrafast and Ultracold Systems,” Workshop on “Molecular Functional Dynamics: Fundamental to Life Activity,” IMS, Okazaki (Japan), October 2012.

K. OHMORI, “Optically Engineered Quantum States in Ultrafast and Ultracold Systems,” International Workshop: “Horizons of Quantum Physics: From Foundations to Quantum-Enabled Technologies,” American Club Taipei, Taipei (Taiwan), October 2012.

K. OHMORI, “Quantum simulator of quantum/classical boundary,” The ‘240’ Conference, The University of Chicago, Chicago (U.S.A.), September 2012.

K. OHMORI, “Exploring quantum/classical boundary,” The ‘240’ Conference, The University of Chicago, Chicago (U.S.A.), September 2012.

K. OHMORI, “Ultrafast Coherent Control of an Ultracold Rydberg Gas,” Batsheva de Rothschild Seminar on “Laser Control of Chemical Reactions: Toward Deciphering Mechanisms and Understanding the Theoretical and Experimental Limits,” Ruth-Rimmonim Hotel, Safed (Israel), September 2012.

K. OHMORI, “Spatiotemporal quantum engineering with picometer and attosecond precision,” Special Seminar on “Theoretical Chemistry,” Institut für Chemie und Biochemie, Freie Universitaet Berlin, Berlin (Germany), June 2012.

K. OHMORI, “Optically Engineered Quantum States in Ultrafast and Ultracold Systems,” International Conference on Superconductivity and Magnetism: ICSM 2012, Artemis Marin Princess Hotel, Kumburgaz-Istanbul (Turkey), May 2012.

N. TAKEI, “Ultrafast coherent control of an ultracold Rydberg gas,” International Workshop on Quantum Dynamics and Quantum Walks, Okazaki Conference Center, Okazaki (Japan), November 2012.

N. TAKEI, “Ultrafast coherent control of an ultracold Rydberg gas,” International Workshop on Cooperative Quantum Dynamics and Its Control (CQDC’12), Jülich Supercommputing Center, Jülich (Germany), Octorber 2012.

B-6) 受賞，表彰

大森賢治, 独フンボルト賞 (2012).

大森賢治, アメリカ物理学会フェロー表彰 (2009).

大森賢治, 日本学士院学術奨励賞 (2007).

大森賢治, 日本学術振興会賞 (2007).

大森賢治, 光科学技術研究振興財団研究表彰 (1998).

大森賢治, 東北大学教育研究総合奨励金 (1995).

香月浩之, 英国王立化学会 PCCP 賞 (2009).

香月浩之, 光科学技術研究振興財団研究表彰 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

分子科学研究会委員 (2002–2006).

分子科学会設立検討委員 (2005–2006).

分子科学会運営委員 (2006–2007, 2010–).

原子衝突研究協会運営委員 (2006–2007).

学会の組織委員等

International Conference on Spectral Line Shapes国際プログラム委員 (1998–).

21st International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions 準備委員，組織委員 (1999).

The 5th East Asian Workshop on Chemical Reactions 組織委員長 (2001).

分子構造総合討論会実行委員 (1995).

第19回化学反応討論会実行委員 (2003).

原子・分子・光科学（AMO）討論会プログラム委員 (2003–).

APS March meeting; Focus Topic Symposium “Ultrafast and ultrahighfield chemistry” 組織委員 (2006).

APS March meeting satellite “Ultrafast chemistry and physics 2006” 組織委員 (2006).

第22回化学反応討論会実行委員 (2006).

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

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

European Research Council (ERC), Invited Panel Evaluator.

European Research Council (ERC), Invited Expert Referee.

その他

平成16年度安城市シルバーカレッジ「原子のさざ波と不思議な量子の世界」.

岡崎市立小豆坂小学校　第17回・親子おもしろ科学教室「波と粒の話」.

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

B-8) 大学での講義，客員

総合研究大学院大学物理科学研究科,「量子動力学」, 2012年12月17日–19日.

University of Freiburg, Physics Colloquium “Optically Engineered Quantum States in Ultrafast and Ultracold Systems,” December 3, 2012.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構CREST 研究,「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).

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。

① 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。

② 量子散逸系でのコヒーレント制御の実現：①で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。

③ 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。

④ 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) 電子分光法の精密化と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) 内殻励起の理論アプローチの開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 電子分光法の精密化と分子間相互作用の研究：本グループでは内殻電子や価電子の励起・イオン化分光法の精密化によって固体中の不純物状態や二成分気相クラスターの研究を進めてきた。最近は，実験技術的に難しかった液相，固液界面，有機分子やグラフェン等の積層表面等にも研究対象を拡大している。例えば，溶液（二成分液体）の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。電極反応や触媒反応のその場観測やこれまでバンド形成が見つからなかったような弱い分子間相互作用によるバンド分散の観測等にも成功している。

b) 内殻共鳴分光による未知の価電子状態の研究：内殻励起・イオン化過程を使うことで通常の価電子分光では暗状態の観測を実現した。１光子イオン化で４重項状態，１光子励起で３重項励起状態を作り出した。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，非断熱遷移に複雑に絡み合って理解することが難しい価電子の高励起状態領域を分離して解明することにも成功した。このような内殻励起の特徴を生かした国際共同を推進している。

c) 内殻励起の理論アプローチの開発：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，カナダ CLS，仏 SOLEIL，伊 ELETTRA など）の実験研究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いる。最近，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も理論解析が要求されるようになった。そのため，新たに内殻励起計算用量子化学 CI コード GSCF4 の開発・整備を進めている。

B-1) 学術論文

M. NAGASAKA, N. KOSUGI and E. RÜHL, “Structures of Small Mixed Krypton-Xenon Clusters,” *J. Chem. Phys.* **136**, 234312 (7 pages) (2012).

M. NAGASAKA, E. SERDAROGLU, R. FLESCH, E. RÜHL and N. KOSUGI, “Structures of Mixed Argon-Nitrogen Clusters,” *J. Chem. Phys.* **137**, 214305 (7 pages) (2012).

R. FLESCH, E. SERDAROGLU, F. BLOBNER, P. FEULNER, X. O. BRYKALOVA, A. A. PAVLYCHEV, N. KOSUGI and E. RÜHL, “Gas-to-Solid Shift of C 1s-Excited Benzene,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14**, 9397–9402 (2012).

V. KIMBERG, T. GEJO, M. OURA, T. TOKUSHIMA, Y. HORIKAWA, H. ARAI, S. SHIN and N. KOSUGI, "Rydberg-Valence Mixing and Interchannel Coupling in Resonant Oxygen 1s Inelastic X-Ray Scattering of O_2," *Phys. Rev. A* **85**, 032503 (5 pages) (2012).

C. MIRON, C. NICOLAS, O. TRAVNIKOVA, P. MORIN, Y.-P. SUN, F. GEL'MUKHANOV, N. KOSUGI and V. KIMBERG, "Imaging Molecular Potentials Using Ultrahigh-Resolution Resonant Photoemission," *Nat. Phys*. **8**, 135–138 (2012).

A. LINDBLAD, V. KIMBERG, J. SODERSTROM, C. NICOLAS, O. TRAVNIKOVA, N. KOSUGI, F. GEL'MUKHANOV and C. MIRON, "Vibrational Scattering Anisotropy in O_2. Dynamics beyond the Born-Oppenheimer Approximation," *New J. Phys.* **14**, 113018 (2012).

K. ATAK, N. ENGEL, K. M. LANGE, R. GOLNAK, M. GOTZ, M. SOLDATOV, J. E. RUBENSSON, N. KOSUGI and E. F . AZIZ, "The Chemical Bond in Carbonyl and Sulfinyl Groups Studied by Soft X-Ray Spectroscopy and Ab Initio Calculations," *ChemPhysChem* **13**, 3106–3111 (2012).

T. MARUYAMA, S. SAKAKIBARA, S. NARITSUKA, W. NORIMATSU, M. KUSUNOKI, H. YAMANE and N. KOSUGI, "Band Alignment of a Carbon Nanotube/N-Type 6H-SiC Heterojunction Formed by Surface Decomposition of SiC Using Photoelectron Spectroscopy," *Appl. Phys. Lett.* **101**, 092106 (4 pages) (2012).

J. W. CHIOU, S. C. RAY, S. I. PENG, C. H. CHUANG, B. Y. WANG, H. M. TSAI, C. W. PAO, H.-J. LN, Y. C. SHAO, Y. F. WANG, S. C. CHEN, W. F. PONG, Y. C. YEH, C. W. CHEN, L.-C. CHEN, K.-H. CHEN, M.-H. TSAI, A. KUMAR, A. GANGULY, P. PAPAKONSTANTINOU, H. YAMANE, N. KOSUGI, T. REIGIER, L. LIU and T. K. SHAM, "Nitrogen-Functionalized Graphene Nanoflakes (GNFs:N): Tunable Photoluminescence and Electronic Structures," *J. Phys. Chem. C* **116**, 16251–16258 (2012).

H. YAMANE and N. KOSUGI, "Hybridized Electronic States in Potassium-Doped Picene Probed by Soft X-Ray Spectroscopies," *AIP Adv.* **2**, 042114 (6 pages) (2012).

B-4) 招待講演

N. KOSUGI, "Core-Level Shifts of Free and Interacting Molecules," 15th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure XAFS15, Beijing (China), July 2012.

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, 2006–2007, 2009–2010, 2012–2013)，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

SRI シンクロトロン放射装置技術国際会議国際諮問委員 (1994–2009).

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–).

ICESS 電子分光及び電子構造国際会議国際諮問委員 (2006–).

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

ICESS-11 電子分光及び電子構造国際会議・共同議長，国際プログラム委員長 (2009).

ICESS-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委員・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, 2012)，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, 2011–2014).

高エネルギー加速器研究機構運営協議員会委員 (2001–2003)，物質構造科学研究所運営協議員会委員 (2001–2003)，加速器・共通研究施設協議会委員 (2001–2003).

東京大学物性研究所軌道放射物性研究施設運営委員会委員 (1994–2012).

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AOFSRR 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-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(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).

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),「分子間バンド分散の精密観測による有機半導体の電気伝導特性の定量的解明」, 山根宏之 (2012年–2014年).

科研費挑戦的萌芽研究,「動作環境における有機デバイス電子状態の「その場」観測」, 山根宏之 (2012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・確立を主目的にしており, 測定対象の現象として, 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, 試料として, 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, より複雑な系や外場・環境効果に重点をシフトしている。その場観測手法や顕微分光法も駆使する必要がある。このような多様な分子システムへの応用研究は, 以前のUVSOR-I 光源の性能では全く不可能であり, UVSOR-II をさらに高輝度化したUVSOR-III 光源の性能が必須である。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きた。これらは放射光分子科学分野において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大きく貢献している。

見　附　孝一郎（准教授）（1991 年 4 月 1 日～ 2012 年 3 月 31 日）*)

A-1) 専門領域：化学反応素過程，軌道放射分子科学

A-2) 研究課題：

a) 高分解能斜入射分光器の研究開発とフラーレン科学への利用

b) レーザーと軌道放射を組合せたポンプ・プローブまたは２重共鳴分光

c) 極端紫外超励起状態や高励起イオン化状態の分光学と動力学

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 軌道放射光施設に，気相光励起素過程の研究を目的とした高分解能高フラックスの斜入射分光器を建設した。25 から 160 eV の光子エネルギーの範囲で，フラックス 10^{10} 光子／秒と分解能 3000 が同時に達成された。「フラーレンの極端紫外分光専用ライン」に特化させてフラーレン類の質量分析と光電子分光を展開している（装置に関し特許取得）。第１に，気相及び凝縮相の C_{60} や C_{70} の絶対光吸収断面積を測定し，巨大共鳴ピーク（~20 eV）に付随する形状共鳴遷移を初めて観測した。第２に，遷移金属原子の 4*d* 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（特許取得）。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て，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. MITSUKE, H. KATAYANAGI, B. P. KAFLE and MD. S. I. PRODHAN, "Design of Velocity Map Imaging Spectrometer Equipped with a Mass Gate Discriminating Particular Photofragments," *ISRN Phys. Chem.* **2012**, 959074 (9 pages) (2012).

N. NIITSU, M. KIKUCHI, H. IKEDA, K. YAMAZAKI, M. KANNO, H. KONO, K. MITSUKE, M. TODA and K. NAKAI, "Nanosecond Simulations of the Dynamics of C_{60} Excited by Intense Nearinfrared Laser Pulses: Impulsive Raman Excitation, Rearrangement, and Fragmentation," *J. Chem. Phys.* **136**, 164304 (12 pages) (2012).

B-3) 総説，著書

N. NIITSU, M. KIKUCHI, H. IKEDA, K. YAMAZAKI, M. KANNO, H. KONO, K. MITSUKE, M. TODA, K. NAKAI and S. IRLE, "Simulation of Nuclear Dynamics of C_{60}: From Vibrational Excitation by Near-IR Femtosecond Laser Pulses to Subsequent Nanosecond Rearrangement and Fragmentation," in *Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications*, K. Nishikawa, J. Maruani, E. J. Brändas, G. Delgado-Barrio and P. Piecuch, Eds., Springer, pp. 149–177 (2012).

B-4) 招待講演

見附孝一郎,「色素増感太陽電池の原理，特徴及び課題」, 第２７４回化学科コロキウム, 城西大学, 坂戸, 2012年3月.

K. MITSUKE, "Morphology, Catalytic Activities, and Electronic Structures of the Nanosystems Constituting Dye-Sensitized Solar Cells," The 27th Philippine Chemistry Congress (PCC), Manila (Philippine), April 2012.

見附孝一郎,「導電性ポリマーを作る」, 子ども大学にしいるま, 城西大学, 坂戸, 2012年11月.

B-5) 特許出願

特許 5156468号,「原子／分子ビームの3次元速度分布測定方法及び装置」, 見附孝一郎，片柳英樹 (自然科学研究機構), 2012年.

B-6) 受賞，表彰

見附孝一郎, 日本化学会欧文誌BCSJ 賞 (2001).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

原子衝突研究協会委員 (1987, 1998–2003).

原子衝突研究協会企画委員 (1996–2003).

原子分子データベース協会設立準備委員 (2004–2008).

学会の組織委員等

質量分析連合討論会実行委員 (1993).

第9回日本放射光学会年会実行委員 (1995–1996).

第１2回日本放射光学会年会組織委員およびプログラム委員 (1998–1999).

第１5回化学反応討論会プログラム委員および実行委員長 (1998–1999).

International Symposium on Photo-Dynamics and Reaction Dynamics of Molecules, Okazaki, Cochair (1998–1999).

原子衝突協会第25回研究会実行委員 (1999–2000).

International Workshop on the Generation and Uses of VUV and Soft X-ray Coherent Pulses, Lund, Sweden, Member of the Program Committee (2001) **(真空紫外・X線コヒーレント光の発生と利用に関する国際集会, プログラム委員).**

XIV International Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics, Cairns, Australia, Member of the Program Committee (2003–2004) **(第14回真空紫外光物理国際会議プログラム委員).**

IV International Conference on Atomic and Molecular Data and their Applications, Toki, Japan, Member of the Program Committee (2003–2004) **(第4回原子分子データとその利用に関する国際会議プログラム委員).**

第19回日本放射光学会年会組織委員, 実行委員およびプログラム委員長 (2005–2006).

第22回化学反応討論会プログラム委員および実行委員 (2005–2006).

原子衝突研究協会第31回研究会実行委員 (2005–2006).

第3回分子科学討論会実行委員 (2008–2009).

第6回分子科学討論会優秀講演賞選考委員 (2012).

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**

The Winter School of Asian-Core Program, “Morphology, Catalytic Activities, and Electronic Structures of the Nanosystems Constituting Dye-Sensitized Solar Cells (DSSC),” Beijing (China), February 21.

城西大学理学部化学科,「自然科学概論」,「化学統計力学I」, 2012年4月–7月.

城西大学理学部化学科,「物理化学I」,「無機分析化学実験」,「生活と化学物質II」, 2012年9月–12月.

城西大学大学院理学研究科物質科学専攻,「有機物理化学特論」, 2012年9月–12月.

B-10) **競争的資金**

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).

トヨタ先端技術共同研究,「液相法によるZnO系薄膜の形成」, 見附孝一郎, 片柳英樹 (2012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かにする。将来の目標は次の通りである：①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, ②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, ③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。

＊) 2012年4月1日城西大学理学部化学科教授

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。高輝度放射光発生のために真空封止アンジュレータ３台，可変偏光型アンジュレータ３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

I. KATAYAMA, H. SHIMOSATO, M. BITO, K. FURUSAWA, M. ADACHI, M. SHIMADA, H. ZEN, S. KIMURA, N. YAMAMOTO, M. HOSAKA, M. KATOH and M. ASHIDA, “Electric Field Detection of Coherent Synchrotron Radiation in a Storage Ring Generated Using Laser Bunch Slicing,” *Appl. Phys. Lett.* **100**, 111112 (4 pages) (2012).

C. EVAIN, C. SZWAJ, S. BIELAWSKI, M. E. COUPRIE, M. HOSAKA, A. MOCHIHASHI and M. KATOH, “Suppression of Self-Pulsing Instabilities in Free-Electron Lasers Using Delayed Optical Feedback,” *Phys. Rev. S. T. Accel. Beams* **15**, 040701 (7 pages) (2012).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

H. ZEN, M. ADACHI, J. YAMAZAKI, H. HAYASHI, E. NAKAMURA, S. KIMURA, M. KATOH, T. TAKAHASHI, N. YAMAMOTO, M. HOSAKA and Y. TAKASHIMA, "Present Status and Future Prospects of Project on Utilizing Coherent Light Sources for User Experiments at UVSOR-II," *Proc. 33rd Internat. Free Electron Laser Conf.*, 215–218 (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. 33rd Internat. Free Electron Laser Conf.*, 212–214 (2011).

H. ZEN, M. ADACHI, M. KATOH, C. SZWAJ, S. BIELAWSKI and M. HOSAKA, "Technical Developments for Injecting External Laser to a Storage Ring FEL in CW and Q-switched Operation," *Proc. 33rd Internat. Free Electron Laser Conf.*, 362–365 (2011).

Y. TAIRA, H. TOYOKAWA, M. ADACHI, S. TANAKA, M. KATOH and N. YAMAMOTO, "Feasibility Study of Gamma-Ray Induced Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy in an Electron Storage Ring," *Proc. 3rd Internat. Particle Accelerator Conf.*, 4103–4105 (2012).

H. ZEN, M. ADACHI, M. KATOH, T. TANIKAWA, N. YAMAMOTO and M. HOSAKA, "Chirped Pulse Generation by CHG-FEL," *Proc. 33rd Internat. Free Electron Laser Conf.*, 366–369 (2011).

B-3) 総説，著書

M. KATOH and S. BIELAWSKI, "Coherent Terahertz Synthesizer," *Nat. Photonics* **6**, 76–77 (2012).

B-6) 受賞，表彰

島田美帆, 第8回日本加速器学会奨励賞 (2011).

平　義隆, 第7回日本物理学会若手奨励賞 (2012).

肥田洋平, 第9回日本加速器学会年会賞（ポスター部門) (2012).

丹羽貴弘, 第9回日本加速器学会年会賞（ポスター部門) (2012).

平　義隆, 第9回日本加速器学会年会賞（口頭発表部門) (2012).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本加速器学会評議員 (2008–2009).

日本放射光学会評議員 (2006–2009, 2010–2012).

学会の組織委員等

日本加速器学会組織委員 (2004–).

日本放射光学会第13回年会プログラム委員長 (2000).

日本加速器学会第10回年会プログラム委員長 (2013).

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トロン光研究センター，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年以降の高度化により，既に低エネルギーのシンクロトロン光源としては世界的にも最高レベルの性能を有するにあるが，放射光輝度をさらに向上させる改造を2012年春に実施した。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の導入を進めている。さらに，真空封止型アンジュレータ1台を設置した。加速器の立上調整は概ね予定通り進んだが，一層の性能向上に向けて調整を進めている。

自由電子レーザーに関しては，新しい実験ステーションの整備が概ね完了し，装置の基本性能の確認を進めている。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ている。新しい実験ステーションにおいて実用化を意識した光源技術開発に取り組む。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に着手した。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に取り組む。

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性が現れる固体・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。

擬一次元有機導体 $(TMTCF)_2X$ (C = T, S, X = PF_6, AsF_6) の角度分解光電子分光による電子構造。

Yb 系重い電子系 $YbAl_2$ の角度分解光電子分光による電子構造。

鉄系超伝導体 LiFeAs の角度分解光電子分光による電子構造。

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) の赤外・テラヘルツ分光による電子構造。

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。

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。

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

J. ONOE, T. ITO, S. KIMURA, H. SHIMA, Y. TODA and H. YOSHIOKA, “One-Dimensional Metallic Peanut-Shaped Nanocarbon with Positive and Negative Gaussian Curvatures: Toward a New Science of Quantum Electronic Systems on Riemannian Surfaces,” *Fullerenes, Nanotubes, Carbon Nanostruct.* **20**, 1–16 (2012).

I. KATAYAMA, H. SHIMOSATO, M. BITO, K. FURUSAWA, M. ADACHI, M. SHIMADA, H. ZEN, S. KIMURA, N. YAMAMOTO, M. HOSAKA, M. KATOH and M. ASHIDA, "Electric Field Detection of Coherent Synchrotron Radiation in a Storage Ring Generated Using Laser Bunch Slicing," *Appl. Phys. Lett.* **100**, 111112 (4 pages) (2012).

T. INUSHIMA, D. K. MAUDE, H. LU, W. J. SCHAFF, T. IIZUKA, S. KIMURA, A. YAMAMOTO and K. FUKUI, "Superconducting Properties of InN with Low Carrier Density near the Mott Transition," *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**, 044704 (9 pages) (2012).

T. HAJIRI, T. ITO, R. NIWA, M. MATSUNAMI, B. H. MIN, Y. S. KWON and S. KIMURA, "Three-Dimensional Electronic Structure and Interband Nesting in the Stoichiometric Superconductor LiFeAs," *Phys. Rev. B* **85**, 094509 (6 pages) (2012).

T. IIZUKA, T. MIZUNO, B. H. MIN, Y. S. KWON and S. KIMURA, "Existence of Heavy Fermions in the Antiferromagnetic Phase of $CeIn_3$," *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**, 043703 (4 pages) (2012).

J. ONOE, T. ITO, H. SHIMA, H. YOSHIOKA and S. KIMURA, "Observation of Riemannian Geometric Effects on Electronic States," *Europhys. Lett.* **98**, 27001 (5 pages) (2012).

Y. S. KWON, J. B. HONG, Y. R. JANG, H. J. OH, Y. Y. SONG, B. H. MIN, T. IIZUKA, S. KIMURA, A. V. BALATSKY and Y. BANG, "Evidence of a Pseudogap for Superconducting Iron-Pnictide $Ba_{0.6+\delta}K_{0.4-\delta}Fe_2As_2$ Single Crystals from Optical Conductivity Measurements," *New J. Phys.* **14**, 063009 (11 pages) (2012).

H. MIYAZAKI, T. HAJIRI, T. ITO, S. KUNII and S. KIMURA, "Momentum-Dependent Hybridization Gap and Dispersive In-Gap State of the Kondo Semiconductor SmB_6," *Phys. Rev. B* **86**, 075105 (4 pages) (2012).

F. CHEN, Q. GE, M. XU, Y. ZHANG, X. SHEN, W. JI, M. MATSUNAMI, S. KIMURA, J. HU and D. L. FENG, "The Orbital Characters of Low-Energy Electronic Structure in Iron-Chalcogenide Superconductor $K_xFe_{2-y}Se_2$," *Chin. Sci. Bull.* **57**, 3829 (7 pages) (2012).

T. HIRAHARA, N. FUKUI, T. SHIRASAWA, M. YAMADA, M. AITANI, H. MIYAZAKI, M. MATSUNAMI, S. KIMURA, T. TAKAHASHI, S. HASEGAWA and K. KOBAYASHI, "Atomic and Electronic Structure of Ultrathin Bi(111) Films Grown on Bi_2Te_3(111) Substrates: Evidence for a Strain-Induced Topological Phase Transition," *Phys. Rev. Lett.* **109**, 227401 (5 pages) (2012).

V. GURITANU, S. SEIRO, J. SICHELSCHMIDT, N. CAROCA-CANALES, T. IIZUKA, S. KIMURA, C. GEIBEL and F. STEGLICH, "Optical Study of Archetypical Valence-Fluctuating Eu-Systems," *Phys. Rev. Lett.* **109**, 247207 (5 pages) (2012).

M. MATSUNAMI, A. CHAINANI, M. TAGUCHI, R. EGUCHI, Y. TAKATA, M. OURA, M. YABASHI, K. TAMASAKU, Y. NISHINO, T. ISHIKAWA, M. KOSAKA and S. SHIN, "Photoemission Evidence for Valence Fluctuations and Kondo Resonance in $YbAl_2$," *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**, 073702 (4 pages) (2012).

H. OKAMURA, N. OHTA, A. TAKIGAWA, I. MATSUTORI, K. SHOJI, K. MIYATA, M. MATSUNAMI, H. SUGAWARA, C. SEKINE, I. SHIROTANI, H. SATO, T. MORIWAKI, Y. IKEMOTO, Z. LIU and G. L. CARR, "Pressure Suppression of Unconventional Charge-Density-Wave State in $PrRu_4P_{12}$ Studied by Optical Conductivity," *Phys. Rev. B* **85**, 205116 (7 pages) (2012).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

S. KIMURA, E. NAKAMURA, K. IMURA, M. HOSAKA, T. TAKAHASHI and M. KATOH, "Design of a dedicated beamline for THz coherent synchrotron radiation at UVSOR-III," *J. Phys.: Conf. Series* **359**, 012009 (5 pages) (2012).

T. TAKAHASHI, T. IIZUKA, T. MORI and S. KIMURA, "Development of a Scanning Near-Field Sub-THz-Wave Microscopy with Coherent Transition Radiation," *J. Phys.: Conf. Series* **359**, 012016 (6 pages) (2012).

T. HAJIRI, R. NIWA, T. ITO, M. MATSUNAMI, Y. J. SONG, S. KIMURA and Y. S. KWON, "Polarization-dependent three-dimensional angle-resolved photoemission study on LiFeAs," *J. Phys.: Conf. Series* **391**, 01212 (4 pages) (2012).

H. MIYAZAKI, H. MOMIYAMA, T. HAJIRI, T. ITO, K. IMURA, M. MATSUNAMI and S. KIMURA, "Fabrication of single crystalline EuO thin films with SrO buffer layer on $SrTiO_3$ substrate," *J. Phys.: Conf. Series* **391**, 012047 (4 pages) (2012).

S. KIMURA, T. IIZUKA, Y. MURO, J. KAJINO and T. TAKABATAKE, "Anisotropic gap formation in CeM_2Al_{10} (M = Ru, Os)," *J. Phys.: Conf. Series* **391**, 012030 (4 pages) (2012).

B-3) 総説，著書

木村真一,「磁性と「重い電子」は共存するか？　低温高圧下テラヘルツ分光によるインジウム化セリウムの電子構造」, *O plus E* **34**, 562–566 (2012).

木村真一,「磁性と「重い電子」は共存するか？　低温・高圧下テラヘルツ分光による量子臨界点での電子状態の観測」, *固体物理* **47(8)**, 365–373 (2012).

B-4) 招待講演

M. MATSUNAMI, T. HAJIRI, H. MIYAZAKI, M. KOSAKA and S. KIMURA, "Direct observation of dispersive Kondo resonance and hybridized bands in Yb-based compounds," The Fourth International Workshop on the Dual Nature of f-Electrons, Himeji (Japan), July 2012.

D. T. ADROJA, T. TAKABATAKE, Y. MURO, K. YUTANI, J. KAJINO, K. UMEO, S. KIMURA and A. SEVERING, "Coexistence of Antiferromagnetic Order and Hybridization Gap in Ce-based Kondo Semiconductors," The 19th International Conference on Magnetism, Busan (Korea), July 2012.

H. MIYAZAKI, T. HAJIRI, M. MATSUNAMI, T. ITO and S. KIMURA, "Thickness-Dependent Exchange Splitting of EuO Ultrathin Films," The 19th International Conference on Magnetism, Busan (Korea), July 2012.

S. KIMURA, "Generation and applications of terahertz coherent synchrotron radiation," The 11th International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation, Lyon (France), July 2012.

S. KIMURA, "Existence of Heavy Fermions in the Antiferromagnetic Phase in $CeIn_3$," Low Energy Electrodynamics in Solids 2012, Napa (U.S.A.), July 2012.

木村真一,「固体の機能性を生み出す電子構造の複合環境下における先端分光」, 名古屋工業大学若手研究イノベータ養成センター「ナノテクノロジー・材料」分野　第3回シンポジウム「ナノ構造解析に基づく材料設計，実験軽装と理論計算の融合に向けて」, 名古屋, 2012年1月.

木村真一,「THz 光を用いた分光研究と cERL への期待」, 高エネルギー加速器研究機構第2回コンパクト ERL サイエンスワークショップ, 筑波, 2012年7月.

木村真一,「先端放射光を用いた物質科学」, 分子研研究会「新たな光源開発によって拓かれる物質科学」, 岡崎, 2012年10月.

木村真一,「UVSORにおける真空紫外角度分解光電子分光」, 東大物性研極限コヒーレント光科学研究センター発足記念ワークショップ「レーザー・放射光融合研究領域の開拓」, 柏, 2012年11月.

B-6) 受賞, 表彰

木村真一, 第5回日本放射光学会若手奨励賞 (2001).

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).

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, 2012–2014).

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).

日本放射光学会渉外委員 (2012–2013).

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, 2008–2009, 2010–2011).

UVSOR 利用者懇談会世話人 (2000–2001).

学会の組織委員等

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

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

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

第26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 (2012).

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).

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

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

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

第23回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2009).

平成21年度総研大国際シンポジウム「総研大学術ネットワークの構築」実行委員 (葉山, 2009).

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

第21回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム組織委員, 実行委員 (2007).

4th International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources, Co-chair, Member of International Advisory Board (Awaji Island, Japan, September 2007).

UVSOR Workshop on Terahertz Coherent Synchrotron Radiation, Co-Chair (Okazaki, Japan, September 2007).

第20回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム組織委員長, プログラム委員, 実行委員 (2006).

第3回次世代光源計画ワークショップ――先端的リング型光源が開くサイエンス―― 実行委員長 (日本放射光学会主催, 岡崎, 2006年8月).

第19回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム組織委員長, プログラム委員, 実行委員 (2005).

次世代光源計画ワークショップ――未来光源が開くサイエンス―― 実行委員長 (日本放射光学会主催, 岡崎, 2005年8月).

International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources 2005, Member of International Advisory Board (Rathen, Germany, June 2005).

第18回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2004).

第17回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム組織委員, プログラム委員 (2003).

第16回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム組織委員, プログラム委員(2002).

第15回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2001).

第14回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム組織委員, プログラム委員 (2000).

第13回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (1999).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光共同利用実験審査委員会委員 (2009–2010, 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 11th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure, Special Issue of Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Guest Editor, Elsevier (2010).

真空誌編集委員 (2007–).

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

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「物性科学概論」, e-learning.

名古屋大学シンクロトロン光研究センター, 客員准教授, 2012年4月– .

東京大学物性研究所, 嘱託研究員, 1995年4月– .

B-9) 学位授与

飯塚拓也,「強相関電子系の多重極限下電子構造」, 2012年3月, 博士(理学).

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の基礎研究」, 木村真一 (2010年–2012年).

科研費基盤研究(B),「強相関4f電子系の量子臨界点における電子状態の光学的・光電的研究」, 木村真一 (2006年–2008年).

(財)光科学技術研究振興財団助成金,「リング型電子加速器からの大強度テラヘルツ光の発生と制御」, 木村真一 (2006年–2007年).

科研費特定領域研究(公募研究),「モット転移系有機超伝導体の高圧・高磁場下の電子状態」, 木村真一 (2004年–2005年).

科研費若手研究(A),「電子相関が強い系の多重極限環境下における物性発現メカニズムの分光研究」, 木村真一 (2002年–2004年).

科研費萌芽研究,「シンクロトロン放射光を使ったテラヘルツ顕微分光法の開発」, 木村真一 (2002年).

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三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なってきた。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・角度分解光電子分光(BL5U)・逆光電子分光やテラヘルツポンプ・光電子プローブ分光(BL1)の開発を進め, 物質科学・分子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及び電子・イオン同時計測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) 中性質量選別クラスター源及び多成分混合分子クラスター源の開発

e) 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，及び，アンジュレータと分光器，及び電子エネルギー分析器を同時に制御するための整備を行い，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 年以降，小さな分子の内殻励起に伴う超高速解離過程を観測対象として，電子スペクトルを光のエネルギーの関数として計測する，二次元電子分光法を利用した研究を展開している。一方，内殻励起分子の解離ダイナミクスに関しては，我々が開発した電子・イオン同時計測装置を利用した実験研究を協力研究として進めている。

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，1 光子の吸収により分子の内殻電子二つが放出される内殻二正孔状態の生成過程について，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) BL6U での観測対象を気相の原子分子から種々のクラスターに拡張するために，クラスター源の開発を行っている。従来の放射光によるクラスター実験では，クラスターのサイズ選別は行われておらず，吸収スペクトルの構造などは全て平均クラスターサイズで議論されてきた。この状況を打破し，質量選別したクラスターの吸収スペクトルを直接観測することを目指して装置開発を行っている。また，大型の排気装置を利用した多成分混合分子クラスター源の開発も行っている。

e) 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及びクラスターの挙動について，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希ガスクラスターが，入射 FEL よりも短波長の蛍光を放出していることを見出した。平均クラスターサイズ 100 個程度の Ar クラスターに，波長 51 nm の EUV-FEL 光を照射した場合，20 nm から 60 nm 程度の波長範囲に亘り，多数のピーク状構造が観測された。観測された蛍光の FEL 強度依存性，クラスターサイズ依存性，及びノズル距離依存性の測定から，高強度 EUV-FEL 照射によるナノプラズマの生成と電子・イオン再結合反応による励起多価イオンの効率的な生成が，短波長蛍光放出のメカニズムであると結論付けられた。一方, SACLA の XFEL を利用した研究として, 高濃度 Kr 原子や Cu などの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を進めている。

B-1) 学術論文

A. SUGISHIMA, H. IWAYAMA, S. YASE, H. MURAKAMI, K. NAGAYA, M. YAO, H. FUKUZAWA, X.-J. LIU, K. MOTOMURA, K. UEDA, N. SAITO, L. FOUCAR, A. RUDENKO, M. KURKA, K.-U. KÜHNEL, J. ULLRICH, A. CZASCH, R. DÖRNER, R. FEIFEL, M. NAGASONO, A. HIGASHIYA, M. YABASHI, T. ISHIKAWA, T. TOGASHI, H. KIMURA and H. OHASHI, "Charge and Energy Transfer in Argon-Core-Neon-Shell Clusters Irradiated by Free-Electron-Laser Pulses at 62 nm," *Phys. Rev. A* **86**, 033203 (6 pages) (2012).

T. GEJO, T. TAMURA, K. HONMA, E. SHIGEMASA, Y. HIKOSAKA and Y. TAMENORI, "Angle-Resolved Metastable Fragment Yields Spectra of N_2 and CO in K-Edge Excitation Energy Region," *J. Chem. Phys.* **136**, 054201 (7 pages) (2012).

H. IWAYAMA, M. NAGASONO, J. R. HARRIES and E. SHIGEMASA, "Demonstration of Up-Conversion Fluorescence from Ar Clusters in Intense Free-Electron-Laser Fields," *Opt. Express* **20**, 23174–23179 (2012).

B-4) 招待講演

岩山洋士,「XFEL（SACLA）による超蛍光の観測を目指して」, 原子衝突学会改称記念式典, 調布, 2012年7月.

繁政英治,「短波長自由電子レーザーによる指向性発光現象の探索」, 光化学討論会ランチョンセミナー, 大岡山, 2012年9月.

繁政英治,「UVSOR における高輝度利用研究の現状と EUV-FEL 利用研究の新展開」, 東北大学電子光理学研究センター平成24年度電子光理学研究拠点研究会, 仙台, 2012年11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, 2012–).

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, 2012).

第13回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウム実行副委員長 (1999).

第13回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (1999).

第19回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウム実行委員 (2005).

SRI06（シンクロトロン放射装置技術国際会議）プログラム委員 (2005).

第22回化学反応討論会実行委員 (2006).

第20回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2006).

第21回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2007).

第2回AOFSRR（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

名古屋大学小型シンクロトロン光研究センター , 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).

科研費若手研究(B),「自由電子レーザー励起によるレーザープラズマ光源の研究開発」岩山洋士 (2012年–2013年).

C) 研究活動の課題と展望

BL6Uでは，SPring-8では実施出来ない250 eVより低いエネルギー領域において，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及び電子・イオン同時計測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，及びクラスター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ニクスの展開

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。特には近年のマイクロ固体フォトニクス［マイクロチップ Nd:YVO_4 レーザー（1990 年），Yb:YAG レーザー（1993 年），セラミックレーザー（1997 年），バルク擬似位相整合（QPM）素子：大口径周期分極反転 MgO:$LiNbO_3$（PPMgLN）（3mm 厚 2003 年，5mm 厚 2005 年，10mm 厚 2012 年）］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，新たなフォトニクス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_4 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であるサブナノ秒からピコ秒の便利な光源開拓に関する貢献，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。これまでに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，出力エネルギー 0.5 J，Nd:YAG レーザーからの変換効率 80% に到る高効率・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ニクスで実証した。特にマイクロチップレーザーの高輝度特性を利用したエンジン点火では，パルスギャップ効果もあり極めて低いエネルギーでの効率的なレーザー点

火効果を確認した。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

W. KONG and T. TAIRA, "Lens-Less Edge-Pumped High Power Microchip Laser," *Appl. Phys. Lett.* **100**, 141105 (4 pages) (2012).

R. BHANDARI, T. TAIRA, A. MIYAMOTO, Y. FURUKAWA and T. TAGO, "> 3 MW Peak Power at 266 nm Using Nd:YAG/ Cr^{4+}:YAG Microchip Laser and Fluxless-BBO," *Opt. Mater. Express* **2**, 907–913 (2012).

W. KONG, A. SUGITA and T. TAIRA, "Generation of Hermite-Gaussian Modes and Vortex Arrays Based on 2D Gain-Distribution Controlled Microchip Laser," *Opt. Lett.* **37**, 2661–2663 (2012).

Y. SATO and T. TAIRA, "Temperature Dependencies of Stimulated Emission Cross Section for Nd-Doped Solid-State Laser Materials," *Opt. Mater. Express* **2**, 1076–1087 (2012).

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, "Half-Joule Output Optical-Parametric Oscillation by Using 10-mm-Thick Periodically Poled Mg-Doped Congruent $LiNbO_3$," *Opt. Express* **20**, 20002–20010 (2012).

Y. DENG, A. SCHWARZ, H. FATTAHI, M. UEFFING, X. GU, M. OSSIANDER, T. METZGER, V. PERVAK, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, T. KOBAYASHI, G. MARCUS, F. KRAUSZ, R. KIENBERGER and N. KARPOWICZ, "Carrier-Envelope-Phase-Stable, 1.2 mJ, 1.5 Cycle Laser Pulses at 2.1 μm," *Opt. Lett.* **37**, 4973–4975 (2012).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

W. KONG and T. TAIRA, "Lens-Less Edge-Pumping Design for High Power Single Mode Yb:YAG Microchip Laser," *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics (ASSP)*, AM4A.1 (2012).

R. BHANDARI, T. TAIRA, A. MIYAMOTO, Y. FURUKAWA and T. TAGO, "> 3 MW Peak Power at 266 nm Using Nd:YAG/Cr^{4+}:YAG Microchip Laser and Fluxless-Grown BBO," *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Photonics (ASSP)*, AT2A.1 (2012).

Y. SATO and T. TAIRA, "Temperature Dependences of Stimulated Emission Cross Section in Nd:YAG, Nd:YVO_4, and Nd:$GdVO_4$," *OSA Topical Meeting on Advances in Optical Materials (AIOM)*, IW3D.6 (2012).

M. TSUNEKANE and T. TAIRA, "Real Plug-Size, High Peak Power 3-Beam Composite Ceramic Laser for Ignition of Automobile Engines," *The 1st Advanced Lasers and Photon Sources (ALPS'12) co-located with OPTICS & PHOTONICS International 2012 Congress (OPIC 2012)*, ALPSp2-10 (2012).

S. HAYASHI, K. NAWATA, T. TAIRA, H. MINAMIDE and K. KAWASE, "High Peak-Power, Single Longitudinal Mode and Tunable Terahertz Wave Generation Pumped by a Microchip Nd:YAG Laser," *The 1st Advanced Lasers and Photon Sources (ALPS'12) co-located with OPTICS & PHOTONICS International 2012 Congress (OPIC 2012)*, ALPS5-5 (2012).

R. BHANDARI and T. TAIRA, "Megawatt Peak Power Green Microchip Laser," *LDC'12, OPTICS & PHOTONICS International 2012 Congress (OPIC 2012)*, LDC5-6 (2012).

W. KONG and T. TAIRA, "Lens-Less Edge-Pumping High Power Single-Mode Yb:YAG Microchip Laser," *CLEO 2012*, CTu1D.2 (2012).

S. HAYASHI, K. NAWATA, T. TAIRA, H. MINAMIDE and K. KAWASE, "High Peak-Power and Narrow-Linewidth Terahertz Wave Generation Pumped by a Microchip Nd:YAG Laser," *CLEO 2012*, CTu1B.6 (2012).

Y. SATO and T. TAIRA, "Model for the Temperature Dependent Emission Cross Section of Nd Laser Media," *CLEO 2012*, CTu1D.7 (2012).

M. TSUNEKANE and T. TAIRA, "High Peak Power Passively Q-Switched Yb:YAG Micro-Lasers," *CLEO 2012*, JW2A.27 (2012).

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, "Fabrication of 10-mm-Thick Periodically Poled Mg-Doped Congruent $LiNbO_3$ Device for High-Energy Wavelength Conversion," *CLEO 2012*, CTh1B.1 (2012).

R. BHANDARI, T. TAIRA, A. MIYAMOTO, Y. FURUKAWA and T. TAGO, "60% FHG Efficiency from Fluxless-Grown BBO Using Nd:YAG/Cr^{4+}:YAG Microchip Laser," *CLEO 2012*, CTh1B.6 (2012).

W. KONG and T. TAIRA, "Generation of 2D High-Order Hermit-Gaussian Modes, Doughnut-Shape Mode and Vortex Array Based on Edge-Pumped Microchip Laser," *The 8th Asia Pacific Laser Symposium (APLS 2012)*, O1.1 (2012).

T. TAIRA, "Microchip Laser, Ceramic Laser toward Giant Micro-Photonics," *The 17th OptoElectronics and Communications Conference (OECC 2012)*, 5F2-3 (2012). (*Invited*)

T. TAIRA, "Giant Micro-Photonics for Laser Ignitions," *2012 IEEE Photonics Society Int'l Conference on Optical MEMS & Nanophotonics (OMN 2012)*, ThC1 (2012). (*Invited*)

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, "Half-Joule Class, Efficient Optical-Parametric Oscillation by 10-mm-Thick Periodically Poled Mg-Doped Congruent $LiNbO_3$," *5th EPS-QEOD Europhoton Conference*, TuA.2 (30) (2012).

V. KEMLIN, D. JEGOUSO, J. DEBRAY, B. MENAERT, P. SEGONDS, B. BOULANGER, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, "Widely and Continuously Tunable Optical Parametric Oscillator up to 4.8 Microns Based on 5%MgO:PPLN Crystal Cut as a Cylinder," *5th EPS-QEOD Europhoton Conference*, TuA.6 (175) (2012).

M. TSUNEKANE and T. TAIRA, "High Peak Power, Yb:YAG/Cr:YAG Passively Q-switched Microlaser," *5th EPS-QEOD Europhoton Conference*, FrA.5 (116) (2012).

T. TAIRA, "Promise on Giant Micro-Photonics for Pulse-Gap," *Extended Abstracts, 73rd Autumn Meeting for Jpn. Society of Appl. Phys.*, 13a-G2-1 (2012). (*Invited*)

R. BHANDARI and T. TAIRA, "High Repetition Rate Operation of Megawatt Peak Power Microchip Laser," *Extended Abstracts, 73rd Autumn Meeting for Jpn. Society of Appl. Phys*., 13a-G2-4 (2012).

Y. SATO and T. TAIRA, "Theoretical Study of Manufacturing Processes for Anisotropic Laser Ceramics," *Extended Abstracts, 73rd Autumn Meeting for Jpn. Society of Appl. Phys.*, 13p-G2-12 (2012).

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, "Highly-Efficient, Half-Joule Output Optical-Parametric Oscillation by Using 10-mm-Thick Periodically Poled Mg-Doped Congruent $LiNbO_3$," *Extended Abstracts, 73rd Autumn Meeting for Jpn. Society of Appl. Phys.*, 13p-G2-13 (2012).

T. TAIRA and H. ISHIZUKI, "0.5J-OPO by Using 10mm-Thick Bulk PPmgLN," *50 Years of Nonlinear Optics—NLO 50 International Symposium*, WO.4 (2012).

T. TAIRA, "High Brightness Microchip Lasers for Engine Ignition," *Frontiers in Optics 2012, The OSA's 96th Annual Meeting, Rochester*, FM3G.1 (2012). (*Invited*)

M. TSUNEKANE and T. TAIRA, “High Peak Power Micro-Laser for Ignition of Automobile Engines,” *2nd International Conference on Frontiers of Manufacturing with Photons, Energetic Particles and Power fields in 2012 (MP^3 2012), 5th International Photonics and OptoElectronics Meetings (POEM2012)*, MF4A.2 (MP3-1447926) (2012). (*Invited*)

B-3) 総説，著書

平等拓範,「パルスギャップ高強度レーザー――ジャイアントマイクロフォトニクス――」, ***レーザー協会誌*** **37**, 1–5 (2012).

S. HAYASHI, K. NAWATA, H. SAKAI, T. TAIRA, H. MINAMIDE and K. KAWASE, “High-Power, Single-Longitudinal-Mode Terahertz-Wave Generation Pumped by a Microchip Nd:YAG Laser,” *Opt. Express* **20**, 2881–2886 (2012).

常包正樹，金原賢治，平等拓範,「マイクロレーザーによる次世代イグニッション」, ***材料の科学と工学*** **49**, 14–19 (72–77) (2012).

秋山　順，平等拓範,「レーザーセラミックスのマイクロドメイン構造制御」, ***セラミックス*** **47**, 249–252 (2012).

T. TAIRA and J. SANGHERA, “Feature Issue Introduction: Advances in Optical Materials,” *Opt. Mater. Express* **2**, 1171–1175 (2012).

平等拓範,「ジャイアントパルスマイクロチップレーザーの可能性」, ***日本レーザー医学会誌*** **33**, 152–157 (2012).

平等拓範，石月秀貴,「分極反転光デバイスのマイクロ固体フォトニクスへの展開」, ***オプトロニクス*** **31**, 110–114 (2012).

Y. SATO, J. AKIYAMA and T. TAIRA, “Micro-Domain Controlled Anisotropic Laser Ceramics Assisted by Rare-earth Trivalent,” *Pacific Rim Laser Damage 2011*, Proc. of SPIE 8206, 82061T (8 pages) (2012).

B-4) 招待講演

J. AKIYAMA, Y. SATO and T. TAIRA, “Fabrication and Optical Characterization of Anisotropic Laser Ceramics,” 32nd Annual Meeting of The Laser Society of Japan, Sendai (Japan), February 2012.

平等拓範,「パルスギャップ領域ジャイアントパルスレーザーによる革新」, **第77回レーザ加工学会講演会**, **大阪**, **2012年5月**.

T. TAIRA, “Micro Solid-State Photonics Toward Giant Photonics,” Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics (SIOM), Shanghai (China), June 2012.

平等拓範，W. KONG，石月秀貴,「マイクロ固体フォトニクスによるパルスギャップサイエンス」, **第4回超高速光エレクトロニクス研究会**, **東京，2012年6月**.

T. TAIRA, “Microchip Laser, Ceramic Laser toward Giant Micro-Photonics,” The 17th OptoElectronics and Communications Conference (OECC 2012), Busan (Korea), July 2012.

T. TAIRA, “High-Brightness Microchip Lasers Toward Giant Micro-Photonics,” Ajou University, Suwon (Korea), July 2012.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics for Laser Ignitions,” 2012 IEEE Photonics Society Int’l Conference on Optical MEMS & Nanophotonics (OMN 2012), Banff (Canada), August 2012.

T. TAIRA, “Promise on Giant Micro-Photonics for Pulse-Gap,” Extended Abstracts, 73rd Autumn Meeting for Jpn. Society of Appl. Phys., Ehime (Japan), September 2012.

T. TAIRA, “High Brightness Microchip Lasers for Engine Ignition,” Frontiers in Optics 2012, The OSA’s 96th Annual Meeting, Rochester (U.S.A.), October 2012.

平等拓範,「ジャイアントパルスマイクロチップセラミックレーザーの進展――ジャイアント マイクロフォトニクス――」, **電子情報通信学会技術研究報告**, **宮崎**, **2012年10月**.

M. TSUNEKANE and T. TAIRA, “High Peak Power Micro-Laser for Ignition of Automobile Engines,” 2nd International Conference on Frontiers of Manufacturing with Photons, Energetic Particles and Power fields in 2012 (MP^3 2012), 5th International Photonics and OptoElectronics Meetings (POEM2012), Wuhan (China), November 2012.

平等拓範,「透明セラミックスによるジャイアントパルスレーザー――ジャイアントマイクロフォトニクスを目指して――」, 放射線科学とその応用第186委員会　第4回委員会, 第4回研究会, 名古屋, 2012年12月.

B-5) 特許出願

特 2012-015136,「レーザ装置」, 平等拓範, バンダリ　ラケシュ, 古川保典, 宮本晃男, 羽生真之, 田子　毅(自然科学研究機構, (株)オキサイド), 2012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).

平等拓範, 国際光工学会(SPIE)フェロー (2012).

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 (2009-2013).

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–).

科学技術交流財団「ジャイアントマイクロフォトニクスII」研究会座長 (2011–2013).

レーザー学会「マイクロ固体フォトニクス」技術専門委員会主査 (2012–2015).

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).

Laser Ignition Conference 2013 (LIC'13), 国際会議プログラム委員会共同統括議長 (2012–2013).

LASERS 2001, 国際会議プログラム委員 (2001).

レーザー学会学術講演会プログラム委員 (2001, 2004, 2006).

CLEO/PacificRim 2005, 国際会議プログラム委員 (2004–2005).

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

23rd International Laser Radar Conference, 国際会議実行委員 (2005–2006).

Int. Conf. "Micro- to Nano-Photonics—ROMOPT 2006," プログラム委員 (2005–2006).

CLEO, Nonlinear Optics Application, 国際会議分科委員 (2006–2009).

OSA, Nonlinear Optics, 国際会議プログラム委員 (2006–2011).

3rd Laser Ceramics Symposium: International Symposium on Transparent Ceramics for photonic applications, 国際会議諮問委員 (2006–2007).

APLS 2008, 国際会議プログラム委員 (2007–2008).

3rd EPS Europhoton Conference on Solid-State and Fiber Coherent Light Sources, 国際会議分科委員 (2007–2008).

レーザー学会学術講演会第28回年次大会実行委員会委員 (2007).

レーザー・光波・マイクロ波国際会議2008（ILLMC2008)国際学会諮問委員 (2008).

International Workshop on Holographic Memories (IWHM) 2008, プログラム委員会委員 (2008).

OECC2008「CLEO Focus: Frontiers in Photonics」, プログラム分科委員会委員 (2008).

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

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

レーザー学会学術講演会第30回年次大会実行委員会委員 (2009).

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

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

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

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

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–).

レーザー学会, レーザーの農業応用専門委員会委員 (2012–2014).

APLS 2012, 国際会議プログラム委員 (2012–2012).

レーザー学会, 諮問員 (2012–2014).

レーザー学会, レーザー照明・ディスプレイ専門委員会委員 (2012–2015).

CLEO 2013: Science & Innovations 02: Solid-State, Liquid, Gas, and High-Intensity Lasers, 国際会議諮問委員 (2012–2013).

レーザー学会, レーザー衝撃科学の基礎と応用専門委員会委員 (2012–2015).

Optics & Photonics International Congress 2013 (OPIC2013), 国際会議組織委員会委員 (2012–2013).

International Workshop on Holography and related technologies 2012 (IWH 2012), 国際会議プログラム委員会委員 (2012).

8th Laser Ceramics Symposium (LCS): International Symposium on Transparent Ceramics for Photonic Applications, 国際会議プログラム委員会委員 (2012).

SPIE/SIOM Pacific Rim Laser Damage 2013, 国際会議国際委員会委員 (2012–2013).

CLEO-PR 2013, 国際会議プログラム委員会委員 (2012–2013).

Materials Committee, Advanced Solid State Lasers (ASSL) 2013, 国際会議プログラム委員会委員 (2012–2013).

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–).

Fibers (http://www.mdpi.com/journal/fibers, ISSN 2079-6439), MDPI, 編集委員会委員 (2012 – 2013).

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 (2011–2013).

B-8) 大学での講義，客員

豊橋技術科学大学エレクトロニクス先端融合研究所, 客員教授, 2012年.

B-10) 競争的資金

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　(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–).

科学技術交流財団平成２４年度共同研究推進事業,「エンジン点火用高輝度マイクロチップレーザー」, 研究統括者　平等拓範 (2012年–2013年).

B-11) 産学連携

(株)コンポン研究所,「マイクロ固体フォトニクスの基礎研究」, 平等拓範 (2012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 (2012年).

(株)リコー ,「高出力レーザー光源の研究」, 平等拓範 (2012年).

(株)リコー ,「VCSEL 励起によるマイクロチップレーザーに関する研究」, 平等拓範 (2012年).

(株)デンソー ,「高輝度マイクロチップレーザーの研究」, 平等拓範 (2012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，ディスプレー，光メモリ分野での展開が図られつつある。特にエネルギー分野からエンジンのレーザー点火への期待は高い。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) 赤外ファイバーレーザーの開発

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，パルス幅が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，様々な波長の超短光パルスを発生させることを目標としている。今年度の成果としては，チタンサファイアレーザーの基本波（800 nm）と二倍波（400 nm）を窒素ガス中に集光し，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 500 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。また，基本波と二倍波の位相関係によって，発生するスペクトルが変化することに着目し，それが 2 つの異なるパラメトリック過程から発生する赤外光の干渉によるものであることを示した。

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，発生と同様に窒素ガスを非線形媒質として，参照光パルスと赤外光の相互相関スペクトルを測定する手法をとった。窒素ガス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 6.9 fs となった。赤外光パルスの中心波長は 3.3 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，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。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。さらに，超短光パルスの振動電場を計測する新しい手法を開発した。

c) 一般的に，波長変換において，変換元と変換先との波長がなるべく近いほうが，変換効率の向上が見込まれる。2–20 μm の赤外光パルス発生を目的として，チタンサファイアレーザーよりも長波長の超短光パルスを発生するファイバーレーザーの開発を行った。ツリウムを添加した石英ファイバーをレーザー媒質として，150 fs 程度で 1.8 μm を中心波長としたパルスを連続的に発生する発振器を製作した。チタンサファイアレーザー（800 nm）に比べて，発振する波長が長いため，長波長への波長変換に適していると同時に，チタンサファイアレーザーに比べて，大幅にコンパクトなレーザー発振器の設計が可能となり，産業や医療への応用が期待される。

B-1) 学術論文

P. ZUO, T. FUJI, T. HORIO, S. ADACHI and T. SUZUKI, “Simultaneous Generation of Ultrashort Pulses at 158 and 198 nm in a Single Filamentation Cell by Cascaded Four-Wave Mixing in Ar,” *Appl. Phys. B: Lasers Opt.* **108**, 815–819 (2012).

Y. NOMURA, H. SHIRAI, K. ISHII, N. TSURUMACHI, A. A. VORONIN, A. M. ZHELTIKOV and T. FUJI, "Phase-Stable Sub-Cycle Mid-Infrared Conical Emission from Filamentation in Gases," *Opt. Express* **20**, 24741–24747 (2012).

N. KUSE, A. OZAWA, Y. NOMURA, I. ITOH and Y. KOBAYASHI, "Injection Locking of Yb-Fiber Based Optical Frequency Comb," *Opt. Express* **20**, 10509–10518 (2012).

N. ISHII, S.ADACHI, Y. NOMURA, A. KOSUGE, Y. KOBAYASHI, T. KANAI, J. ITATANI and S. WATANABE, "Generation of Soft X-Ray and Water Window Harmonics Using a Few-Cycle, Phase-Locked, Optical Parametric Chirped-Pulse Amplifier," *Opt. Lett.* **37**, 97–99 (2012).

B-2) **国際会議のプロシーディングス**

Y. NOMURA, Y. ITO, A. OZAWA, X. WANG, C. CHEN, S. SHIN and S. WATANABE, "Coherent quasi-CW 153-nm light source at high repetition rate," *SPIE Photonics West*, 8240-16, 82400H (2012).

T. FUJI, Y. NOMURA, H. SHIRAI, N. TSURUMACHI, A. A. VORONIN and A. M. ZHELTIKOV, "Phase-stable sub-single-cycle mid-infrared pulses generated through filamentation," *HILAS2012*, HW3C.3. (2012).

T. FUJI, Y. NOMURA, H. SHIRAI and N. TSURUMACHI, "Frequency-resolved optical gating with electro-optic sampling," *Ultrafast Phenomena 2012*, TUE.2B.5 (2012).

Y. NOMURA, T. FUJI, H. SHIRAI, N. TSURUMACHI, A. A. VORONIN and A. M. ZHELTIKOV, "Generation of phase-stable half-cycle mid-infrared pulses through filamentation in gases," *Ultrafast Phenomena 2012*, MON.PI.9 (2012).

T. FUJI, Y. NOMURA, H. SHIRAI, K. ISHII, N. TSURUMACHI, A. A. VORONIN and A. M. ZHELTIKOV, "Generation of half-cycle mid-infrared pulses through filamentation in gases," *LPHYS2012*, 5.2.1. (2012).

T. FUJI, Y. NOMURA, H. SHIRAI, K. ISHII, N. TSURUMACHI, A. A. VORONIN and A. M. ZHELTIKOV, "Phase-stable half-cycle mid-infrared pulses generated through filamentation in gases," *COFIL2012* (2012).

B-3) **総説，著書**

野村雄高，CHUANGTIAN CHEN，渡辺俊太郎，小林洋平,「コヒーレントな狭帯域準連続真空紫外光源の開発」, *化学工業* **63**, 36 (2012).

B-4) **招待講演**

Y. NOMURA, "Coherent quasi-CW 153-nm light source at high repetition rate," SPIE Photonics West, San Francisco (U.S.A.), January 2012.

T. FUJI, "Generation of half-cycle mid-infrared pulses through filamentation in gases," LPHYS2012, Calgary (Canada), July 2012.

T. FUJI, "Phase-stable half-cycle mid-infrared pulses generated through filamentation in gases," COFIL2012, Tucson (U.S.A.), October 2012.

藤　貴夫,「超短光パルスの振動電場を測定する新しい方法」, 分子研研究会「新しい光の創成と物質科学――精密計測と操作への展開」, 分子研研究会, 岡崎, 2012年10月.

B-5) 特許出願

特願 2012-101276,「光パルスの強度と位相を測定する方法及び装置」, 藤　貴夫, 野村雄高(自然科学研究機構), 2012年.

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).

CLEO/Europe2013国際会議プログラム委員 (2013).

CLEO/Pacific Rim 2013 国際会議プログラム委員 (2013).

B-8) 大学での講義，客員

(独)理化学研究所, 客員研究員, 2010年 2月– .

総合研究大学院大学物理科学研究科,「光物理」, 2012年前期.

B-10) 競争的資金

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

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

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

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト,「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).

科研費基盤研究(B),「超広帯域コヒーレント中赤外光を用いた新しい分光法の開拓」, 藤　貴夫 (2012年).

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,「超短中赤外パルスを用いた生細胞内分子の無染色ライブイメージング法の開発」, 藤　貴夫 (2012年).

科学技術振興事業団先端計測分析技術・機器開発プログラム要素技術タイプ,「超広帯域コヒーレント赤外分光技術の開発」, 藤　貴夫 (2012年–2015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).

光科学技術研究振興財団 研究助成,「ツリウム添加ファイバーによるフェムト秒レーザーの開発」, 野村雄高 (2012年–2013年).

C)　研究活動の課題と展望

フィラメンテーションを用いた波長変換は，気体を媒質としながらも，高効率な超短光パルスの波長変換法として有効であり，これまで，近赤外光のチタンサファイアレーザーの出力を真空紫外や赤外への波長変換を実験的に示してきた。今後，これらの波長の光を同時に発生させ，それらを使ったユニークな分光を行うことを目指している。本年度は，3–20 μm にわたる広帯域な赤外光を発生させ，その詳しい評価を行うことができた。さらに，超短光パルスにおける振動電場の新しい計測法や，ファイバーレーザーの開発などを進めることができた。今後は，これら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。

6-4　物質分子科学研究領域

電子構造研究部門

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

d) 雰囲気制御型硬X線光電子分光法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 磁性薄膜は垂直磁化や巨大磁気抵抗などの興味深い磁気特性を示し，基礎科学的にも応用的な見地からも広く研究が行われている。当研究室では，実験室で簡便に行える磁気光学 Kerr 効果（MOKE）法に加え，UVSOR-II BL4B を用いた高磁場極低温X線磁気円二色性法（XMCD）を用いて，様々な磁性薄膜の磁気特性検討を行ってきた。今年度は，極端に大きな保持力や磁気異方性を有すると期待される W(110) 上に成長させた Fe 単層アイランド・ナノワイヤの磁化曲線の XMCD 法による直接測定などの成果が挙がった。

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，新しい光電子顕微鏡の立ち上げが完了し，Ni/Cu(001) 薄膜への水素吸着や昇温過程などの磁壁移動に関する動画観測に成功するなどの成果が挙がった。

c) 昨年度に成果の挙がった Invar 合金の極低温での非熱膨張の起源が格子振動の量子揺らぎに依ることを解明した研究に関して，国際会議２件の招待講演を行った。また，今年度はマルテンサイト変態を呈する MnNi 合金に関して協奏的な Invar/anti-Invar 特性があることを見出した。

d) SPring-8 の新しい超高輝度硬X線ビームラインに，燃料電池の状態解析のため，気体存在下で硬X線光電子分光測定が可能な装置を製作しているところである。

B-1) 学術論文

T. NAKAGAWA, Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA, T. METHFESSEL, S. DIEHL and H.-J. ELMERS, “Giant Magnetic Anisotropy Energy and Coercivity in Fe Island and Atomic Wire on W(110),” *Phys. Rev. B* **86**, 144418 (5 pages) (2012).

T. YOKOYAMA, “Path Integral Effective Classical Potential Method Applied to Anharmonicity and Quantum Effects in Thermal Expansion of Invar Alloy,” *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* **10**, 486–492 (2012).

T. SAIDA, O. SEKIZAWA, N. ISHIGURO, K. UESUGI, M. HOSHINA, T. URUGA, S. OHKOSHI, T. YOKOYAMA and M. TADA, “4D Visualization of Structures/Chemical States of Pt/C Cathode Catalyst Layers in Polymer Electrolyte Fuel Cells by 3D-Laminography-XAFS,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **51**, 10311–10314 (2012).

N. ISHIGURO, T. SAIDA, T. URUGA, O. SEKIZAWA, S. NAGAMATSU, K. NITTA, T. YAMAMOTO, S. OHKOSHI, Y. IWASAWA, T. YOKOYAMA and M. TADA, "Operando Time-Resolved X-Ray Absorption Fine Structure Study for Surface Events on a Pt_3Co/C Cathode Catalyst in a Polymer Electrolyte Fuel Cell during Voltage-Operating Processes," *ACS Catal.* **2**, 1319–1330 (2012).

K. EGUCHI, Y. TAKAGI, T. NAKAGAWA and T. YOKOYAMA, "Growth Process and Magnetic Properties of Iron Nanoparticles Deposited on Si_3N_4/Si(111)-(8×8)," *Phys. Rev. B* **85**, 174415 (8 pages) (2012).

H. WANG, S. HAMANAKA, Y. NISHIMOTO, S. IRLE, T. YOKOYAMA, H. YOSHIKAWA and K. AWAGA, "In Operando XAFS Studies of Polyoxometalate Molecular Cluter Batteries: Polyoxometalates as Electron Sponges," *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 4918–4924 (2012).

K. HILD, G. SCHÖNHENSE, H. J. ELMERS, T. NAKAGAWA, T. YOKOYAMA, K. TARAFDER and P. M. OPPENEER, "Dominance of the First Excitation Step for Magnetic Circular Dichroism in Near-Threshold Two-Photon Photoemission," *Phys. Rev. B* **85**, 014426 (10 pages) (2012).

B-3) 総説，著書

T. NAKAGAWA and T. YOKOYAMA, "Laser induced threshold photoemission and its application to photoelectron microscope," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **185**, 356–364 (2012).

T. YOKOYAMA, "Quantum Effect and Anharmonicity in an Invar Alloy Studied by EXAFS Spectroscopy," *Photon Factory Activity Report Part A: Highlights and Facility Report 2011* p.32–33 (2012).

阿波賀邦夫，小谷正博，横山利彦，編著,「固体の化学と物性」, 大学院講義物理化学第2版III, 幸田清一郎，小谷正博，染田清彦，阿波賀邦夫編, 東京化学同人, 2, 3, 5, 6章, 7章2節著 (2012).

横山利彦,「光電子分光」, 錯体化学選書⑦金属錯体の機器分析(下), 大塩寛紀編, 三共出版, 17章, 356–391 (2012).

B-4) 招待講演

中川剛志，横山利彦,「Fe/W(110)におけるXMCDによる巨大保持力観測とNi/Cu(001)の水素吸着過程におけるUV MCD PEEMによる磁区変化観測」, 日本表面科学会放射光表面科学部会顕微ナノ材料科学合同シンポジウム, 慶應大学, 神奈川, 2012年11月.

横山利彦,「分子・物質合成プラットフォームの概要――研究者が自ら集結する分子・物質合成拠点形成へ――」, 文部科学省ナノテクノロジープラットフォームシンポジウム, 東京大学, 東京, 2012年10月.

横山利彦,「分子吸着表面XAFSと軟X線定在波法の開発」, 黒田・太田シンポジウム, 慶應大学, 神奈川, 2012年8月.

T. YOKOYAMA, "Anharmonicity and Quantum Effects in Thermal Expansion of Invar Alloy," 15th Int. Conf. X-ray Absorption Fine Structure, Beijing (China), July 2012.

T. YOKOYAMA, "Anharmonicity and Quantum Effects in Thermal Expansion of an Invar Alloy," XAFS Theory Workshop: XAFS Theory and Nano Particles (Satellite Conf. of XAFS15), Chiba (Japan), July 2012.

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XAFS 研究会幹事 (2001–2007, 2010–).

日本放射光学会評議員 (2004–2005, 2008–2010, 2011–2012).

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 (1998–2012).

第15回X線吸収微細構造国際会議プログラム委員 (2011–2012).

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化学班専門研究員 (2010–2012).

文部科学省ナノテクノロジー・ネットワーク運営委員 (2007–2011).

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 (2004–2006).

日本放射光学会誌編集委員長 (2005–2006).

競争的資金等の領域長等

科学研究費補助金特定領域研究「分子スピン」総括班事務局 (2003–2006).

その他

文部科学省ナノテクノロジー・プラットフォーム分子・物質合成プラットフォーム代表機関運営責任者 (2012.7.–)

文部科学省ナノテクノロジー・プラットフォーム分子・物質合成プラットフォーム分子科学研究所, 実施責任者 (2012.7.–).

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,「物性化学」, 2012年後期.

京都大学大学院理学研究科化学専攻, 連携客員教授, 2011年– .

京都大学大学院理学研究科, 集中講義「固体表面磁性」, 2012年 7月 11日–12日.

名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻, 客員教授, 2012年– .

東京大学物性研究所, 嘱託研究員, 2011年– .（中川剛志）

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C),「レーザー誘起磁気円二色性STM によるフタロシアニン分子のスピン分布マッピング」, 高木康多 (2012年–2014年).

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, 富士フィルム株式会社,「無機機能性材料の固体構造解析」, 横山利彦 (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・ナノドットの磁気的性質，および分子吸着などの表面化学的な処理による新しい現象の発見とその起源の解明などを目指し，超高真空表面磁気光学Kerr 効果法，高磁場（7 T）極低温（5 K）X線磁気円二色性法（UVSOR 利用），磁気的第二高調波発生法（フェムト秒Ti:Sapphire レーザー使用），極低温超高真空走査トンネル顕微鏡などの手法を展開している。また，紫外光励起光電子放出による磁気円二色性が仕事関数しきい値近傍で極端に増大する現象を発見し，紫外磁気円二色性光電子顕微鏡を世界に先駆けて開発し，さらにはこれまで全く研究されていなかった二光子光電子磁気円二色性法の初観測に成功し，極めて有効な手法として今後の発展が期待できることが示せた。

また，昨年度から，広域X線吸収微細構造（EXAFS）法と経路積分法を併用して，磁性合金の熱膨張等の研究を始め，既に成果が挙がっている。今後も，この独自の手法によって，局所構造の見地から固体の熱的性質を検討していきたい。

さらに，昨年度から，唯グループとともに，SPring-8 の超高輝度硬X 線を利用した燃料電池のin situ X線吸収分光による解析を行っているが，今年度は，雰囲気制御型硬X線光電子分光法の開発を始めた。来年度の手法確立と燃料電池への応用を目指す。

2002年7月から助手・助教を務めた中川剛志が九州大学・大学院総合理工学府・物質理工学専攻の准教授として転出，来年度に新しい助教を迎え，新規研究課題に取り組む予定である。

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触媒の調製とその構造－機能相関の解明

b) 表面モレキュラーインプリンティング固定化金属錯体の設計と調製

c) Ce 系複合酸化物固溶体の界面を利用した金属触媒の活性化とその特性解明

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 時間分解 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) Ir ダイマー，Mn4 核オキソクラスター，Ru3 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て，酸化物表面固定化金属錯体を調製した。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。表面の化学修飾により，固定化した金属種の触媒反応条件における安定性を大きく向上させることに成功した。

b) 酸化物表面に固定化した単核 Pd 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を行い，鈴木カップリング反応のための表面モレキュラーインプリンティング触媒を調製した。配位子の定量分析，NMR，XAFS などの手法により，固定化した Pd 錯体および表面モレキュラーインプリンティング触媒の構造を明らかにした。

c) Ce 系酸化物固溶体の界面を利用して Ni 粒子を担持し，メタンスチームリフォーミング，ドライリフォーミング反応の特性と触媒活性構造の相関を明らかにした。

d) Pt 及び Pt_3Co，Pt_3Ni 合金ナノ粒子カソード触媒を用いた MEA について，燃料電池電圧サイクルにおける in-situ 時間分解 QXAFS を測定した。燃料電池電圧操作時におけるカソード表面の反応，Pt 触媒の構造変化の構造速度論を明らかにした。

e) SPring-8 のX線マイクロビームを用いた走査型顕微 XAFS，X線ラミノグラフィー XAFS により，燃料電池 MEA 内部の Pt/C カソード触媒の 3 次元分布や Pt/CeZrOx 触媒 1 粒内部化学状態の違いを捉えることに成功した。

B-1) 学術論文

Y. YANG, Z. WENG, S. MURATSUGU, N. ISHIGURO, S. OHKOSHI and M. TADA, “Preparation and Catalytic Performances of a Molecularly Imprinted Ru-Complex Catalyst with an NH_2 Binding Site on a SiO_2 Surface,” *Chem. –Eur. J.* **18**, 1142–1153 (2012).

N. MAITY, C. WATTANAKITW, S. MURATSUGU, N. ISHIGURO, Y. YANG, S. OHKOSHI and M. TADA, “Sulfoxidation on a SiO_2-Supported Ru Complex Using O_2/Aldehyde System,” *Dalton Trans.* **41**, 4558–4565 (2012).

N. ISHIGURO, T. SAIDA, T. URUGA, O. SEKIZAWA, S. NAGAMATSU, K. NITTA, T. YAMAMOTO, S. OHKOSHI, Y. IWASAWA, T. YOKOYAMA and M. TADA, “Operando Time-Resolved X-Ray Absorption Fine Structure Study for Surface Events on a Pt_3Co/C Cathode Catalyst in a Polymer Electrolyte Fuel Cell during Voltage-Operating Processes,” *ACS Catal.* **2**, 1319–1330 (2012).

M. TADA, S. ZHANG, S. MALWADKAR, N. ISHIGURO, J. SOGA, Y. NAGAI, K. TEZUKA, H. IMOTO, S. O.-Y.-MATSUO, S. OHKOSHI and Y. IWASAWA, "The Active Phase of Nickel/Ordered $Ce_2Zr_2O_x$ Catalysts with a Discontinuous (x = 7–8) in Methane Steam Reforming," *Angew. Chem., Int. Ed.* **51**, 9361–9365 (2012). [HOT PAPER]

T. SAIDA, O. SEKIZAWA, N. ISHIGURO, K. UESUGI, M. HOSHINA, T. URUGA, S. OHKOSHI, T. YOKOYAMA and M. TADA, "4D Visualization of a Cathode Catalyst Layer in a Polymer Electrolyte Fuel Cell by 3D-Laminography-XAFS," *Angew. Chem., Int. Ed.* **51**, 10311–10314 (2012).

S. ZHANG, S. MURATSUGU, N. ISHIGURO, S. OHKOSHI and M. TADA, "Perovskite $NaCeTi_2O_6$-Supported Ni Catalysts for CH_4 Steam Reforming," *ChemCatChem* **4**, 1783–1790 (2012). [Back Cover of Issue 11].

S. MURATSUGU, Z. WENG, H. NAKAI, K. ISOBE, Y. KUSHIDA, T. SASAKI and M. TADA, "Surface-Assisted Transfer Hydrogenation Catalysis on a γ-Al_2O_3-Supported Ir Dimer," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14**, 16023–16031 (2012).

B-4) 招待講演

唯美津木,「触媒開発戦略と放射光ナノアプリケーション」, 第5回放射光連携ワークショップ――SPring-8 のナノアプリケーションが拓くイノベーション――, 東京, 2012年 2月.

M. TADA, "Time-Resolved XAFS Study on Practical Pt-Alloy Cathode Catalysts under Fuel-Cell Operating Conditions," JAEA-Symposium on Synchrotron Radiation Research 2012, Harima, March 2012.

M. TADA, "Functionalization of Catalyst Surfaces Grafting Metal Complexes for Selective Catalysis," The 9th Japan-China Joint Symposium on Metal Cluster Compounds, Fukuoka, August 2012.

唯美津木,「時間・空間分解X線吸収微細構造法による触媒構造解析」, 第22回触媒学会キャラクタリゼーション講習会, 大阪, 2012年 10月.

M. TADA, "In-Situ Time-Resolved/Space-Resolved XAFS Study for Heterogeneous Catalysis," Fifth International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology, Osaka, October 2012.

唯美津木,「燃料電池MEA の時間分解・空間分解XAFS 構造解析」, 岩澤コンファレンス2012「サステイナブル社会のための最先端触媒化学・表面科学」, 神戸, 2012年 10月.

M. TADA, "Surface/Interface-Mediated Catalysis on Supported Metal Catalysts" 2nd International Symposium on Molecular Activation (ISMA-2), Nara, November 2012.

S. MURATSUGU, "Design and Functionalization of Oxide-Supported Transition Metal Complex Catalysts for Heterogeneous Catalysis," 2nd International Conference on Molecular and Functional Catalysis (ICMFC-2), Singapore (Singapore), July 2012.

邨次　智,「酸化物表面を媒体とした固定化金属錯体触媒の創製」, 第43回中部化学関係学協会支部連合秋季大会, 名古屋, 2012年 11月.

邨次　智,「金属錯体と酸化物表面を駆使した不均一系触媒の創製」, 錯体化学若手の会中部支部勉強会, 名古屋, 2012年 12月.

邨次　智,「金属錯体の酸化物表面プログラミングによる触媒機能創出」, 新学術領域研究若手合同シンポジウム「配位プログラム」×「融合マテリアル」, 東京, 2012年 12月.

B-6) 受賞，表彰

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

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

唯美津木, 日本化学会学生講演賞 (2004).

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

唯美津木, 井上研究奨励賞 (2007).

M. TADA, PCCP Prize (2007).

唯美津木, 日本化学会優秀講演賞 (2007).

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

唯美津木, 日本化学会進歩賞 (2008).

唯美津木, 東海化学工業会賞技術賞 (2008).

唯美津木, 日本放射光学会奨励賞 (2009).

唯美津木, 井上リサーチアウォード (2009).

唯美津木, 化学技術戦略推進機構萌芽技術奨励 (2009).

唯美津木, 守田科学研究奨励賞 (2009).

S. MURATSUGU, 2nd Asian Conference on Coordination Chemistry *Dalton Transactions* Poster Prize (2009).

邨次　智, 井上研究奨励賞 (2009).

邨次　智, 日本化学会優秀講演賞（学術） (2010).

唯美津木, 触媒学会若手優秀講演賞 (2010).

S. MURATSUGU, The Royal Society of Chemistry Poster Prize (2010).

唯美津木, 文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2010).

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 Nanocscopic 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).

16th International Symposium Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis (ISHHC-16), Vice Program Chair (2012–2013).

Advisory Board Member of ISHHC (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-8) **大学での講義，客員**

名古屋大学大学院理学研究科, **客員准教授**, **2012年–2013年**.

B-10) **競争的資金**

科研費特別研究員奨励費,「**表面モレキュラーインプリンティング法による不斉金属錯体触媒の構築と不斉触媒作用**」, **唯美津木** (**2003年–2004年**).

科研費若手研究(B),「**モレキュラーインプリンティングマンガン錯体触媒の表面設計と不斉光酸化反応の制御**」, **唯美津木** (**2005年–2006年**).

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

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

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

科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業研究シーズ探索プログラム(**物質・機能探索分野**),「**酵素インスパイアード触媒表面の創製によるテイラーメイド触媒反応空間の設計と選択触媒反応制御**」, **唯美津木** (**2010年**).

科研費新学術領域研究「**配位プログラム**」(**公募研究**),「**テンプレート電気化学法を駆使した合金ナノ粒子超構造体触媒表面の創製**」, **邨次　智** (**2010年–2011年**).

科研費新学術領域研究「**分子活性化**」(**計画研究**),「**固体表面での高反応性活性構造の創出と触媒的高効率物質変換**」, **唯美津木** (**2010年–2014年**).

NEDO 固体高分子形燃料電池実用化推進技術開発「基盤技術開発」MEA 材料の構造・反応物質移動解析,「時空間分解X線吸収微細構造（XAFS）等による触媒構造反応解析」, 唯美津木 (2010年–2011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イティブ物質変換」, 唯美津木 (2011年–2014年).

C) 研究活動の課題と展望

効率的な触媒反応を目指した新しい固体触媒表面の分子レベル設計のために，金属錯体の表面固定化，表面化学修飾，表面モレキュラーインプリンティング等の触媒表面の構築法を用いて，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の構築を目指している。調製した固定化金属錯体触媒の構造を固体 NMR, IR，ラマン分光，XPS，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，X線ラミノグラフィー XAFS 法の触媒系への展開を推進しており，触媒反応条件におけるその場（in-situ）XAFS 構造解析によって，触媒自身の動きやミクロ構造情報を明らかにしたい。

電子物性研究部門

山　本　浩　史（教授）（2012 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：分子物性科学

A-2) 研究課題：

a) 有機モットFET（FET＝電界効果トランジスタ）

b) 有機超伝導FET

c) 超分子ナノワイヤー

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 有機モット絶縁体 κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu[N(CN)$_2$]X (X = Cl, Br) の薄膜単結晶を用いたFETを作製し，その電気的特性を測定した。モット絶縁体中では電子間に働くクーロン反発と格子整合のために本来金属的であるべきキャリアの伝導性が極端に低い状態が実現しているが，トランジスタのゲート電界により静電キャリアドーピングが行われると実効的なクーロン反発が遮蔽されて金属的な伝導性が復活する。こうした原理による伝導性スイッチングはこれまでの半導体デバイスではほとんど使われてこなかったが，我々のグループが世界に先駆けて原理検証したものである。本年は動作温度の上昇と，デバイス特性を支配する「モット転移の臨界指数」の検証とを目的として様々な測定を行った。その結果，より大きなモットハバードギャップを有する物質系を用いることにより，動作温度の向上が見込めることが明らかとなった。

b) 上記モット絶縁体のモットハバードギャップを低温において小さくしていくと，超伝導状態が実現することが予想されている。そこで基板からの歪みを制御することによって極限まで電荷ギャップを小さくしたFETを作製し，これに対してゲート電圧をかけることによって電界誘起超伝導の可能性を検討した。具体的には，基板としてひっぱり歪み効果の小さい $SrTiO_3$ を選択し，この基板に Nb をドープして伝導性を持たせることによりゲート電極としての役割も果たせるようにした後，その表面に Al_2O_3 を ALD（Atomic Layer Deposition）成長させることによってボトムゲート用の基板を作製した。この基板に κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu[N(CN)$_2$]Br の薄膜単結晶を載せて低温まで温度を下げると，ちょうど電子相が超伝導とモット絶縁体の境界付近に誘導され，非常に小さな摂動で超伝導転移を制御できる状態を実現することに成功した。この状態でゲート電圧をかけると，絶縁体だったデバイス抵抗がほんの数ボルトの電圧で超伝導状態に転移し，有機物として世界で初めての超伝導FETが実現出来たことが明らかとなった。このデバイス中では相分離によってジョセフソン接合が出来ており，3端子ジョセフソンデバイスのゲート電界における制御が出来たことも分かっている。またいくつかのサンプルを測定することにより，バンド幅とバンドフィリングとをパラメーターとしたモット絶縁体の基底状態における相図を描くことが出来るようになり，強相関電子系の持っている基本的な性質を調べるためのツールとして，今回のデバイスが利用できることも明らかとなった。

c) 我々は以前の研究において，分子性導体の結晶中にハロゲン結合を利用した超分子ネットワーク構造を構築し，絶縁性の被覆構造とその中を貫通する伝導性ナノワイヤーとからなる複合構造を形成した。こうしたナノワイヤーは結晶構造の中で三次元的に周期配列しているため，結晶の並進対称性を使った配線材料として利用できる可能性がある。そのため，現在このようなナノワイヤーの物性と配列様式を改良するための研究を行っている。

B-1) 学術論文

T. KUSAMOTO, H. M. YAMAMOTO, N. TAJIMA, Y. OSHIMA, S. YAMASHITA and R. KATO, "Bilayer Mott System Based on Ni(dmit)$_2$ (dmit = 1,3-dithiole-2-thione-4,5-dithiolate) Anion Radicals: Two Isostructural Salts Exhibit Contrasting Magnetic Behavior," *Inorg. Chem.* **51**, 11645–11654 (2012).

D. WATANABE, M. YAMASHITA, S. TONEGAWA, Y. OSHIMA, H. M. YAMAMOTO, R. KATO, I. SHEIKIN, K. BEHNIA, T. TERASHIMA, S. UJI, T. SHIBAUCHI and Y. MATSUDA, "Novel Pauli-Paramagnetic Quantum Phase in a Mott Insulator," *Nat. Commun.* **3**, 1090 (2012).

T. KISS, A. CHAINANI, H. M. YAMAMOTO, T. MIYAZAKI, T. AKIMOTO, T. SHIMOJIMA, K. ISHIZAKA, S. WATANABE, C.-T. CHEN, A. FUKAYA, R. KATO and S. SHIN, "Quasiparticles and Fermi Liquid Behaviour in an Organic Metal," *Nat. Commun.* **3**, 1089 (2012).

B-3) 総説，著書

川椙義高，山本浩史,「有機モットトランジスタの物理と可能性」, ***応用物理*** **81**, 1034–1037 (2012).

B-4) 招待講演

山本浩史,「分子系π電子における電場誘起超伝導」, 物理学会, 神奈川, 2012年9月.

H. M. YAMAMOTO, "Crystal Engineering of Molecular Conductors by Halogen-Bonded Network," Gordon Conference, New Hampshire (U.S.A.), June 2012.

H. M. YAMAMOTO, "Electrostatic doping into an organic Mott-insulator," M2S, Washington D.C. (U.S.A.), August 2012.

H. M. YAMAMOTO, "Monocrytalline Supramolecular Nanowires," 17MCC, Kuala Lumpur (Malaysia), October 2012.

H. M. YAMAMOTO, "Field-induced superconductivity at an organic transistor interface," IWAMSN2012, Ha Long (Vietnam), November 2012.

B-6) 受賞，表彰

山本浩史, CrystEngComm Prize (2009).

山本浩史, 分子科学会奨励賞 (2009).

山本浩史, 理研研究奨励賞 (2010).

B-7) 学会および社会的活動

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会情報科学用有機材料第142委員会運営委員 (2007–).

学会誌編集委員

Molecular Science 編集委員 (2010–2011).

その他

理化学研究所研究員会議代表幹事 (2009–2010).

B-8) 大学での講義，客員

東京工業大学大学院総合理工学研究科,「半導体電子物性」, 2012年11月–2013年2月.

総合研究大学院大学物理科学研究科,「物性化学」, 2012年後期.

東京工業大学大学院総合理工学研究科, 連携教授, 2012年6月– .

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究,「電子相関を利用した新原理有機デバイスの開発」, 山本浩史 (2009年–2013年).

科研費若手研究(A),「超分子ナノワイヤーの冗長性拡張による金属化」, 山本浩史 (2008年–2011年).

科研費特定領域研究(公募研究),「電極との直接反応によるDCNQIナノ単結晶作成とその機能探索」, 山本浩史 (2006年–2008年).

理研理事長ファンド戦略型,「シリコン基板上での分子性導体ナノ結晶作成とその物性測定」, 山本浩史 (2005年–2007年).

理研研究奨励ファンド,「Crystal Engineeringを用いた導電性ナノワイヤーの多芯化・直交化」, 山本浩史 (2003年–2004年).

C) 研究活動の課題と展望

これまでの研究によって，分子性導体の単結晶デバイス作製技術が確立してきた。今後はこの技術をどのように応用し，適用範囲を広げていくかということが研究を進めていく上での鍵となる。分子系では格子の柔らかさと電子間の相互作用が同居しており，ひとつにはこの性質をうまく生かして低温物性を展開する方向性が考えられる。その方向としては，低温での超伝導転移やモット転移を用いた様々な実験を続けていくことが重要である。一方でこうした分子間相互作用をうまく設計すれば，室温付近での物性発現も十分可能性があり，物質系やデバイス構造の工夫により新しい方向性での研究を模索したいとも考えている。

中　村　敏　和（准教授）（1998 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：物性物理学，物質科学

A-2) 研究課題：

a) 磁気共鳴法による有機導体・低次元スピン系の電子状態理解

b) パルスおよび高周波 ESR を用いたスピン科学研究の新しい展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 有機導体･低次元スピン系の特異な電子状態に興味を持ち，微視的な観点からその電子状態やスピン･電荷ダイナミッ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圧力下の 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，新規な自己ドープ型有機導体の強磁場 ESR を用いた研究，二次元モット－超伝導近傍相での電荷注入に関する微視的研究も行っている。

b) 分子研所有のパルスおよび高周波 ESR を用いて，高分解能 ESR・高エネルギー特性を利用した複雑なスピン構造の決定，多周波領域にわたるスピンダイナミクス計測といった種々な点から，スピン科学研究展開を行っている。本年度は Q-band の多重パルスシステムも稼働した。今後さらに，当該グループだけでなく所外の ESR コミュニティーと連携を取り，パルス・高周波 ESR の新たな可能性や研究展開を議論し，大学共同利用機関である分子研からのスピン科学の情報発信を行っていく。

B-1) 学術論文

T. NAITO, T. KARASUDANI, K. OHARA, T. TAKANO, Y. TAKAHASHI, T. INABE, K. FURUKAWA and T. NAKAMURA, “Simultaneous Control of Carriers and Localized Spins with Light in Organic Materials,” *Adv. Mater.* **24**, 6153–6157 (2012).

M. KANO, H. MORI, K. MATSUBAYASHI, M. ITOI, M. HEDO, T. P. MURPHY, S. W. TOZER, Y. UWATOKO and T. NAKAMURA, “Anisotropy of Upper Critical Field in a One-Dimensional Organic System, $(TMTTF)_2PF_6$ under High Pressure,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**, 024716 (7 pages) (2012).

A. FUNABIKI, H. SUGIYAMA, T. MOCHIDA, K. ICHIMURA, T. OKUBO, K. FURUKAWA and T. NAKAMURA, “Physical Properties of a Molecular Conductor $(BEDT\text{-}TTF)_2I_3$ Nanohybridized with Silica Nanoparticles by Dry Grinding,” *RSC Adv.* **2**, 1055–1060 (2012).

Y. YAMADA, M. OKAMOTO, K. FURUKAWA, T. KATO and K. TANAKA, “Switchable Intermolecular Communication in a Four-Fold Rotaxane,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **51**, 709–713 (2012).

D. SAKAMAKI, A. ITO, K. TANAKA, K. FURUKAWA, T. KATO and M. SHIRO, “1,3,5-Benzenetriamine Double- and Triple-Decker Molecules,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **51**, 8281–8285 (2012).

B-4) 招待講演

T. NAKAMURA, "Multi-Frequency and Pulsed ESR Study on Electric- and Bio-Functional Materials," The 8th Asia-Pacific EPR/ESR Symposium (APES 2012), Tsinghua Science Park, Beijing (China), November 2012.（基調講演）

B-6) 受賞，表彰

古川　貢, 電子スピンサイエンス学会奨励賞 (2012).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会領域7世話人 (2000–2001).

日本物理学会代議員 (2001–2003).

日本物理学会名古屋支部委員 (2001–2007).

日本化学会実験化学講座編集委員会委員 (2002).

電子スピンサイエンス学会担当理事 (2004–2005).

電子スピンサイエンス学会運営理事 (2006–2011).

アジア環太平洋EPR/ESR学会（Asia-Pacific EPR/ESR Society), 秘書／財務 (2004–2008), 日本代表 (2010–).

学会の組織委員等

Asia-Pacific EPR/ESR Symposium 2006, Novosibirsk, Russia, International Organizing Committee (2006).

分子構造総合討論会2006（静岡), プログラム委員 (2006).

A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology (ISESS-SEST2007) Shizuoka, Japan Organizing Committee (2007).

Asia Pacific EPR Society—EPR Symposium 2008, Cairns, Queensland, Australia, International Advisory Committee (2008).

第3回分子科学討論会 2009（名古屋), プログラム委員 (2009).

第49回電子スピンサイエンス学会年会（名古屋), プログラム委員 (2010).

Asia Pacific EPR/ESR Symposium 2012, Oct 11th–15th, 2012, Beijing, China, International Organizing Committee.

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

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 (2011–2013).

学会誌編集委員

電子スピンサイエンス学会編集委員 (2003).

電子スピンサイエンス学会編集委員長 (2004–2005).

電子スピンサイエンス学会編集アドバイザー (2006–).

B-8) 大学での講義，客員

学習院大学理学部物理学科,「基礎化学」, 2012年前期.

B-10) 競争的資金

科研費挑戦的萌芽研究,「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」, 中村敏和 (2012年–2013年).

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ックス研究」, 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),「シアノバクテリア由来光化学II複合体の高磁場ESRによる研究」, 中村敏和 (2008年–2009年).

科研費特定領域研究,「分子導体における電荷の遍歴性と局在性の研究」, 代表者　薬師久弥(中村敏和は準代表者で実質独立)(2003年–2007年).

科研費基盤研究(C)(2),「一次元有機導体の逐次SDW 転移における電子状態の解明」, 中村敏和 (2001年–2003年).

科研費挑戦的萌芽研究,「機能性物質の時間分解ESR イメージング研究」, 古川貢 (2011年–2013年).

科研費若手研究(A),「次世代太陽光エネルギー”希土類色素増感太陽電池”のスピンダイナミクス研究」, 古川　貢 (2009年–2011年).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型),「分子自由度が拓く新物質科学」公募班「光誘起機能性材料のアドバンスドESRによるスピンダイナミクス研究」, 古川　貢(2009年–2010年).

科研費若手研究(B),「色素増感太陽電池の光電変換特性とスピンダイナミクスの相関」, 古川　貢 (2006年–2008年).

科研費若手研究(B),「セミマクロスコピックスケールの巨大磁気モーメントイメージング」, 古川　貢 (2004年–2005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ESR（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。

山　本　　薫（助教）（1998 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：物性化学

A-2) 研究課題：

a) 電子分極型強誘電体の探索と物性理解

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 有機伝導体 α'-(BEDT-TTF)$_2$IBr$_2$ 塩は室温の常誘電相から反強誘電相を経て強誘電相に転移する。転移の実態は電荷秩序と考えられるがそれが二段階で進行する原因は未知であり，その理解のために，電荷の巨視的な秩序揺らぎについての知見が得られる誘電率測定を試みた。その結果，大きな誘電率の発生が期待された強誘電性転移点では有意な信号は観測されなかった。一方で，これよりも低温の他の物性測定に異常が見られていない領域において，リラクサー的周波数依存性を示す緩和信号が観測された。Vogel-Fulcher 解析を適用したが，見積もられた Fulcher 温度は物理的に不合理な値となり，この信号がバルク結晶の誘電性とは無関係に発生する Maxwell-Wagner 効果に関係していることを示唆している。

B-1) 学術論文

S. C. LEE, A. UEDA. H. KAMO, K. TAKAHASHI, M. URUICHI, K. YAMAMOTO, K. YAKUSHI, A. NAKAO, R. KUMAI, R. KOBAYASHI, H. NAKAO, Y. MURAKAMI and H. MORI, "Charge-Order Driven Proton Arrangement in a Hydrogen-Bonded Charge-Transfer Complex Based on a Pyridyl-Substituted TTF Derivative," *Chem. Commun.* **48**, 8673–8675 (2012).

K. KODAMA, M. KIMATA, T. YAMAKUCHI, N. KURITA, A. HARADA, H. SATSUKAWA, T. TERASHIMA, S. UJI, K. YAMAMOTO and K. YAKUSHI, "Charge Transport in Charge-Ordered States of Two-Dimensional Organic Conductors, α-(BEDT-TTF)$_2$I$_3$ and α'-(BEDT-TTF)$_2$IBr$_2$," *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**, 044703 (7 pages) (2012).

K. YAMAMOTO, A. A. KOWALSKA and K. YAKUSHI, "Second-Harmonic Generation Microscopy of Ferroelectric Organic Conductor Using Hydrostatic Pressure Apparatus with Ar as a Heat Sink," *Phys. Status Solidi C* **9**, 1189–1192 (2012).

B-4) 招待講演

山本　薫,「光学SHG 観測による有機伝導体α-ET 塩における純電子型の強誘電転移」, 東大物性研新物質科学部門セミナー , 千葉県柏市 , 2012 年 10 月.

B-6) 受賞，表彰

山本　薫, 応用物理学会講演奨励賞 (1996).

山本　薫, 日本物理学会 JPSJ 注目論文 (2005).

山本　薫, 7th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets, Outstanding Presentation Prize (2007).

山本　薫, 日本物理学会 JPSJ Editor's Choice (2008).

山本　薫，岩井 伸一郎，Sergiy BOYKO，柏崎暁光，平松扶季子，岡部智絵，西信之，薬師久弥, 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

日本物理学会領域7運営委員 (2009–2010).

学会の組織委員等

有機固体若手・夏の学校 2004年校長 (2004).

分子研研究会「新規な誘電体最前線――電子と強誘電性――」提案者・世話人 (2009).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C),「相関電子の結晶化により強誘電分極する有機伝導体の複合体薄膜創成による新機能探索」, 山本　薫 (2011年–2013年).

科研費新学術領域研究(公募研究),「フラストレーションで抑制された強誘電性電荷整列の分子自由度操作による秩序化制御」, 山本　薫 (2011年–2012年).

科研費新学術領域研究「分子自由度が拓く新物質科学」(公募研究),「α'-(BEDT-TTF)$_2$IBr$_2$ における電子型強誘電相の不均一分布」, 山本　薫 (2009年–2010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).

C)　研究活動の課題と展望

電子型強誘電体は電子分極の同位相秩序によって巨視分極する新しい強誘電体物質群である。その機能特性の理解のために誘電率の把握が重要であるが，対象物質は本質的に電気伝導体であるため研究例は少なく，測定手法の確立が課題となっている。我々は，電子強誘電体の有力な候補の一つであるα'-(BEDT-TTF)$_2$IBr$_2$ 塩の単結晶を試料として誘電率の観測を試みた。電子強誘電性の実態は電荷秩序であるため，通常その強誘電転移は金属状態から発生するが，この塩では強誘電転移に先行して反強誘電相が現れるために絶縁性が高く，転移にともなう分極揺らぎを検知しやすいと期待される。しかしラジオ波未満の低周波誘電率は，電極界面に蓄積する伝導電子に由来した擬似的変位電流に支配され，試料本来の誘電応答は検出できなかった。このことは，界面準位の出現を避ける電極形成法の工夫が重要であることを示し，同時に，ラジオ波周期未満のデュレーションの電場印加では伝導電子によるジュール熱の発生の回避が可能であることを意味しており，分極反転にパルス電場が有効であることを示唆している。

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，多孔有機材料

A-2) 研究課題：

a) 二次元高分子の創出と機能開拓

b) 共役多孔性高分子の創出と機能開拓

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 大環状ポルフィリンをビルディングブロックとして用い，ポルフィリン二次元高分子を構築する手法を開拓した。様々な金属ポルフィリン錯体に適用することで，同じ結晶構造を持ちながら，金属種の異なる二次元高分子の構築を可能とした。興味深いことに，金属種によってポルフィリン二次元高分子の伝導特性が劇的に変わることが分かった。フリーベースポルフィリン二次元高分子はホール伝導であるが，銅ポルフィリン二次元高分子は電子伝導を示す。一方，金属種を亜鉛に置き換えると，電子とホールの両方を伝導することが可能となった。二次元高分子は積層することで，ポルフィリンユニットは真上に重なるようにスタックし，ポルフィリンカラムが形成される。このカラム構造が伝導パスとして機能することを見いだした。それゆえ，中心金属種によりポルフィリン環の電子密度や状態が左右され，伝導特性に大きく影響を与えるようになった（ドイツ化学会誌 *Angew. Chem., Int. Ed.* 2012）。これと同様に，フタロシアニン二次元高分子では，異なる中心金属種を用いて伝導特性を制御できることを見いだした（イギリス王立化学協会誌 *Chem. Commun.* 2012）。一方，電子ドナーとアクセプターをモノマーとして，ドナーとアクセプターからなる二次元高分子の合成手法を開拓した。従来の系とは異なり，この場合，電子ドナーとアクセプターは自己選別して周期的なドナーカラムとアクセプターカラム構造を構築することが可能である。従って，分子の中では ambipolar 伝達経路が予め内蔵され，ドナーカラムはホール移動，アクセプターカラムには電子輸送が可能となる。実際，キャリア移動能を計測したところ，ドナー・アクセプター二次元高分子が ambipolar 伝導であることを見いだした（ドイツ化学会材料専門誌 *Adv. Mater.* 2012）。また，分子骨格にはヘテロ接合が規則正しく配列しているため，効率的な電荷分離システムとして機能することが期待されている（日経産業新聞，日刊工業新聞，科学新聞等に記事報道）。

b) カルバゾール誘導体をビルディングブロックとして用いて新規な共役多孔性高分子を構築した。カルバゾール共役多孔性高分子は，巨大な表面積を持ち，ポア空間にゲスト分子を取り込むことができる。三次元構造でありながら，π 共役は広がっていることが特徴的である。そのため，励起子は局在することなく，分子骨格の中で移動することができる。カルバゾール共役多孔性高分子は，青く光る蛍光性物質である。その蛍光特性を利用し，新しい蛍光センシングシステムを開拓した（アメリカ化学会誌 *J. Am. Chem. Soc.* 2012）。電子アクセプターである芳香族分子をキャッチすると，蛍光発光は直ちに消光されてしまうことを見いだした。これとは反対に，電子リッチな芳香族分子をさらすと，蛍光発光は著しく増幅されることが分かった。すなわち，カルバゾール共役多孔性高分子は，標的分子が電子不足か電子リッチかを識別することができるユニークな蛍光性物質である。多孔性と π 共役を持ち合わせていることで，このような素早く応答し，かつ on と off の両方をセンシングできる分子識別システムが構築可能となった。

B-1) 学術論文

X. DING, X. FENG, A. SAEKI, S. SEKI, A. NAGAI and D. JIANG, "Conducting Metallophthalocyanine 2D Covalent Organic Frameworks: The Role of Central Metals in Controlling π-Electronic Functions," *Chem. Commun.* **48**, 8952–8954 (2012).

X. LIU, Y. XU and D. JIANG, "Conjugated Microporous Polymers as Molecular Sensing Devices: Microporous Architecture Enables Rapid Response and Enhances Sensitivity in Fluorescence-On and Fluorescence-Off Sensing," *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 8738–8742 (2012).

X. FENG, L. CHEN, Y. HONSHO, O. SAENGSAWANG, L. LIU, L. WANG, A. SAEKI, S. IRLE, S. SEKI, Y. DONG and D. JIANG, "An Ambipolar Covalent Organic Framework with Self-Sorted and Periodic Electron Donor-Acceptor Ordering," *Adv. Mater.* **24**, 3026–3031 (2012).

X. FENG, L. LIU, Y. HONSHO, A. SAEKI, S. SEKI, S. IRLE, Y. DONG, A. NAGAI and D. JIANG, "High-Rate Charge Carrier Transport in Porphyrin Covalent Organic Frameworks: Switching from Hole to Electron, and to Ambipolar," *Angew. Chem., Int. Ed.* **51**, 2618–2622 (2012).

B-3) 総説，著書

X. FENG, X. DING and D. JIANG, "Covalent Organic Frameworks," *Chem. Soc. Rev.* **41**, 6010–6022 (2012).

B-4) 招待講演

D. JIANG, "Surface Engineering in Covalent Organic Frameworks," The 244th ACS National Meeting and Expo, Philadelphia (U.S.A.), August 2012.

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 Materilas, Photo and Theoretical Molecular Science, Beijing, December 5–8, Organizer (2006).

China-Japan Joint Symposium on the π-Conjugated Molecules towards Functional Materials, Beijing, February 24–25, Organizer (2008).

Sokendai Asian Winter School "Molecular Sciences on Different Space-Time Scales," Okazaki, December 9–12, Co-Organizer (2008).

China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Beijing, December 20–21, Organizer (2008).

China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Hokkaido, August 2–5, Organizer (2009).

Sokendai Asian Winter School ”Molecular Sciences on Different Space-Time Scales,” Okazaki, December 2–5, Co-Organizer (2009).

China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Jilin University, Changchun, July 25–28, Organizer (2010).

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).

科研費基盤研究(A),「共役多孔性高分子による特異分子空間の創出と機能開拓, 江　東林 (2012年–2014年).

C)　研究活動の課題と展望

二次元高分子及び多孔性共役高分子を柱に，これらの特異な構造を有する高分子は，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，生物物理学，構造生命科学

A-2) 研究課題：

a) 膜表在型タンパク質ヒト由来 PLC-δ1 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-δ1 PH ドメインの NMR による解析

c) 常磁性ポリ酸の固体 ^{95}Mo NMR

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-δ1 PH ドメイン（hPH）の Native PAGE による機能解析法を改良し，より生理的環境に近い状態での hPH の機能解析法およびタンパク質の熱安定性評価法の確立に成功した。これらの解析により，hPH に特徴的に存在し基質とは直接結合しない α2 ヘリックスが，hPH の基質結合状態の安定化およびタンパク質の熱安定性の上昇に寄与していることを明らかにした。

b) アミノ酸特異的に安定同位体標識した hPH およびその部位特異的変異体について溶液 NMR による解析を行った。昨年度の解析で，hPH に特徴的に存在する α2 ヘリックスが基質結合に伴って構造の安定化が起こることを明らかにしたが，この効果は基質結合に伴い，α2 ヘリックスが，空間的に離れた位置に存在する β3–β4 ループと，間接的に相互作用することにより生じることを明らかにした。

c) Mo(V) は ε-Keggin アニオンやリング・チューブ状のナノサイズの酸化物などのポリ酸に含まれており，d^1 電子の局在性は分子設計や光学的，電気的，磁気的性質といった物性面から興味が持たれている。これまでに我々は固体 ^{95}Mo NMR によるポリ酸の d^1 電子の局在性の解析を行ってきた。本研究では固体 ^{95}Mo NMR を常磁性ポリ酸に適用した。スペクトルのシミュレーションや DFT 計算の結果，常磁性化合物においても固体 ^{95}Mo NMR が有用であると分かった。

B-1) 学術論文

K. YAZAWA, F. SUZUKI, Y. NISHIYAMA, T. OHATA, A. AOKI, K. NISHIMURA, H. KAJI and T. ASAKURA, "Determination of Accurate ^{1}H Positions of Alanine Tripeptide with Anti-Parallel and Parallel β-Sheet Structures by High Resolution ^{1}H Solid State NMR and GIPAW Chemical Shift Calculation," *Chem. Commun.* **48**, 11199–11201 (2012).

M. TANIO and K. NISHIMURA, "Analysis of the Phospholipase C-δ1 Pleckstrin Homology Domain Using Native Polyacrylamide Gel Electrophoresis," *Anal. Biochem.* **431**, 106–114 (2012).

A. TSUTSUMI, N. JAVKHLANTUGS, A. KIRA, M. UMEYAMA, I. KAWAMURA, K. NISHIMURA, K. UEDA and A. NAITO, "Structure and Orientation of Bovine Lactoferrampin in the Mimetic Bacterial Membrane as Revealed by Solid-State NMR and Molecular Dynamics Simulation," *Biophys. J.* **103**, 1–9 (2012).

B-6) 受賞，表彰

西村勝之, 日本核磁気共鳴学会　優秀若手ポスター賞 (2002).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会分野別専門委員 (2004–2009).

日本核磁気共鳴学会評議員 (2009–2010).

日本核磁気共鳴学会選挙管理委員 (2005).

学会の組織委員等

第51回NMR 討論会プログラム委員 (2012).

学会誌編集委員

日本生物物理学会欧文誌 *Biophysics*, Advisory board (2005–2009).

Global Journal of Biochemistry, Editorial Board (2010–).

B-8) 大学での講義，客員

総研大アジア冬の学校,「Principles of Solid State NMR and its Applications for the Characterization of Biomolecules」, 2012年1月12日.

総合研究大学院大学統合生命科学教育プログラム,「Sructural analysis of biomolecules by solid-state NMR spectroscopy（生体分子科学)」, 2012年5月22日, 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在性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).

(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).

科研費若手研究(B),「スペクトル解析を容易にする常磁性物質の固体重水素NMR 法の開発」, 飯島隆広 (2012年–2014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).

科研費基盤研究(C),「タンパク質分子内情報伝達の分子機構」, 谷生道一 (2012年–2014年).

C) 研究活動の課題と展望

着任以来行ってきたNMRを用いた膜表在性タンパク質の構造，および機能解析の研究がようやくまとまり始めた。今後，より高次の構造機能相関の研究へ発展させたいと考えている。また，生体分子を対象とした研究だけではなく，分子材料を対象とした研究も更に発展させて行きたい。また，超高磁場NMRを用いた研究や，共同利用機器を用いた外部機関との共同研究をさらに推進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

b) 第３分子導入とドーピングの統合による高効率有機薄膜太陽電池の開発

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 制御を行った。n 型化ドーパントとして Cs_2CO_3，p 型化ドーパントとして MoO_3 および V_2O_5 を用い，ほぼすべての有機半導体に対して，pn 制御が原理的に可能であることを確認した。この技術を用いて，金属電極／有機界面に高濃度ドーピングを行い，オーミック化する方法を確立した。

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。そのため，アクセプターの C_{60} とドナー有機半導体を混合した共蒸着膜に対し，３元蒸着法を駆使して，直接 pn 制御する技術を確立した。共蒸着膜そのものを用いることで，励起子が解離しないという，有機特有の問題点が無くなり，無機太陽電池と同じ取り扱いができるようになった。この全く新しい技術を用いて，チオフェン誘導体：C_{60} 共蒸着膜中に，２つの p^+in^+ 接合セル（＋は高濃度ドーピングを意味）を，n^+p^+ 有機／有機トンネルオーミック接合で連結したタンデムセルを，ドーピングのみで作り込み，効率 2.4% を得た。また，ケルビン振動容量法を用いて，セルのバンドの曲がりを直接マッピングする方法を見いだし，セル全体のエネルギー構造を実寸で描けるようになった。

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［$\sigma = en\mu$］。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。キャリア濃度（n）は，上述 (a) のドーピングによって増大できる。キャリア移動度（μ）は，昨年度，液体で，基板に付着しない第３分子を共蒸着中に共蒸発させ，共蒸着膜の結晶化／層分離を行い，ルート形成して，増大する技術を開発した。

今年度，第３分子とドーピングを統合して，セル抵抗を本質的に低減し，高効率有機薄膜太陽電池を実現する研究をスタートした。C_{60}:フタロシアニン共蒸着膜に対して，４元蒸着によって，第３分子導入，ドーピングを同時に行った。この低抵抗共蒸着膜を電子，ホールブロック有機層でサンドイッチすることで，無機太陽電池に近い特性が得られるようになった。共蒸着膜の σ，n，μ すべてを，ケルビン法と van der Pauw ４端子法で定量的に評価する方法を確立し，セルのエネルギー設計ができるようになった。無機太陽電池と同様に，少数キャリア拡散距離が効率向上の鍵となることが分った。種々の共蒸着膜系に，本方法を適用し，本質的な効率向上につなげる。

B-1) 学術論文

Y. SHINMURA, M. KUBO, N. ISHIYAMA, T. KAJI and M. HIRAMOTO, "*pn*-Control and *pn*-Homojunction Formation of Metal-Free Phthalocyanine by Doping," *AIP Adv.* **2**, 032145 (6 pages) (2012).

M. KUBO, Y. SHINMURA, N. ISHIYAMA, T. KAJI and M. HIRAMOTO, "Invertible Organic Photovoltaic Cells with Heavily-Doped Organic/Metal Ohmic Contacts," *Appl. Phys. Express* **5**, 092302 (3 pages) (2012).

N. ISHIYAMA, M. KUBO, T. KAJI and M. HIRAMOTO, "Tandem Photovoltaic Cells Formed in Single Fullerene Films by Impurity Doping," *Appl. Phys. Lett.* **101**, 233303 (3 pages) (2012).

B-3) 総説，著書

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池」, *Molecular Science*, 分子科学会, **6**, A0052 (2012).

平本昌宏，久保雅之，石山仁大，嘉治寿彦,「ドーピングによるpn 制御と有機薄膜太陽電池」,「有機薄膜太陽電池の研究最前線」, 松尾　豊監修, シーエムシー出版（株), 第3章第2節, pp. 122–136 (2012).

嘉治寿彦，平本昌宏,「液体分子同時蒸発による低分子蒸着系混合膜の結晶化」,「有機薄膜太陽電池の研究最前線」, 松尾　豊監修, シーエムシー出版（株), 第4章第2節, pp. 173–180 (2012).

平本昌宏，久保雅之,「低分子系有機薄膜太陽電池――ドーピング技術――」, *未来材料*, 特集：プリンテッド・エレクトロニクス材料――エレクトロニクス材料における革命, エヌ・ティー・エス（株), 第12巻6号, pp. 38–43 (2012).

嘉治寿彦,「低分子有機薄膜太陽電池のための真空蒸着法の新展開」, *応用物理学会有機分子バイオエレクトロニクス分科会誌*, **23**, pp. 39–44 (2012).

嘉治寿彦,「分子拡散を利用した低分子有機半導体薄膜の結晶化と太陽電池応用」, *応用物理学会有機分子バイオエレクトロニクス分科会誌*, **23**, pp. 103–104 (2012).

嘉治寿彦,「真空蒸着法の改良による有機薄膜太陽電池の光電流向上」, *月刊ディスプレイ*, 2012年7月号特集1有機系太陽電池が動き出す, (株)テクノタイムズ社, 第7章, **18**, pp. 28–34 (2012).

B-4) 招待講演

M. HIRAMOTO, "Organic Thin-Film Solar Cells—New-Type of Solar Cells of Printable, Paintable, and Low-Costs," Japan NANO 2012, Tokyo Big Sight, Tokyo (Japan), February 2012.

M. HIRAMOTO, "Recent Progress on Organic Thin-Film Solar Cells," The 19th International Workshop on Active-Matrix Flatpanel Displays and Devices—TFT Technologies and FPD Materials—(AM-FPD), Ryukoku Univ. Avanti Kyoto Hall, Kyoto (Japan), July 2012.

M. HIRAMOTO, "Bandgap Science for Organic Thin-Film Solar Cells," International Workshop on Flexible & Printable Electronics (IWFPE) 2012, Muju Resort, Jeollabuk-do (Korea), November 2012.

平本昌宏,「エネルギー問題の解決は科学者の使命――次世代の太陽電池の話――」, 市民公開講座第92回分子科学フォーラム, 岡崎コンファレンスセンター, 2012年2月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の基礎と将来展望」, 熊本県産業技術センター第1回人材育成講演会, 熊本県産業技術センター会議室, 2012年2月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池のためのバンドギャップサイエンス」, 日本化学会第92春季年会, 慶応大学, 2012年3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」, 日本学術振興会結晶成長の科学と技術第161委員会第76回研究会「太陽電池材料の結晶成長技術と最新動向」, 宮崎駅前KITEN 8F 会議室, 2012年5月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池のエネルギー構造設計とナノ構造設計」, 日本学術振興会光電相互変換第125委員会次世代の太陽光発電システム第175委員会合同研究会「太陽電池材料の光電変換過程と新しい展開」, 静岡大学浜松キャンパス佐鳴会館会議室, 2012年5月.

平本昌宏,「市場投入ステージに入った有機薄膜太陽電池」, SEMI FORUM JAPAN 2012 オーガニックエレクトロニクスセミナー , グランキューブ大阪, 2012年 6月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池のためのバンドギャップサイエンス」, CREST 有機太陽電池シンポジウム――高効率化と実用化への道――, 京都大学宇治キャンパスきはだホール, 2012年 7月.

平本昌宏,「高性能有機薄膜太陽電池の誕生と進化」, 2012年光化学討論会プレシンポジウム「太陽エネルギーの利用拡大に向けた光化学の挑戦」, 光化学協会, 東京工業大学大岡山キャンパスくらまえホール, 2012年 9月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池の基礎・設計とこれからの展開」, 熊本大学自然科学研究科AGEIN 学生主催特別講義, 熊本大学工学部2号館 224号室, 2012年 10月.

平本昌宏,「太陽光発電技術」, SEMI ジャパンSEMI Tutorial「有機系太陽電池コース」, SEMI ジャパン大島ビル5F, 市ヶ谷, 東京, 2012年 10月.

平本昌宏,「有機薄膜太陽電池　基礎と応用」, 第4回薄膜太陽電池セミナー , 龍谷大学アヴァンティ響都ホール, 京都, 2012年 10月.

平本昌宏,「低分子系有機薄膜太陽電池の最新研究」, 平成24年度KAST（神奈川科学技術アカデミー）教育講座「有機系太陽電池の実証・実用化」, かながわサイエンスパークKSP ホール, 2012年 12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」, 量子エレクトロニクス研究会「太陽電池と量子エレクトロニクス――発光デバイス・光物性の研究実績をどう生かすか――」, 上智大学軽井沢セミナーハウス, 2012年 12月.

嘉冶寿彦,「低分子有機薄膜太陽電池のための真空蒸着法の新展開」, 応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会研究会「環境調和型有機デバイスのための成膜・評価技術の最前線」, 産業技術総合研究所臨海副都心センター , 2012年 3月.

嘉冶寿彦,「有機薄膜太陽電池の新しい作製手法に関する研究開発」, 愛知県新エネルギー産業協議会主催第6回太陽電池利活用セミナー , (公財)あいち産業振興機構, 名古屋, 2012年 2月.

嘉冶寿彦,「共蒸発分子誘起結晶化による有機薄膜太陽電池の短絡電流向上」, 応用物理学会第59回春季年会講演奨励賞受賞記念講演, 早稲田大学, 2012年 3月.

嘉冶寿彦,「分子拡散を利用した低分子有機半導体薄膜の結晶化と太陽電池応用」, 応用物理学会有機バイオエレクトロニクス分科会主催M&BE 研究会, 東京, 2012年 6月.

B-6) 受賞，表彰

嘉冶寿彦, 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).

有機薄膜太陽電池サテライトミーティング世話人代表 (2009–).

The 37th International Symposium on Compound Semiconductors (ISCS2010), Programm Committee Member of the Session "Organic Semiconductor Materials and Devices," 31 May-4 June 2010, Takamatsu Kagawa, Japan (2010).

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).

京都大学化学研究所全国共同利用・共同研究拠点連携基盤専門小委員会委員 (2011–2012).

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–).

戦略的創造研究推進研究（CREST）「低エネルギー，低環境負荷で持続可能なものづくりのための先導的な物質変換技術の創出（ACT-C）」研究領域　領域アドバイザー (2012–).

その他

岡崎ビジネス大賞評価委員 (2012).

岡崎ものづくり協議会学識委員 (2011–).

B-8) 大学での講義，客員

大阪大学社会人人材教育プログラム，「有機太陽電池(I)(II)（ナノ高度学際教育研究訓練プログラム講義（2012年度））」, 2012年10月30日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C)(2),「高効率有機3層接合型固体太陽電池の開発」, 平本昌宏 (2006年–2007年).

科研費基盤研究(C)(2),「垂直接合型有機固体太陽電池の開発」, 平本昌宏 (2004年–2005年).

科研費基盤研究(C)(2),「分子結晶におけるステップ構造制御と増幅型光センシングデバイス」, 平本昌宏 (2002年–2003年).

科学技術振興機構特許補完研究プログラム，「光電流増倍現象等を利用したガス検知方法及びガスセンサー」, 平本昌宏 (2003年).

科学技術振興機構シーズ育成試験，「p-i-n 接合型有機固体太陽電池」, 平本昌宏 (2005年).

科学技術振興機構産学共同シーズイノベーション化事業顕在化ステージ,「高効率有機固体太陽電池の実用化試験」, 平本昌宏 (2006年–2007年).

科学技術戦略推進機構アカデミアショーケース研究助成,「p-i-n 有機太陽電池の開発」, 平本昌宏 (2006年).

(財)関西エネルギー研究基金(KRF) 助成,「有機半導体のpn 制御とp-i-n 有機固体太陽電池の開発」, 平本昌宏 (2008年).

科研費基盤研究(B)(2),「有機半導体のイレブンナイン超高純度化による10% 効率有機薄膜太陽電池の開発」, 平本昌宏 (2009年–2012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–2010年).

科研費挑戦的萌芽研究,「クロスドーピングによる有機薄膜太陽電池」, 平本昌宏 (2012年–2013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–).

科学技術振興機構先端的低炭素化技術開発(ALCA),「有機薄膜太陽電池の結晶性理想構造の共蒸発分子誘起結晶化法による実現と高効率化」, 嘉治寿彦 (2012年–).

B-11) 産学連携

共同研究(積水化学(株)),「有機・無機半導体界面における半導体物性測定」, 平本昌宏 (2012年–2013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」(研究代表者:平本)の遂行のために, 研究員4名(久保, 新村, 横山, 能岡)を雇用している。2012年は, 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た。本年度10月から, ALCA プロジェクト「有機薄膜太陽電池の結晶性理想構造の共蒸発分子誘起結晶化法による実現と高効率化」(研究代表者:嘉治)がスタートした。今後, ドーピング, ナノ構造制御の両方を, それぞれのプロジェクトで推進し, 協力して有機薄膜太陽電池の高効率化を図る。CREST プロジェクトは, 有機半導体のバンドギャップサイエンスの確立にほぼ目処がついたため, これをセル設計に生かして, 効率向上を実際に示さなければならない。すでに, 有機半導体を無機半導体なみに取り扱えるレベルに達していることから, 今後, 無機に多くを学ぶ必要がある。無機太陽電池の経験を持つ専門家が必要となる可能性がある。

2週に1度, 1日かけて研究報告とディスカッションを強力に行っている。研究員の2名(久保, 新村)は, 自分で英語論文をかける実力に達している。学生の確保が引き続き重要課題として残っている。

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) 曲面芳香族分子の開発（芳香族ベルト・サドル）

b) 電界効果トランジスタのための有機半導体の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) グラフェンやその変形であるカーボンナノチューブは，炭素の 6 員環のみから構成され，ゼロのガウス曲率をもつ。一方，C_{60} に代表されるフラーレンは，6 員環に 5 員環が加わることにより，正のガウス曲率となる。1991 年，A. L. Mackay らは，負のガウス曲率をもつ炭素同素体を初めて提案した。これは，6 員環と 8 員環の組み合わせにより構成され，periodic minimal surface のひとつである Schwarz's P-surface を構築する。グラフェンの π 共役が２次元方向に伸長するのに対して，３次元的なグラフェンと見なすことができる。我々は昨年度，この３次元グラフェンの繰り返し単位であるテトラベンゾ [8] サーキュレンの合成に成功した。これは，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である。しかしながら，収率が数 % 程度であったため，材料としての評価が十分ではなかった。今回，2 量化を防ぐための 8 個のメチル基を導入することにより，数 100 mg 単位の昇華精製したサンプルを得ることができた。まず，有機トランジスタを作成することにより，p 型半導体として機能を検討した。真空蒸着により形成した薄膜は，分子の非平面性を反映してアモルファスとなった。このため，ホール移動度は 10^{-4} cm^2/Vs 程度であった。今後は，基板温度を上げ結晶化を促進させるか，単結晶トランジスタを検討する必要がある。さらに，この新規芳香族サドルからユニークな物性を引き出すことに取り組んでいきたい。

B-1) 学術論文

E. KAYAHARA, Y. SAKAMOTO, T. SUZUKI and S. YAMAGO, "Selective Synthesis and Crystal Structure of [10] Cycloparaphenylene," *Org. Lett.* **14**, 3284–3287 (2012).

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

京大化研・山子教授を代表者とするCREST「超分子化学的アプローチによる環状π共役分子の創製とその機能」に共同研究者として参加している（2016年3月まで）。有機ELや有機トランジスタの材料開発における経験を生かしていきたい。これまで，有機デバイスに使われているπ共役分子は直鎖型のものである。これが環化することによって，どのような固体構造を取るのか興味深い。アモルファスになるのか，結晶になるのか，それとも分子構造により自由に制御できるのか，その点を見極めていきたい。我々はここ数年，短いカーボンナノチューブである芳香族ベルト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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) ターピリジン二単位とトリアゾールを結合した新しい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) 塩と反応して二核錯体を形成した。フタラジン・ピリダジン架橋の配位子の場合は OH，Cl といった η^1, μ_2 型架橋の錯体だったのに対し，トリアゾール架橋の配位子ではカルボキシラートが η^2, μ_2 型に架橋した錯体が得られた。５員環と６員環とで配位結合の方向が異なることを反映したものである。また，これらの錯体のサイクリックボルタモグラムを測定したところ，コバルト錯体に水を添加した場合に大きな酸化電流が観測された。水の酸化触媒として働いていることを示唆している。

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引き続き調べた。キノン濃度に対する反応の初期速度依存性を調べたところ，濃度が高くなると初期速度が小さくなる特異な現象が見られた。この結果は，フタロシアニンの三重項から反応が進行していると考えれば説明できる。フタロシアニンの三重項エネルギーは 1.13 eV と低いにも関わらず，電子移動型の反応が可能であることを示している。また，還元剤であるチオールの酸性度が高いほど反応が速いこと，および酸の添加により反応が加速されることから，キノンアニオンラジカルに対するプロトン化が後続反応の律速段階であることがわかった。

B-1) 学術論文

H. KON and T. NAGATA, “Synthesis, Properties and Photoreactions of the Hybrid Molecules Consisting of a Co^{II} Mononuclear Complexes and Porphyrins,” *Chem. –Eur. J.* **18**, 1781–1788 (2012).

H. YAMAZAKI, S. IGARASHI, T. NAGATA and M. YAGI, “Substituent Effects on Core Structures and Heterogeneous Catalytic Activities of $Mn^{III}(\mu\text{-}O)_2Mn^{IV}$ Dimers with 2,2’:6’,2”-Terpyridine Derivative Ligands for Water Oxidation,” *Inorg. Chem.* **51**, 1530–1539 (2012).

M. NAKAMURA, H. TAHARA, K. TAKAHASHI, T. NAGATA, H. UOYAMA, D. KUZUHARA, S. MORI, T. OKUJIMA, H. YAMADA and H. UNO, “π-Fused bis-BODIPY as a Candidate for NIR Dyes,” *Org. Biomol. Chem.* **10**, 6840–6849 (2012).

Y. MIYAKE, T. NAGATA, H. TANAKA, M. YAMAZAKI, M. OHTA, R. KOKAWA and T. OGAWA, “Entropy-Controlled 2D Supramolecular Structures of *N*,*N*’-Bis(*N*-alkyl)-naphthalenediimides on a HOPG Surface,” *ACS Nano* **6**, 3876–3887 (2012).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本化学会東海支部代議員 (1999–2000).

学会の組織委員等

International Meeting “Photosynthesis in the Post-Genomic Era: Structure and Function of Photosystems” 組織委員 (2006).

The 70th Okazaki Conference“ Molecular Mechanism of Photosynthetic Energy Conversion: The Present Research and Future Prospects ”組織委員 (2010).

学会誌編集委員

Biochimica and Biophysica Acta, “Photosynthesis” Special Issue, Guest Editor (2006).

Photosynthesis Research, “Recent Perspectives of Photosystem II” Special Issue, Guest Editor (2008).

B-8) 大学での講義，客員

総合研究大学院大学物理科学研究科,「化学エネルギー変換論」, 2012年7月.

立教大学大学院理学研究科化学専攻,「エネルギー変換の有機化学」, 2012年9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),「人工キノン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

三成分連結型配位子を用いた複核錯体では，架橋配位子の構造を調節することで空き配位座の相互配置を制御できた。ただし，今回の配位子は合成が煩雑であることと，単結晶の育成が難しいため構造解析に手間取ることが問題点である。複核錯体の空き配位座の制御は新規な反応性開拓のため非常に重要であるため，一般性の高い合成手法の開拓と，単結晶作成技術の向上を目指す必要がある。

フタロシアニン系の光化学については，近赤外領域の励起エネルギーでも電子移動型の反応を実現できることを立証した。光励起電子移動を用いた物質変換は，光エネルギーの新たな活用法の開拓につながる重要なテーマであり，使える光の波長範囲が広がることの意義は極めて大きい。

櫻　井　英　博（准教授）（2004 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：有機化学

A-2) 研究課題：

a) お椀型共役化合物「バッキーボウル」の合成手法の開発と物性評価

b) 金属ナノクラスターを触媒とする新規反応の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) お椀型共役化合物「バッキーボウル」は，フラーレン・単一組成カーボンナノチューブ合成達成への鍵物質として，あるいはそれ自身の特異な物理的性質を利用した新規物質の基本骨格として魅力的な化合物群である。我々はバッキーボウルの「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。今年度の主な成果としては以下のような研究が挙げられる。①ここ数年来取り組んでいる官能化バッキーボウルの自在合成について，様々なタイプの置換スマネンの合成法の確立に成功した。その結果，有機材料を研究している様々なグループから，スマネン骨格を取り入れた応用研究が多く提案されており，今後は応用を指向した分子設計へと研究が進展していくものと期待される。②昨年度初めて合成に成功した含窒素ヘテロバッキーボウルについて，今年，無置換の基本骨格構造の合成ならびにX線結晶構造解析にも成功した。その結果，窒素の位置により生じているボウルキラリティに対応して，キラルヘリカルスタッキング構造をとることが見出された。これはアキラルなスマネンが垂直なカラム構造をとるのと対照的であり，興味深いとともに，今後の展開が期待される。③フッ素化芳香族化合物は，その電子的特徴によりユニークな物性を示すことが知られている。ベルリン自由大学の Lentz 研究室との共同研究により，様々なフッ素化バッキーボウルの合成が進められており，興味深い特徴が現れている。例えば，トリフルオロメチル基をオルト位に２個導入したコラヌレンは，無置換コラヌレンとは異なり，スマネン様のカラム状パッキング構造を結晶中で形成し，無置換コラヌレンの１万倍以上の顕著な電子移動能を示すことが明らかとなった。④様々なバッキーボウルが合成可能になってきたことで，基礎有機化学への貢献も進んでいる。例えば，ベンジル置換スマネンの立体異性体の生成比を求めることで，曲面の π 電子構造が与える立体電子効果の大小を見積もることができ，実際，Convex 面の π 共役構造がより大きな超共役効果を示すことを実験的，理論的に示すことができた。また，バッキーボウルの特徴的な動的挙動であるボウル反転について，その反転エネルギーと分子構造との相関について精査し，置換基がボウル反転エネルギーに与える影響について一般則を提案することができた。

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。①計算科学研究センターの江原 G との共同研究で，ポリビニルピロリドン（PVP）保護金クラスターのアルコール酸化触媒過程の反応機構の解析を行い，PVP マトリクスの効果による電子豊富な金表面への酸素とアルコールの共吸着過程，続く吸着酸素による β 水素の引き抜き過程を経て進行していることを明らかにした。②金－パラジウムの２原子系合金クラスターを用いると，低温において選択的に炭素－塩素結合の活性化が進行することを見出し，この現象を利用して，芳香族塩素化物の室温での Ullmann カップリング反応を初めて実現した。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。

B-1) **学術論文**

R. N. DHITAL, A. MURUGADOSS and H. SAKURAI, "Dual Roles of Polyhydroxy Matrices for Homocoupling of Arylboronic Acid Catalysed by Gold Nanoclusters under Acidic Conditions," *Chem. –Asian J.* **7**, 55–59 (2012).

S. HIGASHIBAYASHI, NASIR BAIG R. B., Y. MORITA and H. SAKURAI, "Selective Synthesis of C_3 Symmetric Functionalized Sumanenes," *Chem. Lett.* **41**, 84–86 (2012).

R. SHOMURA, S. HIGASHIBAYASHI, H. SAKURAI, Y. MATSUSHITA, A. SATO and M. HIGUCHI, "Chiral Phenylazomethine Cage," *Tetrahedron Lett.* **53**, 783–785 (2012).

A. MURUGADOSS, N. KAI and H. SAKURAI, "Synthesis of Bimetallic Gold-Silver Alloy Nanoclusters by Simple Mortar Grinding," *Nanoscale* **4**, 1280–1282 (2012).

D. VIJAY, H. SAKURAI, V. SUBRAMANIAN and G. N. SASTRY, "Where to Bind in Buckybowls? The Dilemma of a Metal Ion," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14**, 3057–3065 (2012).

K. BOBUATONG, S. KARANJIT, R. FUKUDA, M. EHARA and H. SAKURAI, "Aerobic Oxidation of Methanol to Formic Acid on Au_{20}^-: A Theoretical Study on the Reaction Mechanism," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14**, 3103–3111 (2012).

S. MEBS, M. WEBER, P. LUGER, B. M. SCHMIDT, H. SAKURAI, S. HIGASHIBAYASHI, S. ONOGI and D. LENTZ, "Experimental Electron Density of Sumanene, a Bowl Shaped Fullerene Fragment; Comparison with the Related Corannulene Hydrocarbon," *Org. Biomol. Chem.* **10**, 2218–2222 (2012).

H. KITAHARA and H. SAKURAI, "*Anti*-Addition Mechanism in the Intramolecular Hydroalkoxylation of Alkene Catalyzed by PVP-Stabilized Nanogold," *Molecules* **17**, 2579–2586 (2012).

S. HIGASHIBAYASHI, R. TSURUOKA, Y. SOUJANYA, U. PURUSHOTHAM, G. N. SASTRY, S. SEKI, T. ISHIKAWA, S. TOYOTA and H. SAKURAI, "Trimethylsumanene: Enantioselective Synthesis, Substituent Effect on Bowl Structure, Inversion Energy, and Electron Conductivity," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **85**, 450–467 (2012).

J.-J. CHEN, S. ONOGI, Y.-C. HSIEH, C.-C. HSIAO, S. HIGASHIBAYASHI, H. SAKURAI and Y.-T. WU, "Palladium-Catalyzed Arylation of Methylene-Bridged Polyarenes: Synthesis and Structures of 9-Arylfluorene Derivatives," *Adv. Synth. Catal.* **354**, 1551–1558 (2012).

R. N. DHITAL and H. SAKURAI, "Anomalous Efficacy of Bimetallic Au/Pd Nanoclusters in C–Cl Bond Activation and Formal Metathesis-Type C–B Bond Activation at Room Temperature," *Chem. Lett.* **41**, 630–632 (2012).

Q.-T. TAN, S. HIGASHIBAYASHI, S. KARANJIT and H. SAKURAI, "Enantioselective Synthesis of a Chiral Nitrogen-Doped Buckybowl," *Nat. Commun.* **3**, 891 (2012).

S. ONOGI, S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI, "Microwave-Assisted Synthesis of Methyl (1*S*,2*R*,4*S*,5*R*)-7-Aza-5-hydroxybicyclo[2.2.1]heptan-2-carboxylate through Unexpected Stereoselective Substitution Reaction," *Tetrahedron Lett.* **53**, 3710–3712 (2012).

Y. MORITA, S. NAKAO, S. HAESUWANNAKIJ, S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI, "Emission Amplification by Sumanene Nanocrystals in an *Onigiri*-Type Organic–Organic Assembly," *Chem. Commun.* **48**, 9050–9052 (2012).

O. SOPHIPHUN, J. WITTAYAKUN, R. N. DHITAL, S. HAESUWANNAKIJ, A. MURUGADOSS and H. SAKURAI, "Gold/Palladium Bimetallic Alloy Nanoclusters Stabilized by Chitosan as Highly Efficient and Selective Catalyst for Homocoupling of Arylboronic Acid," *Aust. J. Chem.* **65**, 1238–1243 (2012).

P. KAEWMATI, E. SOMSOOK, R. N. DHITAL and H. SAKURAI, "Aerobic Oxygenation of Phenylboronic Acid Promoted by Thiol under Gold-Free Conditions: A Warning against Gold Nanoparticle Catalysis," *Tetrahedron Lett.* **53**, 6104–6106 (2012).

H. KITAHARA and H. SAKURAI, "Addition versus Oxygenative Cleavage: Two Contradictory Reactivities in the Reaction of *N*-Benzyl 4-Pentenylamine Catalyzed by Colloidal Nanogold under Aerobic Conditions," *Chem. Lett.* **41**, 1328–1330 (2012).

B. M. SCHMIDT, S. SEKI, B. TOPOLINSKI, K. OHKUBO, S. FUKUZUMI, H. SAKURAI and D. LENTZ, "Electonic Properties of Trifluoromethylated Corannulenes," *Angew. Chem., Int. Ed.* **51**, 11385–11388 (2012).

R. N. DHITAL, C. KAMONSATIKUL, E. SOMSOOK, K. BOBUATONG, M. EHARA and H. SAKURAI, "Low-Temperature Carbon–Chlorine Bond Activation by Bimetallic Gold/Palladium Alloy Nanoclusters: An Application to Ullmann Coupling," *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 20250–20253 (2012).

A. MURUGADOSS, K. OKUMURA and H. SAKURAI, "Bimetallic AuPd Nanocluster Catalysts with Controlled Atomic Gold Distribution for Oxidative Dehydrogenation of Tetralin," *J. Phys. Chem. C* **116**, 26776–26783 (2012).

B-3) 総説，著書

櫻井英博,「**カーボンナノチューブの単一組成合成，キラリティ制御へ向けた有機合成アプローチ**」, ***化学工業*** **63**, 140–145 (2012).

東林修平,「**炭素・窒素原子でできた「おわん分子」を合成**」, ***セラミックス*** **47**, 806 (2012).

B-4) 招待講演

H. SAKURAI, "Matrix and Dopant Effect on *quasi*-Homogeneous Gold Nanocluster Catalyst in Aqueous Media," 2nd Molecular Materials Meeting, Singapore, January 2012.

H. SAKURAI, "Unusual Reactivity of Bimetallic Gold/Palladium Alloy Nanoclusters toward C–X Bond Activation," Workshop on Novel Catalytic Systems and Innovative Nanomaterials, Institute for Molecular Science, Okazaki, April 2012.

S. HIGASHIBAYASHI, "C_3 Symmetric Buckybowls, Sumanenes," Kathmandu Symposia on Advanced Materials 2012, Kathmandu (Nepal), May 2012.

櫻井英博,「**金クラスター触媒によるカップリング反応**」, **第45回有機金属若手の会夏の学校**, **山梨**, **2012年7月**.

H. SAKURAI, "Colloidal Nanogold as a Unique *quasi*-Homogeneous Catalyst," Department Seminar, Fuzhou University, Fuzhou (China), October 2012.

H. SAKURAI, "Colloidal Nanogold as a Unique *quasi*-Homogeneous Catalyst," Department Seminar, Xi'an Jiaotong University, Xi'an (China), October 2012.

H. SAKURAI, Q.-T. TAN and S. HIGASHIBAYASHI, "Chemical Synthesis of Nitrogen-Doped Buckybowls," 8th IUPAC International Symposium on Novel Materials and their Synthesis and 22th International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers, Xi'an (China), October 2012.

H. SAKURAI, "Synthesis of Sumanene and Related Buckybowls," Department Seminar, Freie Universität Berlin, Berlin (Germany), November 2012.

H. SAKURAI, "Synthesis of Sumanene and Related Buckybowls," Department Seminar, Universität Würzburg, Berlin (Germany), November 2012.

櫻井英博,「擬均一系クラスター触媒の有機合成的アプローチ」, 第9回触媒相模セミナー , 相模原, 2012年 11月.

櫻井英博,「バッキーボウル合成の最近の進歩」, 学術講演会, 埼玉大学大学院理工学研究科, さいたま, 2012年 12月.

櫻井英博,「お椀型共役化合物「バッキーボウル」の化学」, 奈良先端未来開拓コロキウム2012, 奈良先端科学技術大学院大学, 生駒, 2012年 12月.

H. SAKURAI, "Synthesis of Sumanene and Related Buckybowls," Department Seminar, National Institute of Interdisciplinary Science & Technology, Thuruvananthapuram (India), December 2012.

H. SAKURAI, "Recent Progress in Sumanene Chemistry," Department Seminar, Indian Institute of Chemical Technology, Hyderabad (India), December 2012.

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

埼玉大学大学院理工学研究科,「マクロ化学特論」, 2012年.

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),「ヘテロフラー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π空間の構築」, 櫻井英博 (2008年–2012年).

科研費研究活動スタート支援,「ナノクラスターの反応性を活かした環境調和型炭素−炭素結合形成反応の開発」, 杉石露佳 (2012年–2013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).

科学技術振興機構先導的物質変換領域,「多核金属の協働作用で生み出すクラスター触媒の新反応」, 櫻井英博 (2012年–2017年).

科学技術振興機先導的物質変換領域,「遷移金属触媒反応によるπ電子系おわん分子合成法の開発」, 東林修平 (2012年–2017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,「ヘテロフラー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,「ヘテロフラーレン合成を指向したバッキーボウル分子の自在合成」, 櫻井英博 (2005年–2006年).

住友財団基礎科学研究助成,「お椀型共役化合物「バッキーボウル」の自在合成」, 櫻井英博 (2005年).

住友財団基礎科学研究助成,「C_3 対称曲面π共役系拡張バッキーボウルの合成」, 東林修平 (2009年).

C) 研究活動の課題と展望

バッキーボウルの化学に関しては，分子研異動時に目標としていた基本的な方法論開発は終了したと言える。合成研究のうちの半分は既に合目的分子デザインとその実践的合成へシフトしている。そのため，共同研究先の外部研究者との議論による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。一方で，新奇な合成手法の開拓とそれを用いた新物質開発は，さらに最先端の難しい領域に突入しており，実際に，3次元π分子にしかみられないような不思議な現象に直面している。本領域を担当している各研究者の今後の益々の奮闘を期待する。

金属ナノクラスター触媒の化学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これからも積極的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。これまで以上に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，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，及びターンスタイル構造を有する巨大分子の構築プロセスを開発した。今年度は，四端子型素子である単電荷ポンプ構造をもつ巨大分子の構築に成功した。次の課題として，「単一分子内単電荷素子の実働検証」，および「多端子型素子間の精密配線法の確立」をめざすことにした。そのためには，根幹パーツ群（トンネル／静電接合，クーロン島，ワイヤ／アンカー）の構造最適化，および大型分子ブロック間の逐次接合法の整備を行う必要があり，分子構築プロセスの改善と新規開拓に着手した。その結果，N- ヘテロ環状カルベン配位子や，直接 C–H 活性化を用いた最新のカップリング反応を併用することにより，これまでのプロセスよりも遥かに広範な中／大型分子の精密合成が可能となることが分かった。これにより，根幹パーツ群の構造バリエーションは大幅に増加し，また多端子型素子を複数組み合わせた「集積回路」の全合成への目処もついたと考えている。

b) 電極／単一分子鎖／電極系における電荷輸送特性の解明と制御法の開拓を，阪大・寺田—山田 G，産総研・浅井 G らと実施している。計測法の改良により温度変化の範囲を広げて，絶縁被覆付きオリゴチオフェン群 [5–17 量体] の単一分子伝導度の温度変化を検討した。その結果，14 量体において，主要な伝導機構がトンネルからホッピングへと転移する現象が，350 K 付近に観測できた。なお，計測可能な範囲では，14 量体よりも短鎖な系ではトンネル伝導のみ，より長鎖な系ではホッピング伝導のみが観測された。14 量体の伝導度の温度変化は，Keldysh グリーン関数に基づくスケーリング関数で再現可能であった。このスケーリング関数法を用いて，測定圏外であった 17 量体のトンネル—ホッピング転移温度が 250 K 付近と推定できる。17 量体の方が 14 量体よりも，ホッピング伝導が “ ON ” になる温度が低いことから，330 K 以上の高温領域では，17 量体の方が長鎖長であるにも関わらず，14 量体よりも伝導度が高いという「逆転現象」を確認している。一方，発光中心や磁性中心を導入した機能性分子ワイヤの電子特性を評価するための合成・計測研究を，昨年度に引き続き，京大・田中（一）G と実施している。

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，高分解能 STM 観測や局所分光法により，個別分子レベルで解明するための研究を，横浜・市立大の横山 G と実施している。大型分子の，官能基分解能レベルの実空間観測を実施する場合，「良質な孤立吸着分子の試料」の作成が必須となる。昨年度，エレクトロスプレー法により良質な試料が得られることが分かったが，ビギナーがすぐに実施できる程の汎用性はなかった。そこで，10 nm から 120 nm 長級までの被覆分子鎖について，試料作製条件を徹底的に再検討し，計測法としてルーチン化した。このノウハウは，阪大寺田—山田 G にも移転する予定である。

B-1) 学術論文

SK. LEE, R. YAMADA, S. TANAKA, GS. CHANG, Y. ASAI and H. TADA, "Universal Temperature Crossover Behavior of Electrical Conductance in a Single Oligothiophene Molecular Wire," *ACS Nano* **6**, 5078–5082 (2012).

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

「分子電線の候補分子は，剛直で直鎖状の主鎖骨格を持たねばならない。」

これは業界一般の常識である。しかし，一般に直鎖剛直分子は可溶性に乏しく，それを改善するための構造修飾をほどこすと，もはや他の機能修飾部を増設する余地が無くなってしまったりする。対してウチの分子群は，溶液中では，剛直でもないし直鎖構造もとらない。そのため，格段に良好な可溶性と可精製性を示し，また構造修飾の余地も多大である。結果，「伸び代が大きい」巨大分子系となっている。一方，各種ナノ計測ステージ上では，「分子－基板－電極間相互作用」と「5員環オリゴマーの構造特性」をうまく利用することにより，電荷輸送に最適な直鎖状／共平面構造をとるようにすることができる。これを他力本願共平面性と称している。このネタは，ごく少数のスペシャリスト達と，研究現場で掘り起こし，実験的確認をしつつ発展させてきたものである。将来的に，この手法がファインマン流の分子スケール素子開発の切り札になるかは，未だ心もとないが，今のところターゲットにしたブツは確実にゲットできている。行けるところまでは行ってみよう。

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) 有機エレクトロニクスの研究において，ホウ素原子の機能を利用した物質開発が注目されている。1,3- ジケトン BF_2 錯体は強い蛍光とともに高い電子受容性を示すことから，トリフェニルアミン色素にこの錯体部位を導入した有機色素を設計・合成し，その構造をX線結晶構造解析により決定した。その光物性および電気化学的特性から，この色素は色素増感太陽電池用色素として有用であると期待される。

b) 光誘起電子移動過程を利用する高効率・高選択的還元反応開発の一環として，電子供与体としてアミン類を用い，α- ブロモメチル置換環状芳香族 β- ケトエステルの光誘起電子移動反応を検討したところ，生成物として，脱ブロム化 β- ケトエステル，環拡大 γ- ケトエステル，環拡大 γ- ケトエステル二量化体（meso および dl 体）が得られた。この結果は，反応が一級アルキルラジカル中間体を経由して進行していることを示唆している。

c) 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-1) 学術論文

M. TOMURA and Y. YAMASHITA, "Bis(tetra-*n*-butylammonium) Bis(5,6-dicyanopyrazine-2,3-dithiolato-κ^2S,S') palladium(II)," *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* **68**, m57–m57 (2012).

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 (2003–2012).

C) 研究活動の課題と展望

有機固体における電気伝導性，磁性，光学的非線形性などの物性の発現には，その分子固有の特質のみならず，集合体内でどのように分子が配列しているかということが大いに関与している。そのために，このような機能性物質の開発には分子配列および結晶構造の制御，すなわち，「分子集合体設計」というコンセプトが極めて重要となってくる。しかしながら，現状で

は，簡単な有機分子の結晶構造予測さえ満足には成し遂げられていない。このことは，逆に言えば，拡張π電子系内に，水素結合などの分子間の弱い相互作用を導入し，種々の分子集合体を設計・構築するという方法論には，無限の可能性が秘められているということを示している。今後は，水素結合のみならず，ヘテロ原子間相互作用・C–H…π 相互作用・立体障害といった新しいツールによる分子集合体設計，特に，格子状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π電子系との間のノンコバレントな相互作用（C–X…N，C–X…π）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) 枯草菌（*Bacillus subtilis*）中に含まれる HemAT-Bs は,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り，酸素センサーの本体として機能するヘムを活性中心として有している。HemAT-Bs 中のヘムには，生理的なエフェクター分子である酸素以外に，CO も結合するが，CO が結合した場合には生理的な応答は起こらない。すなわち, HemAT-Bs は何らかの機構により, 生理的なエフェクターである酸素を選択的に認識することにより，酸素センサーとして機能している。本年度の研究においては，時間分解共鳴ラマン分光法を用い，HemAT-Bs による選択的酸素センシングおよび分子内シグナル伝達の分子機構解明を目的とした研究を行った。CO 結合型 HemAT-Bs の光解離に伴って生成する反応中間体では，10 ns ～ 100 μs の時間領域において ν(Fe–His)（ヘム鉄と軸配位子であるヒスチジン間の伸縮振動モード）の位置は変化しなかった。これに対して，酸素結合型 HemAT-Bs においては，酸素の光解離後に観測される ν(Fe–His) は，デオキシ型の ν(Fe–His) に比べて低波数側にシフトして観測された。これらの結果は，HemAT-Bs に酸素，あるいは CO が結合した場合に，それぞれのヘム近位側のコンフォメーションが異なっていることを示唆している。また，このようなヘム近位側のコンフォメーション変化が, 酸素センシングにより誘起される分子内シグナル伝達に関与しているものと考えられる。また, CO 結合型 HemAT-Bs の CO 光解離後の時間分解紫外共鳴ラマンスペクトル測定を行い，CO 結合に伴うタンパク質コンフォメーション変化を追跡した結果，気体分子の結合・解離により B- ヘリックス，G- ヘリックスのコンフォメーション変化が誘起されることが分かった。

b) 乳酸菌（*Lactococcus lactis*）はヘム生合成系を欠損しているが，外部からヘム分子を取込むことにより酸素呼吸により生育可能である。しかし，必要量以上に取り込まれたヘム分子は，活性酸素産生などにより細胞毒性を示すため，細胞内のヘム濃度は厳密な制御を受けている。今年度も昨年度に引き続き，*L. lactis* の細胞内ヘム濃度制御に中心的な役割を果たしている転写調節因子 HrtR の構造機能相関の解明に取組んだ。アポ型 HrtR は，非常に高い DNA 結合能（Kd = 0.2 nM）を有しており，遊離のヘム分子が存在しない条件下においてリプレッサートとして機能し，細胞外へのヘム排出に関与するトランスポーター遺伝子の発現を抑制している。細胞内の遊離ヘム濃度が上昇すると，アポ型 HrtR にヘム分子が結合することにより，HrtR は標的 DNA から解離し，ヘム排出に関与するトランスポーター遺伝子の発現が誘導される。本研究では，アポ型 HrtR と標的 DNA の複合体の結晶構造解析に成功し，その構造を 2.0 Å 分解能で決定した。HrtR は，DNA 結合モチーフとしてヘリックス・ターン・ヘリックスモチーフを有している。本モチーフ中の認識ヘリックス中に存在する Arg46 と Tyr50 の２残基が，HrtR による標的 DNA 配列の認識および

特異的結合に中心的な役割を果たしていることが分かった。ヘム結合に伴い，HrtR は標的 DNA から解離する。これは，ヘム結合に伴って HrtR の N 末ドメイン（DNA 結合ドメイン）の相対配置が変化し，二つのサブユニットにそれぞれ存在する DNA 認識ヘリックス間の距離が増大し，その結果，DNA 認識ヘリックスが標的 DNA の主溝に結合できなるためであることが分かった。

B-1) 学術論文

H. SAWAI, H. SUGIMOTO, Y. SHIRO, H. ISHIKAWA, Y. MIZUTANI and S. AONO, "Structural Basis for Oxygen Sensing and Signal Transduction of the Heme-Based Sensor Protein Aer2 from *Pseudomonas aeruginosa*," *Chem. Commun.* **48**, 6523–6525 (2012).

S. EL-MASHTOLY, M. KUBO, Y. GU, H. SAWAI, S. NAKASIMA, T. OGURA, S. AONO and T. KITAGAWA, "Site-Specific Protein Dynamics in Communication Pathway from Sensor to Signaling Domain of Oxygen Sensor Protein, HemAT-Bs: Time-Resolved Ultraviolet Resonance Raman Study," *J. Biol. Chem.* **287**, 19973–19984 (2012).

H. SAWAI*, M. YAMANAKA*, H. SUGIMOTO, Y. SHIRO and S. AONO, "Structural Basis for the Transcriptional Regulation of Heme Homeostasis in *Lactococcus lactis*," *J. Biol. Chem.* **287**, 30755–30768 (2012). (* equal contribution)

Y. YOSHIDA, H. ISHIKAWA, S. AONO and Y. MIZUTANI, "Structural Dynamics of Proximal Heme Pocket in HemAT-Bs Associated with O_2 Dissociation," *Biochem. Biophys. Acta, Proteins Proteomics* **1824**, 866–872 (2012).

B-3) 総説，著書

S. AONO, "Novel bacterial gas sensor proteins with transition-metal-containing prosthetic groups as active sites," *Antioxd. Redox Signal.* **16**, 678–686 (2012).

青野重利,「鉄分バランスを整える—乳酸菌における細胞内ヘム濃度制御」, ***化学*** **67**, 68–69 (2012).

B-4) 招待講演

S. AONO, "Structural basis for the transcriptional regulation of heme homeostasis in *Lactococcus lactis*," 4th Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences Experiments and Simulations, Nara (Japan), January 2012.

S. AONO, "Transcriptional regulation by heme acting as a signaling molecule," 221st The Electrochemical Society Meeting, Seattle (U.S.A.), May 2012.

S. AONO, "Structural basis for the transcriptional regulation of heme homeostasis in lactic acid bacterium, *Lactococcus lactis*," 7th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-7), Jeju (Korea), July 2012.

S. AONO, "Molecular mechanism of heme-responsive transcriptional regulation," 6th Asian Biological Inorganic Chemistry Conference (AsBIC-6), Hong Kong (China), November 2012.

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

14th International Conference on Biological Inorganic Chemistry 組織委員会総務委員長 (2009).

The first International Symposium on Biofunctional Chemistry 組織委員 (2012).

Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences—Experiments and Simulations 組織委員 (2008–2010, 2012).

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 (2010–2012).

学会誌編集委員

J. Biol. Inorg. Chem., Editorial Advisory Board (2002–2004).

Biosensors, Editorial Board (2010–).

B-10) 競争的資金

科研費特定領域研究（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

生物は，様々な外部環境の変化に応答・対応しながら，生体内の恒常性を維持している。我々の研究グループでは，生物にとって最も重要な遷移金属イオンである鉄イオンの細胞内恒常性維持に興味をもち，細胞内の鉄イオンの恒常性維持機構解明を目的とした研究に取組んでいる。なかでも，鉄イオンを含む化合物である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重点を置き，研究を進めている。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・グロビュール状態蛋白質化学療法剤複合体の抗腫瘍活性

b) DMSO 停止水素／重水素交換二次元 NMR 法の改良

c) GroEL/GroES 複合体の構造揺らぎと生物機能

d) GroEL/GroES 複合体形成の熱力学的解析

e) 質量分析を用いた野生型 GroEL の水素／重水素交換反応解析

A-3) 研究活動の概要と主な成果

a) これまでの我々の研究から，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。そこで，今年度はモルテン・グロビュール状態のαラクトアルブミンの運び屋としての特性を利用した新しい抗腫瘍複合体の作製を試みた。不飽和脂肪酸の代わりに抗癌剤とモルテン・グロビュール状態にあるαラクトアルブミンとの複合体を作製し，その抗腫瘍細胞活性を検討した。その結果，特にアドリアマイシンやパクリタキセルとαラクトアルブミンとの複合体は，抗癌剤単独で処理した場合に比べ顕著に高い抗腫瘍細胞活性を示したのに対して，正常細胞に対する毒性は低下した。

b) ジメチルスルフォキシド（DMSO）停止水素／重水素（H/D）交換二次元 NMR 法は，蛋白質のペプチド・アミド水素の H/D 交換反応を実施後，重水素化 DMSO（DMSO-d6）溶液中で H/D 交換反応を停止させ，DMSO 溶液中で変性し H/D 交換も停止した蛋白質の二次元 NMR スペクトルを取ることにより，各アミド水素の交換反応を追跡する方法である。そのままでは良好な NMR スペクトルの得られない，蛋白質超分子複合体やアミロイド線維，H/D 交換反応が速すぎてアミド水素の NMR 信号が十分得られない，変性蛋白質などの H/D 交換反応測定に用いられてきた。しかし，これまでの DMSO 停止 H/D 交換法では凍結乾燥を溶媒交換に用いるため，変性剤中の蛋白質や高濃度の塩存在下の H/D 交換反応には適用できない難点があった。そこで，凍結乾燥の代わりにスピン脱塩カラムを用いることによりこの難点を克服した。6.0 M 塩酸グアニジン中で変性した ^{15}N 標識ユビキチンの H/D 交換反応を測定し，スピン脱塩カラムを用いた方法が有効であることを確認した。

c) 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 H/D 交換二次元 NMR を用いた研究を行っている。昨年に引き続き，GroES 単独での H/D 交換反応を DMSO 停止 H/D 交換二次元 NMR 法と 920 MHz NMR 装置を用いて追跡した（20 mM KCl，25 mM リン酸緩衝液，pH 6.5，25 ℃）。その結果，GroES の 94 個のペプチド・アミド水素中 33 個の交換反応を定量的に求め，それらの水素交換保護因子を決定した。残りの 61 残基については，水素交換反応速度定数の下限が求められた。最も強く保護されているアミド水素の保護因子は 10^6–10^7 のオーダーであり，通常の球状蛋白質の保護因子と同程度であったが，保護因子 10^6 以上の非常に強く保護されたアミド水素の数はわずか 10 個で，通常の小さな球状蛋白質について知られている数よりも著しく少なかった。このことは，7 量体 GroES 中のかなりの部分がフレキシブルで天然変性状態にあることを示している。保護因子 10^5 以上の強く保護されたアミノ酸残基は疎水性コアを形成する 3 本のβストランドに集中しており，残基 17–34 の可動性ループ領域はあまり保護されていなかった。先行研究において，GroES の熱や変性剤によるアンフォールディング転移の熱力学的解析が報告されており，それらの熱力学パラメータから期待される保護因子は 10^2–10^4 のオーダーで H/D 交換で求

められた最も強く保護されている残基の保護因子よりも数桁小さいことがわかった。このことは，GroES のアンフォールディング転移が，先行研究で仮定されているような単純な二状態や三状態の転移ではないことを示している。

d) ADP や ATP の存在下では，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。昨年度に引き続き，分子研に設置されている超高感度滴定型熱量計を用いて，GroEL の単一リング変異体（SR1）と GroES の結合の熱力学的解析を行った。GroES を SR1 で滴定し，3 mM ADP 存在下 25.0 °C で，結合定数 $K_b = 6.4 \times 10^6$ M^{-1}，エンタルピー変化 ΔH_b = 37 kcal/mol，エントロピー変化 ΔS_b = 156 cal/mol/K を得た（pH 7.5，100 mM KCl，10 mM $MgCl_2$）。ΔH_b，ΔS_b ともに正で，結合がエントロピー駆動であることがわかった。^{15}N 標識した GroES と二次元 NMR（HSQC）スペクトルを用いた滴定実験でも，3 mM ADP 存在下で 10^5 M^{-1} のオーダーの結合定数が得られたが，3.0 mM ATP 存在下では測定限界を超えて結合定数が大きくなった（$K_b >> 10^6$ M^{-1}）。

e) H/D 交換質量分析法を用いて野生型 GroEL（分子量約 80 万）の溶液中のコンフォメーション解析を，フロリダ州立大学の Marshall 教授のグループとの共同研究として行った。アポ型 GroEL と ATP アナログ（ATPγS）結合 GroEL の H/D 交換反応を数残基レベルの分解能で観測し，ヌクレオチド結合に伴ったコンフォメーション変化を分子全体にわたって特徴付けることが出来た。

B-1) 学術論文

K. TOMOYORI, T. NAKAMURA, K. MAKABE, K. MAKI, K. SAEKI and K. KUWAJIMA, “Sequential Four-State Folding/Unfolding of Goat α-Lactalbumin and Its N-Terminal Variants,” *Proteins* **80**, 2192–2206 (2012).

J. CHEN, H. YAGI, P. SORMANNI, M. VENDRUSCOLO, K. MAKABE, T. NAKAMURA, Y. GOTO and K. KUWAJIMA, “Fibrillogenic Propensity of the GroEL Apical Domain: A Janus-Faced Minichaperone,” *FEBS Lett.* **586**, 1120–1127 (2012).

B-4) 招待講演

K. KUWAJIMA, “Some remaining questions about the mechanism of protein folding,” 4th Japan-Korea Seminar on Biommolecular Sciences—Experiments and Simulations, Cultural Center of Todaiji-Temple, Nara, January 2012.

T. NAKAMURA, K. MAKABE, T. AIZAWA, K. KAWANO, M. DEMURA and K. KUWAJIMA, “Structure and biological function of anti-tumor complexes between oleic acid and proteins in the molten globule state,” 4th Japan-Korea Seminar on Biommolecular Sciences—Experiments and Simulations, Cultural Center of Todaiji-Temple, Nara, January 2012.

K. MAKABE, T. NAKAMURA and K. KUWAJIMA, “Structural insights into the stability perturbaions by N-terminal variations in human and goat α-lactalbumin,” 4th Japan-Korea Seminar on Biommolecular Sciences—Experiments and Simulations, Cultural Center of Todaiji-Temple, Nara, January 2012.

K. KUWAJIMA, “Some remaining questions about the mechanism of protein folding,” The International Conference on Statistical Mechanics of Liquids: From Water to Biomolecules, Okazaki Conference Center, Institute for Molecular Science, Okazaki, February 2012.

K. KUWAJIMA, “Molecular mechanisms of cytotoxicity of HAMLET and other protein-oleic acid complexes,” IGER International Symposium on Science of Molecular Assembly and Biomolecular Systems 2012, Nagoya University, Nagoya, September 2012.

K. KUWAJIMA, “Molecular mechanisms of cytotoxicity of HAMLET and other protein-oleic acid complexes,” The 12th KIAS Conference on Protein Structure, Korea Institute for Advanced Study, Seoul (Korea), October 2012.

桑島邦博,「シャペロニン超分子複合体の水素交換反応」, 大阪大学蛋白質研究所セミナー「分子シャペロンの機能発現の新展開と細胞制御」, 大阪大学蛋白質研究所, 大阪, 2012年11月.

K. KUWAJIMA, “Structural fluctuations and functional expression of the chaperonin complexes,” The 6th International Symposium “Molecular Science of Fluctuations toward Biological Functions,” Kyoto TERRSA, Kyoto, December 2012.

K. KUWAJIMA, “The structure and function of HAMLET and its related protein complexes,” The 3rd HAMLET Conference, Lund University, Lund (Sweden), December 2012.

B-5) 特許出願

特願 2012-147492,「蛋白質—化学療法剤複合体及びその製造方法, 並びに医薬」, 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), 岡田誠治(熊本大学), 2012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 (2010–2011).

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, 2011, 2012).

文部科学省科学研究費審査部会専門委員会委員 (2002, 2004, 2009, 2011).

JST 若手個人研究推進事業(さきがけ)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: Strucuture, Function & Bioinformatics, Editorial Board (1993–).

J. Mol. Biol., Associate Editor (2004–2011).

BIOPHYSICS, Associate Editor (2005–).

Spectroscopy—Biomedical Applications, Editorial Board (2002–2011).

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-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,「**生体分子科学**」, **2012年5月1日, 8日(統合生命科学教育プログラム授業科目を兼ねる)**.

総合研究大学院大学アジア冬の学校,「Molecular Mechanisms of Protein Folding」, **岡崎コンファレンスセンター** , **2012年1月12日**.

The 11th KIAS Protein Folding Winter School, “Molecular Mechanisms of Protein Folding,” High1 Resort, Kanwon-do (Korea), February 5–10.

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が，生命科学や医学とも深い関わりを持っている。特に，フォールディング中間体であるモルテン・グロビュール状態のα ラクトアルブミンが脂肪酸（オレイン酸）と複合体を形成すると抗腫瘍活性を発現するのは興味深い現象である。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，β_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。この仮説を確かめるため，本年度は，アドリアマイシンやパクリタキセル等の抗癌剤をモルテン・グロビュール状態のα ラクトアルブミンにに結合させた複合体を作製し，その抗腫瘍活性を調べた。その結果，期待通りに複合体の抗腫瘍活性増強の観測された。現在共同研究先である熊本大学・エイズ学研究センター・岡田誠治教授の研究室において複合体を用いた動物実験が進行中である。

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。GroEL/GroES 複合体中のGroES 部分の水素交換反応の実験も終えているので，今後これらの実験データを解析し，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・分子生物学的アプローチによる複合糖質およびタンパク質の機能解析

c) ナノテクノロジーと構造生物学の融合による生命分子科学研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 糖鎖の機能を詳細に理解するためには，その立体構造を溶液中での揺らぎを含めて明らかにする必要がある。我々は，常磁性ランタニドイオンの導入によって観測される擬コンタクトシフト（PCS）を活用し，NMR 法と分子動力学（MD）計算を組み合わせた糖鎖の動的立体構造解析法を開発した。神経細胞膜上に存在する糖脂質 GM3 の糖鎖に常磁性ランタニドイオンを導入し，糖鎖の各水素および炭素原子の化学シフト変化から PCS 値を求めた。一方，MD 計算によって得られた複数のコンフォマーを考慮した立体構造モデルから PCS の理論値を算出し，実験値との比較を行った。その結果，主要なコンフォメーションのみならず，存在割合の低い安定構造を考慮することで両者がよりよく一致することが判明し，これにより溶液中での糖鎖の立体構造の揺らぎを正しく記述することに成功した。さらに，本手法を分岐型糖鎖 GM2 へと拡張し，糖残基間の相互作用を通じて立体構造の揺らぎが制御されている様子を明らかにした。

b) タンパク質の細胞内運命の決定に関わるいくつかの分子認識メカニズムを構造生物学的アプローチによって解明した。ユビキチン（Ub）―プロテアソーム系で働くタンパク質の中には Ub と相同性の高いドメイン（UBL）を持つものがいくつか存在する。例えば，NF-κB の活性化制御を通じて免疫応答や細胞の生存など様々な生命現象に関与している直鎖状 Ub 鎖の生成を触媒する酵素複合体は，HOIL-1L の UBL と HOIP の Ub 会合ドメイン（UBA）の相互作用を通じて形成されている。また，立体構造不全の糖タンパク質から糖鎖を切り離す酵素の N 末端に位置する PUB ドメインがプロテアソーム基質運搬因子 HR23 の UBL と相互作用することを私たちは見出している。これらの分子間相互作用様式をX線結晶構造解析と NMR 解析を通じて明らかにし，立体構造の類似した Ub/UBL が独自のパートナータンパク質との特異的相互作用を実現する仕組みの一端を明らかにすることができた。また，コラーゲン特異的な分子シャペロン Hsp47 の基質結合部位を解明することにも成功した。

c) 自然界ではタンパク質や DNA が，ウイルス殻などの巨大なカプセル状の構造体に閉じ込められることで，その構造や機能の制御を受けている。一方，人工系では，精密構造をもつカプセル状分子の大きさに限界があり，タンパク質のような巨大な分子を閉じ込めることはこれまでできなかった。我々は，東京大学の藤田誠教授との共同研究を通じて，パラジウムイオンと有機二座配位子，計 36 個の構成成分から自己組織化した巨大な中空球状錯体を基盤として，その内面に糖鎖の有限ナノ界面を構築し，球状錯体の内部に Ub を丸ごと包接することに成功した。すなわち，分子生物学的手法と化学修飾を組み合わせることにより Ub を連結した配位子を新たに調製し，これを糖で化学修飾した有機配位子およびパラジウムイオンと混合することで，球状錯体を自己組織化生成した。NMR を利用した拡散速度の計測などを通じて，Ub が球状錯体に封入されていることを実証することができた。

B-1) 学術論文

L. MAURI, R. CASELLATO, M. G. CIAMPA, Y. UEKUSA, K. KATO, K. KAIDA, M. MOTOYAMA, S. KUSUNOKI and S. SONNINO, "Anti-GM1/GD1a Complex Antibodies in GBS Sera Specifically Recognize the Hybrid Dimer GM1-GD1a," *Glycobiology* **22**, 352–360 (2012).

D. FUJITA, K. SUZUKI, S. SATO, M. YAGI-UTSUMI E. KURIMOTO, Y. YAMAGUCHI, K. KATO and M. FUJITA, "Synthesis of a Bridging Ligand with a Non-Denaturated Protein Pendant: Toward Protein Encapsulation in a Coordination Cage," *Chem. Lett.* **41**, 313–315 (2012).

K. TAKAGI, S. KIM, H. YUKII, M. UENO, R. MORISHITA, Y. ENDO, K. KATO, K. TANAKA, Y. SAEKI and T. MIZUSHIMA, "Structural Basis for Specific Recognition of Rpt1p, an ATPase Subunit of the 26 S Proteasome, by the Proteasome-Dedicated Chaperone Hsm3p," *J. Biol. Chem.* **287**, 12172–12182 (2012).

S. YAMAMOTO, Y. ZHANG, T. YAMAGUCHI, T. KAMEDA and K. KATO, "Lanthanide-Assisted NMR Evaluation of a Dynamic Ensemble of Oligosaccharide Conformations," *Chem. Commun.* **48**, 4752–4754 (2012).

Y. KAMIYA, Y. UEKUSA, A. SUMIYOSHI, H. SASAKAWA, T. HIRAO, T. SUZUKI and K. KATO, "NMR Characterization of the Interaction between the PUB Domain of Peptide:*N*-Glycanase and Ubiquitin-Like Domain of HR23," *FEBS Lett.* **586**, 1141–1146 (2012).

S. KIM, A. NISHIDA, Y. SAEKI, K. TAKAGI, K. TANAKA, K. KATO and T. MIZUSHIMA, "New Crystal Structure of the Proteasome-Dedicated Chaperone Rpn14 at 1.6 Å Resolution," *Acta Crystallogr., Sect. F: Struct. Biol. Cryst. Commun.* **68**, 517–521 (2012).

H. YAGI, K. ISHIMOTO, T. HIROMOTO, H. FUJITA, T. MIZUSHIMA, Y. UEKUSA, M. YAGI-UTSUMI, E. KURIMOTO, M. NODA, S. UCHIYAMA, F. TOKUNAGA, K. IWAI and K. KATO, "A Non-Canonical UBA-UBL Interaction Forms the Linear-Ubiquitin-Chain Assembly Complex," *EMBO Rep.* **13**, 462–468 (2012).

H. YAGI, S. WATANABE, T. SUZUKI, T. TAKAHASHI, Y. SUZUKI and K. KATO, "Comparative Analyses of *N*-Glycosylation Profiles of Influenza A Viruses Grown in Different Host Cells," *Open Glycoscience* **5**, 2–12 (2012).

N. SRIWILAIJAROEN, S. KONDO, H. YAGI, H. HIRAMATSU, S. NAKAKITA, K. YAMADA, H. ITO, J. HIRABAYASHI, H. NARIMATSU, K. KATO and Y. SUZUKI, "Bovine Milk Whey for Preparation of Natural *N*-Glycans: Structural and Quantitative Analysis," *Open Glycoscience* **5**, 41–50 (2012).

Y. ZHANG, S. YAMAMOTO, T. YAMAGUCHI and K. KATO, "Application of Paramagnetic NMR-Validated Molecular Dynamics Simulation to the Analysis of a Conformational Ensemble of a Branched Oligosaccharide," *Molecules* **17**, 6658–6671 (2012).

H. YAGI, T. SAITO, M. YANAGISAWA, R. K. YU and K. KATO, "Lewis X-Carrying *N*-Glycans Regulate the Proliferation of Mouse Embryonic Neural Stem Cells via the Notch Signaling Pathway," *J. Biol. Chem.* **287**, 24356–24364 (2012).

Y. UEKUSA, S. MIMURA, H. SASAKAWA, E. KURIMOTO, E. SAKATA, S. OLIVIER, H. YAGI, F. TOKUNAGA, K. IWAI and K. KATO, "Backbone and Side Chain ^{1}H, ^{13}C, and ^{15}N Assignments of the Ubiquitin-Like Domain of Human HOIL-1L, an Essential Component of Linear Ubiquitin Chain Assembly Complex," *Biomol. NMR Assignments* **6**, 177–180 (2012).

M. YAGI-UTSUMI, S. YOSHIKAWA, Y. YAMAGUCHI, Y. NISHI, E. KURIMOTO, Y. ISHIDA, T. HOMMA, J. HOSEKI, Y. NISHIKAWA, T. KOIDE, K. NAGATA and K. KATO, "NMR and Mutational Identification of the Collagen-Binding Site of the Chaperone Hsp47," *PLoS ONE* **7**, e45930 (2012).

D. FUJITA, K. SUZUKI, S. SATO, M. YAGI-UTSUMI, Y. YAMAGUCHI, N. MIZUNO, T. KUMASAKA, M. TAKATA, M. NODA, S. UCHIYAMA, K. KATO and M. FUJITA, "Protein Encapsulation within Synthetic Molecular Hosts," *Nat. Commun.* **3**, 1093 (2012).

T. FUJII, M. URUSHIHARA, H. KASHIDA, H. ITO, X. LIANG, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and H. ASANUMA, "Reversed Assembling of Dyes in an RNA Duplex Compared with Those in DNA," *Chem. –Eur. J.* **18**, 13304–13313 (2012).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. KATO, "Structural glycomic approaches to molecular recognition events on cell surfaces," *Biochemical Roles of Eukaryotic Cell Surface Macromolecules: 2011 ISCSM Proceedings (Advances in Experimental Medicine and Biology)*, P. R. Sudhakaran and A. Surolia, Eds., Springer Science+Business Media; New York, 15–32 (2012).

B-3) 総説，著書

K. KATO and Y. YAMAGUCHI, "Glycoproteins and antibodies: Solution NMR studies," in *Encyclopedia of Magnetic Resonance*, R. K. Harris and R. E. Wasylishen, Eds. John Wiley; Chichester, **3**, 1779–1790 (2012).

柳澤勝彦，松崎勝巳，加藤晃一,「アミロイド蓄積開始機構の解明と治療薬開発への展開」, ***最新医学*** **67**, 138–158 (2012).

加藤晃一,「タンパク質の翻訳後修飾の構造生物学研究」, ***薬学雑誌*** **132**, 563–573 (2012).

加藤晃一,「研究戦略YAKU学――研究現場から臨床へ――No.38創薬ターゲットとしての糖鎖」, ***薬事日報*** **11133**, 8 (2012).

Y. KAMIYA, T. SATOH and K. KATO, "Molecular and structural basis for *N*-glycan-dependent determination of glycoprotein fates in cells," *Biochim. Biophys. Acta, Gen. Subj.* **1820**, 1327–1337 (2012).

加藤晃一，矢木宏和,「バイオ／抗体医薬品における構造解析」,「バイオ／抗体医薬品の開発・製造プロセス」, **情報機構**, **173–183 (2012).**

加藤晃一，矢木宏和,「X線とNMRによる抗体解析」,「新機能抗体開発ハンドブック」, **浜窪隆雄監修**, **エヌ・ティー・エス**, **65–69 (2012).**

加藤明文，矢木宏和，加藤晃一，飯田　茂，中村和靖,「糖鎖制御による抗体医薬品の差別化」,「次世代医薬開発に向けた抗体工学の最前線」, **熊谷　泉監修**, **シーエムシー出版**, **144–149 (2012).**

加藤晃一，矢木宏和,「NMR法による抗体の高次構造」,「次世代医薬開発に向けた抗体工学の最前線」, **熊谷　泉監修**, **シーエムシー出版**, **275–283 (2012).**

B-4) 招待講演

K. KATO, "Protein dynamics in the ubiquitin-proteasome system," 4th Japan-Korea Seminar on Biomolecular Science-Experiments and Simulations, Nara, January 2012.

加藤晃一,「糖鎖の生命分子科学」, **基礎生物学研究所・生理学研究所・分子科学研究所ー名古屋工業大学　第4回合同講演会**, **岡崎**, **2012年1月.**

K. KATO, "Structural Basis for Improved Efficacy of Therapeutic Antibodies by Engineering of their Fc Glycans," Antibodies Asia 2012, Shanghai (China), February 2012.

加藤晃一,「糖鎖機能解明への分子科学的アプローチ」,山手イブニングセミナー, 岡崎, 2012年5月.

K. KATO, "Structural observations on sugar chains as protein extensions for functional promotion," 第12回日本蛋白質科学会年会, 名古屋, 2012年6月.

K. KATO, "Structural glycomics approaches for characterization of biotherapeutics and their application to atomic anatomy of antibodies," BioChina 2012, Shanghai (China), June 2012.

K. KATO, "Structural views of carbohydrate-protein interaction systems as potential therapeutic targets," The 26th International Carbohydrate Symposium (ICS2012), Madrid (Spain), July 2012.

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連関の探査」, 新学術領域研究「揺らぎと生体機能」平成24年度合同班会議, 作並, 2012年7月.

K. KATO, "High Resolution Analysis of Protein Glycosylation," 日本製薬工業協会バイオ医薬品委員会, 東京, 2012年9月.

加藤晃一,「ATP非依存性シャペロンの構造ダイナミクスと機能発現メカニズム」, 新学術領域研究「揺らぎと生体機能」「水和とATP」合同公開シンポジウム「ゆらぎと水――生命のエネルギーと機能の分子機構を探る」, 大阪, 2012年9月.

矢木真穂,「アミロイドβの構造転移と分子間相互作用」, 大阪大学蛋白質研究所セミナー・包括脳ネットワーク研究会第3回神経科学と構造生物学の融合研究会, 大阪, 2012年10月.

加藤晃一,「糖鎖改変による抗体医薬の機能向上の構造基盤」, 第4回糖鎖科学中部拠点研究会, 名古屋, 2012年10月.

K. KATO, "Structural biology of post-translational modifications of proteins," Seminar in Department of Biochemistry Yonsei University, Seoul (Korea), October 2012.

K. KATO, "NMR of glycoproteins," Pharmaceutical NMR Lecture Series in Osaka, Osaka, October 2012.

K. KATO, "Conformational dynamics and interactions of glycoconjugates of therapeutic interest," Commemorative Symposium on the 20th Anniversary of the Mizutani Foundation for Glycoscience, Tokyo, November 2012.

加藤晃一,「複合糖質の構造生物学：創薬標的としての糖鎖」, 第40回構造活性相関シンポジウム, 岡崎, 2012年11月.

加藤晃一,「生体分子の自己組織化プロセスの精密構造解析」, CREST「ナノ界面技術の基盤構築」研究領域第2回公開シンポジウム「ナノ界面が生み出す次世代機能」, 東京, 2012年12月.

K. KATO, "NMR Characterization of Conformational Fluctuations of Oligosaccharides and Glycoconjugates," 新学術領域研究「揺らぎと生体機能」第6回公開シンポジウム, 京都, 2012年12月.

加藤晃一,「複合糖質の立体構造・ダイナミクス・相互作用」, 第85回日本生化学会大会, 福岡, 2012年12月.

K. KATO, "High Resolution Analysis of Protein Glycosylation," CASSS CMC Strategy Forum Japan 2012, Tokyo, December 2012.

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「若手の力フォーラム」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1等賞 (2011).

山口拓実, 日本化学会第92春季年会優秀講演賞（学術）(2012).

Zhang Ying, 平成24年度総合研究大学院大学学長賞 (2012).

雲井健太郎, 第12回日本蛋白質科学会年会ポスター賞 (2012).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本バイオイメージング学会評議員 (1995–).

日本生化学学会評議員 (2002–).

日本糖質学会評議員 (2003–).

日本核磁気共鳴学会評議員 (2006–2012), 理事 (2008–2012).

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).

第51回NMR 討論会運営委員 (2012).

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 (2009–2011).

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–).

大阪大学蛋白質研究所「共同利用・共同研究」委員会超高磁場NMR 共同利用・共同研究専門部会委員 (2012–).

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」, 2012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」, 2012年.

理化学研究所, 客員研究員, 2009年 4月– .

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– .

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」, 2012年.

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」(計画研究),「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–2011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–).

科研費挑戦的萌芽研究,「分子シャペロン機能を有するシャトル型プロテアソーム活性化因子の同定と構造機能解析」, 加藤晃一 (2012年–).

科研費若手研究(B),「常磁性金属修飾糖鎖を用いた過渡的相互作用の動的観察」, 山口拓実 (2012年–).

科研費基盤研究(A),「糖鎖認識系を標的とする創薬を目指した複合糖質機能の構造基盤の解明と分子設計」, 加藤晃一 (2012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Fcγ受容体IIIaとの結合状態の構造解析」, 加藤晃一 (2012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 (2012年).

(株)豊田中央研究所,「耐熱性カビ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 (2012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 (2012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 (2012年).

C) 研究活動の課題と展望

生命システムを構成する多数の分子素子がダイナミックな集合離散を通じて細胞の機能を制御し, 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方策を引き続き模索する。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メカニズムを実験科学と計算科学の融合を通じて解明することを目指す。特に, 細胞表層にみられる糖脂質ラフトにみられるような, 弱い相互作用を通じて集合した流動性と運動性に富んだ超分子複合体に対して分子科学的アプローチを実施するための適切なモデル系の構築と方法論の開発に一層力を注ぐ。

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) 不斉サレン錯体による不斉エポキシ化活性種の研究

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) ヘムタンパク質の機能発現において軸配位子がどのような役割をもつかは，古くより興味がもたれ研究が行われているが，未だ明快な解答が得られていない問題の一つである。例えば，ペルオキシダーゼではヒスチジン由来のイミダゾレートが，カタラーゼではチロシン由来のフェノレート，さらにシトクロム P450 ではシステイン由来のチオレートが配位している。これらヘム酵素は，鉄４価オキソポルフィリン π －カチオンラジカル（Compound I）とよばれる共通の反応活性種を用いて反応することから，軸配位子は Compound I の電子構造や反応性を大きく変化させていると考えられていた。ところが，軸配位子がどういった機構で Compound I の反応性を制御しているのかという問題は，未解明のままであった。我々は，Compound I モデル錯体を用いてこの問題の解決をめざした。反応速度論的手法や種々の分光学的手法を組み合わせることにより，軸配位子は Compound I 自体をより活性にすることにより反応性を高めているのではなく，反応後に生成する鉄３価状態（resting state）の安定性を高めることにより Compound I の反応性を高めているというユニークな機構で制御していることを見いだした。

b) 遷移金属錯体を用いた不斉酸化反応は，天然物合成，医薬品合成などさまざまな合成反応において極めて重要な反応である。そのため，多くの不斉酸化反応を行う遷移金属錯体が開発されている。それらの中で不斉マンガンサレン錯体（Jacobsen 触媒）は，極めて有用性の高い錯体である。しかし，Jacobsen 触媒がどのような活性種を生成し，どのように不斉選択性を発現しているかは未解明の問題である。とりわけ，Jacobsen 触媒がほとんど平面的な構造であるにもかかわらずなぜ高い不斉選択性を示すのかは，多くの研究者が注目している点である。我々は，マンガン４価サレン錯体とヨードシルアレンとの反応により，ヨードシルアレン付加体の合成，単離に成功した。さらにこの錯体の構造解析にも成功した。結晶構造では，ヨードシルアレンの配位によりサレン配位子が平面から階段状に大きく構造変化し不斉な環境を作り出していることが明らかとなった。さらにこの錯体と種々のオレフィンとの反応を行い，ヨードシルアレン付加体が高原子価オキソ錯体を生成せず直接エポキシ化反応を行っていることを明らかにした。

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 π カチオンラジカル錯体（compound-I 錯体）を合成し，塩素イオンとの反応を研究した。プロトンの効果を解明するため，トリフルオロ酢酸存在下，compound-I 錯体と塩素イオンの反応を –90 度で行い，種々の分光法を用いて解析した。その結果，compound-I 錯体は塩素イオンと反応してメソクロロ鉄３価イソポルフィリン錯体に変化することを見いだした。さらにこの錯体は，

種々の有機化合物を塩素化することができることが明らかにした。これまでイソポルフィリンは不活性な錯体と考えられていたが，ポルフィリン環の置換基により活性化できることが証明された。

B-1) 学術論文

Z. CONG, S. YANAGISAWA, T. KURAHASHI, T. OGURA, S. NAKASHIMA and H. FUJII, "Synthesis, Characterization, and Reactivity of Hypochlorito-Iron(III) Porphyrin Complexes," *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 20617–20620 (2012).

Z. CONG, T. KURAHASHI and H. FUJII, "Formation of Iron(III) *Meso*-Chloro-Isoporphyrin as a Reactive Chlorinating Agent from Oxoiron(IV) Porphyrin π-Cation Radical," *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 4469–4472 (2012).

T. KURAHASHI and H. FUJII, "Comparative Spectroscopic Studies of Iron(III) and Manganese(III) Salen Complexes Having a Weakly-Coordinating Triflate Axial Ligand," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **85**, 940–947 (2012).

C. WANG, T. KURAHASHI and H. FUJII, "Structure and Reactivity of Iodosylarene Adduct of Manganese(IV) Salen Complex," *Angew. Chem., Int. Ed.* **51**, 7809–7811 (2012).

A. TAKAHASHI, D. YAMAKI, K. IKEMURA, T. KURAHASHI, T. OGURA, M. HADA and H. FUJII, "The Effect of the Axial Ligand on the Reactivity of the Oxoiron(IV) Porphyrin π-Cation Radical Complex: Higher Stabilization of the Product State Relative to the Reactant State," *Inorg. Chem.* **51**, 7296–7305 (2012).

T. SATO, S. NOZAWA, A. TOMITA, M. HOSHINO, S. KOSHIHARA, H. FUJII and S. ADACHI, "Coordination and Electronic Structure of Ruthenium(II)-*tris*-2,2'-Bipyridine in the Triplet Metal-to-Ligand Charge Transfer Excited State Observed by Picosecond Time-Resolved Ru *K*-Edge XAFS," *J. Phys. Chem. C* **116**, 14232–14236 (2012).

J. ZHU, T. KURAHASHI, H. FUJII and G. WU, "Solid-State ^{17}O NMR and Computational Studies of Terminal Transition Metal Oxo Compounds," *Chem. Sci.* **3**, 391–397 (2012).

B-4) 招待講演

H. FUJII, "Reactions of Oxoiron(IV) Porphyrin π-Cation Radicals with Chloride Ion," 40th International Conference on Coordination Chemistry, Valencia (Spain), September 2012.

H. FUJII, "^{13}C and ^{15}N NMR Spectroscopy of Heme-Bound Cyanide (^{13}C^{15}N) in Ferric Heme Peroxidases," 7th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines, Jeju (Korea), July 2012.

H. FUJII, "Control of Regioselectivity of Heme Oyxgenase by Reconstruction of Active Site," Japan-Korea Seminars on Biomolecular Sciences-Experiments and Simulations, Nara (Japan), January 2012.

藤井　浩,「生体内における常磁性金属イオンと有機ラジカルとの磁気的相互作用について」, 分子研研究会「レーザー分光および磁気測定による分子構造探求の新展開」, 岡崎, 2012年7月.

倉橋拓也,「不斉マンガンサレン触媒から生成する高原子価錯体の分光・磁気測定研究」, 分子研研究会「レーザー分光および磁気測定による分子構造探求の新展開」, 岡崎, 2012年7月.

藤井　浩,「鉄イオン含有酵素の反応中間体の電子構造と反応性について」, 北陸先端大, 能美市, 2012年3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」, 筑波大学, つくば市, 2012年1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).

T. KURAHASHI and H. FUJII, BCSJ Award Article (2012).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

酸化反応討論会幹事 (2011–).

学会の組織委員等

14th International Conference on Bioinorganic Chemistry, Local Committee (2009).

B-8) 大学での講義，客員

筑波大学大学院理学専攻化学研究科, 集中講義「無機分析化学特論」, 2012年1月24日–25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),「高原子価マンガンオ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る。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

秋　山　修　志（教授）（2012 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：生物物理学，時間生物学

A-2) 研究課題：

a) タンパク質時計が奏でる概日リズムの分子科学的解明

b) タンパク質時計のコヒーレント制御

c) X線溶液散乱とX線結晶構造解析を相補的に駆使した生体高分子の動的構造解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) X線小角散乱を始めとする各種分光法を用いて，時計タンパク質 KaiC の構造変化を捉えた。KaiC はドーナツを２つ積み上げたような２重のリング状構造をしており，片方のリングにある「周期を規定する ATPase」の制御状態と密に連動して，もう片方のリング半径が膨らんだり，縮んだりを繰り返す。このリズミカルな分子鼓動を蛍光分光法でリアルタイム計測することに成功した。

b) タンパク質時計の応答を大規模スクリーニングするための実験装置を独自開発した。今後，外乱の種類や時空間的パターンについて検証を深めることで，源振の特性が導き出されるものと期待される。

c) 散乱強度の規格化に用いる標準タンパク質の調製・品質管理法を確立することで，原点散乱強度を用いた分子量推定の精度や再現性を向上させることに成功した。また,生体高分子のX線溶液散乱計測に特化した８連セルを開発し，これによりデータ品質を損なうことなく実験時間を大幅に短縮することに成功した。

B-1) 学術論文

S. AKIYAMA, “Structural and Dynamic Aspects of Protein Clocks: How Can They Be So Slow and Stable?” *Cell. Mol. Life Sci.* **69**, 2147–2160 (2012).

B-3) 総説，著書

A. MUKAIYAMA, T. KONDO and S. AKIYAMA, “Visualization of circadian ticking of cyanobacterial clock protein KaiC in real time,” *SPring-8 Research Frontiers 2011*, 46–47 (2012).

B-4) 招待講演

秋山修志,「Kai タンパク質時計の源振の分子科学的解明に向けて」, 第１９回時間生物学会学術大会, 北海道大学, 2012 年 9 月.

秋山修志,「時計タンパク質のダイナミクス」, 放射光将来光源利用サイエンス若手シンポジウム, 東京大学, 2012 年 8 月.

秋山修志,「時計タンパク質 KaiC の概日性分子鼓動」, 第１２回日本蛋白質科学会年会, 名古屋国際会議場, 2012 年 6 月.

向山　厚，尾上靖弘，大迫政人，近藤孝男，秋山修志,「シアノバクテリア時計タンパク質 KaiC の ATPase に備わる自己抑制制御機構」, 第１２回日本蛋白質科学会年会, 名古屋, 2012 年 6 月.

向山　厚，近藤孝男，秋山修志,「シアノバクテリア時計タンパク質 KaiC が刻む概日リズム」, 第１２回日本蛋白質科学会年会, 名古屋, 2012年 6月.

秋山修志,「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～源振の分子科学的解明と新光源への期待～」, 第２５回日本放射光学会年会, 鳥栖市民文化会館, 2012年 1月.

S. AKIYAMA, “Circadian ticking of cyanobacterial clock protein KaiC in solution,” from Structure to Dynamics: For Our Understanding of Protein–Protein Interactions, Nagoya (Japan), March 2012.

S. AKIYAMA, “Tracking and Visualizing Intramolecular Feedback in Cyanobacterial Clock Protein KaiC,” The 12th KIAS Conference on Protein Structure and Function, Seoul (Korea), October 2012.

B-6) 受賞，表彰

S. AKIYAMA, The Protein Society Annual Poster Board Award (2002).

S. AKIYAMA, 2006 SAS Young Scientist Prize (2006).

秋山修志, 日本生物物理学会若手奨励賞 (2007).

秋山修志, 平成２０年度文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2008).

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 (2011–).

日本生物物理学会分野別専門委員 (2010, 2012).

学会の組織委員等

第１８回日本時間生物学会学術大会実行委員 (2011).

第１２回日本蛋白質科学会年会組織委員 (2012).

第５０回日本生物物理学会年会実行委員 (2012).

学会誌編集委員

日本生物物理学会「生物物理」会誌編集委員 (2009–2011).

日本結晶学会「日本結晶学会」会誌編集委員 (2010–2012).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究,「時間と共に離合集散を繰り返す分子機械のX線小角散乱・動的構造解析」, 秋山修志 (2005年–2009年).

科研費若手研究(B),「異常分散・X線小角散乱を利用した無配向生体高分子の２原子間距離計測」, 秋山修志 (2007年–2010年).

科研費若手研究(A),「時を生み出すタンパク質 KaiC における ATPase 自己抑制・温度補償機構」, 秋山修志 (2010年–2013年).

科研費挑戦的萌芽研究,「多チャンネル・セルを用いたハイスループットX線小角散乱」, 秋山修志 (2012年–2014年).

C)　研究活動の課題と展望

2012年 4月に当研究グループを立ち上げ，それより実験室や機器類の整備，グループ構成員の拡充など，研究体制の整備に注力してきた。同年9月に着任した向山厚助教および研究補助員らの努力により，シアノバクテリアの時計タンパク質が安定的に生産・精製されるようになった。これによって生物物理学，分光学，構造生物学といった幅広い方向への研究展開が可能となるため，試料の量と質が早い段階で担保されたことは非常に意義深い。

X線溶液散乱用に開発された8連セルは安定に稼働しており，実験データの収集が大幅に簡便化された。これによって計測以外の業務に割くことのできる時間が増し，現場での試料調製やデータ解釈が十分にできるようになった。次年度は，観測ポート数を劇的に増やした多チャンネル・セルを開発し，さらなる計測効率や精度の向上に貢献したい。

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) 赤外分光法によるチャネルロドプシンの光誘起構造変化の解明
d) 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
e) 哺乳動物カリウムチャネルタンパク質の赤外分光解析
f) 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
g) 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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 古細菌型ロドプシンの一種であるハロロドプシンは光駆動型塩化物イオンポンプである。今年度は光誘起の赤外差スペクトルを時分割計測し，各中間体形成時における水の O–H 伸縮振動の帰属に成功した。タンパク質内部で水素結合の相手がいない水分子の “ dangling bond ” の強度変化から，塩化物イオンの取込みと放出の際に，そのような水分子が増えることを明らかにした（Y. Furutani *et al., J. Phys. Chem. Lett.* **3**, 2964–2969 (2012)）。負電荷を持ったイオンがタンパク質内部で安定化される際に水分子が積極的に関与していることを示唆する結果である。
b) 表面増強赤外分光計測を膜タンパク質に適用するため，金薄膜の厚みの違いによる赤外吸収への影響を調べた。対象にはハロロドプシン試料を選び，タンパク質骨格の吸収を反映する amide I および amide II を観測した。その結果，厚みが 3~7 nm 程度では通常の吸収スペクトルが観測され，9~11 nm ではスペクトルに歪みが現れ，~20 nm においては正負が逆転したスペクトルを観測した。偏光子を用いた計測により，スペクトル形状の変化は s 偏光による影響であることを明らかにした（H. Guo *et al., Chem. Phys.* in press）。また，光誘起構造変化を観測するため，反応中間体の寿命が 1 sec 程度と長いセンサリーロドプシン 2 を用いた実験を行い，活性中間体形成に伴う赤外スペクトル変化の計測にも成功した。
c) チャネルロドプシンは，緑藻類に由来する光駆動型イオンチャネルである。本課題は，野生型チャネルロドプシン，ChR-1 及び ChR-2 から作成されたキメラチャネルロドプシン，ChR-Wide Receiver（ChRWR）と ChR-Fast Receiver（ChRFR）の分子機構を明らかにすることを目的とする。哺乳培養細胞で発現させた ChRWR 及び ChRFR を精製し，脂質二重膜に再構成した上で，全反射フーリエ変換赤外分光法を用いて，光定常状態での構造変化を解析した。ChRWR 及び ChRFR の赤外差スペクトルは非常によく似ているが，ChR-2 とはいくつかの点で異なることが分かった。ChR-1 部分が多く含まれるキメラタンパク質であるため，ChR-1 の構造変化は ChR-2 とは異なっていることが示唆される。
d) 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，これまでメラノプシンがどのような分子特性を持つことで体内時計の調節を担っているのかは不明であった。前年度に解析に成功した頭索類ナメクジウオのメラノプシンに加えて，今年度はマウスなど哺乳動物のメラノプシンについても哺乳培養細胞を用いて試料を大量調製することに成功した。現在各種メラノプシンについて，分子特性の類似点・相違点を生化学的・分光学的手法を用いて明らかにすることに取り組んでいる。

e) **イオンチャネルは，様々な細胞とりわけ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，個々のチャネルの特徴がどのように生み出されているのかなど，不明な点が残っている。今年度は，哺乳動物が持つ各種カリウムチャネルのうち，20 種類程度について哺乳培養細胞を用いた大量発現に取り組み，その内いくつかのチャネルタンパク質について大量調製に成功した。そして調製したイオンチャネルについて，カリウム存在条件とナトリウム存在条件との赤外差吸収スペクトルを測定することに成功した。その結果,既に赤外分光解析が進んでいるカリウムチャネル KcsA の結果**（Y. Furutani *et al*., *J. Phys. Chem. Lett*. **3**, 3806–3810 (2012)）**と類似する振動バンドを見いだした。**

f) **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，また濃度依存的なゲーティング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計測した。その結果，膜貫通ドメインに存在する Mg^{2+} 結合サイト（Mg1）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おり，またチャネルが開いた状態と閉じた状態で Mg1 サイトに存在するアスパラギン酸の配位状態が異なっていることが明らかになってきた。**

g) **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，顕微蛍光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た。現在，カルシウムと結合すると蛍光強度が増大する分子とカルシウムイオンとが高効率で混合されていることを蛍光顕微鏡で確認しており，蛍光相関関数を求めることによって反応時間の規格化を行っている。今後は蛍光標識した低収量生体試料（特に膜タンパク質）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たい。**

B-1) **学術論文**

K. KATAYAMA, Y. FURUTANI, H. IMAI and H. KANDORI, “Protein-Bound Water Molecules in Primate Red- and Green-Sensitive Visual Pigments,” *Biochemistry* **51**, 1126–1133 (2012).

H. ITO, M. SUMII, A. KAWANABE, Y. FAN, Y. FURUTANI, L. S. BROWN and H. KANDORI, “Comparative FTIR Study of a New Fungal Rhodopsin,” *J. Phys. Chem. B* **116**, 11881–11889 (2012).

Y. FURUTANI, K. FUJIWARA, T. KIMURA, T. KIKUKAWA, M. DEMURA and H. KANDORI, “Dynamics of Dangling Bonds of Water Molecules in *pharaonis* Halorhodopsin during Chloride Ion Transportation,” *J. Phys. Chem. Lett*. **3**, 2964–2969 (2012).

Y. FURUTANI, H. SHIMIZU, Y. ASAI, T. FUKUDA, S. OIKI and H. KANDORI, “ATR-FTIR Spectroscopy Revealed the Different Vibrational Modes of the Selectivity Filter Interacting with K^+ and Na^+ in the Open and Collapsed Conformations of the KcsA Potassium Channel,” *J. Phys. Chem. Lett*. **3**, 3806–3810 (2012).

B-4) **招待講演**

T. KIMURA, H. KANDORI and Y. FURUTANI, “Time-resolved infrared study on the light-driven chloride ion pump protein,” 4th Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Cultural Center of Todaiji Temple, Nara (Japan), January 2012.

T. KIMURA, S. DOUKI, R. ISHITANI, O. NUREKI and Y. FURUTANI, "Ion-selective mechanism of Mg^{2+} transporter MgtE studied by ATR-FTIR spectroscopy," 4th Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences, Nara (Japan), January 2012.

古谷祐詞,「赤外分光法でイオン輸送および情報伝達にはたらく膜タンパク質の構造変化を調べる方法」, 難治性疾患・統合創薬プロジェクト第9回セミナー , 立命館大学, 草津, 2012年1月.

古谷祐詞，清水啓史，浅井祐介，福田哲也，老木成稔，神取秀樹,「全反射赤外分光法によるK^+およびNa^+イオン結合に伴うKcsA イオン選択フィルターの構造変化解析」, 特定領域研究「高次系分子科学」第15回ミニ公開シンポジウム「イオンチャネル研究の現状とこれからについて考える」, 大阪大学, 吹田, 2012年1月.

古谷祐詞,「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」, 平成23年度「若手研究者による分野間連携プロジェクト」実績報告会, 分子科学研究所, 岡崎, 2012年2月.

古谷祐詞,「膜蛋白質の構造揺らぎと機能連関の解明に資する赤外分光計測法の開発」, 自然科学研究機構プロジェクト「脳神経情報の階層的研究」「機能生命科学における揺らぎと決定」合同シンポジウム, 岡崎コンファレンスセンター , 岡崎, 2012年2月.

古谷祐詞,「赤外分光法の膜タンパク質への適用〜過去・現在・未来〜」, 分子研研究会「次世代分子科学に向けた複合研究討論会」, 分子科学研究所, 岡崎, 2012年3月.

木村哲就,「生体分子反応の実時間観察を可能にする溶液混合装置の開発と応用例」, 2011年度技術課セミナー「フォトリソグラフィー技術の基礎と応用」, 分子科学研究所, 岡崎, 2012年3月.

Y. FURUTANI, "Ion-Protein Interactions Studied by ATR-FTIR Spectroscopy," The 16th East Asian Workshop on Chemical Dynamics, National Tsing Hua University, Hsinchu (Taiwan), April 2012.

古谷祐詞,「タンパク質のまちがい探し〜赤外吸収差スペクトル法とは?〜」, 大阪市立大学理学研究科セミナーシリーズ, 大阪市立大学, 大阪, 2012年4月.

Y. FURUTANI, "Ion-protein Interactions Studied by ATR-FTIR Spectroscopy," 17th Malaysian Chemical Congress (17MCC) 2012, Putra World Trade Centre, Kuala Lumpur (Malaysia), October 2012.

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).

古谷祐詞, 平成24年度分子科学研究奨励森野基金 (2012).

木村哲就, 5th International symposium on Nanomedicine, The Best Poster Award (2012).

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, 2012–2013).

日本生物物理学会分野別専門委員 (2010, 2011, 2012).

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 (2011–2012).

日本分光学会中部支部幹事 (2012).

日本生物物理学会分野別専門委員 (2012).（木村哲就）

学会の組織委員等

第15回レチナールタンパク質国際会議実行委員 (2012–2013).

学会誌編集委員

日本生物物理学会生物物理中部地区編集委員 (2007, 2010).

B-8) 大学での講義，客員

総合研究大学院大学物理科学研究科,「分子分光学」, 2012年7月11日.

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).

科研費挑戦的萌芽研究,「哺乳動物イオンチャネルの機能的発現と分子機構解析」, 古谷祐詞 (2012年–2013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–2010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).

B-11) 産学連携

ノバルティス科学振興財団研究奨励金,「部位特異的蛍光標識を用いたGタンパク質共役受容体の動的構造変化の解析」, 塚本寿夫 (2012年).

C)　研究活動の課題と展望

研究室を主催してから新たに開始した表面増強赤外分光計測に関する最初の論文を発表することができた(印刷中)。現在は，金薄膜に膜タンパク質を吸着させる向きをコントロールし，細胞質側と細胞外側との構造変化を選択的に検出することを試みている。また，今のところ光受容タンパク質に対して適用しているが，将来的には各種イオンチャネルなどにも適用の範囲を広げていきたい。タンパク質内部の水分子の構造変化を時分割計測する回転セルを装置開発室と共同で開発中である。水和量を極限にまで下げる必要があるため，フローセルを使うことはできない。1回の光反応で退色する試料や元の状態に戻るのに時間の掛かる試料に最適な計測系になるものと期待している。株式会社ユニソクと共同で開発した急速溶液混合装置による時分割赤外吸収計測については，進捗に遅れがあるが，来年度から本格的に実験を行う予定である。哺乳動物細胞による膜タンパク質の大量発現系が安定して稼働しており，チャネルロドプシン，メラノプシン，哺乳動物カリウムチャネルなど様々な挑戦的な研究対象に取り組んでいる。来年度には，それぞれの実験データから機能発現機構に迫る興味深い結論が得られるものと期待している。

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. M. A. YAMADA, S. M. SARKAR and Y. UOZUMI, “Self-Assembled Poly(imidazole-palladium): Highly Active, Reusable Catalyst at Parts per Million to Parts per Billion Levels,” *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 3190–3198 (2012).

Y. M. A. YAMADA, T. WATANABE, A. OHNO and Y. UOZUMI, “Development of Polymeric Palladium-Nanoparticle Membrane-Installed Microflow Devics and their Application in Hydrodehalogenation,” *ChemSusChem* **5**, 293–299 (2012).

Y. M. A. YAMADA, S. M. SARKAR and Y. UOZUMI, “Amphiphilic Self-Assembled Polymeric Copper Catalyst to Parts per Million Levels: Click Chemistry,” *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 9285–9290 (2012).

T. OSAKO, D. PANICHAKUL and Y. UOZUMI, “Enantioselective Carbenoid Insertion into Phenolic O–H Bonds with a Chiral Copper(I) Imidazoindolephosphine Complex,” *Org. Lett.* **14**, 194–197 (2012).

K. INAMOTO, C. HASEGAWA, K HIROYA, Y. KONDO, T. OSAKO, Y. UOZUMI and T. DOI, “Use of Dimethyl Carbonate as a Solvent Greatly Enhances the Biaryl Coupling of Aryl Iodides and Organoboron Reagents without Adding Any Transition Metal Catalysts,” *Chem. Commun.* **48**, 2912–2914 (2012).

B-3) 総説，著書

Y. UOZUMI, “Allylic and Aromatic Substitution Reactions,” in *Science of Synthesis Water in Organic Synthesis*, 511–534 (2012).

B-4) 招待講演

魚住泰広,「高分子担持 Pd 触媒を用いた水中有機合成」, 有機合成のニュートレンド２０１２, 大阪, 2012年12月.

Y. UOZUMI, “Recent Progress in the Suzuki-Miyaura Coupling: Green, Flow, Asymmetric Catalytic Systems,” 8th CRC International Symposium on Organometallics & Catalysis, Toronto (Canada), February 2012.

Y. UOZUMI, “NCN Pincer Palladium Complexes—Their Preparation via a Ligand Introduction Route and Their Catalytic Properties—,” Seminar at Faculty of Chemisty, Weizmann Institute of Science, Rehovot (Israel), April 2012.

Y. UOZUMI, “Amphiphilic Self-Assembled Polymeric Pd and Cu Catalysts: Suzuki-Miyaura Coupling and Huisgen Cycloaddition at ppm Levels,” The 6th CMDS Meeting on OMCOS 2012, Sokcho (Korea), September 2012.

魚住泰広,「遷移金属不斉触媒の革新と展開」, 第2回CSJ 化学フェスタ 2012, 東京, 2012年10月.

Y. UOZUMI, “Amphiphilic Self-Assembled Polymeric Pd and Cu Catalysts: Suzuki-Miyaura Coupling and Huisgen Cycloaddition at ppm Levels,” The 2nd Korea Forum on Organic Chemistry, Seoul (Korea), November 2012.

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・サスティナブル・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).

浜坂　剛, 第1回「名古屋大学石田賞」(2012).

大迫隆男, 有機合成化学協会研究企画賞 (2012).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

地球環境産業技術研究機構（RITE）技術評価分科会委員会 (2002–2004).

コンビナトリアル・ケミストリー研究会代表幹事 (1998–2009).

有機合成化学協会支部幹事 (1998–).

学会の組織委員等

名古屋メダル実行委員 (2000–).

International Conference on Organic Synthesis 実行委員 (2002–2004).

IUPAC meeting “Polymer in Organic Chemistry 2006” 実行委員 (2004–2006).

OMCOS 14 組織委員 (2006–2007).

触媒学会創設50周年記念国際シンポジウム組織委員 (2007–).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会第 116 委員会委員 (1998–).

日本学術振興会科学研究費補助金第一次審査員 (2002–2006).

科学振興調整費審査委員 (2003–2004).

振興調整費「新機能材料開発に資する強磁場固体NMR」研究運営委員 (2004–2007).

学会誌編集委員

日本化学会速報誌編集委員 (2001–2002).

SYNLETT 誌アジア地区編集主幹 (2002–).

Tetrahedron Asymmetry 誌アドバイザリーボード (2002–).

SYNFACTS 誌編集委員 (2005–).

ACS Combinatorial Science 誌エディトリアルアドバイザリーボード (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・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発プロジェクト　研究チームリーダー (2008–2012).

B-8) 大学での講義，客員

大阪大学産業科学研究所, 客員教授, 2012 年 4 月 1日–6 月 30日.

日本大学大学院総合基礎科学研究科,「次世代のクリーン化学合成を実現する高分子担持触媒の創製」, 2012 年 12 月 6日.

B-9) 学位授与

武藤　翼,「両親媒性ピンサー型パラジウム錯体から成るベシクル触媒の創製と水中有機分子変換反応への応用」, 2012 年 3 月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

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).

経済産業省・戦略的技術開発グリーンサスティ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–).
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 (2012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ー炭素結合形成を経る多段階有機合成の全工程・全操作を有機溶剤を全く用いずに実現しつつある。その過程で従来の有機合成手法では獲得し得ない疎水性相互作用に立脚した新規な反応駆動概念を提案することができた。特に均一触媒系でさえ未開拓であった高立体選択的不斉Suzuki カップリング反応を水中不均一で達成したことは大きな成果である。またナノパラジウム粒子の高分子マトリクス内での発生・分散と固定化に成功し,アルコール酸化やハロゲン化芳香族の脱ハロゲン反応など, グリーン化学の中心課題を解決してきた。他の金属種(W, Ru, Rh, Cu)に適用範囲を拡張しつつある。今後さらに基礎科学的論証を重ねる予定である。さらに金属架橋高分子の自己集積触媒の開発に注力しつつあり, マイクロ流路内の層流界面での自己集積錯体触媒膜の創製に成功した。

独自に開発した高立体選択的不斉ユニットであるpyrroloimidazolone 骨格ならではの有効な利用を推進しつつあり, 上述の水中不斉触媒プロセスの達成に加えて, 新しいピンサー型錯体触媒の設計・開発に至っている。その過程で見いだした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月に終了した。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し育てる研究に注力しており, 幾つかの新機軸候補課題の中から大きな発展に繋がる新課題を見いだしたいと考えている。現状の環境・活力を維持する上で今こそ従来以上の基礎的学術研究への集中こそが重要である。

錯体物性研究部門

田　中　晃　二（教授）（1990 年 3 月 16 日～ 2012 年 3 月 31 日）*)

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) 水の 4 電子酸化反応における酸素－酸素形成過程の機構解明。

B-1) 学術論文

B. COHEN, D. POLYANSKY, P. ACHORD, D. CABELLI, J. MUCKERMAN, K. TANAKA, R. THUMMMEl, R. ZONG and E. FUJITA, “Steric Effects for Proton, Hydrogen-Atom, and Hydride Transfer Reactions with Geometric Isomers of NADH-Model Ruthenium Complexes,” *Faraday Discuss.* **155**, 129–144 (2012).

T. WADA, H, OHTSU and K. TANAKA, “Catalytic Four-Electron Oxidation of Water via Intramolecular Coupling of the Oxo Ligands of Bis(ruthenium-bipyridine) Complex,” *Chem. –Eur. J.* **18**, 2374–2381 (2012).

S. K. PADHI and K. TANAKA, “Photo- and Electrochemical Redox Behavior of Ru(II) Complexes Having Cyclometalated 3-Phenylbenzo[*b*][1,6]naphthyridine (phbn) Ligand,” *Inorg. Chem.* **51**, 5386–5392 (2012).

H. OHTSU and K. TANAKA, “Drastic Difference in the Photo-Driven Hydrogenation Reactions of Ruthenium Complexes Containing NAD Model Ligands,” *Chem. Commun.* **48**, 1796–1798 (2012).

K. TANAKA, H. ISOBE, S. YAMANAKA and K. YAMAGUCHI, “Similarities of Artificial Photosystems by Ruthenium Oxo Complexes and Native Water Splitting Systems between Artificial and Native Water Splitting Systems,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **109**, 15560–15564 (2012).

S. PADHI, R. FUKUDA, M. EHARA and K. TANAKA, “Comparative Study of C^N and N^C Type Cyclometalated Ruthenium Complexes with an NAD^+/NADH Function,” *Inorg. Chem.* **51**, 8091–8102 (2012).

S. PADHI, R. FUKUDA, M. EHARA and K. TANAKA, “Photoisomerization and Proton-Coupled Electron Transfer (PCET) Promoted Water Oxidation by Mononuclear Cyclometalated Ruthnium Catalysts,” *Inorg. Chem.* **51**, 5386–5392 (2012).

H. OHTSU and K. TANAKA, “An Organic Hydride Transfer Reaction of a Ruthenium NAD Model Complex Leading to Carbon Dioxide Reduction,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **51**, 9792–9795 (2012).

B-4) 招待講演

田中晃二,「錯体触媒による水の酸化反応」, 光合成シンポジウム, 東京, 2011 年 2 月.

B-6) 受賞，表彰

田中晃二, 日本化学会学術賞 (1999).

田中晃二, 錯体化学会賞 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

地球環境関連研究動向の調査化学委員会委員 (1990–1993).

錯体化学会事務局長 (1990–2008).

錯体化学会会長 (2008–).

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).

経済産業省委託研究,「ソーラー水素製造プロセス技術開発（革新的光触媒）」, 田中晃二 (2012年度–2014年度).

C)　研究活動の課題と展望

遷移金属上での一酸化炭素と求核試薬との反応は有機合成の最も重要な素反応の一つである。二酸化炭素は金属－η^1－CO_2錯体を形成させると速やかに金属－CO 錯体に変換可能であるが，二酸化炭素還元条件下では金属－CO 結合の還元的開裂のためにCO が発生する。したがって，二酸化炭素を有機合成のC1源とするためにはCO_2由来の金属－CO 結合を開裂させることなく各種の試薬と反応させる方法論の開発にかかっている。還元型の配位子をCO_2還元の電子貯蔵庫として使用するのみならず金属－CO 結合へのヒドリドの供給により，金属－CO 結合の還元を目指している。さらにCO_2 の多電子還元反応は，電気エネルギーから化学エネルギーへの変換手段としても大きな期待がかけられる。

金属アクア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，酸素原子上に不対スピンを有するオキシルラジカル金属錯体が生成する。オキシルラジカル金属錯体を経由する水および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。

＊）2012 年 3 月 31 日退職

2012 年 4 月 1 日京都大学物質－細胞統合システム拠点特任教授

村　橋　哲　郎（教授）（2012 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：錯体化学，有機金属化学

A-2) 研究課題：

a) 一次元金属鎖サンドイッチ錯体の創成と性状解明

b) 二次元金属シートサンドイッチ錯体の創成と性状解明

c) 高反応性パラジウム錯体およびパラジウムクラスターの反応性解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 一次元金属鎖サンドイッチ錯体内で金属鎖がレドックス誘起により可逆的に分裂することを発見。また，平行に配置された π 一配位子間で可逆的に C–C 結合形成を起こすことも発見。

b) サンドイッチ構造内に Pd_2Pt，および $PdPt_2$ 組成を持つ混合金属コアを固定することに初めて成功。

c) 高い反応活性を持つ二核 Pd–Pd 結合種がアレーン類に二核付加反応を起こすことを発見。

B-1) 学術論文

T. MURAHASHI, K. SHIRATO, A. FUKUSHIMA, K. TAKASE, T. SUENOBU, S. FUKUZUMI, S. OGOSHI and H. KUROSAWA, “Redox-Induced Reversible Metal Assembly through Translocation and Reversible Ligand Coupling in Tetranuclear Metal Sandwich Frameworks,” *Nat. Chem.* **4**, 52–58 (2012).

T. MURAHASHI, K. USUI, Y. TACHIBANA, S. KIMURA and S. OGOSHI, “Selective Construction of Pd_2Pt and $PdPt_2$ Triangles in a Sandwich Framework: Carbocyclic Ligands as Scaffolds for a Mixed-Metal System,” *Chem. –Eur. J.* **18**, 8886–8890 (2012).

B-3) 総説，著書

村橋哲郎,「新しいサンドイッチ化合物群の誕生――点から線，面へと金属をつなげる――」, *現代化学* 42–46 (2012).

B-4) 招待講演

村橋哲郎,「金属鎖および金属シートを持つサンドイッチ化合物の創製」, 東京大学大学院工学研究科応用化学談話会, 東京, 2012 年 3 月.

村橋哲郎,「サンドイッチ化合物の新展開」, 分子研研究会, 岡崎, 2012 年 3 月.

T. MURAHASHI, “Redox-Switchable Metal Assembling and Ligand Coupling in Tetranuclear Palladium Sandwich Frameworks,” The 9th Japan-China Joint Symposium on Metal Cluster Compounds, Fukuoka (Japan), August 2012.

村橋哲郎,「サンドイッチ化合物の化学――単核から多核への展開」, 東京工業大学理工学研究科応用化学専攻セミナー, 東京, 2012 年 11 月.

村橋哲郎,「サンドイッチ化合物の構造次元性拡張」, 第 43 回中部化学関係学協会支部連合秋季大会, 名古屋, 2012 年 11 月.

T. MURAHASHI, “Chemistry of Dimensionally Extended Sandwich Compounds,” RIKEN International Symposium on Frontiers of Organometallic Chemistry, Saitama (Japan), November 2012.

B-6) 受賞，表彰

村橋哲郎, 日本化学会進歩賞 (2007).

村橋哲郎, 錯体化学会研究奨励賞 (2007).

村橋哲郎, 文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2008).

村橋哲郎, 有機合成化学協会研究企画賞 (2008).

村橋哲郎, Royal Society of Chemistry (RSC), Dalton Lectureship Award (2010).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

錯体化学会副事務局長 (2012–).

錯体化学会理事 (2012–).

文部科学省，学術振興会，大学共同利用機関等の委員等

文部科学省学術審議会専門委員会科研費審査委員 (2009–).

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,「応化特論第一」, 2012年後期.

総合研究大学院大学物理科学研究科,「錯体物性化学」, 2012年後期.

B-10) 競争的資金

科研費特定領域研究（公募研究),「π －電子空間における金属原子集合体の形成と構造制御」, 村橋哲郎 (2005年).

科研費若手研究(B),「シート状2次元パラジウム骨格を持つ有機パラジウム錯体の創製」, 村橋哲郎 (2005年–2006年).

大阪大学FRC若手研究者育成プログラム,「サンドイッチ型二次元単層金属シート化合物の創出」, 村橋哲郎 (2005年).

科学技術振興機構さきがけ研究,「炭素鋳型法による低次元性ナノ金属集合体のビルドアップ型創製」, 村橋哲郎 (2005年–2009年).

科研費特定領域研究（計画研究),「遷移金属多核錯体の高精度金属核配列制御」, 村橋哲郎 (2006年–2009年).

科研費若手研究(B),「メタロセン型パラジウムクラスター分子の創製および反応性」, 村橋哲郎 (2007年–2008年).

住友財団基礎科学助成,「拡張π －共役炭素間に固定された多核金属種の動的集合性及び反応性の解明」, 村橋哲郎 (2009年–2010年).

科学技術振興機構さきがけ研究,「光化学的手法による天然有機色素の金属バインディング機能創出」, 村橋哲郎 (2010年–2013年).

科研費挑戦的萌芽研究,「メタロセン型異種混合金属クラスターの創製」, 村橋哲郎 (2011年–2012年).

徳山科学技術振興財団研究助成,「メタロセン型後周期遷移金属クラスター触媒の開発」, 村橋哲郎 (2012年–2013年).

科研費若手研究(A),「後周期遷移金属を用いたメタロセノイドクラスターの創製と反応解明」, 村橋哲郎 (2012年–2014年).

C)　研究活動の課題と展望

これまでにない結合様式を持つ新たな分子群の存在を実証することは，化学研究における源流に位置づけられ，ここから新たな発展が導かれる。我々の研究グループではこれを最重要課題の一つとして位置づけ，独自の分子設計指針に基づく新有機金属化合物群の実証・創成研究を進めている。特に，新しいサンドイッチ化合物群の創出に力を入れている。2つの不飽和炭化水素類がそのπ－電子を用いて金属に配位することにより生じるサンドイッチ錯体は，代表的な有機金属化合物群の一種である。しかし，従来の概念では，安定サンドイッチ分子の構造内に固定できる金属原子の数は1つまたは2つに制限されると考えられてきた。これに対して，我々の研究グループでは，新しい錯体合成法を開発し，多数の金属原子からなる金属集合体がサンドイッチ分子内に形成･固定され，安定な分子を与えることを初めて発見している（*Science*, 2006 など）。この発見を契機として，様々なサイズ・形状を持つ多核サンドイッチ化合物が得られることを明らかにしてきており，多核サンドイッチ化合物は広く存在しうる一般性の高い新分子群であることが判明しつつある。今後，合成研究をさらに展開していくことで，オリゴマーサイズやポリマーサイズのサンドイッチ化合物が存在することを実証できる可能性がある。また，適用できる金属元素の種類を増やす検討も必要である。一方，多様な種類の多核サンドイッチ化合物が入手できるようになってきたため，多核サンドイッチ化合物の基本的物性や反応性の解明にも着手できるようになってきた。既に，いくつかの興味深い内部構造変化挙動を明らかにしており，本年に論文発表したレドックス誘起による金属鎖の可逆的分裂挙動もそのひとつである（*Nat. Chem.*, 2012）。多核サンドイッチ化合物は今後も新現象を示す可能性があり，その全貌を明らかにしていくことを目指していく。また，我々のグループでは均一系で取り扱うことのできる反応活性 Pd–Pd 結合錯体を合成することに成功しており，その反応機構についての研究を進めている。特に，ここ数年は，アレーン類とパラジウムクラスターとの配位結合様式および変換パターンの解明を進めている。パラジウムとアレーン類との結合相互作用は弱いため，これまでその配位結合様式は詳しく理解されていなかったが，これを解明できる可能性がある。

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) プロトン共役電子移動を利用した多電子移動反応

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の解明に取り組んだ。触媒と酸化剤の高速混合により得られる紫外可視吸収スペクトルの経時変化を特異値分解することにより，反応中間体と考えられる有意なスペクトル成分を得ることに成功した。その結果は，DFT/TDDFT 計算によるスペクトル予測とも一致した。以上より，触媒の３電子酸化体を経由した機構で反応が進行していることが判明した。

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，水溶液中における電子・プロトン授受プロセスの制御を試みた。一例として，２電子２プロトンの授受が可能なルテニウム－アクア部位と，同じく２電子２プロトンの授受が可能な 2,2’- ビイミダゾールを組み合わせたルテニウム錯体を合成することにより，水溶液中，電荷の増減を伴わない四電子移動反応を実現させることに成功した。このような多電子移動反応は，人工光合成などのエネルギー貯蔵技術に応用可能である。

c) 金属錯体の界面配列に挑戦した。具体的には，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，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を構築することに成功した。

B-1) 学術論文

M. OKAMURA, M. YOSHIDA, R. KUGA, K. SAKAI, M. KONDO and S. MASAOKA, “A Mononuclear Ruthenium Complex Showing Multiple Proton-Coupled Electron Transfer toward Multi-Electron Transfer Reactions,” *Dalton Trans.* **41**, 13081–13089 (2012).

M. KOBAYASHI, S. MASAOKA and K. SAKAI, “Photoinduced Hydrogen Evolution from Water Based on a Z-Scheme Photosynthesis by a Simple Platinum(II) Terpyridine Derivative,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **51**, 7431–7434 (2012).

M. KOBAYASHI, S. MASAOKA and K. SAKAI, “Synthesis, Crystal Structure, Spectroscopic and Electrochemical Properties, and H_2-Evolving Activity of a New $[PtCl(terpyridine)]^+$ Derivative with Viologen-Like Redox Properties,” *Dalton Trans.* **41**, 4903–4911 (2012).

H. A. E.-GHAMRY, K. SAKAI, S. MASAOKA, K. Y. E.-BARADIE and R. M. ISSA, “Preparation, Characterization, Biological Activity and 3D Molecular Modeling of Mn(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Pd(II) and Ru(III) Complexes of Some Sulfadrug Schiff Bases,” *Chin. J. Chem.* **30**, 881–890 (2012).

H. A. E.-GHAMRY, K. SAKAI, S. MASAOKA, K. Y. E.-BARADIE and R. M. ISSA, "Synthesis and Characterization of Self-Assembled Coordination Polymers of N-Diaminomethylene-4-(3-formyl-4-hydroxy-phenylazo)-benzenesulfonamide," *J. Coord. Chem.* **65**, 780–794 (2012).

W.-W. YANG, Y.-W. ZHONG, S. YOSHIKAWA, J.-Y. SHAO, S. MASAOKA, K. SAKAI, J. YAO and M. HAGA, "Tuning of Redox Potentials by Introducing a Cyclometalated Bond to Bis-Tridentate Ruthenium(II) Complexes Bearing Bis(Nmethylbenzimidazolyl)benzene or -pyridine Ligands," *Inorg. Chem.* **51**, 890–899 (2012).

A. KIMOTO, K. YAMAUCHI, M. YOSHIDA, S. MASAOKA and K. SAKAI, "Kinetics and DFT Studies on Water Oxidation by Ce^{4+} Catalyzed by $[Ru(terpy)(bpy)(OH_2)]^{2+}$," *Chem. Commun.* **48**, 239–241 (2012).

K. KUROIWA, M. YOSHIDA, S. MASAOKA, K. KANEKO, K. SAKAI and N. KIMIZUKA, "Self-Assembly of Tubular Microstructures from Mixed-Valence Metal Complexes and their Reversible Transformation via External Stimuli," *Angew. Chem., Int. Ed.* **51**, 656–659 (2012).

B-3) 総説，著書

正岡重行,「金属錯体を用いた水の酸化と人工光合成への挑戦」, *化学工業* **63**, 646–652 (2012).

吉田将己，正岡重行,「錯体型人工光合成へ向けて！――金属錯体触媒による酸素発生反応に新展開」, *月刊「化学」* **67(6)**, 12–16 (2012).

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」, 第43回中部化学関係学協会支部連合秋季大会, 名古屋工業大学, 2012年11月.

正岡重行,「植物から学べ！　人工光合成」, 分子科学研究所一般公開, 岡崎コンファレンスセンター, 2012年10月.

正岡重行,「金属錯体を触媒とする水の酸化反応」, 神奈川R&D推進協議会技術討論会, 旭硝子株式会社中央研究所, 2012年10月.

S. MASAOKA, "Water Oxidation Catalyzed by Mononuclear and Multinuclear Metal Complexes," Environmental Issues and Challenges: Toward Breakthrough by Bioinorganic Chemistry, 62nd JSCC Symposium, University of Toyama (Japan), September 2012.

S. MASAOKA, "A Mononuclear Ruthenium Complex Showing Multiple Proton-Coupled Electron Transfer toward Multi-Electron Transfer Reactions," Inorganic Photophysics and Photochemistry—Fundamentals and Applications: Dalton Discussion 13, University of Sheffield, Sheffield (U.K.), September 2012.

S. MASAOKA, "Water Oxidation Catalyzed by Mononuclear Ruthenium Complexes: Effect of Cerium(IV) Ion as a "Non-Innocent" Oxidant," 9th Japan-China Joint Symposium on Metal Cluster Compounds, Hilton Fukuoka Sea Hawk (Japan), August 2012.

正岡重行,「ヘキサアザトリフェニレン(HAT)から学んだこと」, エキゾチック分子集合体の新展開, 北海道大学学術交流会館, 2012年8月.

S. MASAOKA, "Water Oxidation Catalyzed by Mononuclear Ruthenium Complexes: Effect of Cerium(IV) Ion as a "Non-Innocent" Oxidant," 2nd International Conference on Molecular and Functional Catalysis (ICMFC-2), Biopolis (Singapore), July 2012.

S. MASAOKA, “Reaction Mechanism and Activity Enhancement of Water Oxidation by Mononuclear Ruthenium Catalysts: Effect of Cerium(IV) Ion as a Non-Innocent Oxidant,” 95th Canadian Chemistry Conference and Exhibition, Calgary (Canada), May 2012.

S. MASAOKA, “Paradigm Shift in Water Oxidation,” Workshop on Novel Catalytic Systems and Innovative Nanomaterials, Institute for Molecular Science (Japan), April 2012.

正岡重行,「金属錯体を用いた水の酸化と人工光合成への挑戦」, 日本化学会第９２春季年会特別企画講演, 慶応大学日吉キャンパス, 2012年3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９２春季年会若い世代の特別講演会, 慶応大学日吉キャンパス, 2012年3月.

正岡重行,「錯体における光酸化還元の基礎」, 第1回人工光合成基礎セミナー, 東京大学本郷キャンパス, 2012年3月.

正岡重行,「金属錯体を触媒とする酸素発生反応」, 大阪市立大学複合先端研究機構年次総会, 大阪市立大学, 2012年3月.

S. MASAOKA, “Chemistry of Transition Metal Complexes for Artificial Photosynthesis,” The 4th Winter School of Asian-Core Program, Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing (China), February 2012.

正岡重行,「人工光合成を志向した金属錯体化学」, 基生研・生理研・分子研−名工大 合同講演会, 岡崎コンファレンスセンター, 2012年1月.

B-6) 受賞, 表彰

近藤美欧, 第5回資生堂女性研究者サイエンスグラント (2012)

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

科学技術振興機構先導的物質変換領域,「超分子クラスター触媒による水を電子源としたCO_2還元反応系の構築」, 近藤美欧 (2012年–2017年).

科研費挑戦的萌芽研究,「二次元反応場への金属錯体集積と水を基質とする革新的多電子物質変換」, 正岡重行 (2012年–2013年).

科研費若手研究(B),「高効率触媒界面の構築を目指した錯体プラットフォームの開発」, 近藤美欧 (2012年–2013年).

第5回資生堂女性研究者サイエンスグラント,「界面電子移動プログラミングによる水の完全光分解系の構築」, 近藤美欧 (2012年–2013年).

学融合推進センター公募研究事業事業枠③女性研究者支援,「界面電子移動反応を利用した水の完全光分解システムの創成」, 近藤美欧 (2012年).

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)」,「有機ー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,「鉄ー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–π 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, ①水を四電子酸化して電子を取り出す反応系の構築, ②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, ③水中プロトンの活性化と反応性制御, ④水中ラジカル形成と反応性制御, ⑤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。

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 UVSOR に関して Adam Hitchcock 教授（McMaster University, Canada）に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り，また現在 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 2012 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，また国際性，世界における研究の位置づけなどの現状などを分析していただいた。Fleming 教授による研究所全 PI のヒヤリングと評価が 2010 年度，2011 年度と含めて完了した。Fleming 教授の評価，提言は，本 7 章にレポートとして掲載してある。

また Adam Hitchcock 教授は軟Ｘ線分光の分子科学研究の権威である。10 月初旬に UVSOR に関係する全研究グループのヒヤリングを行い，またすべての BL の設備の状況を評価していただき，特に UVSOR 光顕微分光装置の立ち上げに多大のアドバイスを頂いた。

Hitchcock 教授の UVSOR 施設の評価は（１）所内グループが所内専用 BL で新しい分子科学の研究分野を切り開くスタイルは，国際的にも他にない UVSOR の大きな強みであること，（２）その特徴をさらに強化すべく，所内グループを増強すべきであり，（３）UVSOR 単独ではなく所内の各種装置も併用できる研究環境を生かした国際共同プログラムを戦略的に進めるべきであり，（４）UVSOR のようなリング型放射光源は時間分解実験に向いていないが，所内のレーザー利用研究者と協力して，時間分解の実験を手がけるべきであることなど，具体的で建設的な提言を頂いた。

これらの評価以外にも，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 2012 年４月に行い，研究顧問の柳田敏雄特任教授にも参加いただき，研究の評価と将来の方向に対する提言を頂いた。

（大峯　巖）

7-1　研究顧問による点検評価

7-1-1　Graham R. Fleming 研究顧問

原文

Report to the Director General of IMS Visit October 2012

This visit concerned progress in hiring top quality new young faculty and a brief discussion of the detailed report on UVSOR written by Adam Hitchcock. A brief discussion of IMS's international impact was held with Dr. Ohmine.

I was impressed by all the new faculty. They all have broad and compelling research programs and for the most part were impressively mature in their scientific thinking and multi-pronged approaches to their research. I very much hope this type of hiring can continue, as the energy and interactiveness these young scientists bring will help to revitalize the Institute. A problem, discussed in previous reports, of bringing their groups up to critical mass quickly will influence the impact of their research, particularly in the international context. I strongly recommend that the Institute facilitate efforts to bring in top quality students and postdoctoral researchers, perhaps by advertisement, holding 'open house' at IMS, and whatever strategies may be appropriate in the local context.

I received interesting descriptions of projects in the synthetic chemistry of multinuclear sandwich compounds, on molecular electronics and on advanced optical methods to study fundamental questions of quantum mechanics. The first two projects are from new full professors at IMS and are very encouraging for the future of the Institute.

I now turn to a more difficult topic. I believe that the existing policy on promotion from Associate to Full Professor at IMS needs updating. I fully understand that any potential change in protocol needs full and careful consideration. However I am persuaded that the long-term impact of these exciting young researchers on IMS would be greater if they knew that, were they to be highly successful, they could plan for a long-term career at IMS. This vesting in the future of the Institute will make them more willing to take on tasks that benefit the Institute as a whole and in shaping IMS's future. Such efforts might include leading proposals to bring important new research centers or initiatives to IMS, for example.

The report on UVSOR was very comprehensive, despite having only a single author. It was very encouraging to see that the majority of the beamlines were at the state of the art and that a series of upgrades has been successfully completed. The opportunities for increasing international participation in UVSOR as a result of the shutdown of NSLS at Brookhaven and the limited number of initial beamlines at NSLS II were briefly discussed. To capitalize on this opportunity, a process to review and selectively accept proposals from international users is needed. I strongly support the development of new light source techniques at UVSOR and through international collaborations.

A discussion, necessarily preliminary because of incomplete facts, of the international standing and impact of IMS was held with Director General Ohmine. Based on the available information, IMS compares well with good US Chemistry departments in citations per paper, being less cited only than Berkeley and Harvard, the top two ranked chemistry departments in the US. To follow on, I suggest that the Director General assign a senior faculty member to assemble a sensible set of quantitative measures—perhaps based

on the Shanghai Jioaotong World University Rankings Methodology (http://www.shanghairanking.com/ARWU-Methodology-2012.html). A full discussion of the results of this analysis with senior IMS faculty in Autumn 2013 could prove very valuable for planning purposes.

訳文

G. Fleming 教授 評価レポート（2012 年 10 月訪問）

今回の訪問においては，優秀な若手教員の新たな採用状況の進展具合，及び Adam Hichcock による UVSOR の詳細な評価レポートに関して議論した。また，分子研の国際的な影響力に関しても，大峯所長と議論を行った。

新たに採用されたすべての教員には，感銘を受けた。彼らは皆，広範で説得力のある研究テーマに取り組んでおり，彼らの科学的思考や研究に対する多面的な取組方は，印象的なくらい賢明である。彼らのような若手科学者がもたらす情熱と相互作用は，研究所に活力をもたらす助けとなるものであるので，今回のような教員採用が継続されることを大いに望むものである。前回の評価レポートでも指摘したように，彼らの研究グループの規模を十分な大きさにまで速やかに拡大することができるか否かは，特に国際的な状況における彼らの研究のインパクトに大きな影響を及ぼすであろう。研究所が，最良の学生や博士研究員を獲得する努力を，広報活動，研究所のオープンハウスなどのほか，適当と思われるいかなる戦略でも用いることにより，促進することを強く勧めるものである。

多核サンドイッチ化合物を対象とした合成化学，分子エレクトロニクス，及び量子力学の根源的な問題に取り組むための先端的光学的実験手法に関する研究プロジェクトに関して，興味深い説明を受けた。これらのうち，最初の二つのプロジェクトは新たに採用された二人の教授によるものであり，研究所の将来にとっても大変に心強いものである。

ここで, 難しい問題について論点を移したい。私は, 准教授から教授への昇進を禁止している分子研の現在の方針は, 見直すべきであると思う。方針の重大な変更については，十分に注意深く検討する必要があることは理解している。しかしながら，もし若手研究者が高いレベルで充分な業績をあげれば，分子研において長期の研究キャリアを過ごすことができるということになれば，優秀な若手研究者が分子研に及ぼす長期的なインパクトは，より一層大きくなるであろうことを，私は確信している。研究所において将来的に内部昇進できるとなれば，若手研究者達は，研究所全体に利益をもたらす業務や，分子研の将来計画策定等にも喜んで取り組むようになるであろう。これらの取組の中には，例えば，重要な新しい研究センターの設置申請を主導する，あるいは分子研を主導するということをも含まれるであろう。

UVSOR の評価レポートは，一人で作成されたにもかかわらず，非常に包括的である。大部分のビームラインは, 最先端の状況にあり，一連の高度化事業が成功裏に完了したことは明らかである。ブルックヘブンにある NSLS が閉鎖されたことによる，UVSOR の国際的関与が増加する可能性について，及び，初期に NSLS II で立ち上げられる，限定されたビームラインについて簡単な議論を行った。この機会を最大限に利用するためには，海外ユーザーからの利用申請の審査及び採択プロセスの構築が必要である。私は，国際共同研究を通じた，UVSOR における新たな光源技術の開発を強く支持するものである。

情報が完全ではないため余儀なく予備的なものとなってはいるが，分子研の国際的な立ち位置，及び影響力について，大峯分子研所長と議論を行った。入手可能な情報を基に比較すると，一論文当りの被引用数において分子研は，アメリカのトップ２である UC バークレー校，及びハーバード大学の化学科には劣るものの，アメリカの優れた大学の化学科に比肩している。さらに情報収集並びに評価を継続して実施するために，シニアな教員を担当として任命し，上海交通大学により提唱されている大学評価法（http://www.shanghairanking.com/ARWU-Methodology-2012.html）に基づいた一連の定量的データを収集・整理することを提案したい。分子研教授の皆さんと 2013 年秋に，この解析結果に関する総合的な議論を行うことは，研究所の将来を考える上で非常に有益なものとなるであろう。

7-2　UVSOR の点検評価

7-2-1　Adam Hitchcock 教授

原文

Review of Beamlines and Science at UVSOR

1. Overview

I was asked by the Director General to review the present status and future directions of science using UVSOR from the perspectives of

* international activities

* application to molecular science

* in-house contributions and challenges in the area of molecular science

My comments are based on the recent (2010, 2011) annual reports and a series of nine one-hour sessions with UVSOR researchers and UVSOR users from other departments in IMS and other institutions. I thank all the presenters for the careful work they put into their presentations, which allowed me considerable insight into the present status and future directions. I was particularly struck by the relative youth and enthusiasm of many of the presenters which speaks well for the vitality of UVSOR and IMS.

Here I make selected comments on each presentation / area of research / status of the instrumentation. After that I make some general observations on how these current activities position UVSOR relative to other facilities with strong research programs in molecular science, and where I think there are opportunities for improving international participation and enhancing the relevance of UVSOR research to the overall mission of IMS, which I take to be primarily fundamental research into systems and phenomena where the perspective of the molecular unit is a strong organizing principle.

2.1 Facility and Light Source Research (Masahiro KATOH, Director, UVSOR)

The synchrotron source, after updating to UVSOR-III in early 2012 (this year!), is a very competitive facility relative to all other sub-1GeV SR sources. The most recent upgrade has significantly reduced the emittance and has freed up space for additional insertion devices (total 6). This has provided an opportunity for adding a new, very competitive beamline for science (BL4U, STXM), a number of other beamline and end-station upgrades, and conversion of BL1U into a very versatile platform for advanced light source generation experimentation. The latter is an important aspect of a synchrotron facility as it provides ongoing challenges for the accelerator group, opportunities for collaboration with other accelerator light source facilities, and can lead to large improvements in light source technology, which may be a platform for a future upgrade of UVSOR. At the same time there appear to be too many challenging initiatives under way—free electron laser development, coherent THz systems, fs slicing, and laser Compton gamma ray generation. It was not clear which of these had priority or which had a potential or actual user community. The latter should be an important principle in guiding priorities for further investment and development in this area.

It was noted that some beamlines have challenges with operation in the current top-up mode. The fraction of the time devoted to top-up injection, and thus perturbation of the storage ring is 20% (12 seconds each minute), due to rather short lifetime of the electron beam just after the upgrade to UVSOR-III. The present 12 seconds (12 injections) per minute seem long relative to those at other SR facilities. The number of top-up injections will decrease as the electron beam lifetime and the injection efficiency improve as in UVSOR-II. Efforts should be made to improve the top-up injection procedure, as soon as possible, not only to reduce the fraction

of the time, but also to reduce any perturbations of the beam position or size associated with the top-up. This is particularly important for brightness dependent experiments such as STXM.

2.2 Spectroscopy of Liquid Systems (BL3U: Masanari NAGASAKA, KOSUGI Group, IMS)

The liquid spectroscopy instrumentation developed at UVSOR is better than versions I have seen at the ALS and CLS. This is a very rapidly developing area of SR science with tremendous potential for both fundamental and applied studies. The cluster apparatus on BL3U is also an outstanding piece of equipment. Together with the gas, liquid and solid spectroscopy capabilities at BL3U and other UVSOR beamlines, the ensemble is ideally suited for systematic studies of the evolution of structure (electronic, magnetic and geometric) from isolated molecules/atoms, to the solid state. The session on cluster and liquid spectroscopy at the recent ICESS-12 meeting (St. Malo, France, Sep. 2012) was one of the best of that conference in my opinion.

The plans that Nagasaka outlined to extend the methods to *in situ* electrochemistry, liquid–solid interfaces; solid–gas interface and *in situ* chemical and photochemical reactions are very exciting and will be some of the outstanding research from UVSOR in the next few years. This area should be supported fully. There is also very strong synergy between these spectroscopy studies and science with similar goals but with lateral spatial resolution, that will be performed on the BL4U STXM, which should be operational and open to various classes of users by spring 2013.

2.3 VUV, EUV and X-Ray Absorption and Photoemission Spectroscopy of Solids and Gases

(BL2A, BL4B, BL5B, BL6U: Eiji SHIGEMASA, UVSOR)

BL2A (double crystal monochromator) provides the highest energy photons at UVSOR. Despite being non-competitive relative to similar BL at other SR facilities, due to the low critical energy at UVSOR, it operates well and has a small but steady use by a number of Japanese research groups, primarily for materials science using X-ray absorption. It was noted that the publication rate was low which may reflect the non-competitive nature of this beamline. For a low energy ring like UVSOR a better choice to cover the high energy range would be a grating monochromator, which, with suitable multilayer mirror technology, can provide quite high performance up to 3–4 keV.

BL5B features an unusually wide photon energy range (6–600 eV) and a very large chamber equipped with a very flexible 6-axis goniometer. It is apparently one of only a few beamlines in Japan that are capable of characterizing large optical elements in a very flexible way. The research carried out on this beamline is primarily of a service character. At other facilities (*e.g.* ALS BL 6.3.2), there are active research programs in developing coatings and characterizing optics for semiconductor EUV lithography. This could be an area for future research at BL5B.

BL4B, the first soft X-ray beamline at UVSOR with high energy resolution, has produced some high quality molecular and materials science in recent years, based on research by in-house and external users. The newer BL3U undulator line covers a similar energy range and is now the preferred beamline for spectroscopy research in this energy range. However BL4B still has an active research program in magnetic materials (see discussion of the presentation by T. Yokoyama in section 2.7).

BL6U is the most modern and competitive of the beamlines supervised by Shigemasa. Its variable angle, variable line spacing PGM monochromator provides good intensity with outstanding energy resolution. It was noted that the minimum undulator gap that can be achieved at present is 13 mm, whereas the design specified a 10 mm minimum gap. The reason for this should be identified and repaired if possible, since there are some photon energies that cannot be reached due to the out-of-spec minimum gap. The two

end stations for BL6U are each internationally competitive. The gas phase Auger electron photoion coincidence (AEPICO) apparatus is ideally suited for studies of molecular photoionization dynamics with high energy electrons, and complements research at other facilities which use the Cold Target Recoil Ion Momentum Spectrometer (ColTRIMS) approach. The MBS-A1 photoemission end station is also very competitive internationally and has been adapted for two-dimensional electron spectroscopic studies in gas phase. Consistent with its competitive character, there are a number of outstanding international collaborators (Lablanquie, Simon, Piancastelli) using this instrument.

The gas phase examples presented by Shigemasa, along with those in the 2011 UVSOR annual report are excellent examples of modern synchrotron based molecular dynamics and photo-physics science. I particularly admired the studies of ultrafast dissociation in C 1s excited CF_4 (p. 53) and the electronic Doppler result in S 2p excited OCS (p. 56). BL6U is one of the outstanding examples of molecular science research at UVSOR and should continue to be well supported. Identification of suitable collaborators and independent researchers from the international community should be a target for increasing the international visibility of the molecular science program at UVSOR.

I note that Shigemasa and his group members are now using the SACLA X-ray free electron laser for advanced molecular photophysics studies. This is a very good development for UVSOR. Opportunities of using research at UVSOR to complement SACLA research, possibly resulting in joint publications, should be encouraged.

2.4 X-Ray Absorption, X-Ray Emission and Angle Resolved Photoemission of Solids

(BL3U, BL6U: Hiroyuki YAMANE, KOSUGI Group, IMS)

BL3U is a world class facility for X-ray absorption, X-ray emission and resonant X-ray scattering. This has enabled some exceptional research by UVSOR and outside researchers. The examples of XAS characterization of organic conductors and semiconductors for organic LED, organic electronics, and organic photovoltaic systems were fascinating. I draw particular attention to *in operando* measurements which used the difference of FY_NEXAFS spectra induced by applied potentials or currents to characterize the changes in molecular structure of electronic states (*PRL* **107** (2011) 147401). This is one of the first *in operando* soft X-ray studies of a device material to my knowledge. It revealed the surprising result that the electronic structure changes are associated with σ states, rather than the π states normally believed to be involved in the conductivity of organic conductors and semiconductors. These results have important implications for the field of single molecule electronic devices, which is a very hot topic and target of development at many research facilities around the world.

The X-ray emission spectrometer has exceptional performance relative to similar facilities at other SR centers. The energy resolution is below 100 meV at 140 eV X-ray energy, which is very competitive. The efficiency of the novel transmission grating spectrometer is probably the highest in the world for soft X-ray spectrometers. It has been used for studies of a number of interesting systems, including DNA polymers (poly(G-C), poly(A-T)) and N-doped graphene nano flakes (*J. Phys. Chem. C* **116** (2012) 16251). The higher performance transmission grating which is planned for the XES spectrometer will further improve energy resolution and possibly efficiency. The future plan to apply XES and RIXS techniques to *in operando* studies of molecular devices is really at the cutting edge of international SR science with X-ray emission spectroscopy.

An outstanding program of angle-resolved photoemission from molecular solids and thin films on **BL6U** was also described by Dr. Yamane. The system for these studies is one of the best in the world, achieving < 5 meV overall energy resolution (photon & electron), ability to cool to 13 K, and a 5-axis motion system that allows rather complete band structure studies with the sensitivity

needed to track band dispersion in organic systems which are typically much smaller than the dispersion in semiconductor and metal systems. The achievement of these technical capabilities in an instrument constructed at IMS is a tribute to the excellence of the Equipment Development Center which is a real asset for UVSOR and IMS. The quality of the preparation chamber and its ability to allow for preparation of organic thin films in a system also used for semiconductor and other samples was noted. There is strong international participation on BL6U. A number of interesting examples were outlined, including: Band alignment at the interface between carbon nanotubes (CNT) and a SiC substrate in CNT rafts prepared surface decomposition of SiC (Maruyama); spin–orbit (Rashba) band splitting in 1-d Pt nanowires (Yeom); nanoscale phase separation in DNA Watson-Crick (G-C) multilayer films (Friedlein); and valence band dispersion in metal phthalocyanines (Yamane). The latter project, a major effort by Dr. Yamane, showed very fascinating temperature dependent dynamics results which gave important insights into intermolecular interactions and how these can be tuned by adding substituents to the phthalocyanine or changing the metal. Since the molecular films which are the focus of these studies are easily damaged by synchrotron radiation, it is essential to be able to prepare very uniform samples which can then be used to circumvent radiation damage by scanning the sample to fresh areas during the measurements. This system is one of the best in the world for ARPES studies of organic solids.

Dr. Yamane identified a number of improvements that could be made to further enhance the performance of this facility. These include a larger analyzer (*e.g.* D80 VG Scienta) to improve efficiency; a new analysis chamber; and addition of an O_2 dosing system to remove carbon contamination on the BL6U optics. To the extent these will facilitate new molecular science, UVSOR/IMS should seriously consider these requests.

2.5 Scanning Transmission X-Ray Microscopy (BL4U: Takuji, OHIGASHI, UVSOR)

BL4U is a new soft X-ray undulator beamline with a dedicated STXM end station. STXM is a relatively new spectromicroscopy technique which has may applications in both fundamental and applied science. The planned science program is very ambitious. Further development of the instrumentation and techniques (cryo spectromicroscopy, cryo-tomography, ptychography) will require substantial effort, and should be staged after reliable basic operation is achieved. The STXM project at UVSOR will have a significant advantage relative to other STXM facilities, as IMS is able to provide on site sample preparation (ultramicrotomy, focused ion beam milling, high end optical microscope with encoders and micromanipulators, *etc.*). BL4U & the STXM end station are part of the Nanotechnology Platform Project in Japan. This is very appropriate and will link the STXM to the on site analytical transmission electron microscope (TEM), which is an excellent complementary research tool. The presence of scanning Raman and IR microscopes (both lab and UVSOR based) provide additional complementary analytical microscopy techniques. Efforts should be made to facilitate multi-technique studies, for example, by developing sharable sample mounting and methods to quickly locate the same spatial regions of samples in the different microscopes.

2.6 Solid State Science (BL1B, BL5U, BL6B, BL7U: Shin-ichi KIMURA, UVSOR)

BL7U and **BL5U**, both dedicated to angle resolved photoemission (ARPES) of surfaces and solids, are the 1st and 2nd most popular beamlines at UVSOR, as judged by usage, ratio of allocated to requested shifts, and numbers of publications in high profile journals. **BL7U** is among the very best facilities world wide for condensed matter electronic structure studies using low energy photons. Usually researchers turn to beamlines with higher photon energy (>100 eV) if they need additional sampling depth to ensure they are sampling bulk properties. At BL7U very low outgoing electron energies are used, as these are also bulk sensitive. The energy

resolution of 2 meV (electron and photon combined) is only surpassed by a few other lines in the world. The Apple II insertion device means that the full polarization properties of samples can be explored. A range of outstanding condensed matter science is taking place on BL7U including: Detailed studies of Fe-based superconductors; exploration of charge density wave effects at the surface of graphite; investigation of organic conductors. The ongoing development of conventional optical focusing techniques for UV light to achieve sub-micron spot sizes in the 7–9 eV photon energy could lead to some world-unique capabilities which would complement higher photon energy nano-ARPES lines at the ALS (Maestro) and Soleil (Antares). The potential for using such a facility to study laterally heterogeneous surfaces was illustrated with a novel system of electronic phase separation which is suspected to occur in κ-$(Et)_2Cu[N(CN)_2]Br$ on the sub-micron spatial scale. BL7U should invite more international users.

While **BL5U** is a somewhat older ARPES system with lower performance, its higher photon energy range (up to 200 eV) provides a useful complement to BL7U. Planned modifications to improve the performance of BL5U were described, including replacement of the monochromator, which has a resolving power of only 3000, as opposed to the 10,000–50,000 resolving power of BL7U. Although a number of organic materials are being studied with BL7U and 5U, the majority of the science is in the realm of condensed matter physics of semiconductors, metals and correlated electron materials.

BL6B provides light in the IR and THz range. Kimura outlined some exciting instrumentation developments, including his magic mirror which achieves exceptionally large angular collection of bend magnet IR radiation (only exceeded by the mirror array system of the IRENI facility at SRC, Wisconsin), and the recent adoption of a focal plane array detector for far- and mid-IR spectromicroscopy on BL6B. Interesting science using far-IR (THz) to study organic materials at high pressure was presented. However there has been relatively little molecular science using BL6B despite the extensive use of synchrotron IR spectroscopy and spectromicroscopy for molecular science at other SR facilities around the world. Given the activities in organic electronic materials and biosciences at IMS, it would seem there is excellent potential to expand use of BL6B, especially in the mid-IR to visible range where many non-SR scientists are actively using lab based IR spectroscopy and spectromicroscopy. I understand that Assoc. Prof. Furutani (Life and Coordination-Complex Molecular Science, IMS) is interested in partly-dedicated use of BL6B for bioscience applications. The new program to provide such 'approved program' time (outlined by Kimura at the end of his Friday presentation) seems to be an excellent opportunity to increase molecular science activity at the IR microscope on BL6B. There is also a lot of science which can be advanced using STXM and IR microscopy in a complementary fashion. Development of identical or cross-compatible sample mounting and fiducialization approaches (perhaps linked through the encoded stages of the optical microscope at BL4U STXM) could significantly facilitate that development.

BL1B has capabilities for developing novel coherent THz and THz-VUV experiments using laser slicing with amplitude modulated pulse trains. This is very exciting light source physics with good potential to achieve new physics. Possible molecular science applications of the coherent THz source were outlined in the areas of protein motion and carrier dynamics in Li ion battery and organic Dirac Fermion materials. At present the motivation is clearly exploration of novel instrumentation/light source capabilities. Its impact on molecular science is likely to be limited, at least in the short term.

2.7 Magnetic Materials (XAS, XMCD) (BL4B: Toshihiko YOKOYAMA, IMS)

The superconducting magnetic spectroscopy system on **BL4B** is a competitive facility relative to related systems internationally. It has among the highest on-sample magnetic field at SR facilities and has a good degree of flexibility in sample mounting relative to the field and photon polarization such that all aspects of the magnetic properties of samples can be measured. The facility is part

of the Nanotechnology Platform Project in Japan, for which funding was recently renewed for a 10 year period. Professor Yokoyama gave overviews of five specific research projects in the surface and thin film magnetism: Magnetic properties of Fe islands and nanowires on W(110); Co nanorods on Cu(110)-(2×3)N; γ'FeN/Cu(001); Fe on Si_3N_4/Si(111)-(8×8); VOPc/Si(111). The latter is the only example with a molecular science flavor. In this case, a combination of polarization dependent NEXAFS and V 2p XMCD was used to determine the structure and magnetism. Although there was a significant change in electronic structure and bonding between monolayer and multilayer VOPc, the V 2p XMCD magnetic signature was identical indicating the V 3d character is similar despite the bonding change. All of the examples presented high quality data from very challenging low signal systems. While similar science is being done elsewhere, Professor Yokoyama noted a major advantage of the UVSOR operation was the much lower time pressure which allows for sufficient time to study samples requiring careful *in situ* preparation.

2.8 Photoemission of Organic Solids (BL8B: Satoshi KERA, Chiba University)

BL8B is a public beamline dedicated to ultraviolet photoemission spectroscopy and ARPES of organic solids. The presentation gave a strong motivation for the research of the Chiba group in terms of the need to understand the fundamental principles of molecular assembly in order to control electronic structure and functionality of organic materials for electronics applications. A quantum perspective and the theme of wavefunction spreading was used to interpret recent results on: Weak band gap states in fullerene thin films; conduction mechanism and hole-phonon coupling as a limit to charge mobility in pentacene films; band dispersion in rubrene. BL8B is the oldest beamline at UVSOR. Plans to improve the instrumentation (replace the current analyzer with a modern 2D angle-energy electron spectrometer) and move from 8B to 2B were described and motivated by the need for higher performance to enable use of UV-ARPES for momentum space orbital mapping of organic solids. This approach was highlighted by a number of presentations at the recent ICESS12 meeting and is clearly a trend in international science in this area.

2.9a VUV Optical Properties (BL3B, BL7B: Shin-ichi KIMURA, UVSOR)

BL3B and **BL7B** are dedicated to studies of the optical properties (reflection, absorbance and luminescence) in the visible—and vacuum UV regions. **BL7B** is an older beamline that has recently been reconfigured to focus on ellipsometry measurements. **BL3B** has recently been moved from BL1B and significantly upgraded to the HOTRLU system which has greatly improved flux (relative to the previous BL1B system), and a smaller spot size by using a Kirkpatrick-Baez focusing system. Research on the UV optical properties of a number of interesting materials was described, including AlN and EBSTO, a layered organic–inorganic system, as well as studies related to calibrating instruments for astrophysics. There is significant international participation and quite high productivity (BL3B & BL7B generated over 20% of all UVSOR publications in the past 5 years), although the publications are rarely in the first rank journals.

2.9b VUV Spectroscopy of Biological Molecules (BL3B, BL7B: Kazumichi NAKAGAWA, Kobe U.)

Professor Nakagawa described his program for careful transmission measurements on thin films of the individual amino acids and DNA bases, which are used to generate absolute absorption cross-sections. Results are typically reliable to 5–10%, but often only after a sum-rule normalization correction. The motivation for the work is UV biosensors, and connections to UV damage related to cataracts. However there was no evidence for a direct link to those areas, and the energy range relevant to these issues is only a very small part of the energy range over which the absorption was measured. However, in terms of understanding the fundamental

physics and chemistry of radiation damage, such a wide range of spectral studies may be meaningful.

3. General Comments about Science and Future Directions for UVSOR

3a. International Competitiveness

As outlined in detail above, some beamlines, end-stations and research programs are more internationally competitive than others. Of particular high quality I consider BL3U, BL6U and BL3B.

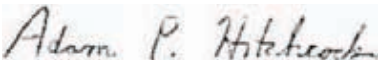
3b. Relevance to Molecular Science Mission

The liquids, electrochemistry, and chemical/photochemical reaction science, as well as the electronic structure (ARPES, XAS, XES) studies of molecular thin films are areas of the most direct relevance to molecular science. There is a strong tradition of gas phase spectroscopy studies at UVSOR which is very relevant to molecular science. However, I was less impressed by the instrumentation and science in this area, than in other areas. Although not mainstream molecular science, the instrumentation and programs in condensed matter electronic structure (ARPES) are very strong and definitely worth continuing.

3c. Role of In-House Contributions/Future Directions

A key aspect of UVSOR is that a large proportion of the scientific direction, instrumentation development, and beamtime is determined by the in house scientists. This is in strong contrast to most other SR facilities, where it is the science and interests of external researchers that is dominant. I consider the exceptional in-house research programs to be a real strength of UVSOR. The quality of the science on the international scale then strongly depends on the quality of the team leaders, the researchers they attract to their teams, and their international collaborations. IMS is fortunate to have some very talented researchers. Relative to other facilities, the size of the UVSOR staff is very small, yet the output is outstanding, from the perspectives of quality, diversity and quantity. Hiring of at least one additional faculty in IMS or UVSOR, at the professor or associate professor level should be (and, I understand, is) a high priority. While the main goal should be to find a dynamic young or mid-career individual with a passion for synchrotron-based research applied to molecular science, if there are equally good candidates, research in the area of nanoscience would build best on the existing instrumentation and strengths of UVSOR.

November 22, 2012



Adam P. Hitchcock, FRSC

Professor of Chemistry & Chemical Biology

McMaster University

Canada

UVSOR ビームラインと研究の評価

1. 概要

所長から UVSOR を利用した研究の現状と将来の方向性に関する以下の３項目について評価するように依頼を受けた。

・国際的活動状況

・分子科学への応用

・分子科学分野における所内研究者の貢献度と取組み

以下のコメントは最近の 2010 年，2011 年の UVSOR 年報（Activity Report）と UVSOR 所属研究者，所内 UVSOR 利用研究者，所外利用研究者の計９人に対するヒアリング（一人当たり１時間）結果に基づいたものである。いずれもよく準備された発表内容であり，現状と将来の方向性について深く考察することができた。発表者全員に感謝する。特に UVSOR 及び IMS の活力について十分説明してくれた発表者の若さと熱意に感銘を受けた。

以下では，それぞれのプレゼン，研究分野，装置性能についてコメントをしたのち，それらの現状を他施設と比較したときに，強力な分子科学研究プログラムを持ってして，どのように UVSOR を位置付けるのか，また，国際参加を改善させ，IMS 全体の使命に UVSOR をもっと適合させる機会がどのあたりにあるのかについて考えた。なお，IMS の使命としてとりあげたのは，分子を単位として全体を見るという観点から分子システムや分子現象について重点的に基礎研究しているという点である。

2.1　施設及び光源研究（加藤政博，UVSOR 施設長）

2012 年度の前半に UVSOR-III へと高度化された施設は他のどの 1 GeV 以下の放射光源と比較しても非常に競争力がある。直近の高度化により，エミッタンスは著しく小さくなり，新たな挿入光源の設置も可能となった（合計６台）。この高度化により，研究面で極めて競争力の高い STXM（走査型透過軟Ｘ線顕微鏡）ビームライン導入を初めとする多数のビームライン接続装置の高度化，BL1U ステーションにおける多様な光源開発及び利用実験が可能となった。後者は，加速器チームに対して新しい技術開発に挑戦する機会や他の加速器施設との共同研究の機会を与え，ひいては，UVSOR の将来計画に結び付く光源技術として大幅な向上をもたらす側面もある。と同時に，あまりに多くの課題に取り組んでいるように思える。すなわち，自由電子レーザー，コヒーレントテラヘルツ放射光，フェムト秒スライシング，レーザーコンプトン散乱ガンマ線発生。これらのうち，どれが有望なものであり，実際に利用に結びつくものであるのかが明確ではない。これは，今後の予算配分や研究開発における優先順位付けをするうえで考慮すべき重要な点である。

いくつかのビームラインではトップアップモードでの実験に取り組んでいる。トップアップ入射に要する時間は，全体の 20% となる毎分 12 秒と多い。これは UVSOR-III に高度化された直後のビーム寿命の短さに起因しているが，他の放射光施設に比べて長いように思われる。ビーム寿命及び入射効率を UVSOR-II と同等水準に向上し，また，入射に要する時間の短縮だけでなく，入射時のビーム軌道の動きを抑えることもできるだけ速やかに実現すべきである。これは特に STXM のような輝度を必要とする実験において重要である。

2.2. 液体系の分光（BL3U：長坂将成，IMS 小杉グループ助教）

UVSOR で開発された液体の軟Ｘ線吸収分光の測定装置は，ALS（米バークレーの放射光施設）と CLS（カナダの放射光施設）にある装置よりも優れている。液体の軟Ｘ線分光は，放射光科学において，基礎研究と応用研究の両面から大きな可能性があり，今，急速に発展している分野である。BL3U に設置されているクラスター装置も素晴らしい装置である。BL3U や他の UVSOR のビームラインで気体，液体，固体の軟Ｘ線分光装置を組み合わせて，孤立分子から固体までの様々な物質の電子状態，磁性，構造を系統的に調べることができるのは，理想的な環境である。最近の ICESS-12 国際会議（2012 年９月にフランス・サンマロにて開催された電子分光会議）におけるクラスターと液体の軟Ｘ線分光に関するセッションは，私の考えでは最も優れたものの一つであった。

長坂が提案した，現在の液体セルを改造して，電極反応における固液界面のその場観測，固気界面と固液界面における触媒反応の直接観察，また光励起反応における固液界面のその場観測を行う計画はとてもわくわくするものであり，今後数年において UVSOR の中でも際立った研究成果になると思われる。この研究分野は最大限支援すべきである。また，これらの分光手法と BL4U STXM で展開される面内方向の空間分解能を求める研究とは強い協力関係にある。なお，後者の装置は 2013 年春から稼働し，いろんな分野の利用者を受け入れる予定になっている。

2.3 固体及び気体の VUV，EUV，Ｘ線吸収分光及び光電子分光

（BL2A，BL4B，BL5B，BL6U：繁政英治，UVSOR 施設准教授）

BL2A（二結晶分光器）は，UVSOR で最も高エネルギーの光を供給しているビームラインである。BL2A は順調に運転されており，主にＸ線吸収分光による物質科学において多くの国内研究グループが小規模ながら定常的に利用しているが，UVSOR 光源加速器は臨界エネルギーが低いので，他施設の同種のビームラインと比較すると競争力はない。BL2A の競争力の無さは，論文の出版率が低いことからわかると言ってよいだろう。UVSOR 光源のような低エネルギーリングで高エネルギー領域をカバーするには，回折格子分光器の方がより良い選択であろう。多層膜ミラー技術を組合せれば，3–4 keV まで極めて高い性能が期待される。

BL5B は，非常に広い光エネルギー領域（6–600 eV）と極めて自由度の大きな６軸ゴニオメータを装備した大きな真空チャンバーを有することにその特徴がある。大きな光学素子の性能評価が行える，日本には殆ど存在しないビームラインである。このビームラインで実施される研究内容は，研究の補助的性格のものが多い。他施設（ALS の BL6.3.2 など）では，半導体 EUV リソグラフィー用光学素子のコーティング開発や特性評価において活発な研究プログラムがある。このような開発研究は BL5B の今後のターゲットになるはずである。

BL4B は，UVSOR 施設における軟Ｘ線領域での最初の高分解能ビームラインであり，所内及び所外利用者によって，近年，質の高い分子科学や物質科学の研究成果が出ている。今や，BL4B とほぼ同じ光エネルギー領域は新しい BL3U アンジュレータラインがカバーしており，BL4B より分光研究に適したビームラインとなっている。ただし，BL4B は磁性材料に有効な研究が展開されている（2.7 章，横山による説明に関する議論を参照のこと）。

BL6U は，繁政が管理するビームラインであり，最新鋭で競争力が高い。偏角可変型不等刻線平面回折格子（PGM）分光器は，非常に高い分解能で高強度の軟Ｘ線を供給する。現在，アンジュレータの最小ギャップ値が設計値の 10 mm に及ばない 13 mm に制限されている。このため，カバーできない光エネルギー領域が生じているので，その原因を同定し，もし可能であれば改善すべきである。BL6U の以下の二つの接続装置は，国際競争力がある。気相のオージェ電子・イオン同時計測（AEPICO）装置は，運動エネルギーの高い電子が放出される分子の内殻イオン化ダイナミクスの研究には理想的なものであり，他施設の冷却標的反跳イオン運動量分光（ColTRIMS）アプローチを補完するも

のになっている。MBS 社製 A-1 電子分析器もまた極めて国際競争力があり，気相の二次元電子分光法に利用されている。傑出した国際共同研究者ら（Lablanquie, Simon, Piancastelli）が利用していることからその競争力がわかる。

UVSOR Activity Report 2011 に沿って繁政から示された気相実験の例は，放射光を利用した分子動力学や光物理学の優れた例になっている。私が特に賞賛するのは，CF_4 分子の炭素 1s 励起に伴う超高速解離に関する研究（53 頁），及び硫黄 2p 電子を励起した OCS 分子からのオージェ電子に観測されるドップラー分裂に関する研究（56 頁）である。BL6U は，UVSOR を利用した分子科学として目立つ成果をあげており，十分に支援を続けるべきである。また，国際的な分野コミュニティーから適切な共同研究者や単独で研究可能な研究者を見つけ出すことによって，UVSOR 施設が推進する分子科学研究プログラムの国際的な認知度を高めるべきである。

現在, 繁政とグループメンバーは, 先端的な分子光物理研究のために SACLA のＸ線自由電子レーザーを使っている。これは，UVSOR のためにも非常に好ましい展開である。すなわち，SACLA での研究を補完するために UVSOR を利用すれば，両方を組み合わせた論文になる可能性が出てくるので，そのような好機を活かすべきである。

2.4. 固体のＸ線吸収，Ｘ線発光，及び角度分解光電子分光（BL3U，BL6U：山根宏之，IMS 小杉グループ助教）

BL3U は，軟Ｘ線吸収（XAS），軟Ｘ線発光（XES），共鳴Ｘ線散乱（RIXS）の世界ランクの設備であり，所内外の研究者によって他施設では見られないような研究を可能にしている。有機 LED，有機エレクトロニクス，有機太陽電池に関連した有機導体や有機半導体の XAS による研究は印象的であった。特に，蛍光収量 XAS（FY-NEXAFS）を用いた電圧印加した有機物質の電子構造の operando 観測の例（*PRL* **107** (2011) 147401）は興味深い。この XAS 研究は私の知る限り世界初のデバイス材料の operando 観測例である。有機伝導体や有機半導体の電気伝導には普通，π 状態が関与していると信じられているが，驚いたことに本研究は，電気伝導に直接は関与しないと考えられている σ 電子系の電圧印加による変動を明瞭に観測している。現在，世界の多くの研究施設で開発されており，極めてホットな話題となっている単一分子電子材料の分野に，これらの結果は重要な示唆を与える。

BL3U の軟Ｘ線発光（XES）分光器は他の放射光施設にはないような性能を示しており，特に，140 eV 以下の低エネルギー領域で 100 meV というエネルギー分解能を達成しており，十分な世界的競争力を有している。また，新規透過型回折格子分光器の検出効率はおそらく世界的にも最高の軟Ｘ線発光分光器に位置づけられる。この分光器を用いることで，DNA のモデル分子（poly(G-C)，poly(A-T)）や窒素ドープグラフェン（*J. Phys. Chem. C* **116** (2012) 16251）などの興味深い系の研究に利用されている。XES 分光器用の新しい高性能透過型回折格子が手に入れば，エネルギー分解能や検出効率のさらなる向上が期待できる。XES 及び RIXS を応用した有機デバイスの動作環境下の operando 観測が将来計画となっており，これは国際的に見て正に当該分野での最先端に位置づけられる。

BL6U における有機固体・薄膜の角度分解光電子分光（ARPES）研究では傑出した計画が山根によって報告された。実験装置は世界的に見てトップクラスであり，5 meV 以下のエネルギー分解能（励起光，電子），13 K までの冷却能，５軸の試料マニピュレーターを装備している。一般的な半導体や金属材料に比べて非常に弱い有機固体・薄膜の相互作用を精密に観測するために必要な感度をもっており，ほぼ完全なバンド構造の研究が可能になっている。これらの技術開発は装置開発室の優秀さの賜であり，これは UVSOR 施設と IMS にとって正に財産と言える。有機薄膜調製や他の試料調製を可能とする試料準備槽も注目に値する。BL6U では強力な国際参加がある。カーボンナノチューブとワイドギャップ半導体界面でのバンドアライメント（丸山），Pt の１次元ナノワイヤー中のスピン－軌道（ラシュバ）分裂（Yeom），DNA ワトソン－クリック混合膜中におけるナノレベルでの相分離（Friedlein），金属フタロシアニン結晶膜の分子間バンド分散（山根）などの成果が報告された。特に山根自身による研究成果は分子間相互作用の本質

に迫った結果であり，分子の構成元素を置換することによる分子間相互作用の制御にも成功している。また，多くの有機物質は放射光照射による損傷を非常に受けやすい。この問題に対しては，極めて均一な高品質試料を作製し，放射光の照射スポットを走査することで試料損傷の影響を回避している。BL6U の ARPES 装置は有機固体・薄膜の装置として世界的に見てトップクラスである。

BL6U の性能の更なる強化・改善に向けて，先にも述べた試料損傷の影響を少なくするための検出効率の向上（例えば，VG シエンタ社製 D80 アナライザーへの更新），試料測定槽の更新，ビームライン光学系の炭素汚染除去用の酸素ガス導入システムの導入などの提案が山根からあった。出来る限り BL6U で新しい分子科学研究が行えるように，UVSOR 施設あるいは研究所として，これらの提案を真摯に検討すべきである。

2.5 走査型透過軟Ｘ線顕微鏡（BL4U：大東琢治，UVSOR 施設助教）

BL4U は，STXM 専用の新しい軟Ｘ線アンジュレータビームラインである。STXM は基礎科学，応用科学の両面で利用可能なかなり新しい分光手法である。UVSOR 施設での研究計画は非常に野心的である。装置開発や技術開発（クライオ顕微分光，クライオトモグラフィー，タイコグラフィー）には相当の努力が必要であり，まずは STXM の基本性能が安定に得られるようにしたあとで取り組むべきである。UVSOR 施設における STXM プロジェクトは他の STXM 装置と比較して相当優位な点がある。それは研究所内で試料作成ができることである（ウルトラミクロトーム，FIB 処理，エンコーダーと顕微操作ができる最高レベルの光学顕微鏡など）。BL4U と STXM 装置は国のナノテクノロジー・プラットフォーム事業の一環で利用される。これは極めて妥当であり，その結果，STXM を補完する電子顕微鏡（TEM）とも連携ができる見込みである。さらに，走査型ラマン・赤外顕微鏡で補完できる。これらいろんな種類の顕微分光で，試料ホルダーを共通化し，試料の同じ空間領域をすばやく設定できるようにするなどの工夫を行うべきである。

2.6 固体科学（BL1B，BL5U，BL6B，BL7U：木村真一，UVSOR 施設准教授）

BL7U と **BL5U** は，どちらも表面や固体の角度分解光電子分光（ARPES）に使われているものであり，申請されたシフト数に対して配分されたシフト数の割合と高いレベルの雑誌に出版された論文数から判断して，UVSOR で１番目・２番目に人気のあるビームラインである。**BL7U** は，低エネルギー光を用いた凝縮系の電子構造研究の装置として世界最高設備の仲間に入っている。試料のバルク状態を観測できるために必要な測定深さを得るには，通常，高い光エネルギー（100 eV 以上）のビームラインが使われる。BL7U では極めて低い電子エネルギーを使うことでバルク敏感を実現している。2 meV のエネルギー分解能（励起光，電子）は，世界でほんの少しのビームラインだけで達成している。APPLE-II 型挿入光源によって，試料のすべての偏光性を観測できる。BL7U で得られた傑出した凝縮系の研究成果は以下のとおりである：鉄系超伝導体の詳細な研究；グラファイト表面の電荷密度波の探求；有機伝導体の研究である。7~9 eV の光エネルギーの範囲でサブミクロンのスポットサイズを実現するために現在開発中の従来型集光技術による装置は，米国 ALS 放射光施設（Maestro ビームライン）や仏国 Soleil 放射光施設（Antares ビームライン）のような高エネルギー光を使った nano-ARPES 装置を補完できる，世界的にもユニークな装置になるであろう。このような面内方向のヘテロ表面が解析できる装置の有効性を示す例として，κ-$(ET)_2Cu[N(CN)_2]Br$ においてサブミクロンスケールで起こると考えられている，新しい電子相分離系が取り上げられていた。いずれにしても，BL7U は，もっと国際的にユーザーを招集すべきである。

BL5U は，ちょっと古くて性能の低いビームラインであるが，その高い光エネルギー（200 eV まで）は BL7U をう

まく補完している。BL5U の性能を向上させるための改造計画が説明された。そこでは，BL7U の分解能 10000–50000 に対してたった 3000 の分解能である現有分光器の更新が含まれている。BL7U や 5U では有機物質についての利用研究も行われているが，利用研究の大部分は半導体や金属，強相関系物質を対象としている。

BL6B は，赤外とテラヘルツ領域をカバーしており，偏向電磁石からの赤外放射を他とは比較にならないくらいに大きく取り込むことが可能な木村独自のマジックミラー（ただし，集光性能はウィスコンシンの SRC 施設の IRENI 装置のミラー列装置によって追い越された）や遠赤外・中赤外顕微分光のための焦点面アレー検出器を備えている。遠赤外（テラヘルツ）領域では高圧下の有機物質に対して興味深い研究が行われているが，世界の他の放射光施設では放射光赤外分光や顕微分光を使った分子科学研究が広く行われているのと比較すると，BL6B では分子科学がほとんどないに等しい。IMS では有機電子物質や生物科学の研究が行われていることを考えれば，BL6B の利用拡大可能な優れた潜在力があるはずである。特に中赤外から可視領域では，多くの研究者が放射光を利用せず実験室ベースの赤外分光や顕微分光を使っている。私は古谷准教授（生命・錯体分子科学研究領域）が生物科学応用のため，時期を限って BL6B を専有利用することに興味を持っていることを知った。「長期利用課題」のような新しいプログラム（木村の金曜日のプレゼンの最後の説明）は，BL6B の赤外顕微鏡を使って分子科学研究を強化する絶好の機会であると思われる。STXM と赤外顕微鏡を相補的に併用した，先導的研究も多くある。それを容易にするには，試料取付方法の共通化や相互可換化，さらに基準点設定（BL4U の STXM 装置のために設置している光学顕微鏡のエンコードステージを通して接続できそうである）の開発が重要である。

BL1B は，振幅変調されたパルス列でレーザースライスされた新しいコヒーレントなテラヘルツ光やテラヘルツ・真空紫外同期実験の開発に使われている。これは，新しい物理の実現が期待できそうな光源である。コヒーレントテラヘルツ光源を使ってできる分子科学として，タンパク質の動きやリチウム電池の電荷ダイナミクス，有機ディラック粒子の分野があるとの説明があったが，明らかに現時点での動機は新しい装置や光源の開発にあり，分子科学へのインパクトは少なくとも当面は限られたものになろう。

2.7 磁性材料のＸ線吸収分光（XAS），Ｘ線磁気円二色性（XMCD）（BL4B：横山利彦，IMS グループ）

BL4B の超伝導磁石磁気分光システムは国際的に競争力のある設備である。世界の放射光施設に設置されている同種装置としては最高レベルの試料印加磁場，また，磁場・Ｘ線入射角に対する試料向きの自由度に関して優れており，様々な磁気特性計測に対応可能である。この設備は今後 10 年間継続されるナノテクノロジー・プラットフォーム事業の一環として利用される。横山教授は表面・薄膜磁性に関する５つの具体的な研究成果の概略を説明した。それらは，W(110) 表面上の島状並びに縞状 Fe，Cu(110)-(2×3)N 表面上の Co ナノロッド，Cu(001) 表面上の γ'-FeN，Si_3N_4/Si(111)-(8×8) 上の Fe，Si(111) 表面上のバナジルフタロシアニン VOPc の５件である。最後の１件のみが分子に関する研究例である。この研究では，Ｘ線吸収端近傍微細構造（NEXAFS）の偏光依存性と Ｖ 2p のＸ線磁気円二色性（XMCD）測定から，構造と磁性を評価している。単層と多層 VOPc では電子状態や化学結合に大きな違いがあるが，Ｖ 2p XMCD は似通っており Ｖ 3d 磁性は単層でも保持されているという結果であった。紹介されたすべての研究例で，極めて信号強度の低い系においても高品質のデータが得られている。横山教授は，同様の研究は他でも行われているものの，ビームタイムに制約の少ない UVSOR 施設では，丁寧な *in situ* 測定が必須の試料について十分に時間をかけて検討できる点が有利であると述べた。

2.8 有機固体の光電子放出（BL8B：解良聡，千葉大准教授）

BL8B は，有機固体の角度分解光電子分光（ARPES）及び紫外光電子分光法専用の公開ビームラインである。ヒアリングの際には，有機エレクトロニクスへの応用展開をふまえ，有機材料の機能性と電子構造を制御していくうえで，分子集合体の基幹学理を理解することの必要性について，千葉大グループによる研究の取組内容が報告された。波動関数の広がりに主として着目することで，量子論的視点から最近の成果について考察し，フラーレン薄膜における弱いバンドギャップ状態密度の検出や，ペンタセン薄膜における電荷移動度の上限としての電子格子相互作用やその伝導機構，ルブレン結晶のバンド分散測定などが報告された。BL8B は UVSOR における最も古いビームラインである。真空紫外領域における ARUPS による有機固体の波数空間軌道マップ測定を可能とするためには，より高い性能が必要であり，装置の改良計画として，BL8B から BL2B への移設，最新の二次元検出器を有する分析器への更新が提案された。このような方向性については，最近行われた ICESS12 国際会議において多くの関連成果が発表されており，この分野における国際的な動向になっている。

2.9a 真空紫外領域の光物性（BL3B，BL7B：木村真一，UVSOR 施設准教授）

BL3B と **BL7B** は可視から真空紫外領域の光物性研究（反射，吸収，発光）に使われている。**BL7B** は古いビームラインであり，最近エリプソメトリー測定に集中するために再配置された。**BL3B** は，最近 BL1B から移動され，高いフラックス（以前の BL1B に比べて）と K-B ミラー系を用いることによる小さなスポットサイズを持つ HOTRLU 装置に更新された。AlN，EBSTO（層状有機・無機系），宇宙物理のための機器校正に関する研究を含む，興味深い物質の紫外の光物性研究が多数紹介された。論文は第一ランクの雑誌にはほとんど出ていないが，国際共同や極めて高い生産性がある（BL3B と BL7B は過去５年間に UVSOR 関連の発表論文の 20% 以上を生み出している）。

2.9b 生物学的分子の真空紫外分光（BL3B，BL7B：中川和道，神戸大学教授）

中川教授は個々のアミノ酸と DNA 塩基の透過率を詳細に測定し吸収断面積を絶対値で決定する研究について報告した。最終的な信頼性は 5–10% で，総和則による補正を一部行っている。本研究の動機に紫外バイオセンサーや白内障に対する紫外線損傷への関連が述べられていたが，直接に関連する証拠はなく，測定された広いエネルギー範囲のごく微小部分でのみこれらの課題と関連するものである。しかしながら放射線損傷の物理的，化学的過程の理解にはこれらの広域スペクトルはおそらく有用であろう。

3. UVSOR における研究と将来の方向性に関する一般的評価

3a. 国際的競争力

上述したように，いくつかのビームライン，装置，研究計画は他より国際競争力がある。特に高水準のものとして，BL3U，BL6U，BL3B を挙げる。

3b. 使命としての分子科学への適合性

液体，電気化学，化学／光化学反応の研究は，分子薄膜の電子構造研究（ARPES，XAS，XES）と同様に，分子科学に直結する分野である。分子科学に非常に適合している気相分光研究は UVSOR 施設でも長い伝統がある。しかし，この分野の装置や研究にはあまり魅力を感じなかった。分子科学ではないけれども，凝縮系の電子構造研究（ARPES）の装置開発と研究計画は非常に強力で，間違いなく継続する価値がある。

3c. 所内研究者の役割と将来の方向性

研究の方向性，装置開発，ビームタイムの多くを所内研究者が決定しているところが，UVSOR の重要な鍵である。これは他の放射光施設とは対極にある。他施設で支配的なのは外部研究者の研究と興味である。UVSOR の本当の強みは極めて優れた所内研究者の研究計画であると考えている。その際，国際的観点での研究レベルは所内チームリーダー，そのチームに引き込む所外研究者，そして国際共同研究者のレベルに強く依存する。IMS は運良く何人かの非常に能力の高い研究者を抱えている。他施設に比較して，UVSOR スタッフのサイズは非常に小さいにもかかわらず，その成果は質，広がり，量の点で際だっている。しかし，少なくとも教授・准教授を 1 名，IMS あるいは UVSOR に採用することの優先順位は高い。放射光を基本として分子科学に熱意を持って取り組む，活動的な若手あるいは中堅を探すべきではあるが，もし同等の優れた候補がいた場合には，ナノサイエンス分野の研究者が UVSOR の既存の装置と特徴を最も活かせると考えられる。

2012 年 11 月 22 日

Adam P. Hitchcock, FRSC
カナダ McMaster 大学
化学・化学生物学教授

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はなく，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，施設の充実は研究職員が流動していくシステムそのものを支援することになる。従って，施設の継続的な運営が重要であり，毎年，所全体に定員削減，人件費削減の要請があっても施設の技術職員については手を付けず技術の向上に努め，絶えず技術レベルの高い人材を確保するようにした。技術職員が研究所外に出かけその高い技術力で研究支援するなどの技術交流を可能とした。さらに長期戦略が必要な施設には教授を置くことで，現在は，施設所属の研究職員であっても流動性を保てる方向になっている。

現在，極端紫外光研究施設（UVSOR施設），計算科学研究センター（組織的には岡崎共通研究施設のひとつ）が大型設備を有し，計画的に高度化，更新を行うことで世界的にトップクラスの共同利用を実施している。国内外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。巻頭にも述べたように，2013年４月から，分子スケールナノサイエンスセンターを改組し新たに「協奏分子システム研究センター」を発足させた。

（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 程度まで下げる改造を 2012 年春に行った。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 台のアンジュレータが稼働することとなった。改造後，加速器の立ち上げ調整は概ね順調に進み利用実験も予定通り再開できた。現在，運転の安定性の改善に取り組んでいる。

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 13 本が稼働しており，2 本が立上調整中である。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。今年度建設が完了し立上調整が進んでいる軟Ｘ線顕微分光ビームラインは，国内では初めての装置であり，2013 年度より供用開始となる。

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。現在，コヒーレントなテラヘルツ光・真空紫外光の試験利用開始に向けて準備を進めている。

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や新しい技術の導入へ重心を移す。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。 2013 年度には固体光電子分光ビームラインのうち一本について，アンジュレータや分光器，末端の実験装置も含む高度化を行うことが決定した。

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，実現可能性について技術的検討を進めている。

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，平成 24 年度から文部科学省・ナノテクノロジープラットフォームプログラムを受託し，ナノセンターが業務としてこれを運営している。ナノネットとナノプラットフォームの内容や成果に関しては 5-5，5-6 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 24 年度の外部委員は，馬場嘉信名古屋大学大学院工学研究科教授，花方信孝物質・材料研究機構ナノテクノロジー融合ステーション長，中嶋直敏九州大学大学院工学研究院教授，朝倉哲郎東京農工大工学研究院教授，木川隆則理化学研究所横浜研究所生命分子システム基盤研究領域副領域長であった。主として，ナノテクノロジープラットフォームの運営や超高磁場 NMR に関する現状と将来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 及びフラーレン類縁体の精密構造研究，海洋性巨大天然分子などのナノサイズ分子構造体の高次構造や動的挙動の精密解析などに対して，ナノネットを通して共同利用に供されている。所内でも，岡崎統合バイオサイエンスセンターの加藤晃一教授のグループが精力的に本装置を活用したタンパク質構造解析研究を遂行しており，さらに，岡崎統合バイオサイエンスセンターの桑島邦博教授のグループもパワーユーザーであり，所内外とも充実した先端利用がなされている。また，安定な共同利用運用に加えて，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，平成 23 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。

分子科学研究所の組織改編によって，平成 24 年度をもってナノセンターは廃止され，発展的に協奏分子システム研究センターに改組となり，共同利用機器は機器センターが統合的に管理運用することとなった。共同利用は基本的に停止することなく支援に供せられることとなる。

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可変な特殊波長（特に赤外域）レーザーの開発の他，マイクロチップレーザー光源等の開発を行い，産業界からも注目される成果を挙げてきた。分子位相制御レーザー開発研究部は，分子制御のための時間的特性を制御したレーザーの開発と反応制御実験を目的として設置され活動を行った。

平成 18 年度には分子研の研究系・施設の組織改編へ向けた議論が行われたが，この中で，レーザーセンターのあり方に強く関連する事柄は以下の２点であった。第一に，レーザーや放射光を重要な研究手段とし，光と物質との相互作用に基づく分子科学を展開する研究領域として新たに光分子科学研究領域が設けられることになった。従来はこの研究領域の研究が，主に分子構造，電子構造，極端紫外光科学の各研究系と，極端紫外光研究施設とレーザーセンターとに別々に所属する研究グループによって行われてきた。しかし，この組織形態は，多くの共通した概念や方法論を基本とする研究グループを縦割りに分断し，研究者間の情報の共有や研究活動における日常の議論を阻害する要因となっていた。一方，レーザー光源を用いた研究グループは，17 年度から始まった「エクストリーム・フォトニクス」のプログラムにより，既に当時，組織横断的なつながりを持つ機会が増えていた。そこで，この新研究領域を創設することにより，放射光関連の研究グループとの間の壁も取り払い，本研究所における光分子科学研究をさらに活性化することを目指したのである。第二の点は機器センターの再設置であった。本研究所には以前，同センターが設置されていたが，その後，極低温センターと化学試料室と共に廃止され，レーザーセンターと分子物質開発研究センターが設置され，後者は更に分子スケールナノサイエンスセンターへと改組された。しかし，共通機器を一括して管理運営し，所内外の研究者の共同利用を促進する必要が改めて認識され機器センターが再度設置されることとなった。これに伴って，レーザーセンターが管理運営していた共通機器の大部分が機器センターに移管されることになった。

この措置により，レーザーセンターは従来の共同利用に関する業務を大幅に圧縮することができ，センターとしての活動の重点を開発研究に移すことが可能となった。そこで改組後のレーザーセンターでは，光分子科学研究領域の研究グループと密接な連携をとりながら，分子研におけるレーザー関連光分子科学の開発研究の中心として機能することを重要なミッションと考えることとなった。ただし，光分子科学研究領域の研究グループとレーザーセンターの役割の違いを認識しておく必要がある。光分子科学研究領域の各研究グループではそれぞれの興味のもとで光分子科学の研究分野を開拓し，先端的研究を展開するのに対して，レーザーセンターのミッションは，光分子科学の先端的研究とその将来的な発展に必要な，光源を含む装置，方法論の開発，及びそれらの技術の蓄積に重点がおかれるべきである。光分子科学研究領域とレーザーセンターのインタープレイにより生まれた技術や方法論を蓄積するだけではなく，開発された手法，装置や部品を所内外に提供・共同利用に供する点で，研究領域における各グループの研究活動との差が存在する。

ただし，技術や方法論の開発段階においては，各グループの研究活動とレーザーセンターの活動を明瞭に区別する

ことは，しばしば困難である。従って，レーザーセンターと研究グループの人的な相互乗り入れは不可欠であり，平成 19 年度の組織再編に際しては，光分子科学研究領域及び UVSOR に属する数名の教授・准教授がレーザーセンターに併任する形で運営することとなった。このような組織で，光分子科学の新分野を切り拓くための装置，方法論の開発と技術蓄積を行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的方法論を作って行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・フォトニクス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，前年度より試行している。

平成 24 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ピー，マイクロスコピー，制御法に至る統合的な研究手法を開発することを目的としている。これらの開発研究により，他に類を見ない装置や方法論を創出して分子科学研究の重要な柱として寄与し，分子科学研究所とコミュニティの新たな共同利用の機会を開拓することが求められる。また，技術職員が積極的にこれらの研究開発に参加することによって，新たに開発された装置や方法論をセンターに蓄積し，継承していくための原動力として活躍する事が，センターのミッションに照らして重要な点である。センターが保有する光計測に関する汎用の小型装置と技術については，一部を所内で共用することを試行している。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ろう。先端的なレーザー光源をセンターで保有し，その利用研究を複数のグループが行うというセンターの形態も状況によっては考えられる。しかし現在の分子科学における先端的なレーザー実験は，多くの場合，そ

れぞれの研究目的に適した小型レーザーが用いられており，一つの大型のレーザーを共同で利用するという利用形態が一般的ではない。このような利用形態を取るとすれば, どのような仕様とし, どのような利用実験が可能であるかを，コミュニティを巻き込んで十分議論する必要があり，このような方向を想定すべきかどうかは今後の検討課題である。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 24 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・豊田中研との共同研究として，当研究室で製作した異方性レーザーセラミックスの解析を行った。その結果，マイクロドメインの方位に統計的な揺らぎがあることを確認した。これらの測定結果を記述できる希土類 4f 電子のスピン・軌道角運動量を考慮した磁場による系の異方性制御に関し，新たなモデルの構築を試みており，高出力レーザー新材料に向けた共同研究を深化させつつある。これにかかる研究成果は，近く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，7 fs 程度の単一サイクル中赤外光パルスが発生された。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，論文として出版された。

8-4　機器センター

機器センターは，汎用機器の維持･管理･運用と，所内外の施設利用者への技術支援を主な業務としている。この他，研究所内外の共同利用者と協力して，機器センターの機器を利用した特色ある測定装置の開発とその共同利用も行っている。機器センターでは，化学分析機器，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等の多様な機器の維持・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）のほかに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。

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，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，極低温棟･レーザーセンター棟１階・実験棟地下・南実験棟への集約化を図った。特に，南実験棟 S101 号室には，主に分光計測関係装置を集中して配置した。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した。

平成 23 年 11 月には，明大寺地区のヘリウム液化装置の新規設置が行われた。以来，順調に稼働しており，ようやくにして余裕のあるヘリウム供給体制が整備された。ただし，今般の世界的な供給ひっ迫に伴ってヘリウムの新規購入が極めて困難になっていることから，利用後の回収を徹底させることが必要である。また，昨年度末に特別な予算的措置をもって，有機微量元素分析装置の新規交換，SQUID 極低磁場オプションならびに ESR CW-ENDOR オプション導入等を行った。

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 24 年度の所外施設利用件数は平成 25 年２月末現在で 95 件である。平成 22 年度は 60 件，23 年度は 81 件であったので，増加傾向にあることがわかる。

研究所全体として大規模装置を効率的に運用する必要性の高まりを受けて，機器センターにおいて，比較的汎用性の高い装置群を集中的かつ経常的に管理することとなった。その一環として，平成 23 年度末に終了した「ナノテクノロジーネットワーク事業」で運営されてきた 920 MHz NMR および高分解能電子顕微鏡, さらに, 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た。「ナノテクノロジーネットワーク事業」に関しては，その発展である「ナノテクノロジープラットフォーム事業」が平成 24 年７月より開始された。分子研において当事業を運営する母体は分子スケールナノサイエンスセンターであり，その中に設置された「ナノプラットフォーム室」が実務を担当している。来年度にはナノサイエンスセンターが改組されるのを受けて，ナノプラットフォーム室は機器センターに移設されて業務を継続する予定である。

以上の状況に対応して，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，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した。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，かなり高額の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的機器。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で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当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。これを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っている。

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など非機械加工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技術開発を行うような取り組みを「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，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。2012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。

2013年3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月に更新され，後者は2013年3月に更新された。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。

超高速分子シミュレータは富士通社製のPRIMERGY RX300S7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188.7 Tflopsで総メモリ容量55 TByte超である。PRIMERGY RX300S7は，16 CPUコア/128 GB構成のノード342台からなるPCクラスタである。インターコネクトはInfiniBand QDRを採用し，全台数を40 GB/sで，一部は2系統の80 GB/sで演算ノード間を相互接続しており，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。特徴は，vSMPの導入により複数ノードを仮想的に1ノードの巨大共有メモリシステムとして運用できることである。しかも，ジョブ毎にこの制御が可能である。また32ノードには，NVIDIA社製のGPGPU TeslaM2090を搭載している。UV2000は1024 CPUコア/8 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インターコネクト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。

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，運用管理クラスタおよびネットワーク装置から構成される。演算サーバは，富士通製のPRIMERGY CX250S1で，16 CPUコア/64 GByte構成のノード368台からなる共有メモリ型スカラ計算機のPCクラスタである。理論総演算性能は136.6 Tflops，総メモリ容量は23 TByteである。インターコネクトはInfiniBand FDRを採用し，全台数を56 GB/sで相互接続しており，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。ファイルサーバは，1800 TByteのディスクを装備しており，演算サーバのインターコネクトに直結している。本ディスクは演算サーバのワークディレクトリとしてだけでなく，共同利用システム全体のホームディレクトリやバックアップ領域として運用している。本演算サーバは，2014年9月に次世代CPUを有するPCクラスタに入れ換えることになっており，その時点では220 Tflops以上に増強される。

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 118,989 件のデータが収録され，世界 91 カ国から利用されている。

共同利用に関しては，2012 年度は 190 研究グループにより，総数 697 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。近年，共同利用における利用者数が増加傾向にあり，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エアを提供していることを示している。

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，一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（9 課題，75 名）。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「理論と計算科学による新たな展開と可能性を探る」と 2 つのウィンタースクール「第 2 回量子化学ウインタースクール～基礎理論と生体系の理論～」と「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～」を開催した。

平成 24 年度　システム構成（2013 年 3 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 RX300S7
	OS：Linux
	CPUCore 数：5472（16CPUCore×342 ノード）
	総理論性能：126.9 Tflops（371.2 Gflops×342 ノード）+21.2 Tflops（TeslaM2090 x32）
	総メモリ容量：43.7 TB（128 GB×342 ノード）
高速 I/O 演算サーバ	
	型番：SGI UV2000
	OS：Linux
	CPUCore 数：1024
	総理論性能：20.4 Tflops（20.0 Gflops/CPUCore）
	総メモリ容量：8.0 TB
	ディスク容量：400 TB（/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）
	総理論性能：20.2 Tflops（13.2 Gflops/CPUCore）
	総メモリ容量：3.0 TB（32 GB×96 ノード）
	ディスク容量：48 TB（/k/home）

外部磁気ディスク装置	
	型番：PANASAS PAS12，PAS11
	総ディスク容量：1000 TB
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	
	型番：富士通 PRIMERGY CX250S1
	OS：Linux
	CPUCore 数：5888（16CPUCore×368 ノード）
	総理論性能：136.6 Tflops（371.2 Gflops×368 ノード）
	総メモリ容量：23.5 TB（64 GB×368 ノード）
ファイルサーバ	
	型番：富士通 PRIMERGY RX300S7（8 ノード）
	OS：Linux
	総メモリ容量：320 GB（64 GB×2 ノード＋ 32 GB×6 ノード）
	ディスク容量：1800 TB（/home（300 TB），/save（600 TB），/week（300 TB），バックアップ領域（600 TB））
フロントエンドサーバ	
	型番：富士通 PRIMERGY RX300S7（4 ノード）
	OS：Linux
	総メモリ容量：256 GB（64 GB×4 ノード）
運用管理クラスタ	
	型番：富士通 PRIMERGY RX200S7（16 ノード）
	OS：Linux
	総メモリ容量：512 GB（32 GB×16 ノード）
高速ネットワーク装置	
	型番：Force10 S4810

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，藤井浩准教授の４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撹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撹乱の統合的研究
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 24 年度には，本事業のテーマに関連し,「温度生物学：植物からヒトまで」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		○	○ （九州大学長）
齋藤　一夫　東北大理教授		○	○
ジョージ・ポーター　英国王立研究所教授化学部長			○

9-2　評議員（1981～2004）

氏　名	所　属	第1期 '81.6.1～ '83.5.31	第2期 '83.6.1～ '85.5.31	第3期 '85.6.1～ '87.5.31	第4期 '87.6.1～ '89.5.31	第5期 '89.6.1～ '91.5.31	第6期 '91.6.1～ '93.5.31	第7期 '93.6.1～ '95.5.31	第8期 '95.6.1～ '97.5.31	第9期 '97.6.1～ '99.5.31	第10期 '99.6.1～ '01.5.31	第11期 '01.6.1～ '03.5.31	第12期 '03.6.1～ '04.3.31
赤松　秀雄	東大名誉教授，分子研名誉教授	○	○	○	○ '88.1.8 死亡								
石川　忠雄	慶應大学長	○											
石塚　直隆	名大学長	○~'81.7.22											
飯島　宗一	名大学長	○ '81.9.1~	○	○	○~'87.7.21								
植村　泰忠	東大理教授，東京理大教授	○	○	○									
神田　慶也	九大学長	○											
小谷　正雄	東京理科大学長	○											
小松　　登	豊田中研所長	○	○										
齋藤　一夫	東北大理教授，国際基督教大教授	○	○~'84.5.15			○	○	○					
榊　米一郎	豊橋技科大学長	○	○~'84.3.31										
島村　　修	相模中央研最高顧問 理事	○	○										
田島弥太郎	遺伝研所長	○											
馬場　宏明	北大応電研所長	○	○	○	○								
福井　謙一	京大工教授，京都工繊大学長，基礎化学研究所長	○	○	○	○	○	○						
藤巻　正生	お茶女大家政教授，お茶女大学長	○	○	○									
向坊　　隆	東大名誉教授	○											
森　大吉郎	宇宙研所長	○	○ '83.11.25 死亡										
亀谷　哲治	星薬科大学長		○	○									
角戸　正夫	姫路工大学長		○	○									
本多　波雄	豊橋技科大学長		○ '84.4.16~	○	○	○							

氏　名	所　属	第1期 '81.6.1～ '83.5.31	第2期 '83.6.1～ '85.5.31	第3期 '85.6.1～ '87.5.31	第4期 '87.6.1～ '89.5.31	第5期 '89.6.1～ '91.5.31	第6期 '91.6.1～ '93.5.31	第7期 '93.6.1～ '95.5.31	第8期 '95.6.1～ '97.5.31	第9期 '97.6.1～ '99.5.31	第10期 '99.6.1～ '01.5.31	第11期 '01.6.1～ '03.5.31	第12期 '03.6.1～ '04.3.31
田中　郁三	東工大理教授,理学部長,学長，学位授与機構長		○	○	○	○	○						
中嶋　貞雄	東大物性研所長		○										
小田　　稔	宇宙研所長		○'84.2.16~	○	○								
斎藤　喜彦	慶應大理工教授			○	○								
森田　正俊	豊田中研代表取締役			○	○	○							
伊東　　椒	東北大理教授, 徳島文理大薬教授			○	○	○							
鈴木　　進	東北大金材研所長			○									
豊沢　　豊	東大物性研所長, 中央大理工教授			○	○	○	○						
平野　龍一	東大名誉教授			○	○								
藤田　栄一	大阪薬科大学長, 京大名誉教授				○	○	○						
西原　春夫	早稲田大学総長				○	○							
倉田　道夫	三菱瓦斯化学(株) 顧問				○	○							
朽津　耕三	長岡技科大教授, 城西大理教授				○	○	○	○					
田丸　謙二	東京理科大理教授				○	○	○						
早川　幸男	名大学長				○'87.7.22~	○	○ '92.2.5 死亡						
千原　秀昭	阪大理教授，(社)化学情報協会専務理事				○	○	○	○					
米澤貞次郎	近畿大理工学総合研教授，近畿大理工教授				○	○	○	○					
赤池　弘次	統計数理研究所長					○	○	○					
三ヶ月　章	日本学術振興会学術相談役，東大名誉教授					○	○						
伊藤　昌壽	東レ(株)相談役最高顧問						○	○	○				
佐々木慎一	サイエンスクリエイト(株)常任顧問						○	○	○				
佐野　博敏	東京都立大学長						○						
櫻井　英樹	東北大理学部長, 東北大理教授						○	○					
松永　義夫	神奈川大理教授						○	○	○				
秋本　俊一	学士院会員							○	○				

氏　名	所　属	第1期 '81.6.1～'83.5.31	第2期 '83.6.1～'85.5.31	第3期 '85.6.1～'87.5.31	第4期 '87.6.1～'89.5.31	第5期 '89.6.1～'91.5.31	第6期 '91.6.1～'93.5.31	第7期 '93.6.1～'95.5.31	第8期 '95.6.1～'97.5.31	第9期 '97.6.1～'99.5.31	第10期 '99.6.1～'01.5.31	第11期 '01.6.1～'03.5.31	第12期 '03.6.1～'04.3.31
岩村　秀	九大有機化学基礎研究センター教授							○	○				
加藤　延夫	名大総長							○	○	○			
黒田　晴雄	東京理科大総合研教授							○	○	○			
塩野　宏	成蹊大法教授							○	○	○			
田中　久	前京都薬科大学長							○	○				
堀　幸夫	金沢工業大副学長							○	○				
森本　英武	(株)豊田中央研顧問							○	○				
守谷　亨	東京理科大理工教授							○	○				
大瀧　仁志	立命館大理工教授								○	○			
清水　良一	統数研所長								○	○	○		
田隅　三生	埼玉大理教授，理学部長								○	○			
土屋　荘次	早稲田大理工学総合研究センター客員教授								○	○	○	○	○
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究センター長									○	○	○	
後藤　圭司	豊橋技科大学長									○	○	○	○
高橋　理一	(株)豊田中央研代表取締役所長									○	○	○	○
中西　敦男	学術著作権協会常務理事									○	○		
細矢　治夫	お茶水女子大理教授									○	○	○	○

氏　名	所　属	第1期 '81.6.1～ '83.5.31	第2期 '83.6.1～ '85.5.31	第3期 '85.6.1～ '87.5.31	第4期 '87.6.1～ '89.5.31	第5期 '89.6.1～ '91.5.31	第6期 '91.6.1～ '93.5.31	第7期 '93.6.1～ '95.5.31	第8期 '95.6.1～ '97.5.31	第9期 '97.6.1～ '99.5.31	第10期 '99.6.1～ '01.5.31	第11期 '01.6.1～ '03.5.31	第12期 '03.6.1～ '04.3.31
本多　健一	東京工芸大学長									○	○		
安岡　弘志	東大物性研所長									○			
山崎　敏光	理化学研RIビーム科学研究室研究協力員									○	○	○	○
荻野　博	放送大学宮城学習センター所長										○	○	○
木原　元央	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設長										○		
近藤　保	豊田工業大客員教授										○	○	○
佐原　眞	国立歴史民俗博物館長										○	○	
廣田　襄	京大名誉教授										○	○	○
福山　秀敏	東大物性研所長										○	○	○
松尾　稔	名大総長										○		
山村　庄亮	慶應大名誉教授										○	○	○
蟻川　芳子	日本女子大理教授											○	○
飯吉　厚夫	中部大学長											○	○
石谷　炯	(財)神奈川科学技術アカデミー専務理事											○	○
海部　宣男	国立天文台長											○	○
木村　嘉孝	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所長											○	
北川源四郎	統計数理研究所長												○
木下　實	東大名誉教授												○
小間　篤	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所長												○

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　荘次　(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, Rechard Stephen 米国シカゴ大学名誉教授					○ (~2012.3.31)
WALMSLEY, Ian A. 英国オックスフォード大学副学長					○ (2012.4.1~)

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　荘次　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)											
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　荘次	東大教養学教授	○共(共~'82.4.30)		○									
豊沢　豊	東大物性研教授	○人											
廣田　襄	京大理教授	○人(人~'82.3.31)		○人	○(副)・人								
米澤貞次郎	京大工教授	○共(共'82.5.1~)											
井口　洋夫	分子研教授	◎人	◎人	◎									
岩村　秀	分子研教授	○人・共	○人	○人	○ ~'87.5.31								
木村　克美	分子研教授	○共	○共	○人・共	○人・共	○ (◎'90.1.29~)	○ (◎~'92.3.31)						
花崎　一郎	分子研教授	○	○	○	○	○共	○人・共	○人・共	○				
廣田　榮治	分子研教授	○人	○人	○人	○	○ (◎~'90.1.16)							
藤山　常毅	分子研教授	○ ('82.4.30死亡)											
諸熊　奎治	分子研教授	○人・共(共~'82.4.30)	○人	○人	○共	○人	○人 (◎~'92.2.14)						
吉原經太郎	分子研教授	○人・共	○人・共	○人・共	○人	○人		○人	◎				
田中　郁三	分子研教授(客員)(東工大理教授)	○											
笛野　高之	分子研教授(客員)(阪大基礎工教授)	○	○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　二朗	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		○○共										
黒田　晴雄	東大理教授		○共										
高柳　和夫	宇宙研教授		○	○									
中島　　威	東北大理教授		○人										
中村　宏樹	分子研教授	○ (共'82.5.1~)	○共	○	○人	○人	○共	○人	○	○	◎共	○人	○人
丸山　有成	分子研教授(客員) (お茶女大理教授)		○	○	○	○人	○人	◎					
山本　明夫	分子研教授(客員) (東工大名誉教授)		○		○	○							
茅　　幸二	慶應大理工教授			○共	○共	○共							
菅野　　暁	東大物性研教授			○	○								
坪村　　宏	阪大基礎工教授			○人									
細矢　治夫	お茶女子理教授			○人	○人								
又賀　昇	阪大基礎工教授			○共	○~'88.3.31								
松永　義夫	北大理教授			○人	○人								
北川　禎三	分子研教授			○共	○人・共	○人・共	○	○人	○人	○	○ '00.4.1~	◎	◎
齋藤　一夫	分子研教授			○									
青野　茂行	金沢大院自然科学研究科長				○	○							
安積　　徹	東北大理教授				○人	○人							
原田　義也	東大教養学教授				○人	○(副)人							
松尾　　拓	九大工教授				○共								
丸山　和博	分子研教授(客員) (京大理教授)			○	○ '88.6.1~								
大瀧　仁志	分子研教授				○ '88.4.1~	○	○共						
薬師　久彌	分子研教授				○ '88.9.1~	○共	○人	○人	○共	○共	○共	○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								
岩田　末廣	分子研教授					○人	○人	○ '94.4.1~	○人	○人	○~'00.3.31		
志田　忠正	京大理教授					○人	○人						
田隅　三生	東大理教授					○人	○						
仁科雄一郎	東北大金材研教授					○共	○						
村田　好正	東大物性研教授					○	○(副)						
中筋　一弘	分子研教授					○	○人	○人 (~'94.3.31)					
飯島　孝夫	学習院大理教授						○人	○(副)					
伊藤　公一	大阪市立大理教授						○人	○人					
小川禎一郎	九大総合理工教授						○共	○共					
小尾　欣一	東工大理教授						○共	○					
京極　好正	阪大蛋白研教授						○人	○人					
田中　晃二	分子研教授						○	○共	○人	○人	○共	○共	○共
齋藤　修二	分子研教授						○ ~'92.4.1	○共	○共	◎共			
川崎　昌博	北大電子科学研教授							○人	○人				
近藤　　保	東大理教授							○人	○(副)人				
斎藤　軍治	京大理教授							○	○				
塚田　　捷	東大理教授							○共	○共				
山口　　兆	阪大理教授							○人	○人				
宇理須恆雄	分子研教授							○共 ('94.5.1~)	○共	○共	○	○共	○共
中村　　晃	分子研教授							○					
小杉　信博	分子研教授								○人	○人	○共	○人	○人
渡辺　芳人	分子研教授								○共	○共	○人	○~'02.3.31	
大澤　映二	豊橋技科大工教授								○	○共			
生越　久靖	福井高専校長								○	○			
小谷　正博	学習院大理教授								○人	○人			
西　　信之	分子研教授								○人	○人	○人	○共	○共
三上　直彦	東北大院理教授								○共	○人			
岡田　　正	阪大院基礎工教授									○	○共		
加藤　重樹	京大院理教授									○人	○人		

氏　名	所　属	第1期 '81.5.1～ '83.4.30	第2期 '83.5.1～ '85.4.30	第3期 '85.5.1～ '87.4.30	第4期 '87.5.1～ '89.4.30	第5期 '89.5.1～ '91.4.30	第6期 '91.5.1～ '93.4.30	第7期 '93.5.1～ '95.4.30	第8期 '95.5.1～ '97.4.30	第9期 '97.5.1～ '99.4.30	第10期 '99.5.1～ '01.4.30	第11期 '01.5.1～ '03.4.30	第12期 '03.5.1～ '04.3.31
小谷野猪之助	姫路工業大理教授									○共	○共		
関　一彦	名大物質科学国際研究セ教授									○人	○人		
田中　武彦	九大院理教授									○人	○人		
簇野　嘉彦	九大院総合理工教授									○(副)	○(副)		
小林　速男	分子研教授									○人	○人	○共	○共
阿知波洋次	東京都立大院理教授										○	○人共 (人'02.4.1~)	○人
北原　和夫	国際基督教大教養教授										○	○	○
濵口　宏夫	東大院理教授										○人	○人	○人
松本　和子	早稲田大理工教授										○人	○人 (~'02.3.31)	
平田　文男	分子研教授										○人	○人	○人
藤井　正明	分子研教授										○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											○	
榊　茂好	九大有機化学基礎セ教授											○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　惠子	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－人事選考部会に属する委員
（副）　副議長　　共－共同研究専門委員会に属する委員

氏名・所属（当時）	第１期 2004. 4. 1 ～ 2006. 3.31	第２期 2006. 4. 1 ～ 2008. 3.31	第３期 2008. 4. 1 ～ 2010. 3.31	第４期 2010. 4. 1 ～ 2012. 3.31	第５期 2012. 4. 1 ～ 2014. 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	○共
小杉　信博　分子研教授	○人	○	○人	◎人･共	○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	○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	○
藥師　久彌　分子研教授	○人	◎共 '07.4.1~	○共		
齊藤　真司　分子研教授				○人	○人
大島　康裕　分子研教授				○	○人
魚住　泰広　分子研教授				○共	○人･共
青野　重利　分子研教授(岡崎統合バイオ)				○人･共	○人･共
加藤　政博　分子研教授					○
山本　浩史　分子研教授					○
加藤　晃一　分子研教授(岡崎統合バイオ)					○
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	
冨宅喜代一　神戸大院理名誉教授			○(副)人	○(副)人	
山下　正廣　東北大院理教授			○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　神奈川大理教授				○	○

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	第５期 2012. 4. 1 〜 2014. 3.31
山内　　薫　東大院理教授				○	○
森　　健彦　東工大院理工教授				○人	○人
佃　　達哉　東大院理教授				○人	○人
朝倉　清高　北大触媒セ教授				○	○
神取　秀樹　名工大院工教授				○	○(副)人
河野　裕彦　東北大院理教授				○	○共
寺嵜　　亨　九大院理教授				○人	○人
水谷　泰久　阪大院理教授				○人	○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）

<table>
<tr><th rowspan="2">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</th><th rowspan="2">該当する職</th><th rowspan="2">分子研規則による種別</th><th rowspan="2">任　期</th><th colspan="2">任期更新に関する事項</th></tr>
<tr><th>可　否</th><th>任　期</th></tr>
<tr><td rowspan="2">分子科学研究所に置かれる研究領域及び研究施設</td><td rowspan="2">助教</td><td>５年に満たない任期を残す者</td><td>分子研規則による残任期間</td><td rowspan="2">可</td><td rowspan="2">任期を定めずに採用</td></tr>
<tr><td>５年を越える任期を残す者</td><td>５年</td></tr>
</table>

9-10　自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則

平成16年4月1日
分研規則第4号

自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則

（目的）

第1条　この規則は，自然科学研究機構分子科学研究所（以下「研究所」という。）の設置目的及び社会的使命を達成するため，研究活動等の状況について自己点検・評価，及び外部の者による評価（以下「外部評価」という。）を行い，もって研究所の活性化を図ることを目的とする。

（点検評価委員会）

第2条　研究所に，前条の目的を達成するため分子科学研究所点検評価委員会（以下「委員会」という。）を置く。

2　委員会は，次に掲げる者をもって組織する。

一　研究所長

二　研究総主幹

三　研究主幹

四　研究施設の長

五　本部研究連携室の研究所所属の研究教育職員

六　技術課長

七　その他研究所長が必要と認めた者

3　前項第7号の委員の任期は，2年とし，再任を妨げない。

（委員長）

第3条　委員会に委員長を置き，研究所長をもって充てる。

2　委員長に事故があるときは，研究総主幹がその職務を代行する。

（招集）

第4条　委員会は，委員長が招集し，その議長となる。

（点検評価委員会の任務）

第5条　委員会は，次に掲げる事項について企画，検討及び実施する。

一　自己点検・評価及び外部評価の基本方針に関すること。

二　自己点検・評価及び外部評価の実施に関すること。

三　自己点検・評価報告書及び外部評価報告書の作成及び公表に関すること。

四　独立行政法人大学評価・学位授与機構が行う評価に係る諸事業への対応に関すること。

五　その他自己点検・評価及び外部評価に関すること。

（点検評価事項）

第６条　委員会は，次の各号に掲げる事項について点検評価を行うものとする。

一　研究所の在り方，目標及び将来計画に関すること。

二　研究目標及び研究活動に関すること。

三　大学等との共同研究体制及びその活動に関すること。

四　大学院教育協力及び研究者の養成に関すること。

五　研究教育職員組織に関すること。

六　研究支援及び事務処理に関すること。

七　国立大学法人総合研究大学院大学との連係及び協力に関すること。

八　施設設備等研究環境及び安全に関すること。

九　国際共同研究に関すること。

十　社会との連携に関すること。

十一　学術団体との連携に関すること。

十二　管理運営に関すること。

十三　学術情報体制に関すること。

十四　研究成果等の公開に関すること。

十五　財政に関すること。

十六　点検評価体制に関すること。

十七　その他委員会が必要と認める事項

２　前項各号に掲げる事項に係る具体的な点検評価項目は，委員会が別に定める。

（専門委員会）

第７条　委員会に，専門的事項について調査審議するため，専門委員会を置くことができる。

２　専門委員会に関し必要な事項は，委員会が別に定める。

（点検評価の実施）

第８条　自己点検・評価又は外部評価は，毎年度実施する。

（点検評価結果の公表）

第９条　研究所長は，委員会が取りまとめた点検評価の結果を，原則として公表する。ただし，個人情報に係る事項，その他委員会において公表することが適当でないと認めた事項については，この限りではない。

（点検評価結果への対応）

第10条　研究所長は，委員会が行った点検評価の結果に基づき，改善が必要と認められるものについては，その改善に努めるものとする。

（庶務）

第 11 条　委員会の庶務は，岡崎統合事務センター総務部総務課において処理する。

（雑則）

第 12 条　この規則に定めるもののほか，委員会の運営に関し必要な事項は，委員会の議を経て研究所長が定める。

附則

1　この規則は，平成 16 年 4 月 1 日から施行する。

2　この規則施行後，第 2 条第 2 項第 7 号により選出された最初の委員の任期は，同条第 3 項の規定にかかわらず，平成 18 年 3 月 31 日までとする。

9-11　自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則

平成16年4月1日
分研規則第5号

自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則

（設置）

第1条　自然科学研究機構分子科学研究所（以下「研究所」という。）に，研究所の将来計画について検討するため，将来計画委員会（以下「委員会」という。）を置く。

（組織）

第2条　委員会は，次の各号に掲げる委員をもって組織する。

一　研究所長

二　研究総主幹

三　研究所の教授数名

四　研究所の准教授数名

五　その他分子科学研究所長（以下「研究所長」という。）が必要と認めた者

2　前項第3号，第4号及び第5号の委員の任期は，1年とし，再任を妨げない。ただし，補欠の委員の任期は，前任者の残任期間とする。

3　前項の委員は，研究所長が委嘱する。

（委員長）

第3条　委員会は，研究所長が招集し，その委員長となる。

（専門委員会）

第4条　委員会に，専門的な事項等を調査検討させるため，専門委員会を置くことができる。

（委員以外の者の出席）

第5条　委員長は，必要に応じて，委員以外の者を委員会に出席させ，意見を聴取することができる。

（庶務）

第6条　委員会の庶務は，岡崎統合事務センター総務部総務課において処理する。

附則

1　この規則は，平成16年4月1日から施行する。

2　この規則施行の後最初の任命に係る委員の任期は,第2条第2項の規定にかかわらず,平成17年3月31日までとする。

附則

この規則は，平成19年4月1日から施行する。

9-12　大学共同利用機関法人自然科学研究機構年度計画（平成 25 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

① 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。

② 岡崎統合バイオサイエンスセンターにおける連携研究を推進するため，生命システムの動的秩序の統合的理解を目指すことを新たな目標として掲げ，３つの新研究領域（バイオセンシング研究領域，生命時空間設計研究領域，生命動秩序形成研究領域）に組織を改編し，分子から個体までのさまざまな階層にまたがる重点課題についての研究を開始するとともに，これら研究を担う特任准教授を公募により採用する。

③ 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，ニホンザル及びマーモ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求する研究施設「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「画像情報科学」の創成に向け，引き続き，「画像科学コミュニティ」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とともに，研究会／シンポジウム開催等の活動を通して，コミュニティの拡大を図り，「画像科学」の創成を図る。

更に，これまでの議論をふまえ，新たな研究分野として「宇宙における生命」を設置する。

各分野の特記事項を以下に示す。

（国立天文台）

① すばる望遠鏡を用いた初期宇宙の天体形成の解明や太陽系外惑星の検出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。

② 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。

③ すばる望遠鏡の次世代観測装置である超広視野主焦点カメラ（HSC）の現地試験を完了し，共同利用及び戦略的観測プログラムを開始する。また，超広視野主焦点分光器及び波面補償光学を利用した次世代装置の検討を進める。

④ 岡山天体物理観測所に設置予定の京都大学新光赤外線望遠鏡の技術開発等を，京都大学，名古屋大学等と協力して行う。

⑤ 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。

⑥ 平成 25 年度から運用開始する新しいスーパーコンピュータの共同利用運用を定常化させる。また，それらを駆使したシミュレーション天文学を推進し，数値天文学の世界的センターとしての学術水準を維持する。

⑦ 大型低温レーザー干渉計型重力波望遠鏡「かぐら（KAGRA）」の建設と装置開発を東京大学宇宙線研究所や高エネルギー加速器研究機構などの各機関と協力して進める。

⑧ アルマ計画において，受信機の製作を完了すると共に，本格運用を継続する。

⑨ 米国ハワイ州マウナケア山に TMT（30m 光赤外線望遠鏡）を国際協力により建設することをめざし，国際協議をさらに継続し，核心技術の開発実証を進める。

⑩ 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。平成 26 年度打上げ予定の小惑星探査衛星の機器試験を進める。

⑪ 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。

⑫ 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）

① 大型ヘリカル実験装置（LHD）において，閉構造ダイバータの排気能力の拡充によって粒子制御能力を高めるなど，プラズマを高性能化するための機器整備を進める。更なるイオン温度の向上や，より高温高密度の定常プラズマの実現を目指した実験などを共同利用・共同研究からなる計画に沿って実施する。得られた高性能プラズマを対象として，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，プラズマの振舞の物理機構の解明を図る。次年度以降の加熱電力増力や運転信頼性向上のための機器整備を行う。

② 性能向上したプラズマシミュレータ（スーパーコンピュータ）の有効活用により，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進展を図る。特に，流体・運動論・ハイブリッドコード，多時空間スケールコード，統合輸送コード，データ解析コード等の整備・拡張を進めるとともに，LHD プラズマをはじめとする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。

③ 制御核融合の実現のための工学プロジェクトを推進し，原型炉の概念設計の基本案をまとめる。更に基本設計に向けて必要となる超伝導コイルシステム，ブランケットシステム，機器構成材料，高熱流機器，及び水素同位体，等に関する研究設備を新たに強化整備することによって，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）

① 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。そのために，遺伝子，細胞内小器官，細胞の役割，エネルギー受容，細胞間シグナル，細胞間ネットワーク，生物共生の機構などについて，新規モデル生物の開発やライブイメージング，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。

② 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，生物遺伝資源の保存のための大学連携バイオバックアッププロジェクト（IBBP）を本格稼働し，研究拠点機能を一層強化する。

③ 連携する大学サテライト拠点と協力し，IBBP をさらに強化するとともに，研究者が利用しやすい運営体制の整備を行う。

④ 既存のモデル生物では研究することが困難な生物現象の解明を目指して，特徴ある生物を新規にモデル化し多様な生物機能を研究する拠点を形成する。

（生理学研究所）
① 生体の働きを担う機能分子の構造，その動作・制御メカニズム，生体機能への統合を解明するとともに，それらが破綻した際の病態等に関する研究を進める。
② 生体恒常性の維持，脳神経における情報処理とその発達，記憶学習等のメカニズムを分子・細胞レベルで解明するとともに，それらの病態への関わりに関する研究を進める。
③ 痛覚・掻痒・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，これらが障害された病態生理や治療法に関する研究，及び判断・感情や対人関係などヒトの高次機能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。
④ ウィルスベクターを用いた遺伝子発現によって特定神経回路機能を操作して機能を解析する研究手法を用いて，脳機能の解析を行う。ブレイン・マシン・インタフェースを応用し，脳神経系障害や神経疾患の病態と代償・回復メカニズムについて調べる。
⑤ 分子・細胞から個体に至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。可視化のためのプローブ・ベクターの作製，イメージング技術開発・改良等を行う。新たに設置したミクロトーム組込み型の三次元走査型電子顕微鏡（3D-SEM）を用いた神経結合の網羅的解析（コネクトミクス）等を行う。

（分子科学研究所）
① 理論・計算分子科学研究領域が中心となって，電子状態計算による機能性分子等の構造・反応性及び電磁波との相互作用，生体高分子等の複雑系の構造変化ダイナミクスに関する理論的研究を行う。
② 光分子科学研究領域が中心となって，先端的なレーザー光源やコヒーレント放射光源の開発と，それらを駆使した極限的な光計測法や光制御法の開発を進める。それらを用いて，孤立分子系から多体系に至る様々な物質相における極限時空間スケールでの光－物質相互作用の観測と制御を試み，光分子科学の格段の進展を目指す。
③ 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・磁性薄膜などの創成・開発並びに新規物性・機能探索，及び，これらの分子性物質の機能物性解析のための新規分光学的手法の開発等の研究を行う。
④ 生命・錯体分子科学研究領域が中心となって，金属錯体及び機能性タンパク質の統合的基礎研究に立脚し，蛋白質が関与するイオン輸送，物質変換，情報伝達の分子機構解明，蛋白質の構造形成原理や生体リズムなどの機能発現原理の追求，エネルギー変換や物質構造変換を指向した遷移金属反応系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
① 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助成もしくは重点配分など，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。
② 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。
③ 新たな研究分野の設置に向けて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する。
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とともに，生命科学研究分野における画像取得や画像データ解析のための新たなソフトウェアの開発，定量的解析手法の確立などの展開を進める体制を確立する。
更に，「宇宙と生命」に関する研究者コミュニティの意見を踏まえ，新たな研究分野「宇宙における生命」を推進する体制を確立する。

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
① 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。
② 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・共同研究を引き続き実施する。
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 分野及び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，双方向型共同研究における連携強化や一般共同研究におけるネットワーク型の推進など，中核拠点として，共同研究に参画する大学間の交流を一層進め，大学の研究活性化に貢献する。
基礎生物学研究所では，IBBP センターの本格的運用により大学等研究機関の生物遺伝資源のバックアップを一層推進する。また精密な環境制御下で生物の環境応答を多元的に解析するための設備を導入し共同利用・共同研究を開始する。
生理学研究所では，脳科学・生理学研究に必要な実験動物やツール・技術の開発・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。特に，ウィルスベクターの供給，三次元走査型電子顕微鏡（3D-SEM）を用いた神経結合の網羅的解析の共同研究を開始する。
分子科学研究所では，化学分野における先端的研究設備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を実施する。また，活発な人事流動を生かして，大学等との双方向の共同研究を推進する。

各分野の特記事項を以下に示す。
（国立天文台）
① 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，TMT（30m 光赤外線望遠鏡）実現のための国際連携を強化する。
② アルマ望遠鏡を主軸とする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。
③ 将来の太陽観測衛星，月惑星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」，「かぐや」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，国立天文台内装置等からの大量観測データの解析・公開機能を充実させ，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）
① 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，合理的な方策を実施することによって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更に推進する。
② 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，大型計算機を用いた共同研究･共同利用環境の整備，シンポジウム・利用講習会・教育講座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。

③ 炉工学研究の拠点として，材料・ブランケット・マグネット・高熱流機器・トリチウム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。並行して，これらに必要な研究設備を強化整備する。
④ 国際熱核融合実験炉及び「幅広いアプローチ」等の国際事業や，慣性核融合等の国内事業に対して，卓越した研究拠点として大学とともに連携研究を推進する。

（基礎生物学研究所）
① IBBP の事業遂行に当たり，生物機能解析センター及びモデル生物研究センターと連携し高度の品質管理を行うとともに，ラボオートメーション設備を用いて塩基配列情報等の整備を行うことで，生物遺伝資源の付加価値を向上させ，大学間連携による共同研究の基盤を強化する。また，基生研コンファレンス等を通じて，国際共同研究の核としての活動を行う。
② 生物の生育環境を精密に制御し，個体／組織／細胞の動態や遺伝子発現等の多元的な生物情報を統合的に解析する統合解析システムを導入し，共同研究の開始に向けた準備を行う。
③ 植物の多様な生育環境（温度，湿度，日長，二酸化炭素濃度）を精密に制御する野外型精密環境制御装置を導入し，様々な環境下で植物育成を行い，長期間にわたる多元的生育情報をネット配信によって所外研究者へ提供するための整備を行う。
④ 水生動物室の大規模な改修を行い，精密な温度管理下での淡水及び海水生物の飼育を可能とすることにより，環境応答研究などの水生動物を用いた共同利用・共同研究を促進する。

（生理学研究所）
① 分子から個体そして社会活動に至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，革新的なコネクトミクス技術を応用した研究を行う。
② 対人関係など社会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（dual-fMRI）を用いた共同利用実験，共同研究を推進する。また，超高磁場機能的磁気共鳴画像装置（7T-fMRI）導入のための準備を進めるとともに，導入後の共同利用実験開始に向けて関係研究者コミュニティでの情報交換を強化する。
③ 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，利用者のニーズに沿ったニホンザルの安定した供給を進める。疾病対策を強化するなど，供給ニホンザルの一層の高品質化を図る。長期的安定供給のための体制整備を引き続き検討する。
④ 課題を設定して重点的に進める計画共同研究を行う。特に，平成 24 年度に設置されたウィルスベクター開発室より，ウィルスベクターの供給を開始する。
⑤ 実験動物の検疫管理体制を強化するために，岡崎共通研究施設・動物実験センターに研究教育職員１名を新たに配置する。

（分子科学研究所）
① 極端紫外光研究施設において，高輝度放射光源の特性を余さず引き出すためのビーム制御技術や低エネルギー放射光施設の特徴を活かした観測装置の更なる高度化を目指す。分子制御レーザー開発研究センターとのレーザー運用及び応用技術に関する連携を継続し，レーザー光と放射光を同期させた利用実験を推進する。
② 新設の協奏分子システム研究センターが中心になって，分子スケール，ナノスケール，メゾスケールなど各階層の分子科学をつなぐことで従来のナノ分子科学を越えた新分野を展開する。高磁場 NMR などの先端的計測設備を相補的・有機的に共同利用し，多様な分子系に対する高度な動的構造機能研究を推進する。
③ 計算科学研究センターにおいて，スーパーコンピュータ及び汎用コンピュータの大規模な計算資源を駆使した機能性分子や生体分子等の電子状態，反応やダイナミクスに関する理論・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
① 国立天文台では，共同利用を行っている各観測所・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・運用の改善に資する。
② 核融合科学研究所では，コミュニティの要請に応えるべく計測器貸出制度や双方向性を持った共同研究を更に推進することにより，機器の有効利用や研究者の相互交流を進める。
③ 基礎生物学研究所では，生物機能解析センター及びモデル生物研究センターの設備の充実，利便性の向上によって，質の高い共同研究を推進する。
④ 生理学研究所では，研究者コミュニティの意見を得て，計画共同研究等の改善を図る。特に，新たに三次元走査型電子顕微鏡（3D-SEM）を用いた計画共同研究の実施を開始する。
⑤ 分子科学研究所では，共同利用研究申請，審査，成果報告を Web 上ですべて処理できる，電子申請システムを構築し，共同利用研究の利便性向上に取り組む。また，この取組の効果を検証し，必要に応じてシステムを修正することにより，システムのより一層の充実を図る。
⑥ 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頂の他の観測所等と観測時間の交換を行い，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，その本格運用を継続し，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。
⑦ 核融合科学研究所では，政府レベルの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。
⑧ 基礎生物学研究所では，各種国際コンファレンスの開催によって生まれた国際共同研究の促進を図るとともに，研究成果の論文発表等を積極的に行う。
⑨ 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，共同研究者派遣，グループ共同研究及び情報交換セミナーによって研究交流の促進を図るとともに，新分野の開拓を行う。
⑩ 分子科学研究所では「分子研国際共同研究」をより柔軟に実施できるように国際共同研究担当職員を配置し，従来の事業に加えて，「国際若手研究者招へいプログラム」，「国際インターンシッププログラム」，「アジア連携分子研研究会」，「ミニ国際シンポジウム」等の新しい取組によって，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・研究集会を強化する。
⑪ 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９大学による国内外の光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。
⑫ 核融合科学研究所では，双方向型共同研究の枠組みにおいて，ヘリカル型核融合研究の重要課題解決を目指し，複数の参画大学附置研究センターが連携協力する環境整備を進める。
⑬ 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，既存の環境制御システムを発展させた新たな解析システムの導入により，共同利用・共同研究のより一層の活性化を目指す。
⑭ 生理学研究所では，新たに，名古屋大学医学部・大学院医学系研究科及び放射線医学総合研究所との間に学術協定を締結し，共同研究，人材交流，院生教育を連携的に推進する。また，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するとともに，ウィルスベクターの開発をさらに発展させ，全国の研究者への提供を開始する。

⑮ 分子科学研究所では，機器センターが主体となって，「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」及び「ナノテクノロジープラットフォーム」プロジェクト等を通じて，全国レベルでの研究者コミュニティのネットワーク構築を継続・発展させ，先端的計測設備の相互利用による効率的な運用と，構造機能物性評価に関する共同利用・共同研究のより一層の活性化を支援する。

3　教育に関する目標を達成するための措置

（1）大学院への教育協力に関する目標を達成するための措置

① 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。

② 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総合研究大学院大学の特別経費による研究科を超えた教育プロジェクト「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」を更に強化し，個々の学生の個性を活かした特長のある大学院教育を行う。また，ｅ‐ラーニングの整備を含む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。
生命科学研究科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，生命科学研究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」の受講者を中心に博士（脳科学）を授与できる体制整備を受け，引き続き本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。

③ 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

① 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）制度等を充実させ，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。

② 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），全国の高等専門学校に対する「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へい事業や国際インターンシッププログラム（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ッ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，海外からの体験入学者を受け入れる「インターンシップ」（基礎生物学研究所，生理学研究所）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

① 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うとともにアウトリーチ活動のための広報スペースを確保するなど，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。

② 各機関において，出前授業・出前講義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），核融合科学研究所の理科教育研究会等での教員との科学コミュニケーション，生理学研究所の「せいりけん市民講座」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。

③ 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ともに，研究で得られた成果を公開し，その普及を促進する。また，知的財産等の創出としての特許出願を支援するとともに，特許収支を考慮した登録特許の適切な管理（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

① 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，国際交流協定等への貢献を通じて国際的な研究成果の実現に貢献する。

② 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。更には，各機関が締結した国際学術交流協定などに基づき，海外の主要研究拠点との研究者交流，共同研究，留学生受入を推進するとともに，外国人研究者の採用を促進し，国際的研究･教育拠点を構築する。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（国立天文台，生理学研究所検討中）やウェブによる応募受付システムの採用（国立天文台検討中）などを広め，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。

II　業務運営の改善及び効率化に関する目標を達成するためにとるべき措置

1　組織運営の改善に関する目標を達成するための措置

① 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。

② 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。

③ 機構長のリーダーシップの下，各機関が一体となって自然科学の新分野の創成を図るため，新分野創成センターの体制を充実させるとともに，「宇宙における生命」研究分野を設置する。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。

④ 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，生理学研究所では教授への内部昇格禁止と任期制の併用，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。

⑤ 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。
⑥ 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，男女共同参画推進のパンフレットを作成して，職員への内部啓発や広報活動を行う。また，機構全体としてポジティブアクションを取るための準備体制を整える。

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
① 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着実に進める。
② 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。
③ 事務職員について，能力及び業績に関する人事評価を行うとともに，事務局と各機関間の人事異動を推進する。

III　財務内容の改善に関する目標を達成するためにとるべき措置
1　外部研究資金，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
① 各分野の研究推進及び共同利用・共同研究の更なる強化を図るため，年俸制常勤職員制度等を活用して優秀な研究者を採用するなど，適正な人件費の管理を行う。
② 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分析の実施や機構内他機関の節減事例を参考にする等して，契約方法を見直す等の節減方策の検討を行い，経費削減に努める。

3　資産の運用管理の改善に関する目標を達成するための措置
① 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 ページの情報内容について周知徹底を図り，有効活用を促進する。
② 国立天文台野辺山地区の職員宿舎等を転用して設置した「自然科学研究機構野辺山研修所」を機構全体の研修施設として運営する。
また，国立天文台乗鞍コロナ観測所を転用して設置した「自然科学研究機構乗鞍観測所」及び生理学研究所伊根実験室を転用して設置した「自然科学研究機構伊根実験室」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。

IV　自己点検・評価及び当該状況に係る情報の提供に関する目標を達成するためにとるべき措置
1　評価の充実に関する目標を達成するための措置
① 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。
② 機構全体としての業務運営の改善に資するため，年度計画に基づく実績の検証を行うとともに，平成 24 年度に実施した外部評価における意見を踏まえ，組織運営の充実を図る。

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。

V　その他業務運営に関する重要目標を達成するためにとるべき措置
1　施設設備の整備・活用等に関する目標を達成するための措置
① 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，大型ヘリカル実験の基盤となる施設設備の整備を行うなど，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。
② 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。
③ 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
① 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。
② 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。また，メンタルヘルスケアのためにストレスチェックを行う。
③ 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。