

「分子研リポート 2013」 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 国際諮問委員.....	9
2-4-4 運営会議.....	9
2-4-5 運営会議人事選考部会.....	10
2-4-6 運営会議共同研究専門委員会.....	10
2-4-7 学会等連絡会議.....	11
2-4-8 教授会議.....	11
2-4-9 主幹・施設長会議.....	11
2-4-10 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.....	22
2-6 財 政	23
2-6-1 現員.....	23
2-6-2 財政.....	23
2-7 岡崎共通施設	26
2-7-1 岡崎情報図書館.....	26
2-7-2 岡崎コンファレンスセンター.....	26
2-7-3 岡崎共同利用研究者宿泊施設.....	26
2-7-4 職員会館.....	26
2-8 その他.....	27
2-8-1 知的財産.....	27
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	37
3-3 共同利用研究	39
3-3-1 共同利用研究の概要.....	39
3-3-2 2013 年度の実施状況.....	39
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	63
3-4-1 外国人客員部門等及び国際交流.....	63
3-4-2 岡崎コンファレンス.....	67
3-4-3 分子科学研究所国際共同研究.....	71

3-4-4	日韓共同研究.....	73
3-4-5	分子研国際インターンシッププログラム.....	73
3-5	大学院教育.....	74
3-5-1	特別共同利用研究員.....	74
3-5-2	総合研究大学院大学二専攻.....	75
3-5-3	オープンキャンパス・分子研シンポジウム.....	79
3-5-4	夏の体験入学.....	79
3-5-5	総研大アジア冬の学校.....	81
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.....	82
3-5-7	統合生命科学教育プログラム.....	83
4	研究支援等	85
4-1	技術課.....	86
4-1-1	技術研究会.....	86
4-1-2	技術研修.....	88
4-1-3	人事.....	90
4-1-4	受賞.....	91
4-2	安全衛生管理室	92
4-3	史料編纂室.....	93
4-4	広報室.....	94
4-5	社会との交流	96
4-5-1	自然科学研究機構シンポジウム.....	96
4-5-2	大学共同利用機関シンポジウム.....	97
4-5-3	分子科学フォーラム.....	97
4-5-4	分子研コロキウム.....	98
4-5-5	岡崎市民大学講座.....	99
4-5-6	その他.....	99
4-6	理科教育への協力.....	101
4-6-1	スーパーサイエンスハイスクール.....	101
4-6-2	あいち科学技術教育推進協議会.....	101
4-6-3	国研セミナー.....	102
4-6-4	小中学校での出前授業.....	103
4-6-5	職場体験学習.....	104
4-6-6	その他.....	105
4-7	一般公開	106
4-8	見学者受け入れ	107
5	各種事業	109
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）.....	111
5-2	連携融合事業「エクストリームフォトンクス」（文部科学省）.....	112
5-3	分野間連携（自然科学研究機構）	114
5-3-1	概要.....	114
5-3-2	イメージング・サイエンス.....	114
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.....	116
5-4	アジア研究教育拠点事業	117

5-5	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).....	118
5-6	「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).....	124
5-6-1	はじめに.....	124
5-6-2	TCCI の活動について	125
5-6-3	今後の課題と取組みについて.....	129
5-7	最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム (文部科学省).....	130
5-8	東アジア若手研究者交流プログラム (EXODASS プログラム)	132
5-8-1	全体趣旨.....	132
5-8-2	分子研主催プロジェクト課題について.....	132
5-8-3	実施状況.....	132
5-9	研究大学強化促進事業 (文部科学省)	134
6	研究領域の現状	135
6-1	論文発表状況	135
6-2	理論・計算分子科学研究領域.....	136
	理論分子科学第一研究部門	136
	計算分子科学研究部門	146
6-3	光分子科学研究領域	156
	光分子科学第一研究部門	156
	光分子科学第二研究部門	165
	光分子科学第三研究部門	169
	光源加速器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)	175
	光物性測定器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)	178
	光化学測定器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)	184
	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)	188
6-4	物質分子科学研究領域.....	203
	電子構造研究部門	203
	電子物性研究部門	212
	分子機能研究部門	215
	安全衛生管理室	226
6-5	生命・錯体分子科学研究領域.....	230
	生体分子機能研究部門	230
	生体分子情報研究部門	248
	錯体触媒研究部門	252
	錯体物性研究部門	256
6-6	協奏分子システム研究センター	260
	階層分子システム解析研究部門	260
	機能分子システム創成研究部門	271

7. 点検評価と課題	287
7-1 外国人運営顧問による点検評価	288
7-1-1 Ian A. Walmsley 外国人運営顧問	288
7-1-2 Thomas V. O'Halloran 外国人運営顧問	297
7-2 研究顧問による点検評価	298
7-2-1 Graham R. Fleming 研究顧問	298
7-3 運営顧問による点検評価	301
7-3-1 報告書	301
8. 研究施設の現状と将来計画	305
8-1 極端紫外光研究施設 (UVSOR)	306
8-2 協奏分子システム研究センター	307
8-3 分子制御レーザー開発研究センター	308
8-4 機器センター	311
8-5 装置開発室	313
8-6 計算科学研究センター	314
8-7 岡崎統合バイオサイエンスセンター	317
9. 資料	319
9-1 評議員 (1976 ~ 1981)	319
9-2 評議員 (1981 ~ 2004)	320
9-3 運営顧問 (2004 ~)	324
9-4 外国人評議員 (1976 ~ 2004)	325
9-5 外国人運営顧問 (2004 ~)	326
9-6 運営に関する委員会委員 (1975 ~ 1981)	327
9-7 運営協議員 (1981 ~ 2004)	328
9-8 運営会議委員 (2004 ~)	332
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	334
9-10 自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則	335
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	338
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 26 年度)	339

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、さらに協奏分子システム研究センター（2013年4月から発足）や極端紫外光研究施設を始めとする7つの研究施設・センター、などを擁し、分子の構造と反応と機能についての先鋭的な基礎研究を進め分子の新たな可能性を探っています。

このレポートには、2013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ンクス研究」、（4）「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、新たな展開を図っています。

2013年7月に木村准教授が大阪大学教授、2014年3月末に櫻井准教授が大阪大学教授、また藤井准教授が奈良女子大学教授として転出しました。これらの3名の准教授は分子科学研究所の研究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。2013年9月に若手独立フェロー（特任准教授）として小林玄器君が就任しました。分子研は人の入れ替わりが盛んであり、2014年3月末までのここ4年間で教授7名、准教授8名、助教22名が転出（定年退職を含む）し、また教授3名、准教授が2名、助教18名が転入しました（承継教員約80名中）。さらに2014年度始めには、2名の教授（岡崎統合バイオサイエンスセンター、光分子科学研究領域）、3名の准教授（協奏分子システム研究センター、UVSOR、生命・錯体分子科学研究領域）が着任します。

2013年度も、カリ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きました。Fleming教授は2013年10月に4日間にわたり、主に新しく発足した協奏分子システム研究センターの現状と将来計画について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戴きました。また、外国人運営顧問であるオックスフォード大学副学長のIan Walmsley教授には、2013年8月に4日間にわたり、分子研の運営状況

また光分子科学研究領域研究グループと極端紫外光研究施設 UVSOR に於ける研究を重点的にヒヤリングしていただきました。さらに12月と1月には、運営顧問の廣田襄教授、齋藤軍治教授、増原宏教授に分子研の運営状況、研究のあり方について、ヒヤリングをしていただき、貴重な提言を戴きました。それらの研究評価、提言などは本リポートに掲載されています。

分子科学研究所は次世代の核となる学問を生み出す時にまさに立っています。皆様のご支援とご協力をお願いいたします。

2014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。

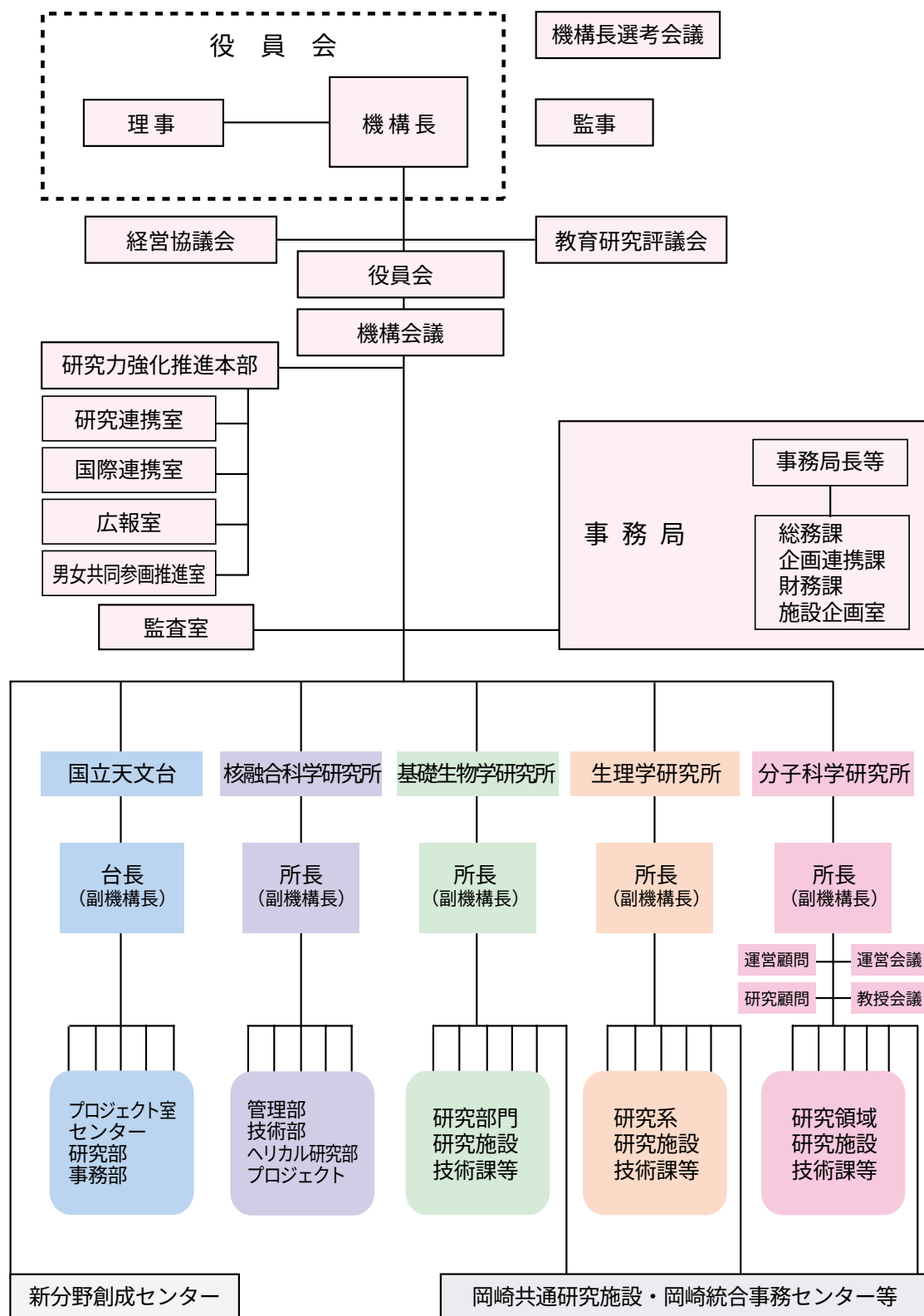
- 1965. 12.13 日本学術会議は、「分子科学研究所」（仮称）の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
- 1973. 10.31 学術審議会は、「分子科学研究所」（仮称）を緊急に設立することが適当である旨、文部大臣に報告した。
- 1974. 4.11 文部大臣裁定により、東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室（室長：井口洋夫前東京大学物性研究所教授、定員3名）及び分子科学研究所創設準備会議（座長：山下次郎前東京大学物性研究所長、学識経験者35人により構成）が設置された。
- 1974. 7. 6 分子科学研究所創設準備会議において、研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
-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

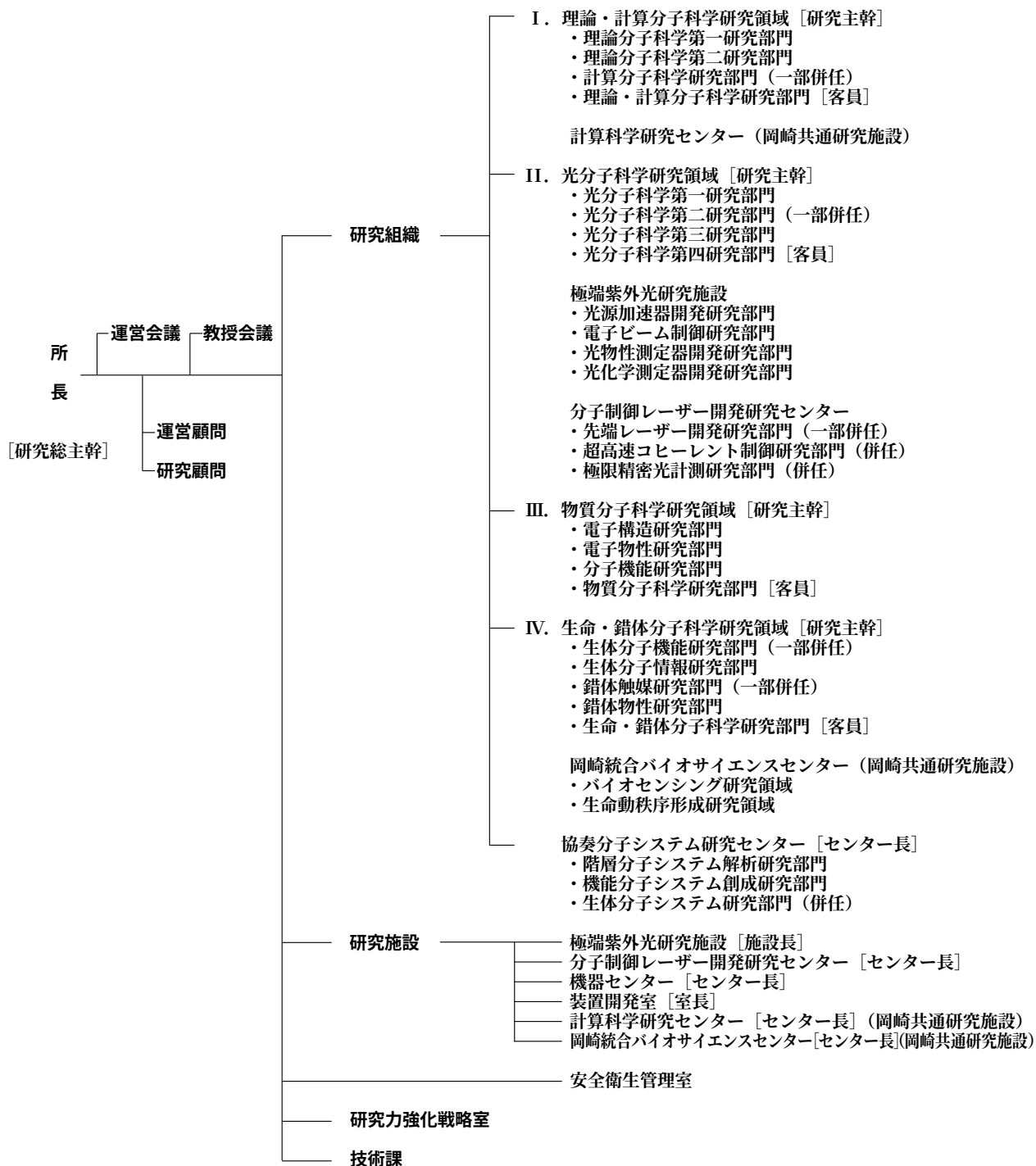
1979. 4. 1 分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され、管理局が総務部（庶務課、人事課、国際研究協力課）、経理部（主計課、経理課、建築課、設備課）、技術課に改組された。
1979. 11. 8 分子科学研究所創設披露式が挙行された。
1981. 4. 1 第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4.14 国立学校設置法の一部を改正する法律により、分子科学研究所と生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所、生理学研究所）は総合化され、岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され、管理局が岡崎国立共同研究機構管理局となり、技術課が研究所所属となった。
1982. 4. 1 研究施設として極端紫外光実験施設（UVSOR）が設置された。
1982. 6.30 極端紫外光実験棟第1期工事（1,281 m²）が竣工した。
1983. 3.30 極端紫外光実験棟第2期工事（1,463 m²）が竣工した。
1983. 4. 1 電子構造研究系に分子エネルギー変換研究部門が、分子集団研究系に分子集団動力学研究部門、極端紫外光研究部門が設置された。
1983. 11.10 極端紫外光実験施設ストレージリング装置に電子貯蔵が成功した。
1984. 2.28 極端紫外光実験施設の披露が行われた。
1984. 4.11 研究施設として、錯体化学実験施設（錯体合成研究部門、錯体触媒研究部門）が設置された。流動研究部門制度が充足し錯体化学実験施設に錯体合成研究部門が設置された。
1985. 5.10 分子科学研究所創設10周年記念式典が挙行された。
1987. 4. 1 第三代研究所長に井口洋夫分子科学研究所教授が任命された。
1989. 2.28 分子科学研究所南実験棟（3,935 m²）が竣工した。
1989. 5.28 分子集団研究系に界面分子科学研究部門が、関連領域研究系に有機構造活性研究部門（共に流動研究部門）が設置された。
1991. 3.27 極端紫外光実験棟（増築）（283 m²）が竣工した。
1991. 4.11 極端紫外光科学研究系（反応動力学研究部門）が設置された。基礎光科学、界面分子科学、極端紫外光の各研究部門は分子集団研究系から極端紫外光科学研究系へ振替された。
1993. 4. 1 第四代研究所長に伊藤光男前東北大学教授が任命された。
1993. 12. 3 極端紫外光実験施設創設10周年記念式典が挙行された。
1994. 1.31 電子計算機センター棟（増築）（951 m²）が竣工した。
1995. 3.31 関連領域研究系有機構造活性研究部門（流動）が廃止された。
1995. 4. 1 理論研究系に分子基礎理論第四研究部門が設置された。
1995. 5.12 分子科学研究所創設20周年記念式典が挙行された。
1996. 5.11 関連領域研究系に分子クラスター研究部門（流動）が設置された。
1997. 4. 1 機器センター、極低温センター、化学試料室が廃止され、分子制御レーザー開発研究センター、分子物質開発研究センターが設置された。
1999. 4. 1 第五代研究所長に茅幸二慶應義塾大学教授が任命された。
2000. 4. 1 電子計算機センター、錯体化学実験施設錯体合成研究部門が廃止され、電子計算機室が設置された。共通研究施設として、統合バイオサイエンスセンター、計算科学研究センター、動物実験センター、アイソトープ実験センターが設置された。
2002. 2.28 山手2号館（統合バイオサイエンスセンター、計算科学研究センター）（5,149 m²）が竣工した。
2002. 3.11 山手1号館A（動物実験センター、アイソトープ実験センター）（4,674 m²）が竣工した。
2002. 4. 1 関連領域研究系分子クラスター研究部門（流動）、極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門（流動）、分子物質開発研究センターが廃止され、分子スケールナノサイエンスセンター（分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門、ナノ触媒・生命分子素子研究部門、ナノ光計測研究部門、界面分子科学研究部門（流動）、分子クラスター研究部門（流動））が設置された。
2003. 8.20 山手4号館（分子科学研究所分子スケールナノサイエンスセンター）（3,813 m²）が竣工した。
2003. 12. 2 極端紫外光実験施設創設20周年記念式典が挙行された。

2004. 3. 1 山手5号館（NMR）（664 m²）が竣工した。
2004. 3. 8 山手3号館（統合バイオサイエンスセンターなど）（10,757 m²）が竣工した。
2004. 4. 1 国立大学法人法により、国立天文台、核融合科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所、分子科学研究所が統合再編され、大学共同利用機関法人自然科学研究機構が創設された。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、先端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。
2013. 4. 1 分子スケールナノサイエンスセンターが廃止され、協奏分子システム研究センター（階層分子システム解析研究部門、機能分子システム創成研究部門、生体分子システム研究部門）が設置された。
2013. 10. 1 広報室及び史料編纂室が廃止され、研究力強化戦略室が設置された。
2013. 12. 6 極端紫外光研究施設創設30周年記念式典が挙行された。

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。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當なため，形式的には機構長の諮問組織的な位置付けで，その都度，各研究所別に大学共同利用機関長選考委員会を設置することにした。その委員は教育研究評議会と経営協議会の機構外委員も候補に加えて，機構外から機構長によって選ばれる。一方，機能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名で運用した。4年目となり，国内3名を新たに追加した。

運営顧問（2013年度）

齊 藤 軍 治	名城大学教授
廣 田 襄	京都大学名誉教授
増 原 宏	(台湾) 国立交通大学講座教授

外国人運営顧問（2013年度）

WALMSLEY, Ian A.	英国オックスフォード大学副学長
O'HALLORAN, Thomas V.	米国ノースウェスタン大学教授

2-4-2 研究顧問

分子科学研究所では，法人化の前から所長が研究面を諮問するために研究顧問制度を導入している。第一期中期計画期間では国内3名の研究顧問が，所内の各研究グループによる予算申請ヒアリングに参加し，それぞれについて採点し，所長はその採点結果を参照しつつ各研究グループに配分する研究費を決定してきた。第二期中期計画期間は国際的な研究機関としての研究面を中心に諮問することとし，国外委員も追加することとした。現在の研究顧問は以下のとおりである。

研究顧問（2013年度）

FLEMING, Graham

柳 田 敏 雄

カリフォルニア大学バークリー校研究担当副学長

大阪大学教授

2-4-3 国際諮問委員

特定の分野等に関し、国際的な著名研究者に依頼して諮問を受けることを2012年度後半より開始した。

HITCHCOCK, Adam P.

WALES, David

カナダマックマスター大学教授 放射光分野

英国ケンブリッジ大学教授 生命分子科学（理論）分野

2-4-4 運営会議

運営会議は所長の諮問組織として設置され、現在は、所外委員10名、所内委員11名の合計21名の組織である。所外委員は、分子科学研究者コミュニティである関連学会から派遣される委員会組織の学会等連絡会議で候補が選出され、所長が決定する。所内委員は、研究主幹、研究施設長を中心として、所長が決定する。運営会議は教授会議と連携をとりながら所長候補、研究教育職員人事、共同研究、その他の重要事項について審議、検討する。所長候補者の検討は、大学共同利用機関長選考委員会から依頼を受けて運営会議で行われる。研究教育職員人事については、運営会議の中から選ばれた所外委員5名、所内5名で構成される人事選考部会の審議を運営会議の審議と見なす。一方、共同研究については、まず、運営会議の下に置かれた共同研究専門委員会で作成して、それについて運営会議で審議する。その他、共同研究以外の重要事項について運営会議の下に専門委員会を設定することが可能である。

運営会議委員（任期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 寄 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

2-4-5 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（2012，2013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 嵩 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）

2-4-6 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（2012，2013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）	櫻 井 英 博 （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）	

2-4-7 学会等連絡会議

所長の要請に基づき学会その他の学術団体等との連絡、運営会議委員各候補者等の推薦等に関するについて、検討し、意見を述べる。所長が議長を務める。

学会等連絡会議構成員（2013年度）

【所外委員】

（日本化学会推薦）

加藤 昌子（北大院教授）

田原 太平（理研主任研究員）

吉澤 一成（九大教授）

（日本物理学会推薦）

金谷 利治（京大教授）

吉 信 淳（東大教授）

（日本放射光学会推薦）

松原 英一郎（京大院教授）

（錯体化学会推薦）

大場 正昭（九大院教授）

（分子科学会推薦）

神取 秀樹（名工大院教授）

小林 昭子（日大教授）

関谷 博（九大院教授）

高塚 和夫（東大院教授）

中嶋 敦（慶應大教授）

松本 吉泰（京大院教授）

（日本生物物理学会推薦）

寺嶋 正秀（京大院教授）

【所内委員】

秋山 修志（分子研教授）

魚住 泰広（分子研教授）

小杉 信博（分子研教授）

齊藤 真司（分子研教授）

横山 利彦（分子研教授）

2-4-8 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。法人化の際も教授会議を継続することを決めた。所長が議長を務める。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、教授会議に選挙管理人を置き、その指示に従い、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。

2-4-9 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。所長が議長を務める。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、研究施設の施設長等の教授で、所長が招集し、主催する。

2-4-10 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	2013.10.22~25, 11.10~12, 12.25, 2014.1.9, 3.24~26
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	2013.7.11
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	2013.6.28
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	2014.3.3
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	2013.8.23, 2014.2.20
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	2013.9.11, 2014.1.22
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	2013.9.13
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	2013.6.11, 12.16
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	2013.10.24, 2014.1.22

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		2013.4.5, 6.7, 7.2, 10.4, 11.1, 12.2, 2014.1.7, 2.6, 3.7
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	2013.4.16, 5.28, 6.18, 7.16, 9.17, 10.15, 11.20, 12.25, 2014.1.21, 2.18
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	2013.8.21
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	2014.3.18
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	2013.5.23, 7.23, 9.5, 11.11, 2014.1.21, 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	2013.8.1, 2014.2.5
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	2013.9.30, 2014.1.21
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	2014.3.26
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	2013.4.16, 5.21, 6.17, 7.12, 8.20, 9.17, 10.15, 11.25, 12.25, 2014.1.21, 2.18, 3.18

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	2013.9.25
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	2013.4.19, 6.24, 10.28, 12.4, 2014.2.24
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	2013.9.9, 12.4
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	2013.9.4, 2014.2.24
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	2013.7.2
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	2013.5.29, 8.8
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	2013.5.30
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	2013.8.9, 9.17, 12.13
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		2013.7.31, 8.4, 11.26, 2014.1.26
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	2013.5.28
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	2013.5.28
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	2013.5.8, 7.10, 9.11, 11.13, 2014.1.8, 3.12
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	2013.7.3
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	2013.11.21
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	2013.6.18, 10.22, 2014.2.12

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
桑 島 邦 博	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

齊 藤 真 司	教 授
森 俊 文	助 教
小 野 純 一	研究員(IMS フェロー)
信 定 克 幸	准教授
飯 田 健 二	助 教
野 田 真 史	特任研究員
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

計算分子科学研究部門

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)
BOBUATONG, Karan	研究員
BOEKFA, Bundet	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)

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
三宅 伸一郎	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	特任研究員
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)

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)
初井 宇記	准教授(理化研播磨)

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
高 木 康 多	助 教
上 村 洋 平	助 教
WANG, Heng	特任研究員
脇 坂 祐 輝	特別訪問研究員
唯 美津木	教 授(委嘱)(名大物質科学国際研究センター)
石 黒 志	特任研究員(名大物質科学国際研究センター)
KITYAKARN, Sutasinee	特任研究員(名大物質科学国際研究センター)
邨 次 智	特別訪問研究員
笹 部 崇	特別訪問研究員

電子物性研究部門

山 本 浩 史	教 授(併)
須 田 理 行	助 教(併)
中 村 敏 和	准教授

分子機能研究部門

平 本 昌 宏	教 授
嘉 治 寿 彦	助 教
江 東 林	准教授
永 井 篤 志	助 教
GU, Cheng	研究員(IMS フェロー)
DALAPATI, Sasanka	研究員(IMS フェロー)
XU, Yanhong	研究員
CHEN, Xiong	研究員
JIN, Shangbin	研究員
WEI, Hao	特別訪問研究員
西 村 勝 之	准教授
谷 生 道 一	特任助教(分子科学研究所特別研究員)
加 藤 久 雄	共同研究員
細 川 洋 一	共同研究員

物質分子科学研究部門(客員研究部門)

朝 倉 哲 郎	教 授(東京農工大工)
竹 延 大 志	教 授(早稲田大先進理工)
鐘 本 勝 一	准教授(大阪市立大院理)

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
村 木 則 文	特任助教(分子科学研究所特別研究員)
加 藤 晃 一	教 授(兼)(岡崎統合バイオサイエンスセンター)
山 口 拓 実	助 教
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(併)
向 山 厚	助 教(併)
阿 部 淳	研究員
古 谷 祐 詞	准教授
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
PAN, Shiguang	研究員
櫻 井 英 博	准教授(併)

錯体物性研究部門

村 橋 哲 郎	教 授(併)
山 本 浩 二	助 教(併)
堀 内 新之介	研究員(IMS フェロー)
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
---------	-----

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	教 授(委嘱)(阪大院生命機能)
松 波 雅 治	助 教
KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika	特別訪問研究員

光化学測定器開発研究部門

繁 政 英 治	准教授
岩 山 洋 士	助 教

協奏分子システム研究センター センター長(併) 秋 山 修 志

階層分子システム解析研究部門

秋 山 修 志	教 授
向 山 厚	助 教
檜 山 卓 也	研究員
鹿 野 豊	特任准教授(若手独立フェロー)
石 崎 章 仁	特任准教授(若手独立フェロー)

小 林 玄 器	特任准教授(若手独立フェロー)
齊 藤 真 司	教 授(併)
古 谷 祐 詞	准教授(併)

機能分子システム創成研究部門

山 本 浩 史	教 授
須 田 理 行	助 教
村 橋 哲 郎	教 授
山 本 浩 二	助 教
鈴 木 敏 泰	准教授
阪 元 洋 一	助 教
黒 田 康 弘	研究員
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)
MAITY, Prasenjit	研究員
PANDIT, Palash	研究員
DHITAL, Raghu Nath	学振外国人特別研究員 '13.10.1 ~ '15.9.30
正 岡 重 行	准教授(併)

生体分子システム研究部門

青 野 重 利	教 授(兼)(岡崎統合バイオサイエンスセンター)
加 藤 晃 一	教 授(兼)(岡崎統合バイオサイエンスセンター)
藤 井 浩	准教授(兼)(岡崎統合バイオサイエンスセンター)

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
ARZAKANTSYAN, Mikayel	研究員(IMS フェロー)
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
柴 田 真 輔	共同研究員
藤 貴 夫	准教授
野 村 雄 高	助 教
白 井 英 登	研究員(IMS フェロー)

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

金 子 靖	特任専門員
中 尾 聡	研究員

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

田 中 彰 治 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

バイオセンシング研究領域

青 野 重 利 教 授

吉 岡 資 郎 助 教(兼)

北 辻 千 展 特任研究員

生命動秩序形成研究領域

加 藤 晃 一 教 授

山 口 拓 実 助 教(兼)

WANG, Ying-Hui 研究員

藤 井 浩 准教授

倉 橋 拓 也 助 教(兼)

杵 鞭 春 樹 研究員(IMS フェロー)

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)

江 原 正 博 教 授

福 田 良 一 助 教(兼)

奥 村 久 士 准教授

伊 藤 暁 助 教(兼)

石 田 干 城 助 教(兼)

大 野 人 侍 助 教

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 主 任

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	主 任
手 島 史 綱	主 任

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 高 山 敬 史

機器利用技術一係

牧 田 誠 二	主 任
藤 原 基 靖	技術職員

機器利用技術二係

岡 野 芳 則	主 任
水 川 哲 徳	主 任
上 田 正	主 任
中 野 路 子	技術職員

計算科学技術班 班 長 水 谷 文 保

計算科学技術一係

長 屋 貴 量	技術職員
---------	------

計算科学技術二係

岩 橋 建 輔	主 任
松 尾 純 一	技術職員

計算科学技術三係

内 藤 茂 樹	主 任
澤 昌 孝	技術職員

学術支援班 班 長 山 中 孝 弥

学術支援一係

賣 市 幹 大	技術職員
原 田 美 幸	主 任
南 野 智	技術職員

学術支援二係

永 田 正 明	係 長
---------	-----

* 整理日付は2014年1月1日現在。

* 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、所長および運営顧問、研究顧問によるヒアリング、また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、研究期間の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（2014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	263	154	3	14	223
転出者数	6	35	64	228	119	0	9	213
現 員	1	12(4)	12	35	35(1)	3	5	10

（ ）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	143	152
現 員	6	7

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

2014.1.1

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)	6	9(7)		9(7)
光分子科学研究領域		4(2)	0(3)	6	10(5)		10(5)
物質分子科学研究領域		2(4)	3(1)	4(1)	9(6)		9(6)
生命・錯体分子科学研究領域		1(5)	2(4)	6(2)	9(11)		9(11)
研究施設		4(8)	5(3)	13	22(11)		22(11)
技術課						35(1)	35(1)
小計	1	12(23)	12(14)	35(3)	60(40)	35(1)	95(41)
岡崎統合バイオサイエンス センター		2	1	(3)	3(3)		3(3)
計算科学研究センター		1(1)	1	(3)	2(4)		2(4)
合計	1	15(24)	14(14)	35(9)	65(47)	35(1)	100(48)

() 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	2009 年度	2010 年度	2011 年度	2012 年度	2013 年度
人件費	1,207,802	1,224,363	1,187,453	1,126,099	1,068,438
運営費，設備費	2,090,047	2,125,872	2,983,850	2,133,268	2,766,023
施設費	607,060	575,589	0	31,269	322,686
合計	3,904,909	3,925,824	4,171,303	3,290,636	4,157,147

寄付金

区 分	2009 年度	2010 年度	2011 年度	2012 年度	2013 年度
件数 (件)	43	4	10	11	10
金額 (千円)	26,770	12,870	7,409	13,340	7,125

共通研究施設を除く

科学研究費補助金

区 分	2009 年度	2010 年度	2011 年度	2012 年度	2013 年度
件数 (件)	74	64	58	61	60
金額 (千円)	334,961	381,763	312,600	236,700	222,310

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

2013 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	4	2	6
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		7	2	9
若手研究	(S)	0	0	0
若手研究	(A)	5	0	5
若手研究	(B)	16	1	17
基盤研究	(S)	1	0	1
基盤研究	(A)	3	1	4
基盤研究	(B)	9	3	12
基盤研究	(C)	9	0	9
特別研究員奨励費		2	0	2
特別研究員奨励費	外国人	1	0	1
研究活動スタート支援		2	0	2
奨励研究		1	0	1
合計		60	9	69

* 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	17,400	60,000	77,400
新学術領域研究	課題	0	0	0
特定領域研究		0	0	0
挑戦の萌芽研究		8,400	3,200	11,600
若手研究	(S)	0	0	0
若手研究	(A)	25,400	0	25,400
若手研究	(B)	22,000	700	22,700
基盤研究	(S)	14,600	0	14,600
基盤研究	(A)	21,200	10,100	31,300
基盤研究	(B)	44,700	13,300	58,000
基盤研究	(C)	12,800	0	12,800
特別研究員奨励費		2,300	0	2,300
特別研究員奨励費	外国人	400	0	400
研究活動スタート支援		2,200	0	2,200
奨励研究		300	0	300
合計		171,700	87,300	259,000

*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	2009 年度	2010 年度	2011 年度	2012 年度	2013 年度
件数 (件)	15	10	5	10	8
金額 (千円)	33,292	29,982	27,730	42,025	133,667

2013 年 12 月 31 日現在

受託研究

区 分	2009 年度	2010 年度	2011 年度	2012 年度	2013 年度
国	4	4	4	4	2
独立行政法人	20	22	22	24	15
大学等	3	1	1	2	6
民間企業他	0	0	0	1	2
合計件数 (件)	27	27	27	31	25
合計金額 (千円)	755,710	919,914	828,934	1,287,601	883,110

(岡崎共通研究施設を含む)

2013 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（2013.12）岡崎情報図書館は雑誌1,506種（和292, 洋1,214）、単行本95,720冊（和13,090, 洋82,630）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 m²、鉄筋コンクリート造2階建てで、大型スクリーン及びAV機器等を備えた200余名が参加可能な大会議室、120名の中会議室、100名の小会議室などが設けられている。中・小会議室はそれぞれ会議等の目的に応じて2分割して使用することもできる。

2-7-3 岡崎共同利用研究者宿泊施設

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

三島ロッジ	室数 シングル：60室 ツイン：14室 ファミリー：20室
-------	-------------------------------

共同設備：炊事場、洗濯室、公衆電話、情報コンセント

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

2-7-4 職員会館

職員会館は機構（岡崎3機関）の福利厚生施設として建てられ、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、赤外光スペクトル計測装置及び方法・両親媒性ポリマー担持鉄触媒、半導体レーザー励起固体レーザー装置を利用する車載式点火装置など多岐にわたっている。この中には、企業との共同出願も含まれている。これらを基にした企業との共同研究も盛んであり、基礎科学の成果が企業を通して社会に還元される道を作っている。平成24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4件）、平成25年度は、個人有0件、機構有4件（実出願1件）であった（平成26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きた。また、平成23年度からは、post-JENESYSプログラムとしてEXODASS（EXchange prOgram for the Development of Asian Scientific Society）プログラムを立ち上げ、アジア地区の若手研究者に、分子科学研究所に2週間～3ヶ月間滞在し、研究を行う機会を提供することにより、アジア地区における基礎研究の発展と研究ネットワーク構築に寄与している。

分子科学研究所は、また大学共同利用機関を基盤機関とする総合研究大学院大学・物理科学研究科に属し、構造分子科学専攻と機能分子科学専攻の二つの大学院専攻を持ち、他の大学院では整備されていない各種の高度な大型の研究施設・実験設備を活用して特色のある大学院教育を行っている。総合研究大学院大学としての分子科学研究所の2専攻では、分子科学における最先端の基礎研究を行うとともに、学生の研究課題に応じて、複数指導体制を採用し、研究活動に密着した学生セミナー、国際シンポジウム、共同研究等を通して若手研究者育成のための大学院教育を行っている。さらに、他大学の大学院生や学部学生に対しても、それぞれ受託大学院生（特別共同利用研究員制度による）、体験入学者として受け入れ、先端的な研究施設を用いて積極的な教育研究活動を行っている。総合研究大学院大学への入学資格は、修士の学位をもつ方、大学を卒業して企業等で研究に従事し、修士の学位と同等と認められる方を対象とした博士後期課程に加えて、平成18年度より学部卒を対象とした5年一貫制博士課程を導入している。入学試験は原則として毎年8月、1月の2回行っている。

3-1 研究領域

理論・計算分子科学研究領域

研究目的 分子及びその集合体、生体分子やナノ物質などの多体化学系の構造、反応、物性、機能について量子力学、統計力学などに基づく理論・計算分子科学研究により解明する

理論分子科学第一研究部門

研究目的 多体分子系の反応ダイナミクス、物性、機能の解明のための方法論の開発とそれに基づく理論・計算科学的研究

研究課題 1, 凝縮系における不均一な構造遍歴ダイナミクスおよび機能発現の理論的研究
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, 凝縮重系の新規電子状態の解明とその方法論開発

計算分子科学研究部門

研究目的 機能性分子や不均一触媒系、さらに生体分子などの電子状態や構造の解明のための方法論の開発とそれに基づく理論・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, 分子動力学シミュレーションにおける新しい手法の開発と生体系への応用

理論・計算分子科学研究部門（客員）

研究目的 1, 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で、反応や物性を光で制御すること、及びそれに必要となる高度な光源開発を目的として研究を行う

光分子科学第一研究部門

- 研究目的 主としてレーザー光源を用いた先端的分光法、顕微鏡法等を用いて、分子とその集合体の高精度・高精細な構造を明らかにすると同時に、新たな光機能の開拓や物質特性の光制御を目指した研究を行う
- 研究課題 1, 極めて高い空間分解能を持つ先端的分光法による、分子集団の励起ダイナミクス、微粒子系における励起状態と増強電場の研究
- 2, 高強度かつ高コヒーレント光による分子運動の量子状態操作法の開拓、並びに、分子構造や反応ダイナミクス研究への適用

光分子科学第二研究部門

- 研究目的 物質の量子論的な性質を、デザインされた光電場で詳細に観察し制御するための新しい方法論と、それを支える高度な光源の開発を目指した研究を行う
- 研究課題 1, 高度にデザインされたレーザー場を用いて、原子・分子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、それに関す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, 「フォトリック結晶」「フォトリックナノ構造」の物理的基礎と応用
- 2, X線顕微鏡の開発とその生物観察への応用
- 3, X線自由電子レーザーの測定システムの開発とその分子科学への応用
- 4, 高強度テラヘルツ光の発生とその分子科学研究への応用

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リソの研究
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 分子及びその集合体を示す新たな現象や有用な機能の発見を目指し、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。また、分子・分子集合体の物性・機能の起源を解明するため、主として分光法に基づいた新たな観測技術開発に努める

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, 物質科学・表面科学のための新しい分光学的計測手法の開発
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, 分子性固体の磁気共鳴研究
2, 分子を使った新しいエレクトロニクスの開発

分子機能研究部門

- 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・高分子・超分子およびデバイス創製，生体分子の構造と機能
- 研究課題 1, 有機薄膜太陽電池
2, 機能性二次元・三次元高分子の創製
3, 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

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じた新しい先端的研究分野の開拓
- 研究課題 1, 核磁気共鳴を用いた絹の精密構造解析と再生医療材料設計
2, 新奇有機機能性材料の開発・基礎物性研究ならびにデバイスへの応用
3, 有機半導体導電キャリアの電子スピン共鳴

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 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, 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
- 3, 金属酵素による酸素分子活性化機構
- 4, 窒素循環サイクルに関わる金属酵素の分子機構
- 5, 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, 赤外差分分光計測による膜タンパク質の構造機能相関解明
- 4, 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, 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
2, 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

協奏分子システム研究センター

- 研究目的 分子を軸足に「個」と「集団」を結ぶロジックを確立し，その原理をもとに斬新な分子システムを創成する

階層分子システム解析研究部門

- 研究目的 個々の分子の動態が分子間相互作用や複雑な制御ネットワークを介して多重の階層を貫き，分子システムとしての卓越した機能へ繋がっていく仕組みの解明
- 研究課題 1, 生物時計タンパク質が24時間周期のリズムを奏でる仕組みの解明
2, 分子時計システム研究のための研究基盤構築
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物理化学理論
5, 量子トンネル現象の原理的理解に関する研究
6, 多数の分子の究極測定理論と情報との関係に関する研究
7, 酸水素化物を基本とした新規機能性材料の探索
8, 電極／電解質界面の制御によるリチウム二次電池の高性能化
9, 生体分子系における反応および階層的構造変化の解明
10, 赤外分光法を基軸とした協奏分子システムの動的構造変化の解析

機能分子システム創成研究部門

- 研究目的 機能性新分子の合成と、その複合化による創発的分子ナノデバイスの創成
- 研究課題
- 1, 機能性分子の多重集積化による新規機能性分子デバイス
 - 2, π 共役系有機化合物と金属クラスターとの複合化による新型有機金属化合物
 - 3, ナノサイズのお椀と粒:「バッキーボール」と「ナノクラスター触媒」
 - 4, ナノスケール曲面を有するグラフェン半導体分子
 - 5, 金属錯体を触媒とする酸素発生・光水素発生・二酸化炭素還元とその反応場形成

生体分子システム研究部門

- 研究目的 生物が示す多彩な生命現象の分子レベルでの解明
- 研究課題
- 1, 新規な機能を有する金属タンパク質の構造と機能
 - 2, 超高磁場 NMR を機軸とする生命分子のダイナミクスの探究
 - 3, タンパク質分子が相互作用する際の認識, 情報伝達, 機能制御及びそのための実験・理論的手法の開発
 - 4, 金属酵素の機能発現の分子メカニズムの解明

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リクスの中核センターとしての役割を果たしている。

機器センター

目 的 機器センターは，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，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8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。

(A) 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。

(B) 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)

(C) 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)「ミニ国際シンポジウム」欧米など海外の研究者を含めたもの。

(エ)「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。

(D) 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。

(E) 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。

(F) 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。

(G) 機器センター施設利用：機器センターに設置された機器の個別的利用。

(H) 装置開発室施設利用：装置開発室に設置された機器の個別的利用。

3-3-2 2013 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
波長選択型有機太陽電池の開発研究	中部大学工学部 田中 基彦

(2) 協力研究

課 題 名 (通年)	代 表 者
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
凝縮相中の炭素骨格および芳香環の電子励起状態の研究	関西学院大学理工学部 尾崎 幸洋
概日リズムの分子機構の説明を目指した非線形結合系の数理	北海道大学大学院情報科学研究科 井上 純一
弱測定を用いた波動関数のダイナミクスと量子相関の直接観測	高知工科大学システム工学群 小林 弘和
金属ナノ構造体の増強光電場によるジアセチレン LB 膜の二光子重合反応の検討とナノスケール光導波路の試作	青山学院大学理工学部 坂本 章
金ナノ粒子・シリコンナノポア複合構造によるナノ局在・増強光電場の発生と蛍光分子励起特性の評価	慶應義塾大学理工学部 斎木 敏治
重水素置換ベンゼンの高分解能レーザー分光	京都大学大学院理学研究科 馬場 正昭
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
ピコ秒パルスレーザーによるレーザー誘起ブレイクダウンを用いた点火に関する研究	大阪大学大学院工学研究科 赤松 史光

高分解能電子分光による内殻励起状態の崩壊過程の研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
オージェ終状態を選別した内殻励起 cis-ヘキサフルオ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
赤外分光法を用いた新規熱電変換材料 Fe ₂ VAl 化合物の電子構造に関する研究	名古屋工業大学若手研究イノベータ養成センター	宮崎 秀俊
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

課 題 名 (前期)

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
腸管出血性大腸菌 (O-157) 感染症に対する薬剤の開発にかかわる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医療社会学研究室	尾又 一実
気相イオンの極低温冷却と NMR 分光への応用	神戸大学	富宅喜代一
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
3 原子分子を対象にした準安定多価分子イオンの生成機構解明	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
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
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
ポルフィリン単分子磁石による光誘起磁気スイッチングデバイス開発	大阪大学大学院理学研究科	田中 大輔
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
偏光 NEXAFS を用いた窒素ドープ酸化チタンの構造に関する研究	慶應義塾大学大学院理工学研究科	紋谷 祐爾
砂田格子を用いたメタマテリアル設計	京都大学大学院工学研究科	中田 陽介
光捕集アンテナにおける励起エネルギー移動ダイナミクスの分子論的機構に関する理論的研究	琉球大学理学部	東 雅大
開放系電子状態理論による光機能界面の基礎研究	放送大学教養学部	安池 智一
ZnO ナノロッド中のプロトンの固体 NMR による評価 2	大阪工業大学工学部	佐々 誠彦
分子性伝導体の単結晶広幅 NMR による電子状態の微視的研究	学習院大学理学部	開 康一
A サイト秩序型ペロブスカイト CaCu ₃ Ti _{1-x} Ru _x O ₁₂ の電子構造	弘前大学大学院理工学研究科	任 皓駿
ヒト IgG 抗体の酸性 pH により誘導された分子種の構造解析に関する研究	鹿児島大学大学院理工学研究科	伊東 祐二
赤外フェムト秒パルスレーザーの開発	福井大学大学院工学研究科	川戸 栄

課 題 名 (後期)

代 表 者

テトラセンイミドジスルフィドと各種ドーパントを用いた有機薄膜太陽電池の膜構造制御	東京大学大学院理学系研究科	松尾 豊
マンノーストリミングを介した糖タンパク質品質管理機構の研究	京都大学再生医科学研究所	細川 暢子
電気化学軟X線吸収分光法によるホウ酸ニッケル酸素生成触媒の研究	慶應義塾大学理工学部	吉田 真明
ポルフィリン単分子磁石の炭素材料上分子配列制御と光誘起磁気スイッチングデバイスの開発	大阪大学大学院理学研究科	田中 大輔
高原子価金属-フェノラート錯体の性質と反応性	茨城大学理学部	島崎 優一
9,9-ジアリール-2,7-フルオレンジイル骨格を有する高屈折性芳香族ポリケトン	山形大学大学院理工学研究科	前山 勝也
非線型量子ウォークの極限確率分布の解明	茨城大学工学部	和田 達明
腸管出血性大腸菌 (O-157) 感染症に対する薬剤の開発にかかわる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医療社会学研究室	尾又 一実
グラフェン薄膜のエッジ状態の角度分解光電子分光	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
光捕集アンテナにおける励起エネルギー移動ダイナミクスの分子論的機構に関する理論的研究	琉球大学理学部	東 雅大
気相イオンの極低温冷却と NMR 分光への応用	神戸大学	富宅喜代一
パルス圧縮を用いた大強度短パルス放射光発生に関する研究	京都大学エネルギー理工学研究所	全 炳俊
常温接合を用いた高機能固体レーザーの開発	中央大学理工学部	庄司 一郎
クマル酸誘導体とその水和系の非断熱緩和ダイナミクス	広島大学大学院理学研究科	江幡 孝之
Electronic structure of hexagonal Ge multilayers	北陸先端科学技術大学院大学マテリアルサイエンス研究科	FRIEDLEIN, Rainer
極限電子ビーム源としてのマルチアルカリカソード生成条件の最適化研究	広島大学大学院先端物質科学研究科	栗木 雅夫
二酸化炭素の酸素 1s 内殻励起時の低エネルギー光電子スペクトル測定	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	下條 竜夫
アンジュレタ高次光が持つ新奇な性質の解明	広島大学放射光科学研究センター	佐々木茂美
赤外フェムト秒パルスレーザーの開発	福井大学大学院工学研究科	川戸 栄

(3) 研究会

- ① 【ミニ国際シンポジウム】
レーザーフィラメンテーション技術の基礎と応用
Fundamentals and Applications of Laser Filaments
2013年4月4日(木)～6日(土) 岡崎コンファレンスセンター

April 4 (Thursday)

- 9:30- 9:45 A. Terasaki (Kyushu University, Japan)
Opening address
- 9:45-10:30 L. Wöste (Freie Universität Berlin, Germany)
Fundamentals and applications of plasma filaments: An overview of achievements from the Teramobile project
- 10:30-11:00 Coffee break
- 11:00-11:45 T. Fujii (Central Research Institute of Electric Power Industry, Japan)
Interaction of femtosecond-laser-induced filament plasma with external electric field in atmosphere and its application
- 11:45-12:15 T. Siebert (Max-Born-Institut Berlin, Germany)
Methodology for applications in supercontinuum spectroscopy: Pulse compression, shaping, and analysis
- 12:15-12:45 K. Yoshihara (Emeritus Professor of Institute for Molecular Science, Japan)
UV-light assisted water droplet/aerosol formation in air
- 12:45-14:15 Lunch
- 14:15-15:00 T. Leisner (Karlsruher Institut für Technologie, Germany)
Laser filament–cloud interactions
- 15:00-15:30 T. Fuji (Institute for Molecular Science, Japan)
Coherent control of mid-infrared pulse generation by using four-wave mixing through filamentation
- 15:30-16:00 A. Baltuska (Technische Universität Wien, Austria)
Femtosecond mid-infrared filamentation and remotely-induced gas lasing
- 16:00-16:30 Coffee break
- 16:30-17:15 T. Suzuki (Kyoto University, Japan)
Ultrafast photoelectron spectroscopy in gas and liquid phases
- 17:15-17:45 L. Shah (University of Central Florida, U.S.A.)
Prospects of femtosecond fiber lasers for filamentation applications
- 17:45-18:15 S. Utsunomiya (Kyushu University, Japan)
Radioactive contamination derived from the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant accident
- 18:15-20:00 Welcome party and Poster session

April 5 (Friday)

- 9:00- 9:45 S. L. Chin (Laval University, Canada)
Molecular lasing inside a filament
- 9:45-10:30 T. Kobayashi (University of Electro-Communications, Japan)
Proposal of a novel pulse cleaning method for the generation of stable filamentation
- 10:30-11:00 Coffee break
- 11:00-11:45 S. Tzortzakis (IESL-FORTH Heraklion, Greece)
Taming filaments and strong THz fields
- 11:45-12:15 A. Nakajima (Keio University, Japan)
Ultrafast laser spectroscopy for surface photoemission via two-photon probing
- 12:15-12:45 L. Gallmann (ETH Zürich, Switzerland)
Engineered QPM based OPCPA for few-cycle pulse compression in the mid-infrared
- 12:45-13:30 Lunch
- 13:30-17:45 Excursion
- 17:45-19:45 Conference dinner

April 6 (Saturday)

- 9:00- 9:45 U. Keller (ETH Zürich, Switzerland)
High average power pulse compression into the few cycle regime—different options and trade-offs
- 9:45-10:30 S. Minemoto (University of Tokyo, Japan)
Imaging atomic and molecular orbitals with high-order harmonic spectroscopy
- 10:30-11:00 Coffee break
- 11:00-11:45 M. Richardson (University of Central Florida, U.S.A.)
Recent studies of air filamentation
- 11:45-12:15 N. Nakashima (Toyota Physical and Chemical Research Institute)
Change of M(III) to M(II): M = Eu, Sm, Yb, Fe in solution by femtosecond laser excitation accompanied by generation of white-light laser

12:15-12:45	G. Steinmeyer (Max-Born-Institut Berlin, Germany) Rogue waves in multi-filaments: A rough optical sea
12:45-14:15	Lunch
14:15-15:00	E. Rühl (Freie Universität Berlin, Germany) Interactions of short pulse laser radiation with gases and nanoscopic matter
15:00-15:30	A. Hishikawa (Nagoya University, Japan) Ultrafast dissociative ionization in few-cycle intense laser fields
15:30-15:50	A. Terasaki (Kyushu University, Japan) Concluding remarks

② 【ミニ国際シンポジウム】
分子ダイナミクスの階層性——超高速分光から一分子測定による解析まで——
Hierarchical Molecular Dynamics: From Ultrafast Spectroscopy to Single Molecule Measurements
2013年5月25日(土)～26日(日) 岡崎コンファレンスセンター

May 25

9:15-10:00	Registration
Session 1	Chair: Shinji Saito (IMS)
10:00-10:10	Iwao Ohmine (IMS) Opening Address
10:10-10:45	Shaul Mukamel (Univ. California, Irvine) Coherent Multidimensional Stimulated X-Ray Raman Spectroscopy of Molecules
10:45-11:20	Satoshi Takeuchi (RIKEN) Femtosecond Raman Tracking of Initial Structural Evolution in Reacting Molecules
11:20-11:55	R. J. Dwayne Miller (Max Plank Institute Hamburg) Do We Live in a Quantum World?—A New Twist
Session 2	Chair: Yasuhisa Mizutani (Osaka Univ.)
13:30-14:05	Yasuhiro Ohshima (IMS) Coherent Excitation of Molecular Motions by Intense Ultrashort Pulses
14:05-14:40	Peter Hamm (Univ. Zurich) Two-Dimensional Raman-THz Spectroscopy of Water
Session 3	Chair: Akihito Ishizaki (IMS)
15:00-15:35	Takayuki Uchihashi (Kanazawa Univ.) Single-Molecule Imaging of Proteins at Work with High-Speed Atomic Force Microscopy
15:35-16:10	Philipp Kukura (Univ. Oxford) Interferometric Scattering Microscopy: A New Look into the Nano-World
16:10-16:45	Shuji Akiyama (IMS) Circadian Pacemaker of Cyanobacteria by Intra-Molecular Feedback Regulation of KaiC ATPase
16:45-18:00	Poster Presentation
18:30	Banquet (at Okazaki New Grand Hotel)

May 26

Session 4	Chair: Yuji Furutani (IMS)
9:00- 9:35	Hideki Kandori (Nagoya Institute of Technology) Microbial Rhodopsins from the Ocean
9:35-10:10	Joachim Heberle (Freie Universität Berlin) Transient Protonation Changes in Channelrhodopsin-2 and Their Relevance to Channel Gating
Session 5	Chair: Kunihiko Ishii (RIKEN)
10:30-11:05	Shoji Takada (Kyoto Univ.) Large-Scale Functional Dynamics of p53 Studied by Multi-Scale Molecular Simulations
11:05-11:40	Gilad Haran (Weizmann Institute of Science) Single-Molecule FRET Studies of Multi-State Protein Folding
Session 6	Chair: Tahei Tahara (RIKEN)
13:30-14:05	Satoshi Takahashi (Tohoku Univ.) Microsecond-Resolved Tracking of the Unfolded State of BdpA by a Line Confocal Detection of Single Molecule Fluorescence
14:05-14:40	Akinori Kidera (Yokohama City Univ.) Hierarchical Dynamics of Protein Molecules Revealed by Molecular Dynamics Simulations
14:40	Closing Remark

③ 【アジア連携分子研研究会】

日中合同若手シンポジウム——革新的配位材料

Japan-China Joint Coordination Chemistry Symposium for Young Scientists on Advanced Coordination Materials

2013年6月13日(木)～15日(土) 分子科学研究所 実験棟301－303号室

June 13 (Thursday) Registration and Welcome banquet (Okazaki Grand Hotel)

June 14 (Friday)

8:50- 9:00 Opening remarks (Chairperson: Tetsuro Murahashi)
Jing-Lin Zuo & Takafumi Ueno

Session I Chairperson: Tetsuro Murahashi

9:00- 9:30 Sigeyuki Masaoka (Institute for Molecular Science)
Water Oxidation by Mono- and Multinuclear Metal Complexes

9:30-10:00 Yujie Xiong (University of Science and Technology of China)
Surface and Interface Modulation for Tuning Catalytic Performance of Inorganic Nanocrystals

10:00-10:30 Photo and Coffee break

Session II Chairperson: Wen-Ping Hu

10:30-11:00 Masayoshi Higuchi (National Institute for Materials Science)
Electro- and Photo-Chemical Devices with Organic-Metallic Hybrid Polymers

11:00-11:30 Masayuki Takeuchi (National Institute for Materials Science)
Functional Supramolecular Materials Based on Designed π -Conjugated Molecules

11:30-12:00 Jun-Hua Luo (Fujian Institute of Research on the Structure of Matter)
Polar Molecular Optoelectronic Crystalline Materials

12:00-13:30 Lunch

Session III Chairperson: Teppei Yamada

13:30-14:00 Yutaka Matsuo (The University of Tokyo)
Precise Synthesis of Co₈S₁₅ Cluster inside the Bowl-Shaped Templating Fullerene Ligand

14:00-14:30 Wen-Ping Hu (Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences)
Organic Field-Effect Transistors

14:30-15:00 Ryota Sakamoto (The University of Tokyo)
Coordination Programming of Photo- and Electro-Functional Molecular Assemblies

15:00-15:30 Soichiro Yoshimoto (Kumamoto University)
Formation and Nanoscale Characterization of 2D Molecular Assembly at Solid-Liquid Interface

15:30-15:50 Coffee break

Session IV Chairperson: Guang-Shan Zhu

15:50-16:20 Tetsuro Murahashi (Institute for Molecular Science)
Dynamic Structural Changes of Multinuclear Sandwich Complexes

16:20-16:50 Jing-Lin Zuo (Nanjing University)
Giant Metallo-Supramolecular Cages Encapsulating Single-Molecule Magnets

16:50-17:00 Coffee break

Session V Chairperson: Jing-Lin Zuo

17:00-17:30 Michito Yoshizawa (Tokyo Institute of Technology)
Micelle-Like Molecular Capsules as Photoactive Hosts

17:30-18:00 Zhi-Yong Tang (National Center for Nanoscience and Technology)
Inorganic Nanoparticle-Metal Organic Framework Core-Shell Nanostructures: A Novel Multifunctional Platform

19:00 Dinner

June 15 (Saturday)

Session VI Chairperson: Michito Yoshizawa

9:00- 9:30 Teppei Yamada (Kyushu University)
Proton Conductivity of Acidic Metal–Organic Frameworks

9:30-10:00 Jie-Peng Zhang (Sun Yat-Sen University)
Porous Metal Azolate Frameworks

10:00-10:30 Takashi Uemura (Kyoto University)
Polymer Chemistry in Coordination Nanospaces

10:30-11:00 Coffee break

Session VII Chairperson: Xun Wang

11:00-11:30 Yan-Zhen Zheng (Xi'an Jiaotong University)
Coordination Chemistry as a Key Engine for Magnetic Cooling

11:30-12:00 Yuichi Negishi (Tokyo University of Science)
Precise Synthesis and Functionalization of Magic Gold Clusters

12:00-13:30 Lunch

<i>Session VIII</i>	<i>Chairperson: Hikaru Takaya</i>
13:30-14:00	Guang-Shan Zhu (Jilin University) Constructing Porous Materials for Gas Storage and Separation
14:00-14:30	Takane Imaoka (Tokyo Institute of Technology) Precise Synthesis of Monodisperse Subnanoparticles
14:30-15:00	Xun Wang (Tsinghua University) Inorganic Nanostructure with Sizes down to 1nm: A Macromolecule Analogue
15:00-15:20	Coffee break
<i>Session IX</i>	<i>Chairperson: Jun-Long Zhang</i>
15:20-15:50	Koji Harano (The University of Tokyo) Surface Programming of Sub-100 nm-Sized Fullerene Bilayer Vesicles
15:50-16:20	Hikaru Takaya (Kyoto University) Metal Array Fabrication Based on Metalated Amino Acids and Peptides: Emerging Function on Multi-Metal Supramolecular Assembly
16:20-16:50	Jun-Long Zhang (Peking University) Design of Luminescent ZnSalens for Molecular Imaging
16:50-17:00	Coffee break
<i>Session X</i>	<i>Chairperson: Koji Harano</i>
17:00-17:30	Akira Onoda (Osaka University) Programmed Hierarchical Assemblies of Hemoproteins toward Functional Biodevices
17:30-18:00	Takafumi Ueno (Tokyo Institute of Technology) Expanding Coordination Chemistry from Protein to Protein Assembly
18:00-18:10	Closing remarks
18:30	Dinner

④ 【ミニ国際シンポジウム】
最先端分光で切り拓く強相関電子系の未来
IMS Workshop on Advanced Spectroscopy of Correlated Materials (ASCM 13)
2013 年 8 月 2 日 (金) ~ 4 日 (日) 岡崎コンファレンスセンター

August 2nd (Friday) Place: 3rd floor of UVSOR Facility, Institute for Molecular Science

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

August 3rd (Saturday)

10:00-10:10 Opening remarks: Hidetoshi Miyazaki (Nagoya Institute of Technology, Japan)

1. *Heavy Fermion systems (Chair: M. Matsunami, UVSOR)*

10:10-10:35 [Invited] Global k-space perspective of temperature-dependent U 5f-states in URu₂Si₂
Jonathan Denlinger (Lawrence Berkeley National Laboratory, USA)
10:35-11:00 [Invited] Soft X-ray ARPES study of uranium compounds
Shin-ichi Fujimori (Japan Atomic Energy Agency, Japan)
11:00-11:25 [Invited] Optical study of archetypical valence-fluctuating Eu systems
Jörg Sichelschmidt (MPI Chemische Physik fester Stoffe, Germany)
11:25-11:50 [Invited] Low-energy optics of uranium-based heavy Fermions: Drude response of slow and fast electrons
Marc Scheffler (Universität Stuttgart, Germany)
11:50-13:00 Group Photo + Lunch

2. *Molecular solids and Novel technical aspects including new synchrotron beam lines (Chair: R. Gemma, NIT)*

13:00-13:25 [Invited] Time-resolved ARPES of graphite using femtosecond pulsed light in the deep-to-extreme UV region
Yukiaki Ishida (University of Tokyo, Japan)
13:25-13:45 [Contributed] Electron-phonon coupling investigation via phonon dispersion measurement in graphite by angle-resolved photoelectron spectroscopy
Shin-ichiro Tanaka (Osaka University, Japan)
13:45-14:05 [Contributed] Angle-resolved photoemission study of quasi-one-dimensional organic conductor
Takahiro Ito (Nagoya University, Japan)
14:05-14:20 Coffee Break
14:20-14:45 [Invited] Angle resolved photoemission spectroscopy of two dimensional organic metal
Takayuki Kiss (Osaka University, Japan)
14:45-15:15 [Invited] SOR-ARPES studies on π -electronic interaction in organic films and interfaces
Hiroyuki Yamane (Institute for Molecular Science, Japan)
15:30-16:30 UVSOR Site Tour

16:30-18:30 Check-in and Free Time
 18:45-21:00 Open-air Banquet at IMS (Okazaki fireworks festival)

August 4th (Sunday) Place: Conference room C, Okazaki Conference Center

3. *Rare-earth and transition metal oxides* (Chair: H. Miyazaki, NIT)

9:00- 9:25 [Invited] Observation of laser-induced magnetization precession in ferromagnetic EuO
 Takayuki Makino (University of Fukui, Japan)
 9:25- 9:50 [Invited] Investigating the Spin-Polarized Metal-Insulator Transition in Carrier Doped Eu_{1-x}Gd_xO Thin Films and Heterostructures by ARPES
 Kyle Shen (Cornell University, U.S.A.)
 9:50-10:15 [Invited] Quantum confinement of strongly correlated electrons in oxide artificial structures
 Kohei Yoshimatsu (Tokyo Institute of Technology, Japan)
 10:15-10:40 Coffee Break

4. *Topological insulators* (Chair: S. Kimura, Osaka Univ. and UVSOR)

10:40-11:05 [Invited] Theoretical proposal of topological insulator for a Kondo insulator SmB₆
 Tetsuya Takimoto (Hanyang University, Korea)
 11:05-11:30 [Invited] Topological phase transitions in ultrathin films
 Toru Hirahara (University of Tokyo, Japan)
 11:30-11:55 [Invited] Spin- and angle- resolved photoemission as a direct probe of spin textures in topological insulators
 Akio Kimura (Hiroshima University, Japan)
 11:55-12:20 [Invited] Local orbital angular momentum and circular dichroism ARPES
 Changyoung Kim (Yonsei University, Korea)
 12:20-12:30 Closing remarks: Shin-ichi Kimura (Osaka University and UVSOR, Japan)

⑤ 【分子研研究会（一般）】

光による分子性伝導体の電子相制御

2013 年 10 月 3 日（木）～ 4 日（金） 岡崎コンファレンスセンター

10 月 3 日（木）【一日目】

13:30-13:35 はじめに
 山本 浩史（分子研）

I. 新物質

13:35-14:00 「紫外光に応答して磁性と金属的伝導性を可逆的に発現する分子結晶」
 内藤 俊雄（愛媛大）
 14:00-14:25 「スピנקロスオーバー伝導体とその関連物質の外場応答」
 高橋 一志（神戸大）
 14:25-14:50 「分子性導体を用いた光駆動型超伝導トランジスタの開発」
 須田 理行（分子研）
 14:50-15:15 「パイ共役ポリマーの自己組織化による球状構造体形成と特異な発光特性」
 山本 洋平（筑波大）
 15:15-15:25 <休憩>

II. 分光測定とその理論（1）

15:25-15:50 「極超短パルス光で見る、操る、強相関電子・スピン・格子～モノサイクル制御を目指して～」
 岩井 伸一郎（東北大）
 15:50-16:15 「電子型強誘電転移を示す有機伝導体の探索」
 山本 薫（岡山理科大）
 16:15-16:40 「ダイマーモット絶縁体の光誘起相転移の初期過程」
 高橋 聡（名工大）
 16:40-17:05 「分子性導体の第一原理計算に基づくモデル化と多様な電子相図」
 妹尾 仁嗣（理研）
 17:05-17:30 「分子性導体の光誘起相転移における電子と構造の異なるダイナミクス」
 恩田 健（東工大）

10 月 4 日（金）【二日目】

III. デバイスと電氣的測定

9:00- 9:25 「色素ドーパナノ粒子 SET の光誘起スイッチング特性」
 野口 裕（千葉大）
 9:25- 9:50 「電気伝導と磁化からみた分子性導体の光応答」
 飯森 俊文（室蘭工大）
 9:50-10:15 「二次元高分子による π 電子構造の制御」
 江 東 林（分子研）

10:15-10:40 「光による α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の絶縁破壊」
田嶋 尚也 (東邦大)

10:40-10:50 <休憩>

IV. 分光測定とその理論 (2)

10:50- 「光・テラヘルツ波による電子型強誘電体の超高速分極制御」
岡本 博 (東大)

11:15-11:40 「dmit 錯体における光誘起相転移の探索」
石川 忠彦 (東工大)

11:40-12:15 「電荷秩序系の光照射効果の理論」
橋本 博志 (東北大)

12:15-12:20 閉会の辞

⑥ 【分子研研究会 (一般)】
 π 造形科学：複学理インテグレーションによる未来材料開拓
2013 年 10 月 25 日 (金) ~ 26 日 (土) 分子科学研究所 山手 4 号館 3 階会議室

10 月 25 日

13:30 開会の挨拶 磯部寛之 (東北大)

13:35 第 1 部： π 造形科学における合成化学の進歩 (座長 櫻井英博)
「バッキーボウルを基盤とした π 分子造形イノベーション」
櫻井英博 (分子科学研究所)
「安定な反芳香族化合物の創成と三次元芳香族性の実現」
忍久保 洋 (名古屋大学)
「 π 造形のための新しい触媒的芳香環構築反応の開発と応用」
田中 健 (東京農工大学)
「開殻 π 電子系分子の新奇造形技術と新物性の開拓」
鈴木修一 (大阪市立大学)
「典型元素を用いたボウル型 π 造形と革新的物性の発掘」
斉藤雅一 (埼玉大学)

14:55 休憩

15:10 第 2 部： π 造形集積科学が目指すもの (座長 芥川智行)
「強誘電性・強弾性機能の発現を目指したソフト π 集積システム造形」
芥川智行 (東北大学)
「大規模分子集積化による巨視的 π 造形システムの構築と新機能開拓」
福島孝典 (東京工業大学)
「 π 共役系高分子の集合状態造形」
竹内正之 ((独) 物質・材料研究機構)
「溶液デバイスの実現に向けた動的複合 π アセンブリー造形」
矢貝史樹 (千葉大学)

16:30 第 3 部： π 造形科学を支える物理学 (座長 杉本学)
「 π 造形科学のための理論設計・解析手法の開発と応用」
杉本 学 (熊本大学)
「 π 造形システム集合体の物性制御」
竹延大志 (早稲田大学)
「発達 π 電子系を有する分子の複合電磁波分光法と電子機能予測」
佐伯昭紀 (大阪大学)

17:30 初日の議論の感想 佐藤 健太郎 (サイエンスライター)

18:00 懇親会

10 月 26 日

9:30 フリーディスカッション

11:50 閉会の挨拶 福島孝典

12:00 解散

⑦ 【分子研研究会 (一般)】
ロドプシン研究の故きを温ねて新しきを知る
2013 年 11 月 18 日 (月) ~ 19 日 (火) 岡崎コンファレンスセンター

11 月 18 日 (月)

13:00 - 13:05 はじめに 今元 泰 (京都大学)

I. 生物の多彩な光受容 座長：菊川峰志（北海道大学）

- 13:05 - 13:25 井上圭一（名古屋工業大学大学院工学研究科）
光駆動ナトリウムポンプの発見と展開
- 13:25 - 13:50 岡野俊行（早稲田大学理工学術院）
青色光による遺伝子発現の制御と青色光受容分子の解析
- 13:50 - 14:10 山崎洋一（奈良先端科学技術大学院大学）
PYP の分光学的性質の多様性獲得機構
- 14:10 - 14:30 斉藤圭亮（大阪大学大学院理学研究科）
ロドプシンの機能に違いを生み出す水素結合強度の違い

II. 細胞の光応答の分子基盤 座長：佐藤恵太（京都大学）

- 14:50 - 15:10 小島大輔（東京大学大学院理学系研究科）
動物の背地適応を制御する光受容分子の探索
- 15:10 - 15:35 寺北明久（大阪市立大学大学院理学研究科）
松果体関連器官の波長識別の分子基盤
- 15:35 - 15:55 佐藤慎哉（大阪大学大学院理学研究科）
コイ錐体での視物質再生に関与する 11- シスレチナール生成反応，AL-OL 反応の解析
- 15:55 - 16:05 集合写真
- 16:05 - 18:00 ポスター発表
- 18:00 - 20:00 懇親会

11 月 19 日（火）

III. レチナール蛋白質の光構造変化 座長：筒井 圭（京都大学）

- 9:00 - 9:20 古谷祐詞（分子科学研究所）
微生物型ロドプシンから様々な膜タンパク質研究へ—時間分解フーリエ変換赤外分光法による構造変化解析—
- 9:20 - 9:40 今元 泰（京都大学大学院理学研究科）
構造ダイナミクスからみたロドプシンの活性化機構
- 9:40 - 10:05 内藤 晶（横浜国立大学大学院工学研究院）
光照射固体 NMR による光受容膜タンパク質の活性中間体の捕捉と構造変化の解明

IV. レチナール蛋白質研究の新規アプローチ 座長：片山耕大（名古屋工業大学）

- 10:25 - 10:45 神谷基司（京都大学大学院理学研究科）
レチナールの化学
- 10:45 - 11:10 水谷泰久（大阪大学大学院理学研究科）
ロドプシン研究に共鳴ラマン分光学が寄与したもの、そしてこれから
- 11:10 - 11:35 田原太平（理化学研究所）
光受容蛋白質のフェムト秒ダイナミクスの観測と理解
- 11:35 - 11:55 川村 出（横浜国立大学大学院工学研究院）
固体 MAS NMR によるフォボロドプシンのレチナールタンパク質間相互作用の解析

V. レチナール蛋白質と G 蛋白質共役型受容体の多様性 座長：石北 央（大阪大学）

- 13:00 - 13:20 山下高廣（京都大学大学院理学研究科）
脊椎動物非視覚オプシン Opn5 グループの多様な分子特性
- 13:20 - 13:40 今井啓雄（京都大学霊長類研究所）
霊長類味覚受容体の機能解析
- 13:40 - 14:05 神山 勉（名古屋大学大学院理学研究科）
古細菌型ロドプシンの構造比較

VI. レチナール蛋白質研究の将来にむけて 座長：和田昭盛（神戸薬科大学）

- 14:25 - 14:50 山中章弘（名古屋大学環境医学研究所）
ロドプシンを用いて神経活動を操作し、個体行動を制御する
- 14:50 - 15:10 須藤雄気（名古屋大学大学院理学研究科）
微生物型レチナールタンパク質の非常識で未来を拓く
- 15:10 - 15:35 神取秀樹（名古屋工業大学大学院工学研究科）
ロドプシン研究の現状と我々のアプローチ
- 15:35 - 16:00 七田芳則（京都大学大学院理学研究科）
脊椎動物ロドプシンの分子構築を自然から学ぶ
- 16:00 - 16:05 おわりに 古谷祐詞（分子研）

⑧ 【アジア連携分子研研究会】
 日韓生体分子科学セミナー——実験とシミュレーション
 6th Japan-Korea Seminars on Biomolecular Science: Experiments and Simulation
 2013 年 11 月 25 日 (月) ~ 27 日 (水) 岡崎コンファレンスセンター

November 25 (Mon)

【Chair: Yuji Furutani (IMS)】

10:00-10:25 Akihito Ishizaki (IMS)
 QUANTUM DYNAMIC ASPECTS IN PHOTOSYNTHETIC LIGHT HARVESTING—OLD ROOTS, NEW SHOOTS

10:25-10:50 Young Min Rhee (POSTECH)
 INTERPOLATED MECHANICS/MOLECULAR MECHANICS STUDIES ON THE DYNAMICS OF FLUORESCENT PROTEINS

10:50-11:10 coffee break

【Chair: Shigetoshi Aono (IMS)】

11:10-11:35 Yuji Furutani (IMS)
 STIMULUS-INDUCED DIFFERENCE FTIR SPECTROSCOPY ON ION-CHANNEL AND ION-PUMP PROTEINS

11:35-12:00 Osami Shoji (Nagoya Univ.)
 GASEOUS ALKANE HYDROXYLATION CATALYZED BY CYTOCHROME P450BM3 BY TRICKING ITS SUBSTRATE RECOGNITION USING DECOY MOLECULES

12:00-13:30 lunch

【Chair: Young Min Rhee (POSTECH)】

13:30-13:55 Jinwoo Lee (Kwangwoon Univ.)
 A NOVEL APPROACH TO NON-EQUILIBRIUM THERMODYNAMICS

13:55-14:20 Nam Ki Lee (POSTECH)
 SINGLE-VESICLE FRET ASSAY FOR THE NEUROTOXICITY OF A-SYNUCLEIN OLIGOMERS IN PARKINSON'S DISEASE: INHIBITING NEURONAL SNARE-MEDIATED VESICLE FUSION

14:20-14:45 Naoyuki Inagaki (Nara Inst. of Sci. & Tech.)
 SIGNAL-FORCE TRANSDUCTION IN AXON OUTGROWTH AND GUIDANCE

14:45-15:05 coffee break

【Chair: Yuji Furutani (IMS)】

15:05-15:30 Jaehoon Yu (Seoul National Univ.)
 A PEPTIDE MIMETIC OF APOLIPOPROTEIN A-I THAT CONTAINS 2-NAPHTHYLAMINE RESIDUES ENHANCES CHOLESTEROL EFFLUX AND SEQUESTERS OXIDIZED LDL FROM MACROPHAGE CELLS

15:30-15:55 Changbong Hyeon (KIAS)
 UREA-INDUCED DENATURATION OF RNA

15:55-16:20 Chaok Seok (Seoul National Univ.)
 GALAXY 2013 TESTED ON RECENT COMMUNITY-WIDE PREDICTION EXPERIMENTS

16:20-16:40 coffee break

【Chair: Hisashi Okumura (IMS)】

16:40-16:55 Balachandran Manavalan (KIAS)
 RANDOM FOREST-BASED PROTEIN MODEL QUALITY ASSESSMENT (RFMQA) USING STRUCTURAL FEATURES AND POTENTIAL ENERGY TERMS

16:55-17:10 Takumi Yamaguchi (IMS)
 PARAMAGNETISM-ASSISTED NMR EVALUATION OF MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS FOR CONFORMATIONAL CHARACTERIZATION OF OLIGOSACCHARIDES

16:55-17:10 Takumi Yamaguchi (IMS)
 PARAMAGNETISM-ASSISTED NMR EVALUATION OF MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS FOR CONFORMATIONAL CHARACTERIZATION OF OLIGOSACCHARIDES

17:10-17:25 Tadashi Satoh (Nagoya City Univ. & JST PRESTO)
 STRUCTURAL BASIS FOR PROTEASOME FORMATION MEDIATED BY ASSEMBLY CHAPERONE NAS2

17:25-17:40 Min-Kyu Kim (KIOST)
 CRYSTAL STRUCTURES OF COLD-ACTIVE β -MANNANASE AND ITS MANNOPENTAPOSE COMPLEXES FROM ANTARCTIC SPRINGTAIL, *Cryptopygus antarcticus*

18:00 Free Discussion/Mixer

November 26 (Tue)

【Chair: Jooyoung Lee (KIAS)】

- 9:30- 9:55 Julian Lee (Soongsil Univ.)
EXACT PARTITION FUNCTION ZEROS OF THE WAKO-SAITÔ-MUÑOZ-EATON PROTEIN MODEL
- 9:55-10:20 Fumio Hirata (Ritsumeikan Univ.)
ROLE OF WATER TO CONVERT "NON-BIOLOGICAL" FLUCTUATION TO THE "BIOLOGICAL" ONE
- 10:20-10:40 coffee break

【Chair: Seokmin Shin (Seoul National Univ.)】

- 10:40-11:05 Jooyoung Lee (KIAS)
HIGH-ACCURACY PROTEIN STRUCTURE MODELING AND ITS APPLICATION TO MOLECULAR REPLACEMENT OF CRYSTAL PHASING
- 11:05-11:30 Hisashi Okumura (IMS)
REPLICA-PERMUTATION METHOD FOR PROTEIN SIMULATIONS AND PRESSURE-INDUCED DENATURATION
- 11:30-11:55 Sun Choi (Ewha Womans Univ.)
COMPUTER-AIDED DRUG DESIGN AND MOLECULAR MODELING STUDIES FOR THE DISCOVERY OF COVALENT INHIBITORS
- 11:55-13:30 lunch

【Chair: Sun Choi (Ewha Womans Univ.)】

- 13:30-13:55 Seokmin Shin (Seoul National Univ.)
UNDERSTANDING AMYLOID FORMATION
- 13:55-14:20 Hirofumi Sato (Kyoto Univ.)
MOLECULAR THEORIES OF SOLVATION, FLUCTUATION AND DIFFUSION IN AQUEOUS SOLUTION
- 14:20-14:45 Weontae Lee (Yonsei Univ.)
STRUCTURE AND DYNAMICS OF C-TERMINAL REGULATORY DOMAIN OF *Vibrio vulnificus* EXTRACELLULAR METALLOPROTEASE
- 14:45-15:05 coffee break

【Chair: Kunihiro Kuwajima (SOKENDAI)】

- 15:05-15:30 Sung-il Yoon (Kangwon National Univ.)
CONSERVED, BUT DISTINCT, ACTIVATION OF TOLL-LIKE RECEPTOR 5 BY FLAGELLIN
- 15:30-15:55 Keehyoung Joo (KIAS)
NMR STRUCTURE DETERMINATION BY CONFORMATIONAL SPACE ANNEALING
- 15:55-16:10 Chihiro Kitatsuji (IMS)
MOLECULAR MECHANISM FOR HEME-MEDIATED INHIBITION OF THE 5-AMINOLEVULINIC ACID SYNTHASE 1
- 16:10-16:30 coffee break

【Chair: Koichi Kato (IMS)】

- 16:30-16:45 Norifumi Muraki (IMS)
STRUCTURAL BASIS FOR PROTOCHLOROPHYLLIDE REDUCTION IN THE CHLOROPHYLL BIOSYNTHESIS
- 16:45-17:00 In Suk Joung (KIAS)
A SIMPLE STRUCTURE-BASED MODELING FOR EXPLORING MACRO-MOLECULAR CONFORMATIONAL CHANGES
- 17:00-17:15 Sim Jun (Soongsil Univ.)
GRAPH-THEORY BASED COMPUTATION OF PROTEIN RIGID BLOCKS
- 18:00 Banquet

November 27 (Wed)

【Chair: Shingo Nagano (Tottori Univ.)】

- 9:30- 9:55 Hironari Kamikubo (Nara Inst. of Sci. & Tech.)
FUNCTIONAL MODIFICATION OF A PROTEIN BY USING ELEMENT IMPLANTATION
- 9:55-10:20 Shuji Akiyama (IMS)
KaiC AS CIRCADIAN PACEMAKER OF CYANOBACTERIAL CIRCADIAN CLOCK
- 10:20-10:40 coffee break

【Chair: Soo Hyun Eom (GIST)】

- 10:40-11:05 Genji Kurisu (Osaka Univ.)
STRUCTURAL STUDIES OF THE CYTOPLASMIC DYNEIN MOTOR DOMAIN
- 11:05-11:30 Koichi Kato (IMS)
AN ARCHAEL HOMOLOGY OF PROTEASOME ASSEMBLY CHAPERONE FORMS A HOMOTETRAMER AND FUNCTIONS AS PROTEASOME ACTIVATOR

11:30-11:55 Sun-Shin Cha (KIOST)
ZINC-BINDING TO THE SURFACE OF PROTEINS AND ITS APPLICATION TO EXPERIMENTAL PHASING

11:55-13:30 lunch

【Chair: Fumio Hirata (Ritsumeikan Univ.)】

13:30-13:55 Soo Hyun Eom (GIST)
CRYSTAL STRUCTURE OF THE CORE DOMAIN OF HUMAN SWIPROSIN-1, CALCIUM DEPENDENT ACTIN BUNDLING PROTEIN

13:55-14:20 Kunihiro Kuwajima (SOKENDAI)
IRREVERSIBLE DENATURATION OF *Escherichia coli* MALTODEXTRIN GLUCOSIDASE

14:20-14:45 Shun Hirota (Nara Inst. of Sci. & Tech.)
OLIGOMERIZATION OF HEME PROTEINS BY DOMAIN SWAPPING

14:45-15:05 coffee break

【Chair: Shun Hirota (Nara Inst. of Sci. & Tech.)】

15:05-15:30 Toshitaka Matsui (Tohoku Univ.)
UNIQUE REACTION MECHANISMS OF IsdG-TYPE HEME DAGRADING ENZYMES FROM PATHOGENIC BACTERIA

15:30-15:55 Shingo Nagano (Tottori Univ.)
STRUCTURE AND HEME ACQUISITION MECHANISM OF A HEMOPHORE HasA HAVING UNUSUAL 5-COORDINATED HEME

15:55-16:20 Shigetoshi Aono (IMS)
STRUCTURAL BASIS FOR THE TRANSCRIPTIONAL REGULATION OF HEME HOMEOSTASIS IN LACTOCOCCUS LACTIS

⑨ 【分子研研究会（一般）】
先端スピン計測技術による分子性物質研究の現状と展望
2013 年 12 月 18 日（水）～ 19 日（木） 分子科学研究所 研究棟 201 号室

12 月 18 日

13:00 はじめに
太田仁（神戸大分子フォトサイエンス研究センター）

＜第 1 セッション＞ 座長：中村 敏和（分子研）

磁気共鳴法による生理機能イメージング装置開発
市川和洋（九大 先端融合医療創成センター）
同位体でスピララベルされたキララなニトロキシラジカルの EPR イメージング
平田拓（北大情報科学）

14:00 CW とパルス -ESR とスピララベルを使ってタンパク質についてわかること（仮題）
荒田敏昭（阪大理）
PELDOR, ENDOR でみる酸素発生系マンガングラスターの磁気構造
三野広幸（名大理）
生体内ラジカル検出のためのプローブ剤開発
山田健一（九大薬）

15:00 休憩

＜第 2 セッション＞ 座長：大和真由実（九大 先端融合医療レドックスナビ）

15:20 有機ラジカル単結晶 ESR と分子間磁気相互作用（仮題）
細越裕子（大府大理）
分子性物質研究に向けた多周波数 ESR の可能性
大久保晋（神戸大分子フォトサイエンス研究センター）

16:00 有機半導体素子に対する電流検出 ESR
鐘本勝一（大市大理）
パルス ESR による照射食品の計測と解析
亀谷宏美（農研機構食品総合研究所）
9GHz EPR イメージング法の医科学への応用：皮膚疾患と皮膚構造 の解析
中川公一（弘前大保健）

17:00 総合討論

18:30 懇親会

12月19日

8:00 ラボツアー

〈第3セッション〉座長：平田 拓（北大情報科学）

9:00 自己ドーピング型有機導体に対する磁気共鳴研究
中村敏和（分子研）
Qバンドパルス ESR を用いたプリオン凝集体構造の解析（仮題）
稲波 修（北大獣医）
任意波形マイクロ波パルスを用いたスピン制御 技術と新しい ESR 分光手法への展開
佐藤和信（大市大理）
10:00 有機薄膜の磁気伝導効果の現状
生駒忠昭（新潟大自然科学）
光誘起伝導性ドナー・アクセプター型 COF のスピンドYNAMICS
古川 貢（新潟大機器分析センター）
10:40 休憩

〈第4セッション〉座長：稲波 修（北大 獣医）

11:00 高磁場動的核分極多重共鳴の装置開発と実験
藤原敏道（阪大蛋白質研）
チエノチオフェン系分子材料を用いた高移動度有機トランジスタにおけるキャリアダイナミクス
田中久暁（名大工）
高周波 ESR を用いた分子性導体の研究—— π -d 系および量子スピン液体物質への応用
大島勇吾（理研）
12:00 終わりに
市川和洋（九大先端融合医療創成センター）

⑩ 【分子研研究会（一般）】

金属クラスター錯体・高分子状金属錯体を舞台とした構造・機能化学の最前線
2014年3月12日（水）～13日（木） 分子科学研究所 研究棟201号室

3月12日（水）

13:00-13:10 研究会趣旨説明 野呂 真一郎（北海道大学電子科学研究所）

セッションⅠ：座長 唯 美津木（名古屋大学）

13:10-13:40 牧浦 理恵（大阪府立大学）
「液相界面における高配向性分子膜の形成」
13:40-14:20 阿部 正明（九州大学）
「 π 共役系遷移金属錯体の配位集積に基づく分子性巨大クラスターの構築と電子特性」
14:20-14:45 写真撮影，コーヒーブレイク

セッションⅡ：座長 中沢 浩（大阪市立大学）

14:45-15:35 石谷 治（東京工業大学）
「直鎖状およびリング状 Re(I) 多核錯体の合成と光機能」
15:35-16:15 大久保 貴志（近畿大学）
「配位高分子の構造・キャリア制御と薄膜太陽電池への展開」

セッションⅢ：座長 久枝 良雄（九州大学）

16:15-16:45 小門 憲太（北海道大学）
「多孔性結晶を鋳型とした特殊構造ネットワーク高分子」
16:45-17:35 宮坂 等（東北大学金属材料研究所）
「Functional MOFs：電子・スピン・化学反応を制御する」
18:00-20:00 懇親会

3月13日（木）

セッションⅣ：座長 西原 寛（東京大学）

9:30-10:00 志賀 拓也（筑波大学）
「特異な幾何構造をもつ多核金属錯体の物性研究」
10:00-10:30 近藤 篤（東京農工大学）
「柔軟な高分子状金属錯体の特異的吸着現象」
10:30-10:45 コーヒーブレイク

セッション V：座長 田所 誠（東京理科大学）
 10:45-11:25 正岡 重行（分子科学研究所）
 「金属錯体を用いた多電子酸化還元反応」
 11:25-12:05 植村 卓史（京都大学）
 「錯体サブナノ空間を用いた精密高分子集積」
 12:05-12:10 閉会挨拶 黒田 孝義（近畿大学）

(4) 若手研究会等

課 題 名	提案代表者
第 2 回分子科学若手シンポジウム	上智大学大学院理工学研究科 村上 龍大

(5) 岡崎コンファレンス

課 題 名	提案代表者
波束ダイナミクス；コヒーレンスとインコヒーレンス	分子科学研究所 大森 賢治

(6) UVSOR 施設利用

(前期)		
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
BL1B の整備	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
コヒーレントシンクロトロン放射光を用いた固体電子物性研究	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
Si 系廃棄物から合成した Y 型ゼオライトの局所構造評価	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
抗菌性ハイドロキシアパタイトにおける P-K 端および Ag-L 端の局所構造解析	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
ゼオライトに修飾した MoO _x 触媒活性種の L 殻 XANES 解析による還元構造の解明	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
希土類元素添加酸化化物蛍光体における希土類元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
AlGaN の Al1s 及び Gd3d 内殻からの発光・励起スペクトル測定 (II)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
He プラズマ照射により発現する樹枝状ナノタングステンの XAFS による構造・電子状態解析	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微粉碎処理過程での Si 局所構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
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	富永 亜希
軟 X 線吸収分光法による加熱処理した金属酸化物薄膜の研究	九州シンクロトロン光研究センター	小林 英一
真空紫外励起による酸化物結晶の固有発光と励起子から希土類イオンへのエネルギー移動	秋田大学工学資源学研究科	小玉 展宏
ワイドバンドギャップを有する無機・有機絶縁材料の吸収・発光および寿命測定	早稲田大学理工学術院	大木 義路
太陽光励起レーザ材料の光学特性	岐阜大学工学部	山家 光男
アルカリハライド結晶中の不純物イオン間のエネルギー移動の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
アミノ酸全 20 種, 核酸塩基全 5 種の広域吸収スペクトル測定完結計画 (3-30 eV)	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
高分解能多電子同時計測による分子のオージェ過程の研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
希薄磁性体における磁性元素の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
BL4B ビームライン整備	分子科学研究所	岩山 洋士
Li イオン二次電池高容量正極材料での反応機構解明に向けた表面・バルクの電子構造解析	産業技術総合研究所	奥村 豊旗
磁性薄膜と接合したトポロジカル絶縁体の電子構造	東京大学大学院理学系研究科	平原 徹
BL5U 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
非化学量論組成ホイスラー合金およびパイライト型遷移金属二硫化物固溶体の電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
Sm _{1-x} Y _x S における化学圧力下金属-絶縁体転移に伴う電子状態変化の直接観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
高分解能角度分解光電子分光を用いたキャリアドープ希土類酸化物の電子状態の直接観測	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
極端紫外光領域における岩石の反射スペクトル測定	東京大学大学院理学系研究科	吉川 一朗
アモルファス半導体における光誘起欠陥評価	岐阜大学工学部	林 浩司

アミノ酸全 20 種、核酸塩基全 5 種の広域吸収スペクトル測定完結計画 (30-250 eV)	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
シリコン材料中の新不純物中心の電子構造	東北学院大学工学部	淡野 照義
BL6B の顕微分光の整備	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
放射光赤外イメージングによる電子相分離の直接観測	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
鉛フリー圧電体の遠赤外線スペクトル	名古屋工業大学工学研究科	柿本 健一
高輝度放射光を用いた赤外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
新型トポロジカル物質の低エネルギー高分解能 ARPES	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半導体における電子格子相互作用	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
High-resolution photoemission spectroscopy studies on iron-pnictide superconductors	東京大学物性研究所	WALID, Malaeb
微小ギャップ半導体中の表面電子構造	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
ARPES studies of electronic nematicity and pseudogap-like phase in iron-pnictides	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
Polarization dependent ARPES study on three recently found superconductors	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
Studies on the electronic anisotropy in Ba(Fe,Ru) ₂ As ₂	大阪大学大学院生命機能研究科	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 Tm 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
低励起エネルギー偏光依存型角度分解光電子分光による擬一次元有機半導体における分子鎖間相互作用の研究	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
巨大 Seebeck 効果を示す FeSb ₂ における近藤半導体的電子構造の解明とその利用方法の確立	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
電荷密度波・磁性競合系と多段磁性・構造転移系の角度分解光電子分光	立命館大学理工学部	今田 真
カーボンナノマテリアル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・フリー発光の寿命特性	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 線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
ボロンドープダイヤモンドに見られるバンド端近傍発光の時間分解	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
VUV エリプソメトリーの整備	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
価数揺動を示す強相関電子系における可視・真空紫外反射分光	名古屋大学大学院理学研究科	井村敬一郎
真空紫外透明光学素子開発に向けたガラス中希土類イオンの電子状態研究	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	清水 俊彦
パイ共役分子／金属界面に現れる界面準位の起源および形成機構の解明	岩手大学工学部	細貝 拓也
角度分解紫外光電子分光法による高伝導度を示す PEDOT-PSS 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
有機半導体・無機半導体界面のエネルギー準位接合	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
熱励起遅延蛍光色素を用いた有機 EL 素子の電子構造	千葉大学先進科学センター	石井 久夫
有機－有機ヘテロ界面における界面電荷と分子間電荷移動との相関	千葉大学先進科学センター	中山 泰生
Development and maintenance of the BL-8B	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga rasika
Electronic structure of amino acids assembly studies by UPS	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga rasika
有機固体のエネルギー領域 0 から 20 eV での電子平均自由行程の精密測定	京都大学化学研究所	吉田 弘幸
金属修飾した有機薄膜からの電子放出現象と電子構造との相関に関する研究	近畿大学理工学部	田中 仙君
光電子分光法による金属内包フラーレンの電子状態の研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮崎 隆文
Ultraviolet-Vacuum ultraviolet reflectance and photoluminescence studies on LaAlO ₃ /SrTiO ₃ films	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
LiTi ₂ O ₄ 透明超伝導体の低温での透過率測定	分子科学研究所	許斐 太郎
高次高調波取出用フッ化物誘電体多層膜ミラーの真空紫外反射率測定	(独) 情報通信研究機構未来 ICT 研究所	和久井健太郎
立方晶窒化ホウ素中の硫黄の局所構造解析	(独) 物質・材料研究機構	村田 秀信
有機固体対応ビームラインの再構築：BL2B の立ち上げおよび BL8B の整備	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
真空紫外発光分光による固体光励起状態の包括的研究	山形大学理学部	北浦 守
(後期)		
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
BL1B の整備	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
コヒーレントシンクロトロン放射光を用いた固体電子物性研究	大阪大学産業科学研究所	入澤 明典
ゼオライトに修飾した MoOx 触媒活性種の L 殻 XANES 解析による還元構造の解明	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
希土類元素添加酸化物質蛍光体における希土類元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之

AlGaN の Al1s 及び Gd3d 内殻からの発光・励起スペクトル測定 (II)	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
He プラズマ照射により発現する樹枝状ナノタングステンの XAFS による構造・電子状態解析	名古屋大学エコトピア科学研究所	吉田 朋子
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	富永 亜希
真空紫外励起による酸化物結晶の固有発光と励起子から希土類イオンへのエネルギー移動	秋田大学工学資源学研究所	小玉 展宏
ワイドバンドギャップを有する無機・有機絶縁材料の吸収・発光および寿命測定	早稲田大学理工学術院	大木 義路
太陽光励起レーザ材料の光学特性	岐阜大学工学部	山家 光男
アルカリハライド結晶中の不純物イオン間のエネルギー移動の研究	大阪府立大学大学院理学系研究科	河相 武利
アミノ酸全 20 種, 核酸塩基全 5 種の広域吸収スペクトル測定完結計画 (3-30 eV)	神戸大学大学院人間発達環境学研究所	中川 和道
高分解能多電子同時計測による分子のオージェ過程の研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
希薄磁性体における磁性元素の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
BL4B ビームライン整備	分子科学研究所	岩山 洋士
Li イオン二次電池高容量正極材料での反応機構解明に向けた表面・バルクの電子構造解析	(独)産業技術総合研究所	奥村 豊旗
BL5U 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
非化学量論組成ホイスラー合金およびパイライト型遷移金属二硫化物固溶体の電子構造	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
中間バンド型太陽電池における周期及び組成偏重がバンド構造に及ぼす影響	名古屋大学大学院工学研究科	宇治原 徹
Sm _{1-x} Y _x S における化学圧力下金属-絶縁体転移に伴う電子状態変化の直接観測	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
高分解能角度分解光電子分光を用いたキャリアードープ希土類酸化物の電子状態の直接観測	名古屋工業大学若手研究イノベーション養成センター	宮崎 秀俊
極端紫外光領域における岩石の反射スペクトル測定	東京大学大学院理学系研究科	吉川 一朗
アモルファス半導体における光誘起欠陥評価	岐阜大学工学部	林 浩司
アミノ酸全 20 種, 核酸塩基全 5 種の広域吸収スペクトル測定完結計画 (30-250 eV)	神戸大学大学院人間発達環境学研究所	中川 和道
シリコン材料中の新不純物中心の電子構造	東北学院大学工学部	淡野 照義
BL6B の顕微分光の整備	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
放射光赤外イメージングによる電子相分離の直接観測	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
鉛フリー圧電体の遠赤外線スペクトル	名古屋工業大学工学研究科	柿本 健一
高輝度放射光を用いた赤外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
新型トポロジカル物質の低エネルギー高分解能 ARPES	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半導体における電子格子相互作用	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
微小ギャップ半導体中の表面電子構造	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
Polarization dependent ARPES study on three recently found superconductors	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
Studies on the electronic anisotropy in Ba(Fe,Ru) ₂ As ₂	大阪大学大学院生命機能研究科	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
低励起エネルギー偏光依存型角度分解光電子分光による擬一次元有機導体における分子鎖間相互作用の研究	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
巨大 Seebeck 効果を示す FeSb ₂ における近藤半導体的電子構造の解明とその利用方法の確立	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
新規オージェ・フリー発光の寿命特性	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 線偏光観測ロケット実験 CLASP のフライト品評価	自然科学研究機構国立天文台	成影 典之
VUV エリプソメトリーの整備	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
パイ共役分子/金属界面に現れる界面準位の起源および形成機構の解明	岩手大学工学部	細貝 拓也
角度分解紫外光電子分光法による高伝導度を示す PEDOT-PSS 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
有機半導体・無機半導体界面のエネルギー準位接合	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
熱励起遅延蛍光色素を用いた有機 EL 素子の電子構造	千葉大学先進科学センター	石井 久夫
有機-有機ヘテロ界面における界面電荷と分子間電荷移動との相関	千葉大学先進科学センター	中山 泰生
Development and maintenance of the BL-8B	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga rasika
Electronic structure of amino acids assembly studies by UPS	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga rasika
有機固体のエネルギー領域 0 から 20 eV での電子平均自由行程の精密測定	京都大学化学研究所	吉田 弘幸

金属修飾した有機薄膜からの電子放出現象と電子構造との相関に関する研究	近畿大学理工学部	田中 仙君
光電子分光法による金属内包フラーレンの電子状態の研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮崎 隆文
スラグおよびスラグ酸処理溶液から合成した Ca 系化合物の局所構造評価	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
新規圧電用ニオブ酸カリウム系セラミックスの構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
軟X線領域の蛍光収量法を用いた材料のその場観察	九州シンクロトロン光研究センター	小林 英一
アルカリハライド微結晶によるシンチレーション機能の研究	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
酸素発生電極触媒能を示す高原子価金属酸化物における LMCT 状態の解析	北海道大学大学院工学研究院	青木 芳尚
$\text{CaCu}_3\text{Ti}_{4-x}\text{Ru}_x\text{O}_{12}$ における d 電子の二重性	弘前大学理工学研究科	任 皓駿
軟X線光電子分光によるリン化ニッケル表面の電子状態の解明	立教大学理学部	枝元 一之
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 2	東京大学大学院理学系研究科	平原 徹
Angle-resolved photoemission of Cu-doped NaFeAs and SrFe_2As_2	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
鉄ニクタイト超伝導体における角度分解光電子分光	大阪大学大学院理学研究科	田島 節子
イリジウム酸化物の真空紫外分光	東京大学大学院工学系研究科	藤岡 淳
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
真空紫外領域における YF_3 薄膜の光伝導特性評価	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 晋吾
真空紫外透明光学素子開発に向けたガラス中希土類イオンの電子状態研究	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	清水 俊彦
真空紫外反射による亜鉛リン酸塩ガラス中ビスマスの電子状態の研究	(独)産業技術総合研究所	北村 直之
Study exotic quantum properties at $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ interface using ultraviolet-Vacuum ultraviolet reflectance and photoluminescence	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
第三周期元素 K 端 XAS プリエッジの微細構造解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
有機固体対応ビームラインの再構築: BL2B の立ち上げおよび BL8B の整備	千葉大学大学院融合科学研究科	解良 聡
真空紫外発光分光による固体光励起状態の包括的研究	山形大学理学部	北浦 守

(7) 施設利用

① 機器センター

(通年)

新規な有機半導体の構造解明	東京工業大学大学院理工学研究科	芦沢 実
分子内電荷移動錯体の結晶構造解析による分子配列の解明と分子間相互作用の解明	静岡大学工学部	植田 一正
新規な多核金属錯体の合成と X 線結晶構造解析	静岡大学理学部	仁科 直子
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

(前期)

サイズ・組成制御した銅カルコゲナイド半導体ナノ粒子の発光特性の研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	濱中 泰
X 線結晶構造解析による分子構造の決定	豊橋技術科学大学大学院工学研究科	藤沢 郁英
シアニン J 会合体の蛍光特性に関する研究	早稲田大学理工学術院	井村 考平
アゾ金属錯体の円偏光紫外光誘起キラル秩序の CD 分光	東京理科大学理学部	秋津 貴城
新奇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
紅色光合成細菌由来光捕集膜蛋白質複合体における耐熱化の分子機構	神戸大学大学院農学研究科	木村 行宏
バイオマス利用に向けた糖化関連タンパク質の解析	農業・食品産業技術総合研究機構畜産草地研究所	横山 浩
側鎖に分岐アルキル基を有する π 共役系ラセン高分子の溶媒及び温度に対する光学特性	室蘭工業大学大学院工学研究科	馬渡 康輝
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
一次元ロジウム-ジオキソレン錯体の結晶構造解析 2	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	満身 稔
協同転移を示す複合機能錯体の低温構造解析	神戸大学大学院理学研究科	高橋 一志
ベンゼン重水素置換体の分子構造精密決定	九州大学稲盛フロンティア研究センター	石元 孝佳

(後期)

エネルギー有効利用のためのアニオンドーパ酸化物-有機物ナノコンポジットの可能性研究	自然科学研究機構核融合科学研究所	高山 定次
サイズ・組成制御した銅カルコゲナイド半導体ナノ粒子の光学特性の研究	名古屋工業大学大学院工学研究科	濱中 泰
X 線結晶構造解析による分子構造の決定	豊橋技術科学大学大学院工学研究科	藤沢 郁英
新規なキャリア輸送材料の合成と電子デバイスへの応用	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 克彦
紅色光合成細菌の光捕集膜タンパク質複合体における耐熱化の分子機構	茨城大学理学部	大友 征宇

キレート型プロトン性イオン液体中での錯形成と構成成分の拡散
 多孔性ポリフィリン亜鉛錯体の結晶構造解析
 イオン性ブロック共重合体の熱分析
 光合成膜蛋白質耐熱化の熱力学的解析
 新規な光センサータンパク質の生化学的解析
 BEDT-TTF 銀錯体の極低温構造解析
¹⁸³W 核磁気共鳴法によるタングステン錯体の構造研究
 金属間結合形成転移を示す機能性金属錯体の構造解析

奈良女子大学大学院人間文化研究科
 兵庫県立大学大学院物質理学研究科
 岐阜大学工学部
 神戸大学大学院農学研究科
 日本大学生物資源科学部
 名城大学農学部
 岡山大学大学院自然科学研究科
 神戸大学大学院理学研究科

飯田 雅康
 満身 稔
 三輪 洋平
 木村 行宏
 高野 英晃
 平松 孝章
 押木 俊之
 高橋 一志

② 装置開発室

(前期)

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

神経細胞ネットワークハイスループットスクリーニング素子のセンサー基板とマイクロ流路開発

先進超伝導線材における引張歪印加機構プローブの開発

人工脂質膜上の脂質クラスターの可視化と脂質プローブの検出感度推定

東北大学多元物質科学研究所

山崎 優一

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

自然科学研究機構核融合科学研究所

菱沼 良光

名古屋大学大学院医学系研究科

深澤 有吾

(後期)

形彫放電加工機による透過型電子顕微鏡部品製作

神経細胞ネットワークハイスループットスクリーニング素子のセンサー基板とマイクロ流路開発

高電圧高速パルススイッチング回路の製作

名古屋大学全学技術センター

松下 幸司

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

新潟薬科大学薬学部

星名賢之助

③ 計算機利用

半導体における不純物電子状態の第一原理的研究

分子内および分子間電子・電荷移動の研究

生体分子の機能発現反応に関する理論的研究

生体分子および触媒分子系の量子化学

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

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

Rigged QED 理論に基づく局所量に関する研究

金属蛋白質の反応制御機構に関する理論的研究

生体分子の構造と機能に関する理論的研究

複雑分子系の化学反応のシミュレーション

ナノ・バイオ物質の電子状態・構造・機能の相関

階層的電子状態計算理論とナノ構造プロセス

革新的量子計算科学の創造と大規模シミュレーション

生体内におけるアミノ酸の D- 化機構の解明と D- 化が及ぼす影響の検討

色素増感太陽電池に関する理論的研究

ナノ・バイオ物質群の構造・機能・電子状態の相関関係の計算科学的解析

相対論的分子軌道法と実験のコラボレーションによる機能性金属錯体の電子状態設計：有機 EL・分子スイッチングを中心に

界面和周波発生分光の理論

遷移金属触媒をもちいた二酸化炭素変換反応の機構解析

有機デバイスへの応用に向けた非晶質有機半導体材料の幾何・電子構造計算と膜の屈折率計算

バクテリア ATP 合成酵素の ε サブユニットを基にした GTP センサーの理論設計

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

第一原理反応ダイナミクスの多角的展開

真空及び固体中における分子とナノ構造の磁性理論

超球面探索法を用いた結晶構造の予測

分子動力学及び量子化学計算を用いたセルロース関連分子の構造と機能の研究

カーボンナノリングの構造と物性研究

慶應義塾大学理工学部

山内 淳

神奈川大学理学部

田仲 二郎

千葉大学大学院薬学研究科

星野 忠次

北海道大学触媒化学研究センター

長谷川淳也

名古屋大学大学院理学研究科

岡本 祐幸

京都大学福井謙一記念研究センター

榊 茂好

京都大学大学院工学研究科

立花 明知

大阪大学蛋白質研究所

鷹野 優

広島大学大学院理学研究科

相田美砂子

京都大学福井謙一記念研究センター

諸熊 奎治

東京大学大学院工学系研究科

押山 淳

鳥取大学大学院工学研究科

星 健夫

量子化学研究協会研究所

中辻 博

金沢大学医薬保健研究域

小田 彰史

(独)産業技術総合研究所

北尾 修

筑波大学数理物質系

神谷 克政

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

東北大学大学院理学研究科

森田 明弘

東京大学大学院工学系研究科

野崎 京子

山形大学大学院理工学研究科

横山 大輔

京都大学大学院理学研究科

高田 彰二

分子科学研究所

岩田 末廣

北海道大学大学院理学院

武次 徹也

横浜国立大学大学院工学研究院

Raebiger
Hannes

和歌山大学システム工学部

山門 英雄

横浜国立大学大学院工学研究院

上田 一義

名古屋大学物質科学国際研究センター

瀬川 泰知

有機化学反応における求電子性および求核性についての理論的研究	高知大学大学院総合人間自然科学研究科	金野 大助
脂質膜へのタンパク質埋め込みのための分子シミュレーション技術の確立	金沢大学理工研究域	齋藤 大明
セルロース結晶の溶媒とダイナミクス挙動と結晶性セルロース結合タンパク質との相互作用	宮崎大学工学教育研究部	湯井 敏文
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
柔軟な相互作用系のガラス転移	筑波大学数理物質系	宮崎 州正
MD/3D-RISM 法を用いた自由エネルギー計算による自己組織化の動的側面に関する研究	愛媛大学大学院理工学研究科	宮田 竜彦
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教育研究センター	山口 兆
分子クラスターの構造と化学反応経路の量子化学的研究	電気通信大学大学院情報理工学研究科	山北 佳宏
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
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	Irle Stephan
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
コンピューターシミュレーションによる核酸構造安定性の解析	甲南大学先端生命工学研究所	杉本 直己
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
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
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
水、氷、クラスレート・ハイドレートの構造相転移の理論研究	岡山大学大学院自然科学研究科	田中 秀樹
高精度量子化学計算によるナノサイズ分子の分子機能の解明	(独)理化学研究所	中嶋 隆人
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	横浜市立大学大学院生命医科学研究科	森次 圭
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
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
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
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
金属錯体・触媒・生体関連分子の構造・物性・反応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
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
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
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
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
第一原理量子論による次世代新原理メモリの設計指針の獲得	筑波大学計算科学研究センター	白石 賢二
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
第一原理的手法によるナノ・バイオ関連物質の形成と機能に関する研究	三重大学大学院工学研究科	秋山 亨
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
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
フッ化物イオン認識によるウレア基修飾ポリ(パラ-フェニレン)レセプターからくる蛍光出力の振電スイッチング	北海道大学大学院工学研究科	佐藤信一郎
剪断流下の脂質膜系における構造形成	東京大学物性研究所	芝 隼人
タンパク質と基質分子の結合自由エネルギー解析	金沢大学理工研究域	川口 一朋
簡単な分子の光化学過程の理論的研究	新潟大学自然科学系	徳江 郁雄
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
有機化合物における置換基効果の微視的起源	鳥取大学大学院工学研究科	早瀬 修一
6 員環構造を持つナノ物質の第一原理計算	金沢大学理工研究域	斎藤 峯雄
化学反応の分類および分子設計に関する理論的研究	岐阜大学工学部	酒井 章吾
分子性結晶における光誘起相転移の理論的研究	高エネルギー加速器研究機構	岩野 薫
低酸化数ホウ素化合物の酸化還元挙動および含ホウ素 PBP 配位子を有する金属錯体群の反応性の解明	中央大学理工学部	山下 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
分子性液体に関する計算機シミュレーション	岐阜大学工学部	寺尾 貴道
5d 金属を含む多核金属錯体の電子状態	岐阜大学工学部	海老原昌弘
有機ラジカルの電子状態の ab initio MO 計算	奈良女子大学大学院自然科学系	竹内 孝江
薬物と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
芳香族アルコール溶媒とクラスターにおける励起状態プロトン移動反応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
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	筑波大学数理物質系	前島 展也
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

薬物リード化合物創出のための分子シミュレーション	(独)産業技術総合研究所	亀田 倫史
特異な機能を有する結晶分子の量子化学的研究	横浜国立大学大学院工学研究院	河野 雄次
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
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
ドーピングされたグラフェンの構造とその性質	東京大学大学院理学系研究科	今村 岳
超臨界水の振動スペクトル解析	徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部	吉田 健
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
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
酸化還元ユニットを有するキラルバイ共役系分子の開発	北里大学理学部	長谷川真士
三次元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
かさ高い芳香族アジド基が有する高いクリック性に関する研究	東京医科歯科大学学生体材料工学研究所	吉田 優
シクロデキストリンによる β -ラクタム系抗生物質の包接現象のエネルギー解析	近畿大学生物理工学部	藤澤 雅夫
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	千葉工業大学工学部	松澤 秀則
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タンパク質の構造変化の解析	名古屋大学大学院理学研究科	横 互介
push-pull 型スターバースト発色団の構造と電子状態の解明	静岡大学理学部	三井 正明
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	東京工業大学大学院生命理工学研究科	中田 浩弥
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
量子力学/分子力学混合 (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
化学反応の ab initio 計算による研究	愛媛大学理工学研究科	長岡 伸一
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
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
分子軌道法による反応予測を基盤とする新有機反応の開発	東京大学大学院理学系研究科	中村 栄一
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
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 申明
タンパク質中のアミノ酸間情報伝達経路の解析	名古屋大学大学院理学研究科	倭 剛久
金属クラスターの構造および反応過程の理論的解析	豊田工業大学クラスター研究室	市橋 正彦
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
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
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
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
第一原理及び古典分子動力学計算による Si ナノシート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
光解離反応の量子制御に関する理論的研究	(独)日本原子力研究開発機構	黒崎 譲
生体分子および溶媒の構造機能相関の解明	立命館大学生命科学部	高橋 卓也
理論計算による触媒機能の解明	星薬科大学薬学部	坂田 健
非古典的相互作用を含むタンパク質-薬物間相互作用の FMO-D 法を用いた解析計算スキームの開発	近畿大学薬学部	中村 真也
ペプチドの水溶液中における安定性の圧力依存性	立命館大学薬学部	加藤 稔
有機ケイ素化合物の特異な反応性の解明と予測	東京工業大学大学院理工学研究科	川内 進
酵素加水分解における酵素-基質相互作用に関する研究	明星大学理工学部	松本 一嗣
大規模系の高精度電子状態計算手法の開発と応用	早稲田大学高等研究所	小林 正人
糖質の構造解析	(財)野口研究所	山田 一作
創薬を指向する生体分子系の分子動力学計算	東京大学先端科学技術センター	山下 雄史
腸管出血性大腸菌 (O-157) 感染症に対する薬剤の開発にかかわる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
凝縮系における緩和および反応ダイナミクスの理論研究	分子科学研究所	斉藤 真司
凝縮重電子系の量子化学計算: 共役系および生体金属化合物の電子状態解析	分子科学研究所	柳井 毅
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
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
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
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

フェムト秒レーザー電場をもちいた気相分子クラスターにおけるダイナミクスの研究	分子科学研究所	水瀬 賢太
大規模量子化学エネルギー微分計算プログラムの開発	分子科学研究所	石村 和也
ボウル型共役化合物の物性調査, および金属クラスター触媒の活性評価研究	分子科学研究所	櫻井 英博
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
タンパク質-リガンド複合体形成の自由エネルギー計算	(独)日本原子力研究開発機構	河野 秀俊
シトクロム酸化酵素におけるリガンドの結合様式および相互作用機構の理論解析	兵庫県立大学大学院生命科学研究科	館野 賢
2- ハロ酸脱ハロゲン化酵素と耐熱性シス테인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
ホタルルシフェラーゼの発光波長予測	兵庫県立大学大学院工学研究科	加藤 太郎
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 2	北里大学理学部	米田 茂隆
対イオンによる DNA の局所構造変化がタンパク質との相互作用や凝集に及ぼす影響	大分大学医学部	谷川 雅人
カリウムチャネルでのイオン透過におけるタンパク質と水分子の役割, およびイオン選択性の発現機構の解明	福井大学医学部	老木 成稔
KODA による開花のメカニズムについて	名城大学情報センター	寺田 幸正
キラル秩序を有するシッフ塩基金属錯体の CD スペクトルの解釈	東京理科大学理学部	秋津 貴城
縮合多環芳香族化合物に基づく有機発光材料および有機半導体材料の開発	東京農工大学大学院工学研究科	中野 幸司
計算科学的アプローチによる肺炎球菌ケトライド耐性における構造学的メカニズムの解明	千葉大学大学院薬学研究院	佐藤 慶治
非平面有機半導体の分子設計	分子科学研究所	鈴木 敏泰
アミノ酸の準安定平衡状態の研究	早稲田大学国際教養学部	稲葉 知士
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
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
イオン性分子及び糖類の水和状態に関する分子動力学計算	東京大学大学院工学系研究科	川辺 駿佑
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
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	東京薬科大学生命科学部	宮川 毅
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
芳香族分子と金属イオン・極性分子における電子状態と光誘起反応の量子化学計算ならびに生体分子系における分子認識の分子動力学及び大規模量子化学計算による解析	北里大学一般教育部	江川 徹
動的螺旋分子における螺旋反転反応の理論的研究	明治大学理工学部	村岡 梓
水, 氷, クラスレート水和物の相転移メカニズムに関する理論研究	分子科学研究所	望月 建爾
多孔性窒化炭素表面と有機分子の相互作用に関する理論研究	東京大学大学院総合文化研究科	尾中 篤
有機ケイ素化合物の構造と性質	群馬大学理工学研究院	久新 莊一郎
多元素クラスターの赤外分光のための基礎研究における赤外スペクトルの検討	東京大学大学院総合文化研究科	工藤 聡
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
有機金属錯体の結合性の解明	分子科学研究所	村橋 哲郎
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
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
低原子価ゲルマニウム化学種の結合した遷移金属錯体の合成と構造	東北大学大学院理学研究科	渡邊 孝仁
小分子活性化を可能とする遷移金属錯体の分子設計及び構造に関する理論計算	東京工業大学大学院理工学研究科	石田 豊
ランタノイド錯体の溶液中構造解析	東京工業大学大学院理工学研究科	奥村 森
DFT 計算によるジメチルジヒドロピレン共役遷移金属錯体の基底および励起状態に関する研究	名古屋大学大学院理学研究科	邨 次智
量子化学計算による金属酵素モデル錯体の反応機構の解析	九州大学先端物質化学研究所	太田 雄大
非線形, 非対称単一分子電気特性研究のための構造物性相関の研究	大阪大学大学院理学研究科	小川 琢治
クラスターイオンの幾何構造および移動度計算	東北大学大学院理学研究科	大下 慶次郎
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
時計タンパク質複合体の構造解析	名古屋大学遺伝子実験施設	石浦 正寛
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
光触媒の理論的研究	(独)物質・材料研究機構	梅澤 直人
緩和モード解析を用いた高分子溶融体の線形粘弾性の評価手法の開発	慶應義塾大学大学院理工学研究科	岩岡 伸之
量子化学計算によるイオン伝導解析	三重大学大学院工学研究科	大西 拓
クラウンエーテルおよびペプチドナノリングを用いたアミノ酸キラリティー認識機構の第一原理電子論	早稲田大学理工学術院	武田 京三郎

Julia-Kocienski 反応の反応機構の解明と立体選択的オレフィン化試薬の開発	岐阜大学工学部	安藤 香織
腸管出血性大腸菌（O-157）感染症に対する薬剤の開発にかかわる分子動力	国立国際医療研究センター	尾又 一実
学シミュレーション		
酸化還元電位に依存したプロテインジスルフィドイソメラーゼのドメイン	分子科学研究所	加藤 晃一
再配向機構の解明		
大規模分子動力学シミュレーションによる脂質膜とタンパク質の相互作用	京都大学化学研究所	松林 伸幸
の研究		
水素結合性液体中における振動ダイナミクス	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	富永 圭介
光誘起機能性物質の機能性解明研究	新潟大学研究推進機構	古川 貢
鉄触媒によるオレフィン重合反応の機構解析	東京大学大学院工学系研究科	伊藤 慎庫
量子多成分系分子理論の開発とその応用	横浜市立大学大学院生命ナノシステム科	立川 仁典
	学研究科	
銅含有亜硝酸還元酵素に関する計算化学研究	京都府立大学大学院生命環境科学研究科	リントゥルオト 正美
近接場光と分子の相互作用	慶應義塾大学大学院理工学研究科	岩佐 豪
有機ラジカル液晶の分子間磁気相互作用の起源	大阪大学大学院基礎工学研究科	内田 幸明
分子性導電・磁性材料に関する理論的研究	京都大学低温物質科学研究センター	中野 義明
量子化学文献データベースの開発	首都大学東京大学院理工学研究科	波田 雅彦
GEMB（Generalized-Ensemble Molecular Biophysics）プログラムの開発	分子科学研究所	奥村 久士
界面分光計算ソフトウェア Calnos の開発	東北大学大学院理学研究科	森田 明弘
（計算物質科学イニシアティブ利用枠）		
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
凝縮分子科学系における揺らぎとダイナミクス	名古屋大学大学院工学研究科	笹井 理生
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
ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション	名古屋大学大学院工学研究科	尾形 修司
全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開	名古屋大学大学院工学研究科	岡崎 進
拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明	名古屋大学大学院理学研究科	岡本 祐幸
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	東京大学大学院工学系研究科	山下 晃一
にむけた大規模数値計算		
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
合金凝固組織の高精度制御を目指したデンドライト組織の大規模数値計算	北海道大学大学院工学研究院	大野 宗一
超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化	東北大学金属材料研究所	西松 毅

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～'06		'07		'08		'09		'10		'11		'12		'13		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	103	828	2	29	2	22	1	28	0	0	1	13	1	21	2	27	人数： 登録人数
協力研究	3,644	5,027	91	219	90	200	119	412	122	316	108	292	123	329	64	173	〃
招へい 協力研究	195	197	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	〃
所長 招へい	3,863	3,863	132	132	159	159	148	148	148	148	78	78	93	93	96	96	人数： 旅費支給者
研究会	311	5,131	9	198	4	105	5	110	6	137	4	105	10	207	10	154	〃
若手研究会等	—	—	—	—	1	12	1	10	1	14	1	11	1	19	1	21	〃
岡崎コンファ レンス	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	1	29	1	18	〃
施設利用 Ⅰ	1,796	4,053	59	120	72	177	60	179	66	166	98	266	60	254	36	105	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)	4,444	14,538	145	595	147	656	171	676	170	666	190	668	190	813	185	711	〃
協力研究 (ナノプラット)	333	677	41	107	55	130	36	86	35	94	25	64	15	51	50	123	〃
施設利用 (ナノプラット)	162	343	19	69	31	103	39	107	25	89	20	35	52	150	132	395	〃
合計	14,851	34,657	498	1,469	561	1,564	580	1,756	573	1,630	525	1,532	546	1,966	577	1,823	
経費	545,194		—		—		—		—		—		—		—		千円

＊施設利用Ⅱは'00より電子計算機施設利用

('13年度の数値は、2014.1.31現在)

＊ナノプラット（ナノテクノロジープラットフォーム事業）は'13年度から実施。'02年度から'06年度はナノテクノロジー総合支援事業、'07年度から'12年度までナノテクノロジー・ネットワーク事業。

分子科学研究所UVSOR共同利用研究実施一覧

年度 項目	'85～'06		'07		'08		'09		'10		'11		'12		'13		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	2	2	人数： 旅費支給者
研究会	34	640	2	55	2	18	2	44	1	1	2	68	4	63	0	0	〃
施設利用	2,530	12,431	145	678	156	708	147	660	140	659	139	682	136	706	141	732	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	2,989	14,675	161	747	159	727	149	704	141	660	145	754	146	775	143	734	
経費	230,477		—		—		—		—		—		—		—		千円

('13 年度の数値は、2014.1.31 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
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
12	2	2	6	32	202	244
合計	71	51	441	156	1,149	1,868

* 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
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
12	8	4	13	28	26	85	0	80	244
合計	217	59	121	187	305	348	29	602	1,868

表3 海外からの研究者（2013年度）

1. 外国人運営顧問			
WOLYNES, Peter	アメリカ	ライス大学教授	
2. 日本学術振興会招へい外国人研究者等			
DHITAL, Raghu Nath	ネパール	分子科学研究所研究員	'13.10. 1-'15. 9.30
3. 国際共同研究			
KHOURY ATHIEH, Bruno	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'13. 4. 1-'13. 8.31
LE GOFF, Florian	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'13. 4. 1-'13. 8.31
LI, Ke	中国	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'13. 4. 1-'13. 8.31
THAMMAPORN, Ratshpa	タイ	カセサート大学大学院大学院生	'13. 4. 1-'13. 7.23
LONG, Chen	中国	北京理工大学大学院大学院生	'13. 4. 1-'14. 3.31
FEL, Xu	中国	中山大学（中国）大学院生	'13. 4. 1-'14. 3.31
ANSARI, Shaz Ali	インド	Indian Institute of Technology 大学院生	'13. 5. 8-'13. 7.10
SINGH, Priyanka	インド	Central Drug Research Institute(CDRI) 大学院生	'13. 5.10-'13. 8. 7
AGRAWAL, Meghdeep	インド	Indian Institute of Technology 大学院生	'13. 5.20-'13. 7.24
HARAN, Gilad	イスラエル	Weizmann Institute of Science 教授	'13. 5.24-'13. 5.29
CIOFINI, Ilaria	イタリア	フランス国立パリ高等化学学校准教授	'13. 5.30-'13. 6. 4
BOUSQUET, Diane	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'13. 5.30-'13. 6. 4
LABAT, Frederic	フランス	フランス国立パリ高等化学学校助教	'13. 5.31-'13. 6. 4
LIU, Chao	中国	Wuhan Univ. 博士研究員	'13. 6. 1-'13. 8.31
THONGPAEN, Jompol	タイ	Mahidol University 大学院生	'13. 6. 1-'13. 9.30
CHIOU, Jan-Wern	台湾	高雄大学准教授	'13. 6.23-'13. 6.29 '13. 8.25-'13. 8.31 '13.11.21-'13.11.28
WANG, Bo-Yao	台湾	淡江大学博士研究員	'13. 6.23-'13. 6.30 '13. 8.25-'13. 8.31
WANG, Yu-Fu	台湾	淡江大学大学院生	'13. 6.23-'13. 6.30 '13.10. 1-'14. 3.31
HARDAL, Ali Umit Cemal	トルコ	Koc University 大学院生	'13. 7. 1-'13. 9.30
HITCHCOCK, Adam	カナダ	McMaster University 教授	'13. 7.10-'13. 7.27 '14. 1.25-'14. 2.12
QIN, Zhisheng	中国	McMaster University 大学院生	'13. 7.22-'13. 8. 6 '13. 9.16-'13. 9.23 '13.12. 5-'13.12.23
SICHELSCHMIDT, Jorg	ドイツ	マックスプランク個体化学物理研究所教授	'13. 7.29-'13. 8. 4
SCHEFFLER, Marc	ドイツ	Physikalisches Institute, Universitat Stuttgart 准教授	'13. 7.29-'13. 8. 4
WNAG, Yu-Fu	台湾	淡江大学大学院生	'13. 8.25-'13. 8.31
PONG, Way-Faung	台湾	淡江大学教授	'13. 8.25-'13. 8.29 '13.11.17-'13.11.25
FLESCH, Roman	ドイツ	ベルリン自由大学助教	'13. 9. 8-'13. 9.16 '14. 2.16-'14. 2.22
RUEHL, Eckart	ドイツ	ベルリン自由大学教授	'13. 9. 8-'13. 9.17 '14. 2.16-'14. 2.24
KUECHLER, Sarah	ドイツ	ベルリン自由大学博士研究員	'13. 9. 9-'13. 9.13 '14. 2.17-'14. 2.22
LIN, Ming-Wei	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 助教	'13. 9.24-'13. 9.28 '13.12. 2-'13.12. 6
HSU, Yao-Chen	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 准教授	'13. 9.24-'13. 9.28
SHIU, Hung-Wei	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 准教授	'13. 9.24-'13. 9.28 '13.12. 2-'13.12. 6
LAI, Yu-Ling	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 非常勤研究員	'13. 9.24-'13. 9.28 '13.12. 2-'13.12. 6
TUNGJITGUSONGUN, Vithawas	タイ	Mahidol University 大学院生	'13.10. 1-'13.12.29
JUNG, Sung Won	韓国	浦項工科大学（POSTECH）大学院生	'13.10.10-'13.10.26

SON, Yeong Seop	韓国	浦項工科大学 (POSTECH) 大学院生	'13.10.10-'13.10.19
ARRUA, Ruben Dario	オーストラリア	タスマニア大学博士研究員	'13.10.14-'13.10.19
KIM, Hyo Sung	韓国	浦項工科大学 (POSTECH) 学部学生	'13.10.17-'13.10.26
WANG, Hsui-tsu	台湾	National Tsinghua University 大学院生	'13.11.17-'13.11.28
SHIN, Woojong	韓国	浦項工科大学 (POSTECH) 大学院生	'13.11.17-'13.11.28
HAN, Sang Wook	韓国	浦項工科大学 (POSTECH) 教授	'13.11.22-'13.11.30
CHANG, Chiao-Kai	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 大学院生	'13.12. 2-'13.12. 6
CHIOU, Guan-Chiun	台湾	National Synchrotron Radiation Research Center 大学院生	'13.12. 2-'13.12. 6
EBERLE, Fabian	ドイツ	ベルリン自由大学大学院生	'14. 1. 6-'14. 3.16
ZHU, Xiaohui	中国	McMaster University 大学院生	'14. 1.25-'14. 2. 6
ROSENDAHL, Scott	カナダ	McMaster University 博士研究員	'14. 1.25-'14. 2. 9
YAMAMOTO, Kenji	日本	ベルリン自由大学大学院生	'14. 2.16-'14. 2.22
4. 所長招へい協力研究員			
大坪 嘉之	フランス	Synchrotron SOLEIL 博士研究員	'13. 3.30-'13. 4. 3
熊谷 崇	ドイツ	Fritz-Haber-Institute 学振海外特別研究員	'13. 3.31-'13. 4. 2
FORTAGH, Jozsef	ドイツ	Universitat Tübingen 教授	'13. 4.29-'13. 5. 1
STEPHAN, Thurmer	ドイツ	Helholtz-Zentrum 博士研究員	'13. 5. 3-'13. 5. 8
柴田 幹大	アメリカ	MAX Planck Florida Institute for Neuroscience 博士研究員	'13. 5. 4-'13. 5. 9
岡崎 圭一	日本	Max-Planck Institute of Biophysics 博士研究員	'13. 8.31-'13. 9. 3
森 俊文	日本	Stanford University 博士研究員	'13. 8.31-'13. 9. 5
WALES, David	イギリス	University of Cambridge 教授	'13.11. 9-'13.11.14
小笠原 寛人	アメリカ	SLAC 国立加速器研究所スタッフサイエンティスト	'13.11.29-'13.12. 2
HERNANDEZ, Rigoberto	アメリカ	Georgia Institute of Technology 教授	'13.12. 8-'13.12.10
5. 特別訪問研究員			
KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika	スリランカ	千葉大学特任助教	'13. 4. 1-'14. 3.31
WEI, Hao	中国	上海交通大学准教授	'13.11.21-'14. 3.31
6. 招へい研究員			
岡崎 圭一	アメリカ	National Institutes of Health LCP 研究員	'13. 4. 1-'13. 4. 1
SHAH, Lawrence	アメリカ	CREOL The College 助教	'13. 4. 2-'13. 4. 9
CHIN, See Leang	カナダ	Laval University 教授	'13. 4. 3-'13. 4. 6
RICARDSON, Martin	アメリカ	CREOL The College 教授	'13. 4. 3-'13. 4. 7
WOESTE, Ludger	ドイツ	ベルリン自由大学教授	'13. 4. 3-'13. 4. 7
MUKHERJEE, Debashis	インド	Indian Association for the Cultivation of Science Emeritus Professor	'13. 4. 8-'13. 5.11
SINHA, Debalina	インド	Indian Association for the Cultivation of Science 大学院生	'13. 4. 8-'13. 5.11
SCHLAU-COHEN, Gabriela S.	アメリカ	Stanford University 博士研究員	'13. 4.12-'13. 4.18
BIEGERT, Jens	スペイン	ICFO-The Institute of Photonics Sciences 教授	'13. 4.26-'13. 4.27
GUPTA, Sreenath	アメリカ	Argonne National Laboratory 研究員	'13. 4.26-'13. 4.27
森 俊文	アメリカ	University of Wisconsin その他	'13. 4.29-'13. 5. 3
KOCH, Christiane	ドイツ	University of Kassel Theoretisch 教授	'13. 5. 7-'13. 5. 7
HANNONGBUA, Supa	タイ	Kasetsart University 教授	'13. 5.23-'13. 5.24
			'13. 5.24-'13. 5.27
古賀 信康	アメリカ	University of Washington 特別研究員	'13. 6.18-'13. 6.19
斉田 謙一郎	イギリス	University of Leeds その他	'13. 6.24-'13. 6.28
KUBECEK, Vaclav	チェコ	Czech Technical University 教授	'13. 7. 7-'13. 7. 9
CAMMI, Roberto	イタリア	Universita' di Parma 教授	'13. 7.15-'13. 7.28
DENLINGER, Jonathan	アメリカ	Lawrence Berkeley National Laboratory 主任研究員	'13. 8. 2-'13. 8. 4
KIM, Changyoung	韓国	Yonsei University 教授	'13. 8. 2-'13. 8. 5
瀧本 哲也	韓国	Hanyang University 准教授	'13. 8. 2-'13. 8. 4
JO, Jihee	韓国	Chosun University 学部学生	'13. 8.11-'13. 8.24
			'14. 1.26-'14. 2.14
LIM, Jong Kuk	韓国	Chosun University 助教	'13. 8.11-'13. 8.24
			'14. 1.26-'14. 2.14
WANG, Hsiao-tsu	台湾	National Tsing Hua University 大学院生	'13. 8.25-'13. 9. 2

TI, Tee Jia	マレーシア	University Malaya 大学院生	'13. 9.29-'13.11.15 '13.11.16-'13.12.27
IMPENG, Sarawoot	タイ	Kasetsart University 大学院生	'13. 9.30-'13.11.15 '13.11.16-'13.12.29
LI, Binbin	シンガポール	Nanyang Technological University 大学院生	'13. 9.30-'13.11.15 '13.11.16-'13.12.30
YEH, Tien Tien	台湾	National Chiao Tung University 大学院生	'13.10. 1-'13.11.15 '13.11.16-'13.12.29
SALEH, Muhammad	インドネシア	University Gadjah Mada 大学院生	'13.10. 3-'13.11.15 '13.11.16-'13.12.31
JUNG, Sung Won	韓国	Pohang University of Science and Technology 大学院生	'13.10.10-'13.10.26
DALAGAN, Juliet	フィリピン	Xavier University 助教	'13.10.12-'13.11.15 '13.11.16-'13.12.15
CHINAPANG, Pondchanok	タイ	Chulalongkorn University 大学院生	'13.10.13-'13.11.30 '13.12. 1-'14. 1.31 '14. 2. 1-'14. 4. 1
KHONGPRACHA, Pipat	タイ	Kasetsart University 講師	'13.10.23-'13.11.23 '13.11.24-'13.12.30
安宅 憲一	ドイツ	ベルリン自由大学主幹研究員	'13.10.23-'13.10.24
PANDUNGROS, Panuwat	タイ	Chulalongkorn University 講師	'13.10.29-'13.12.16
THEODOR, Agapie	アメリカ	California Institute of Technology 教授	'13.10.29-'13.10.30
OON, Han Loke	オーストラリア	The University of Western Australia 大学院生	'13.11. 4-'13.12.22
TRAN, Uyen	ベトナム	Ho Chi Minh University of Technology 大学院生	'13.11.14-'13.12.16
LIU, Wenting	中国	Shanghai University 大学院生	'13.11.15-'13.12.31
HIERO, Cyrille	フランス	University of Burgundy 教授	'13.11.19-'13.11.21
RULISEK, Lubomir	チェコ	Institute of Organic Chemistry and Biochemistry グループリーダー	'13.12. 6-'13.12. 9
SRNEC, Martin	チェコ	Institute of Organic Chemistry and Biochemistry 研究員	'13.12. 6-'13.12. 9
KUNDIG, Peter	スイス	University of Geneva 教授	'13.12.12-'13.12.12
EBERLE, Fabian	ドイツ	ベルリン自由大学大学院生	'14. 1. 6-'14. 3.16
LINDLE, Dennis	アメリカ	University of Nevada 教授	'14. 2. 5-'14. 2.12
PIANCASTELLI, Novella	フランス	Universite Pierre et Marie Curie 教授	'14. 2. 5-'14. 2.12
LABLANQUIE, Pascal	フランス	Universite Pierre et Marie Curie 准教授	'14. 2.14-'14. 3. 2
KEDEM, Yaron	デンマーク	Nordic Institute of Theoretical Physics 研究員	'14. 2.18-'14. 2.26
KNEE, George	イギリス	University of Oxford 大学院生	'14. 2.18-'14. 3. 2
WU, Shengjun	中国	Nanjing University 教授	'14. 2.20-'14. 2.23
ZHANG, Yu-Xiang	中国	Xidian University 大学院生	'14. 2.20-'14. 3. 2
ZHU, Xuanmin	中国	University of Science and Technology of China 研究員	'14. 2.20-'14. 3. 2
7. 岡崎コンファレンス			
BAUMERT, Thomas	ドイツ	Universitaet Kassel 教授	'13.10.29-'13.11. 3
SUSSMAN, BenjaminJ.	カナダ	National Research Council Canada 准教授 (レベル)	'13.10.29-'13.11. 3
AVERBUKH, Ilya	イスラエル	Weizmann Institute of Science 教授	'13.10.28-'13.11. 3
CAO, Jianshu	アメリカ	Massachusetts Institute of Technology 教授	'13.10.29-'13.11. 3
KOSLOFF, Ronnie	イスラエル	Hebrew University of Jerusalem 教授	'13.10.28-'13.11. 3
KREMS, Roman	カナダ	University of British Columbia 教授	'13.10.30-'13.11. 3
LEVIS, Robert J.	アメリカ	Temple University 教授	'13.10.29-'13.11. 3
MILNER, Valerie	カナダ	University of British Columbia 助教	'13.10.30-'13.11. 3
百瀬 孝昌	カナダ	University of British Columbia 教授	'13.10.30-'13.11. 3
WEIDEMULLER, Matthias	ドイツ	University of Heidelberg 教授	'13.10.30-'13.11. 3
PACHON, Leonardo	カナダ	University of Toronto 助教	'13.10.29-'13.11. 3
NAREVICIUS, Edvardas	イスラエル	Weizmann Institute of Science 特任准教授	'13.10.28-'13.11. 3
NELSON, Keith	アメリカ	Massachusetts Institute of Technology 教授	'13.10.31-'13.11. 3

表4 国際交流協定締結一覧

相手方機関名	国名	協定書等名	主な内容	締結年月日	有効期限	相手方署名者	機 構 署名者
中国科学院 化学研究所	中国	分子科学における日・中共同 研究プロジェクト覚書	共同研究（物質分子科学、光 分子科学、理論計算分子科学）	2013. 9. 6	2018. 9. 5	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・分子科学 研究所	台湾	分子科学研究所と中央研究 院原子・分子科学研究所との 分子科学分野における協 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
インド科学振興 協会	インド	自然科学研究機構分子科学 研究所とインド科学振興協 会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）	2013. 3.20	2017. 3.19	代表	所長
ベルリン自由大 学	ドイツ	自然科学研究機構分子科学 研究所とベルリン自由大学 との分子科学分野における 共同研究に関する覚書	分子科学分野における学術 交流及び共同研究等の実施	2013. 6.21	2016. 6.20	学長	所長

(2013.12.31 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25年度は下記の第73回岡崎コンファレンスを開催した。

会 議 名：第73回岡崎コンファレンス

“Coherent and Incoherent Wave Packet Dynamics”

期 間：2013年10月30日(水)～11月2日(土)

場 所：岡崎コンファレンスセンター

組織委員：Moshe Shapiro（プリティッシュコロンビア大学）、大森賢治（分子研）、大島康裕（分子研）

内 容：

去る2013年10月30日～11月2日に、岡崎市の岡崎コンファレンスセンターにおいて、標記国際会議が開催された。岡崎コンファレンスは、分子科学ならびに関連分野における中心的課題を集中して議論する場として分子研が主催するもので、研究所創設以来30有余年の歴史を有する。今回はカナダBritish Columbia大学のPeter Wall Institute for Advanced Studiesと共催で開催された。同大学のMoshe Shapiro教授は、会議の発案、予算獲得からプログラムの設定に至るまで強力なリーダーシップを発揮された。Shapiro教授のご尽力が無ければ本会議が実現することは無かった。

量子の世界では、物質は波である。波は干渉して強め合ったり弱め合ったりする可干渉性（コヒーレンス）を持っている。物質の定常状態を表す定在波を固有関数と呼ぶが、固有関数を複数個重ね合わせると、それらが強め合う場所が時間とともに移動して行く状態が生まれる。これを波束と呼ぶ。時間発展する量子系を理解する為には、波束の時間発展を観測しなければならない。同様に制御する為には、波束の時間発展を制御する必要がある。本会議では、この波束の観測と制御に関連する最先端の研究動向について議論した。最近では、量子という概念は物理学だけではなく、化学、情報科学、生物学など様々な分野に波及している。なぜならレーザーを始めとする光技術の発展で実験が精緻化し、従来量子性とは無縁と思われていた自然現象で量子的な効果が認められつつあるからだ。例えば、化学反応を量子力学的な可干渉性を利用して制御する試みは1980年代から行われている。本会議の主催者の一人であるShapiro教授はToronto大学のPaul Brumerとともに、共通の終状態に至る二つの異なる光励起過程が干渉することを利用して、分子の光解離反応を制御する手法を理論的に提案した。同時期にChicago大学のStuart A. Riceとその共同研究者であるDavid TannorやRonnie Kosloffらは、電子励起状態ポテンシャル上で運動する波束をレーザーパルスで他の電子状態に遷移させることによって光解離反応を制御する手法を理論的に提案した。コヒーレント制御と呼ばれるこれらの概念はその後のレーザー技術の発展によって実験的に実現された。今日では、ナノケルビンまで冷却された分子を対象に、同様の思想に基づくより精密な化学反応制御が試みられつつある。また、情報は紙や電子など物理

的な実体に乗って他所に伝わるが、この伝達物質の量子性をコヒーレント制御することによって、スパコンの1億倍以上高速なコンピューターや、盗聴が100%不可能な通信インフラなどを構築することができる。より最近では、光合成、視覚、渡り鳥の方角認知などの生物現象でも量子力学的なメカニズムが提唱されつつある。これらは時間発展する現象であることが多く、そこでの波束の時間発展を観測し制御することは、現象の理解と制御に大きな進展をもたらすと期待される。本会議では、そのような観測制御のための基盤技術の開発から、それらの応用までを幅広く議論した。例えば、上述の生物系において、量子力学的なコヒーレンスがどの程度重要な役割を果たしているのかについて、原子集団を用いたモデル系との対比などによって議論した。これらを通じて、量子力学と古典力学の境界における新しい世界観に基づく自然科学の新しい分野の創出を目指した。

招待講演者を以下に挙げる。

Prof. Shuji Akiyama (Institute for Molecular Science)

Prof. Ilya Averbukh (Weizmann Institute of Science)

Prof. Thomas Baumert (University of Kassel)

Prof. Jianshu Cao (Massachusetts Institute of Technology)

Prof. Akihito Ishizaki (Institute for Molecular Science)

Prof. Ronnie Kosloff (The Hebrew University of Jerusalem)

Prof. Roman Krems (The University of British Columbia)

Prof. Robert J. Levis (Temple University)

Prof. Valerie Milner (The University of British Columbia)

Prof. Takamasa Momose (The University of British Columbia)

Prof. Kazutaka Nakamura (Tokyo Institute of Technology)

Prof. Ed Narevicius (Weizmann Institute of Science)

Prof. Keith Nelson (Massachusetts Institute of Technology)

Prof. Yasuhiro Ohshima (Institute for Molecular Science)

Prof. Hiromi Okamoto (Institute for Molecular Science)

Dr. Leonardo Pachon (University of Toronto)

Dr. Benjamin Sussman (National Research Council, Canada)

Prof. Matthias Weidemüller (University of Heidelberg)

原子分子光物理学、ナノ科学、凝縮系物理学、生物科学など幅広い研究領域における世界トップレベルの研究者が、波束やコヒーレンスという観点から各々の分野の最先端について素晴らしい講演を行った。また、実験家と理論家がバランス良く配置されたプログラムは、様々な観点から分野横断的な議論を促進するのにとても役立った。ポスターセッションにおいても、同様の活発な議論が行われた。これらを通じて育まれた革新的なアプローチや創造的なコンセプトを以下にまとめる。

- 1) 分子回転の新しい観測制御スキーム, 高強度レーザー誘起の分子解離やイオン化, 分子振動を用いた高速情報処理, 極低温分子の生成と衝突。
- 2) 極低温リュドベリ原子や光格子中の極低温分子を用いた多体物理の探求。

- 3) バルク固体やナノ物質中のプラズモン, コヒーレントフォノン, 光誘起相転移など電子や原子の集団運動の光制御。
 4) 光合成や概日リズムなど生体系におけるコヒーレンスの探求。

また本会議で展開された分野横断的な議論は、二つの異なる研究分野の融合の可能性を示した。例えば、極低温物理と超高速コヒーレント制御、量子光学と生物科学、量子情報処理と分子科学などの組み合わせである。研究者ネットワークという観点からは、カナダ、米国、ヨーロッパ、イスラエル、日本のトップ研究者間の共同研究を促進した点が意義深い。

本会議が大きな実りを得て終了した1ヶ月後、その中心的な役割を果たされた Shapiro 教授が他界された。Shapiro 教授はコヒーレント制御の創始者であり、これまで30年以上に渡って世界の物理化学を牽引して来られた。若手研究者を温かい目で見守りながら次世代の育成にも力を注がれた。本会議の招待講演者の中には Shapiro 教授の薫陶を受けた者が何人もいる。筆者も言葉に尽くせぬほどお世話になった。本会議は Shapiro 教授の最後のメッセージでもある。ここで育まれた新しい科学の芽を大きく育て、いつの日か Shapiro 教授のご功績に報いたい。

30th October (Wednesday)

9:20 – 9:30 Opening address by Director General of IMS, Iwao Ohmine

Session 1: Coherent manipulation of molecular motion

9:30 – 10:10 **Ilya Averbukh** (Weizmann Institute of Science)
 “Optics of a gas of coherently spinning molecules”
 10:10 – 10:50 **Yasuhiro Ohshima** (IMS)
 “Coherent nonlinear optical manipulation of molecular vibration and rotation”
 10:50 – 11:10 Coffee break
 11:10 – 11:50 **Valery Milner** (The University of British Columbia)
 “Controlled creation, direct observation and study of molecular super rotors”
 11:50 – 12:30 **Yehiam Prior** (Weizmann Institute of Science)
 “From individual to strongly coupled metallic nanocavities”
 12:30 – 14:00 Lunch

Session 2: Coherent Control

14:00 – 14:40 **Thomas Baumert** (University of Kassel)
 “Nonperturbative coherent wavepacket dynamics in molecules”
 14:40 – 15:20 **Robert J. Levis** (Temple University)
 “Strong field control of alkylphenones using the tunnel ionization launch state”
 15:20 – 15:40 Coffee break
 15:40 – 16:20 **Ronnie Kosloff** (The Hebrew University of Jerusalem)
 “Coherent control of hot and cold photoassociation”
 16:20 – 17:00 **Benjamin Sussman** (National Research Council, Canada)
 “Ultrafast quantum processing in the vibronic states of molecules and solids”

31st October (Thursday)

Session 3: Ultracold physics and chemistry

9:30 – 10:10 **Matthias Weidemüller** (University of Heidelberg)
 “Dressing photons with Rydberg atoms—interacting polaritons, non-classical light and quantum transport of energy”
 10:10 – 10:50 **Roman Krems** (The University of British Columbia)
 “Molecules in an optical lattice as a quantum simulator of polaron physics”
 10:50 – 11:10 Coffee break
 11:10 – 11:50 **Takamasa Momose** (The University of British Columbia)
 “Cold molecules towards coherent control”
 11:50 – 12:30 **Ed Narevicius** (Weizmann Institute of Science)
 “TBA”
 12:30 – Excursion (to Asuke Village; with lunch box)

1st November (Friday)

Session 4: Condensed-phase dynamics

9:30 – 10:10	Hiromi Okamoto (<i>IMS</i>) “Plasmon dynamics and chiralities investigated by optical nanoscopy”
10:10 – 10:50	Kazutaka Nakamura (<i>Tokyo Institute of Technology</i>) “Optical control of quasiparticles in a bulk solid”
10:50 – 11:10	Coffee break
11:10 – 11:50	Keith Nelson (<i>Massachusetts Institute of Technology</i>) “Molecular and collective coherent control”
11:50 – 12:30	Jianshu Cao (<i>Massachusetts Institute of Technology</i>) “Coherent energy transfer in light-harvesting: Symmetry, disorder, and noise”
12:30 – 14:00	Lunch
14:00 – 16:00	Poster
17:00 – 17:30	Attraction
18:00 – 20:00	Conference dinner

2nd November (Saturday)

Session 5: Complex systems

10:00 – 10:40	Shuji Akiyama (<i>IMS</i>) “The frontier in protein-clock system ~ How do organisms measure time? ~”
10:40 – 11:20	Akihito Ishizaki (<i>IMS</i>) “Electronic and vibrational wavepackets in photosynthetic energy transfer”
11:20 – 12:00	Leonardo Pachon (<i>University of Toronto</i>) “On the classical/quantum nature of excitonic energy transfer in multichromophoric systems”
12:00 – 12:10	Closing remarks

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年度の法人化の際に、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。平成24年度に見直しを行い、平成25年度より、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招聘、②若手外国人研究者の招聘、などを伴う国際共同研究が推進されている。本プログラムによる国際共同研究の採択件数は初年度（平成16年度）7件、平成17年度10件、平成18年度12件、平成19年度10件、平成20年度9件、平成21年度12件、平成22年度13件、平成23年度13件、平成24年度11件、本年度35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。

2013 年度実施状況

代表者	研 究 課 題 名	相手国
魚住 泰広	鉄ナノ触媒によるフロー反応の開発	カナダ
魚住 泰広	銅触媒による芳香族 C-H 結合空気酸化反応の機構研究	中国
小杉 信博	金属電析及び有機エレクトロクロミズムを理解するためのその場観測電気化学セルの開発	カナダ
小杉 信博	自己組織化ナノワイヤーと巨大ラシュバ分裂	韓国
小杉 信博	細胞と皮膚による薬の摂取の研究 (ナノテク STXM)	ドイツ
小杉 信博	走査型透過 X 線顕微鏡によるモノリシックポリマーの評価 (ナノテク STXM)	オーストラリア
小杉 信博	バンドギャップ技術のための新規ハイブリッド二次元ナノシートの電子構造マッピング (ナノテク STXM)	台湾
小杉 信博	有機半導体デバイスの表面機能化と界面特性 (ナノテク STXM)	台湾
横山 利彦	新奇ハイブリッド二次元ナノシートの磁気特性 (ナノテク XMCD)	台湾
繁政 英治	高分解能共鳴オージェ電子分光法による内殻励起分子ダイナミクスの研究	フランス
大森 賢治	超高速量子シミュレーターの開発	フランス・ドイツ
大森 賢治	極低温分子の超高速光会合	ドイツ
大森 賢治	バルク固体の超高速光制御	ドイツ
江原 正博	多配置クラスター展開法の開発と応用	インド
江原 正博	SAC-CI 法による電子移動指標	フランス
岡本 裕巳	ナノフォトニック物質の光電場構造・ダイナミクス解析	イギリス
加藤 晃一	自己組織化ナノ内面の化学	韓国
加藤 晃一	糖鎖-糖鎖相互作用にかかわる N 型糖鎖の構造解析	アメリカ
加藤 晃一	NMR を利用した N 型糖鎖の立体構造解析	ドイツ
加藤 晃一	神経幹細胞における糖鎖の機能解析	アメリカ
加藤 晃一	NMR を利用した Glucosidase II MRH ドメインと N 型糖鎖の相互作用解析	アルゼンチン アメリカ
加藤 晃一	阻害剤添加による HIV 逆転写酵素の構造・ダイナミクスへの影響	タイ
加藤 晃一	NMR 法を利用したガングリオシド糖鎖間相互作用の解析	イタリア
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
加藤 晃一	糖鎖バイオマーカーの構造解析	インド
加藤 晃一	糖脂質膜上におけるアミロイド β タンパク質の構造変化の生物物理学的解析	イギリス
加藤 晃一	アルツハイマー病におけるタウタンパク質のアミロイド凝集阻害化合物の開発	イスラエル
加藤 晃一	質量分析による糖鎖の構造解析	台湾
加藤 晃一	植物で発現させた糖タンパク質の糖鎖構造解析	韓国
加藤 晃一	味覚修飾タンパク質クルクリンの機能発現機構の解明	アメリカ
斉藤 真司	過冷却水のガラス転移	インド
斉藤 真司	水の分子内振動の揺らぎの解析	アメリカ
江 東林	多孔性高分子を用いた蓄電システムの構築	オーストラリア
平等 拓範	固体レーザーの開発	スペイン・チェコ 中国・アメリカ
古谷 祐詞	糖輸送タンパク質の赤外分光	スペイン・ドイツ

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年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。本年度、第15回シンポジウム“Hierarchical Structure from Quantum to Functions of Biological Systems”を7月に神戸で開催し、日本、韓国からそれぞれ12、11件の講演が行われた。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。

3-4-5 分子研国際インターンシッププログラム

これまでは院生などの長期研修生（インターン）の受入れを分子研国際共同プログラムや外部資金別に実施してきたが、外部資金がいつもあるわけではなく、長期的に研究所が実施する基幹プログラムとして位置付ける方向で平成24年度に見直しを行い、平成25年度より分子研国際インターンシッププログラム（IMS-IIP）として事業化することにした。平成25年度の実績は表にあるように31名の受入れを行った。なお、半年以上の研修生については特別共同利用研究員として受け入れてRA雇用をおこなうことにしている。EXODASS事業での受入れは3ヶ月未満を原則としている。サマースクール、ウィンタースクール等は1週間程度である。それ以外は最長半年の受入れを可能としている。現在はすべて分子研国際共同の予算を運用しているが、今後、可能なものについては、外部資金への応募を進めながら、実施する予定である。なお、ここでは分子研国際共同研究、日韓共同研究に参加している院生等は除外している。

	フランス	ドイツ	中国	台湾	インド	タイ	シンガポール	ベトナム	フィリピン	マレーシア	インドネシア	トルコ	オーストラリア	合計
協定に基づくもの	3	1				3(1)								7(1)
協定準備中のもの					1									1
その他の共同研究			2(2)	1(1)	2							1		6(3)
サマースクール				5										5
EXODASS			1	1		4	1	1	1	1	1		1	12
合計	3	1	3(2)	7(1)	3	7(1)	1	1	1	1	1	1	1	31(4)

（ ）は内数で半年以上の長期インターン（特別共同利用研究員としてRA雇用しているもの）

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 ～2003	04	05	06	07	08	09	10	11	12	13
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	4										
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	40	2									1
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	80			3	4	6	6	4	11	12	11
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	37	2				1					
三重大学	7										
京都大学	40		2	1	1	1	2			1	1
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	26					1				2	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	37	1									
山口大学	1										
愛媛大学	8	1									
高知大学	2										
九州大学	45								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	2
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	1
中央大学								1			
東海大学	3										
東京理科大学	8	1									
東邦大学	3										
星薬科大学	1										
早稲田大学	12	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	6
計	586	17	14	16	17	17	17	17	27	30	24

＊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（2013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	6	16
機能分子科学専攻	8	8	19
計	16	14	35

在籍学生数（2013年12月現在） 単位：人

（年度別）

入学年度専攻		2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	計	定 員
構造分子科学専攻	5年一貫	0	0	2	0	1	2	4	9	2
	博士後期	0	0	0	1	0	4	1	6	3
機能分子科学専攻	5年一貫	1	1	1	2	2	2	0	9	2
	博士後期	0	0	0	0	4	5	4	13	3

学位取得状況 単位：人

（年度別）

専 攻	1991～2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	80(11)	3	7	5	5(1)	7	5	2	2	6	3	125(12)
機能分子科学専攻	65(10)	5(4)	4	5	1	4	3	5	1	3	3	99(14)

（ ）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	1989～2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013
構造分子科学専攻	105	7	8	11(1)	8(1)	5(1)	5(3)	5(1)	1(1)	6(2)	5(4)
機能分子科学専攻	95	6	7	4	5(1)	5(2)	7(2)	4(2)	6(2)	8(2)	4

（ ）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		
	1989-2011 年度	2012 年度	2013 年度	1989-2011 年度	2012 年度	2013 年度
中 国	22	3	2	7	1	3
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		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				2		
タイ				2	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～'11 年度	'12 年度	'13 年度	'89～'11 年度	'12 年度	'13 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			2(2)	3			5(2)
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		7			10
名古屋工業大学	1						1
豊橋技術科学大学	5			3(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	3(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				4			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
いわき明星大学						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		1(1)				3(1)
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
福岡大学			1(1)				1(1)
放送大学	1						1
＊その他	34(2)	4(1)	1	24(3)	3	3	69(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（2013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	22	8	30
講 師	3	4	7
助 教	15	13	28
大学・公的機関等研究職	25	25	50
民間企業	29	22	51
その他	23	19	42
計	126	100	226

3-5-3 オープンキャンパス・分子研シンポジウム

2013年5月31日（金）午後～6月1日（土）午前まで分子研シンポジウム2013を開催し、引き続き1日（土）午後に分子研オープンキャンパス2013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7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7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54名であった（オープンキャンパス・分子研シンポジウムいずれか一方のみを含む）。参加者構成は、沖縄から東北まで、学部学生16名、大学院生30名、教員・研究者6名、民間2名であり、あわせて合計54名であった。所内からも多くの参加を得た。

参加者数まとめ

	学部学生	大学院生	教員・その他	民間	合計
東北	1	1	0	0	2
関東	10	19	2	2	33
甲信越	0	0	1	0	1
東海	1	0	1	0	2
近畿	2	10	1	0	13
九州・沖縄	2	0	1	0	3
合計	16	30	6	2	54

3-5-4 夏の体験入学

2013年8月5日（月）から8日（木）までの4日間、分子科学研究所において、第10回総研大夏の体験入学を開催した。本事業は、他大学の学部学生・大学院生に対して、実際の研究室での体験学習を通じて、分子科学研究所（総研大物理科学研究科構造分子科学専攻・機能分子科学専攻）における研究環境や設備、大学院教育、研究者養成、共同利用研究などを周知するとともに、分子研や総研大への理解促進を目的としている。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。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、定員を上回る応募を受け、選考の結果、28名の学生に参加いただいた。実施スケジュールは以下のとおりである。

8月5日（月）：オリエンテーション、UVSORと計算科学研究センターの見学

交流会

8月6日（火）、7日（水）：配属研究室にて研究体験

8月8日（木）：体験内容報告会

参加者の内訳、体験内容、受入研究室は以下の通りである。

	所属	学年	体験内容	対応教員
1	京都大学大学院	修士2年	光で分子を回してみよう！	大島 教授
2	東京工業大学大学院	修士2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
3	東京工業大学大学院	修士2年	有機トランジスタ	山本 教授
4	東京工業大学大学院	修士2年	膜タンパク質の分子機構に赤外分光計測で迫る！	古谷 准教授
5	東京工業大学大学院	修士2年	光を使って分子を制御しよう	大森 教授
6	福島大学大学院	修士2年	固体 NMR を用いた生体分子の構造研究に関する体験	西村 准教授
7	静岡大学大学院	修士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	小杉 教授
8	東邦大学	学部4年	有機半導体セキシチオフェンの合成	鈴木 准教授
9	日本大学	学部4年	クラスター触媒を用いた反応の一例を体験	櫻井 准教授
10	金沢大学	学部3年	多孔性と π 共役を兼備する分子	江 准教授
11	東京大学	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
12	東京工業大学	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
13	城西大学	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
14	城西大学	学部3年	有機金属クラスターを合成してみよう	村橋 教授
15	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
16	慶應義塾大学	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	東北大学	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
18	京都大学	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
19	高知大学	学部2年	有機 EL 素子の作製と発光測定	平本 教授
20	東京大学	学部2年	レーザーから発生する光パルスの測定	藤 准教授
21	横浜市立大学	学部2年	タンパク質で生物時計を作ってみよう	秋山 教授
22	東京大学	学部2年	計算化学のハッキング体験学習	柳井 准教授
23	鳥取大学	学部2年	タンパク質で生物時計を作ってみよう	秋山 教授
24	東京大学	学部2年	金属酵素モデルを用いた酵素研究の体験	藤井 准教授
25	上智大学	学部2年	有機 EL 素子の作製と発光測定	平本 教授
26	慶應義塾大学	学部2年	有機金属クラスターを合成してみよう	村橋 教授
27	東京理科大学	学部1年	金属錯体で学ぶ人工光合成	正岡 准教授
28	徳島大学	学部1年	フロンティア軌道理論と量子化学計算	江原 教授

3-5-5 総研大アジア冬の学校

2013年12月10日（火）から13日（金）にかけて岡崎コンファレンスセンターで「総研大アジア冬の学校」が開催された。総研大・物理科学研究科では、研究科内の5専攻で行っている研究・教育活動をアジア諸国の大学院生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10回目である。アジア諸国から定員を大幅に超える応募を受け、書類選考の結果、17名を受け入れた。その国籍別の内訳はタイ6名、インドネシア4名、シンガポール3名、中国2名、ベトナム1名、マレーシア1名である。また、EXODASS 招聘留学生在が12名、日本国内からの参加者が14名あり、講師を除く参加者は合計43名であった。今回は、テーマを“Innovations and Challenges in Molecular Science: From Basics to Cutting-edge Researches”とし、分子科学の基礎から最先端にわたる講義を行った。参加者によるポスター発表、EXODASS 招聘留学生によるミニシンポジウムも行われた。プログラムの詳細は下記のとおりである。

December 10

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

December 11

9:30-11:00: **Prof. Tetsuro Murahashi** (IMS)
Organometallic Complexes of Transition Metals: Structures and Reactivities
11:00-11:10: Break
11:10-12:40: **Prof. Tetsuro Murahashi** (IMS)
Organometallic Complexes of Transition Metals: Structures and Reactivities
12:40-14:00: Lunch
14:00-17:30: **EXODASS mini-symposium**
17:30-19:00: **Poster Session**

December 12

9:30-11:00: **Prof. Hiroshi Yamamoto** (IMS)
Organic Field-Effect-Transistors: Its mechanism, application and recent advances
11:00-11:10: Break
11:10-12:40: **Prof. Hiroshi Yamamoto** (IMS)
Organic Field-Effect-Transistors: Its mechanism, application and recent advances
12:40-14:00: Lunch
14:00-14:45: **Mr. Shangbin Jin** (SOKENDAI/IMS)
Large Pore Donor-Acceptor Covalent Organic Frameworks and their Charge Transfer and Separation Events
14:45-15:30: **Mr. Kenji Mochizuki** (SOKENDAI/IMS)
A new molecular level insight into how the hydrogen bond network is disordered in homogeneous ice melting
15:30-15:35: Group Photograph
15:35-15:45: Break
15:45-17:15: **Prof. Takuya Nagasaka** (National Institute for Fusion Science)
Development of Low Activation Vanadium Alloys for Fusion Reactor
17:30-19:00: Banquet

December 13

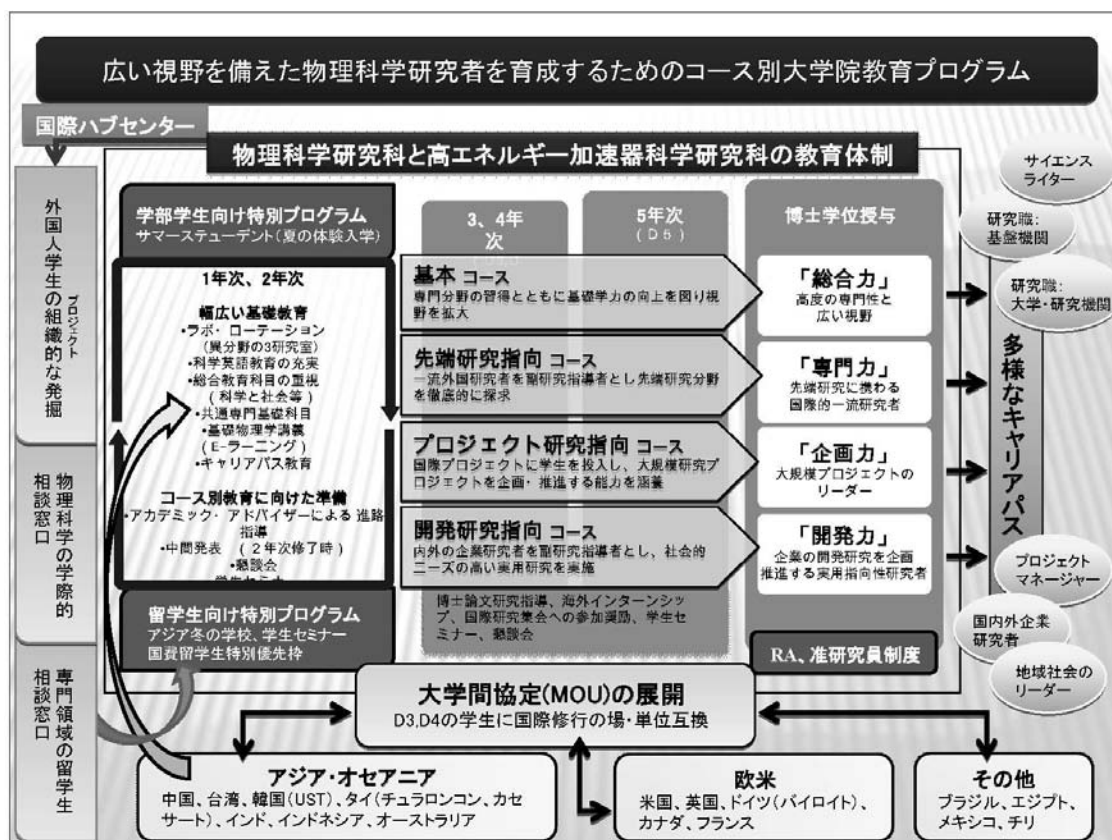
9:30-11:00: **Prof. Masahiro Ehara** (IMS)
Quantum Chemistry for Excited States
11:00-11:10: Break
11:10-12:40: **Prof. Masahiro Ehara** (IMS)
Quantum Chemistry for Excited States

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加えて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、履修規程や単位認定方法などの実務的作業・調整が進められ、2013年度から本格的に研究科を超えたプログラムとして運用している。



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 (<http://ibep.ims.ac.jp/index.html>)。

2013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。科目数は前年度8から今年度11に増加。「機能生体分子科学」の代わりに「構造生体分子科学」、新たに「基礎生体科学分子」、「生物情報学」、「生命起源論」を加えた。

(2) 「学生企画型共同研究 (IRC grant)」

本企画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。今年度の採用は3件であった。研究成果は2013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、本プログラム、新学術「動的秩序と機能」(代表加藤晃一教授)共催)

本年度は機能分子科学専攻の加藤晃一教授がオーガナイザーで「生命システムの動秩序」というタイトルで8月に開催された。海外を含め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。

本プログラムの提供する講義に機能・構造分子科学専攻の大学院生の参加が少ないのは残念である。本プログラムでは豪華な講師陣が興味深い講義をしており、聴かないのはもったいないと思うことがしばしばである。ちょっと窓を開けて外の景色も見てみてはいかがだろうか。

4. 研究支援等

ここに記載しているのは、直接研究活動を行わないが研究を遂行する上でなくてはならない研究支援業務であり、主に技術課が担当・支援しているものである。特に法人となつてからは、全国の分子科学コミュニティの連帯を強めるために研究支援部門を強化してきた。法人化後に新設された部門には、「安全衛生管理室」、「広報室」、「史料編纂室」があり、引き続き活発な活動を行っている。また、平成 25 年度から自然科学研究機構は「研究大学強化促進事業」の支援対象機関となり、分子研もこの事業の一環で「研究力強化戦略室」が設置され、広報室と史料編纂室は研究力強化戦略室に発展的に含まれることになった。さらに今後、技術課はこの戦略室と連携して研究支援業務を進める事になる。

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 年度に組織編成を大きく見直したが、新しい研究センターの設置や研究所の構想により即した体制を整えるため、平成 25 年 7 月に 7 技術班を 6 技術班に再編し一部の人員配置換えも行った。（「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か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。部分的に、平成 14 年 3 月に廃止した研究施設の「化学試料室」の機能も有している。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、研究活動報告や要覧誌の発行などに留まらず、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き様々な活動を行ってきた。例えば分子研における研究トピックスの発信やプレスリリース、分子研ウェブサイトの整備、事業内容を紹介する動画の制作や展示室を見学者に公開するなど、研究所のアウトリーチ活動全般を担っている。これらの活動を研究力強化の立場から見直すことも含めて、今後は研究力強化戦略室として一体的に活動することになった。

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・記録してきた。今後は広報資料や研究活動等評価資料（IR 資料）という観点で、研究力強化推進室の中に位置付けることとなる。

4-1 技術課

技術課は、所長に直属した技術職員の組織で、技術課長以下に6技術班14技術係を配置し、構成員は2013年4月1日現在で35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压ガスの知識、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技術職員は流動性に乏しいので、組織と個人の活性化を図るために積極的に次のような事項を推進している。

4-1-1 技術研究会

施設系技術職員が他の大学、研究所の技術職員と技術的交流を行うことにより、技術職員相互の技術向上に繋がることを期待し、1975年度、分子研技術課が他の大学、研究所の技術職員を招き、第1回技術研究会を開催した。内容は日常業務の中で生じたいろいろな技術的問題や失敗、仕事の成果を発表し、互いに意見交換を行うものである。その後、毎年分子研でこの研究会を開催してきたが、参加機関が全国的規模に広がり、参加人員も300人を超えるようになった。そこで、1982年度より同じ大学共同利用機関の高エネルギー物理学研究所（現、高エネルギー加速器研究機構）、名古屋大学プラズマ研究所（現、核融合科学研究所）で持ち回り開催を始めた。その後さらに全国の大学及び研究機関に所属する技官（現、技術職員）に呼びかけ新たな技術分野として機器分析技術研究会も発足させた。現在ではさらに多くの分科会で構成された総合技術研究会が大学で開催され、さらなる発展を遂げつつある。表1に今までの技術研究会開催場所及び経緯を示す。

表1 技術研究会開催機関

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

昭和 53	分子科学研究所	昭和 53 年 6 月 2 日	機械, 回路	技術研究会について討論会 分科会形式始める
	高エネルギー物理学研究所	昭和 53 年 10 月 27 日	機械技術	
昭和 54	分子科学研究所	昭和 54 年 7 月	機械, 回路, 電子計算機	電子計算機関連の分科会を創設
	高エネルギー物理学研究所	昭和 54 年 10 月 19 日	機械	
昭和 55	分子科学研究所	昭和 55 年 2 月	機械, 回路, 電子計算機	
	高エネルギー物理学研究所	昭和 55 年 10 月 24 日	機械	
	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
	大阪産業科学研究所	平成 8 年 11 月 14-15 日	機器分析	
	名古屋大学理学部	平成 9 年 2 月 6-7 日	装置開発 A,B, ガラス工作	
	北海道大学理学部	平成 9 年 2 月 27-28 日	低温	
平成 9	核融合科学研究所	平成 9 年 9 月 11-12 日	機械, 回路, 低温, 電子計算機, 装置技術	
	静岡大学	平成 9 年 11 月 27-28 日	機器分析	工学部, 情報学部, 電子工学研究所 各技術部の共催
平成 10	名古屋工業大学	平成 10 年 11 月 26-27 日	機器・分析	
	高エネルギー加速器研究機構	平成 11 年 3 月 4-5 日	工作, 低温, 回路・制御, 装置, 計算機	インターネット討論会
平成 11	東北大学	平成 11 年 11 月 11 日	機器・分析	
	分子科学研究所	平成 12 年 3 月 2-3 日	装置, 回路, 極低温, 電子計算機, ガラス工作	インターネット技術討論会
平成 12	福井大学	平成 12 年 9 月 28-29 日	機器・分析	
	東北大学	平成 13 年 3 月 1-2 日	工作, 装置, 回路, 極低温, 情報・ネットワーク, 材料・物性開発, 地球物理観測	
平成 13	大阪大学	平成 13 年 11 月 15-16 日	機器・分析	
	核融合科学研究所	平成 14 年 3 月 14-15 日	工作, 装置, 計測・制御, 低温, 計算機・データ処理	技術部長 大竹 勲
平成 14	東京大学	平成 15 年 3 月 6-7 日	工作, 装置, 回路, 極低温, 情報・ネットワーク, 生物科学, 機器・分析, 地球物理観測, 文化財保存, 教育実験・実習	
平成 15	三重大学	平成 15 年 11 月 20-21 日	機器・分析	
	高エネルギー加速器研究機構	平成 16 年 2 月 26-27 日	工作, 低温, 回路・制御, 装置, 計算機	技術部長 三国 晃

平成 16	佐賀大学	平成 16 年 9 月 16-17 日	機器分析を主とし全分野	
	大阪大学	平成 17 年 3 月 3-4 日	工作, 装置, 回路・計測制御, 低温, 情報ネットワーク, 生物科学, 教育実験・演習・実習	
平成 17	岩手大学	平成 17 年 9 月 15-16 日	機器・分析	
	分子科学研究所	平成 18 年 3 月 2-3 日	機械・ガラス工作, 回路, 低温, 計算機, 装置	技術課長 加藤 清則
平成 18	広島大学	平成 18 年 9 月 14-15 日	安全衛生, 計測制御, 機器・分析など全分野	
	名古屋大学	平成 19 年 3 月 1-2 日	機械・ガラス工作, 装置技術, 回路・計測・制御, 低温, 情報ネットワーク, 生物, 分析・環境, 実験・実習	
平成 19	富山大学	平成 19 年 8 月 23-24 日	機器・分析	
	核融合科学研究所	平成 20 年 3 月 10-11 日	工作・低温, 装置, 計測・制御, 計算機・データ処理	技術部長 山内 健治
平成 20	愛媛大学	平成 20 年 9 月 25-26 日	機器・分析	
	京都大学	平成 21 年 3 月 9-10 日	機械・ガラス工作, 装置, 回路・計測・制御, 低温, 情報ネットワーク, 生態・農林水産, 医学・実験動物, 分析・物性, 実験・実習・地域貢献, 建築・土木, 環境・安全	
平成 21	琉球大学	平成 22 年 3 月 4-5 日	機器分析, 実験・実習, 地域貢献, 安全衛生	
	高エネルギー加速器研究機構	平成 22 年 3 月 18-19 日	機械, 低温, 計測・制御・回路, 装置, 情報・ネットワーク	
平成 22	東京工業大学	平成 22 年 9 月 2-3 日	機器分析, 実験・実習, 地域貢献, 安全衛生	
	熊本大学	平成 23 年 3 月 17-18 日	機械・ガラス工作, 装置, 回路・計測・制御, 低温, 情報ネットワーク, 生態・農林水産, 医学・実験動物, 分析・物性, 実験・実習・地域貢献, 建築・土木, 環境・安全	
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	
平成 25	鳥取大学	平成 25 年 9 月 12-13 日	機器・分析, 安全衛生	
	核融合科学研究所	平成 26 年 3 月 13-14 日	工作技術, 装置技術, 計測・制御技術 低温技術, 情報処理技術	

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。2013 年度は外部より 4 名の講師（民間 2 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
平成24年度	15

表3 平成25年度技術研修受入状況 (2013.4.1 ~ 2014.3.31)

氏 名	所 属	受入期間	備 考
武田 洋一	岩手大学	25.6.18 ~ 6.19	共同開発セミナー「超精密加工」
加賀 亨	岩手大学	25.6.18 ~ 6.19	共同開発セミナー「超精密加工」
鈴木 和司	名古屋大学大学院理学研究科	25.6.19	共同開発セミナー「超精密加工」
鳥居 龍晴	名古屋大学大学院理学研究科	25.6.19	共同開発セミナー「超精密加工」
立花 健二	名古屋大学大学院理学研究科	25.6.19	共同開発セミナー「超精密加工」
大西 崇文	名古屋大学大学院理学研究科	25.6.19	共同開発セミナー「超精密加工」
叶 哲生	名古屋大学大学院理学研究科	25.6.17 ~ 6.21	非切削加工技術および走査型電子顕微鏡操作に関する研修
古舘 守道	岩手大学	25.8.28 ~ 8.31	学生実験等に向けた Arduino プロトタイピングに ARM マイコンへの適用に関する研修
松岡 芳彦	(株) 実用技術研究室	26.3.26	レーザー加工技術の基礎と応用
尾松 孝茂	千葉大学大学院	26.3.26	レーザー加工技術の基礎と応用
早川 伸哉	名古屋工業大学大学院	26.3.26	レーザー加工技術の基礎と応用
木村 一彦	(株) ナノシステムソリューションズ	26.3.26	レーザー加工技術の基礎と応用
高野 朋幸	慶応義塾大学理工学部	26.3.26	レーザー加工技術の基礎と応用
鈴木 雅也	ものづくり大学製造技能工芸学科	26.3.26	レーザー加工技術の基礎と応用
野口与四郎	日産自動車(株)総合研究所	26.3.26	レーザー加工技術の基礎と応用
鈴木 和司	名古屋大学大学院理学研究科	26.3.26	レーザー加工技術の基礎と応用
松下 幸司	名古屋大学大学院理学研究科	26.3.26	レーザー加工技術の基礎と応用
大西 崇文	名古屋大学大学院理学研究科	26.3.26	レーザー加工技術の基礎と応用
叶 哲生	名古屋大学大学院理学研究科	26.3.26	レーザー加工技術の基礎と応用

4-1-3 人事

技術職員人事は、法人化されてからは、広く人材を確保するために、国立大学法人等採用試験や公募採用も取り入れ、即戦力、より高度な専門技術を持つ人材の採用を行ってきた。これら職員人事の経緯を表4に示す。また、職員採用については技術職員の年齢構成も考慮している。現在の職員の年齢構成は、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	辞職	研究・広報技術班	静岡市役所
2007年12月31日	辞職	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	辞職	学術支援班	
2012年3月31日	転出	光技術班	名古屋大学
2013年3月31日	辞職	機器利用技術班	

4-1-4 受賞

早坂啓一（1995 年定年退官）	日本化学会化学研究技術有功賞（1986） 低温工学協会功劳賞（1991）
酒井楠雄（2004 年定年退官）	日本化学会化学技術有功賞（1995）
加藤清則（2008 年定年退職）	日本化学会化学技術有功賞（1997）
西本史雄（2002 年辞職）	日本化学会化学技術有功賞（1999）
山中孝弥	日本化学会化学技術有功賞（2004）
石村和也	WATOC2005 Best Poster Diamond Certificate（2005）
堀米利夫	日本化学会化学技術有功賞（2005）
鈴木光一	日本化学会化学技術有功賞（2007）
吉田久史	日本化学会化学技術有功賞（2008）
水谷文保	日本化学会化学技術有功賞（2009）
青山正樹	日本化学会化学技術有功賞（2012）

4-2 安全衛生管理室

安全衛生管理室は、研究所における快適な職場環境の実現と労働条件の改善を通じて、職場における職員の安全と健康を確保するための専門業務を行うことを目的として、平成16年4月に設置された。安全衛生管理室には、室長、専任及び併任の安全衛生管理者、安全衛生管理担当者、化学物質・放射線・高圧ガス・電気・レーザーなどのそれぞれの分野を担当する作業主任者が置かれている。安全衛生管理者は、少なくとも毎週1回 明大寺・山手両地区を巡視し、設備、作業方法又は衛生状態に危険及び有害のおそれがあるときは、直ちに、職員の健康障害を防止するための必要な措置を講じている。また、職場の安全衛生を推進するために必要な、作業環境測定（必要に応じ外部に委託）や、保護具、各種の計測機器、文献・資料、各種情報の集中管理を行い、分子研における安全衛生管理の中心としての活動を行っている。

また安全衛生管理室では、分子科学研究所全職員に対する安全衛生教育も行っており、そのための資料作成、各種資格取得の促進、専門家の養成などを行っている。雇入れ時の安全衛生教育は年度初旬に定例として行うほか、講習テキストと講習会DVDを用意し、年度途中の採用者に対しても、随時安全衛生教育が可能となるよう配慮している。

また長期滞在する外国人研究者に対しては、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。

また平成25年度には「ひやり・はっと」事案についての内容掌握と情報の共有化を推進した。また試薬管理システムの導入を推進し次年度からの本格的運用を予定している。

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。

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）。

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・技術リテラシー向上の一助をなすこと。

上記ミッションに対応する活動として、下記の業務を行っている。

4-4-1 各種出版物の作成・配布

分子研レポート（年1回発刊）、Annual Review（年1回）、および分子研レターズ（年2回）の編集実務、ならびに研究所のパンフレット（日本語版と英語版）および総研大構造・機能分子科学専攻のリーフレットの作成を担当している。パンフレット類に関しては、配布ターゲットにマッチした内容およびラインアップとなるように、整理・改編に取り組んでいる。研究所パンフレットは2012年度に改訂を行い、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。2013年度には、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2011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、2010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13件のプレスリリースを行った（2014年2月1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おり、2014年度当初のリニューアルオープンを予定している。

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14回：「分子が拓くグリーン未来」、学術総合センター一橋記念講堂、2013年3月20日。

第15回：「アストロバイオロジー」、学術総合センター一橋記念講堂、2013年10月14日。

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「分子研レポート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、再び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「分子研レターズ68号」を参照）。

また、講演会の開催と併せて、展示コーナーを設けてビデオやパネルを用いた説明を行なっている。常設展示室に設置されている可搬式のグラフィックパネルや模型を適宜利用するなど、展示内容のさらなる充実に努めている。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も促している。

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」、2013年11月16日には同会場にて第4回「万物は流転する～因果と時間」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）、大型スクリーンに投影したスーパーコンピュータによるシミュレーションCG（第3回、第4回）、および各種の大型分子模型（第4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、第1回目にサイエンス・ジャーナリストのお二人による座談会形式で実施するなど、新たな試みを行った。どの回も、100名を超える多数の参加者があり、特に、通算第100回記念となった2014年1月31日は、追加の椅子を多数準備する必要があったほどの盛会であった。本年度より、隣接する岡崎高校のスーパーサイエンス事業のご協力を頂き、多数の高校生の皆さんにも参加して頂いている。さらに、小学生以下の小さなお子さんの参加も見られるようになった。若い参加層の皆さんから活発な質問をお寄せ頂き、講演を盛り上げて頂いている。地域に根差しした公開講座会として、広く認知され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
97	2013. 5.24	取材現場から見たサイエンス	尾関 章 (朝日新聞科学記者) 古田 彩 (日経サイエンス記者)
98	2013. 7.17	自然界の輝く色の秘密を探る	木下 修一 (大阪大学大学院生命機能研究科教授)
99	2013. 9.20	糖鎖が担うタンパク質社会の秩序維持	加藤 晃一 (岡崎統合バイオサイエンスセンター教授)
100	2014. 1.31	空はなぜ青いか ——身のまわりにはおもしろいことが多い	藤嶋 昭 (東京理科大学学長)

4-5-4 分子研コロキウム

分子研コロキウムは既に800回を超える歴史のあるセミナーであり、元々のコロキウムの趣旨は、全ての教授、准教授（当時は助教授）が参加し、各人の専門分野を越えて学問的な刺激を受ける場を提供することであった。しかし、数年少し前程度からその趣旨が薄れてきており、自分の研究内容に関係するセミナーのみ聴講し、専門外の講演には関知しないとの風潮が少なからず広まってしまった。このような聴講スタイルであれば通常の研究セミナーや学会発表でその目的は達成可能である。コロキウムの立ち上げ当時とは、スタッフの数も研究分野の広がりも大きく異なることは事実であるが、やはり当初の趣旨に立ち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すぐに議論を掘り下げるような懇談会も毎回開催している。

以下は2013年度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
845	2013. 4.30	Interfacing Cold Atoms and Solids	Prof. Jozsef Fortagh (University of Tübingen)
846	2013. 5.27	Coherent Multidimensional Spectroscopy of Excitons with Classical and Quantum Light Raman Optical Activity of Single Molecules and the Symmetry of "Plasmonic Molecules" Making the Molecular Movie: The Chemists' Gedanken Experiment Enters the Lab Frame	Prof. Shaul Mukamel (University of California) Prof. Gilad Haran (Weizmann Institute of Science) Prof. R. J. Dwayne Miller (University of Hamburg & University of Toronto)
847	2013. 6.21	Self-Oscillating Polymer Gels as Novel Biomimetic Materials	吉田 亮 (東京大学大学院工学研究科教授)
848	2013. 7.19	生体分子システムの階層性： 化学反応と運動	高田 彰二 (京都大学大学院理学研究科教授)
849	2013. 8.21	Quantum Photonic Networks: Building Large-Scale Quantum Machines out of Light	Prof. Ian A. Walmsley (University of Oxford)
850	2013.11.12	Exploring Energy Landscapes: From Molecules to Nanodevices	Prof. David J. Wales (University of Cambridge)
851	2013.11.15	ATP 合成酵素の1分子生物物理学の最前線	野地 博行 (東京大学大学院工学研究科教授)
852	2013.12. 5	Ultrafast Spectroscopy of Donor-Acceptor Organic Molecules for Photovoltaic Applications	Prof. Stefan Haacke (University of Strasbourg)
853	2013.12.20	パルスX線で分子の構造変化を可視化する	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教授)
854	2014. 1. 8	Hybrid Light-Matter States: Fundamentals and Potential	Prof. Thomas W. Ebbesen (University of Strasbourg)
855	2014. 1.17	チャネル機能の再構成と動的イメージ	老木 成稔 (福井大学医学部教授)
856	2014. 2.18	Transient Excitons at Metal Surfaces	Prof. Hrvoje Petek (University of Pittsburgh)

857	2014. 3.12	Oscillatory Shear Deformation of Amorphous Solids: Transition from Localized to Ergodic Behavior and Memory Effects	Prof. Srikanth Sastry (Tata Institute of Fundamental Research Centre for Interdisciplinary Sciences)
858	2014. 3.25	Inorganic Control of Cellular Decisions: Connecting Transition Metal Fluxes, Receptors and Sensors at the Atomic Level	Prof. Thomas O'Halloran (Northwestern 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	物の性質は何でできるか
1987 年度	齋藤 一夫	生活を変える新材料
1988 年度	井口 洋夫	分子の世界
1991 年度	吉原経太郎	光とくらし
1994 年度	伊藤 光男	分子の動き
1997 年度	齋藤 修二	分子で宇宙を見る
2000 年度	茅 幸二	原子・分子から生命体までの科学
2003 年度	北川 禎三	からだで活躍する金属イオン
2006 年度	中村 宏樹	分子の科学，独創性，そして東洋哲学
2009 年度	平田 文男	生命活動における『水』の働き
2013 年度	大峯 巖	水，水，水

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。2013年3月9日には、「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した（5校7名が参加）。

岡崎高校への支援としてはその他に、イングリッシュコミュニケーション研修に対して当研究所の外国人特別訪問研究員が講師として参加した。また、魚住グループによる「国際オリンピック」に参加された同校生徒さんに対する実験指導・支援（見事、銀メダルを受賞された）、ならびに、SSH進路オリエンテーション（2年生理系対象の講演会）の講師対応も行った。

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」「デスス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（2011年12月27日）、第4回（2012年12月26日）、第5回（2012年12月26日）は、再び岡崎コンファレンスセンターにて開催された。分子研では、毎回、研究所紹介の展示ブースを出展し、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・助言を行っている。

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	シンクロトン放射とは （加速器・分光器・測定器の見学）	渡邊 誠 助教授 春日 俊夫 助教授
6	1986.10. 4	人類は元素をいかに利用してきたか	齋藤 一夫 教 授
9	1987. 6.13	レーザーの応用について	吉原経太郎 教 授
12	1987. 9.26	コンピュータで探る分子の世界	柏木 浩 助教授
15	1988. 7. 2	目で見える低温実験・発光現象と光酸化現象	木村 克美 教 授
18	1988.10.29	人工光合成とは何か	坂田 忠良 助教授
21	1989. 6.24	星間分子と水——生命を育む分子環境——	西 信之 助教授
24	1989.10.21	常温での超伝導は実現できるか	那須奎一郎 助教授
27	1990. 6.23	目で見える結晶の生成と溶解 ——計算機による実験（ビデオ）——	大瀧 仁志 教 授
30	1990.10.20	電気と化学	井口 洋夫 所 長
33	1991. 6.22	自己秩序形成の分子科学 ——分子はどのようにしてリズムやパターンを作り出すか——	花崎 一郎 教 授
37	1991.12.14	からだと酸素、そしてエネルギー：その分子科学	北川 禎三 教 授
39	1992. 7. 7	サッカーボール分子の世界	加藤 立久 助教授
42	1992.11.13	炭酸ガスの化学的な利用法	田中 晃二 教 授
45	1993. 6.22	化学反応はどのように進むか？	正畠 宏祐 助教授
48	1993.10. 1	宇宙にひろがる分子の世界	齋藤 修二 教 授
51	1994. 6.21	分子の動き	伊藤 光男 所 長
54	1995. 6.20	生体内で活躍する鉄イオン——国境なき科学の世界——	渡辺 芳人 教 授
57	1996. 6.28	分子を積み上げて超伝導体を作る話	小林 速男 教 授
60	1997. 6.13	生体系と水の分子科学	平田 文男 教 授
63	1998. 6.12	電子シンクロト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）	宇理須恒雄 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	畠田 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
109	2013.11.26	身近になってきた有機エレクトロニクス	山本 浩史 教 授

4-6-4 小中学校での出前授業

岡崎市内の小中学校を対象に、物理・化学・生物・地学に関わる科学実験や観察を通して、科学への興味・関心を高めることを目的に、岡崎市教育委員会や各小中学校が企画する理科教育に協力している。

分子科学研究所が担当したものは以下のとおりである。

岡崎市教育委員会（出前授業）

対象校	開催日	テーマ	講 師
六ツ美北中東海中	2002. 1.25	光学異性体とその活用	魚住 泰広 教 授
東海中	2003. 2.18	計算機を使って分子を見る	谷村 吉隆 助 教 授
常磐南小	2005. 2. 7	光の不思議	岡本 裕巳 教 授
東海中	2006. 2. 8	モルフォ蝶とナノ化粧品の秘密	小川 琢治 教 授
美川中	2007. 2.26	生物から学ぶ光と色	小澤 岳昌 助 教 授
矢作西小	2007.12. 4	原子の世界	櫻井 英博 准 教 授
六ツ美北部小	2008.10.10	ミクロの世界の不思議	平本 昌宏 教 授
矢作中	2009.12. 4	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
岩津中	2010.10. 6	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
東海中	2010.11.30	電気を流す物ってどんな物？	中村 敏和 准 教 授
岩津中	2011. 7.11	電気を流す物の性質，磁界のはたらき	中村 敏和 准 教 授
河合中	2011.10.17	計算機シミュレーションで見る原子・分子の世界	伊藤 暁 助 教
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

南中	2013.10. 9	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
常磐中	2013.11.20	バイオフィルムって何？	吉岡 資郎 助 教
竜海中	2013.11.27	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
矢作北中	2013.12. 6	「電気はどうして流れるの!？」 電磁誘導・超伝導を体験しよう	中村 敏和 准 教 授
葵中	2014. 1.16	光で探る分子のダイナミックな姿	大島 康裕 教 授
竜南中	2014. 3.14	Chemistry meets computing	倉重 佑輝 助 教

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

スーパーサイエンススクール事業

対象校	開催日	テーマ	講 師
岩津中	2014. 2. 7	光で探るダイナミックな分子の姿	大島 康裕 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
2013	5	10	豊田市立上郷中学校，岡崎市立常盤中学校，岡崎市立北中学校，岡崎市立河合中学校，岡崎市立竜海中学校

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。2013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

研究活動や内容について、広く一般の方々に理解を深めていただくため研究所内を公開し、説明を行っている。現在では岡崎市にある3つの研究所が輪番に公開を実施しているので、3年に1回の公開となっている。公開日には実験室の公開と講演会が行われ、約2,000人の見学者が分子研を訪れる。

回 数	実施月日	備 考
第1回	1979.11. 9 (Fri)	創設記念一般公開
第2回	1980.11.15 (Sat)	
第3回	1981.11.14 (Sat)	3研究所同時公開
第4回	1985. 5.11 (Sat)	10周年記念一般公開
第5回	1988.11. 5 (Sat)	入場者 1700 人
第6回	1991.10.26 (Sat)	入場者 1974 人
第7回	1994.11.12 (Sat)	入場者 2700 人
第8回	1997.11.15 (Sat)	入場者 2400 人
第9回	2000.10.21 (Sat)	入場者 1183 人
第10回	2003.10.25 (Sat)	入場者 1600 人
第11回	2006.10.21 (Sat)	入場者 2058 人
第12回	2009.10.17 (Sat)	入場者 1346 人
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	実施機関名
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 福井県立藤島高等学校 ほか
2013	11	289	愛知教育大学，愛知県立刈谷高等学校，立命館高等学校， 星城高等学校，東海大学付属高輪台高等学校，山梨県立日 川高等学校，幸田町少年少女発明クラブ，福井県立藤島高 等学校，知多理科同好会，浜松南高等学校，東京都立多摩 科学技術高等学校

（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
2013	4	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』、『研究力強化推進事業』がある。予算的には運営費交付金の一般経費・特別経費、文部科学省の委託事業、日本学術振興会等の競争的資金で実施している。運営費交付金の一般経費以外はいずれも期間が定められており、運営費交付金一般経費も毎年削減を受けている。第1期中期計画期間に特別経費であった3事業（UVSOR 共同利用事業、エクストリームフォトンクス連携事業、研究設備ネットワーク事業）は平成22年度からの第2期中期計画の開始において相当予算削減された上で一般経費化された。その際、エクストリームフォトンクス連携事業はUVSOR 共同利用事業を広く光科学共同利用事業にとらえる中に含まれることになった。なお、スーパーコンピュータ共同利用事業の特別経費については第1期中期計画期間の段階からすでに一般経費化されている。これら事業の継続は認められているが、今後も運営費交付金一般経費の予算削減は続く予想され、第1期中期計画期間と同じ水準での事業実施は困難である。すべての事業の精査を行い、重点化するなど事業を絞り込むこと、また、新たな事業に機動的に取り組むことが必要である。

(1) 『先端的な研究を推進する拠点事業』としては、UVSOR 共同利用事業（放射光分子科学）、エクストリームフォトンクス連携事業（レーザー分子科学）に関連するものとして、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。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おり、研究所としても参加している。

(2) 『国内の研究者への共同研究・共同利用支援に関する事業』のうち、実験研究のための共同利用は機器センターが担当している。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、また、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（研究所内にナノテクノロジープラットフォーム運営室を設置）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ことになっている。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、旧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、予算減を補う方針としている。

(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（協定締結等）を進めている。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（総合研究大学院大学として）は、外務省による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24年度まで毎年、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るところである。

(4)『研究力強化推進事業』

自然科学研究機構として文科省の『研究大学強化促進事業』の予算を受けて機構として一体的に行う事業である。平成25年10月より10年計画で開始された。詳しくは5-9を参照のこと。

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2007年度よりスタートした。2010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131の機関が参加している。2014年2月26日現在、登録機器数は621台、うち外部公開設備は387台、学内専用設備は234台となっている。ユーザー総数は、9,548名である。本年度も2010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を実施した。特に、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している。

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2011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。2011年度6大学、2012年度は2大学、2013年度2大学が採択され、3年間の事業がスタートしている。「設備サポートセンター」事業は本ネットワークと理念を共有し、かつ、連携を行うことによって具体的なメリットも多々あると考えられる。以上の現状を踏まえて、各大学における汎用設備の管理体制構築の取組に対する連携・支援の第一歩として、登録・予約・課金を行っているシステムのソースコード公開の権利を製作・管理業者から買い取った。これは、当システムソースコードを各国立大学に無償提供することにより、各大学でシステムを移植並びにカスタマイズが可能となるようにしたものである。今後は、地域代表校やサポートセンター整備事業該当校などとの意見交換を継続し、連携・支援の具体的プラン策定を行う。

また、ハードウェアの動作安定性を向上させるため、2012年度には、サーバーハード本体を2台体制とし、1台のサーバーには複数のOSを同時稼働させられる環境を構築、独立に2系統のウェブサーバーとデータベースが稼働可能なシステム構成に更新した。この2つのサーバーにインターネットのアクセスが振り分けられる環境として、負荷分散およびハード障害対策を図った。本年度は、管理登録画面の英語表記化を進めており、来年度早々の利用開始を目指している。

5-2 連携融合事業「エクストリームフォトンクス」(文部科学省)

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

(1) 「光を造る」

「光波特性制御マイクロチップレーザーの開発」(平等)

「単一サイクル赤外光パルスの発生」(藤)

(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, *Nature Communications* 誌などの超一流の学術誌に度々発表されただけでなく、多数の新聞各紙で取り上げられ社会的にも大きな注目を集めた。また、フンボルト賞、日本学士院学術奨励賞、日本学術振興会賞、アメリカ物理学会フェロー表彰、国際光学会フェロー表彰、文部科学大臣表彰若手科学者賞、日本化学会学術賞、日本化学会進歩賞、日本分光学会奨励賞、光科学技術研究振興財団研究表彰、英国王立化学会 PCCP 賞など、多くの権威ある表彰の対象となってきた。また、マイクロチップレーザーの開発では、産業界との共同研究が進展した。

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

事業によって推進された理研の光科学研究の成果を総括するとともに、今後の展開についての意見交換が行われた。さらに、11月には蒲郡にて分子科学研究所が主催で「凝縮系における量子の世界」と題した第10回シンポジウムを行い、固体やナノ構造体の量子性を対象にした新しい研究領域の可能性について議論した。平成22年度は、10月に理化学研究所にて「顕微分光技術と生物学との接点」をテーマに第11回シンポジウムを開催した。平成23年度は、6月に理化学研究所にて第12回シンポジウムを開催した。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24－25年度は、理研が光拠点シンポジウムの幹事業務やエクストリームフォトンクス事業の中間評価等で忙しかったため、合同シンポジウムは開催していない。

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25年度）

回	開催日	テーマ	講演者
48	2013. 4. 2	Ultracold Fermi Gases with SU(N) Spin Symmetry in an Optical Lattice	田家 慎太郎 (京都大学 JST-CREST 特定研究員)
49	2013. 4.24	孤立量子系の熱平衡化に関する新しい仮説 —Eigenstate Randomization Hypothesis—	渡辺 優 (京都大学基礎物理学研究所助教)
50	2013. 5. 7	Coherent Control of the Photoassociation of Ultracold Molecules	Christiane Koch (University of Kassel, Germany)
51	2013. 6.10	Linear Control of Light by Light	Benjamin Hourahine (University of Strathclyde, U.K.)
52	2013. 6.26	断熱過程を用いた $^{40}\text{Ca}^+$ の量子状態制御とデコヒーレンスの抑制	野口 篤史 (大阪大学基礎工学研究科博士研究員)
53	2013. 6.27	Molecular Quantum Dynamics in the Gas Phase and at Interfaces	Roberto Marquardt (Universite de Strasbourg, France)
54	2014. 2.20	Quantum Measurements and Weak Values	Yaron Kedem (Nordic Institute for Theoretical Physics 博士研究員)
		Weak Values and Quantum Technology	George C. Knee (University of Oxford 博士後期学生)

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ている。（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ている。）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25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（現在提供されているコンテンツは宇宙関係のもののみ）。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、平成25年度は5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。平成25年4月10日には、2名の特任助教による公開セミナーも実施され、画像処理ソフトウェアの開発にまつわる現状と課題が紹介された。

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、7月には分子研シンポジウム“New Visions for Spectroscopy & Computation: Temporal and Spatial Adventures of Molecular Science”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。

さらに、以上の国際研究拠点形成活動に加え、自然界における階層と全体の向けた取り組みとして、天文学や核融合科学の分野で行われている計算科学研究に関する方法論的および概念的な共通項を探るとともに、他分野のアイデアの導入による研究の展開を目指した活動も進めている。今年度はMDシミュレーションとその応用などに関するシンポジウムを2月20、21日に開催した。

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。とくに平成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、発展的に取り扱われつつある。

平成25年度には中国科学院化学研究所（ICCAS）および台湾中央研究院原子分子科学研究所（IAMS）との国際交流協定を更新し、また教育・研究集会として、平成26年2月に「The Winter School of Asian-Core Program (Taiwan)」がIAMS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」事業が開始された。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している。

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25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線磁気円二色性の2支援、分子物性支援としてSQUID 2機、汎用型ESR 2機、マイクロストラクチャー作製評価の3支援、高磁場NMR支援として800MHzクライオプローブ溶液NMR、600MHz固体NMRの2支援、機能性分子システム創製支援として磁性薄膜作製評価支援をそれぞれ追加し、機能性分子システム創製支援の錯体合成支援を旧担当責任者・永田央准教授の転出のため取り止めた。表2には平成25年度の採択課題一覧、表3には平成25年度の採択・実施件数(平成25年12月31日現在)を示した。

表1 平成25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
軟X線磁気円二色性分光(XMCD)支援	XMCDは、UVSOR BL4Bを用いた極低温高磁場X線磁気円二色性測定システム。薄膜作製用試料準備槽つき。利用エネルギー200-1000 eV、試料温度5-60 K、磁場 ± 5 T(± 7 Tまで一応可能)。作成した薄膜等を大気に曝すことなくそのまま元素選択磁性測定したい場合に有効。	加藤政博施設長 横山利彦教授 高木康多助教 魚住まどか支援員	UVSOR 物質分子科学 物質分子科学 物質分子科学
走査型透過軟X線顕微鏡(STXM)支援	STXMは、UVSOR BL4Uを用いて顕微X線吸収微細構造解析による空間分解能30 nmでの化学状態分析とそのマッピングの利用・解析を支援。エネルギーは100-700 eVまでが利用可能で、主として炭素、酸素、窒素の軽元素が主なターゲット。また、水中雰囲気での試料の高分解能観察も可能。	加藤政博施設長 小杉信博教授 大東琢治助教 稲垣裕一支援員	UVSOR 光分子科学 UVSOR UVSOR
マイクロストラクチャー製作・評価支援	3インチ角フォトマスクを利用したコンタクト露光や、その前処理としての基板洗浄からアッシングまでの一連の作業が可能。	加藤政博室長 鈴木光一課長 青山正樹技術職員 高田紀子技術職員	装置開発室

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。	大島康裕センター長 上田 正技術職員	機器センター
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。	大島康裕センター長 中尾 聡研究員 酒井雅弘技術職員	機器センター
X線光電子分光支援	汎用のX線光電子分光器 (Al, Mg-K α 線利用) を提供。施設利用として気軽に利用いただける。	大島康裕センター長 小杉信博教授 酒井雅弘技術職員	機器センター 光分子科学 UVSOR
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 EMX (X-band), E500 (X-band), E680 (W-band, X-band) を提供。E680 では, 通常の X-bandCW-ESR 以外にも, 多周波数 (Q-, W-band), 多種測定 (パルス, 多重共鳴) が可能。	大島康裕センター長 中村敏和准教授 藤原基靖技術職員	機器センター 物質分子科学 機器センター
磁化測定支援	SQUID 型 磁 化 測 定 装 置 (Quantum Design 社 製 MPMS-7, MPMS-XL7) により, 高感度磁化測定が可能。DC 測定に加え, AC 測定や光照射・圧力下の測定も可能。その他, 超低磁場や角度回転オプションも利用可能。	大島康裕センター長 藤原基靖技術職員	機器センター
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。	大島康裕センター長 山本浩史教授 賣市幹大技術職員	機器センター 協奏分子センター 協奏分子センター
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。	大島康裕センター長 山本浩史教授 賣市幹大技術職員	機器センター 協奏分子センター 協奏分子センター
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, 三重共鳴にも対応。	大島康裕センター長 加藤晃一教授 西村勝之准教授 中野路子技術職員	機器センター 生命・錯体分子科学 物質分子科学 機器センター
600MHz 固体 NMR 支援	600MHz 固体 NMR による蛋白などの生体分子, 有機材料, 天然物などの精密構造解析支援。 ^1H - ^{13}C - ^{15}N 三重共鳴実験まで対応。	大島康裕センター長 西村勝之准教授	機器センター 物質分子科学
800MHz クライオプローブ溶液 NMR 支援	800MHz 溶液 NMR による生体分子複合体をはじめとする低溶解性物質などの高感度・高分解能測定支援。極低温プローブによる ^1H - ^{13}C - ^{15}N 三重共鳴測定に対応。	大島康裕センター長 加藤晃一教授 山口拓実助教	機器センター 生命・錯体分子科学 生命・錯体分子科学
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 嘉治寿彦助教	物質分子科学
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 須田理行助教	協奏分子センター
分子触媒支援	分子触媒の調製, 構造解析。	唯美津木教授(併任)	物質分子科学
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 東林修平助教	協奏分子センター

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 福田良一助教	理論・計算分子科学
磁性薄膜作製評価支援	超高真空中で磁性薄膜等を作成し、in situ 磁気光学 Kerr 効果による評価、ならびに、紫外レーザー磁気円二色性光電子顕微鏡 (UV MCD PEEM) によるナノ磁気構造評価を行う。	横山利彦教授 高木康多助教 魚住まどか支援員	物質分子科学

表2 2013年度(平成25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	支援機器等	代 表 者
920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いた磁場配向性分子の開発と RDC 観測への応用	920MHz NMR 800MHz 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	920MHz NMR 800MHz NMR	国立長寿医療センター研究所 柳澤 勝彦 知症先進医療開発センター
反応基質のアクセスが容易な新規シリカ担持型金属触媒の開発		奈良工業高等専門学校物質化学工学科 嶋田 豊司
お椀型芳香族分子の電子状態制御	SQUID MS-7 SQUID MS-XL7 ESR E500 顕微ラマン 有機合成	東北大学原子分子材料科学高等研究機構 平郡 論
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	有機 FET	東邦大学理学部 田嶋 尚也
バッキーボウル分子のレーザー分光	有機合成	京都大学大学院理学研究科 馬場 正昭
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	青山学院大学理工学部 坂本 章
量子スピン系の ESR 測定及び強磁場磁化測定		神戸大学分子フォトサイエンス研究センター 太田 仁
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	有機 FET	東北大学原子分子材料科学高等研究機構 齋藤 英治
有機ダイマーモット絶縁体における光誘起絶縁体金属転移の観測および有機強誘電体のテラヘルツ波誘電制御	有機 FET	東京大学大学院新領域創成科学研究科 岡本 博
超高速固体 NMR プローブと超高磁場 NMR による繊維・高分子の分子間構造解析	920MHz NMR	東京農工大学大学院工学研究院 朝倉 哲郎
強相関低次元有機錯体における異相接合物性とスピン輸送の解明	有機 FET	(独)理化学研究所 佐藤 慶明
糸状菌インドールプレニル基転移酵素の NMR 解析	920MHz NMR 600MHz NMR	富山大学和漢医薬学総合研究所 森田 洋行
有機反応における活性中間体の化学的反応挙動の解明と応用	量子計算	大阪大学大学院工学研究科 神戸 宣明
タンパク質間相互作用阻害剤の作用解析	800MHz NMR	東北大学大学院薬学研究科 土井 隆行
W バンド ESR によるタンパク質変性過程における構造ダイナミクスの研究	ESR E680	東北大学多元物質科学研究所 大庭 裕範
有機半導体層の物性評価に関する研究	太陽電池	豊橋技術科学大学大学院機械工学系 伊崎 昌伸
非環状骨格を持つ人口核酸の立体構造解析		名古屋大学エコトピア科学研究所 神谷由紀子
酸化亜鉛薄膜及び第 III 族元素ドーパ酸化亜鉛薄膜の化学組成評価とキャリア濃度測定	SEM/FIB TEM 太陽電池	城西大学理学部 見附孝一郎
C5a 阻害ペプチド AcPepA の構造解析に関する研究	800MHz NMR	大阪大学蛋白質研究所 岡田 秀親
超高磁場 NMR による酸化亜鉛ナノロッドの評価	800MHz NMR	大阪工業大学工学部 佐々 誠彦
減衰全反射遠紫外分光法と量子化学計算を用いた凝集相におけるアミド化合物の電子状態の研究	量子計算	関西学院大学 尾崎 幸洋
ピコ秒 pump-probe 分光法によるシンナメートとその水素結合系の非断熱緩和ダイナミクス	量子計算	広島大学 江幡 孝之
人工らせん高分子-らせんペプチド複合体の固体 NMR による構造解析	600MHz NMR	名古屋大学大学院工学研究科 八島 栄次
励起状態の溶媒効果に関する理論研究: 摂動理論に基づく PCM-SAC-CI 法の開発	量子計算	Parma 大学 Roberto Cammi
電子移動励起の化学指標に関する理論研究	量子計算	ENSCP Ilaria Ciofini
SAC-CI 法によるシンナメート誘導体の光物性に関する理論研究	量子計算	Kasetsart 大学 Malinee Promkatkaew

Ru 錯体における光誘起電子移動に関する理論研究	量子計算	Kasetsart 大学	Malinee Promkatkaew
多配置クラスター展開法の開発と応用	量子計算	インド科学研究機構	Debashis Mukherjee

(2) 施設利用

課 題 名	支援機器等	代 表 者	
BL4U 宇宙化学研究拠点構築を目指した予備分析：隕石微粒子の元素マッピングと C-XANES 測定	UVSOR(STXM)	大阪大学大学院理学研究科	藪田 ひかる
含水細胞オルガネラの C,N,O 呼吸端における顕微分光測定	UVSOR(STXM)	東北大学多元物質科学研究所	江島 丈雄
STXM を用いたカーボン-シリカ複合体の蛍光メカニズムの解析	UVSOR(STXM)	名古屋工業大学大学院工学研究科	川崎 晋司
生体分子の軽元素吸収端での XANES 測定とその動物培養細胞化学マッピングへの応用	UVSOR(STXM)	東海大学工学部	伊藤 敦
STXM による有機物成分のナノオーダー分析に基づいたバイオリーチング機構の詳細解明	UVSOR(STXM)	静岡県立大学環境科学研究所	光延 聖
Studies of Drug Uptake into Cells and Skin	UVSOR(STXM)	Freie University Berlin	Eckart Rühl
Surface Functionalization and Interface Properties of Organic Semiconductor Devices	UVSOR(STXM)	National Synchrotron Radiation Research Center (NSRRC)	Yao-Jane Hsu
Electronic Mapping on Hybridized Novel Two Dimensional Nano-Sheets for Band Gap Engineering	UVSOR(STXM)	Tamkang University, Taiwan	Way-Faung Pong
Chemistry and Structure of Nanomaterials Studied Using STXM Spectromicroscopy and Dichroic Mapping	UVSOR(STXM)	McMaster University	Adam Hitchcock
Development of In Situ Electrochemical Cell for STXM: Understanding Metal Electrodeposition and Organic Electrochromism	UVSOR(STXM)	McMaster University	Adam Hitchcock
重金属表面に吸着した 3d 遷移金属のスピン軌道相互作用による巨大磁気異方性と保磁力の研究	UVSOR(XMCD)	九州大学大学院総合理工学研究院	中川 剛志
Magnetic Mapping on Hybridized Novel Two Dimensional Nano-Sheets	UVSOR(XMCD)	Tamkang University, Taiwan	Way-Faung Pong
Effects of Ion Irradiation on Elemental Magnetic Moments of Fe-Cr Model Alloys	UVSOR(XMCD)	Paul Scherrer Institut	Camelia Borca
内殻磁気円二色性を用いたスピントロニクス材料の垂直磁気異方性の起源の解明	UVSOR(XMCD)	東京大学大学院理学系研究科	岡林 潤
骨マトリックスの分光学的計測による骨組織の光学特性解析と分子構造の解明	顕微ラマン	愛媛大学医学部付属病院先端医療創生センター	大嶋 佑介
外部刺激応答型錯体に関する研究	SQUID MS-7 SQUID MS-XL7 ESR EMXplus	帝京大学大学院医学研究科	大胡 恵樹
新規ナノマテリアルの構造および物性評価	顕微ラマン ESR E50	法政大学生命科学部	緒方 啓典
新規分子磁性体の合成、構造解析および物性研究	SQUID MS-7 SQUID MS-XL7 ESR E500	首都大学東京大学院理工学研究科	藤田 渉
動的な電子状態を有するシアノ架橋高スピン多核錯体の開発	SQUID MS-7 SQUID MS-XL7	九州大学先端物質化学研究所	姜 舜徹
合金および酸化物ナノ材料の低温磁性	SQUID MS-7 SQUID MS-XL7	岐阜大学工学部機能材料工学科	嶋 睦宏
カーボンナノチューブのカイラリティ制御に関する研究	顕微ラマン TEM ESCA SEM/FIB	名城大学理工学部	丸山 隆浩
Pd-(Ge,Si)-RE 系新規準結晶及び近似結晶の低温物性	SQUID MS-7 SQUID MS-XL7	北海道大学大学院工学研究院	柏本 史郎
液中レーザー照射によるレーザードーブに関する研究	顕微ラマン SEM/FIB	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 晋吾
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	920MHz NMR 800MHz NMR	名古屋市立大学大学院薬学研究科	矢木 宏和
アルカリ土類金属窒化硼素層間化合物の構造と物性	顕微ラマン SQUID MS-7 SQUID MS-XL7 ESR E500	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	小林 本忠
分子性伝導体 [Pd(dmit) ₂] ₂ 塩における反強磁性相を中心にした電荷不均一状態の探索	顕微ラマン	愛媛大学理工学研究科	山本 貴
メカノケミカル重合による新規機能性セルロースの創製およびその性能評価	ESR EMXplus	静岡県立大学環境科学研究所	坂口 真人
カビ胞子の生存に係わるフリーラジカル信号の同定	ESR E500	名古屋大学大学院工学研究科	石川 健治

フェライト磁性薄膜および複合体の磁気的性質の研究	SQUID MS-7 ESR E500	名古屋工業大学先進セラミック ス研究センター	安達 信泰
バナジウム－鉄複核錯体の合成、構造および物性 微弱磁場センシング・システムの構築	SQUID MS-7 ESR E680 FT 遠赤外	大阪大学大学院理学研究科 富山大学先端ライフサイエンス 拠点	畑中 翼 岡 芳美
新規ポリオキシメタレート錯体の電気化学的酸化還元反応メカニズム の解明	ESR EMXplus	高知大学教育研究部総合科学系	上田 忠治
分子内運動性に付随するプロトン超微細構造の観測	ESR EMXplus ESR E500 ESR E680	京都大学国際高等教育院	加藤 立久
溶液中での結晶化、溶解過程の透過電子顕微鏡（TEM）観察 時間分解 ESR による共有結合性骨格構造の光誘起伝導性メカニズム 解明研究	SEM/FIB ESR EMXplus ESR E500 ESR E680	東北大学大学院理学研究科 新潟大学研究推進機構	木村 勇気 古川 貢
MgB ₂ 超伝導体の超伝導特性におけるホウ素同位体効果	SQUID MS-7 SQUID MS-XL7	核融合科学研究所	菱沼 良光
安定有機ラジカルを側鎖に有するポリアセチレンの磁性研究	SQUID MS-7 SQUID MS-XL7 ESR E500	広島大学大学院理学研究科	井上 克也
3d 遷移金属添加 III 族窒化物の電子－格子相互作用の解明	顕微ラマン	京都工芸繊維大学大学院工芸科 学研究科	園田 早紀
単結晶 hBN 化合物の構造	顕微ラマン SQUID MS-7 SQUID MS-XL7 ESR E500 FT 遠赤外	東北大学原子分子材料科学高等 研究機構	平郡 諭
ランタン型二核錯体・ポルフィリン鉄錯体フタロシアニン金属錯体の 磁気物性	SQUID MS-7 ESR E500	島根大学大学院総合理工学研究科	池上 崇久
非天然金属錯体を活性中心とする人口金属酵素の電子状態解析 新しいメソ多孔性炭素ナノワイヤーの開発	ESR EMXplus SEM/FIB TEM	大阪大学大学院工学研究科 金沢大学理工研究域	大洞 光司 太田 明雄
神経細胞ネットワークハイスループットスクリーニング素子のセン サー基板とマイクロ流路開発	マイクロスト ラクチャー	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
STXM を用いたナノカーボン－シリカ複合体の発光メカニズムの解析 アポトーシスの過程における細胞核内 DNA の分布変化の解析	UVSOR(STXM)	名古屋工業大学大学院工学研究科 東海大学工学部	川崎 晋司 伊藤 敦
走査型透過軟 X 線顕微鏡による放射線耐性菌 <i>Deinococcus radiodurans</i> の観察	UVSOR(STXM)	関西医科大学医学部	竹本 邦子
BL4U 宇宙化学研究拠点構築を目指した予備分析 2：宇宙塵 FIB 試料 の XANES とビームダメージ評価	UVSOR(STXM)	大阪大学大学院理学研究科	藪田ひかる
STXM による微生物－鉱物付着面のナノオーダー分析に基づいたバイ オリチング機構の詳細解明		静岡県立大学環境科学研究所	光延 聖
The influence of polythyleneimine and ammonium on the growth of ZnO nanowires studied by scanning transmission x-ray microscopy (STXM)	UVSOR(STXM)	National University of Kaohsiung	Jau-Wern Chiou
Organic-Organic Heterostructure and Surface Functionalization of Organic Electronics	UVSOR(STXM)	National Synchrotron Radiation Research Center (NSRRC)	Yao-Jane Hsu
Comprehensive characterization of monolithic polymers by scanning transmission X-ray microscopy (STXM)	UVSOR(STXM)	University of Tasmania	Ruben Dario Arrua
巨大ラッシュバ効果を示す半導体表面上における磁性原子の電子状態お よび磁気特性に関する研究	UVSOR(XMCD)	京都大学大学院理学研究科	八田振一郎
半導体表面超構造上に配列した金属含有フタロシアニン分子の磁気特 性に関する研究	UVSOR(XMCD)	物質・材料研究機構	内橋 隆
グラフェン、六方晶窒素化ホウ素を介した強磁性金属－磁性分子の磁 気交換結合の研究	UVSOR(XMCD)	日本原子力研究開発機構	松本 吉弘
超高磁場 NMR 計測と分子動力学計算を活用した糖鎖のコンフォメー ション解析	800MHz NMR	名古屋大学大学院理学研究科	岡本 裕幸
ラセン高分子の溶液構造と固体構造解析 ラマン分光法を用いた DLC 表面の分析	920MHz NMR	北海道大学大学院工学研究院 石川工業高等専門学校電子情報 工学科	平沖 敏文 山田 健二
π 拡張ドナーを成分とする分子性導体の物性・構造に関する研究 金属担持セリアジルコニア酸化物固溶体触媒の粒子分散担持基板の調製	SQUID MS-XL7 SEM/FIB TEM	愛媛大学大学院理工学研究科 名古屋大学物質科学国際研究セ ンター	白旗 崇 唯 美津木
イオンビームによって誘起された Fe-Ni の磁化測定 一次元ロジウム－ジオキソレン錯体の圧力下での磁気特性と原子価状 態の解明	SQUID MS-7 SQUID MS-XL7 ESCA	愛媛大学理工学研究科 兵庫県立大学大学院物質理学研 究科	松下 正史 満身 稔

STXM による高分子材料の相分離構造解析	UVSOR(STXM)	JSR (株)	富永 哲雄
電荷秩序近傍で実現する有機超伝導体のスピン帯磁率測定	ESR E500	北海道大学大学院理学研究院	井原 慶彦
電子スピン共鳴 ESR を用いた光触媒反応磁場効果の関与ラジカル測定と機構解明	ESR E500	京都大学大学院エネルギー科学研究科	奥村 英之
ヘムエリスリン類縁タンパク質 DcrH-Hr の二核鉄中心の電子状態解析	ESR EMXplus	岡崎統合バイオサイエンスセンター	岡本 泰典
生体関連物質をキラル源とするキラル磁性体の合成及び電機磁気光学効果の検証	SQUID MS-7 SQUID MS-XL7	城西大学理学部	秋田 素子
時間分解 ESR による親水性界面光誘起電子移動メカニズムの解明	ESR EMXplus ESR E680	新潟大学理学部	三浦 智明
RxEDO-TTF 系電荷移動錯体に関する分光学的研究		京都大学低温物質科学研究センター	石川 学
ナノインプリント法による有機放射線計測素子の高感度化		富山高等専門学校電気制御システム工学科	多田 和弘
π 共役系高分子内に生成する電子スピンの挙動		室蘭工業大学大学院工学研究科	馬渡 康輝
スピン液体系有機伝導体 κ -H ₃ (Cat-EDT-TTF) ₂ のラマンスペクトル観測と重水素置換効果		岡山理科大学理学部	山本 薫
NMR スペクトルの多変量解析を用いたポリ乳酸の立体規則性解析	920MHz NMR	徳島大学大学院ソシオイテクノサイエンス研究部	押村 美幸
マイクロプリントを応用した心筋細胞・心臓芽細胞共培養システムの開発	マイクロストラクチャー	岡崎統合バイオサイエンスセンター	北島 直幸
磁気相互作用が競合する有機ラジカル磁性体の低温磁気構造解明	ESR EMXplus	大阪府立大学大学院理学系研究科	細越 裕子
金属ドーブ型 BiFeO ₃ の磁化特性に関する研究	SQUID	山形大学大学院理工学研究科	有馬ボシール アハンマド
技術者交流プログラム	磁性薄膜	産業技術総合研究所	蜂谷 智央

(3) 非公開利用

ナノプラットフォーム事業では、民間等の非公開利用も通常の公開利用を大きく圧迫しない条件で積極的に受け入れている。平成 25 年度は UVSOR(STXM) 10 件、顕微ラマン 1 件、SEM/FIB 1 件、磁性薄膜 1 件、太陽電池 1 件が採択された。業種別内訳は大企業 13 件、中小企業 1 件であった。

表 3 2013 年度（平成 25 年度）利用件数一覧（平成 25 年 12 月末現在）分子科学研究所担当分

	協力研究	施設利用	非公開利用
採択件数	29	76	14
実施件数	26	64	12
実施日数	556	1,131	73

ナノプラットフォーム事業では、同一申請者から前期後期に別々に申請があっても通年申請と読み替え 1 件と数える。研究課題が変わっても同一申請者からの申請は年間 1 件とする。

5-6 「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）

5-6-1 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年間の活動を推進している。

(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5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」

第5部会：「マルチスケール材料科学」

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、第5部会が第4部会から独立した。また、第4部会の重点課題と特別支援課題の内、「燃料電池」と「リチウムイオン電池」に関する課題が統合されて重点課題「エネルギー変換の界面科学」に再編成された。

重点課題（分子科学関係）	
第1部会	新量子相・新物質の基礎科学
	電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開
	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）
第3部会	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）
	分子機能と物質変換
	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	エネルギー変換
	エネルギー変換の界面科学（物性科学・分子科学共通課題）
	代表者：杉野 修（東大物性研）
	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）
	拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明 代表者：岡本 祐幸（名大院理）
第3部会	ポリモルフから生起する分子集団機能 代表者：松林 伸幸（京大化研）
	ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス 代表者：中井 浩巳（早大先進理工）
	機能性分子設計-光機能分子と非線形外場応答分子の光物性 代表者：江原 正博（分子研）
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25年度の分野振興活動の報告を行う。

5-6-2 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。

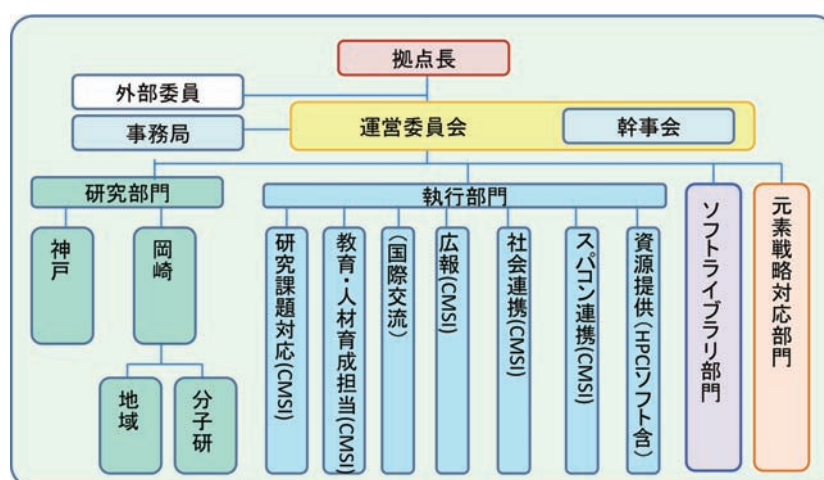


図3 計算分子科学研究拠点（TCCI）体制

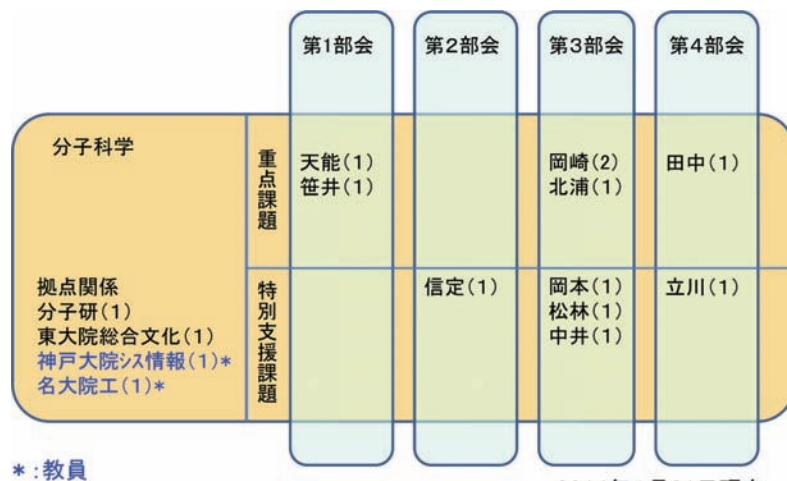


図4 CMSI 研究員・教員配置

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	○高塚、榊、斉藤、佐藤、岡崎、山下
教育・人材育成委員会	○信定、天能、長岡、関野、岡崎
国際交流	(未定)
広報	○柳井、松本
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
ソフトライブラリ部門	○岡崎、北浦、奥村、石村

図5 TCCI 委員会など

(2) 平成 25 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。これに伴い、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、文部科学省の平成 24 年度から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た。

7 月には、「計算科学ロードマップ 概要」（案）が公表されパブリックコメントの募集が行われ、12 月に「計算科学ロードマップ」が公開された。この中で「今後の HPC が貢献しうる社会的課題」として大きく 4 課題、「分野連携による新しい科学の創出」として 3 課題が提案された。これらの課題に対応するアプリケーションプログラムの計算機資源要件の洗い出しも行われた。

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招聘した海外研究者 3 名については、国際ワークショップ以外でも、豊橋技術科学大学、東大、京大、理研 AICS でセミナー講演をお願いし、参加者に、欧米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、阪大が中心となって計算機科学に関する授業（ネットワーク配信）が開催され、多数の大学生、研究員などが参加した。TCCI も授業を分担した。

CMSI 人材育成・教育の一環として企画・実施

行事名	開催日程	場所
第17回分子シミュレーション夏の学校	2013年9月2日(月)～4日(水)	湯沢ニューオータニホテル(新潟県)
	講師3名、参加者42名(内、民間企業6名)	
TCCI ウィンターカレッジ(分子シミュレーション)	2013年10月23日(水)～25日(金)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター(岡崎市)
	講師15名、参加者83名(内、民間企業22名)	
TCCI ウィンターカレッジ(量子化学)	2013年12月16日(月)、17日(火)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター(岡崎市)
	講師5名、参加者46名(内、民間企業7名)	
第3回超並列化技術国際ワークショップ	2014年2月4日(火)	東京大学山上会館(東京都文京区)
	参加者数:34名(内、民間企業3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 4 回研究会：TCCI の全体シンポジウムである第 4 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、重点課題、特別支援課題について成果を報告する会とし、併せて次世代のエクサスケールに向けた議論を始めるべく、エクサスケールについてシステムを検討している 3 グループからもご講演をお願いした。今後、年 1 回は全体シンポジウムの開催を予定している。
- TCCI 第 3 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。今年度も実験化学者による招待講演 10 件、TCCI からの報告 6 件を行った。情報交換、議論を通して興味深く有意義なシンポジウムとなった。
- TCCI 第 3 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・意見交換を通して産学連携を目的としている。今回は、民間企業の京利用のご講演、TCCI からは、産業利用に向けた基盤ソフト（後述）に関する報告、ポスター展示を行った。また、特別講演では橋本昌隆氏より「理工系ポスドクのキャリアパスにおける現状と課題」が行われ、鋭い分析結果の報告と提案が行われた。今年度は、民間企業からの参加者は減っているが、半数以上の質問は民間企業の参加者から行われており、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4回研究会	2013年9月10日(火)、11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:68名(内、民間企業8名)	
TCCI第3回 実験化学との交流シンポジウム	2013年11月5日(火)、6日(水)	京都大学 福井謙一記念研究センター(京都市)
	参加者数:61名(内、民間企業3名)	
TCCI第3回 産学連携シンポジウム 「HPCの利用と 成果と人材」	2014年1月31日(金)13:20から	名古屋大学 野依記念学術交流館(名古屋市)
	参加者数:68名(内、民間企業15名)	

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(RCCS)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。今後も継続していく予定である。

⑤基盤ソフト(分子科学アプリ)の普及に向けて(図8, 図9)

今年度は、平成24年度補正予算を活用して、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利用に向けて、RCCSと協力して環境整備を行った。その中で要望の強い基盤ソフトの試用を、TCCI所有のマシンにて実現した。

プログラム	機能	開発責任者
Calnos	界面分光計算ソフト	(東北大)森田明弘
ERmod	エネルギー表示法に基づく自由エネルギー計算ソフト	(京大)松林伸幸
FMO in GAMESS	高速量子化学計算ソフト	(神戸大)北浦和夫
MODYLAS	高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト	(名大)岡崎進
REM	レプリカ交換法	(名大)岡本祐幸
SMASH(仮称、H26年度予定)	大規模並列量子化学計算ソフト	(分子研)石村和也

図8 基盤ソフトウェア一覧

項番	利用内容	利用可能なマシン環境	
		民間企業	アカデミック
1	ソフト試用	B,C	A,B,C
2	研究利用	C,K	A,C,K
3	共同研究	(開発者主体)	
4	ソフト講習会	○	

A、B、C、Kは利用環境(以下)を示す。

	利用環境	民間企業	アカデミック
A	計算科学研究センター(RCCS)マシン*1	X	○
B	TCCIマシン(15ノード) *2	○(無償、試用がメイン)	
C	公益財団法人計算科学振興財団 (FOCUS) スパコン *3		○
K	理研計算科学研究機構 京 *4		○

*1 RCCSセンターの利用については、RCCSセンターにお問い合わせください。

*2 TCCIマシンの利用については、TCCIにお問い合わせください。

*3 FOCUSスパコンの利用については、FOCUSにお問い合わせください。

*4 京の利用については、高度情報科学技術研究機構(RIST)にお問い合わせください。

○:利用可、
X:利用不可

図9 基盤ソフトの利用環境について

5-6-3 今後の課題と取組みについて

京の本格利用が開始されてから早1年半となる。この世界最速の汎用スーパーコンピュータを利用した成果が確実に始まっている。その成果を分かり易くマスメディアなどを通して国民に報告することを継続していくことが課題である。また、次のエクサスケールに向けて、分子科学分野に必要な技術・人材を養成していくことも重要である。これらに注力していく(図10)。

更に、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に向けて今後も活動を継続して行く所存である。

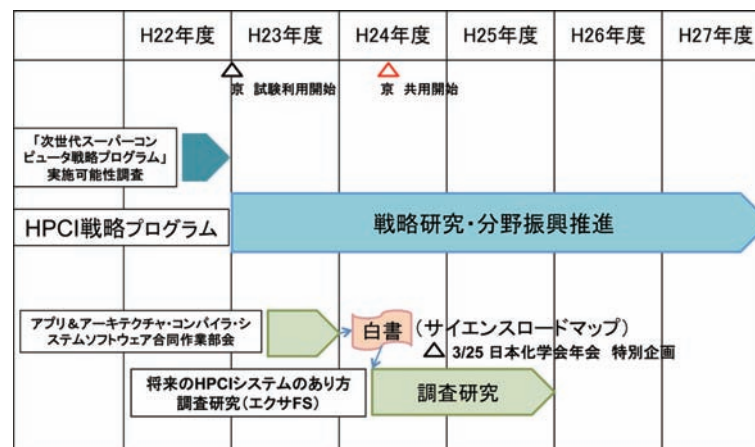


図10 TCCI 研究計画

5-7 最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム (文部科学省)

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

この光拠点事業の公募に対して、分子科学研究所は、大阪大学、京都大学、日本原子力研究開発機構とともに、「融合光新創生ネットワーク」と題したネットワーク拠点を申請し、採択された(http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/20/07/08072808/003.htm)。本年度で6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25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

超高精度量子制御技術の開発では、時空間コヒーレント制御に有効と期待される京都大学の野田進教授のフォトリック結晶レーザーの導入に向けて、野田グループとの研究交流を推進した。また、分子の超高速回転運動をフェムト秒単位で画像化する世界初の光技術を開発した。その他、光拠点からJSTのCREST事業へと展開した連携の成果として、固体中の原子の二次元運動を10兆分の1秒単位で制御し画像化する世界初の光技術の開発に成功した。

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、世界で初めて10倍も波長の異なる光波を重ね合わせ位相制御と計測に成功した。これによって、赤外(2 μm 以上)で世界最短の6.9フェムト秒パルスを達成した。

マイクロドメイン制御に基づく超小型高輝度高品位レーザーの開発において、5mm厚PPMgLNにより1.5サイクル、1.2 mJ、3 kHzでの動作を検証し、10mm厚PPMgLNの高度化に成功した。これによって、世界最高出力740 mJ-OPOの中赤外光発生に成功した。

時空間分解顕微分光技術の開発では、近接場(<100 nm)で<15 fsの局在光パルスを達成し、これを用いてナノ物質上の位置による超高速ダイナミクスの差を世界で初めて観測することに成功した。

(2) 人材育成・施設供用

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、大森教授が独ハイデルベルグ大学物理学科で講義を行った。

施設供用では、超高精度光干渉計、走査型近接場光学顕微鏡を、京大、東工大、慶応大などとの協力研究の資源として提供した。

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、The 73rd Okazaki Conference on “Coherent and Incoherent Wave Packet Dynamics,” および JSPS German-Japanese Colloquium on Frontiers of Laser Science（日本学術振興会との連携事業）を開催した。

5-8 東アジア若手研究者交流プログラム（EXODASS プログラム）

5-8-1 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3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2012年度よりASEAN加盟国、オーストラリア、ニュージーランド、インド、中国、韓国、台湾となり、アジア・オセアニア地区の多く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8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。さらに今期からは、別途、学術交流協定に基づく大学院生・教員交流を行っていたチュラロンコーン大学、カセサート大学（ともにタイ）との交換プログラムを、本プログラムと一体で運用することになった。そのため、例年よりも名目上の参加人数が増え、教育効果も科学技術コミュニティ形成への波及効果も向上した。

5-8-2 分子研主催プロジェクト課題について

プロジェクト課題名は、「『環境・エネルギー』基礎研究基盤の確立」である。

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

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

5-8-3 実施状況

第3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、学術交流協定締結校からの推薦とホームページを利用した公募で行った。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、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10カ国、42名の応募が集まった。配属希望教員を含めたメンバーで書類審査を行った後、いくつかの主要大学においては直接面接試験を行い、最終的に、9カ国12名を採択した。内訳はタイ4名、マレーシア、ベトナム、インドネシア、シンガポール、オーストラリア、中国、台湾各1名である。またキャリアの内訳は、博士研究員（含教員）3名、博士課程学生9名と、大学院生中心の構成となった。

招聘は、2013 年 10 月～12 月にかけて実施され、各研究者に応じて、1～3 ヶ月（ただし MOU 交換学生は最大 6 ヶ月）の期間での研究プログラムが組まれた。また 12 月 11 日に、全員の招聘者を一同に会し、全体会議とミニシンポジウムをアジア冬の学校と共催で実施した。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。特に同種のプログラムであるアジア冬の学校との共催は双方の参加者にとって刺激になったようで、可能な限り、今後も共催を続けていくことが望ましい。

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。本独自事業の EXODASS プログラムをはじめ、様々なチャンネルを利用して、今後の継続が望まれるところである。

5-9 研究大学強化促進事業（文部科学省）

「研究大学強化促進事業」は文部科学省の平成 25 年度から 10 年間の事業であり、(A) 研究戦略や知財管理等を担う研究マネジメント人材群（所謂，URA：University Research Administrator）の確保・活用と (B) 集中的な研究環境改革による大学等の教育研究機関の研究力強化のための支援事業である。

自然科学研究機構では、機構本部に研究力強化推進本部（担当理事が本部長）、5 研究所に研究力強化戦略室が設置され、それぞれ研究マネジメント人材（自然科学研究機構では年俸制の特任教員，特任研究員，特任専門職員の雇用を可能にした）を配置し、研究力強化戦略会議（議長は機構長。理事，5 所長，5 副所長がメンバー）の下で一体的に活動することになった。なお，研究力強化戦略室の室長は研究力強化戦略会議メンバーである副所長（分子研の場合は研究総主幹）を機構長が指名する。

自然科学研究機構では、研究力強化のために①国際共同研究支援，②国内共同研究支援，③広報，④研究者支援（外国人，女性，若手）の 4 本柱を立てている。戦略室の中に広報機能が入ることになったため，分子研では広報室は戦略室に一本化し，これまでの広報室長は戦略室副室長として，③に関する研究マネジメント体制を考えることになった。また，これまでの史料編纂室機能は研究評価・研究企画に利用すべく IR 資料室的機能を持たせて戦略室に含めることにし，室長は評価・企画を⑤として，①②④⑤の研究マネジメント体制を考えることになった。所長は，戦略室メンバーとして，より広い見地からの研究力強化の戦略をシニア URA とともに立てる役目を果たす。

平成 25 年は以下の活動を行った。

- ・日独セミナー等による放射光連携研究，磁気共鳴連携研究などの検討
- ・海外の URA 実態調査（英国 Oxford 大学，米国 California 大学 Berkeley 校）
- ・研究所の研究力強化のための評価・提言（国内外運営顧問，研究顧問）
- ・研究所ホームページ更新
- ・共同研究・共同利用申請ホームページ更新
- ・機器センター（磁気共鳴），UVSOR（スピン），安全衛生管理室（薬品管理）の機能強化
- ・出版物出版（国内外研究者を対象とした研究所紹介，UVSOR 紹介等）

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
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
2012.9. ～ 2013.8.	2013	280	52

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

齊 藤 真 司（教授）（2005 年 10 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：理論化学，物理化学

A-2) 研究課題：

- a) 生体分子における励起状態ダイナミクスの理論研究
- b) 線形・非線形分光法による凝縮系ダイナミクスの理論研究
- c) 過冷却液体のダイナミクスの理論研究

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，各色素のエネルギーレベルがどのように決まり，それらが振動・構造揺らぎの影響をどの程度受け，高効率エネルギー移動がどのように達成されているのかについては明らかではない。これらに関する分子論的解明に向けて，Fenna-Matthews-Olson (FMO) タンパク質に含まれるバクテリオクロフィルの溶液中の電子励起状態の解析を進めた。
- b) 線形および非線形分光法により水の分子内および分子間ダイナミクスの解析を進めてきた。とくに，分子内運動のエネルギー緩和ダイナミクスに関する詳細な解析を行った。その結果，OH 伸縮振動，HOH 変角運動ともに，分子間回転運動（平衡運動）と強く非線形にカップルしていること，また，分子間回転運動がより低い波数領域にある分子間並進運動と強くカップルしているという我々の先行研究とあわせて，水の中でカスケード的な超高速エネルギー緩和が引き起こされていることを明らかにした。
- c) 高次非線形分光法のアイデアを展開し，多時間相関関数を利用し過冷却液体における動的不均一性の解析を進めてきた。Fragile 液体から Strong 液体にわたる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，温度低下に伴う不均一ダイナミクスの寿命の遅延化が系の fragility と強く相関していることを明らかにした。また，過冷却水の熱力学的異常性についても解析を進めている。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とともに，温度低下とともに異常性が増すことが知られている。過冷却状態におけるこのような熱力学的異常性の一つに，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クスの時間・空間スケールを明らかにした。

B-1) 学術論文

K. KIM and S. SAITO, "Multiple Length and Time Scales of Dynamic Heterogeneities in Model Glass-Forming Liquids: A Systematic Analysis of Multi-Point and Multi-Time Correlations," *J. Chem. Phys. (Special Topic of Glass Transition)* **138**, 12A506 (12 pages) (2013).

- M. HIGASHI, S. HIRAI, M. BANNO, K. OHTA, S. SAITO and K. TOMINAGA**, “Theoretical and Experimental Studies on Vibrational Energy Relaxation of the CO Stretching Mode of Acetone in Alcohol Solutions,” *J. Phys. Chem. B* **117**, 4723–4731 (2013).
- S. IMOTO, S. XANTHEAS and S. SAITO**, “Molecular Origin of the Difference in the HOH Bend of the IR Spectra between Liquid Water and Ice,” *J. Chem. Phys.* **138**, 054506 (8 pages) (2013).
- S. SAITO, I. OHMINE and B. BAGCHI**, “Frequency Dependence of Specific Heat in Supercooled Liquid Water and Emergence of Correlated Dynamics,” *J. Chem. Phys.* **138**, 094503 (7 pages) (2013).
- S. IMOTO, S. XANTHEAS and S. SAITO**, “Ultrafast Dynamics of Liquid Water: Frequency Fluctuations of the OH Stretch and the HOH Bend,” *J. Chem. Phys.* **139**, 044503 (7 pages) (2013).
- K. KIM, S. SAITO, K. MIYAZAKI, G. BIROLI and D. R. REICHMAN**, “Dynamic Length Scales in Glass-Forming Liquids: An Inhomogeneous Molecular Dynamics Simulation Approach,” *J. Phys. Chem. B* **117**, 13259–13267 (2013).
- T. SUMIKAMA, S. SAITO and I. OHMINE**, “Mechanism of Ion Permeation through a Model Channel: Roles of Energetic and Entropic Contributions,” *J. Chem. Phys.* **139**, 165106 (8 pages) (2013).

B-3) 総説, 著書

- T. YAGASAKI and S. SAITO**, “Fluctuations and Relaxation Dynamics of Liquid Water Revealed by Linear and Nonlinear Spectroscopy,” *Annu. Rev. Phys. Chem.* **64**, 55–75 (2013).
- 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 (2013).

B-4) 招待講演

- S. SAITO**, “Molecular origin of anomalous temperature dependence of isobaric heat capacity of supercooled water,” 2013 NCTS April workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Taipei (Taiwan), April 2013.
- S. SAITO**, 「凝縮系ダイナミクス——超高速ダイナミクスから熱力学的性質の起源まで——」, QCRI シンポジウム, 京都, April 2013.
- S. SAITO**, “Dynamics of Water: Fluctuation and Relaxation Revealed by Theoretical Two-Dimensional IR Spectroscopy,” 33rd International Conference on Solution Chemistry, Kyoto, July 2013.
- S. SAITO**, “Anomalous Temperature Dependence of Specific Heat of Supercooled Water,” 6th APCTCC (Asian Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry), Gyeongju (Korea), July 2013.
- S. SAITO**, “Dynamics of water: Analysis of third-order nonlinear IR spectroscopy,” Telluride workshop on Vibrational Dynamics, Telluride (U.S.A.), July 2013.
- S. SAITO**, “Molecular Origin of Anomalous Temperature Dependence of Specific Heat of Water: Spatio-temporal Analysis,” 246th ACS National Meeting & Exposition, Indianapolis (U.S.A.), September 2013.
- S. SAITO**, 「過冷却水の特異的熱力学性質の動的起源」, 日本物理学会, 「液液転移——第2臨界点仮説を巡って——」, 徳島大学, September 2013.
- S. SAITO**, “Dynamics of water: From ultrafast dynamics to anomalous thermodynamic properties,” Department Seminar (BK21 plus) at Chungbuk National University, Cheongju (Korea), November 2013.

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-9) 学位授与

井本 翔, “Theoretical studies on ultrafast dynamics of liquid water using linear and nonlinear spectroscopy,” 2013年9月, 博士 (理学).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B)(2), 「生体分子の構造遍歴ダイナミクスと機能発現の分子機構の理論的解明」, 斉藤真司 (2013年度-2016年度).

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

日印共同研究, 「水および水溶液の構造とダイナミクス: 理論と実験」, 斉藤真司 (2010年度-2011年度).

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

科研費特定領域研究(計画研究), 「空間・時間不均一ダイナミクス理論の構築」, 斉藤真司 (2006年度-2009年度).

科研費基盤研究(B)(2), 「化学反応および相転移ダイナミクスの多次元振動分光法による理論解析」, 斉藤真司 (2004年度-2006年度).

C) 研究活動の課題と展望

光合成系における高効率エネルギー移動における励起エネルギー移動の解明に向けて, FMO タンパク質の電子状態計算を行い, ポテンシャルエネルギー面, 相互作用の解析をさらに進めている。過冷却水のダイナミクスに関して, 非常に低い温度の運動の解析を進めており, 動的に不均一な状態から静的に不均一な状態へとどのように変化していくかについて解析を行っている。また, 我々は多時間相関関数のアイデアを援用し, 世界に先駆けて不均一ダイナミクスの寿命の解析を行ってきた。この考えをさらに発展させ, 生体分子系等における構造変化・遍歴ダイナミクスへの展開を進めている。さらに, 生体分子の構造揺らぎ・変化と機能に関する研究にも着手した。

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) ナノ光応答理論及びその理論に基づく超並列プログラムの開発
- b) 金属クラスターにおけるプラズモン励起の解明
- c) 電極反応の理論
- d) 金属クラスターの電子物性

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ナノ構造体の柔軟な電子構造や化学的性質の多様性を活かし、更には光との相互作用の自由度を取り込んだ量子デバイスは、従前の電子デバイスや光デバイスとは異なる光・電子機能性を併せ持った有望な次世代量子デバイスと考えられる。しかし、その機能発現のメカニズムは複雑であるために実験的研究は未だ試行錯誤の連続であり、ましてや理論的研究では、極端に単純化した理論モデル系を対象として、実在系とかけ離れた定性的議論をしているだけである。この現状を打破するためには、実在に即したナノ構造体を対象としてその機能性発現のメカニズムを基礎的な観点から明らかにしつつ、その知見を踏まえた上で物質に任意の機能性を付加する計算科学的観点に立った指導原理を見出すことが必須である。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、昨年度に引き続き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超並列第一原理計算プログラムの開発を行い、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。本年度は特に世界最大規模の光励起電子ダイナミクス計算プログラムを開発することに成功した。
- b) 電子の集団励起（プラズモン励起）に起因する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、貴金属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いて追跡し、表面増強ラマン散乱（SERS）のメカニズム解明を行った。また、金属クラスターの幾何学的配置を制御することによって SERS の強度を変化させることができることを示した。
- c) 電気化学反応は非常に古くから研究されている化学における最も重要な研究課題の一つであるが、最近ではその素過程を電子レベルで詳細に切り込もうとする実験的研究も盛んに行われている。一方、対応する量子論的取り扱いが極めて難しい。本研究課題では、Ag 電極／Au 又は Ag 吸着系を対象としてその電圧印加環境下での電子状態の詳細を議論するための理論開発を行った。
- 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, C. ZENG, N. L. ROSI and R. JIN, "Nonsuperatomic $[\text{Au}_{23}(\text{SC}_6\text{H}_{11})_{16}]^-$ Nanocluster Featuring Bipyramidal Au_{15} Kernel and Trimeric $\text{Au}_3(\text{SR})_4$ Motif," *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 18264–18267 (2013).

T. IWASA, K. NOBUSADA and A. NAKAJIMA, “Electronic and Optical Properties of Vertex-sharing Homo- and Hetero-Biicosahedral Gold Clusters,” *J. Phys. Chem. C* **46**, 24586–24591 (2013).

Y. NEGISHI, W. KURASHIGE, Y. NIIHORI and K. NOBUSADA, “Toward the Creation of Stable, Functionalized Metal Clusters,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 18736–18751 (2013).

K. IIDA, T. YASUIKE and K. NOBUSADA, “Development of Open-Boundary Cluster Model Approach for Electrochemical Systems and Its Application to Ag^+ Adsorption on Au(111) and Ag(111) Electrodes,” *J. Chem. Phys.* **139**, 104101 (7 pages) (2013).

W. KURASHIGE, K. MUNAKATA, K. NOBUSADA and Y. NEGISHI, “Synthesis of Stable $\text{Cu}_n\text{Au}_{25-n}$ Nanoclusters ($n = 1-9$) Using Selenolate Ligands,” *Chem. Commun.* **49**, 5447–5449 (2013).

T. YASUIKE and K. NOBUSADA, “Raman Enhancement by Plasmonic Excitation of Structurally-Characterized Metal Clusters: Au_8 , Ag_8 , and Cu_8 ,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 5424–5429 (2013).

B-3) 総説, 著書

K. NOBUSADA, “Near-Field Excitation Dynamics in Molecules: Nonuniform Light-Matter Interaction Theory Beyond a Dipole Approximation,” in *Progress in Nanophotonics 2*, M. Ohtsu, Ed., Springer-Verlag; Berlin Heidelberg, Chapter 1 (2013).

B-4) 招待講演

K. NOBUSADA, “Toward unified first-principles calculations based on explicit light and matter interaction at nanoscale,” Sweden-Japan Collaboration Symposium: Exploring the Future of Light, Matter, and Information on the Nanoscale, Lund (Sweden), June 2013.

K. NOBUSADA, “Enhanced Raman Spectra by Plasmonic Excitation in Nearby Metal Clusters,” Japan-Korea Molecular Science Symposium: From Quantum to Life, Kobe (Japan), July 2013.

K. NOBUSADA, “Time-Dependent Density Functional Theory for Electron and Electromagnetic Field Coupled Dynamics in Nanostructures,” Gordon Research Conference on Time-Dependent Density-Functional Theory, Biddeford (U.S.A.), August 2013.

K. NOBUSADA, “Theory of Electron and Electromagnetic Field Coupled Dynamics in Nanostructures,” 2013 JSAP-MRS Joint Meeting, Nanoscale Materials Modification by Photon, Ion and Electron Beams II, Kyoto (Japan), September 2013.

K. NOBUSADA, “Unified first-principles calculations of near-field excitation dynamics in nanostructures,” Swiss-Japan Workshop on Light and Matter on the Nanoscale, Lausanne (Switzerland), October 2013.

信定克幸, 「ナノクラスターの高次構造と光・電子動的機能」, 分子理論化学セミナー, 京都, 2013年6月.

信定克幸, 「近接場光励起ダイナミクスの第一原理計算」, 応用物理学会シンポジウム: 計算科学・数理物理とナノフォトリクスの新たな融合の可能性, 京都, 2013年9月.

信定克幸, 「ナノ構造体の超並列第一原理計算と近接場光励起ダイナミクスへの展開」, ナノフォトリクスオープンセミナー, 東京大学, 2013年11月.

信定克幸, 「ナノ物質における光と物質の相互作用理論」, 第9回励起ナノプロセス研究会, 東京, 2013年12月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会領域1 (原子・分子分野)世話人 (2003-2004).

科学技術振興機構地域振興事業評価委員会専門委員 (2005-2006).

文部科学省科学技術・学術審議会専門委員 (2006-2008).

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, 「基礎理論化学」, 2013年7月23日-26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-2012年).

科研費基盤研究(B), 「光エネルギー変換のナノ光学理論と広帯域可視光応答ナノ構造体設計への展開」, 信定克幸 (2013年-2016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

柔軟な電子構造と化学的性質の多様性を持つナノ構造体は新規機能性を生み出す有力候補である。更にナノ構造体が光と相互作用することによって、光の自由度を露に取り込むことができれば、従前の電子デバイスや光デバイスとは異なる光・電子機能性を併せ持った有望な機能物質の開発へと繋がると期待できる。既にこのような期待の下に実験・理論研究が進められているが、その機能発現のメカニズムは複雑であるために実験的研究は未だ試行錯誤の連続であり、ましてや理論的研究では、極端に単純化した理論モデル系を対象として、実在系とかけ離れた定性的議論をしているだけである。この現状を打破するために、実在に即したナノ構造体を対象としてその光応答特性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超並列第一原理計算手法の開発が急務である。これらの理論と計算科学的手法から得られた知見を踏まえた上で物質に任意の機能性を付加する指導原理を見出すことが必須である。

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を持たれている一方で、理論的な取り扱いにはチャレンジングな問題（多参照問題）である。多参照電子状態を正しく記述するためのキーとなる物理は、原子間スケールで擬縮退した電子状態に由来する強い電子相関効果であり、この相関効果の問題の複雑さは分子サイズに対して指数関数的に複雑化し、既存の量子化学計算法ではこの現象を効率よく高精度で計算することができない。これまで、当研究室では、このような距離スケールな強い複雑な電子相関を記述するための厳密対角化法、ab initio 密度行列繰り込み群（DMRG）法の新しい実装を開発してきた。また、この手法を利用した、多配置 CASSCF 波動関数で記述するための手法開発（DMRG-SCF）を行い、これまで絶対取扱不可能だと思われたサイズの大規模な CASSCF 計算を実現した。本研究では、密度行列繰り込み群を出発して動的電子相関を二次の摂動論から効率よく見積もる DMRG-CASPT2（Complete-Active-Space Second-order Perturbation Theory）法を開発した。CASPT2 法は、オリジナルには Roos らによって開発されてきたが、従来法では適用可能な活性化軌道のサイズに限界があったが、本手法はその適用サイズを飛躍的に広げた。DMRG-CASPT2 法を用いて、Cr₂ の解離ポテンシャルの計算に応用し、高精度に実験から見積もられたポテンシャル曲線を再現した。
- b) 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「S₀ → S₁ → S₂ → S₃ → S₄ (→ S₀)」に沿って起こるとされており、反応中心の Mn₄Ca 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 Mn₄Ca 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 Mn₄Ca 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 ($\text{Mn}^{2\text{III}} \text{Mn}^{3\text{IV}} \text{Mn}^{4\text{IV}} \text{Mn}^{5\text{III}}$) 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 ($\text{Mn}^{2\text{III}} \text{Mn}^{3\text{IV}} \text{Mn}^{4\text{IV}} \text{Mn}^{5\text{III}}$) 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 ($\text{Mn}^{2\text{III}} \text{Mn}^{3\text{IV}} \text{Mn}^{4\text{III}} \text{Mn}^{5\text{II}}$) 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 ($\text{Mn}^{2\text{III}} \text{Mn}^{3\text{IV}} \text{Mn}^{4\text{IV}} \text{Mn}^{5\text{III}}$) 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

Y. KURASHIGE, G. K-L. CHAN and T. YANAI, “Entangled Quantum Electronic Wavefunctions of the Mn_4Ca Cluster in Photosystem II,” *Nat. Chem.* **5**, 660–666 (2013).

L. N. TRAN and T. YANAI, “Correlated One-Body Potential from Second-Order Møller-Plesset Perturbation Theory: Alternative to Orbital-Optimized MP2 Method,” *J. Chem. Phys.* **138**, 224108 (12 pages) (2013).

M. SAITOW, Y. KURASHIGE and T. YANAI, “Highly Scalable Multireference Configuration Interaction Theory with Internal Contraction of Density Matrix Renormalization Group Wave Function,” *J. Chem. Phys.* **139**, 044118 (15 pages) (2013).

F. LIU, Y. KURASHIGE, T. YANAI and K. MOROKUMA, “Multireference Ab Initio Density Matrix Renormalization Group (DMRG)-CASSCF and -CASPT2 Study on the Photochromic Ring-Opening of Spiropyran,” *J. Chem. Theory Comput.* **9**, 4462–4469 (2013).

J. CHALUPSKÝ and T. YANAI, “Flexible Nuclear Screening Approximation to the Two-Electron Spin–Orbit Coupling Based on Ab Initio Parameterization,” *J. Chem. Phys.* **139**, 204106 (14 pages) (2013).

B-4) 招待講演

T. YANAI, “Some new approaches to electron correlation: orbital optimization; Mn_4CaO_5 ; DMRG-MRCI,” New Frontiers in Electron Correlation, Telluride (U.S.A.) June 2013.

T. YANAI, “Entangled quantum electronic wavefunctions of biological systems: Density matrix renormalization group approach,” 246th ACS National Meeting & Exposition, Indianapolis (U.S.A.), September 2013.

T. YANAI, “Quantum chemistry with density matrix renormalization group: Theory and applications to π -conjugated systems,” CECAM conference: Structure-property relationships of molecular precursors to organic electronics, Lausanne (Switzerland), October 2013.

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).

T. YANAI, Laureate, International Academy of Quantum Molecular Science (2013).

柳井 毅, 分子科学会奨励賞 (2013).

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 (2007-2013).
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,「基礎理論化学」, 2013年 7月 23日-26日.

B-10) 競争的資金

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

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

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

科研費基盤研究(B),「非経験的密度行列繰り込み群法を基軸とする多状態間電子過程の理論構築と応用」, 柳井 毅 (2013年度-2015年度).

C) 研究活動の課題と展望

当該研究活動で当面課題とする問題は, 多参照な電子状態(電子が強く相関する状態)であり, 理論的な取り扱いにはチャレンジングな問題(多参照問題)である。問題の複雑さは, 問題のサイズ(分子サイズ)に対して指数関数的に複雑化するので, この問題を解くのはなかなか容易ではない。当研究グループが開発を進める「密度行列繰り込み群(DMRG)」「DMRG- 正準変換理論」「DMRG-CASPT2」は, いままでになかった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。

計算分子科学研究部門

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) 分子の励起・吸収スペクトルの多くは溶液中で測定されるが，電子励起により分子内の電子分布は大きく変化するため，溶媒効果は無視できない。本年度は，多数の励起状態に対する溶媒効果を効率良く計算できる PCM-SAC-CI 理論の摂動法の開発を行った。この方法では，励起状態に対する溶媒効果を摂動展開し重要な項のみを考慮することで，PCM-SAC-CI 計算でボトルネックとなっていた自己無頓着反応場の繰り返し計算を回避することができる。しかも，溶媒効果は，各電子状態に特異的に計算するため，現在，簡便な方法としてスペクトル計算に用いられている線形応答法よりも，良い結果を得ることができる。この方法は，ナノカーボン化合物や有機金属化合物など，低エネルギー域に多数の励起状態が存在するような系に対し，特に有効な方法であり，金属-ジイミン錯体の吸収スペクトルに対する溶媒効果を非常に良く再現することができた。
- b) 多環芳香族炭化水素は，炭素材料としての応用やグラフェンのモデルとしての性質等からその電子状態が注目されている。我々は，コロネンとその π 拡張系の励起状態の精密な理論計算を行い，縮退した HOMO - LUMO 間の電子遷移における励起エネルギー準位がいかんして決まるのかを，軌道エネルギー，軌道間の相互作用，配置間の相互作用，及び電子相関の効果に着目して解析した。また，励起状態における van der Waals 相互作用をポルフィリンのモデルに対して計算した。フリーベースポルフィンでは，最低エネルギー状態が van der Waals クラスター中で高エネルギーシフトすることが観測されていたが，シフトの要因が励起状態における分散力であることが，我々の計算から示された。
- c) 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が観測された。実験との共同研究を行い，これらの状態の観測結果の解析を行った。特に， N_2O や CO_2 における DCH 状態や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。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を行い，2 つのコアホールの間の相互作用について緩和エネルギーの性質を明らかにした。
- d) アルミナ表面に担持された銀の微粒子は，水素分子を活性化する。我々は，アルミナ表面に吸着した銀クラスターによるモデル計算を行い， H_2 の結合解離のメカニズムを検討した。計算によると，アルミナ表面は H_2 を解離する能力が高く，水素分子の活性化とそれに続く水素化触媒反応において，銀クラスターとアルミナの境界位置が重要な

役割を果たすことが明らかになった。また、金微粒子における空気酸化のモデル反応系を用い、Coupled-Cluster 計算と DFT 計算の比較を行い、微粒子触媒系における近似計算法の妥当性を検証した。

B-1) 学術論文

R. FUKUDA and M. EHARA, “Mechanisms for Solvatochromic Shifts of Free-Base Porphine Studied with Polarizable Continuum Models and Explicit Solute-Solvent Interactions,” *J. Chem. Theory Comput.* **9**, 470–480 (2013).

K. UEDA, S. YAMANAKA, K. NAKATA, M. EHARA, M. OKUMURA, K. YAMAGUCHI and H. NAKAMURA, “Linear Response Function Approach for the Boundary Problem of QM/MM Methods,” *Int. J. Quantum Chem.* **113**, 336–341 (2013).

S. KARANJIT, K. BOBUATONG, R. FUKUDA, M. EHARA and H. SAKURAI, “Mechanism of Aerobic Oxidation of Methanol to Formic Acid on Au⁺: A DFT Study,” *Int. J. Quantum Chem.* **113**, 428–436 (2013).

M. PROMKATKAEW, S. SURAMITR, T. KARPKIRD, M. EHARA and S. HANNONGBUA, “Absorption and Emission Properties of Various Substituted Cinnamic Acids and Cinnamates, Based on TDDFT Investigation,” *Int. J. Quantum Chem.* **113**, 542–554 (2013).

R. FUKUDA and M. EHARA, “Theoretical Study on the Excited Electronic States of Coronene and Its π -Extended Molecules Using the Symmetry-Adapted Cluster-Configuration Interaction Method,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **86**, 445–451 (2013).

H. KUNIASU, A. SANAGAWA, D. NAKANE, T. IWASAKI, N. KAMBE, K. BOBUATONG, Y. LU and M. EHARA, “ σ -Bond Metathesis between M–X and RC(O)X’ (M = Pt, Pd; X, X’ = Cl, Br, I): Facile Determination of the Relative ΔG Values of the Oxidative Additions of RC(O)X to an M(0) Complex, Evidence by Density Functional Theory Calculations, and Synthetic Applications,” *Organometallics* **32**, 2026–2032 (2013).

M. TASHIRO, N. V. KRYZHEVOI, L. S. CEDERBAUM and M. EHARA, “Polarization and Site Dependence of Interatomic Relaxation Effects in Double Core Hole States,” *J. Phys. B* **46**, 164012 (6 pages) (2013).

D. BOUSQUET, R. FUKUDA, P. MAITARAD, D. JACQUEMIN, I. CIOFINI, C. ADAMO and M. EHARA, “Excited State Geometries of Heteroaromatic Compounds: A Comparative TD-DFT and SAC-CI Study,” *J. Chem. Theory Comput.* **9**, 2368–2379 (2013).

A. SANAGAWA, H. KUNIASU, T. IWASAKI, N. KAMBE, K. BOBUATONG and M. EHARA, “Facile Method of Halogen Exchange Method between Au(Cl)(L) and MeC(O)X (L = PPh₃ and IPr; X = Br and I) via σ -Bond Metathesis Supported by DFT Calculation,” *Chem. Lett.* **42**, 831–832 (2013).

M. EHARA, R. FUKUDA, C. ADAMO and I. CIOFINI, “Chemically Intuitive Indices for Charge-Transfer Excitation Based on SAC-CI and TD-DFT Calculations,” *J. Comput. Chem.* **34**, 2498–2501 (2013).

R. FUKUDA and M. EHARA, “Theoretical Study of the Electronic Excitations of Free-Base Porphyrin-Ar₂ van der Waals Complexes,” *J. Chem. Phys.* **139**, 074303 (10 pages) (2013).

R. FUKUDA and M. EHARA, “Electronic Excited States and Electronic Spectra of Biphenyl: A Study Using Many-Body Wavefunction Methods and Density Functional Theories,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 17426–17434 (2013).

J. A. HANSEN, M. EHARA and P. PIECUCH, “Aerobic Oxidation of Methanol to Formic Acid on Au⁺: Benchmark Analysis Based on Completely Renormalized Coupled-Cluster and Density Functional Theory Calculations,” *J. Phys. Chem. A* **117**, 10416–10427 (2013).

Y. MORISAWA, M. YASUNAGA, R. FUKUDA, M. EHARA and Y. OZAKI, “Electronic Transitions in Liquid Amides Studied by Using Attenuated Total Reflection Far-Ultraviolet Spectroscopy and Quantum Chemical Calculations,” *J. Chem. Phys.* **139**, 154301 (9 pages) (2013).

B-3) 総説, 著書

田中庸裕, 山田淳夫, 江原正博, 「特集 元素戦略プロジェクト 触媒・電池材料グループが目指すもの」, *ぶんせき, 分析学会*, 5月号, 282–286 (2013).

B-4) 招待講演

M. EHARA, “Theoretical and Computational Chemistry for Photofunctional Molecules and Nanocluster Catalysis,” The 3rd ENSCP-IMS joint symposium,” Okazaki (Japan), February 2013.

M. EHARA and R. FUKUDA, “Photochemistry by SAC-CI and TDDFT,” TD-DFT Conference, Nantes (France), April 2013.

M. EHARA, “Theoretical and Computational Chemistry for Photofunctional Molecules,” International Congress for Innovation in Chemistry (PERCH-CIC Congress VIII), Pattaya (Thailand), May 2013.

M. EHARA, “Catalytic Reactions on Au and Au/Pd Nanoclusters,” The 6th Asian Pacific Conference of Theoretical & Computational Chemistry, Gyeongju (Korea), July 2013.

M. EHARA, “Au and Au/Pd Catalysis,” Massey University, Auckland (New Zealand), November 2013.

M. EHARA, “Quantum Chemistry for Excited States,” SOKENDAI Asian Winter School Innovations and Challenges in Molecular Science From Basics to Cutting-Edge Researches, Okazaki (Japan), December 2013.

M. EHARA, “Some Recent Works on Excited States and Nanocluster Catalysts,” Recent Advances in Correlation Problems, Kolkata (India), December 2013.

江原正博, 「理論計算科学による光機能分子と微粒子触媒の研究」, 2012年度放射光連携研究ワークショップ, 東京, 2013年2月.

江原正博, 「理論計算によるルミネッセンスの化学」, 日本化学会第93春季年会「64-ルミネッセンス化学アンサンブル: 多彩な発光機能の基礎と実用展開」, 草津, 2013年3月.

江原正博, 「理論計算化学による光機能分子の光物性～SAC-CI法による研究～」, 先端化学・材料技術部会コンピューターケミストリ分科会講演会, 東京, 2013年6月.

R. FUKUDA, “Electronic excited states of large conjugated molecules studied by the direct SAC-CI method,” 93rd Annual Meeting of the Chemical Society of Japan, Asian International Symposium—Theoretical Chemistry, Chemoinformatics, Computational Chemistry, Kusatsu (Japan), March 2013.

福田良一, 「電子励起状態の量子化学——近赤外光の利用と溶媒効果」, 第3回量子化学ウインタースクール～基礎理論と分子物性の理論～TCCI ウインターカレッジ: 量子化学, 岡崎, 2013年12月.

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 (2007-2013).

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).

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-).

次世代スパコン戦略プログラム「計算物質科学イニシアティブ」 CMSI 運営委員会委員, 企画室会議委員, 部会小委員会委員企画室 (2009-).

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 ナノ統合ソフト担当 (2008-2011).

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」, 2013年 5月 16日-17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 9月- .

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, 拠点助教, 2012年 9月- . (福田良一)

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-).

自然科学研究機構新分野創成センター宇宙における生命研究分野プロジェクト, 「自然界における生体分子の非対称性の起源」, 江原正博, 福田良一, 研究分担 (2013年-2014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

我々は、高精度電子状態理論を基盤として、光の関わる化学現象や微粒子およびバルク触媒を主たる対象とした、新しい化学概念を構築することを目的として研究を進めている。近年、電子状態理論では大規模化が進展し、ナノ材料やバイオ系への応用が展開している。しかし、複雑な励起状態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未だ発展途上にあり、さらに高めていく必要がある。また、ダイナミクスや統計力学も化学現象を解明するために重要である。これらの理論化学によって、化学現象の本質を研究することを目指している。まずは、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、固体表面を高精度に記述できる理論開発を行う。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分子間相互作用について検討し、分子システムとしての機能設計へと展開させたい。表面-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) ハミルトニアンレプリカ置換法の開発
- b) ヘリックス・ストランドレプリカ交換法の開発
- c) AK16 ペプチドの加圧による構造変化

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昨年，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。通常のレプリカ交換法ではレプリカ間で温度を交換するが，温度の代わりにポテンシャルエネルギーにパラメーターを導入し，そのパラメーターを交換することもできる。この手法はハミルトニアンレプリカ交換法と呼ばれる。今年はこの手法のレプリカ置換版，ハミルトニアンレプリカ置換法も開発した。温度は全原子の運動エネルギーから計算される量であるため，温度のレプリカ置換法では，系が大きくなると全自由度の平方根に比例して用意すべきレプリカ数が増える。これは陽的な溶媒を含む場合に特に多くのレプリカを用意しなければいけないことを意味する。一方，ハミルトニアンレプリカ置換法では注目すべき分子（例えばタンパク質）にだけ関係するパラメーターを選ぶことにより，レプリカ数を少なくできるという利点がある。この手法を用いてアミロイド β ペプチドの二量体化過程を明らかにした。
- b) ハミルトニアンレプリカ交換法では温度の代わりに何を交換するパラメーターに設定するかが問題になる。2 面角ポテンシャルエネルギーに新しい項を付け加えることにより α ヘリックスまたは β ストランド構造を多く再現できる。そこで，このポテンシャルエネルギーに係数をかけ，その係数を交換する新しいハミルトニアンレプリカ交換法「ヘリックス・ストランドレプリカ交換法」も開発した。この方法を α ヘリックスと β ヘアピン構造の両方をもつデザインペプチドの分子動力学シミュレーションに応用した。その結果，通常のレプリカ交換法よりもヘリックス・ストランドレプリカ交換法の方がより広い構造空間をサンプルし，より長い α ヘリックス構造や β ヘアピン構造を得ることができた。この手法は今後，タンパク質の立体構造予測を行うための強力な手法になると考えている。
- c) 高圧条件下でのタンパク質の構造変化について，拡張アンサンブル法を用いた理論研究も進めている。通常のタンパク質では圧力をかけると圧力変性が起き， α ヘリックス構造や β シート構造などの2次構造は破壊される。しかし，AK16 ペプチドでは圧力をかけると α ヘリックス構造の形成率が増えることが実験的に知られている。そこで我々は拡張アンサンブル法のひとつである温度・圧力に関する焼き戻し法を用いて，AK16 ペプチドの構造の圧力依存性を調べた。その結果，圧力の増加にともない， α ヘリックス構造の割合は途中までは減少するが，その後増加した。高圧力側だけでとはいえ，圧力により α ヘリックス構造が増えるという実験結果を再現することができたのはこれが初めてである。さらに慣性半径を計算したところ， α ヘリックス構造をとった状態では慣性半径は圧力とともに減少する，すなわち縮んでいるのに対し，アンフォールド状態の慣性半径はほとんど変化ないことがわかった。つまり α ヘリックス構造は加圧にともない縮むために，高圧力条件下では α ヘリックス構造が増えるということが明らかになった。

B-1) 学術論文

- S. G. ITOH and H. OKUMURA**, “Hamiltonian Replica-Permutation Method and Its Applications to an Alanine Dipeptide and Amyloid- β (29-42) Peptides,” *J. Comput. Chem.* **34**, 2493–2497 (2013).
- S. G. ITOH, T. MORISHITA and H. OKUMURA**, “Decomposition-Order Effects of Time-Integrator on Ensemble Averages for the Nosé-Hoover Thermostat,” *J. Chem. Phys.* **139**, 064103 (10 pages) (2013).
- Y. MORI and H. OKUMURA**, “Pressure-Induced Helical Structure of a Peptide Studied by Simulated Tempering Molecular Dynamics Simulations,” *J. Phys. Chem. Lett.* **4**, 2079–2083 (2013).
- H. OKUMURA and S. G. ITOH**, “Transformation of a Design Peptide between the α -Helix and β -Hairpin Structures by a Helix-Strand Replica-Exchange Molecular Dynamics Simulation,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 13852–13861 (2013).
- S. G. ITOH and H. OKUMURA**, “Replica-Permutation Method with the Suwa-Todo Algorithm beyond the Replica-Exchange Method,” *J. Chem. Theory Comput.* **9**, 570–581 (2013).
- T. MORISHITA, S. G. ITOH, H. OKUMURA and M. MIKAMI**, “On-the-Fly Reconstruction of Free-Energy Profiles Using Logarithmic Mean-Force Dynamics,” *J. Comput. Chem.* **34**, 1375–1384 (2013).
- S. G. ITOH and H. OKUMURA**, “Coulomb Replica-Exchange Method: Handling Electrostatic Attractive and Repulsive Forces for Biomolecules,” *J. Comput. Chem.* **34**, 622–639 (2013).
- T. SAKAGUCHI and H. OKUMURA**, “Cutoff Effect in the Nosé-Poincaré and Nosé-Hoover Thermostats,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 034001 (7 pages) (2013).
- C. RUNGNIM, T. RUNGROTMONGKOL, S. HANNONGBUA and H. OKUMURA**, “Replica Exchange Molecular Dynamics Simulation of Chitosan for Drug Delivery System Based on Carbon Nanotube,” *J. Mol. Graphics Modell.* **39**, 183–192 (2013).
- Y. MORI and Y. OKAMOTO**, “Free-Energy Analyses of a Proton Transfer Reaction by Simulated-Tempering Umbrella Sampling and First-Principles Molecular Dynamics Simulations,” *Phys. Rev. E* **87**, 023301 (4 pages) (2013).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- H. OKUMURA**, “Free-energy calculation of a protein as a function of temperature and pressure: Multibaric-multithermal molecular dynamics simulations,” *Proceedings of the 12th Joint European Thermodynamics Conference, JETC 2013*, M. Pilotelli and G. P. Beretta, Eds., (Snoopy, Brescia, Italy, 2013), pp. 494–498 (2013).
- H. OKUMURA and S. G. ITOH**, “Non-Equilibrium Molecular Dynamics Simulation of Amyloid Destruction by Cavitation,” *Proceedings of the 4th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow*, (Hong Kong, China, 2013), ASCHT0199-T05-1-P (8 pages) (2013).

B-4) 招待講演

- H. OKUMURA**, “Introduction to molecular dynamics simulation and its application,” Sokendai Asian Winter School, Toki (Japan), December 2013.
- H. OKUMURA**, “Replica-permutation method for protein simulations and pressure-induced denaturation,” Sixth Japan-Korea Seminars on Biomolecular Sciences, Institute for Molecular Science, Okazaki (Japan), November 2013.
- H. OKUMURA**, “Molecular dynamics simulations for amyloid disruption by supersonic wave,” 2013 NCTS November Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Academia Sinica, Taipei (Taiwan), November 2013.

H. OKUMURA, “Manifold correction and generalized-ensemble algorithms in molecular dynamics simulations,” 2nd International Symposium on Hierarchy and Holism, National Center of Sciences, Tokyo (Japan), February 2013.

奥村久士,「アミノ酸・タンパク質・タンパク質複合体の階層をつなぐ計算分子科学：アミロイド線維形成を理解するために」, 山田研究会・統合バイオサイエンスシンポジウム「次世代バイオサイエンスの可能性 要素から全体へ：ポストゲノム時代における統合的生命科学研究はどうあるべきか?」, 伊良湖ビューホテル, 2013年11月.

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7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, 2013年10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-).

日本生物物理学会中部支部会幹事 (2013-).

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

オリオン公募研究,「アミノ酸・タンパク質・タンパク質複合体の階層をつなぐ計算分子科学：アミロイド線維形成を理解するために」, 奥村久士 (2013年度).

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

これらの研究を踏まえて, 今後以下の研究に取り組む。

- ① アミロイド線維形成の初期過程においてはまずタンパク質の二量体ができ, それが成長してより大きなオリゴマーが形成される。しかし二量体・オリゴマーがどのように形成されるか, 二量体・オリゴマーの構造はどのようなものであるのかは未だに明らかになっていない。そこで拡張アンサンブル分子動力学法を用いて, 二量体・オリゴマー形成過程を原子レベルで明らかにする。
- ② 高圧条件下におけるアミロイド線維の構造は常圧とは異なることが知られている。しかし, その具体的な構造も β シート構造形成に対する高圧力の効果もまだよくわかっていない。そこで高圧力まで調べることができる拡張アンサンブル法により, 高圧力条件下でどのようにタンパク質が凝集し, β シート構造を形成するのかを解明する。
- ③ アミロイド線維を破壊する過程のシミュレーションも行う。近年, 超音波を使ってキャビテーションによりアミロイド線維を破壊する実験報告がいくつかなされている。しかしながら, 水中の気泡がどのようにアミロイド線維を破壊するのか原子レベルでの詳細は分かっていない。そこで超音波を模したサインカーブ状に時間変化する圧力をかけて, 水中におけるアミロイド線維の非平衡分子動力学シミュレーションを行い, その詳細を調べる。

石 田 干 城（助教）（2004 年 11 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：理論化学，計算化学

A-2) 研究課題：

- a) 溶液内光励起反応過程およびエネルギー移動過程に関する理論的研究
- b) 分子動力学法によるイオン液体の動的挙動に関する理論的研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) これまでに提案，改良・発展をさせてきた時間依存形式による溶質分子の電子状態の時間依存変化を記述する方法を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。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るためにさらなる方法論の拡張を行い，現在計算段階へと取り組んでいるところである。また，並行して進めていた光以外でもエネルギー移動過程を制御するような系の一つであるイオン液体の研究において，分子間相互作用の効果が顕著に表れるために上記のエネルギー移動に関する研究手法が一部有効であることを見出した。これらに関連して，イオン間相互作用下でのイオン液体中でのエネルギー移動・散逸のシミュレーションによる研究へと展開しているところである。
- b) 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た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きているところである。特に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，極性溶媒中での光励起後の生体分子中における分子間のエネルギー緩和過程の研究に関連した解析手法を一部応用し，イオン液体中でのイオン間相互作用とエネルギー移動・緩和を研究した。特に室温においてイオン液体は通常液体では過冷却状態において出現する動的不均一性を示したが，これらに関する陽イオンと陰イオンの寄与は同様なものではなく，イオンの大きさやイオン価数といったイオン種の特徴が陽・陰イオン間相互作用エネルギーの緩和過程の違いに顕著に表れることが分かった。また中間散乱関数の解析より，動的不均一性は空間的な構造不均一性と強く相関することが示唆された。

B-1) 学術論文

T. ISHIDA and H. SHIROTA, "Dicationic versus Monocationic Ionic Liquids: Distinctive Ionic Dynamics and Dynamical Heterogeneity," *J. Phys. Chem. B* **117**, 1136–1150 (2013).

B-3) 総説，著書

T. ISHIDA, "The Dynamical Properties on Ionic Liquids: Insights from Molecular Dynamics Study," in *Ionic Liquids—New Aspects for the Future*, J. Kadokawa, Ed., InTech; Rijeka, Croatia, pp. 3–29 (2013).

B-10) 競争的資金

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

科研費特定領域研究(公募研究),「溶液内光励起反応プロセスと溶媒和ダイナミクス」, 石田干城 (2008年-2009年).

科研費特定領域研究(公募研究),「分子動力学法によるイオン液体の理論的研究」, 石田干城 (2008年-2009年).

科研費基盤研究(C),「分子内及び分子間エネルギー移動を起源とする光機能発現の理論的解明」, 石田干城 (2011年-2013年).

C) 研究活動の課題と展望

本年度は溶液内での光励起後の分子内エネルギー移動過程の解析方法の拡張と, その一部に関連してイオン液体中でのイオン間エネルギー相関やダイナミクスを分子動力学法により解析する研究活動を計画し, 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解析方法を光による制御以外のエネルギー移動が起こる系などへの適用を行い, 多くの知見と進展を得ることができた。今後は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取り組んでいきたい。またイオン液体の動的不均一性の研究に関しては, イオン分子のダイナミクスを詳細に解析する方法も発展させることができ, 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, イオン液体に関して, 統一した視点から物性などを理解できることを目指して研究を進めていきたい。

6-3 光分子科学研究領域

光分子科学第一研究部門

岡 本 裕 巳（教授）（2000 年 11 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：ナノ光物理化学

A-2) 研究課題：

- a) 先端的な近接場分光法の開発とその利用研究
- b) 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
- c) ナノ構造物質におけるキラリティと局所的な光学活性

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 14 fs のパルス幅を実現した。これにより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，また条件によってプラズモンの緩和にサイト依存性のあることを実測しつつある。また別な方向への発展として，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。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) 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，近接場測定で得られた二次元的形状の円盤状金微粒子におけるプラズモン波のイメージに対し，理論研究者と共同で新たな理論的枠組みに基づくモードの解析を行い，その起源をほぼ明らかにすることができた。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。我々は既に数年前に，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等に関して研究を進めている。これらの研究の結果として，有用な増強局在光電場を作るには，均一な配列構造ではなく，揺らぎのある構造が望ましいことを確立しつつある。これをさらに体系化するためにナノ構造の制御と観察波長の拡張が重要であり，それを実現するために，電子線描画装置の導入と，フェムト秒で近赤外域広帯域波長可変の近接場励起用光源の導入を進めた。
- c) 2次元のキラルな構造を持つ金ナノ構造体を電子線描画法で作成し，開発を進めている近接場円二色性イメージング装置を用い，局所的な光学活性を測定している。局所的な円二色性信号が巨視的な円二色性信号に比べて極めて大きくなる等，興味深い結果が得られてきている。また2次元のキラルな構造を二つのキラルでない（アキラル）部

分構造に分け、アキラルな部分構造の接近に従って系が光学活性を獲得するプロセスを追跡する研究を行っている。これらの発展として、金属ナノ構造と分子とのキラルな光学的相互作用に関する研究を視野に入れ、研究を推進している。

B-1) 学術論文

- K. IMURA, K. UENO, H. MISAWA and H. OKAMOTO**, “Optical Field Imaging of Elongated Rectangular Nanovoids in Gold Thin Film,” *J. Phys. Chem. C* **117**, 2449–2454 (2013).
- S. KIM, K. IMURA, M. LEE, T. NARUSHIMA, H. OKAMOTO and D. H. JEONG**, “Strong Optical Coupling between Mutually Orthogonal Plasmon Oscillations in a Silver Nanosphere-Nanowire Joined System,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 4146–4153 (2013).
- T. SHIMADA, K. IMURA, H. OKAMOTO and M. KITAJIMA**, “Spatial Distribution of Enhanced Optical Fields in One-Dimensional Linear Arrays of Gold Nanoparticles Studied by Scanning Near-Field Optical Microscopy,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 4265–4269 (2013).
- T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO**, “Circular Dichroism Nano-Imaging of Two-Dimensional Chiral Metal Nanostructures,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 13805–13809 (2013).
- T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO**, “Strong Nanoscale Optical Activity Localized in Two-Dimensional Chiral Metal Nanostructures,” *J. Phys. Chem. C* **117**, 23964–23969 (2013).
- M. KITAJIMA, T. NARUSHIMA, T. KURASHINA, A. N. ITAKURA, S. TAKAMI, A. YAMADA, K. TERAISHI and A. MIYAMOTO**, “Stress Inversion from Initial Tensile to Compressive Side During Ultrathin Oxide Growth of the Si(100) Surface,” *J. Phys.: Condens. Matter* **25**, 355007 (5 pages) (2013).

B-3) 総説、著書

- G. HARTLAND, H. OKAMOTO, M. ORRIT and P. ZIJLSTRA**, “Optical Studies of Single Metal Nanoparticles,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 4090–4092 (2013).
- H. OKAMOTO**, “Nanooptical Studies on Physical and Chemical Characteristics of Noble Metal Nanostructures,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **86**, 397–413 (2013).
- H. OKAMOTO and K. IMURA**, “Visualizing the Optical Field Structures in Metal Nanostructures,” *J. Phys. Chem. Lett.* **4**, 2230–2241 (2013).
- 岡本裕巳**, 「指紋領域のピコ秒赤外吸収スペクトル(スペクトルギャラリー)」, *分光研究* **62**, 174–176 (2013).

B-4) 招待講演

- 成島哲也, 岡本裕巳**, 「キラルなナノ構造体の局所光学活性——近接場ナノイメージング——」, 日本分光学会北海道支部シンポジウム, 札幌, 2013年3月.
- 成島哲也**, 「近接場光学顕微鏡によるナノスケール円偏光二色性イメージング」, 日本分光学会平成24年度中部支部東海・信州ブロック講演会, 岡崎, 2013年3月.
- 岡本裕巳**, 「金属ナノ微粒子の非線形光学トラップ」, 第60回応用物理学会春季学術講演会, 厚木, 2013年3月.
- H. OKAMOTO**, “Nano-Optical Visualization of Subwavelength Optical Field Structures and Chirality in Metal Nanostructures,” Symposium on Plasmon-Based Chemistry and Physics (ICP Preconference), Leuven (Belgium), 2013年7月.

K. IMURA and H. OKAMOTO, “Visualization and Optical Control of Localized Plasmons by Near-Field Optical Microscopy,” Symposium on Plasmon-Based Chemistry and Physics (ICP Preconference), Leuven (Belgium), 2013年7月.

H. OKAMOTO, “Near-Field Optical Visualization of Subwavelength Optical Fields and Chiralities in Metal Nanostructures,” Control and Applications of Light at the Nanoscale, Glasgow (U.K.), 2013年9月.

H. OKAMOTO, Y. NISHIYAMA, T. NARUSHIMA and K. IMURA, “Time-Domain Plasmon Dynamics Measurements by Optical Nanoscopy,” 246th National Meeting of the ACS, Symposium on Chemistry at the Space-Time Limit, Indianapolis (U.S.A.), 2013年9月.

岡本裕巳, 「パルスレーザーによる金属微粒子の捕捉の非線形光学効果」, 日本物理学会2013年秋季大会, 徳島, 2013年9月.

H. OKAMOTO, “Plasmon Dynamics and Chiralities Investigated by Optical Nanoscopy,” A Peter Wall Colloquium Abroad and The 73rd Okazaki Conference on Coherent and Incoherent Wave Packet Dynamics, Okazaki (Japan), 2013年11月.

H. OKAMOTO, “Visualizing the Optical Fields in Metal Nanostructures by Near-Field Optical Microscopy,” The Fourth Asian Spectroscopy Conference (ASC2013), Singapore, 2013年12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옵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옵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).

橋谷田俊, 日本光学会 OPJ ベストプレゼンテーション賞 (2013).

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).

日本学術振興会学術システム研究センター専門研究員 (2013–).

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-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次元高精度歪み検出系開発」, 成島哲也 (2007年).

科研費特定領域研究「光－分子強結合場」(計画研究),「近接場顕微分光に基づく光反応場の動的可視化・制御」,岡本裕巳(2007年-2011年).

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

科学技術振興機構さきがけ研究,「プラズモニ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).

科研費若手研究(B),「近接場超短パルスによるプラズモン波束のコヒーレント制御」,西山嘉男(2013年-).

光科学技術研究振興財団研究助成,「キラル物質に都合の良い光電場の発生とその相互作用に関する研究」,成島哲也(2013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,今後様々な金属ナノ構造に限らず種々の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。また,この実験手法で得られた成果をもとに,金属ナノ構造と分子のキラルな電磁気学的相互作用に基づく新たな物質機能の研究への展開も視野に入りたい。この他にも微粒子の光トラッピング等,ナノ光学に関わるいくつかの研究萌芽を見出しており,機会があればこれらも展開させたいが,現時点の研究室の体制ではそれらを大きく進展させるのは難しそうである。

大 島 康 裕 (教授) (2004 年 9 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：分子分光学，化学反応動力学

A-2) 研究課題：

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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 高強度な極短パルス光と分子との相互作用によって量子状態分布を非断熱的に移動する手法の開発を行ってきた。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。H₂ とのクラスターでは、H₂ がほぼ自由に回転していることを明らかにし、同位体種である D₂ とのクラスターの測定も行うことにより、内部回転に対するポテンシャル障壁の値を決定した。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技术としてチャープパルスを利用した非共鳴誘導ラマン分光を提案した。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。イオンイメージングについて、生成物分布が軸対象でない場合にも適用できる新しい配置を考案し、測定システムを構築した。本システムを用いて、フェムト秒ポンプ・プローブ法クーロン爆発イオンイメージにより、2 原子分子の

非断熱回転励起による時間依存空間配向分布の計測を行った。現在、右もしくは左回りに回転する波動関数の実時間発展の追跡に取り組んでいる。

B-1) 学術論文

S. MIYAKE and Y. OHSHIMA, “Injection-Seeded Optical Parametric Amplifier for Generating Chirped Nanosecond Pulses,” *Opt. Express* **21**, 5269–5274 (2013).

M. NAKAJIMA, H. TOYOSHIMA, S. SATO, K. TANAKA, K. HOSHINA, H. KOHGUCHI, Y. SUMIYOSHI, Y. OHSHIMA and Y. ENDO, “Electronic Spectroscopy of the HCCN Radical,” *J. Chem. Phys.* **138**, 164309 (10 pages) (2013).

M. HAYASHI and Y. OHSHIMA, “Sub-Doppler Electronic Spectra of the Benzene–(He)_n Complexes,” *Chem. Phys.* **419**, 131–137 (2013).

M. HAYASHI and Y. OHSHIMA, “Sub-Doppler Electronic Spectra of the Benzene–(H₂)_n Complexes,” *J. Phys. Chem. A* **117**, 9819–9830 (2013).

K. MIZUSE and A. FUJII, “Infrared Spectroscopy of Large Protonated Water Clusters H⁺(H₂O)_{20–50} Cooled by Inert Gas Attachment,” *Chem. Phys.* **419**, 2–7 (2013).

B-3) 総説、著書

A. FUJII and K. MIZUSE, “Infrared Spectroscopic Studies on Hydrogen-Bonded Water Networks in Gas Phase Clusters,” *Int. Rev. Phys. Chem.* **32**, 266–307 (2013).

B-4) 招待講演

Y. OHSHIMA, “Coherent excitation of molecular motion by intense ultrashort pulses,” IMS Workshop on “Hierarchical Molecular Dynamics: From Ultrafast Spectroscopy to Single Molecule Measurements,” Okazaki (Japan), May 2013.

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-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ー化」, 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。さらに、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も順調に進んでいる。早期に、回転量子波束の4Dイメージングを実現したい。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。現在、性能や操作性の向上を目指した改良を行っている。このバージョンアップが終了次第、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
- g) バルク固体の極限コヒーレント制御

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) コヒーレント制御は、物質の波動関数の位相を操作する技術である。その応用は、量子コンピューティングや結合選択的な化学反応制御といった新たなテクノロジーの開発に密接に結び付いている。コヒーレント制御を実現するための有望な戦略の一つとして、物質の波動関数に波としての光の位相を転写する方法が考えられる。例えば、二原子分子に核の振動周期よりも短い光パルス照射すると、「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) 極低温リユ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。
- g) バルク固体中の原子の超高速2次元運動をフェムト秒単位で制御し画像化する新しい光技術を開発した。

B-1) 学術論文

H. KATSUKI, Y. KAYANUMA and K. OHMORI, “Optically Engineered Quantum Interference of Delocalized Wavefunctions in a Bulk Solid: The Example of Solid Para-Hydrogen,” *Phys. Rev. B* **88**, 014507 (6 pages) (2013).

T. BREDTMANN, H. KATSUKI, J. MANZ, K. OHMORI and C. STEMMLE, “Wavepacket Interferometry for Nuclear Densities and Flux Densities,” *Mol. Phys.* **111**, 1691–1696 (2013).

H. KATSUKI, J. C. DELAGNES, K. HOSAKA, K. ISHIOKA, H. CHIBA, E. S. ZIJLSTRA, M. E. GARCIA, H. TAKAHASHI, K. WATANABE, M. KITAJIMA, Y. MATSUMOTO, K. G. NAKAMURA and K. OHMORI, “All-Optical Control and Visualization of Ultrafast Two-Dimensional Atomic Motions in a Single Crystal of Bismuth,” *Nat. Commun.* **4**, 2801 (2013).

B-4) 招待講演

K. OHMORI, “Ultrafast Coherent Control of an Ultracold Rydberg Gas,” Laser Science XXIX, (the 29th Annual Meeting of the American Physical Society), Hilton Bonnet Creek, Orlando (U.S.A.), October 2013.

K. OHMORI, “Ultrafast Coherent Control of an Ultracold Rydberg Gas,” Conference on Quantum Information and Quantum Control, Fields Institute, Toronto (Canada), August 2013.

K. OHMORI, “Ultrafast Coherent Control of an Ultracold Rydberg Gas,” Gordon Research Conference on “Quantm Control of Light and Matter,” Mount Holyoke College, South Hadley (U.S.A.), July–August 2013.

K. OHMORI, “Ultrafast Coherent Control of an Ultracold Rydberg Gas,” Quantum Dynamics and Spectroscopy in Condensed-Phase Materials and Bio-Systems, TSRC, Telluride (USA), July 2013.

K. OHMORI, “Spatiotemporal Quantum Engineering with Picometer and Attosecond Precision,” Strasbourg Physique Seminaires, Strasbourg University, Strasbourg (France), May 2013.

K. OHMORI, “Spatiotemporal Quantum Engineering with Picometer and Attosecond Precision,” Atomic and laser physics seminar series, Department of Physics, University of Oxford, Oxford (U.K.), May 2013.

K. OHMORI, “Ultrafast Coherent Control of an Ultracold Rydberg Gas,” The 11th US-Japan Joint Seminar on Quantum Electronics and Laser Spectroscopy (The US-Japan QELS-11) “Ultimate Quantum Systems of Light and Matter—Control and Applications,” Nara (Japan), April 2013.

N. TAKEI, “Ultrafast coherent control of an ultracold Rydberg gas,” 15th Japan-Korea Symposium on Molecular Science: Hierarchical Structure from Quantum to Functions of Biological Systems, Hotel Kitano Plaza Rokkoso, Kobe (Japan), July 2013.

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).
The 72nd Okazaki Conference on “Ultimate Control of Coherence” 組織委員 (2013).
A Peter Wall Colloquium Abroad and The 73rd Okazaki Conference on “Coherent and Incoherent Wave Packet Dynamics” 組織委員 (2013).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会日仏先端科学シンポジウム PGM (2010–2012).
日本学術振興会 HOPE ミーティング事業委員 (2012–).
日本学術振興会日独学術コロキウム 学術幹事 (2014).
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

University of Heidelberg, 客員教授, 2012年-。

名古屋大学大学院理学研究科, 特別講義「量子動力学」, 2013年1月17日-18日。

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) 軟X線吸収分光法，光電子分光法による分子間相互作用の研究
- b) 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) 軟X線吸収分光法，光電子分光法による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, H. YUZAWA, T. HORIGOME, A. P. HITCHCOCK and N. KOSUGI, “Electrochemical Reaction of Aqueous Iron Sulfate Solutions Studied by Fe L-Edge Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. C* **117**, 16343–16348 (2013).

H. YAMANE and N. KOSUGI, “Substituent-Induced Intermolecular Interaction in Organic Crystals Revealed by Precise Band-Dispersion Measurements,” *Phys. Rev. Lett.* **111**, 086602 (5 pages) (2013).

H. YAMANE, N. KOSUGI and T. HATSUI, “Transmission-Grating Spectrometer for Highly Efficient and High-Resolution Soft X-Ray Emission Studies,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **188**, 155–160 (2013).

J. PARK, S. W. JUNG, M.-C. JUNG, H. YAMANE, N. KOSUGI and H. W. YEOM, “Self-Assembled Nanowires with Giant Rashba Split Bands,” *Phys. Rev. Lett.* **110**, 036801 (5 pages) (2013).

T. YAJIMA, S. SAKAKIBARA, S. NARITSUKA, H. YAMANE, N. KOSUGI and T. MARUYAMA, “Formation of Carbon Nanotube/n-Type 6H-SiC Heterojunction by Surface Decomposition of SiC and Its Electric Properties,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **52**, 06GD01 (4 pages) (2013).

S. B. SINGH, L. T. YANG, Y. F. WANG, Y. C. SHAO, C. W. CHIANG, J. W. CHIOU, K. T. LIN, S. C. CHEN, B. Y. WANG, C. H. CHUANG, D. C. LING, W. F. PONG, M.-H. TSAI, H. M. TSAI, C. W. PAO, H. W. SHIU, C. H. CHEN, H.-J. LIN, J. F. LEE, H. YAMANE and N. KOSUGI, “Correlation between p-Type Conductivity and Electronic Structure of Cr-Deficient $\text{CuCr}_{1-x}\text{O}_2$ ($x = 0-0.1$),” *Phys. Rev. B* **86**, 241103(R) (6 pages) (2012).

V. KIMBERG, A. LINDBLAD, J. SOEDERSTROEM, O. TRAVNIKOVA, C. NICOLAS, Y. P. SUN, F. GEL’MUKHANOV, N. KOSUGI and C. MIRON, “Single-Molecule X-Ray Interferometry: Controlling Coupled Electron–Nuclear Quantum Dynamics and Imaging Molecular Potentials by Ultrahigh-Resolution Resonant Photoemission and Ab Initio Calculations,” *Phys. Rev. X* **3**, 011017 (16 pages) (2013).

B. DIERKER, E. SULJOTI, K. ATAK, K. M. LANGE, N. ENGEL, R. GOLNAK, M. DANTZ, K. HODECK, M. KHAN, N. KOSUGI and E. F. AZIZ, “Probing Orbital Symmetry in Solution: Polarization-Dependent Resonant Inelastic Soft X-Ray Scattering on Liquid Micro-Jet,” *New J. Phys.* **15**, 093025 (10 pages) (2013).

B-4) 招待講演

H. YAMANE, “Precise ARPES Experiments on Weakly Interacting Molecular Systems: New and Deeper Insights into Organic Electronic Properties,” International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics VUVX2013, Hefei (China), July 2013.

N. KOSUGI, “X-ray absorption spectroscopy applied to molecular gas, liquid and solid: Experiment and theory,” Special Lecture on Physical & Theoretical Chemistry, Institute of Chemistry and Biochemistry, Free University Berlin, Berlin (Germany), June 2013.

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).

長坂将成, 日本放射光学会奨励賞 (2013).

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, 先端のリング型光源計画 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 (2008–2013).

ICISS 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).

ICISS-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).

ICISS-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 (2008-2014).

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 AOFSSR 国際諮問委員及びプログラム委員 (2007, 2009).

極紫外・軟X線放射光源計画検討会議光源仕様レビュー委員会委員 (2001-2002).

SPring-8 評価委員会委員 (2002, 2003, 2004), 専用施設審査委員会委員 (2007-2010), 登録機関利用活動評価委員会委員 (2008).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光共同利用実験審査委員 (1997-2001), 放射光研究施設評価分科会委員 (2001-2002), 放射光戦略ワーキンググループ会議委員 (2007-2009), 放射光科学国際諮問委員会電子物性分科会委員 (2008).

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

台湾放射光科学国際諮問委員会委員 (2008-2011).

台湾中央研究院研究計画審査委員 (2010-2012).

フィンランド Oulu 大学物理学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、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、国際共同研究に大きく貢献している。特に、最も基本的な分光法である光吸収分光と光電子分光に重点を置いて、放射光の分子科学応用を展開してきた。UVSOR-I から UVSOR-II に高度化されたことで、吸収エネルギーや光電子エネルギーの meV オーダーシフトが観測できるようになり、孤立分子や固体を対象とした研究から、クラスター、液体・溶液、有機薄膜などの弱い分子間相互作用系の局所構造解析を可能とした。さらに、UVSOR-II から UVSOR-III に高度化されたことで、輝度がさらに向上するとともに空間分解能が向上したので、現在、精力的にその場観測や顕微分光を軟X線領域で展開している。次の計画は光源に依存しない方法での時間変化の追跡をこれらの実験に組み合わせることである。

片 柳 英 樹 (助教) (2004 年 10 月 16 日着任)

A-1) 専門領域：物理化学

A-2) 研究課題：

- a) フラーレン類の放射光による解離性光イオン化機構の画像観測法による解明
- b) カーボンナノチューブ (CNT) の気相分光
- c) CNT の色素増感太陽電池 (DSSC) への応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 気相におけるフラーレン類 (C_{60} , C_{70}) の放射光による解離性イオン化の機構を明らかにするため、生成した解離フラグメントイオン $C_{60(70)-2n}^{z+}$ ($n \geq 1$; $z = 1-3$) の散乱速度分布の画像観測を行う装置を開発し、これを用いて各フラグメントの速度分布画像を測定した。この結果から分解反応におけるエネルギー分配やフラグメントの内部温度に関する知見が得られ、良く知られている段階的 C_2 放出機構以外の過程が分解反応に寄与している可能性が示唆された。
- b) 上記課題において、フラーレン類の解離機構を明らかにするために開発された気相分光技術を、CNT に応用する。この目的に用いるための、CNT 分子線源および観測用真空装置を設計している。まず設計の指針として、分子研機器センターの MALDI 装置を用いて CNT の蒸発に適した方法・条件を明らかにするための予備実験を行った。また、本研究の試料として適した、市販の CNT 分散液を選択するため、装置開発室の AFM を利用して各種試料の状態を観察した。その結果、AFM 像から得られた各試料の CNT の長さが、気相での実験には長すぎることがわかったため、CNT の長さを制御する方法の検討を始めた。長さの制御された CNT の気相分光が実施できれば、CNT の種々の性質を長さの関数として測定できると考えている。
- c) DSSC は安価で環境負荷の少ない発電手法として期待されている。DSSC の高性能化、長寿命化に、上記の CNT の気相分光の知見を生かす事を試みている。最も重要な性能である光電変換効率を向上させるためには、発電を担う作用極 (負極) の改良に加えて、対極 (正極) における、電池セルに流入した電子を電解液に戻す、電荷移動反応を高速化する事が重要である。従来対極には触媒として白金が用いられていたが、高価であり、劣化が早いいため、改善の方法が模索されていた。炭素は有望な代替物質として期待されており、CNT を用いた例もある。そこで我々は上記の CNT の気相分光の知見と DSSC の電気化学的な知見を組み合わせ、能率の良い対極を作成する事を試みている。現在までに、簡単な方法で、白金対極と比較しうる効率を持つ CNT 対極を作成できる事がわかった。一方、基礎科学的な観点でも、同じ試料を用いて気相分光および電気化学的手法による測定を行う事で、CNT が関与する電子移動反応についての統一的理解が得られると考えている。

B-10) 競争的資金

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 (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).

科研費基盤研究(C),「カーボンナノチューブ分子線源の開発と、これを用いた分光と気相反応機構の解明」, 片柳英樹 (2012年-2014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

(a)については、当初目的としていた結果を得るための実験は2013年の早期に終了し、装置をUVSOR から引き上げて、現在はデータ解析および論文の作成を行っている。この手法自体は他の分子等にも有効に活用できるものの、現在の装置は試作品であるため、今後は、これを改善した小型軽量で移動及び設置調整が容易な観測用真空装置を製作し、ビームラインのユーザー利用等でも手軽にこの手法を実施できるようにする。これは(b)の装置と兼用する。(b)については、CNTの気相分光を行うための真空装置を早期に作成し、UVSORを利用して、まず気相CNTからの信号を得る事を目指す。初期にはCNTのイオン収量の測定が行いやすいと考えられる。(c)については今のところ試験的な実験を行ったのみであるため、今後系統的に対極を作成し、まず対極のみで電気化学的性質を測定し、これを気相分光の結果と比較して議論する事を目指す。その後電池セル全体の作成を試みる。以上のように、分子研での研究で成果を上げる試みに加えて、転出を前提とし、異動後の研究活動に円滑につながる事を意図して研究計画を工夫することが重要であると認識している。

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
- d) 量子ビームの発生と応用に関する研究

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。UVSOR 施設の次期計画の候補として，高繰り返し極紫外自由電子レーザーの開発を目指した研究開発に着手した。
- 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テラヘルツ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。光陰極を用いた電子源の開発を進めている。また，これら偏極量子ビームの応用研究の開拓を進めている。

B-1) 学術論文

M. HOSAKA, N. YAMAMOTO, Y. TAKASHIMA, C. SZWAJ, M. LE PARQUIRE, C. EVAIN, S. BIELAWSKI, M. ADACHI, T. TANIKAWA, S. KIMURA, M. KATOH, M. SHIMADA and T. TAKAHASHI, “Saturation of the Laser-Induced Narrowband Coherent Synchrotron Radiation Process: Experimental Observation at a Storage Ring,” *Phys. Rev. S. T. Accel. Beams* **16**, 020701 (8 pages) (2013).

M. ADACHI, H. ZEN, T. KONOMI, J. YAMAZAKI, K. HAYASHI and M. KATOH, “Design and Construction of UVSOR-III,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **425**, 042013 (5 pages) (2013).

P. THOMA, A. SCHEURING, S. WUENSCH, K. IL'IN, A. SEMENOV, H-W HUEBERS, V. JUDIN, A-S. MUELLER, N. SMALE, M. ADACHI, S. TANAKA, S. KIMURA, M. KATOH, N. YAMAMOTO, M. HOSAKA, E. ROUSSEL, C. SZWAJ, S. BIELAWSKI and M. SIEGEL, "High-Speed Y-Ba-Cu-O Direct Detection System for Monitoring Picosecond THz Pulses," *IEEE Trans. Terahertz Sci. Tech.* **3**, 81–86 (2013).

Y. TAIRA, H. TOYOKAWA, R. KURODA, N. YAMAMOTO, M. ADACHI, S. TANAKA and M. KATOH, "Photon-Induced Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy Using Ultrashort Laser-Compton-Scattered Gamma-Ray Pulses," *Rev. Sci. Instrum.* **84**, 053305 (5 pages) (2013).

H. NISHINO, M. HOSAKA, M. KATOH and Y. INOUE, "Photoreaction of *rac*-Leucine in Ice by Circularly Polarized Synchrotron Radiation: Temperature-Induced Mechanism Switching from Norrish Type II to Deamination," *Chem. –Eur. J.* **19**, 13929–13936 (2013).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

S. TANAKA, M. ADACHI, K. HAYASHI, M. KATOH, S. KIMURA, E. NAKAMURA, J. YAMAZAKI, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, Y. TAIRA, N. YAMAMOTO, T. TAKAHASHI and H. ZEN, "Construction and Commissioning of Coherent Light Source Experiment Station at UVSOR," *Proc. 34th Internat. Free Electron Laser Conf.*, 460–462 (2012).

T. TOYODA, K. HAYASHI and M. KATOH, "Turn-By-Turn Bpm System Using Coaxial Switches and Arm Microcontroller at UVSOR," *Proc. Internat. Beam Instr. Conf.*, 112–116 (2012).

T. KONOMI, M. ADACHI, J. YAMAZAKI, K. HAYASHI and M. KATOH, "Status of UVSOR-III," *Proc. Internat. Particle Accel. Conf.*, 139–141 (2013).

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).

梶浦陽平, 第10回日本加速器学会年会賞(ポスター部門) (2013).

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, 2013–).

日本放射光学学会評議員 (2006–2009, 2010–2012, 2013–).

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tron光研究センター, 客員教授, 2006年-.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B)(2), 「電子蓄積リングによる遠赤外コヒーレント放射光の生成」, 加藤政博 (2003年-2004年).

科研費基盤研究(B), 「レーザーと電子ビームを用いたテラヘルツコヒーレント放射光の生成」, 加藤政博 (2005年-2007年).

科研費基盤研究(B), 「電子ビームのレーザー微細加工によるコヒーレント光発生」, 加藤政博 (2008年-2010年).

文部科学省光・量子科学研究拠点形成に向けた基盤技術開発プロジェクト 量子ビーム基盤技術開発プログラム, 高度化ビーム技術開発課題, 「リング型光源とレーザーを用いた光発生とその応用」, 加藤政博 (2008年-2012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-2013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tron光源としては世界的にも最高レベルの性能を有するが, 放射光輝度をさらに向上させる改造を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に成功し入射効率の向上へ向けて研究を進めている。真空封止型アンジュレータ1台を設置し, 立上調整を行った。加速器の安定性の向上を目指し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。一方, 施設の将来計画として, 多周回型直線加速器を用いた高繰り返しの極紫外自由電子レーザーの可能性を検討している。また, そのための要素技術開発として, 高エネルギー加速器研究機構などと協力し, 光陰極超伝導RF電子銃の開発を進めている。

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。量子ビーム基盤技術開発プログラムのもと, 2008年度から5年間をかけて, 新しい実験ステーションを完成した。今後さらに実用化に向けて研究開発を進める。

新しい量子ビーム源として, レーザーと電子ビームの相互作用による極短パルスガンマ線の発生に関する研究を進める。偏光可変性や極短パルス特性を活かした利用法の開拓を行う。また, 同じく新たな量子ビーム源として, スピン偏極電子源の開発を進めている。生体物質への照射などを手始めに, 将来的には逆光電子分光なども視野に入れながら, 応用を強く意識して開発に取り組んでいる。

光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

木 村 真 一（准教授）（2002 年 4 月 1 日～2013 年 6 月 30 日）＊）

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。
- 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。2012 年度補正予算により，BL5U をスピン・軌道・角度分解光電子分光ビームラインに高度化する計画が認められ，建設を開始した。一方で，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ており，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

H. MIYAZAKI, H. MITANI, T. HAJIRI, M. MATSUNAMI, T. ITO and S. KIMURA, “Three-Dimensional Angle-Resolved Photoemission Spectra of EuO Thin Film,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **191**, 7–10 (2013).

H. J. IM, M. TSUNEKAWA, T. SAKURADA, M. IWATAKI, K. KAWATA, T. WATANABE, K. TAKEGAHARA, H. MIYAZAKI, M. MATSUNAMI, T. HAJIRI and S. KIMURA, “Strong Correlation Effects in the A-Site Ordered Perovskite $\text{CaCu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$ Revealed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy,” *Phys. Rev. B* **88**, 205133 (5 pages) (2013).

B. KIM, P. KIM, W. JUNG, Y. KIM, Y. KOH, W. KYUNG, J. PARK, M. MATSUNAMI, S. KIMURA, J. S. KIM, J. H. HAN and C. KIM, “Microscopic Mechanism for Asymmetric Charge Distribution in Rashba-Type Surface States and the Origin of the Energy Splitting Scale,” *Phys. Rev. B* **88**, 205408 (7 pages) (2013).

S. TANAKA, M. MATSUNAMI and S. KIMURA, “Electron–Phonon Coupling Investigation via Phonon Dispersion Measurement in Graphite by Angle-Resolved Photoelectron Spectroscopy,” *Sci. Rep.* **3**, 3031 (6 pages) (2013).

- M. AITANI, Y. SAKAMOTO, T. HIRAHARA, M. YAMADA, H. MIYAZAKI, M. MATSUNAMI, S. KIMURA and S. HASEGAWA**, “Fermi Level Tuning of Topological Insulator Thin Films,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **52**, 110112 (8 pages) (2013).
- Y. UFUKTEPE, A. H. FARHA, S. KIMURA, T. HAJIRI, K. IMURA, M. A. AL MAMUN, F. KARADAG, A. A. ELMUSTAFA and H. ELSAYED-ALI**, “Superconducting Niobium Nitride Thin Films by Reactive Pulsed Laser Deposition,” *Thin Solid Films* **545**, 601–607 (2013).
- B. H. MIN, J. B. HONG, J. H. YUN, T. IIZUKA, S. KIMURA, Y. BANG and Y. S. KWON**, “Optical Properties of Iron-Based Superconductor LiFeAs Single Crystal,” *New J. Phys.* **15**, 073029 (13 pages) (2013).
- Y. UFUKTEPE, A. H. FARHA, S. KIMURA, T. HAJIRI, F. KARADAG, M. A. AL MAMUN, A. A. ELMUSTAFA, G. MYNENI and H. E. ELSAYED-ALI**, “Structural, Electronic, and Mechanical Properties of Niobium Nitride Prepared by Thermal Diffusion in Nitrogen,” *Mater. Chem. Phys.* **141**, 393–400 (2013).
- M. MATSUNAMI, T. HAJIRI, H. MIYAZAKI, M. KOSAKA and S. KIMURA**, “Strongly Hybridized Electronic Structure of YbAl₂: An Angle-Resolved Photoemission Study,” *Phys. Rev. B* **87**, 165141 (5 pages) (2013).
- T. WATANABE, K. OKIMURA, T. HAJIRI, S. KIMURA and J. SAKAI**, “Phase Selective Growth and Characterization of Vanadium Dioxide Films on Silicon Substrates,” *J. Appl. Phys.* **113**, 163503 (6 pages) (2013).
- J. YAMAGUCHI, A. SEKIYAMA, M. Y. KIMURA, H. SUGIYAMA, Y. TOMIDA, G. FUNABASHI, S. KOMORI, T. BALASHOV, W. WULFHEKEL, T. ITO, S. KIMURA, A. HIGASHIYA, K. TAMASAKU, M. YABASHI, T. ISHIKAWA, S. YEO, S.-I. LEE, F. IGA, T. TAKABATAKE and S. SUGA**, “Different Evolution of Intrinsic Gap in Strongly Correlated SmB₆ in Contrast to YbB₁₂,” *New J. Phys.* **15**, 043042 (12 pages) (2013).
- V. GURITANU, P. WISSGOTT, T. WEIG, H. WINKLER, J. SICHELSCHEIDT, M. SCHEFFLER, A. PROKOFIEV, S. KIMURA, T. IIZUKA, A. M. STRYDOM, M. DRESSEL, F. STEGLICH, K. HELD and S. PASCHEN**, “Anisotropic Optical Conductivity of the Putative Kondo Insulator CeRu₄Sn₆,” *Phys. Rev. B* **87**, 115129 (5 pages) (2013).
- M. HOSAKA, N. YAMAMOTO, Y. TAKASHIMA, C. SZWAJ, M. LE PARQUIER, C. EVAIN, S. BIELAWSKI, M. ADACHI, H. ZEN, T. TANIKAWA, S. KIMURA, M. KATOH, M. SHIMADA and T. TAKAHASHI**, “Saturation of the Laser-Induced Narrowband Coherent Synchrotron Radiation Process: Experimental Observation at a Storage Ring,” *Phys. Rev. S. T. Accel. Beams* **16**, 020701 (8 pages) (2013).
- J. SICHELSCHEIDT, A. HERZOG, H. S. JEEVAN, C. GEIBEL, F. STEGLICH, T. IIZUKA and S. KIMURA**, “Far-Infrared Optical Conductivity of CeCu₂Si₂,” *J. Phys.: Condens. Matter* **25**, 065602 (4 pages) (2013).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- K. IMURA, T. HAJIRI, M. MATSUNAMI, S. KIMURA, M. KANEKO, T. ITO, Y. NISHI, N. K. SATO and H. S. SUZUKI**, “Angle Resolved Photoemission Spectroscopy on Mixed-Valent Sm_{1-x}Y_xS,” *J. Korean Phys. Soc.* **62**, 2028–2032 (2013).
- P. THOMA, A. SCHEURING, S. WÜNSCH, K. IL’IN, A. SEMENOV, H.-W. HÜBERS, V. JUDIN, A.-S. MÜLLER, N. SMALE, M. ADACHI, S. TANAKA, S. KIMURA, M. KATOH, N. YAMAMOTO, M. HOSAKA, E. ROUSSEL, C. SZWAJ, S. BIELAWSKI and M. SIEGEL**, “High-Speed Y-Ba-Cu-O Direct Detection System for Monitoring Picosecond THz Pulses,” *IEEE Trans. Terahertz Sci. Tech.* **3**, 81–86 (2013).

B-3) 総説, 著書

S. KIMURA and H. OKAMURA, “Infrared and Terahertz Spectroscopy of Strongly Correlated Electron Systems under Extreme Conditions,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 021004 (28 pages) (2013).

木村真一, 「インジウム化セリウムの磁性・非磁性境界の電子構造」, 「高温超伝導現象と用途開発最前線」, エヌ・ティー・エス, pp. 460–466 (2013).

B-4) 招待講演

T. HAJIRI, T. ITO, R. NIWA, S. HIRATE, M. MATSUNAMI, B. H. MIN, Y. S. KWON and S. KIMURA, “Polarization-dependent three-dimensional ARPES study on $\text{Li}_{1+x}\text{FeAs}$ ($x = 0, 0.2$),” EMN Workshop on Iron-based Superconductors, Houston (U.S.A.), January 2013.

S. KIMURA, “Generation and Applications of THz Coherent Synchrotron Radiation,” International Symposium on Advanced Synchrotron Light and Material Sciences, Tosu (Japan), March 2013.

S. KIMURA, “Infrared and Terahertz Synchrotron Radiation,” 2nd International Henry Moseley School and Workshop on X-ray Science, Turunç (Turkey), June 2013.

S. KIMURA, “IR and THz SR in Japan,” German Science Days in Kyoto, Workshop 7 “Use of Accelerator-Based Photon Sources: Present Status and Perspectives,” Kyoto (Japan), October, 2013.

木村真一, 「UVSOR-III における真空紫外物性研究の現状と将来」, 物性研短期研究会「真空紫外・軟X線放射光物性研究の将来」, 柏, 2013年5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

8th International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources, Member of International Advisory Committee (Long Island, U.S.A., September 2015).

The 1st Conference on Laser and Synchrotron Radiation Combination Experiment 2014, Member of Steering Committee (Yokohama, Japan, April 2014).

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, 2013-2014).

(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

東京大学物性研究所, 嘱託研究員, 1995年4月-.

B-10) 競争的資金

文部科学省国家課題対応型研究開発推進事業「光・量子融合連携研究開発プログラム」, 「レーザー・放射光融合による光エネルギー変換機構の解明」, 「コヒーレント・テラヘルツ放射光, 逆光電子分光法による光ダイナミクス研究」, 木村真一 (2013年-2017年).

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).

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として, 放射光を使った角度分解光電子分光と赤外・テラヘルツ分光を推進し, いくつかの成果が得られた。これまでにやり残したことの1つとして, スピン・軌道・運動量を分解した電子構造の完全実験を可能にするビー

ムラインの開発を今後1,2年で行っていく。また、テラヘルツポンプ・光電子プローブ分光の開発も進める。さらに、研究分野を物質科学・分子科学のみならず、生命科学へも展開していきたい。

※) 2013 年 7 月 1 日大阪大学大学院生命機能研究科教授

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) 内殻電子励起ダイナミクスの研究
- b) 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
- c) 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
- d) 発光分光法による短波長強レーザー場中の原子分子過程の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 我々の専用ビームライン BL6U は、40 ～ 400 eV の光エネルギー範囲において、分解能 10000 以上かつ光強度 10^{10} 光子数／秒以上の性能を有しており、低エネルギー領域における世界最先端ビームラインの一つである。2009年初秋以降、気体の高分解能電子分光を行うための実験装置の整備、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、原子や分子の内殻電子励起状態や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。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を協力研究として進めている。
- b) 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格段に深まった。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。
- c) 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。
- d) 日本のX線自由電子レーザー（XFEL）、SACLA の試験加速器として SPring-8 サイトに建設された SCSS において、極端紫外領域の強レーザー光に曝された原子分子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来た。SCSS の運転停止・移設に伴い、SACLA での発光分光実験を行っている。SACLA の利用研究として、Kr 原子に XFEL を集光照射し、二つの 1s 電子を剥ぎ取った、中空原子（内殻二正孔状態）の観測に世界に先駆けて成功した。今後も、二光子吸収など、X線領域における非線形過程の直接観測を目指した実験研究を進める。

B-1) 学術論文

H. IWAYAMA, N. SISOURAT, P. LABLANQUIE, F. PENENT, J. PALAUDOUX, L. ANDRIC, J. H. D. ELAND, K. BUČAR, M. ŽITNIK, Y. VELKOV, Y. HIKOSAKA, M. NAKANO and E. SHIGEMASA, “A Local Chemical Environment Effect in Site-Specific Auger Spectra of Ethyl Trifluoroacetate,” *J. Chem. Phys.* **138**, 024306 (6 pages) (2013).

- S.-M. HUTTULA, P. LABLANQUIE, L. ANDRIC, J. PALAUDOUX, M. HUTTULA, S. SHEINERMAN, E. SHIGEMASA, Y. HIKOSAKA, K. ITO and F. PENENT**, “Decay of a 2p Inner-Shell Hole in an Ar⁺ Ion,” *Phys. Rev. Lett.* **110**, 113002 (5 pages) (2013).
- M. NAKANO, F. PENENT, M. TASHIRO, T. P. GROZDANOV, M. ŽITNIK, S. CARNIATO, P. SELLES, L. ANDRIC, P. LABLANQUIE, J. PALAUDOUX, E. SHIGEMASA, H. IWAYAMA, Y. HIKOSAKA, K. SOEJIMA, I. H. SUZUKI, N. KOUCHI and K. ITO**, “Single Photon K⁻² and K⁻¹K⁻¹ Double Core Ionization in C₂H_{2n} (n = 1–3), CO, and N₂ as a Potential New Tool for Chemical Analysis,” *Phys. Rev. Lett.* **110**, 163001 (5 pages) (2013).
- M. N. PIANCASTELLI, R. GUILLEMIN, M. SIMON, H. IWAYAMA and E. SHIGEMASA**, “Ultrafast Dynamics in C 1s Core-Excited CF₄ Revealed by Two-Dimensional Resonant Auger Spectroscopy,” *J. Chem. Phys.* **138**, 234305 (5 pages) (2013).
- K. TAMASAKU, M. NAGASONO, H. IWAYAMA, E. SHIGEMASA, Y. INUBUSHI, T. TANAKA, K. TONO, T. TOGASHI, T. SATO, T. KATAYAMA, T. KAMESHIMA, T. HATSUI, M. YABASHI and T. ISHIKAWA**, “Double Core-Hole Creation by Sequential Attosecond Photoionization,” *Phys. Rev. Lett.* **111**, 043001 (5 pages) (2013).
- M. YABASHI, H. TANAKA, T. TANAKA, H. TOMIZAWA, T. TOGASHI, M. NAGASONO, T. ISHIKAWA, J. R. HARRIES, Y. HIKOSAKA, A. HISHIKAWA, K. NAGAYA, N. SAITO, E. SHIGEMASA and K. UEDA**, “Compact XFEL and AMO Sciences: SACLA and SCSS,” *J. Phys. B* **46**, 164001 (19 pages) (2013).
- Y. HIKOSAKA, M. FUSHITANI, A. MATSUDA, T. ENDO, Y. TOIDA, E. SHIGEMASA, M. NAGASONO, K. TONO, T. TOGASHI, M. YABASHI, T. ISHIKAWA and A. HISHIKAWA**, “Resonances in Three-Photon Double Ionization of Ar in Intense Extreme-Ultraviolet Free-Electron Laser Fields Studied by Shot-by-Shot Photoelectron Spectroscopy,” *Phys. Rev. A* **88**, 023421 (6 pages) (2013).
- E. SHIGEMASA, M. NAGASONO, H. IWAYAMA, J. R. HARRIES and L. ISHIKAWA (OKIHARA)**, “Resonance-Enhanced Three-Photon Single Ionization of Ne by Ultrashort Extreme-Ultraviolet Pulses,” *J. Phys. B* **46**, 164020 (5 pages) (2013).
- J. R. HARRIES, M. NAGASONO, H. IWAYAMA and E. SHIGEMASA**, “Towards Coherent Control of SASE Pulses Using Propagation through Helium Gas at Wavelengths Corresponding to Double Excitation,” *J. Phys. B* **46**, 164021 (5 pages) (2013).
- H. IWAYAMA, K. NAGAYA, M. YAO, X. J. LIU, G. PRÜMPER, K. MOTOMURA, K. UEDA, N. SAITO, A. RUDENKO, L. FOUCAR, M. NAGASONO, A. HIGASHIYA, M. YABASHI, T. ISHIKAWA, H. OHASHI and H. KIMURA**, “Frustration of Photoionization of Ar Nanoplasma Produced by Extreme Ultraviolet FEL Pulses,” *J. Phys. B* **46**, 164019 (6 pages) (2013).
- M. NAKANO, P. SELLES, P. LABLANQUIE, Y. HIKOSAKA, F. PENENT, E. SHIGEMASA, K. ITO and S. CARNIATO**, “Near-Edge X-Ray Absorption Fine Structures Revealed in Core Ionization Photoelectron Spectroscopy,” *Phys. Rev. Lett.* **111**, 123001 (5 pages) (2013).

B-4) 招待講演

- H. IWAYAMA**, “Collective spontaneous emission of He gas irradiated by intense EUV-FEL pulses,” Intense Field, Short Wavelength Atomic and Molecular Processes-2, Xi’an (China), July 2013.

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 (シンクロトン放射装置技術国際会議) プログラム委員 (2005).

第22回化学反応討論会実行委員 (2006).

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

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

第2回 AOFSSR (放射光研究アジア–オセアニアフォーラム) プログラム委員 (2007).

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

第24回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2010).

第25回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2011).

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共同利用施設専門委員 (2005–2006).

(財) 高輝度光科学研究センター利用研究課題選定委員会選定委員 (2007–2009, 2013–).

(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 (2011–2012).

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, Elsevier, Guest Editor (2010).

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 (2010–2012). (岩山洋士)

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「基礎光科学」, 2013年12月3日–6日.

名古屋大学小型シンクロトン光研究センター, 客員准教授, 2007年9月–.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「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継続し, 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する。これにより, 内殻電子励起状態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。これにより, 短波長領域での強レーザー場に対する原子分子過程の本質的理解を得たい。

先端レーザー開発研究部門（分子制御レーザー開発研究センター）

平 等 拓 範（准教授）（1998年2月1日着任）

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

A-2) 研究課題：

- a) マイクロドメイン構造制御に関する研究
- b) マイクロドメイン光制御に関する研究
- c) マイクロ固体フォトリニクス展開

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リニクス [マイクロチップ Nd:YVO₄ レーザー（1990年），Yb:YAG レーザー（1993年），セラミックレーザー（1997年），バルク擬位相整合（QPM）素子：大口径周期分極反転 MgO:LiNbO₃（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，新たなフォトリ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，YVO₄ の高熱伝導率特性の発見，実証に繋がったばかりでなく，マイクロ共振器の高輝度効果，レーザー利得と非線形光学過程の量子相関などの興味深い展開も見せている。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 1.5 サイクル中赤外光からのコヒーレント軟 X 線（波長：～5 nm）・アト秒（200～300 as）発生などをマイクロ固体フォトリニクスで実証した。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，さらには世界ではじめての自動車エンジン搭載，走行実験に成功した。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

K. FURUI, J. HAYASHI, T. OKADA, N. NAKATSUKA, T. TAIRA, T. HORI and F. AKAMATSU, “Study on Laser Induced Ignition for Methane-Air Mixtures with Pico-Second Pulse Duration Laser,” *Trans. Jpn. Soc. Mech. Eng. B* **78**, 2004–2014 (2012). (in Japanese)

M. HEMMER, A. THAI, M. BAUDISCH, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and J. BIEGERT, “18- μ J Energy, 160-kHz Repetition Rate, 250-MW Peak Power Mid-IR OPCPA,” *Chin. Opt. Lett.* **11**, 013202 (3 pages) (2013).

V. KEMLIN, D. JEGOUSO, J. DEBRAY, P. SEGONDS, B. BOULANGER, B. MENAERT, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Widely Tunable Optical Parametric Oscillator in a 5 mm-Thick 5%MgO:PPLN Partial Cylinder,” *Opt. Lett.* **38**, 860–862 (2013).

M. TSUNEKANE, N. PAVEL and T. TAIRA, “Simultaneously 3-Point Ignitable, Nd:YAG/Cr:YAG Ceramic Micro-Lasers,” *Rev. Laser Eng.* **41**, 119–124 (2013). (in Japanese)

M. TSUNEKANE and T. TAIRA, “High Peak Power, Passively Q-Switched Yb:YAG/Cr:YAG Micro-Lasers,” *IEEE J. Quantum Electron.* **49**, 454–461 (2013).

Y. SATO, J. AKIYAMA and T. TAIRA, “Orientation Control of Micro-Domains in Anisotropic Laser Ceramics,” *Opt. Mater. Express* **3**, 829–841 (2013).

R. BHANDARI and T. TAIRA, “Palm-Top Size Megawatt Peak Power Ultraviolet Microlaser,” *Opt. Eng.* **52**, 076102 (6 pages) (2013).

R. BHANDARI, N. TSUJI, T. SUZUKI, M. NISHIFUJI and T. TAIRA, “Efficient Second to Ninth Harmonic Generation Using Megawatt Peak Power Microchip Laser,” *Opt. Express* **21**, 28849–28855 (2013).

V. KEMLIN, D. JEGOUSO, J. DEBRAY, E. BOURSIER, P. SEGONDS, B. BOULANGER, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, G. MENNERAT, J. MELKONIAN and A. GODARD, “Dual-Wavelength Source from 5%MgO:PPLN Cylinders for the Characterization of Nonlinear Infrared Crystals,” *Opt. Express* **21**, 28886–28891 (2013).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. SATO and T. TAIRA, “Fundamental Sciences in Orientation Control Process for Anisotropic Laser Ceramics,” *8th Laser Ceramics Symposium: International Symposium on Transparent Ceramics for Photonic Applications (LCS8)* (2012).

R. BHANDARI and T. TAIRA, “Megawatt Peak Power UV Microlaser,” *SPIE Photonics West, San Francisco*, 8604-4 (2013).

T. TAIRA, “Laser Ignition,” *Session A, Joint Plenary Sessions, OPTICS & PHOTONICS International Congress 2013 (OPIC '13)* (2013).

R. BHANDARI and T. TAIRA, “High Repetition Rate MW Peak Power Green Microchip Laser,” *The 1st Laser Ignition Conference (LIC'13), OPIC'13, LDC/LIC1-3* (2013).

M. HEMMER, A. THAI, M. BAUDISCH, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and J. BIEGERT, “3.1 μ m Wavelength, 19 μ J Energy, 160 kHz Repetition Rate OPCPA for Strong-Field Physics,” *The 2nd Advanced Lasers and Photon Sources (ALPS'13), OPIC'13, ALPS1-4* (2013).

- Y. SATO and T. TAIRA**, “Temperature Dependence of the Pump Absorption Efficiency under Hot-Band Pumping of Nd:YAG,” *The 1st Laser Ignition Conference (LIC’13), OPIC’13*, LIC2-2 (2013).
- M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “Ignition Lasers Operating for Wide Temperature Range,” *The 1st Laser Ignition Conference (LIC’13), OPIC’13*, LIC2-3 (2013).
- A. KAUSAS and T. TAIRA**, “Pulse Energy Increase by Emission Cross-Section Control in Passively Q-Switched Nd:YVO₄/Cr⁴⁺:YAG laser,” *The 1st Laser Ignition Conference (LIC’13), OPIC’13*, LIC2-4 (2013).
- T. TAIRA, S. MORISHIMA, K. KANEHARA, N. TAGUCHI, A. SUGIURA and M. TSUNEKANE**, “World First Laser Ignited Gasoline Engine Vehicle,” *The 1st Laser Ignition Conference (LIC’13), OPIC’13*, LIC3-1 (2013).
- M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “Yb:YAG/Cr:YAG Passively Q-Switched Microlaser for Ignition,” *The 1st Laser Ignition Conference (LIC’13), OPIC’13*, LIC4-4 (2013).
- J. HAYASHI, N. NAKATSUKA, K. FURUI, T. OKADA, T. TAIRA and F. AKAMATSU**, “Characteristics of Laser Ignition in Methane/Air Premixed Gas with Pico-Second Pulse Duration Laser,” *The 1st Laser Ignition Conference (LIC’13), OPIC’13*, LIC8-5 (2013).
- R. BHANDARI, N. TSUJI, T. SUZUKI, M. NISHIFUJI and T. TAIRA**, “118 nm VUV Generation Using Microchip Laser,” *CLEO/Europe-IQEC 2013*, CA-1.1 (2013).
- A. THAI, M. BAUDISCH, M. HEMMER, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and J. BIEGERT**, “250 MW Peak Power Ultrafast Mid-IR OPCPA,” *CLEO/Europe-IQEC 2013*, CF/IE-9.6 (2013).
- T. TAIRA**, “Impact of Giant Microphotonics at Pulse Gap,” *Pacific-Rim Laser Damage 2013*, 8786-18 (2013).
- M. HEMMER, A. THAI, M. BAUDISH, F. SILVA, D. R. AUSTIN, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, A. COUAIRON, D. FACCIO and J. BIEGERT**, “High Average Power Few-Cycle Pulses in the Mid-IR, Self-Compression and Continuum Generation,” *CLEO 2013*, CM2L.3 (2013).
- R. BHANDARI and T. TAIRA**, “High Repetition Rate MW Peak Power at 532 nm Using Microchip Laser,” *CLEO 2013*, SJW2A.26 (2013).
- A. KAUSAS and T. TAIRA**, “Pulse Energy Increase by Emission Cross-Section Control in Passively Q-Switched Nd:YVO₄/Cr⁴⁺:YAG Laser,” *CLEO 2013*, CTh4I.3 (2013).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Discussions on the Pump Absorption Efficiency Under Hot-Band Pumping of Nd:YAG,” *CLEO 2013*, CTh4I.5 (2013).
- R. BHANDARI, N. TSUJI, T. SUZUKI, M. NISHIFUJI and T. TAIRA**, “Efficient Second to Ninth Harmonic Generation Using Megawatt Peak Power Microchip Laser,” *2013 Nonlinear Optics (NLO)*, NM1A.4 (2013).
- V. KEMLIN, D. JEGOUSO, J. DEBRAY, E. BOURSIER, P. SEGONDS, B. BOULANGER, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and G. MENNERAT**, “Widely and Independently Tunable Cylindrical OPOs for Difference Frequency Generation Experiments,” *2013 Nonlinear Optics (NLO)*, NTu2B.1 (2013).
- T. TAIRA and H. ISHIZUKI**, “Large-Aperture PPMgLN for High Energy Parametric Process,” *2013 Nonlinear Optics (NLO)*, NTu2B.3 (2013).
- M. ARZAKANTSYAN, J. AKIYAMA, Y. SATO and T. TAIRA**, “Optical Characterization of Yb Doped Fluorapatite Anisotropic Ceramics,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, AM1A.4 (2013).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Characterization of 8 mol% Mg-Doped Congruent LiTaO₃ for High-Energy Quasi-Phase Matching Device,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, AM4A.15 (2013).

- Y. SATO and T. TAIRA**, “Accurate Interferometric Evaluation of Thermo-Mechanical and -Optical Properties of YAG, YVO₄, and GdVO₄,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, AM4A.16 (2013).
- S. ILAS, A. SZEMJONOV, P. LOISEAU, G. AKA and T. TAIRA**, “Growth and Characterization of YAl₃(BO₃)₄ Single Crystals,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, AM4A.19 (2013).
- M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “Compact and Wide Temperature Acceptance of VCSEL-Pumped Micro-Laser for Laser Ignition,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, ATu3A.58 (2013).
- V. KEMLIN, D. JEGOUSO, J. DEBRAY, E. BOURSIER, P. SEGONDS, B. BOULANGER, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and G. MENNERAT**, “All-Parametric Dual-Wavelength Source for Difference Frequency Generation Experiments,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, MW3B.10 (2013).
- M. BAUDISCH, A. THAI, M. HEMMER, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and J. BIEGERT**, “5-Cycle, 160-kHz, 20-μJ Mid-IR OPCPA,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, AF1A.7 (2013).
- R. BHANDARI and T. TAIRA**, “Megawatt Peak Power, kHz Repetition Rate at 532 nm Using [100]-Cut Nd:YAG Microchip Laser,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, AF2A.8 (2013).
- T. TAIRA**, “Giant Micro-Photonics for Laser Ignition,” *International Workshop on Luminescent Materials 2013 (LumiMat’13)*, I-3 (2013).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Micro Domain Control for Anisotropic Laser Ceramics,” *International Workshop on Luminescent Materials 2013 (LumiMat’13)*, I-4 (2013).
- M. ARZAKANTSYAN and T. TAIRA**, “Fabrication of Yb:FAP Anisotropic Ceramics,” *9th Laser Ceramics Symposium (2013 LCS)*, E-2 (2013).
- T. TAIRA**, “Giant Micro-Photonics for Energy,” *Optics & Photonics Taiwan, International Conference 2013 (OPTIC 2013)*, 2013-FRI-S0304-I001 (2013).

B-3) 総説, 著書

- 平等拓範, 「レーザー点火」, *レーザー研究* **41**, 3 (2013).
- 平等拓範, 「レーザーエンジン点火」, *オプトロニクス* **32**, 178–181 (2013).
- 平等拓範, 常包正樹, 金原賢治, 森島信悟, 田口信幸, 杉浦明光, 「7. ジャイアントパルスマイクロレーザーによるエンジン点火の可能性」, *プラズマ・核融合学会誌* **89**, 238–241 (2013).
- Y. SATO, J. AKIYAMA, and T. TAIRA**, “Fundamental Investigations in Orientation Control Process for Anisotropic Laser Ceramics,” *Phys. Status Solidi C* **10**, 896–902 (2013).
- 平等拓範, 「先端計測を拓くジャイアントマイクロフォトニクス」, *日本結晶成長学会誌* **40**, 175–183 (2013).
- 齊川次郎, 石垣直也, 宇野進吾, 廣木知之, 東條公資, 井戸豊, 平等拓範, 「全固体深紫外パルスレーザの開発とその応用」, *島津評論* **69**, 293–302 (2013).
- R. BHANDARI and T. TAIRA**, “Megawatt Peak Power UV Microlaser,” *Proceedings of SPIE* **8604**, 860405 (6 pages) (2013).

B-4) 招待講演

- M. ITO**, “Director-General of IMS,” Okazaki Conference, Okazaki (Japan), August 2013.
- 古谷博秀, 平等拓範, 赤松史光, 「レーザ点火技術の今後を考える～レーザ技術と燃焼技術の融合～」, 第50回燃焼シンポジウムワークショップ, 名古屋, 2012年12月.

Y. SATO and T. TAIRA, “Fundamental Sciences in Orientation Control Process for Anisotropic Laser Ceramics,” 8th Lser Ceramics Symposium: International Symposium on Transparent Ceramics for Photonic Applications (LCS8), Nizhny Novgorod (Russia), December 2012.

T. TAIRA, “Solid-state photonics toward giant micro-photonics,” Sokendai Asian Winter School “Frontiers in Photo-Molecular Science,” Okazaki (Japan), January 2013.

S. MORISHIMA, K. KANEHARA, M. TSUNEKANE, T. TAIRA, N. TAGUCHI and A. SUGIURA, “Potential of Laser Ignition Technology for Next Generation SI Engines,” 33rd Annual Meeting of The Laser Society of Japan, Himeji (Japan), January 2013.

T. TAIRA, “Closing Remarks: Prospects of Laser Ignition,” 33rd Annual Meeting of The Laser Society of Japan, Himeji (Japan), January 2013.

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Optical-Parametric Oscillation with 0.5J-Class Output Energy Using 10-mm-Thick PPMgLN Device,” 33rd Annual Meeting of The Laser Society of Japan, Himeji (Japan), January 2013.

平等拓範, 「量子の力でエンジンを回す!~マイクロチップレーザーが拓く次世代火力発電・自動車エンジン~」, 大阪大学技術懇親会「先進光源と産業応用」, 大阪, 2013年2月.

平等拓範, 「マイクロ固体フォトリソの最前線」, 日本光学会(応用物理学会)光波シンセシス研究グループ研究会「未来を切り開く最先端フォトリソ研究」, 仙台, 2013年2月.

平等拓範, 「レーザー点火プラグ——ジャイアントマイクロフォトリソへの誘い」, 光産業技術振興協会第4回光材料・応用技術研究会/日本フォトリソ協議会2013年3月定例会, 東京, 2013年3月.

平等拓範, 「第1講 イントロダクション」, 第13回レーザー学会東京支部研究会「マイクロチップレーザー光源の研究開発とその実用への展開」, 東京, 2013年3月.

常包正樹, 「第2講 エンジン点火用マイクロチップレーザーの研究開発」, 第13回レーザー学会東京支部研究会「マイクロチップレーザー光源の研究開発とその実用への展開」, 東京, 2013年3月.

佐藤庸一, 「第4講 異方性レーザーセラミックス 磁場配向プロセスの理論」, 第13回レーザー学会東京支部研究会「マイクロチップレーザー光源の研究開発とその実用への展開」, 東京, 2013年3月.

ラケシュ・バンダリ, 「第5講 マイクロチップレーザーによるメガワットUV発生」, 第13回レーザー学会東京支部研究会「マイクロチップレーザー光源の研究開発とその実用への展開」, 東京, 2013年3月.

石月秀貴, 「第6講 10mm厚のPPMgLNからの0.5J級出力OPO」, 第13回レーザー学会東京支部研究会「マイクロチップレーザー光源の研究開発とその実用への展開」, 東京, 2013年3月.

平等拓範, 「ジャイアントマイクロフォトリソによるエネルギー変換」, 電子情報通信学会2013年総合大会, 岐阜, 2013年3月.

R. BHANDARI and T. TAIRA, “High Repetition Rate MW Peak Power Green Microchip Laser,” The 1st Laser Ignition Conference '13 (LIC'13), OPIC '13, Yokohama (Japan), April 2013.

M. HEMMER, A. THAI, M. BAUDISCH, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and J. BIEGERT, “3.1 μ m Wavelength, 19 μ J Energy, 160 kHz Repetition Rate OPCPA for Strong-Field Physics,” The 2nd Advanced Lasers and Photon Sources (ALPS'13), OPIC '13, Yokohama (Japan), April 2013.

T. TAIRA, “Laser Ignition,” Session A, Joint Plenary Sessions, OPTICS & PHOTONICS International Congress 2013 (OPIC '13), Yokohama (Japan), April 2013.

T. TAIRA, S. MORISHIMA, K. KANEHARA, N. TAGUCHI, A. SUGIURA and M. TSUNEKANE, “World First Laser Ignited Gasoline Engine Vehicle,” The 1st Laser Ignition Conference ’13 (LIC’13), OPIC ’13, Yokohama (Japan), April 2013.

T. TAIRA, “Impact of Giant Microphotonics at Pulse Gap,” Pacific-Rim Laser Damage 2013, Shanghai (China), May 2013.

M. HEMMER, A. THAI, M. BAUDISH, F. SILVA, D. R. AUSTIN, H. ISKIZUKI, T. TAIRA, A. COUAIRON, D. FACCIO and J. BIEGERT, “High Average Power Few-Cycle Pulses in the Mid-IR, Self-Compression and Continuum Generation,” CLEO 2013, San Jose (U.S.A.), June 2013.

平等拓範, 「ジャイアントマイクロフォトンクスにより拓かれる先端計測」, 日本学術振興会結晶成長の科学と技術第161委員会第82回研究会プログラム「先端計測を拓く結晶材料」, 東京, 2013年7月.

平等拓範, 「マイクロチップレーザーが拓く次世代応用～分子を加工して省エネからモノづくりまで～」, 名古屋国際見本市委員会TECH Biz EXPO 2013, 名古屋, 2013年10月.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics for Laser Ignition,” International Workshop on Luminescent Materials 2013 (LumiMat’13), Kyoto (Japan), November 2013.

Y. SATO and T. TAIRA, “Micro Domain Control for Anisotropic Laser Ceramics,” International Workshop on Luminescent Materials 2013 (LumiMat’13), Kyoto (Japan), November 2013.

T. TAIRA, “Laser Ignitions Toward Giant Micro-Photonics,” ENSCP, Paris (France), November 2013.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics for Energy,” Optics & Photonics Taiwan, International Conference 2013 (OPTIC 2013), Zhongli (Taiwan), December 2013.

T. TAIRA, “High Energy Mid-IR Generation by Using Large-Aperture PPMgLN,” National Chiao Tung University, Hsinchu (Taiwan), December 2013.

B-5) 特許出願

特願 2013-011649, 「光学材料及びその製造方法」, 平等拓範, 秋山 順(自然科学研究機構), 2013年.

特願 2013-013865, 「姿勢調整装置」, 水谷伸雄, バンダリ ラケシュ, 平等拓範(自然科学研究機構), 2013年.

特願 2013-063230, 「半導体レーザー励起固体レーザー装置を利用する車載式点火装置」, 常包正樹, 平等拓範, 金原賢治(自然科学研究機構, (株)日本自動車部品総合研究所, (株)デンソー), 2013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).

NICOLAI 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).

石月秀貴, 平等拓範, 第37回(社)レーザー学会業績賞(進歩賞) (2013).

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 (2011-2013), 事前書面審査 (2013-2016).

レーザー学会評議員 (2005-).

レーザー学会「マイクロ固体フォトンクス」専門委員会主査 (2006-2009).

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 (2008-2012).

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 (2008-2012), 実行委員 (2012-).

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 (2009-2015).

科学技術交流財団「ジャイアントマイクロフォトンクス」研究会座長 (2009-2011).

レーザー学会「マイクロ固体フォトンクスの新展開」専門委員会主査 (2009-2012).

科学技術交流財団「ジャイアントマイクロフォトンクスII」研究会座長 (2011-2013).

レーザー学会「マイクロ固体フォトンクス」技術専門委員会主査 (2012-2015).

科学技術交流財団「ジャイアントマイクロフォトンクスIII」研究会座長 (2013-2015).

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共同統括議長 (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 (2012-2015).

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).
 OSA, 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 (2011–2012).
 Optics & Photonics International Congress 2012 (OPIC2012), Advanced Laser & Photon Source (ALPS 12), 国際会議実行委員会およびプログラム委員会委員 (2011–2012).
 5th EPS Europhoton Conference on “Solid-State and Fiber and Waveguide Coherent Light Sources,” 国際会議分科委員 (2011–).

Laser Damage of SPIE, プログラム委員 (2011-2012).

(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 (2011-2012).

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

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).

International Workshop on Holography and Related Technologies 2013 (IWH 2013), 国際会議プログラム委員会委員 (2013).

Optics & Photonics International Congress 2014 (OPIC2014), 国際会議組織委員会委員 (2013-2014).

9th Laser Ceramics Symposium (LCS): International Symposium on Transparent Ceramics for Photonic Applications, 国際会議諮問委員 (2013).

SPIE Photonics Europe 2014 —Laser Sources and Applications (EPE11I), 国際会議委員会共同議長 (2013-2014).

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-), 幹事 (2008-).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2011-2013).

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 (2011-2014).

学会誌編集委員

Journal of Optical Materials, ELSEVIER, 編集委員会委員 (2010-2013).

Journal of Optical Materials Express, The Optical Society (OSA), シニア編集委員会委員 (2010-2016).

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 (2008-2011).

日本原子力研究開発機構任期付研究員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, 2013年.

仏国国立パリ高等化学学校(ENSCP—Chimie Paris Tech), 客員教授, 2013年.

B-9) 学位授与

KONG, Weipeng, 「Edge-pumped Yb:YAG ceramics microchip laser for high-power mode control」, 2013年9月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

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・機器開発プログラム(機器開発タイプ), 「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-2013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-2012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).

科研費基盤研究(C), 「大口径広帯域擬似位相整合デバイスを用いた高出力超短パルス発生」, 石月秀貴 (2013年-
2015年).

NEDO, 「高性能ジャイアントパルスマイクロチップレーザー(GP-MCL)の開発」, 再委託(研究代表 リコー) (2013年-2014年).

科学技術振興機構先端計測分析技術・機器開発プログラム(実証・実用化タイプ), 「次世代質量イメージング用UVマイク
ロチップレーザー」の実用実証化」, 平等拓範 (2013年-2015年).

B-11) 産学連携

(株)コンボン研究所,「マイクロ固体フォトニクス基礎研究」, 平等拓範 (2013年).

(株)リコー,「高出力レーザー光源の研究」, 平等拓範 (2013年).

(株)デンソー,「高輝度マイクロチップレーザー励起光学系の研究」, 平等拓範 (2013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，2 μm から 20 μm まで波長帯域の広がった超短光パルスのスペクトル情報を失わずに，可視光領域に波長変換することに成功した。この波長変換によって，中赤外スペクトルの情報を，可視光用検出器を使って計測することができるので，この技術によって，高速な赤外分光を行うことが可能となる。
- b) 前述の広帯域中赤外光パルスの光電場波形を直接計測する手法を開発した。光電場波形を計測する手法としては，電気光学サンプリング法が有名だが，現在のところ，テラヘルツ領域など，周波数の低い光についてしか適応できなかった。本研究では，電気光学サンプリング法と周波数分解光ゲート法とを組み合わせることによって，原理的には，測定できる周波数に制限のない方法を確立した。具体的には，前述の 6.9 fs のパルスについて，上記の手法を適応させ，光電場の振動する様子を直接的に観測することに成功した。この手法はプレスリリースされ，新聞にも掲載された。
- 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。トリウムを添加したフッ化物ファイバーをレーザー媒質として，50 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と，長波長への波長変換に適していると同時に，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

Y. NOMURA, H. SHIRAI and T. FUJI, “Frequency-Resolved Optical Gating Capable of Carrier-Envelope Phase Determination,” *Nat. Commun.* **4**, 2820 (11 pages) (2013).

Y. NOMURA, Y.-T. WANG, T. KOZAI, H. SHIRAI, A. YABUSHITA, C. W. LUO, S. NAKANISHI and T. FUJI, “Single-Shot Detection of Mid-Infrared Spectra by Chirped-Pulse Upconversion with Four-Wave Difference Frequency Generation in Gases,” *Opt. Express* **21**, 18249–18254 (2013).

T. FUJI and Y. NOMURA, “Generation of Phase-Stable Sub-Cycle Mid-Infrared Pulses from Filamentation in Nitrogen,” *Appl. Sci.* **3**, 122–138 (2013).

M. YEUNG, B. DROMEY, D. ADAMS, S. COUSENS, R. HÖRLEIN, Y. NOMURA, G. D. TSAKIRIS and M. ZEPF, “Beaming of High-Order Harmonics Generated from Laser–Plasma Interactions,” *Phys. Rev. Lett.* **110**, 165002 (5 pages) (2013).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. NOMURA and T. FUJI, “Coherent control of mid-infrared pulse generation by using four-wave mixing through filamentation,” *UFO IX*, Tu3.6 (2013).

T. FUJI, Y. NOMURA, Y.-T. WANG, A. YABUSHITA and C.-W. LUO, “Single-shot detection of mid-infrared spectra by chirped-pulse upconversion with four-wave difference frequency generation in gases,” *CLEO/Europe-IQEC 2013 (Munich, Germany)*, CF/IE-12.3 (2013).

T. FUJI, Y. NOMURA, Y.-T. WANG, A. YABUSHITA and C.-W. LUO, “Carrier-envelope phase of ultrashort pulses generated by optical rectification process,” *CLEO/Europe-IQEC 2013 (Munich, Germany)*, CF/IE-P.38 (2013).

T. FUJI and Y. NOMURA, “Pulse characterization with absolute carrier-envelope phase value,” *CLEO-PR & OECC/PS 2013 (Kyoto, Japan)*, WB3-3 (2013).

T. FUJI, Y. NOMURA, Y.-T. WANG, A. YABUSHITA, C.-W. LUO, T. KOHZAI and S. NAKANISHI, “Chirped pulse upconversion of mid-infrared pulses with four-wave difference frequency generation in gases,” *CLEO-PR & OECC/PS 2013 (Kyoto, Japan)*, TuC1-5 (2013).

T. FUJI and Y. NOMURA, “Complete waveform characterization of ultrashort pulses,” *CLEO: Science and Innovations 2013 (San Jose, CA, U.S.A.)*, CW1H.8 (2013).

T. FUJI, Y. NOMURA, Y.-T. WANG, A. YABUSHITA and C.-W. LUO, “Mid-infrared chirped-pulse upconversion with four-wave difference frequency generation in gases,” *CLEO: Science and Innovations 2013 (San Jose, CA, U.S.A.)*, JM4K.4 (2013).

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,” *EPJ Web of Conferences* **41**, 11003 (2013)

T. FUJI, Y. NOMURA, H. SHIRAI and N. TSURUMACHI, “Frequency-resolved optical gating with electro-optic sampling,” *EPJ Web of Conferences* **41**, 12001 (2013).

B-4) 招待講演

T. FUJI and Y. NOMURA, “Generation of ultrabroadband infrared continuum by using four-wave mixing through filamentation,” Short Pulse Strong Field Laser Physics International Symposium Honoring See Leang Chin, Quebec City (Canada), May 2013.

T. FUJI and Y. NOMURA, “Coherent control of mid-infrared pulse generation by using four-wave mixing through filamentation,” Fundamentals and Applications of Laser Filaments, Okazaki (Japan), April 2013.

野村雄高, 「新しい赤外コヒーレント光源の開発」, 日本分光学会先端レーザー分光部会研究会, 岡崎, 2013年2月.

藤 貴夫, 「超短光パルスの測定方法」, JP-NetS2013, 福井, 2013年9月.

B-5) 特許出願

特願 2013-027042,「赤外光スペクトル計測装置及び方法」, 藤 貴夫, 野村雄高(自然科学研究機構), 2013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).

HILAS 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).

HILAS 国際会議プログラム委員 (2014).

CLEO/USA2014国際会議プログラム委員 (2014).

B-10) 競争的資金

(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,「ト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).

科研費若手研究(B),「中赤外領域における高繰り返しフェムト秒パルス光源の開発」, 野村雄高 (2013年-2014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高速な赤外分光に応用することができた。ファイバーレーザーの開発では、1.8 μm を中心波長とした 50 fs のパルスを発振器から直接発生させることに成功した。今後は、これらの光源や分光法の特徴をいかし、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線磁気円二色性や紫外光電子磁気円二色性光電子顕微鏡などの分光学的手法を用いた磁性薄膜の表面磁性解析
- b) X線吸収微細構造法を用いた固体の熱的性質
- c) 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，W(110)上に成長させたCo薄膜の磁性をXMCD，XMLD（X線磁気線二色性）法によって検討し，Coとして極めて珍しい反強磁性相を見出した。
- b) 硬X線吸収微細構造（XAFS）分光法を用いて，マルテンサイト変態を呈するMnNi合金における協奏的なInvar/anti-Invar特性があることを見出した。この結果はプレスリリースを行い，新聞にも掲載された。
- c) 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，3000Paまでの気体存在下で硬X線光電子分光測定が可能な装置を製作した。実際に燃料電池動作下での光電子分光測定に成功した。

B-1) 学術論文

K. EGUCHI, Y. TAKAGI, T. NAKAGAWA and T. YOKOYAMA, “Molecular Orientation and Electronic States of Vanadyl-phthalocyanine on Si(111) and Ag(111) Surfaces,” *J. Phys. Chem. C* **117**, 22843–22851 (2013).

N. ISHIGURO, T. SAIDA, T. URUGA, O. SEKIZAWA, K. NAGASAWA, K. NITTA, T. YAMAMOTO, S. OHKOSHI, T. YOKOYAMA and M. TADA, “Structural Kinetics on a Pt/C Cathode Catalyst with Practical Catalyst Loading in an MEA for PEFC Operating Conditions Studied by In Situ Time-Resolved XAFS,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 18827–18834 (2013).

O. SEKIZAWA, T. URUGA, M. TADA, K. NITTA, K. KATO, H. TANIDA, K. TAKESHITA, S. TAKAHASHI, M. SANO, H. AOYAGI, A. WATANABE, N. NARIYAMA, H. OHASHI, H. YUMOTO, T. KOYAMA, Y. SENBA, T. TAKEUCHI, Y. FURUKAWA, T. OHATA, T. MATSUSHITA, Y. ISHIZAWA, T. KUDO, H. KIMURA, H. YAMAZAKI, T. TANAKA, T. BIZEN, T. SEIKE, S. GOTO, H. OHNO, M. TAKATA, H. KITAMURA, T. ISHIKAWA, T. YOKOYAMA and Y. IWASAWA, “New XAFS Beamline for Structural and Electronic Dynamics of Nanoparticle Catalysts in Fuel Cells under Operating Conditions,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **430**, 012020 (6 pages) (2013).

K. EGUCHI, Y. TAKAGI, T. NAKAGAWA and T. YOKOYAMA, “Passivating Effect of Si(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)Ag and Si₃N₄/Si(111)-(8×8) Buffer Layers,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **430**, 012129 (6 pages) (2013).

T. YOKOYAMA and K. EGUCHI, “Anisotropic Thermal Expansion and Cooperative Invar/Anti-Invar Effects in Mn Alloys,” *Phys. Rev. Lett.* **110**, 075901 (5 pages) (2013).

B-3) 総説, 著書

T. YOKOYAMA and K. EGUCHI, “Anisotropic Thermal Expansion and Cooperative Invar/Anti-Invar Effects in MnNi Alloy,” *Photon Factory Activity Report Part A: Highlights and Facility Report 2012*, pp. 22–23 (2013).

横山利彦, 江口敬太郎, 「Invar 合金の非熱膨張特性の起源解明」, *PF News* **31(3)**, 14–18 (2013).

B-4) 招待講演

T. YOKOYAMA, “Novel Spectroscopic Methodology for Materials Science,” RCMS-IGER Seminar, Nagoya University, Nagoya, November 2013.

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, 「物性科学概論」, 2013年.

京都大学大学院理学研究科化学専攻, 連携客員教授, 2011年-2013年.

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-.

B-10) 競争的資金

科研費特別研究員奨励費, 「時分割DXAFS-PEEMの開発と固体表面上の光励起一電子移動過程の直接観測」, 上村洋平 (2013年).

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).

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, NEDO 固体高分子形燃料電池実用化推進技術開発「基盤技術開発」MEA 材料の構造・反応物質移動解析, 「時空間分解X線吸収微細構造(XAFS)等による触媒構造反応解析」, 横山利彦 (2011年-).

C) 研究活動の課題と展望

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

また、2011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、2011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行い、燃料電池動作下(湿った酸素中)での硬X線光電子分光測定に世界で初めて成功した。さらなる展開を目指す。

今年度7月から、昨年度に転出した中川剛志助教の後任として、上村洋平助教が着任した。今後、ピコ秒時間分解X線吸収微細構造分光法の開発的研究を進めるために準備中である。

唯 美津木（准教授）（2008 年 10 月 1 日～2013 年 3 月 31 日）＊）

A-1) 専門領域：錯体化学，触媒化学，物理化学

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) 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。更に、表面の化学修飾を利用して、固定化した金属種の安定性や選択性を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調製を行った。鈴木カップリング反応の反応特性を調べ、表面モレキュラーインプリンティングによる形状選択性の効果を検討した。
- c) Ce 系酸化物をドーブした Ni/SBA-16 触媒を調製し、メタンドライリフォーミング反応の特性と Ce のドーブによる Ni 粒子のシンタリングの違いを明らかにした。
- d) Pt 及び Pt₃Co, Pt₃Ni 合金ナノ粒子カソード触媒を用いた MEA について、実膜厚の MEA に対して、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。その解析を通じて、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, 第 2 金属の添加による構造速度論の変化を明らかにした。
- e) SPring-8 の X 線ナノビームを用いた in situ 走査型顕微 XAFS, in situ X 線ラミノグラフィー XAFS を立ち上げ、燃料電池 MEA 内部の Pt/C カソード触媒の 3 次元分布や Pt/CeZrO_x 触媒 1 粒内部の化学状態の空間分布の計測を行った。

B-1) 学術論文

S. MURATSUGU and M. TADA, "Molecularly Imprinted Ru Complex Catalysts Integrated on Oxide Surfaces," *Acc. Chem. Res.* **46**, 300–311 (2013).

M. WAKI, S. MURATSUGU and M. TADA, "Rate Enhancement for Hexose Sugar Oxidation on an Ethynylpyridine-Functionalized Pt/Al₂O₃ Catalyst with Induced Chirality," *Chem. Commun.* **49**, 7283–7285 (2013). [Inside Back Cover]

S. MURATSUGU, M. H. LIM, T. ITHO, W. THUMRONGPATANARKS, M. KONDO, S. MASAOKA, T. S. A. HOR and M. TADA, "Dispersed Ru Nanoclusters Transformed from a Grafted Trinuclear Ru Complex on SiO₂ for Selective Alcohol Oxidation," *Dalton Trans.* **42**, 12611–12619 (2013). [Inside Front Cover]

S. ZHANG, S. MURATSUGU, N. ISHIGURO and M. TADA, "Ceria-Doped Ni/SBA-16 Catalysts for Dry Reforming of Methane," *ACS Catal.* **3**, 1855–1864 (2013).

S. MURATSUGU, Z. WENG and M. TADA, “Surface Functionalization of Supported Mn Clusters to Produce Robust Mn Catalysts for Selective Epoxidation,” *ACS Catal.* **3**, 2020–2030 (2013).

S. NAGAMATSU, T. ARAI, M. YAMAMOTO, T. OHKURA, H. OYANAGI, T. ISHIZAKA, H. KAWANAMI, T. URUGA, M. TADA and Y. IWASAWA, “Potential-Dependent Restructuring and Hysteresis in the Structural and Electronic Transformations of Pt/C, Au(Core)-Pt(Shell)/C, and Pd(Core)-Pt(Shell)/C Cathode Catalysts in Polymer Electrolyte Fuel Cells Characterized by In Situ X-Ray Absorption Fine Structure,” *J. Phys. Chem. C* **117**, 13094–13107 (2013).

N. ISHIGURO, T. SAIDA, T. URUGA, O. SEKIZAWA, K. NAGASAWA, K. NITTA, T. YAMAMOTO, S. OHKOSHI, T. YOKOYAMA and M. TADA, “Structural Kinetics on a Pt/C Cathode Catalyst with Practical Catalyst Loading in an MEA for PEFC Operating Conditions Studied by In Situ Time-Resolved XAFS,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 18827–18834 (2013).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

O. SEKIZAWA, T. URUGA, M. TADA, K. NITTA, K. KATO, H. TANIDA, K. TAKESHITA, S. TAKAHASHI, M. SANO, H. AOYAGI, A. WATANABE, N. NARIYAMA, H. OHASHI, H. YUMOTO, T. KOYAMA, Y. SENBA, T. TAKEUCHI, Y. FURUKAWA, T. OHATA, T. MATSUSHITA, Y. ISHIZAWA, T. KUDO, H. KIMURA, H. YAMAZAKI, T. TANAKA, T. BIZEN, T. SEIKE, S. GOTO, H. OHNO, M. TAKATA, H. KITAMURA, T. ISHIKAWA, T. YOKOYAMA and Y. IWASAWA, “New XAFS Beamline for Structural and Electronic Dynamics of Nanoparticle Catalysts in Fuel Cells under Operating Conditions,” *J. Phys: Conf. Ser.* **430**, 012020 (6 pages) (2013).

T. TSUJI, T. URUGA, K. NITTA, K. KAWAMURA, M. MIZUMAKI, M. SUZUKI, O. SEKIZAWA, N. ISHIGURO, M. TADA, H. OHKOSHI, H. YAMAZAKI, H. YUMOTO, T. KOYAMA, Y. SENBA, T. TAKEUCHI, Y. TERADA, N. NARIYAMA, K. TAKESHITA, A. FUJIWARA, S. GOTO, M. YAMOTO, M. TAKATA and T. ISHIKAWA, “Development of Fast Scanning Microscopic XAFS Measurement System,” *J. Phys: Conf. Ser.* **430**, 012019 (6 pages) (2013).

M. SUZUKI, N. KAWAMURA, M. MIZUMAKI, Y. TERADA, T. URUGA, A. FUJIWARA, H. YAMAZAKI, H. YUMOTO, T. KOYAMA, Y. SENBA, T. TAKEUCHI, H. OHASHI, N. NARIYAMA, K. TAKESHITA, H. KIMURA, T. MATSUSHITA, Y. FURUKAWA, T. OHATA, Y. KONDO, J. ARIAKE, J. RICHTER, P. FONS, O. SEKIZAWA, N. ISHIGURO, M. TADA, S. GOTO, M. YAMAMOTO, M. TAKATA and T. ISHIKAWA, “A Hard X-Ray Nanospectroscopy Station at SPring-8 BL39XU,” *J. Phys: Conf. Ser.* 012017 (4 pages) (2013).

B-3) 総説, 著書

M. TADA, “Hard X-Ray Time-Resolved/Space-Resolved XAFS Analysis for Heterogeneous Metal Catalysts,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 021013 (8 pages) (2013).

唯美津木, 「問題 3.19 燃料電池」, 「問題と解説で学ぶ表面科学」, 共立出版, p. 122 (2013).

唯美津木, 石黒 志, 「白金合金カソード触媒の in situ リアルタイム XAFS 構造解析」, 「次世代燃料電池開発の最前線」, シーエムシー出版, p. 148–154 (2013).

唯美津木, 「第 3 節 時間・空間分解 X 線吸収微細構造法による触媒構造解析」, 「触媒の設計・反応制御事例集」, (株) 技術情報協会, p. 727–733 (2013).

邨次 智, 唯美津木, 「位置選択的反応を指向した表面モレキュラーインプリンティング Ru 錯体触媒の創製」, ナノ学会会報 **11**, 71–77 (2013).

才田隆広, 唯美津木, 「固体高分子形燃料電池における電極接合体内部における白金触媒の分布・化学状態の観察」, *放射光* 26, 72–83 (2013).

B-4) 招待講演

唯美津木, 「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」, 分子研研究会, 岡崎, 2013年1月.

M. TADA, “Surface/Interface-Mediated Catalysis on Oxide-Supported Metal Catalysts,” I²CNER International Workshop Advanced Materials Transformations, Fukuoka, January 2013.

唯美津木, 「表面を媒体とした触媒反応場の構築」, 日本化学会第93回春季年会特別企画「配位プログラミングの化学——超構造体創製から化学素子への展開」, 草津, 2013年3月.

唯美津木, 「放射光XAFSを利用した燃料電池MEAの時間分解・空間分解構造解析」, 日本化学会第93回春季年会特別企画「化学者のための放射光ことはじめ——XAFS解析 応用とその成果」, 草津, 2013年3月.

唯美津木, 「固体表面での分子レベル触媒構造の構築とその機能の可視化」, 日本化学会第93回春季年会(女性化学者奨励賞受賞講演), 草津, 2013年3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, 井上リサーチアワード (2009).

唯美津木, 化学技術戦略推進機構萌芽技術奨励 (2009).

唯美津木, 守田科学研究奨励賞 (2009).

S. MURATSUGU, 2nd Asian Conference on Coordination Chemistry *Dalton Transactions* Poster Prize (2009).

邨次 智, 井上研究奨励賞 (2009).

邨次 智, 日本化学会優秀講演賞(学術) (2010).

唯美津木, 触媒学会若手優秀講演賞 (2010).

S. MURATSUGU, The Royal Society of Chemistry Poster Prize (2010).

唯美津木, 文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2010).

石黒 志, 第14回XAFS 討論会学生講演賞 (2011).

唯美津木, 第1会日本化学会女性化学者奨励賞 (2013).

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).

学会の組織委員等

International COE Symposium for Young Scientists on Frontiers of Molecular Science 組織委員会委員 (2006).
第22回日本放射光学会年会実行委員会委員 (2007–2008).
第89回日本化学会春季年会特別企画企画担当 (2008–2009).
International Conference on Nanoscopic Colloid and Surface Science, Program Committee Member (2009–2010).
ナノ学会第8回大会実行委員会委員 (2009–2010).
International Symposium on Surface Science—Focusing on Nano-, Green, and Biotechnologies— (ISSS-6), Program Committee Member (2010–2011).
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).
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，「表面分子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トラ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の高効率物質変換」, 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, 触媒自身の動きやマイクロ構造情報を明らかにしたい。

*) 2013 年 4 月 1 日名古屋大学物質科学国際研究センター教授

電子物性研究部門

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压力下の NMR 測定ならびにパルス ESR を行い，リエントラント反強磁性相や量子臨界点の是非，電荷秩序相と基底状態の相関について研究を行っている。この他，新規な自己ドーブ型有機導体の強磁場 ESR を用いた研究，新規な金属錯体や導電性分子物質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ド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

S. JIN, K. FURUKAWA, M. ADDICOAT, L. CHEN, S. TAKAHASHI, S. IRLE, T. NAKAMURA and D. JIANG, "Large Pore Donor-Acceptor Covalent Organic Frameworks," *Chem. Sci.* **4**, 4505–4511 (2013).

Y. FUNASAKO, T. INAGAKI, T. MOCHIDA, T. SAKURAI, H. OHTA, K. FURUKAWA and T. NAKAMURA, "Organometallic Ionic Liquids from Octamethylferrocenium Cations. Preparation, Thermal Properties, Crystal Structures, and Magnetic Properties," *Dalton Trans.* **42**, 8317–8327 (2013).

S. JIN, X. DING, X. FENG, M. SUPUR, K. FURUKAWA, S. TAKAHASHI, M. ADDICOAT, M. E. EL-KHOULY, T. NAKAMURA, S. IRLE, S. FUKUZUMI, A. NAGAI and D. JIANG, "Charge Dynamics in A Donor-Acceptor Covalent Organic Framework with Periodically Ordered Bicontinuous Heterojunctions," *Angew. Chem., Int. Ed.* **52**, 2017–2021 (2013).

Y. MORINAKA, S. SATO, A. WAKAMIYA, H. NIKAWA, N. MIZOROGI, F. TANABE, M. MURATA, K. KOMATSU, K. FURUKAWA, T. KATO, S. NAGASE, T. AKASAKA and Y. MURATA, "X-Ray Observation of a Helium Atom and Placing a Nitrogen Atom Inside He@C₆₀ and He@C₇₀," *Nat. Commun.* **4**, 1554 (5 pages) (2013).

B-6) 受賞, 表彰

古川 貢, 電子スピンスイエンズ学会奨励賞 (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, 2013–).

日本化学会実験化学講座編集委員会委員 (2002).

電子スピンスイエンズ学会担当理事 (2004–2005).

電子スピンスイエンズ学会運営理事 (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回電子スピンスイエンズ学会年会 (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 (2012).

Asia Pacific EPR/ESR Symposium 2014, Nov. 12th–16th, 2014, Nara, Japan, Program Chair (Program Committee) (2014).

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

電子スピンスイエンズ学会編集委員 (2003).

電子スピンスイエンズ学会編集委員長 (2004–2005).

電子スピンスイエンズ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」, 2013年前期.

学習院大学大学院理学研究科, 「物性物理学Ⅱ」, 2013年前期.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「機能物性科学」, 2013年5月7日–6月18日.

名古屋大学大学院工学研究科, 「応用物理学特論」, 2013年11月11日–13日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「先端磁気共鳴計測による電子対相関の解明」,中村敏和(2013年-2015年).

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ドYNAMIX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”のスピンドYNAMIX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によるスピンドYNAMIX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ドYNAMIX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。

分子機能研究部門

平 本 昌 宏（教授）（2008 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：有機半導体，有機太陽電池，有機エレクトロニクスデバイス

A-2) 研究課題：

- a) 有機半導体の pn 制御の機構解明
- b) ドーピングと第3分子導入との統合による高効率有機薄膜太陽電池の開発
- c) 有機太陽電池用共蒸着膜の結晶化／相分離方法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 昨年度までに、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。今年度は、ドーピング機構について詳細に研究した。

ケルビンバンドマッピング法によって、キャリア濃度を正確に評価する方法を確立し、各ドーパントのイオン化率を測定した結果、単独のフラーレン (C_{60})、フタロシアニン (H_2Pc) へのドーピングにおいて、ドナーとして働く Cs_2CO_3 が約 10%，アクセプターとして働く MoO_3 が約 2% であることが分かった。この値は、Si 中のドーパントのイオン化率の 100% よりかなり小さく、有機半導体の比誘電率が無機半導体に比べて小さく、正負電荷が分離しにくいことが原因と考えている。さらに、 $C_{60}:H_2Pc$ 共蒸着膜では、 C_{60} 、 H_2Pc 各単独膜に比べて、約 10 倍のキャリアが発生し、イオン化率も 50% から 90% まで増大し、ドーピング増感が起こることを発見した。

- 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、第3分子を共蒸発させ、共蒸着膜の結晶化／層分離を行ってルート形成すれば増大できる。

以上の考えに基づき、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行った。 $C_{60}:H_2Pc$ 共蒸着膜に対して応用したところ、無機太陽電池に近い、 $0.25\ \mu m$ もの少数キャリア拡散距離を観測した。さらに、 C_{70} とルブレン誘導体、チオフェン誘導体の共蒸着膜にも適用し、本方法の一般性を検証している。

- c) 有機薄膜太陽電池においては、光生成した電子とホールに対するルートを確保するために、共蒸着膜の結晶化／相分離を行って縦型超格子状のナノ構造を形成することが効率向上に不可欠である。今年度は、第3共蒸発分子を用いてルート形成する方法を一般化するため、光学顕微鏡で C_{60} と H_2Pc を識別して観測可能な、比較的大きな数 100 nm の幅を持つ縦型超格子構造を作成し、セル特性との関係を探った。今後、超格子幅をナノレベルまで減少させ、どのような有機半導体の組み合わせにも応用できる技術を完成する。

B-1) 学術論文

N. ISHIYAMA, T. YOSHIOKA, T. KAJI and M. HIRAMOTO, “Tuning of Barrier Parameters of *n*-Type Schottky Junction in Photovoltaic Co-Deposited Films by Doping,” *Appl. Phys. Express* **6**, 012301 (3 pages) (2013).

N. ISHIYAMA, M. KUBO, T. KAJI and M. HIRAMOTO, “Tandem Organic Solar Cells Formed in Co-Deposited Films by Doping,” *Org. Electron.* **14**, 1793–1796 (2013).

M. KUBO, T. KAJI and M. HIRAMOTO, “*pn*-Homojunction Organic Solar Cells Formed in Phase-Separated Co-Deposited Films,” *Appl. Phys. Lett.* **103**, 263303 (4 pages) (2013).

M. KUBO, Y. SHINMURA, N. ISHIYAMA, T. KAJI and M. HIRAMOTO, “Junction Formation by Doping in H₂Pc:C₆₀ Co-Evaporated Films for Solar Cell Application,” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **581**, 13–17 (2013).

T. YOSHIOKA, M. KUBO, N. ISHIYAMA, T. KAJI and M. HIRAMOTO, “Evaluation of Carrier Concentration by C–V Measurements for *p,n*-Controlled C₆₀ Films,” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **579**, 1–4 (2013).

T. KAJI, S. NAKAO and M. HIRAMOTO, “Effect of Co-Evaporant Induced Crystallization on Needle Growth of Phthalocyanine Thin Films,” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **578**, 63–67 (2013).

Y. SHINMURA, M. KUBO, T. KAJI and M. HIRAMOTO, “Improved Photovoltaic Characteristics by MoO₃-Doping to Thick Hole Transporting Films,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **52**, 04CR12 (4 pages) (2013).

K. YOKOYAMA, T. KAJI and M. HIRAMOTO, “Double Co-Deposited Layered Organic Photovoltaic Cells with Sensitivity through the Visible to Near-Infrared,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **52**, 04CR06 (4 pages) (2013).

B-3) 総説, 著書

平本昌宏, 嘉治寿彦, 「有機薄膜太陽電池」, 「太陽電池技術ハンドブック」, オーム社(株), 第10章 (2013).

嘉治寿彦, 「短絡光電流の増大方法—第3共蒸発分子導入」, 「太陽電池技術ハンドブック」, オーム社(株), 第10章細目10 (2013).

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」, *応用物理* **82**(6), 480–486 (2013).

平本昌宏, 新村祐介, 「フタロシアニン単独薄膜における *pn* ホモ接合形成」 (研究所シリーズ 分子科学研究所), *O plus E* **35**(4), 413–417 (2013).

平本昌宏, 「固体型有機太陽電池の開発動向」, 「2013太陽光発電技術大全」, 電子ジャーナル, 第2編第1章第5節 (2013).

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」, *月刊ディスプレイ*, 8月号特集「有機系太陽電池」, **19**(8), pp. 55–61 (2013).

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」, 「人工光合成——システム構築に向けての最新動向技術——」, 福住俊一監修, シーエムシー出版, 第9. 1章, pp. 211–220 (2013).

平本昌宏, 久保雅之, 石山仁大, 「有機薄膜太陽電池のためのバンドギャップサイエンス」, 特集「期待を集める有機光エレクトロニクス」, *月刊オプトロニクス* No. **384**, pp. 50–54 (2013).

嘉治寿彦, 「共蒸発分子誘起結晶化法による有機薄膜太陽電池のドナー: アクセプター混合膜の結晶化」, 応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会奨励賞受賞記念寄稿, *Molecular Electronics and Bioelectronics* **24**(4), 230–235 (2013).

B-4) 招待講演

M. HIRAMOTO, “Photovoltaic Energy Development—Bandgap Science for Organic Thin-Film Solar Cells—,” Chimie Paristech–IMS 3rd Joint Symposium: “Frontier in Molecular Science Based on Photo and Material,” IMS, Okazaki (Japan), February 2013.

M. HIRAMOTO, “Bandgap Science for Organic Thin-Film Solar Cells,” 7th International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics, M&BE7, Fukuoka International Congress Center, Fukuoka (Japan,) March 2013.

M. KUBO, “pn-Homojunction Organic Solar Cells Formed in the Thick Phase-Separated Co-Deposited Films by Doping,” KJF-ICOME2013 (KJF International Conference on Organic Materials for Electronics and Photonics), Busan (Korea), August 2013.

M. HIRAMOTO, “Bandgap Science for Organic Thin-Film Solar Cells,” Global Photovoltaic Conference 2013 (GPVC 2013), The 8th Aseanian Conference on Dye-Sensitized & Organic Solar Cells (DSC-OPV8), Busan (Korea), November 2013.

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」, CREST 「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」研究領域第1回公開シンポジウム, 豊田工業大学, 名古屋, 2013年1月.

嘉治寿彦, 「様々なアクセプタを用いた有機薄膜太陽電池の共蒸発分子誘起結晶化法による光電流向上」, 電気情報通信学会有機エレクトロニクス研究会(OME), ウィンク愛知, 名古屋, 2013年1月.

平本昌宏, 「有機薄膜太陽電池太陽電池の現状と将来」, 第14回自然科学研究機構シンポジウム「分子が拓くグリーン未来」, 学術総合センター (一橋講堂), 東京, 2013年3月.

平本昌宏, 「バンドギャップサイエンス」, 第5回有機薄膜太陽電池サテライトミーティング, かながわサイエンスパーク(KSP) 西棟 701会議室, 川崎, 2013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」, 近畿化学協会機能性色素部会「次世代の色素・顔料技術, その新たな展開」, 大阪科学技術センター, 大阪, 2013年5月.

平本昌宏, 「有機薄膜太陽電池の基礎」, 先導的物質変換領域(ACT-C)第2回領域会議特別講演, 富士ソフトアキバプラザ5階アキバホール, 東京, 2013年6月.

平本昌宏, 「共蒸着膜へのドーピングによる有機薄膜太陽電池」, CREST 有機太陽電池シンポジウム——用途開発と産業展開への道——, 京都大学宇治構内おうぼくプラザ・きはだホール, 宇治, 2013年7月.

平本昌宏, 「有機薄膜太陽電池の開発」, TECH Biz EXPO2013 (第3回次世代ものづくり基盤技術産業展), ポートメッセ名古屋, 2013年10月.

平本昌宏, 「有機系太陽電池コース」, PV Tutorial (SEMI ジャパン), 東京市ヶ谷, 2013年10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」, 文部科学省「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)計算分子科学研究拠点第3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, 京都, 2013年11月.

平本昌宏, 「有機半導体のpn制御と有機薄膜太陽電池」, 2013年度後期物性研究所短期研究会「エネルギーと新材料の物性・物質科学」, 東京大学物性研究所, 柏, 2013年11月.

嘉治寿彦, 「有機薄膜太陽電池のドナー:アクセプター混合層の共蒸発分子誘起結晶化」, 有機分子・バイオエレクトロニクス分科会奨励賞受賞記念講演, 第74回応用物理学会秋季学術講演会, 同志社大学京田辺キャンパス, 京田辺, 2013年9月.

嘉治寿彦, 「共蒸発分子誘起結晶化法の研究開発とその有機薄膜太陽電池応用」, 第4回有機分子・バイオエレクトロニクスの未来を拓く若手研究者討論会, レイクフォレストリゾート, 京都, 2013年9月.

平本昌宏, 「有機半導体の基礎, 特に, 有機薄膜太陽電池, pn制御」, 分子工学特別講演会(京都大学化学研究所), 桂キャンパス, 京都, 2013年12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」, 関西化学フォーラム「次世代太陽電池研究の最前線」, 関西学院大学神戸三田キャンパス, 三田, 2013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」, 高分子学会有機エレクトロニクス研究会「有機薄膜太陽電池の研究最前線」, 東工大蔵前会館, 東京, 2013年12月.

B-6) 受賞, 表彰

嘉治寿彦, 応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会奨励賞 (2013).

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

平本昌宏, 国立大学法人大阪大学教育・研究貢献賞 (2006).

平本昌宏, 応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会論文賞 (2006).

平本昌宏, JJAP(Japanese Journal of Applied Physics) 編集貢献賞 (2004).

平本昌宏, 電子写真学会研究奨励賞 (1996).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会幹事 (1997-1998, 2001-2002).

応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会年会講演プログラム委員 (2002-2003).

Korea-Japan Joint Forum (KJF)—Organic Materials for Electronics and Photonics, Organization Committee Member (2003-).

「有機固体における伝導性・光伝導性および関連する現象」に関する日中合同シンポジウム組織委員 (2007-).

応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会年会講演プログラム委員長 (2008-2009).

Fifth International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics (M&BE5)(Miyazaki), Organization Committee Member (2009).

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

有機薄膜太陽電池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).

The 40th International Symposium on Compound Semiconductors (ISCS 2013), Program Committee Member, “Organic Semiconductors and Flexible Materials,” Kobe Convention Center, Kobe, Japan, May 19-23 (2013).

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 (2012-2013). (嘉治寿彦)

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).

さがり「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(2013年度))」, 2013年10月29日.

京都大学大学院エネルギー科学研究科, 「先進エネルギー生成学I」(修士), 「先進エネルギー生成学特論I」(博士), 客員教授, 2013年度後期.

京都大学大学院工学研究科, 「分子工学特論第三」(修士), 2013年12月9日-10日.

B-9) 学位授与

石山仁大, 「Design of the Energy Structures of Photovoltaic Organic Co-deposited Films by Impurity Doping」, 2013年9月, 博士(理学).

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).

NEDO 「太陽光発電システム未来技術研究開発」, 「超階層ナノ構造を有する高効率有機薄膜太陽電池の研究開発」, 平本昌宏(分担) (2006年度-2009年度).

科学技術振興機構CREST 研究, 「二酸化炭素排出抑制に資する革新的技術の創出」, 「有機薄膜太陽電池の高効率化に関する研究」, 平本昌宏(分担) (2008年度-2009年度).

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-2014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-2018年).

科研費基盤研究(B),「共蒸着膜のpn制御による15%効率有機タンデム太陽電池の開発」, 平本昌宏 (2013年-2015年).

科研費若手研究(B),「共蒸発分子誘起結晶化法の異種材料展開と原理探求」, 嘉治寿彦 (2013年-2014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

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5名(久保, 新村, 菊池, 山品, 安部)を雇用している。2013年は, 嘉治助教, 中尾研究員, 杉原(秘書)と私の4名とあわせ, 9名のグループで研究を行った。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)の推進のために, セル作製と測定をすべて大気にさらさず行うことのできる, 新型蒸着装置を導入した。有機半導体のドーピングによるpn制御技術はほぼ確立できたので, 多くの有機半導体の組み合わせから成る共蒸着膜に対して一般的有効なセル設計方法を開発している。効率向上を実際に示し, 次の段階のプロジェクトにつなげることが必要である。有機半導体を無機半導体なみに取り扱えるレベルに早期に到達することが必要である。

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。来年度より, 博士課程学生1名が参加する予定。

江 東 林（准教授）（2005 年 5 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：有機化学，高分子科学

A-2) 研究課題：

- a) 二次元高分子の創出と機能開拓
- b) 多孔性共役高分子の創出と機能開拓

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 二次元高分子を合成するための新しい反応を開拓した。アジン結合反応を開拓し，新奇な π 共役系二次元高分子の合成に成功した。得られた二次元高分子は，特異な蛍光発光能を示し，ナノチャンネルにおいて水素結合によりゲスト分子とドッキングすることで蛍光が著しく消光されることを見だし，二次元高分子の蛍光センサーとしての可能性を示した（アメリカ化学会誌 *J. Am. Chem. Soc.* 2013）。スクアライン結合で連結した二次元高分子の構築に成功し，優れた光触媒として機能することを見だした（ドイツ化学会誌 *Angew. Chem., Int. Ed.* 2013, hot paper）。フェナジン結合で共役系が二次元的にのびている高分子を合成し，類のない高いキャリア移動度を示すことを突き止めた。ナノチャンネルに電子アクセプターを導入することで，光電変換における二次元高分子の高い潜在性を明らかにした（*Nature Commun.* 2013）。電子ドナーとアクセプターからなる二次元高分子の構築手法を確立し（*Chem. Sci.* 2013），その特異な電荷分離状態や電荷ダイナミクスを解明した（ドイツ化学会誌 *Angew. Chem., Int. Ed.* 2013, cover page）。これらの成果は，二次元高分子という分野を大きく前進させると共に，分野の基礎を築くものとして注目されている。構造を完全に制御した高分子の設計，合成及び機能開拓に新しい道筋を示した（科学新聞，化学工業日報，日経産業新聞，日刊工業新聞，Nanotech Japan トピックス等に記事報道）。
- b) 多孔性共役高分子に関して，蛍光発光性ポリマーの合成に着目した。三次元構造を活かすことで，コア-シェル構造を有する共役高分子の合成に成功した。コアとシェアにそれぞれ構造の異なる共役高分子を導入することにより，強く発光する一連の共役高分子を合成した。興味深いことに，シェアの厚みにより，蛍光発光波長を制御することができ，発光性高分子の新しい構築手法として注目されている。さらに，多孔性媒体としての貯蔵機能を開拓し，超吸着能を有する一連の多孔性共役高分子の合成に成功した。特に，有害物質であるアミン類に対して，何と自分重量の7倍も相当するアミンを吸着することができ，かつ簡単な処理で再利用することができる特徴を持ち合わせている。これは，多孔性物質の貯蔵機能の設計に新しい指針を与えたものとして注目されている。

B-1) 学術論文

- S. DALAPATI, S. JIN, J. GAO, Y. XU, A. NAGAI and D. JIANG, "An Azine-Linked Covalent Organic Framework," *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 17310–17313 (2013).
- J. GUO, Y. XU, S. JIN, L. CHEN, T. KAJI, Y. HONSHO, M. A. ADDICOAT, J. KIM, A. SAEKI, H. IHEE, S. SEKI, S. IRLE, M. HIRAMOTO, J. GAO and D. JIANG, "Conjugated Organic Framework with Three-Dimensionally Ordered Stable Polymer with Delocalized π Clouds," *Nat. Commun.* **4**, 2736 (2013).
- S. JIN, K. FURUKAWA, M. ADDICOAT, L. CHEN, S. TAKAHASHI, S. IRLE, T. NAKAMURA and D. JIANG, "Large Pore Donor-Acceptor Covalent Organic Frameworks," *Chem. Sci.* **4**, 4505–4511 (2013).

X. CHEN, M. ADDICOAT, S. IRLE, A. NAGAI and D. JIANG, “Control Crystallinity and Porosity of Covalent Organic Frameworks through Managing Interlayer Interactions Based on Self-Complementary π -Electronic Force,” *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 546–549 (2013).

A. NAGAI, X. CHEN, X. FENG, X. DING, Z. GUO and D. JIANG, “A Squaraine-Linked Covalent Organic Framework,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **52**, 3770–3774 (2013). (Hot Paper)

S. JIN, X. DING, X. FENG, M. SUPUR, K. FURUKAWA, S. TAKAHASHI, M. ADDICOAT, M. E. EL-KHOULY, T. NAKAMURA, S. IRLE, S. FUKUZUMI, A. NAGAI and D. JIANG, “Charge Dynamics in a Donor–Acceptor Covalent Organic Framework with Periodically Ordered Bicontinuous Heterojunctions,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **52**, 2017–2021 (2013). (Inside Cover)

X. FENG, Y. DONG and D. JIANG, “Star-Shaped Two-Dimensional Covalent Organic Frameworks,” *CrystEngComm* **15**, 1508–1511 (2013). (Themed Issue for COFs)

Y. XU, A. NAGAI and D. JIANG, “Core-Shell Conjugated Microporous Polymers: A New Strategy for Exploring Color-Tunable and -Controllable Light Emissions,” *Chem. Commun.* **49**, 1591–1593 (2013). (Inside Cover)

X. LIU, Y. XU, Z. GUO, A. NAGAI and D. JIANG, “Super Absorbent Conjugated Microporous Polymers: A Synergistic Structural Effect on Exceptional Uptake of Amines,” *Chem. Commun.* **49**, 3233–3235 (2013).

B-3) 総説, 著書

D. JIANG, S. JIN, Y. XU and X. LIU, “Design, Synthesis, and Functions of Conjugated Microporous Polymers,” in *Nanoporous Materials: Synthesis and Applications*, Taylor & Francis Books, Chapter 2 (2013).

Y. XU, S. JIN, H. XU, A. NAGAI and D. JIANG, “Conjugated Microporous Polymers: Design, Synthesis and Applications Covalent Organic Frameworks,” *Chem. Soc. Rev.* **42**, 8012–8031 (2013). (Cover Page)

B-4) 招待講演

D. JIANG, “Covalent Organic Frameworks: Predesignable Molecular Structure and Functional Exploration,” Japan-China Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Okazaki (Japan), January 2013.

D. JIANG, “Covalent Organic Frameworks: A Versatile Platform for Designing Semiconducting Structures with Inborn Intra- and Intermolecular Orderings,” 2013 MOF young investigator symposium, Shanghai (China), May 2013.

D. JIANG, “Light-Emitting Conjugated Polymers with Microporous Network Architectures,” International Symposium on Aggregation-Induced Emission, Wuhan (China), May 2013.

D. JIANG, “Two-Dimensional Polymers and Covalent Organic Frameworks,” The 11th China-Japan Joint Symposium on Conduction and Photoconduction in Organic Solids and Related Phenomena, Changchun (China), September 2013.

D. JIANG, “Two-Dimensional Polymers and Covalent Organic Frameworks,” The 9th IUPAC International Symposium on Novel Materials and Their Synthesis, Shanghai (China), October 2013. (Keynote Lecture)

D. JIANG, “Two-Dimensional Polymers as a Novel Functional Material Platform,” The 6th China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Suzhou (China), October 2013.

B-6) 受賞, 表彰

- 江 東林, 2000年度日本化学会年次大会講演賞 (2000).
江 東林, 2005年度日本化学会若手特別講演賞 (2005).
江 東林, 2006年度高分子学会 Wiley 賞 (2006).
江 東林, 2006年度科学技術分野文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2006).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第二回デンドリマー国際会議実行委員 (2000).

Winter School of JSPS Asian Core Program on Frontiers of Materials, Photo and Theoretical Molecular Science, Beijing, December 5–8, Organizer (2006).

China-Japan Joint Symposium on the π -Conjugated Molecules towards Functional Materials, Beijing, February 24–25, Organizer (2008).

Sokendai Asian Winter School “Molecular Sciences on Different Space-Time Scales,” Okazaki, December 9–12, Co-Organizer (2008).

China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Beijing, December 20–21, Organizer (2008).

China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Hokkaido, August 2–5, Organizer (2009).

Sokendai Asian Winter School “Molecular Sciences on Different Space-Time Scales,” Okazaki, December 2–5, Co-Organizer (2009).

China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Jilin University, Changchun, July 25–28, Organizer (2010).

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

Japan-China Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, IMS, Okazaki, Jan. 19–21, Organizer (2013).

China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture, Soochow University, Changchun, October 25–28, Organizer (2013).

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–2015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ポリマーの謎に迫る。

西 村 勝 之 (准教授) (2006 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：固体核磁気共鳴，構造生命科学

A-2) 研究課題：

- a) 膜表在型タンパク質ヒト由来 PLC- $\delta 1$ PH ドメインの NMR による解析
- b) 固体 NMR によるタンパク質構造解析手法開発のための試料調製
- c) 安定同位体非標識試料を対象とした固体 NMR 信号帰属法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) アミノ酸特異的に安定同位体標識した膜表在性タンパク質ヒト由来 PLC- $\delta 1$ PH ドメイン (hPH) およびその部位特異的変異体について，基質結合に伴う分子内アロステリック相互作用について，溶液 NMR による解析を行った。その結果，hPH 分子内に存在する相互作用ネットワークが，基質結合に伴い再構成されることで，基質結合部位から離れた部位の環境変化を誘起することを発見した。
- b) 固体 NMR による，難溶性，または結晶化タンパク質の立体構造解析手法の確立のため，モデルタンパク質として，大腸菌由来 3 本膜貫通型タンパク質，ウイルス由来 2 本膜貫通型タンパク質，および大腸菌由来水溶性タンパク質の発現系構築，および精製条件の検討を行った。
- c) 有機溶剤に不溶な有機低分子，高分子が多数存在する。これらの試料は構造が不均一な非結晶試料であり，固体 NMR が有効な解析手段である。しかし，安定同位体非標識試料であるため，その構造解析に適用可能な方法は極めて限定的である。このため，これら試料を対象とした固体 NMR による信号帰属法，および分子間の近接原子情報を取得する手法の開発を検討した。

B-1) 学術論文

T. ASAKURA, Y. SUZUKI, K. YAZAWA, A. AOKI, Y. NISHIYAMA, K. NISHIMURA, F. SUZUKI and H. KAJI, "Determination of Accurate ^1H Positions of (Ala-Gly) $_n$ as a Sequential Peptide Model of *Bombyx mori* Silk Fibroin before Spinning (Silk I)," *Macromolecules* **46**, 8046–8050 (2013).

M. TANIO and K. NISHIMURA, "Intramolecular Allosteric Interaction in the Phospholipase C- $\delta 1$ Pleckstrin Homology Domain," *Biochim. Biophys. Acta, Proteins Proteomics* **1834**, 1034–1043 (2013).

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, 2013–2014).

日本核磁気共鳴学会選挙管理委員 (2005).

学会の組織委員等

The 25th International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems 組織委員, 実行委員 (2013–2016).

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

総合研究大学院大学統合生命科学教育プログラム, 「細胞膜の構造と物質輸送(基礎生体分子科学)」, 2013年11月26日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「非標識固体試料解析のための固体NMR 新規測定法開発」, 西村勝之 (2013年–2015年).

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

本年度, ナノプラットフォーム事業により 600MHz のNMRを導入頂き, これを機に, 分子材料を対象とした固体NMR 解析依頼を頂くようになった。既存の固体NMR 測定法の多くは, 選択的安定同位体標識した試料を前提としており, 天然存在比同位体を観測して, 構造解析する手法は極めて限られている。今後, これらの試料を対象とした測定法の開発も行っていきたい。また, 本装置は, グループ所有の装置で測定ができなかった3重共鳴の測定が可能であり, 今後3重共鳴の測定法開発も行っていきたい。

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) 水素結合性ドナーであり，かつ，電子アクセプターでもあるシアナニル酸は，機能性超分子集合体の構成成分分子として注目されている。シアナニル酸の分子・結晶構造は，これまで六水和物のもののみが知られていたが，今回，新たな水和異性体であるシアナニル酸二水和物を見いだすことに成功し，その分子・結晶構造をX線結晶構造解析により決定した。単位格子の体積は六水和物のもののおよそ半分で，六水和物の結晶に見られた水分子からなるネットワークは形成されていなかった。
- b) 高い平面性を有する π 共役分子は，優れた半導体特性を示す分子として注目を集めているが，溶解性が乏しいという欠点を持つ。そこで，N-Boc ピロールを熱変換ユニットにもつ π 共役分子を設計・合成し，その構造をX線結晶構造解析により決定した。2, 5位に種々のアリール基を持つ N-Boc ピロール誘導体は良好な溶解性を示し，示差熱・熱重量分析により Boc 基が脱離することを確認した。熱変換後は平面構造へと変化し，紫外可視吸収スペクトル，サイクリックボルタンメトリー測定において物性変化が観測された。

B-1) 学術論文

E. HASEGAWA, E. TOSAKA, A. YONEOKA, Y. TAMURA, S. TAKIZAWA, M. TOMURA and Y. YAMASHITA, "Photoinduced Electron Transfer Reaction of α -Bromomethyl Substituted Benzocyclic β -Keto Esters with Amines: Selective Reaction Pathways Depending on Nature of Amine Radical Cations," *Res. Chem. Intermed.* **39**, 247–267 (2013).

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 $\cdots$ π 相互作用・立体障害といった新しいツールによる分子集合体設計、特に、格子状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 $\cdots$ N, C-X $\cdots\pi$)は結晶工学上有用なツールとなり得る可能性を秘めているが、水素結合系と比較してその報告例は少ない。そこでこれを用いた分子集合体設計にも注目している。さらに、合成された分子の分子配列を決定づけているこれらの分子間相互作用の理論的な精密解析を行い、得られた情報に基づいてその構造や機能を理解すると共に、これらの構造を再現しうるヒューリスティックな高速計算手法の開発を通じて、結晶構造の計算化学的な予測方法を探求することを最終的な目的としたい。最後に、この分野の研究の発展には、新規化合物の開発が極めて重要であるので、「新しい機能性電子ドナーおよびアクセプター分子の開発」の研究課題も続行する。加えて、以上のような研究活動と安全衛生管理業務の効率的な両立を常に念頭に置いている。

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電子構造解析

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。昨年度に引き続いて、単電荷トンネル素子回路の根幹パーツ群（トンネル／静電接合，クーロン島，ワイヤ／アンカー）の構造バリエーションの増強を進めた。特に，ナノ計測グループからの要請を受け，三端子系分子（単電荷トランジスタ／ターンスタイル）の主鎖と側鎖のサイズを系統的に延長したサンプル群の汎用合成プロセスの開拓を行った。さらに，100 nm ～ 1000 nm 級の超大型分子鎖の精密合成の要請も受けたので，その探索実験も進めている。
- 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・冨田－山田 G，産総研・浅井 G らと実施している。昨年度までに，「基準系」となる被覆分子ワイヤ群の単一分子電子伝導特性について詳細に明らかにした。本年度からは，分子ワイヤ内の定位置に電子構造変調を加えた場合の伝導特性変化について系統的解明を始めた。その第一歩として，主鎖中央部に，「各種置換基ベースの構造変調」，及び「各種拡張パイ共役系ベースの構造変調」を加えた試料群を作成した。その物性評価は，現在進行中である。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／計測研究を京大・田中（一）G と実施中である。さらに，これら電子／光／磁気機能ユニットを集積化した大型分子群を，マイクロ～ナノ電子回路システムに組み込み，機能発現させるための探索研究を，本年度後半よりスタートした新学術領域研究「分子アーキテクニクス：単一分子の組織化と新機能創成（代表：阪大／冨田）」において始めた。
- c) 複数の電子機能ユニットを集積化した巨大単一分子系の「基板上に設置した状態での分子形状」や「複合的量子構造」を，走査型トンネル顕微鏡の分光イメージング法により，官能基分解能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。その根幹技術は，高分解能 STM 観測に必須な高品位測定試料（巨大分子が，平坦／清浄基板上に，絡み合うことなく個別に配置した試料）の作成技術であり，その汎用化を目指した研究から進めている。昨年度，最も単純な被覆分子ワイヤ群（主鎖：10 nm ～ 120 nm 長クラス）について，エレクトロスプレー法による高品位試料の作製法を確立した。この方法論の一般化を進めるため，本年度は，トンネル接合系を導入した二端子／三端子系（主鎖／側鎖：10 nm 長クラス）について，各種条件（溶媒系，試料作成シーケンス等）を最適化した結果，再現性よく高品位試料を作成し，官能基分解能レベルの STM イメージを得ることが可能となった。

B-1) 学術論文

T. YOKOYAMA, Y. KOGURE, M. KAWASAKI, S. TANAKA and K. AOSHIMA, "Scanning Tunneling Microscopy Imaging of Long Oligothiophene Wires Deposited on Au(111) Using Electrospray Ionization," *J. Phys. Chem. C* **117**, 18484–18487 (2013).

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

新学術領域研究の分子開発人にもなったので、6～8研究グループに対して、各々専用仕様の巨大分子の設計施工を、若干一名で行わなくてはならない。結局、「はじめの一歩」の分子開発は、自分の理想的な分子像の追求がベースとなるので、妥協の無い個人戦になるものである。よって、少々無謀な個人戦は覚悟の上である。しかし、実験に専念する時間を削られては、ひとたまりもないのである(怒)。そこのところ、よろしゅうに。

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) 新規なセンサー型転写調節因子の構造と機能に関する研究
- b) 細胞内の遷移金属イオンの恒常性維持に関与するタンパク質の構造機能相関解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ヘム（鉄ポルフィリン錯体）、およびビタミン B12（コバラミン錯体）は、代表的な遷移金属含有型補欠分子族であり、タンパク質中に存在するこれらの分子が活性中心として機能することにより、多様な生理機能を発現することはよく知られている。ヘムタンパク質に関する研究は、これまでに数多く報告されており、新規な研究対象とはならないと考えられがちであるが、近年になって、ヘムおよびヘムタンパク質の新規な生理機能が次々と報告され始め、多くの研究者の注目を集めている。それらの代表的な例として、酸素、CO、NO などのガス分子に対するセンサーとしての機能を有し、遺伝子発現制御、走化性制御、セカンドメッセンジャーの合成・分解を介した多様な生理機能制御などに関与する一群のヘムタンパク質がある。ガス分子センサータンパク質においては、分子中に組込まれたヘムがセンサー活性中心として機能することにより、新規な生理機能を発現している。当研究室でもこれまでの研究において、ヘムを活性中心とする一連のガス分子センサータンパク質の構造機能相関解明に関する研究を行ってきた。また近年、遷移金属イオン・遷移金属含有補欠分子族の新規な生理機能として、こらが生体系におけるシグナルセンシング・シグナル伝達に関与している例が報告され、生物無機化学の新たな研究対象として大きな注目を集めている。本研究では、ビタミン B12（コバラミン）をセンサー活性中心として利用している、新規な光センサー型転写調節因子 CarH、ヘム（鉄プロトポルフィリン）分子をシグナル分子とする新規な転写調節因子 HrtR および PefR を研究対象とし、これらセンサー型転写調節因子による光・ヘム分子センシング、外部シグナル（光、ヘム分子）によるセンサー型転写調節因子の機能制御、ならびに外部シグナルに応答した遺伝子発現制御の分子機構解明を目的とした研究を行っている。
- b) 鉄、銅、コバルト等の遷移金属イオンは、必須微量元素として生物には必須のものであり、その濃度が不足した場合には欠乏症による不具合がある一方で、必要量以上の遷移金属イオンが細胞内に存在すると細胞毒性を示す。したがって、生物は細胞内の遷移金属イオン濃度を適正に維持し、その恒常性を保つために精緻な制御システムを発達させている。また、細胞内では金属イオンのみならず、ヘムや鉄硫黄クラスターといった金属イオン含有型補欠分子族についても厳密な制御システムが存在している。本研究では、このような制御系の中でも特に、鉄含有補欠分子族であるヘムの細胞内濃度制御に関わるヘム輸送タンパク質、ならびに遷移金属イオンセンサーとして機能する一連の転写調節因子を対象とし、それらの構造機能相関の解明を目的とした研究を行っている。

B-1) 学術論文

K. NAKATANI, H. ISHIKAWA, S. AONO and Y. MIZUTANI, “Heme-Binding Properties of Heme Detoxification Protein from *Plasmodium falciparum*,” *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **439**, 477–480 (2013).

T. ISHIDA and S. AONO, “A Model Theoretical Study on Ligand Exchange Reactions of CooA,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 6139–6148 (2013).

B-3) 総説, 著書

S. AONO, “The Dos family of globin-related sensors using PAS domains to accommodate haem acting as the active site for sensing external signals,” *Adv. Microbial Physiol.* **63**, 273–327 (2013).

B-4) 招待講演

S. AONO, “Structural Basis for Oxygen Sensing and Signal Transduction of the Heme-based Sensor Protein Aer2,” 5th Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences Experiments and Simulations, Seoul (Korea), February 2013.

S. AONO, “Signal sensing and signal transduction in heme sensor proteins,” 223rd The Electrochemical Society Meeting, Tronto (Canada), May 2013.

S. AONO, “Structural Basis for Oxygen Sensing and Signal Transduction of the Heme-Based Sensor Protein Aer2,” 6th Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences Experiments and Simulations, Okazaki (Japan), November 2013.

S. AONO, “Biological signal transduction using heme as a signaling molecule,” The 64th Conference of Japan Society of Coordination Chemistry, Okinawa (Japan), November 2013.

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, 2012–2013).

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–).

Chemistry Letters, Section Editor (2013–).

B-8) 大学での講義、客員

岡山大学大学院医歯薬学総合研究科,「先端薬学特論」, 2013年 6月.

東京工業大学生命理工学部生命工学科,「生命理工学特別講義第三」, 2013年 7月.

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),「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).

科研費挑戦的萌芽研究,「生物の環境センシング機能を基盤とした高感度な環境汚染物質検出システムの構築」, 青野重利 (2013年-2014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り組んでいる。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～2013 年 3 月 31 日)*)

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オレイン酸複合体の抗腫瘍活性
- b) マルトデキストリン・グルコシダーゼの非可逆熱変性

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が腫瘍細胞を選択的に細胞死に導く作用のあることが分かっている。腫瘍細胞に対する選択性をさらに明確にするため，正常細胞に分類されるヒト末梢血単核球の培養細胞を用いて，蛋白質-オレイン酸複合体の細胞死活性を調べた。蛋白質として，ヒト α ラクトアルブミン，ヤギ α ラクトアルブミン，イヌ乳リゾチーム，アポミオグロビン， β_2 ミクログロブリンを用い，モルテン・グロビュール状態にあるこれらの蛋白質とオレイン酸との複合体を熱処理法により作成した。各複合体のヒト末梢血単核球に対する細胞死活性を調べた。その結果，いずれの複合体も無害であり，腫瘍細胞 L1210 に対する顕著な細胞死活性を示した以前の結果と合わせて，複合体が腫瘍細胞を選択的に細胞死に導くことが改めて確認された。
- b) 大腸菌の細胞質酵素である，マルトデキストリン・グルコシダーゼ (MalZ) の熱変性を，差吸収スペクトルと分子研に設置されている示差走査型カロリメーター (MicroCal VP-DSC) を用いて解析した。その結果，MalZ の熱変性は非可逆的であり，現象論的には最も単純な非可逆 1 段転移で表されることが分かった。熱変性の律速段階は立体構造の協同的なアンフォールディングであり，天然構造が一気にアンフォールディングして非可逆的に変性状態にいたる。MalZ はアミノ酸残基数 604 の巨大な球状蛋白質であり，単ドメイン蛋白質として大きすぎるために，非可逆変性を示すと考えられる。

B-1) 学術論文

M. S. CHANDAK, T. NAKAMURA, K. MAKABE, T. TAKENAKA, A. MUKAIYAMA, T. K. CHAUDHURI, K. KATO and K. KUWAJIMA, "The H/D-Exchange Kinetics of the *Escherichia coli* Co-Chaperonin GroES Studied by 2D NMR and DMSO-Quenched Exchange Methods," *J. Mol. Biol.* **425**, 2541–2560 (2013).

M. S. CHANDAK, T. NAKAMURA, T. TAKENAKA, T. K. CHAUDHURI, M. YAGI-UTSUMI, J. CHEN, K. KATO and K. KUWAJIMA, "The Use of Spin Desalting Columns in DMSO-Quenched H/D-Exchange NMR Experiments," *Protein Sci.* **22**, 486–491 (2013).

K. MAKABE, T. NAKAMURA and K. KUWAJIMA, "Structural Insights into the Stability Perturbations Induced by N-Terminal Variation in Human and Goat α -Lactalbumin," *Protein Eng., Des. Sel.* **26**, 165–170 (2013).

A. MUKAIYAMA, T. NAKAMURA, K. MAKABE, K. MAKI, Y. GOTO and K. KUWAJIMA, "Native-State Heterogeneity of β_2 -Microglobulin as Revealed by Kinetic Folding and Real-Time NMR Experiments," *J. Mol. Biol.* **425**, 257–272 (2013).

A. MUKAIYAMA, T. NAKAMURA, K. MAKABE, K. MAKI, Y. GOTO and K. KUWAJIMA, "The Molten Globule of β_2 -Microglobulin Accumulated at pH 4 and Its Role in Protein Folding," *J. Mol. Biol.* **425**, 273–291 (2013).

T. NAKAMURA, T. AIZAWA, R. KARIYA, S. OKADA, M. DEMURA, K. KAWANO, K. MAKABE and K. KUWAJIMA, “Molecular Mechanisms of the Cytotoxicity of Human α -Lactalbumin Made Lethal to Tumor Cells (HAMLET) and Other Protein-Oleic Acid Complexes,” *J. Biol. Chem.* **288**, 14408–14416 (2013).

A. OCHI, K. MAKABE, R. YAMAGAMI, A. HIRATA, R. SAKAGUCHI, Y. M. HOU, K. WATANABE, O. NUREKI, K. KUWAJIMA and H. HORI, “The Catalytic Domain of Topological Knot tRNA Methyltransferase (TrmH) Discriminates between Substrate tRNA and Nonsubstrate tRNA via an Induced-Fit Process,” *J. Biol. Chem.* **288**, 25562–25574 (2013).

E. OHMAE, Y. MIYASHITA, S. TATE, K. GEKKO, S. KITAZAWA, R. KITAHARA and K. KUWAJIMA, “Solvent Environments Significantly Affect the Enzymatic Function of *Escherichia coli* Dihydrofolate Reductase: Comparison of Wild-Type Protein and Active-Site Mutant D27E,” *Biochim. Biophys. Acta, Proteins Proteomics* **1834**, 2782–2794 (2013).

H. SEKIGUCHI, A. NAKAGAWA, K. MORIYA, K. MAKABE, K. ICHIYANAGI, S. NOZAWA, T. SATO, S. ADACHI, K. KUWAJIMA, M. YOHDA and Y. C. SASAKI, “ATP Dependent Rotational Motion of Group II Chaperonin Observed by X-Ray Single Molecule Tracking,” *PLoS One* **8**, e64176 (2013).

M. YAGI-UTSUMI, T. KUNIHARA, T. NAKAMURA, Y. UEKUSA, K. MAKABE, K. KUWAJIMA and K. KATO, “NMR Characterization of the Interaction of GroEL with Amyloid β as a Model Ligand,” *FEBS Lett.* **587**, 1605–1609 (2013).

Q. ZHANG, J. CHEN, K. KUWAJIMA, H. M. ZHANG, F. XIAN, N. L. YOUNG and A. G. MARSHALL, “Nucleotide-Induced Conformational Changes of Tetradecameric GroEL Mapped by H/D Exchange Monitored by FT-ICR Mass Spectrometry,” *Sci. Rep.* **3**, 1247 (2013).

B-4) 招待講演

K. KUWAJIMA, “Sequential four-state folding/unfolding of goat α -lactalbumin and its N-terminal variants,” 5th Korea-Japan Seminar on Biomolecular Sciences—Experiments and Simulations, High1 Resort, Kanwon-do (Korea), February 2013.

K. KUWAJIMA, “Sequential four-state folding/unfolding of goat α -lactalbumin and its N-terminal variants,” the 17th Hiroshima International Symposium on Synchrotron Radiation—*Progress in materials science and synchrotron radiation*, Hiroshima University, Hiroshima, February–March 2013.

K. KUWAJIMA, “Molecular mechanisms of cytotoxicity of HAMLET and other protein-oleic acid complexes,” International Symposium on Protein Folding and Its Biological Significance, Okazaki Conference Center, Okazaki, March 2013.

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, 2012–).

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 Pacific-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, 2013).

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: Structure, 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

The 12th KIAS Protein Folding Winter School, “Molecular Mechanisms of Protein Folding,” High1 Resort, Kanwon-do (Korea), January 21-25, 2013.

最終講義, “My studies on protein folding,” 岡崎コンファレンスセンター, 2013年3月6日.

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「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-).

C) 研究活動の課題と展望

2013年3月末に分子研を定年退職し, 実験装置は全て整理したため, 実験研究を継続できる研究環境にはない。今後は, 計算機を用いて蛋白質のフォールディング開始部位を予測し, フォールディング速度過程について既知の実験結果との比較研究を行う予定である。

*) 2013 年 3 月 31 日退職

2013 年 4 月 1 日総合研究大学院大学学融合推進センター特任教授

加 藤 晃 一（教授）（2008 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：構造生物学，タンパク質科学，糖鎖生物学，NMR 分光学

A-2) 研究課題：

- a) NMR 分光法をはじめとする物理化学的手法による複合糖質およびタンパク質の構造・ダイナミクス・相互作用の解析
- b) 生化学・分子生物学的手法による複合糖質およびタンパク質の機能解析
- c) ナノテクノロジーと構造生物学の融合による生命分子科学研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) プロテアソームによるタンパク質分解活性は、プロテアソーム活性化因子（PA）とよばれるタンパク質複合体により厳密に制御されている。我々は、サブユニット選択的に重水素で標識した PA28 ヘテロ 7 量体を用いた中性子小角散乱実験に基づき、本複合体が 3つの α サブユニットと 4つの β サブユニットが互い違いに配置されたリング構造をしていることを明らかにした。また、NMR および分子生物学的手法による解析から、 α サブユニットのループがプロテアソーム内への基質の出入り口を取り囲むように配置し、基質の出入りを抑制するゲートキーパーの役割を演じていることが示唆された。一方、古細菌のプロテアソーム結合タンパク質 PbaB は、ホモ 4 量体を形成した状態で、7 量体構造を有する 20S プロテアソーム α リングと相互作用していることを、X線結晶構造解析および電子顕微鏡解析によって明らかにした。さらに PbaB は、プロテアソーム活性化能とシャペロン活性を併せ持つユニークなタンパク質であることを突きとめた。また、NMR 解析により、大腸菌の分子シャペロンである GroEL とアンフォールド状態にあるモデル基質タンパク質との相互作用の構造的基盤を明らかにすることに成功した。
- b) 細胞膜に存在する α -ジストログリカン（ α DG）上の糖鎖は、ラミニンなどの細胞外マトリックスタンパク質との相互作用を通じて、細胞膜の構造の維持や細胞間相互作用に重要な役割を果たしている。先天性筋ジストロフィー疾患においては、 α DG 上の糖鎖構造の形成不全が細胞間コミュニケーションの異常をもたらし、これにより重篤な病変が引き起こされる。先天性筋ジストロフィー原因遺伝子の 1つである AGO61 のノックアウトマウスを作出してその表現型解析を行った結果、AGO61 の欠損に伴い α DG 上のラミニン結合性を示す糖鎖の発現が消失し、脳の層形成の不全が起きることを見出した。さらに、この遺伝子にコードされたタンパク質は、 α DG 上の特定の位置に結合したマンノース残基へ N-アセチルグルコサミンを連結させるはたらきを担っており、これによりラミニン結合性を示す糖鎖が形成される起点となる糖鎖構造を作る重要な酵素であることを明らかにした。
- c) 細胞膜上の糖鎖は、クラスター化することで超分子構造を形成し、動的な分子認識場として機能している。クラスター化した糖鎖がその機能を発現するメカニズムを理解するためには、NMR による精密構造解析を実現するための適切な膜モデルを設計することが有用である。我々は、糖脂質ガングリオシド GM1, GM2 または GM3 を組込んだ小型バイセルを調製した。これらのガングリオシドは単独では水中で巨大な会合体を形成してしまうが、バイセルへ組込むことで、サイズの制御されたクラスターモデルを構築することができた。これらのガングリオシド含有バイセルを用いて α シヌクレイン（ α Syn）との相互作用解析を行った結果、 α Syn と糖脂質クラスターとの間に形成される過渡的な複合体を捉えることに成功した。また、グラム陰性菌の細胞膜表層を覆うリピド A を含有したミセルを用いて、抗菌ペプチド ザルコトキシシン IA の相互作用機構の構造基盤を解明した。NMR 解析の結果に基づき、ザルコトキシシン IA は N 末端領域を介してリピド A と結合し、ランダムコイルから α ヘリックス構造へと構造変化することを明らかにした。

B-1) 学術論文

- T. YAMAGUCHI, T. UNO, Y. UEKUSA, M. YAGI-UTSUMI and K. KATO**, “Ganglioside-Embedding Small Bicelles for Probing Membrane-Landing Processes of Intrinsically Disordered Proteins,” *Chem. Commun.* **49**, 1235–1237 (2013).
- Y. KAMIYA, K. YANAGI, T. KITAJIMA, T. YAMAGUCHI, Y. CHIBA and K. KATO**, “Application of Metabolic ^{13}C Labeling in Conjunction with High-Field Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy for Comparative Conformational Analysis of High Mannose-Type Oligosaccharides,” *Biomolecules* **3**, 108–123 (2013).
- M. YAGI-UTSUMI, Y. YAMAGUCHI, P. BOONSRI, T. IGUCHI, K. OKEMOTO, S. NATORI and K. KATO**, “Stable Isotope-Assisted NMR Characterization of Interaction between Lipid A and Sarcotoxin IA, a Cecropin-Type Antibacterial Peptide,” *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **431**, 136–140 (2013).
- G. MONDAL, H. YAGI, K. KATO and B. P. CHATTERJEE**, “Multidimensional HPLC Analysis of *N*-Linked Glycans of Serum Alpha-1-Acid Glycoprotein in Chronic Hepatitis B and Hepatitis B-Induced Liver Cirrhosis Patients,” *Trends Carbohydr. Res.* **5**, 11–19 (2013).
- M. SUGIYAMA, H. SAHASHI, E. KURIMOTO, S. TAKATA, H. YAGI, K. KANAI, E. SAKATA, Y. MINAMI, K. TANAKA and K. KATO**, “Spatial Arrangement and Functional Role of α Subunits of Proteasome Activator PA28 in Hetero-Oligomeric Form,” *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **432**, 141–145 (2013).
- S. KITAZAWA, T. KAMEDA, M. YAGI-UTSUMI, K. SUGASE, N. J. BAXTER, K. KATO, M. P. WILLIAMSON and R. KITAHARA**, “Solution Structure of the Q41N Variant of Ubiquitin as a Model for the Alternatively Folded N_2 State of Ubiquitin,” *Biochemistry* **52**, 1874–1885 (2013).
- K. KUMOI, T. SATOH, K. MURATA, T. HIROMOTO, T. MIZUSHIMA, Y. KAMIYA, M. NODA, S. UCHIYAMA, H. YAGI and K. KATO**, “An Archaeal Homolog of Proteasome Assembly Factor Functions as a Proteasome Activator,” *PLoS One* **8**, e60294 (2013).
- T. FUJIMORI, Y. KAMIYA, K. NAGATA, K. KATO and N. HOSOKAWA**, “Endoplasmic Reticulum Lectin XTP3-B Inhibits Endoplasmic Reticulum-Associated Degradation of a Misfolded α 1-Antitrypsin Variant,” *FEBS J.* **8**, 1563–1575 (2013).
- M. S. CHANDAK, T. NAKAMURA, T. TAKENAKA, T. K. CHAUDHURI, M. YAGI-UTSUMI, J. CHEN, K. KATO and K. KUWAJIMA**, “The Use of Spin Desalting Columns in DMSO-Quenched H/D-Exchange NMR Experiments,” *Protein Sci.* **22**, 486–491 (2013).
- T. YAMAGUCHI, Y. KAMIYA, Y.-M. CHOO, S. YAMAMOTO and K. KATO**, “Terminal Spin Labeling of a High-Mannose-Type Oligosaccharide for Quantitative NMR Analysis of Its Dynamic Conformation,” *Chem. Lett.* **42**, 544–546 (2013).
- M. YAGI-UTSUMI, T. KUNIHARA, T. NAKAMURA, Y. UEKUSA, K. MAKABE, K. KUWAJIMA and K. KATO**, “NMR Characterization of the Interaction of GroEL with Amyloid β as a Model Ligand,” *FEBS Lett.* **587**, 1605–1609 (2013).
- S.-J. YOON, N. UTKINA, M. SADILEK, H. YAGI, K. KATO and S. HAKOMORI**, “Self-Recognition of High-Mannose Type Glycans Mediating Adhesion of Embryonal Fibroblasts,” *Glycoconjugate J.* **30**, 485–496 (2013).
- N. NISHIDA, M. YAGI-UTSUMI, F. MOTOJIMA, M. YOSHIDA, I. SHIMADA and K. KATO**, “Nuclear Magnetic Resonance Approaches for Characterizing Interactions between the Bacterial Chaperonin GroEL and Unstructured Proteins,” *J. Biosci. Bioeng.* **116**, 160–164 (2013).

E. KURIMOTO, K. KUROKI, Y. YAMAGUCHI, M. YAGI-UTSUMI, T. IGAKI, T. IGUCHI, K. MAENAKA and K. KATO, “Structural and Functional Mosaic Nature of MHC Class I Molecules in Their Peptide-Free Form,” *Mol. Immunol.* **55**, 393–399 (2013).

M. S. CHANDAK, T. NAKAMURA, K. MAKABE, T. TAKENAKA, A. MUKAIYAMA, T. K. CHAUDHURI, K. KATO and K. KUWAJIMA, “The H/D-Exchange Kinetics of the *Escherichia coli* Co-Chaperonin GroES Studied by 2D NMR and DMSO-Quenched Exchange Methods,” *J. Mol. Biol.* **425**, 2541–2560 (2013).

K. ARAKI, S. IEMURA, Y. KAMIYA, D. RON, K. KATO, T. NATSUME and K. NAGATA, “Ero1- α and PDIs Constitute a Hierarchical Electron Transfer Network of Endoplasmic Reticulum Oxidoreductases,” *J. Cell Biol.* **202**, 861–874 (2013).

S. HORIMOTO, S. NINAGAWA, T. OKADA, H. KOBAYASHI, T. SUGIMOTO, Y. KAMIYA, K. KATO, S. TAKEDA and K. MORI, “The Unfolded Protein Response Transducer ATF6 Represents a Novel Transmembrane-Type Endoplasmic Reticulum-Associated Degradation Substrate Requiring both Mannose Trimming and SEL1L Protein,” *J. Biol. Chem.* **288**, 31517–31527 (2013).

H. YAGI, N. NAKAGAWA, T. SAITO, H. KIYONARI, T. ABE, T. TODA, S. W. WU, K. H. KHOO, S. OKA and K. KATO, “AGO61-Dependent GlcNAc Modification Primes the Formation of Functional Glycans on α -Dystroglycan,” *Sci. Rep.* **3**, 3288 (2013).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. NAKAYAMA, T. ISHII, Y. UEKUSA, K. KATO and S. KUMAZAWA, “Interaction of tea catechins with phospholipids—Roles in their tastes and biological activities,” *J. Food Drug Anal.* **20 (Suppl. 1)**, 305–308 (2012).

B-3) 総説, 著書

矢木宏和, 加藤晃一, 「IgG-Fc と Fc 受容体の複合体形成における糖鎖の役割」, *実験医学* **31**, 1602–1606 (2013).

加藤晃一, 山口拓実, 「NMR 原理」, 「揺らぎ・ダイナミクスと生体機能」, 寺嶋正秀編, 化学同人, pp. 69–79 (2013).

矢木宏和, 加藤晃一, 「神経幹細胞の幹細胞性維持における複合糖質の役割」, *生化学* **85**, 1012–1016 (2013).

山口拓実, 「ランタニドイオンを活用した常磁性 NMR 法による糖鎖の動的構造解析」, *日本化学会生体機能関連化学部会ニュースレター Vol. 28 (No. 2)*, 14–17 (2013).

Y. ZHANG, T. YAMAGUCHI and K. KATO, “New NMR tools for characterizing the dynamic conformations and interactions of oligosaccharides,” *Chem. Lett.* **42**, 1455–1462 (2013).

B-4) 招待講演

K. KATO, “Structural views of carbohydrate–protein interaction systems as potential therapeutic targets,” Kasetsart University Special Seminar, Bangkok (Thailand), January 2013.

T. YAMAGUCHI and K. KATO, “NMR approaches to the molecular basis of oligosaccharide functions,” 2013 Asian Core Winter School, Busan (Korea), January 2013.

加藤晃一, 「生命分子複合体の動態解明への実験的アプローチ」, 京都大学原子炉実験所特別講演会, 京都, 2013年2月.

K. KATO, “Conformational dynamics and interactions of oligosaccharides in physiological and pathological contexts,” Fifth Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, High1 Resort (Korea), February 2013.

M. YAGI-UTSUMI, T. YAMAGUCHI, Y. UEKUSA and K. KATO, “NMR approaches for characterizing molecular recognition process of intrinsically disordered proteins,” Fifth Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, High1 Resort (Korea), February 2013.

M. S. CHANDAK, T. NAKAMURA, K. MAKABE, T. TAKENAKA, J. CHEN, K. KATO and K. KUWAJIMA, “Structural fluctuations of free GroES and the GroES bound to the single-ring chaperonin SR1 studied by hydrogen/deuterium exchange and 2D NMR,” Fifth Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, High1 Resort (Korea), February 2013.

K. KATO, “Molecular and structural basis for N-glycan-dependent determination of glycoprotein fates in cells,” Glycobiology Gordon Research Conference, Ventura (U.S.A.), March 2013.

加藤晃一, 「NMRによる糖鎖クラスターのダイナミクスと相互作用の解析」, 糖鎖集合状態の変化による幹細胞近接場制御についての討論会, 岡崎, 2013年3月.

加藤晃一, 「NMRとSANSによるタンパク質の動的構造解析」, 中性子連携研究会, 東京, 2013年3月.

加藤晃一, 「NMRを用いた生体分子のダイナミクスの解析」, 大阪市立大学分子ナノ情報解析センターユーザーズミーティング, 大阪, 2013年4月.

加藤晃一, 「生命分子のダイナミクスと自己組織化」, 国際高等研究所研究プロジェクト「分子基盤に基づく生体機能への揺らぎとダイナミックネットワークの解明」第1回研究会, 木津川, 2013年5月.

K. KATO, “Structural glycobiology for biophysical decoding sweet messages,” 8th Asian Biophysics Association (ABA) Symposium, Jeju (Korea), May 2013.

M. YAGI-UTSUMI and K. KATO, “NMR approaches for characterizing interactions between GroEL and intrinsically disordered proteins,” 8th Asian Biophysics Association (ABA) Symposium, Jeju (Korea), May 2013.

矢木真穂, 「NMR法を用いたアミロイドβの構造研究」, 第4回「アルツハイマー病診断・治療薬創出に向けた革新的探索系構築に関する研究会」, 大府, 2013年6月.

加藤晃一, 「立体構造からみた糖鎖の不均一性」, 第32回日本糖質学会年会, 大阪, 2013年8月.

山口拓実, 加藤晃一, 「NMRを用いた糖鎖のコンフォメーション揺らぎとクラスター特性の解析」, 国際高等研究所研究プロジェクト「分子基盤に基づく生体機能ネットワークとダイナミクスの解明」第2回研究会, 木津川, 2013年8月.

加藤晃一, 「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」, 国際高等研究所研究プロジェクト「分子基盤に基づく生体機能ネットワークとダイナミクスの解明」第2回研究会, 木津川, 2013年8月.

加藤晃一, 「NMRを用いた生命分子のダイナミクス解析」, 第2回立命館大学BKC生体分子ネットワークセミナー, 草津, 2013年8月.

K. KATO, “Dynamic organization of biomolecular systems for promotion of integrative functions,” Summer School 2013 “Bioorganization”, Okazaki (Japan), August 2013.

K. KATO, “Atomic anatomy of antibody as glycoprotein,” World Biopharma Week China Focus 2013, Shanghai (China), September 2013.

加藤晃一, 「バイオ医薬品の構造をみる」, 日本バイオイメーキング学会第22回学術集会, 東京, 2013年9月.

加藤晃一, 「糖鎖が担うタンパク質社会の秩序維持」, 市民公開講座・第99回分子科学フォーラム, 岡崎, 2013年9月.

加藤晃一, 「生命分子の動的秩序形成におけるミクロ・マクロ相関の探査と設計原理の探求」, 新学術領域研究「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」第1回公開シンポジウム, 岡崎, 2013年10月.

山口拓実,「常磁性効果を活用した糖鎖の立体構造解析——NMR と分子動力学計算によるコンフォメーション空間の探査——」,日本分光学会 NMR 分光部会平成25年度講習会,名古屋,2013年10月.

K. KATO, “NMR characterization of dynamic conformational ensembles of oligosaccharides and intermolecular interactions in glycolipid clusters,” 5th Asia-Pacific NMR Symposium 2013, Brisbane (Australia), October 2013.

加藤晃一,「糖鎖の機能解明を目指したNMR アプローチ」,第52回NMR 討論会,金沢,2013年11月.

加藤晃一,「タンパク質社会の秩序維持における糖鎖の役割」,お茶の水女子大学糖鎖科学教育研究センター第6回公開シンポジウム,東京,2013年11月.

加藤晃一,「糖鎖を見る:分子模型からムービーへ」,生理学研究所研究会「構造の多様性に立脚した糖鎖機能の解明に向けて」,岡崎,2013年11月.

山口拓実,加藤晃一,「生命分子アッセムブリーにおける分子間相互作用のダイナミクスの精密解析」,山田研究会・統合バイオサイエンスシンポジウム,田原,2013年11月.

K. KUMOI, T. SATOH, K. MURATA, T. HIROMOTO, T. MIZUSHIMA, Y. KAMIYA, M. NODA, S. UCHIYAMA, M. SUGIYAMA, H. YAGI and K. KATO, “An archaeal homolog of proteasome assembly chaperone forms a homotetramer and functions as proteasome activator,” Sixth Korea-Japan Seminars on Biomolecular Science: Experiments and Simulation, Okazaki (Japan), November 2013.

K. KATO, “Structural biology of glycoconjugates: Sugar chains as therapeutic targets,” Yonsei-IMS Seminars on Biomolecular Sciences: Protein Structure and Diseases, Busan (Korea), December 2013.

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).

山口拓実,第15回日本糖質学会ポスター賞(2013).

Zhang Ying,糖鎖科学中部拠点奨励賞(2013).

山口拓実,第7回バイオ関連化学シンポジウム講演賞(2013).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本バイオイメーシング学会評議員 (1995-).
日本生化学会評議員 (2002-).
日本糖質学会評議員 (2003-), 理事 (2013-).
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 (2010-2012).

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).
第27回生体系磁気共鳴国際会議(ICMRBS)実行委員 (2013-).

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-).
独立行政法人科学技術振興機構戦略研究推進部外部評価委員 (2012-).
経済産業省 第3者委員会委員 (2013).
文部科学省研究振興局 委員会評価者 (2013-).

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-).

競争的資金等の領域長等

新学術領域研究「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」領域代表者 (2013-).

その他

(株)グライエンス 科学技術顧問 (2004-).
(株)グライエンス 取締役 (2005-2013).
総合研究大学院大学統合生命科学特別委員会委員長 (2013-).

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」,2013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」,2013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,「基礎生体分子科学」,2013年.

B-9) 学位授与

Mahesh Shantilalji Chandak,「Structural Fluctuations of the *Escherichia coli* Co-chaperonin GroES Studied by the Hydrogen/Deuterium-Exchange Method」,2013年9月,博士(理学).

B-10) 競争的資金

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「揺らぎが機能を定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-2013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-).

科研費新学術領域研究「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」(総括班),「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現の研究に関する総括」, 加藤晃一 (2013年-).

科研費新学術領域研究「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」(計画研究),「生命分子の動的秩序形成におけるマイクロ-マクロ相関の探査と設計原理の探求」, 加藤晃一 (2013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 (2013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 (2013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 (2013年).

太陽日酸(株),「タンパク質の安定同位体標識技術の開発」, 加藤晃一 (2013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 (2013年).

C) 研究活動の課題と展望

生命分子素子がダイナミックな集合離散を通じて動的な秩序構造を形成するメカニズムを明らかにするとともに, 生命分子集団の自己組織系に内在する精緻にデザインされた不安定性をあぶり出し, 機能発現にいたる時空間的展開の原理を理解することを目指す。そのために, 生命システムの動的秩序形成におけるマイクロ-マクロ相関の探査を可能とする物理化学的計測手法の開発に一層力を注ぐ。特に, 超高磁場NMR分光法, 量子ビーム溶液散乱などの計測手法を駆使して, 細胞内のタンパク質分解装置であるプロテアソームや, 細胞内および細胞表層において糖鎖認識に関わる生命分子システムを対象に, それらの離合集散のダイナミクスを解明することに取り組む。

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) チトクローム P450 によるアルカンの水酸化反応は，ステロイドホルモン合成など多くの生体反応において鍵となる反応である。これらの水酸化反応では，非常に大きい水素－重水素間での速度論的同位体効果が報告されていて，水素原子のトンネル効果によると考えられている。チトクローム P450 は，鉄 4 価オキソポルフィリン π -カチオンラジカル（Compound I）とよばれる反応活性種を用いて反応する。我々は，Compound I モデル錯体を用いてアルカンの水酸化反応における水素原子トンネル効果の寄与を検討した。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，低温条件ではかなりの水素原子トンネル効果の寄与があること，その寄与の大きさがアルカンの C-H 結合の強さや Compound I モデル錯体の活性度により変化することを見いだした。
- b) 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。最近我々は，マンガン 4 価サレン錯体とヨードシリアルエンとの反応により，ヨードシリアルエン付加体の合成，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，ヨードシリアルエ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。本年度我々は，この解明された構造を基に，ヨードシリアルエンの構造や錯体の対アニオンが付加錯体の反応性や不斉選択性にどのように影響するかを研究した。また，コバルトサレン錯体の電子構造を研究し，コバルトに配位する軸位配位子と混合原子価状態の関係を解明した。
- 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，有機溶媒の可溶性次亜塩素酸塩の合成に成功し，これにより低温中鉄 3 価ヘムに次亜塩素酸イオンが配位した錯体の合成，同定，反応性の解明に世界で初めて成功した。

B-1) 学術論文

T. KURAHASHI and H. FUJII, "Unique Ligand Radical Character of an Activated Cobalt Salen Catalyst that is Generated by Aerobic Oxidation of a Cobalt(II) Salen Complex," *Inorg. Chem.* **52**, 3908–3919 (2013).

C. WANG, T. KURAHASHI and H. FUJII, "Oxygen-Atom Transfer from Iodosylarene Adducts of a Manganese(IV) Salen Complex: Effect of Arenes and Anions on I(III) of the Coordinated Iodosylarene," *Inorg. Chem.* **52**, 9557–9566 (2013).

B-4) 招待講演

藤井 浩, 「高原子価鉄オキソヘム錯体による酸化反応と反応性制御機構」, 第46回酸化反応討論会, 筑波大, つくば, 2013年11月.

藤井 浩, 「高原子価鉄オキソポルフィリン錯体を用いた酵素反応の研究」, 山形大学理学部, 山形, 2013年8月.

藤井 浩, 「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」, 分子研研究会「生体配位化学の最前線と展望」, 岡崎, 2013年2月.

藤井 浩, 「金属酵素の活性部位の電子構造と酵素反応」, 分子研研究会「生物物質科学の展望」, 岡崎, 2013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

山形大学大学院理工学専攻物質生命化学研究科, 集中講義「物質生命化学特別講義I」, 2013年8月7日–8日.

B-10) 競争的資金

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).

科研費基盤研究(B),「次亜塩素酸錯体の反応性と反応選択性の分子機構の解明及びそれに基づく制御法の開発」, 藤井 浩 (2014年-2017年).

C) 研究活動の課題と展望

生体内の金属酵素の構造と機能の関わりを, 酵素反応中間体の電子構造から研究している。金属酵素の機能をより深く理解するためには, 反応中間体の電子状態だけでなく, それを取り囲むタンパク質の反応場の機能を解明することも重要であると考え。これまでの基礎研究で取得した知見や手法をさらに発展させて, 酵素, タンパクのつくる反応場の特質と反応性の関係を解明していきたいと考える。また, これらの研究を通して得られた知見を基に, 酵素機能変換法の新概念を確立できるよう研究を進めたいと考える。

生体分子情報研究部門

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) 急速溶液交換法による膜タンパク質の構造変化計測系の構築
- c) 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析
- d) 哺乳動物カリウムチャンネルタンパク質の赤外分光解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 古細菌型ロドプシンは 7 回膜貫通型ヘリックスからなり、通常、all-trans 型レチナールを発色団として結合する。trans-cis 異性化によって引き起こされるタンパク質の構造変化によって、イオンポンプ、イオンチャンネル、光センサーと様々な機能を発現することが知られている。時間分解赤外分光法により機能発現に至る分子構造の変化を解析することで、タンパク質骨格や側鎖、さらには水分子の構造変化まで明らかにすることが可能である。本年度は、古細菌型ロドプシンでありながら、11-cis 型レチナールを結合することが可能な Middle rhodopsin (MR) の構造変化解析を行い、これまでに見られたことのない β シート構造の変化を観測することに成功した (Y. Furutani et al. J. Phys. Chem. B, 2013)。all-trans レチナールが 13-cis へと光異性化した後、細胞外側領域に存在すると推定される β シートにまで構造変化が伝播している可能性を示唆する結果である。
- b) 膜タンパク質は神経伝達物質、味物質、匂い分子、ATP、カルシウムイオンなど様々な分子やイオンを結合し、情報伝達やエネルギー変換などの機能を発現している。これらの機能発現機構を解明するためには、生体分子やイオンの結合・解離に伴う構造変化を時分割で解析する手法が必要である。ストップフローで用いる圧縮空気作動型ポンプにより、膜タンパク質試料の上部の緩衝液を急速に置換する手法を開発した。塩化物イオンや硝酸イオンを結合するハロロドプシンに対して、本手法を適用し、そのイオン結合に伴う赤外吸収スペクトル変化の時分割計測に成功した (Y. Furutani et al. BIOPHYSICS, 2013)。ステップスキャン法を用いることで、2.5 msec での時分割計測を行い、緩衝液交換が 25 msec 程度で終了していることを硝酸イオンの NO 伸縮振動より確認した。また、ハロロドプシンのイオン取込み反応をレチナールの C=C 伸縮振動により追跡した。本手法は、イオンチャンネル、トランスポーター、イオンポンプ、受容体等の様々な膜タンパク質に適用可能な手法である。
- c) 動物は外界の光情報を、視覚のみならず体内時計の調節などの「非視覚」の用途にも用いている。哺乳類では、メラノプシンという光受容タンパク質が「非視覚」の光受容に関わることがわかっている。前年度までに、ヒトとマウスのメラノプシンを、哺乳培養細胞を用いて大量調製することに成功していた。今年度は、それらのメラノプシンについて分光学的・生化学的な性質を解析した。その結果、動物種の異なるメラノプシンの間で熱安定性が異なることが、「非視覚」機能に重要であることを示唆する知見が得られた。
- d) イオンチャンネルは、細胞内外での物質のやりとりを担う膜タンパク質である。近年様々なイオンチャンネルの X 線結晶構造解析が進展しているが、個々のチャン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イオンチャンネルのうち、two-pore 型と呼ばれるタイプのチャンネルについて、哺乳

培養細胞を用いて大量調製した試料に対して赤外分光解析を行い、そのイオンチャネルが持つ特徴的なイオン選択性を生み出すメカニズムの理解につながる結果を得た。

B-1) 学術論文

Y. FURUTANI, T. OKITSU, L. REISSIG, M. MIZUNO, M. HOMMA, A. WADA, Y. MIZUTANI and Y. SUDO, “Large Spectral Change Due to Amide Modes of a β -Sheet upon the Formation of an Early Photointermediate of Middle Rhodopsin,” *J. Phys. Chem. B* **117**, 3449–3458 (2013).

H. GUO, T. KIMURA and Y. FURUTANI, “Distortion of the Amide-I and -II Bands of an α -Helical Membrane Protein, *pharaonis* Halorhodopsin, Depends on Thickness of Gold Films Utilized for Surface-Enhanced Infrared Absorption Spectroscopy,” *Chem. Phys.* **419**, 8–16 (2013).

Y. FURUTANI, T. KIMURA and K. OKAMOTO, “Development of a Rapid Buffer-Exchange System for Time-Resolved ATR-FTIR Spectroscopy with the Step-Scan Mode,” *BIOPHYSICS* **9**, 123–129 (2013).

M. KOYANAGI, E. TAKADA, T. NAGATA, H. TSUKAMOTO and A. TERAOKA, “Homologs of Vertebrate Opn3 Potentially Serve as a Light Sensor in Nonphotoreceptive Tissue,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **110**, 4998–5003 (2013).

H. TSUKAMOTO and D. L. FARRENS, “A Constitutively Activating Mutation Alters the Dynamics and Energetics of a Key Conformational Change in a Ligand-Free G Protein-Coupled Receptor,” *J. Biol. Chem.* **288**, 28207–28216 (2013).

B-3) 総説、著書

古谷祐詞, 「微生物型ロドプシンの光誘起イオン輸送メカニズムの解明」, 「オプトジェネティクス——光工学と遺伝学による行動制御技術の最前線——」, NTS, pp. 69–78 (2013).

B-4) 招待講演

Y. FURUTANI, “Water Molecules and Ions in Membrane Proteins Studied by FTIR Spectroscopy,” The 5th International Conference as the 2012 OCARINA Annual International Meeting, Osaka (Japan), March 2013.

Y. FURUTANI, “Stimulus-Induced Difference FTIR Spectroscopy Reveals Structural Dynamics of Membrane Proteins,” 15th Japan-Korea Symposium on Molecular Science Hierarchical Structure from Quantum to Functions of Biological Systems, Kobe (Japan), July 2013.

Y. FURUTANI, “Water Molecules and Ions in Membrane Proteins Studied by Stimulus-Induced Difference FTIR Spectroscopy,” Seventh International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy, Kobe (Japan), August 2013.

Y. FURUTANI, “Water Molecules and Ions in Membrane Proteins Studied by FTIR Spectroscopy,” Annual Meeting on Photochemistry 2013, Matsuyama (Japan), September 2013.

Y. FURUTANI, “Stimulus-Induced Difference FTIR Spectroscopy on Ion-Channel and Ion-Pump Proteins,” Sixth Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Okazaki (Japan), November 2013.

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).

古谷祐詞, 第6回(2013年度)分子科学会奨励賞 (2013).

塚本寿夫, 平成24年度日本生物物理学会中部支部講演会優秀発表者 (2013).

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).

学会の組織委員等

第15回レチナ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, 「統合生命科学シリーズ」, 2012年7月8日.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「基礎生体分子科学」, 2012年11月12日.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「構造生体分子科学」, 2013年12月19, 24日.

B-9) 学位授与

郭 浩, 「Investigation of measurement conditions of surface-enhanced infrared absorption spectroscopy and its application to membrane proteins」, 2013年3月, 博士(理学).

藤原邦代, 「時間分解フーリエ変換赤外分光計測による光駆動型塩化物イオンポンプタンパク質ファラオニス・ハロロドプシンのイオン輸送機構に関する研究」, 2013年9月, 博士(理学).

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).

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物理・化学刺激によるゲート開閉の分子機構解明」, 古谷祐詞 (2013年).

科研費若手研究(B),「哺乳動物が環境光を感知するためのメラノプシンの分子特性の解明」, 塚本寿夫 (2013年-2014年).

C) 研究活動の課題と展望

研究室を主催してから開発に取り組んできた急速溶液交換時間分解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。木村哲就助教(現所属;理化学研究所城生体金属科学研究室)の手助けのもと,株式会社ユニソクと共同で開発したシステムである。現在,海外の共同研究者とトランスポーターの輸送機構に着目した研究へと発展させている。塚本寿夫特任助教が立ち上げた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,哺乳動物カリウムイオン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) 自己集積型金属錯体触媒の設計・開発
- c) 新しい遷移金属錯体の創製

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) パラジウム錯体触媒，ロジウム錯体触媒などを両親媒性高分子によって機能修飾することで，これら遷移金属錯体触媒有機変換工程の多くを完全水系メディア中で実施することに成功した。水中不均一での高立体選択的触媒反応の開発を世界にさがけて成功した。とくに最近では鉄ナノ粒子触媒の固定化と水中での水素化触媒を実現した。
- b) 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，さらに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。自己集積型触媒により ppb レベルでの有機分子変換触媒を達成した。
- c) 新しいピンサー錯体の合成方法論を確立し，それら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。

B-1) 学術論文

Y. M. A. YAMADA, H. OHTA, Y. YUYAMA and Y. UOZUMI, “Polymeric Bimetallic Catalyst-Promoted In-Water Dehydrative Alkylation of Ammonia and Amines with Alcohols,” *Synthesis* **45**, 2093–2100 (2013).

R. HUDSON, G. HAMASAKA, T. OSAKO, Y. M. A. YAMADA, C.-J. LI, Y. UOZUMI and A. MOORES, “Highly Efficient Iron(0) Nanoparticle-Catalyzed Hydrogenation in Water in Flow,” *Green Chem.* **15**, 2141–2148 (2013).

H. ZHOU and Y. UOZUMI, “Asymmetric Sonogashira Coupling with a Chiral Palladium Imidazoindole Phosphine Complex,” *Synlett* 2550–2554 (2013).

A. OHTAKA, E. SAKAGUCHI, T. YAMAGUCHI, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI, O. SHIMOMURA and R. NOMURA, “A Recyclable “Boomerang” Linear Polystyrene-Stabilized Pd Nanoparticles for the Suzuki Coupling Reaction of Aryl Chlorides in Water,” *ChemCatChem* **5**, 2167–2169 (2013).

M. MINAKAWA, H. BAEK, Y. M. A. YAMADA, J. W. HAN and Y. UOZUMI, “Direct Dehydrative Esterification of Alcohols and Carboxylic Acids with a Macroporous Polymeric Acid Catalyst,” *Org. Lett.* **15**, 5798–5801 (2013).

B-3) 総説，著書

Y. UOZUMI, “C–C Bond-Forming Reactions via the Heck Reaction,” *Comprehensive Chirality* **4**, 2–17 (2012).

Y. UOZUMI, “C–C Bond-Forming Reactions via Cross-Coupling,” *Comprehensive Chirality* **4**, 18–32 (2012).

B-4) 招待講演

Y. UOZUMI, “Molecular Architecture-Based Administration of Catalysis in Water via Self-Assembly of Amphiphilic Pincer Complexes,” 2013 Asian Core Winter School, Busan (Korea), January 2013.

Y. UOZUMI, “Development of Heterogeneous Catalysis toward Ideal Chemical Processes,” 3rd IMS-CHIMIE PARISTECH Joint Symposium, Okazaki (Japan), February 2013.

Y. UOZUMI, “Molecular Architecture-Based Administration of Catalysis in Water via Self-Assembly of an Amphiphilic Pincer Complexes,” 96th Canadian chemistry Conference and Exhibition, Quebec (Canada), May 2013.

B-6) 受賞, 表彰

魚住泰広, 有機合成化学協会研究企画賞 (1992).

魚住泰広, 日本薬学会奨励賞 (1997).

山田陽一, 日本薬学会奨励賞 (2005).

魚住泰広, 第6回グリーン・サステナブル・ケミストリー賞, 文部科学大臣賞 (2007).

魚住泰広, 平成18年度日本化学会学術賞 (2007).

山田陽一, 文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2008).

山田陽一, Thieme Chemistry Journal Award (2008).

魚住泰広, 井上学術賞 (2010).

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 (2013).

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 誌アドバイザーボード (2002–).

SYNFACTS 誌編集委員 (2005–).

ACS Combinatorial Science 誌エディトリアルアドバイザーボード (2010–).

The Chemical Record 編集委員 (2010–).

その他

科学技術振興機構 CREST 研究「水中での精密分子変換を実現するナノ遷移金属触媒創製」 研究リーダー (2002–2007).

理化学研究所研究チームリーダー (2007–).

経済産業省グリーン・サステナブルケミカルプロセス基盤技術開発プロジェクト 研究チームリーダー (2008–2012).

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」 研究副リーダー (2011–2016).

B-8) 大学での講義, 客員

九州大学大学院理学府, 2013年 6月 14日–15日.

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–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ックス内での発生・分散と固定化に成功し, アルコール酸化やハロゲン化芳香族の脱ハロゲン反応など, グリーン化学の中心課題を解決してきた。他の金属種(W, Ru, Rh, Cu)に適用範囲を拡張しつつある。今後さらに基礎科

学的論証を重ねる予定である。さらに金属架橋高分子の自己集積触媒の開発に注力しつつあり、マイクロ流路内の層流界面での自己集積錯体触媒膜の創製に成功した。

独自に開発した高立体選択的不斉ユニットである pyrroloimidazolone 骨格ならではの有効な利用を推進しつつあり、上述の水中不斉触媒プロセスの達成に加えて、新しいピンサー型錯体触媒の設計・開発に至っている。その過程で見いだしたりガンド導入法によるピンサー錯体構築は従来の種々のピンサー型錯体調製と全く異なる錯体形成経路を経ることから、従来法では合成困難であった立体規制に富むピンサー型錯体の自在調製に道筋をつけた。発展に注力したい。

現時点では競争的研究資金の獲得も順調であり、研究設備などは充足している。大学院生ならびに博士研究員の確保も問題ない。水中機能性固定化触媒に関するCREST研究が2008年3月に終了し、続いてその成果を実践的に発展させるため経済産業省(NEDO)プロジェクトを2008年9月に開始し、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

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) 金属錯体を用いた電気化学的多電子酸化還元反応
- c) 金属錯体の規則配列による反応場構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 水の四電子酸化反応を促進する金属錯体触媒の開発に取り組んだ。具体的には、酸素発生触媒機能の向上を目的とし、プロトン共役電子移動・基質捕捉などの機能を付与した金属錯体の合成と機能評価を行った。その結果、プロトン共役電子移動部位の導入は酸素発生に伴う過電圧の低下に、基質捕捉サイトの導入は触媒反応速度の向上にそれぞれ有効であることを見出した。
- b) 種々の多電子酸化還元反応に対する金属錯体触媒の開発および機能評価を行った。具体的には、二酸化炭素の多電子還元、水の二電子還元（水素発生）、水の四電子酸化（酸素発生）を促進する金属錯体を合成、構造解析し、それらの触媒反応速度を電気化学的手法により算出した。その結果、いくつかの金属錯体が電極表面において極めて高い活性を有することが判明した。
- c) 自己集合作用を利用した金属錯体の規則配列と反応場構築を試みた。具体的には、高い対称性 (D_{4h}) を有するパドルフィール型二核錯体に、相補的な分子間アレーン-パーフルオロアレーン相互作用が可能な官能基を導入し、規則構造の構築を促した。その結果、パドルフィール錯体の軸位が細孔内に配置された多孔性フレームワーク構造を創り出すことに成功した。

B-1) 学術論文

T. ITOH, M. KONDO, M. KANAIKE and S. MASAOKA, "Arene-Perfluoroarene Interactions for Crystal Engineering of Metal Complexes: Controlled Self-Assembly of Paddle-Wheel Dimers," *CrystEngComm* **15**, 6122–6126 (2013).

S. MURATSUGU, M. H. LIM, T. ITOH, W. THUMRONGPATANARAKS, M. KONDO, S. MASAOKA, T. S. A. HOR and M. TADA, "Dispersed Ru Nanoclusters Transformed from a Grafted Trinuclear Ru Complex on SiO_2 for Selective Alcohol Oxidation," *Dalton Trans.* **42**, 12611–12619 (2013).

B-3) 総説、著書

近藤美欧, 正岡重行, 「金属錯体を用いた水の酸化触媒の創製と人工光合成への挑戦」, 「人工光合成 実用化に向けた最新技術」, 情報機構, 84–94 (2013).

岡村将也, 正岡重行, 「プロトン共役電子移動を示す有機配位子を導入した多電子移動錯体触媒」, ペトロテック **36**, 1613–617 (2013).

M. YOSHIDA and S. MASAOKA, “Cerium(IV) in an Acidic Solution: A ‘Non-Innocent’ Oxidant,” in *Cerium: Molecular Structure, Technological Applications and Health Effects*, A. Izyumov and G. Plaksin, Eds., Nova Science Publishers, Inc., 177–185 (2013).

B-4) 招待講演

正岡重行, 「太陽系外惑星での光合成～錯体化学の視点から～」, 若手研究者による分野間連携研究ワークショップ, ICT 文化ホール, 石垣島, 2013年11月.

正岡重行, 「人工光合成を志向した金属錯体化学」, 愛知教育大学理科共通コロキウム, 愛知教育大学, 刈谷, 2013年11月.

S. MASAOKA, “Multi-electron transfer reactions catalyzed by transition metal complexes,” Biomimetic Material Conversion in Coordination Chemistry, 63rd JSCC Symposium, University of the Ryukyus, Okinawa (Japan), November 2013.

S. MASAOKA, “Water Oxidation Catalyzed by Artificial Transition Metal Complexes,” Molecular mechanism of light-driven water oxidation: Photosystem II and artificial photosynthesis, The 51st Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Kyoto International Conference Center, Kyoto (Japan), October 2013.

S. MASAOKA, “Water Oxidation Catalyzed by Metal Complexes,” International Symposium for the 70th anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan, Tohoku University, Sendai (Japan), September 2013.

正岡重行, 「太陽系外惑星での光合成～錯体化学の視点から～」, 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ワークショップ「低温度星まわりの生命居住可能惑星における植物特性の考察とその観測に向けて」テーマA(理論・実験)ワークショップ, 浜名湖ロイヤルホテル, 浜名湖, 2013年9月.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする小分子の多電子酸化還元反応」, 山形大学理学部・テニュアトラックシンポジウム「微小空間・機能の可視化技術」, 山形大学理学部, 山形, 2013年7月.

S. MASAOKA, “Water Oxidation by Mono- and Multinuclear Metal Complexes,” IMS Asian International Symposium: Japan-China Joint Coordination Chemistry Symposium for Young Scientists on Advanced Coordination Materials, Institute for Molecular Science, Okazaki (Japan), June 2013.

S. MASAOKA, “Water Oxidation by Mononuclear and Multinuclear Metal Complexes: Mechanisms and a New Catalyst Design,” The 1st International Symposium on Chemical Energy Conversion Processes (ISCECP-1), Kyushu University, Fukuoka (Japan), June 2013.

S. MASAOKA, “Water Oxidation Catalyzed by Mono- and Multinuclear Metal Complexes,” Asian International Symposium—Inorganic Chemistry/Coordination Chemistry, Organometallic Chemistry—, Ritsumeikan University, Kusatsu (Japan), March 2013.

S. MASAOKA, “Development of highly-active oxygen evolving catalysts toward visible-light-induced water splitting,” 人工光合成研究の最前線 挑戦する若手研究者, JSTさきがけ「光エネルギーと物質変換」研究領域研究成果報告会, 立命館大学, 草津, 2013年3月.

正岡重行, 「植物のデザインに学ぶ人工光合成～金属錯体による酸素発生反応～」, 第14回自然科学研究機構シンポジウム「分子が拓くグリーン未来」, 学術総合センター (一橋講堂), 東京, 2013年3月.

正岡重行, 「人工光合成研究の立場から考える太陽系外惑星での光合成」, 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ワークショップ「低温度星まわりの生命居住可能惑星における植物特性の考察とその観測に向けて」, 伊豆修善寺ホテル滝亭, 伊豆, 2013年3月.

S. MASAOKA, "Water Oxidation Catalyzed by Mono- and Multinuclear Metal Complexes," 2012 OCARINA Annual International Meeting, OCARINA, Osaka (Japan), March 2013.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする人工光合成～現状と将来像～」, 第一回自然科学研究機構コロキウム「自然科学の将来像」, ザ・プリンス箱根, 箱根, 2013年2月.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする酸素発生反応」, 東北大学卓越大学院研究会「金属錯体の固体物性最前線」, 東北大学, 仙台, 2013年2月.

S. MASAOKA, "Water Oxidation Catalyzed by Mono- and Multinuclear Metal Complexes," The 6th Japan-China Joint Symposium on Functional Supramolecular Architectures, Okazaki (Japan), January 2013.

B-6) 受賞, 表彰

岡村将也, 錯体化学会第63回討論会学生講演賞 (2013).

中村 豪, 平成25年度(第4回)総合研究大学院大学学長賞 (2013).

吉田将己, 第2回CSJ 化学フェスタ2012優秀ポスター賞 (2012).

中村 豪, 第2回CSJ 化学フェスタ2012優秀ポスター賞 (2012).

岡村将也, 第2回CSJ 化学フェスタ2012優秀ポスター賞 (2012).

村瀬雅和, 第2回CSJ 化学フェスタ2012優秀ポスター賞 (2012).

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

錯体化学会ホームページ委員 (2013-).

錯体化学会若手部会九州支部世話人 (2006-2010).

錯体化学会若手部会事務局 (2006).

学会の組織委員等

総研大アジア冬の学校2013主催 (2013).

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-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, 2013年4月-.

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(A), 「配位不飽和な自己集合性多核錯体を触媒とする多電子酸化還元反応」, 正岡重行 (2013年-2015年).

科研費新学術領域(公募研究), 「水の酸化の超高効率化を目指した超分子錯体触媒の創製」, 正岡重行 (2013年-2014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,「酸素発生型光合成への挑戦:機構理解と新機能創出」, 正岡重行 (2013年).

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CO₂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かけ研究「光エネルギーと物質変換」領域,「水の可視光完全分解を可能にする高活性酸素発生触媒の創製」, 正岡重行 (2009年-2012年).

科研費若手研究(B),「水の分解反応に対する非貴金属系高活性金属錯体触媒の創製」, 正岡重行 (2009年-2010年).

科学技術振興機構重点地域研究開発推進プログラム「シーズ発掘試験A(発掘型)」,「有機-無機複合型超高活性酸素発生錯体触媒の創製」, 正岡重行 (2009年).

九州大学教育研究プログラム・研究拠点形成プロジェクト,「混合原子価2核錯体を用いた量子セルオートマトン材料の開発」, 正岡重行 (2009年).

(財)鉄鋼業環境保全技術開発基金第29回環境助成研究,「鉄-硫黄系金属錯体を用いた安価高活性水素発生触媒の創成」, 正岡重行 (2008年-2009年).

(財)日産科学振興財団環境研究助成,「水の完全光分解を実現可能とする高活性酸素発生触媒の創成」, 正岡重行 (2008年).

科研費若手研究(B),「高度に組織化された球状水素発生触媒の創製」, 正岡重行 (2006年-2007年).

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。そのために、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方法の開拓、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く。

6-6 協奏分子システム研究センター

階層分子システム解析研究部門

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。このリズム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

A. MUKAIYAMA, T. NAKAMURA, K. MAKABE, K. MAKI, Y. GOTO and K. KUWAJIMA, "Native-State Heterogeneity of β_2 -Microglobulin as Revealed by Kinetic Folding and Real-Time NMR Experiments," *J. Mol. Biol.* **425**, 257–272 (2013).
A. MUKAIYAMA, T. NAKAMURA, K. MAKABE, K. MAKI, Y. GOTO and K. KUWAJIMA, "The Molten Globule of β_2 -Microglobulin Accumulated at pH 4 and Its Role in Protein Folding," *J. Mol. Biol.* **425**, 273–291 (2013).
M. S. CHANDAK, T. NAKAMURA, K. MAKABE, T. TAKENAKA, A. MUKAIYAMA, T. K. CCAUDHURI, K. KATO and K. KUWAJIMA, "The H/D-Exchange Kinetics of the *Escherichia coli* Co-Chaperonin GroES Studied by 2D NMR and DMSO-Quenched Exchange Methods." *J. Mol. Biol.* **425**, 2541–2560 (2013).

B-4) 招待講演

S. AKIYAMA, "KaiC as a Circadian Pacemaker of Cyanobacterial Circadian Clock," 6th Japan-Korea Seminars on Biomolecular Science: Experiments and Simulation, Okazaki (Japan), November 2013.

秋山修志,「タンパク質時計のブラックボックスを開く」,大阪大学蛋白質研究所セミナー第4回神経科学と構造生物学の融合研究会,自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター,岡崎,2013年11月.

S. AKIYAMA, “KaiC as a Circadian Pacemaker of Cyanobacterial Circadian Clock,” 15th Japan-Korea Symposium on Molecular Science, “Hierarchical Structure from Quantum to Functions of Biological Systems,” Kobe (Japan), July 2013.

S. AKIYAMA, “Circadian Pacemaker of Cyanobacteria by Intra-Molecular Feedback Regulation of KaiC ATPase,” IMS Workshop on “Hierarchical Molecular Dynamics: From Ultrafast Spectroscopy to Single Molecule Measurements,” Okazaki (Japan), June 2013.

S. AKIYAMA, “Tracking and Visualizing Intramolecular Feedback in Cyanobacterial Clock Protein KaiC,” The 5th Japan-Taiwan joint meeting on neutron and X-ray scattering, Tokai (Japan), February 2013.

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).

日本生物物理学会中部支部長 (2013-).

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).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

SPring-8利用研究課題審査委員会 (2011-).

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, 2013-).

日本放射光学会「放射光」会誌編集委員 (2013-).

日本結晶学会「日本結晶学会」会誌編集委員 (2010-2012).

B-8) 大学での講義, 客員

岡崎統合バイオサイエンスセンターサマースクール, 講師, 2013年8月22日-24日.

北海道大学大学院講義, 集中講義「ナノテクノロジー・ナノサイエンス概論I ナノバイオシステム論」, 2013年8月7日-9日.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さがけ研究,「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).

科研費若手研究(B),「溶液中における時計タンパク質 KaiC の動態解析」,向山厚 (2013年-2014年).

科研費基盤研究(B),「時計タンパク質の固有周波数の分子科学的解明」,秋山修志 (2013年-2015年).

C) 研究活動の課題と展望

向山助教, 博士研究員, 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について生物物理学, 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った。分子科学研究所へ着任してから2年目を迎え, その間集中して取り組んできた分子時計システムについての研究成果を取りまとめる段階となり, 現在その準備を進めている。

液中高速 AFM と X 線溶液散乱システムの立ち上げに取り組んでおり, 近い時期に, 分子システムの動的構造解析手段が整備される見通しである。次年度は, 種々の分子システムについて応用研究を行うだけでなく, 同時に計測効率や精度の向上に取り組みたい。

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) 凝縮相化学動力学過程の量子理論
- b) 分子システムの環境適応性の理論

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 光合成を行う藍色細菌や緑色植物の光化学系 II 反応中心における初期電荷分離過程の様態は、同じく光合成を行う紅色細菌のそれとは大きく異なることが明らかになってきた。紅色細菌の反応中心ではスペシャル・ペアからの電荷分離は数ピコ秒の時間スケールで起こる事が明らかになっているが、藍色細菌や緑色植物の光化学系 II 反応中心での初期電荷分離はスペシャル・ペアの隣にあるアクセサリ・クロロフィルから数百フェムト秒～1 ピコ秒の時間スケールで起こることが明らかになりつつある。我々は、凝縮相量子動力学の視点から光化学系 II 反応中心で見られるような超高速光誘起電子移動反応の可能性やその原因を解析している。タンパク質の運動が色素分子の電子状態に及ぼす揺らぎ／タンパク質の再配置過程の時間スケールと色素の電子励起の量子力学的非局在化との競合が光誘起電子移動反応の速度を制御し、電子供与体と電子受容体との結合が数十 cm^{-1} 程度である状況においてでさえ数百フェムト秒の時間スケールの電荷分離が実現し得ることを理論的に示した。
- 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、電子励起がエネルギ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

A. ISHIZAKI, "Interaction between Quantum Mixing and Environmental Dynamics Controlling Ultrafast Photoinduced Electron Transfer and Its Temperature Dependence," *Chem. Lett.* **43**, 1406–1408 (2013).

L. BANCHI, G. COSTAGLIOLA, A. ISHIZAKI and P. GIORDA, "An Analytical Continuation Approach for Evaluating Emission Lineshapes of Molecular Aggregates and the Adequacy of Multichromophoric Förster Theory," *J. Chem. Phys.* **138**, 184107 (14 pages) (2013).

B-3) 総説, 著書

石崎章仁, 「光合成光捕集系における電子エネルギー移動と量子コヒーレンス」, *レーザー研究* **41**, 391–397 (2013).

B-4) 招待講演

A. ISHIZAKI, “Quantum aspects in photosynthetic light harvesting—old roots, new shoots,” Sixth Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Okazaki Conference Center, Okazaki (Japan), November 2013.

A. ISHIZAKI, “Electronic and vibrational wave packets in photosynthetic energy transfer,” Quantum Simulation of Open Quantum Systems, Albert-Ludwigs Universität Freiburg, Freiburg (Germany), November 2013.

A. ISHIZAKI, “Electronic and vibrational wave packets in photosynthetic energy transfer,” Vancouver-Okazaki Workshop on Coherent and Incoherent Wave Packet Dynamics, Okazaki Conference Center, Okazaki (Japan), November 2013.

A. ISHIZAKI, “TBA,” International Conference on Computational Modeling Methods and Applications, Northeast Normal University, Changchun, Jilin (China), September 2013. (スケジュールの不都合によりキャンセル)

A. ISHIZAKI, “Quantum dynamical aspects of efficient energy transfer in photosynthetic light harvesting,” The 15th Asian Chemical Congress, Sentosa (Singapore), August 2013.

石崎章仁, 「光合成光捕獲系におけるエネルギーと電子の移動」, CMSI 第1部会「新物質新量子相の基礎科学」夏の学校 2013, 蔵王, 2013年8月.

A. ISHIZAKI, “What do we learn about light harvesting systems from long-lived electronic coherence?” Quantum Effects in Condensed-phase Systems, Telluride Science Research Center, Telluride (U.S.A.), July 2013.

A. ISHIZAKI, “Quantum aspects in photosynthetic light harvesting—old roots, new shoots,” The 15th Japan-Korea Symposium on Molecular Science: Quantum to Life, Kobe (Japan), July 2013.

A. ISHIZAKI, “TBA,” Quantum Transport in Light-Harvesting Bio-nanostructures, Florence (Italy), March 2013. (スケジュールの不都合によりキャンセル)

石崎章仁, 「植物・細菌の光捕獲戦略」, 若手研究者による分野間連携研究プロジェクトワークショップ「太陽系外惑星のハビタビリティと光合成」, 修善寺, 2013年3月.

石崎章仁, 「分子システムが見せる自律性の理解に向けて」, 第1回 NINS Colloquium 「自然科学の将来像」, 箱根, 2013年2月.

A. ISHIZAKI, “What do we learn about light harvesting systems from long-lived electronic coherence?” International Workshop on Quantum Biology: Facts and Future Prospects, Indian Institute of Technology Rajasthan, Jodhpur (India), January 2013.

A. ISHIZAKI, “What do we learn about light harvesting systems from long-lived electronic coherence?” The 72nd Okazaki Conference on Ultimate Control of Coherence, Okazaki Conference Center, Okazaki (Japan), January 2013.

A. ISHIZAKI, “TBA,” 7th Winter School on Quantum Information Science in Taiwan, Kaohsiung (Taiwan), January 2013. (スケジュールの不都合によりキャンセル)

A. ISHIZAKI, “Photosynthetic Light Harvesting: Recent Advances in Theoretical and Experimental Studies,” SOKENDAI Asian Winter School, Frontiers in Photo-Molecular Science, Okazaki (Japan), January 2013.

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 22nd Solvay Conference on Chemistry, Scientific Secretary (2010).

その他

The Netherlands Foundation for Fundamental Research on Matter, external reviewer (2013).

Research Grant Council of Hong Kong, external reviewer (2012).

B-8) 大学での講義, 客員

Wissenschaftskolleg zu Berlin, Fellow 2012–2013, 2013年2月–3月, 5月–6月.

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(A), 「光合成光捕獲系における電子エネルギー移動ダイナミクスとその環境適応性の分子理論」, 石崎章仁 (2013年–2017年).

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」, 石崎章仁 (2012年–2013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」, 石崎章仁 (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的理論的解析」, 石崎章仁 (2006年–2008年).

C) 研究活動の課題と展望

米国における助教授人事を途中で辞退し、帰国・着任してから2年が経過しようとしている。当面の科学的課題は、これまで取り組んできた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の卓越した効率の物理化学的理解に加えて、環境応答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。この研究課題を通して、一般に、電子構造・分子動力学という歴史的進展の先にある分子システムがその機能を自律的に発現させるための動力学自由度の条件を探りたい。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。しかし、更なる研究の広がりや深まり・国際競争力増強のためにはグループの拡充が重要課題の一つであることは言うまでもない。ヒューマンリソースは真剣に議論すべきクルーシャルな問題である。

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) 操作的観点による物理学理論の再構築および情報理論の発展

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。これを契機に新しいレーザー発振の原理や新しい準粒子の凝縮体生成メカニズムへの研究に着手した。
- 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ヤモンド中の窒素・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。また、非ガウスモードの典型例であるラゲールガウスモードを用いて光の偏光状態を推定する方法を提案し、実装した。
- 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。そして、少数サンプルに対する情報量に関する研究に着手した。

B-1) 学術論文

Y. SUSA, Y. SHIKANO and A. HOSOYA, “Reply to “Comment on ‘Optimal Probe Wavefunction of Weak-Value Amplification’”,” *Phy. Rev. A* **87**, 046102 (2 pages) (2013).

T. HORIKIRI, Y. MATSUO, Y. SHIKANO, A. LOGGLER, S. HOFLING, A. FORCHEL and Y. YAMAMOTO, “Temperature Dependence of Highly Excited Exciton Polaritons in Semiconductor Microcavities,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 084709 (10 pages) (2013).

A. U. HARDAL, P. XUE, Y. SHIKANO, O. E. MUSTEAPLIOGLU and B. C. SANDERS, “Discrete-Time Quantum Walk with Nitrogen-Vacancy Centers in Diamond Coupled to a Superconducting Flux Qubit,” *Phys. Rev. A* **88**, 022303 (11 pages) (2013).

Y. SHIKANO, E. SEGAWA, A. PEREZ and J. WANG, “A Special Issue on Theoretical and Mathematical Aspects of Discrete Time Quantum Walks,” *J. Comput. Theor. Nanosci.* **10**, 1555–1556 (2013).

Y. SHIKANO, “From Discrete Time Quantum Walk to Continuous Time Quantum Walk in Limit Distribution,” *J. Comput. Theor. Nanosci.* **10**, 1558–1570 (2013).

M. GONULOL, E. AYDINER, Y. SHIKANO and O. E. MUSTEAPLIOGLU, “Survival Probability in a Quantum Walk on a One-Dimensional Lattice with Partially Absorbing Traps,” *J. Comput. Theor. Nanosci.* **10**, 1596–1600 (2013).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. SHIKANO, “Counter-factual Phenomenon in Quantum Mechanics,” in *Quantum Bio-Informatics V*, Springer, pp. 463–472 (2013).

B-4) 招待講演

鹿野 豊, 「データ駆動型科学研究の将来像」, 第2回 NINS Colloquium セッション2: ビックデータと仮説形成: 複雑系の理解に向けて, ヤマハリゾート「つま恋」, 掛川, December 2013.

Y. SHIKANO, “光渦を使った量子トモグラフィー,” Symposium on New Frontiers of Quantum Photonic Network, 電気通信大学, 調布, November 2013.

Y. SHIKANO, “On Fluctuation-Dissipation Theorem in Non-equilibrium Steady State,” ELiTES thermal noise workshop 2, Jena University, Jena (Germany), August 2013.

鹿野 豊, 「反転分布のないレーザー発振に向けて」, NAIST グリーンフォニクス研究会「有機レーザーを目指して」, 奈良先端科学技術大学院大学, 生駒, August 2013.

Y. SHIKANO, “On the Signal Amplification—From Weak-Value Amplification—,” Summer Workshop on “Physics, Mathematics, And All That Quantum Jazz,” Kinki University, Higashiosaka, August 2013.

Y. SHIKANO, “How to implement the discrete time quantum walk in the hybrid quantum system?” 九州大学 Math-for-Industry 研究所共同利用研究会「量子ウォーク数理の新展開: 物質制御への応用」, 九州大学, 福岡, June 2013.

Y. SHIKANO, “Quasi-Magnon Dynamics on Hybrid Superconducting Qubit and Nitrogen Vacancy Centers in Diamond,” 1st Awaji International Workshop on “Electron Spin Science & Technology: Biological and Materials Science Oriented Applications,” Awaji Yumebutai International Conference Center, Awaji (Japan), June 2013.

鹿野 豊, 「弱値を巡る量子測定理論と量子論の解釈」, 第2回つくば量子情報サロン, 産業技術総合研究所, つくば, 2013年5月.

Y. SHIKANO, “Nonlinear (Discrete Time) Quantum Walk and Porous Medium Equation,” RCPAM-CMRU勉強会 “Quantum Walks and Dynamics on Metric Graphs,” Tohoku University, Sendai, March 2013.

Y. SHIKANO, “Introduction to Quantum Optics—Toward well understanding the nano-scale science (chemistry)—,” 2013 Asian Core Winter School “Advances in Nanomaterials Chemistry—Theory and Experiment,” Hanwha Resort Haeundae, Busan (Korea), January 2013.

Y. SHIKANO, “On Inhomogeneous Quantum Walks,” Joint Mathematics Meeting 2013, San Diego Convention Center, San Diego (U.S.A.), January 2013.

Y. SHIKANO, “Exciton-polariton condensation in high excitation density regime,” The 72nd Okazaki Conference on “Ultimate Control of Coherence,” Okazaki Conference Center, Okazaki (Japan), January 2013.

B-6) 受賞, 表彰

Y. SHIKANO, FQXi Essay Contest “It from Bit or Bit from It” Fourth Prize (2013).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

世界物理年共同主催事業「物理チャレンジ2005」組織委員 (2005).

世界物理年記念春のイベント「物理・ひと・未来」部会員 (2005).

世界物理年春休みイベント「めざせ! 未来のアインシュタイン」運営補助員 (2005).

British Council 主催 Global Innovation Lab. Workshop, パネリスト (2010).

STeLA (Science and Technology Leadership Association) JAPAN Kick off Meeting 総括責任者 (2009).

その他

World Physics Year Launch Conference “Physics for Tomorrow” 日本代表派遣学生 (2005).

早稲田大学本庄高校出前授業「どうやって小さい現象を観るのか?——光で観える限界がある!?——」(2013).

小布施×Summer School by H-LAB 「小布施WEEKEND カフェ」登壇者 (2013).

岡崎市立城北中学校出前授業「観自然～「もの」を観る様々な方法～」(2013).

B-8) 大学での講義, 客員

チャップマン大学, 客員助教授, 2011年11月-.

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(B), 「微小共振器ポラリトン凝縮体生成過程の量子ダイナミクスの解析」, 鹿野 豊 (2013年-2014年).

日本学術振興会優秀若手研究者海外派遣事業, 「時間とエネルギーに対する量子測定モデルの確立」, 鹿野 豊 (2009年-2011年).

科研費特別研究員奨励費, 「時間とエネルギーに対する量子測定モデルの確立」, 鹿野 豊 (2009年-2012年).

C) 研究活動の課題と展望

新しく始めた小さな研究の種を大きくするためには, ビジネス三原則でもある「ヒト・モノ・カネ」の三拍子が揃わなければならない。これまで共同研究を増やすという形でヒューマンリソースの確保を行ってきたが, それでは限界があるということに気付いた。今後, この小さな研究の種を成長させるためには, グループとして多様な人材を確保することに加え, 人材を適切に受け入れるだけの土壌を整備しなければならない。

小 林 玄 器（若手独立フェロー（特任准教授））（2013 年 9 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：無機固体化学，固体イオニクス，電気化学，リチウム二次電池

A-2) 研究課題：

- a) 酸水素化物を基本とした新規機能性材料の探索
- b) 電極／電解質界面制御によるリチウム二次電池の高性能化
- c) 薄膜全固体 Li 二次電池の作製

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ヒドリドが規則配列した新規酸水素化物 $\text{La}_{2-x-y}\text{Sr}_{x+y}\text{LiH}_{1+x+y}\text{O}_{3-y}$ ($-1 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 2$) を合成し，ヒドリドの含有量と原子配列の制御に初めて成功した。これらの物質はヒドリドイオン導電性を持ち，ヒドリドのイオン導電現象を利用した固体電池の電解質に用いることができた。
- b) リチウム二次電池の高容量正極材料として期待されている $\text{Li}_{1.2}\text{MO}_2$ ($M = \text{Ni}, \text{Co}, \text{Mn}$) の粒子表面を Al_2O_3 で修飾することで電池特性の向上に成功した。また， Al_2O_3 修飾を施した $\text{Li}_{1.2}\text{MO}_2$ の粒子の最表面からバルク内部にかけての電子状態を硬X線光電子分光測定により明らかにした。
- c) マグネトロンスパッタを用いた正極材料 (LiCoO_2)，電解質材料 (Li_3BO_3) の薄膜作製条件を見出した。 $\text{Au}/\text{LiCoO}_2/\text{Li}_3\text{BO}_3/\text{Li}_{1+x-y}\text{Al}_x(\text{Ti}, \text{Ge})_{2-x}\text{Si}_y\text{P}_{3-y}\text{O}_{12}/\text{Li}_3\text{BO}_3/\text{In}/\text{Au}$ で構成される全固体二次電池を作製し，電池特性を得ることに成功した。

B-1) 学術論文

M. IQBAL, G. KOBAYASHI, M. HIRAYAMA and R. KANNO, “Synthesis, Structure and Electrochemical Properties of Layered $\text{La}_2\text{Li}_{2x}(\text{CO}_3)_{1-x}\text{O}_{2+2x}$,” *J. Solid State Chem.* **206**, 14–19 (2013).

G. SARAVANAN, K. NANBA, G. KOBAYASHI and F. MATSUMOTO, “Leaching Tolerance of Anodic Pt-Based Intermetallic Catalysts for Formic Acid Oxidation,” *Electrochem. Acta* **99**, 15–21 (2013).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

F. MATSUMOTO, G. SARAVANAN and G. KOBAYASHI, “Application of Ordered Intermetallic Phases to Electrocatalysis,” *Electrochemical society transactions*, **50**, 3–8 (2013).

M. IQBAL, G. KOBAYASHI, M. HIRAYAMA and R. KANNO, “Structural and Electrochemical Properties of Layered Structure $\text{La}_2\text{Li}_{2x}(\text{CO})_{1-x}\text{O}_4$,” *Solid State Ionics: Ionics for Sustainable World, Proceedings of the Asian Conference 13th*, 350–358 (2013).

B-4) 招待講演

小林玄器, 「ヒドリド含有酸化物を基軸とした新規機能性材料の開発」, 第一回TMS 研究会講演会, 横浜, 2013年1月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

2013年電気化学秋季大会実行委員 (2013).

B-10) 競争的資金

科研費研究活動スタート支援, 「逆ペロブスカイト型新規リチウムイオン導電体の創成」, 小林玄器 (2011年-2012年).

科研費若手研究(B), 「ヒドリド含有酸化物を基軸とした新規機能性材料の探索」, 小林玄器 (2012年-2014年).

科学技術振興機構さきがけ研究「新物質科学と元素戦略」, 「ヒドリド酸化物の直接合成による新規機能性材料の探索」, 小林玄器 (2012年-2016年).

C) 研究活動の課題と展望

① 酸水素化物を基軸とした物質探索 (研究課題 a))

これまでの研究を基に, より優れたヒドリド導電特性を持つ物質の探索を行う。さらに, 将来的にはヒドリド導電現象を利用したエネルギーデバイスの創成を目指した研究に展開していきたいと考えている。また, 物質探索を遷移金属系に拡大し, これまでにない電子物性を持つ新規物質の発見を目指す。結晶構造中のヒドリド含有量と元素配列が電子物性に与える影響は未だ明らかにされておらず, 本研究を通じて酸水素化物の物質設計指針を示したいと考えている。

② 電極／電解質界面の制御 (研究課題 b), c))

リチウム二次電池電極の表面を異種酸化物やリン酸塩などで修飾し, 電池特性の飛躍的向上に繋がる界面制御技術の確立を目指す。さらに, 表面修飾が電極／電解質界面における電荷移動やイオン拡散に与える影響を明らかにする。表面修飾が電池反応に与える影響を明らかにするためには, 電池反応前後の電極や電解質の電子状態や結晶構造の変化を調べる必要があり, UVSOR, SPring-8 などの放射光施設や J-Parc などの中性子施設を利用する予定である。

電極／電解質界面でのイオン拡散現象に関する研究によって得られた知見は, 全固体二次電池の開発に活かす。

機能分子システム創成研究部門

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)₂Cu[N(CN)₂]₂X (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を目指してモット絶縁層の単分子膜化を行い、実際に室温でのFET動作を確認することが出来た。
- 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SrTiO₃を選択し、この基板にNbをドーピング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Al₂O₃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)₂Cu[N(CN)₂]₂Br 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。さらに、光によってダイポールのスイッチングが出来る単分子誘電膜を組み合わせると、紫外光と可視光で超伝導状態をON/OFFすることが出来るようになった。
- 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 and R. KATO, "Utilization of σ -Holes on Sulfur and Halogen Atoms for Supramolecular Cation...Anion Interactions in Bilayer Ni(dmit)₂ Anion Radical Salts," *Cryst. Growth Des.* **13**, 4533–4541 (2013).

- H. M. YAMAMOTO, N. NAKANO, M. SUDA, Y. IWASA, M. KAWASUGI and R. KATO**, “A Strained Organic Field-Effect Transistor with a Gate-Tunable Superconducting Channel,” *Nat. Commun.* **4**, 2379 (7 pages) (2013).
- N. TAJIMA, T. YAMAUCHI, T. YAMAGUCHI, M. SUDA, Y. KAWASUGI, H. M. YAMAMOTO, R. KATO, Y. NISHINO and K. KAJITA**, “Quantum Hall Effect in Multilayered Massless Dirac Fermion Systems with Tilted Cones,” *Phys. Rev. B* **88**, 075315 (6 pages) (2013).
- H. M. YAMAMOTO, J. UENO and R. KATO**, “Critical Behavior of a Filling-Controlled Mott-Transition Observed at an Organic Field-Effect-Transistor Interface,” *Eur. Phys. J. Special Topics* **222**, 1057–1063 (2013).
- N. TAKUBO, N. TAJIMA, H. M. YAMAMOTO, H. CUI and R. KATO**, “Lattice Distortion Stabilizes the Photoinduced Metallic Phase in the Charge-Ordered Organic Salts (BEDT-TTF)₃X₂ (X = ReO₄, ClO₄),” *Phys. Rev. Lett.* **110**, 227401 (5 pages) (2013).
- T. KUSAMOTO, H. M. YAMAMOTO, N. TAJIMA, Y. OSHIMA, S. YAMASHITA and R. KATO**, “Bilayer Mott System with Cation–Anion Supramolecular Interactions Based on a Nickel Dithiolene Anion Radical: Coexistence of Ferro- and Antiferromagnetic Anion Layers and Large Negative Magnetoresistance,” *Inorg. Chem.* **52**(9), 4759–4761 (2013).
- Y. KOSAKA, H. M. YAMAMOTO, A. TAJIMA, A. NAKAO, H. CUI and R. KATO**, “Supramolecular Ni(dmit)₂ Salts with Halopyridinium Cations—Development of Multifunctional Molecular Conductors with the Use of Competing Supramolecular Interactions,” *CrystEngComm* **15**(16), 3200–3211 (2013).
- N. TAKUBO, N. TAJIMA, H. M. YAMAMOTO and R. KATO**, “Observation of Photo-Induced Insulator-to-Metal Transition in Charge-Ordered α -(BEDT-TTF)₂I₃ Thin Crystal by Simultaneous Transport and Optical Measurement,” *J. Lumin.* **137**, 237–240 (2013).

B-4) 招待講演

- H. M. YAMAMOTO**, “Electric field induced superconductivity in strongly correlated organic materials,” ISCOM2013, Montreal (Canada), July 2013.
- H. M. YAMAMOTO**, “Organic Mott FET and field induced superconductivity,” ICTP LEMSUPER Conference, Trieste (Italy), September 2013.
- H. M. YAMAMOTO**, “Organic Mott-FET and Field-Induced Superconductivity,” 5th International Symposium on Emergence of Highly Elaborated π -Space and Its Function, Okazaki, October 2013.
- H. M. YAMAMOTO**, “A Strained Organic Field-Effect-Transistor with a Gate-Tunable Superconducting Channel,” ISSMM2013, Tokyo, November 2013.
- H. M. YAMAMOTO**, “Organic Mott-FET and its phase transitions,” International Workshop on Interface Science for Novel Physical Properties and Electronics, Okayama, December 2013.
- 山本浩史**, 「有機モット転移トランジスタと電界誘起超伝導」, 物性研短期研究会, 物性研, 柏, 2013年11月.
- 山本浩史**, 「光による界面分極変化と有機強相関トランジスタ」, 電子誘電体の新展開——光と分極がおりなす新物質相——研究会, 仙台, 2013年12月.
- 山本浩史**, 「有機伝導体界面における電場誘起相転移現象」, 表面・界面スペクトロスコーピー2013, 三島, 2013年12月.

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).

須田理行, 分子科学討論会優秀講演賞 (2013).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

分子科学会企画委員 (2012-).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会情報科学用有機材料第 142 委員会運営委員 (2007-).

学会の組織委員等

日本化学会プログラム編集委員幹事 (2013).

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」, 2013 年 11 月-2014 年 2 月.

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- .

総研大アジア冬の学校, “Organic Field-Effect-Transistors: Its mechanism, application and recent advances,” 2013 年 12 月 10 日-13 日.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきかけ研究, 「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

分子系ならではの格子の柔らかさと電子間の相互作用をうまく生かして創発的物性探索を展開する。具体的には、これまで開発してきた低温での超伝導転移や室温付近でのモット転移を用いたデバイスに対して、単分子薄膜技術や光応答性双極子を組み合わせることによって、新しい電子素子・分子素子の作製と関連するサイエンスの創出を試みる。

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) 複素芳香環がパラジウムに架橋 π -配位することを初めて実証。
- b) パラジウム3核クラスターがアレーンや環状オレフィン類に3核付加を起こすことを初めて実証。

B-1) 学術論文

T. MURAHASHI, S. KIMURA, K. TAKASE, S. OGOSHI and K. YAMAMOTO, "Bridging π -Coordination of Pyrrole and Indole over a Pd^{II}-Pd^I Bond," *Chem. Commun.* **49**, 4310–4312 (2013).

T. MURAHASHI, K. TAKASE, K. USUI, S. KIMURA, M. FUJIMOTO, T. UEMURA, S. OGOSHI and K. YAMAMOTO, "Trinuclear Palladium Addition to Unsaturated Carobcycles," *Dalton Trans.* **42**, 10626–10632 (2013).

B-3) 総説，著書

村橋哲郎, 「局在化近似の枠内で3中心2電子結合をどう表現するか」, *Organomet. News* **44** (2013).

B-4) 招待講演

村橋哲郎, 「有機金属錯体の構造次元性拡張」, 分子研研究会, 岡崎, 2013年1月.

T. MURAHASHI, "Redox-Switchable Metal Assembling and Ligand Coupling in Tetranuclear Palladium Sandwich Frameworks," The 6th Japan-China Joint Symposium on Functional Supramolecular Architectures, Okazaki (Japan), January 2013.

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と性状解明」, 東北大学卓越大学院研究会, 仙台, 2013年2月.

村橋哲郎, 「炭素 π -共役系と金属クラスターの間に形成される柔軟な連続多点配位結合」, 第93日本化学会春季年会, 大津, 2013年3月.

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」, 新学術領域研究会, 東京, 2013年5月.

T. MURAHASHI, "Dynamic Structural Changes of Multinuclear Sandwich Complexes," Japan-China Joint Symposium for Coordination Nanomaterials, Okazaki (Japan), June 2013.

T. MURAHASHI, "Chemistry of Metal Chain Sandwich Complexes," Japan-Canada Joint Symposium for Coordination Chemistry, Naha (Japan), November 2013.

T. MURAHASHI, "Dynamic Structural Changes in Multinuclear Sandwich Complexes," The 63rd Conference of Japan Society of Coordination Chemistry, Okinawa (Japan), November 2013.

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

日本化学会東海支部常任幹事 (2012-).

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-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).

科研費新学術領域研究(計画研究), 「柔らかな連続多点配位性を持つ有機多核金属複合体の創成」, 村橋哲郎 (2013年-2017年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「酸化-増核シーケンスに基づく一次元金属鎖分子の構築」, 村橋哲郎 (2013年-2014年).

C) 研究活動の課題と展望

我々の研究グループでは、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が、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つに制限されたと考えられてきた。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。今後も合成研究をさらに展開していくことにより、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(*Nat. Chem.* 2012)、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(*J. Am. Chem. Soc.* 2011 など)。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、この解明を進めている。

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) 曲面グラフェン分子の開発 (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) グラフェンや曲面グラフェンは、そのユニークな構造と物性のため、化学と物理の両分野で重点的に研究されてきた。 C_{60} に代表されるフラーレン類は、球状で正のガウス曲率をもつ。カーボンナノチューブは円柱状であるが、ガウス曲率はグラフェンと同じゼロのままである。グラフェンに曲面を導入することは、その次元性や電子的性質に大きな影響を与える。グラフェン自身は2次元のゼロギャップ半導体であり、p 型と n 型の ambipolar な性質をもつ。 C_{60} は 0 次元の n 型半導体であり、カーボンナノチューブは1次元の p 型半導体あるいは金属である。それでは、グラフェンに負のガウス曲率を導入した場合、その構造や物性がどのように変化するのか興味深い。

1991 年、Mackay と Terrones は、負のガウス曲率をもつ仮想的な3次元グラフェンを提案した。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 に似た構造をもつ。この繰り返し単位であるテトラベンゾ [8] サーキュレン (TB8C) は、新規な曲面グラフェン分子として興味深い構造をもっている。これは、鞍型の極端に平面性を失った未知のベンゼノイド化合物であり、芳香族サドルと呼ぶべきものである。我々は、TB8C および 8 個のメチル基を導入した誘導体 (OM-TB8C) を、環状オクタフェニレンの分子内 Scholl 反応によって合成した。TB8C の単結晶 X 線構造解析は、[7] サーキュレンよりもさらに深い鞍状の構造を示した。結晶中でのコンフォメーションは S_4 対称であり、DFT 計算による D_{2d} 対称からねじれた構造をしている。理論計算では、波状のねじれ運動 (擬回転) によって、非平面の遷移状態 (S_4 対称) を経由した tub-to-tub 反転が、室温で容易に起こることを示唆している (7.3 kcal mol⁻¹)。溶液中での基底状態のコンフォメーション (D_{2d} 対称) は、結晶中のそれとは異なっているが、これは crystal-packing force と低エネルギーの擬回転によるものである。OM-TB8C は優れた電子供与体であり、有機トランジスタにおいて p 型半導体として機能する (ホール移動度: 10⁻⁴ cm² V⁻¹ s⁻¹)。

B-1) 学術論文

Y. SAKAMOTO and T. SUZUKI, "Tetrabenzo[8]circulene: Aromatic Saddles from Negatively Curved Graphene," *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 14074–14077 (2013).

E. KAYAHARA, T. IWAMOTO, H. TAKAYA, T. SUZUKI, M. FUJITSUKA, T. MAJIMA, N. YASUDA, N. MATSUYAMA, S. SEKI and S. YAMAGO, "Synthesis and Physical Properties of a Ball-Like Three-Dimensional π -Conjugated Molecule," *Nat. Commun.* **4**, 2694 (2013).

E. KAYAHARA, T. IWAMOTO, T. SUZUKI and S. YAMAGO, "Selective Synthesis of [6]-, [8]-, and [10] Cycloparaphenylenes," *Chem. Lett.* **42**, 621–623 (2013).

F. ANGER, R. SCHOLZ, E. ADAMSKI, K. BROCH, A. GERLACH, Y. SAKAMOTO, T. SUZUKI and F. SCHREIBER, "Optical Properties of Fully and Partially Fluorinated Rubrene in Films and Solution," *Appl. Phys. Lett.* **102**, 013308 (5 pages) (2013).

S. KERA, S. HOSOURI, K. SATO, H. FUKAGAWA, S. NAGAMATSU, Y. SAKAMOTO, T. SUZUKI, H. HUANG, W. CHEN, A. T. S. WEE, V. COROPCEANU and N. UENO, "Experimental Reorganization Energies of Pentacene and Perfluoropentacene: Effects of Perfluorination," *J. Phys. Chem. C* **117**, 22428–22437 (2013).

B-10) 競争的資金

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～2013 年 3 月 31 日) *

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三成分結合型二核化配位子の合成・金属錯体形成について詳細に調べた。従来法で収率が極端に低かったトリアゾール閉環反応では，反応温度を調節することで単離精製後の収率を 30% 程度まで改善できた。この配位子を用いたコバルト (II)，ニッケル (II) 錯体の電気化学について調べ，トリアゾール由来の還元波が -2.0 V (フェロセン基準) に現れることを確認した。
- b) ポルフィリンとサレン型配位子を結合した複合配位子を合成し，それぞれ異なる金属を結合させた異種金属複核錯体の合成を行った。サレン部位の前駆体として Boc 基で保護されたエチレンジアミンを持つポルフィリンを合成してニッケル錯体とし，その後 Boc を脱保護してサリチルアルデヒドと反応させ，第二の金属としてアルミニウム・バナジウムを挿入することに成功した。2つの金属中心の間の架橋構造が異なるものを合成し，電気化学挙動の違いについて検討した。

B-1) 学術論文

H. KON and T. NAGATA, “New Ternary Ligands Consisting of a N4 Bridging Ligand and Two Terpyridines, and Their Co(II) and Ni(II) Dinuclear Complexes. Structure, Redox Properties, and Reaction with Acid,” *Dalton Trans.* **42**, 5697–5705 (2013).

H. YAMAZAKI, T. UENO, K. AISO, M. HIRAHARA, T. AOKI, T. NAGATA, S. IGARASHI and M. YAGI, “Synthesis, Characterization and Heterogeneous Catalysis for Water Oxidation of a Di-Manganese Complex with 4'-(4-pyridyl)-2,2':6',2"-Terpyridine,” *Polyhedron* **52**, 455–460 (2013).

B-6) 受賞，表彰

永田 央, 平成25年度科学研究費審査委員表彰 (2013.10).

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-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), 「電子伝達膜を用いた光合成型物質変換システムの構築」, 永田 央 (2013年–2015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、架橋配位子の合成の改良を試みましたが、全収率は未だ低く、根本的な改善が必要である。また、複核錯体の生成収率を改善するため、ピリジン・トリアゾール・ピリジンの部分構造は保ったまま、トリアゾールの 4-N 位置から架橋を伸ばして、錯体を安定化する補助配位子を結合させるなどの戦略を検討している。

異種複核金属錯体については、酸素を好む3族～5族の金属とソフトな後周期の金属を共存させる目処が立った。今後は、基質存在下での電気化学挙動について、より詳細に調べて行く予定である。

*) 2013 年 4 月 1 日名城大学理工学部応用化学学科教授

櫻井英博(准教授)(2004年4月1日着任)

A-1) 専門領域:有機化学

A-2) 研究課題:

- a) お椀型共役化合物「バッキーボール」の合成手法の開発と物性評価
- b) 金属ナノクラスターを触媒とする新規反応の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) お椀型共役化合物「バッキーボール」は、フラーレン・単一組成カーボンナノチューブ合成達成への鍵物質として、あるいはそれ自身の特異な物理的性質を利用した新規物質の基本骨格として魅力的な化合物群である。我々はバッキーボールの「シンプル」かつ「エレガント」な合成経路を確立し、さらに合成した化合物の物性や錯体触媒への応用を目指している。今年度の主な成果としては以下のような研究が挙げられる。①スマネンはカラム状結晶構造を形成することに特徴があり、スマネンを導入することで有機化合物の結晶構造を制御することが可能かどうか、結晶工学の観点から興味を持たれてきた。今回、ピレン部位を導入したスマネンを合成したところ、予想した通りスマネンのカラム構造が優先し、ピレン部位はやや緩んだヘリングボーン構造を形成することで、例えば固体状態におけるエキシマー発光が抑制されることを見出した。このようにスマネン部位は結晶デザイン部位として利用可能であることが示された。②スマネンのベンジル位を酸素化したスマネントリオンの結晶構造解析に成功し、これまでのスマネン誘導体では見られなかったエク립ススタッキング構造であることがわかった。またスマネントリオンは曲面電子受容体として期待されており、化学還元、電気還元実験により、1電子還元体、2電子還元体の構造解析を行った。③スマネンを出発物質とし、 C_{70} の部分構造である新規バッキーボール骨格(ベンゾピレン誘導体)の簡便な合成法の開発に成功した。これまで C_{60} に比べ C_{70} 部分骨格構造のバッキーボールの化学は比較的研究例が少なく、光、電気物性等興味を持たれており、今後の研究の伸展が期待される。
- 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、金/パラジウム合金クラスターにおける効率的な炭素-塩素結合の活性化反応が、クラスター表面のAu, Pdの両原子の協同作用によって効率よく進行することが理論計算によって確かめられた。②金これまで金ナノクラスターによる空気酸化触媒反応は、クラスターサイズが小さいほど活性が高いことがポリビニルピロリドン(PVP)保護クラスターの系で実験的にも確かめられてきた。ところが、今回、おなじPVPでも、保護高分子の分子量を変えただけでその傾向は著しく変化し、より高分子量のPVPを用いると、1 nm付近の小さなクラスターよりも7 nm程度の大きなクラスターの方が遥かに高い活性を有することを見出した。この事実よりクラスターサイズ効果よりも、保護高分子のモルフォロジー変化の方がより金クラスターの活性、すなわち電子状態に影響を与えることが明らかとなった。

B-1) 学術論文

- J. MACK, Y. MORITA, S. HIGASHIBAYASHI, H. SAKURAI and N. KOBAYASHI**, “Magnetic Circular Dichroism Spectroscopy and Electronic Structures of C_3 Symmetry Buckybowls,” *Chem. Phys. Lett.* **556**, 188–194 (2013).
- S. KARANJIT, K. BOBUATONG, R. FUKUDA M. EHARA and H. SAKURAI**, “Mechanism of the Aerobic Oxidation of Methanol to Formic Acid on Au_8^- : A DFT Study,” *Int. J. Quantum. Chem.* **113**, 428–436 (2013).
- R. N. DHITAL, C. KAMONSATIKUL, E. SOMSOOK, Y. SATO and H. SAKURAI**, “Aryl Iodides as Strong Inhibitor for Gold and Gold-Based Bimetallic *quasi*-Homogeneous Catalysis,” *Chem. Commun.* **49**, 2542–2544 (2013).
- B. M. SCHMIDT, B. TOPOLINSKI, S. HIGASHIBAYASHI, T. KOJIMA, M. KAWANO, D. LENTZ and H. SAKURAI**, “The Synthesis of Hexafluorosumanene and its Congeners,” *Chem. –Eur. J.* **19**, 3282–3286 (2013).
- B. B. SHRESTHA, S. KARANJIT, G. PANDA, S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI**, “Synthesis of Substituted Sumanenes by Aromatic Electrophilic Substitution Reactions,” *Chem. Lett.* **42**, 386–388 (2013).
- K. MAEYAMA, T. TSUKAMORO, M. SUZUKI, S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI**, “Nanosized Palladium-Catalyzed Suzuki-Miyaura Coupling Polymerization: Synthesis of Soluble Aromatic Poly(ether ketone)s,” *Polymer J.* **45**, 401–405 (2013).
- S. HIGASHIBAYASHI, S. ONOGI, H. K. SRIVASTAVA, G. N. SASTRY, Y.-T. WU and H. SAKURAI**, “Stereoelectronic Effect of Curved Aromatic Structure Favouring the Unexpected *Endo* Conformation of Benzylic Substituted Sumanene,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **52**, 7314–7316 (2013).
- S. KUNISHIGE, M. KAWABATA, M. BABA, T. YAMANAKA, Y. MORITA, S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI**, “Jet Spectroscopy of Buckybowl: Electronic and Vibrational Structures in the S_0 and S_1 States of Triphenylene and Sumanene,” *J. Chem. Phys.* **139**, 044313 (8 pages) (2013).
- B. TOPOLINSKI, B. M. SCHMIDT, S. HIGASHIBAYASHI, H. SAKURAI and D. LENTZ**, “Sumanenylferrocenes and Their Solid State Self-Assembly,” *Dalton Trans.* **42**, 13809–13812 (2013).
- B. M. SCHMIDT, B. TOPOLINSKI, M. YAMADA, S. HIGASHIBAYASHI, M. SHIONOYA, H. SAKURAI and D. LENTZ**, “Fluorinated and Trifluoromethylated Corannulenes,” *Chem. –Eur. J.* **19**, 13872–13880 (2013).
- R. N. DHITAL, C. KAMONSATIKUL, E. SOMSOOK and H. SAKURAI**, “Bimetallic Gold/Palladium Alloy Nanoclusters: An Effective Catalyst for Ullmann Coupling of Chloropyridines under Ambient Conditions,” *Catal. Sci. Tech.* **3**, 3030–3035 (2013).

B-3) 総説、著書

- 櫻井英博, 「精密有機合成によるカーボン π 空間の構築」, 「高次 π 空間の創発と機能開発」, 赤坂 健編, シーエムシー出版, p. 40–43 (2013).
- 櫻井英博, 東林修平, 「精密合成が拓く π 電子科学」, 「CSJ カレントレビュー12 未来材料を創出する π 電子系の科学——新しい合成・構造・機能化研究」, 赤坂 健, 岩澤伸治, 山口茂弘, 磯部寛之編, 化学同人, p. 46–53 (2013).
- 東林修平, 「カーボンナノチューブの三叉路」, *化学* **68**(6), 59–60 (2013).
- 櫻井英博, 「未だに不可解な Golden Cross Coupling Reaction——金ナノクラスターを用いた炭素–炭素結合生成反応」, *化学* **68**(10), 72–73 (2013).

B-4) 招待講演

H. SAKURAI, “Asymmetric Synthesis of C_3 Symmetric Buckybowls,” Department Seminar, Chulabhorn Research Institute, Bangkok (Thailand), February 2013.

H. SAKURAI, “Colloidal Nanogold as a Unique *quasi*-Homogeneous Catalyst,” Department Seminar, Chulabhorn Research Institute, Bangkok (Thailand), February 2013.

H. SAKURAI, “Colloidal Nanogold as a Unique *quasi*-Homogeneous Catalyst,” Department Seminar, Burapha University, Chonburi (Thailand), February 2013.

H. SAKURAI, “Colloidal Nanogold as a Unique *quasi*-Homogeneous Catalyst,” Department Seminar, Ubon Ratchathani University, Ubon Ratchathani (Thailand), February 2013.

H. SAKURAI, “Colloidal Nanogold as a Unique *quasi*-Homogeneous Catalyst,” Department Seminar, Prince of Songkla University, Hat Yai (Thailand), February 2013.

櫻井英博, 「擬均一系金ナノクラスターの触媒活性」, 学術講演会, 名古屋工業大学大学院工学研究科, 名古屋, 2013年3月.

櫻井英博, 「お椀型共役化合物「バッキーボール」の化学～含窒素ヘテロボールを中心に～」, ナノカーボンケミストリー研究会 2013, 東北大学多元物質科学研究所, 仙台, 2013年3月.

H. SAKURAI, “Asymmetric Synthesis of C_3 Symmetric Buckybowls,” PERCH-CIC Congress VIII, Pattaya (Thailand), May 2013.

H. SAKURAI, “Asymmetric Synthesis of C_3 Symmetric Buckybowls,” Department Seminar, Shanghai University, Shanghai (China), May 2013.

H. SAKURAI, “Matrix Effect on Catalytic Activity of *quasi*-Homogeneous Gold/Hydrophilic Polymer Composites,” The 2nd International Congress on Advanced Materials, Zhenjiang (China), May 2013.

H. SAKURAI, “Asymmetric Synthesis of C_3 Symmetric Buckybowls,” Department Seminar, Nanyang Technological University, Singapore, June 2013.

H. SAKURAI, “Asymmetric Synthesis of C_3 Symmetric Buckybowls,” Department Seminar, Kansas State University, Manhattan (U.S.A.), August 2013.

H. SAKURAI, “Synthesis of Sumanene and Related Buckybowls,” 15th Asian Chemical Congress, Singapore, August 2013.

東林修平, 「お椀型 π 共役分子バッキーボールの合成」, 第30回有機合成化学セミナー, 岡山, 2013年9月.

H. SAKURAI, “Chemistry of C_3 Symmetric Buckybowls,” Department Seminar, Zhejiang University, Hangzhou (China), October 2013.

H. SAKURAI, “Colloidal Nanogold as a Unique *quasi*-Homogeneous Catalyst,” Department Seminar, East China Normal University, Shanghai (China), October 2013.

H. SAKURAI, “Substituted Sumanenes: From Fundamental to Applied Research,” 9th IUPAC International Symposium on Novel Materials and their Synthesis and 23rd International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers, Shanghai (China), October 2013.

H. SAKURAI, “Nanoscience from Organic Synthesis: Chemistry of Nano(Bucky)bowls and Nanoclusters,” Department Seminar, Naresuan University, Pitsanulok (Thailand), November 2013.

H. SAKURAI, “Matrix Effect on Catalytic Activity of Colloidal Nanogold,” 5th Asian Conference on Colloid and Interface Science, Darjeeling (India), November 2013.

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).

東林修平, 有機合成化学協会奨励賞 (2013).

東林修平, 有機合成化学協会研究企画賞 (2013).

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-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活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), 「ボウル型共役配位子を有する金属錯体の動的挙動と機能」, 櫻井英博 (2004年-2005年).

科研費特定領域研究(公募研究), 「バッキーボウルの自在構築」, 櫻井英博 (2006年-2008年).

科研費特定領域研究(公募研究), 「3次元リンク実現のためのお椀型化合物の合成」, 櫻井英博 (2006年-2007年).

科研費特定領域研究(公募研究), 「金ナノクラスターの触媒活性を実現するためのマトリクス開発」, 櫻井英博 (2006年-2007年).

科研費若手研究(B), 「キラル・ヘテロバッキーボウル類の合成」, 東林修平 (2008年-2009年).

科研費基盤研究(B), 「ヘテロフラレン自在合成へのアプローチ」, 櫻井英博 (2008年-2010年).

科研費基盤研究(B), 「官能化バッキーボウルの合成と機能発現」, 櫻井英博 (2011年-2013年).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型), 「精密有機合成によるカーボン π 空間の構築」, 櫻井英博 (2008年-2012年).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型), 「開核性スマネン誘導体の合成と性質」, 櫻井英博 (2013年-2014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).

科学技術振興機構さきかけ研究, 「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).

科学技術振興機構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).

徳山科学技術振興財団研究助成, 「ヘテロフラレン合成を指向したボウル型共役化合物合成法の開発」, 櫻井英博 (2004年).

石川カーボン研究助成金, 「バッキーボウル分子の一般的合成法の開発と物性評価」, 櫻井英博 (2004年).

旭硝子財団研究助成,「ヘテロフラレン合成を指向したバッキーボウル分子の自在合成」, 櫻井英博 (2005年-2006年).
住友財団基礎科学研究助成,「お椀型共役化合物「バッキーボウル」の自在合成」, 櫻井英博 (2005年).
住友財団基礎科学研究助成,「 C_3 対称曲面 π 共役系拡張バッキーボウルの合成」, 東林修平 (2009年).

C) 研究活動の課題と展望

バッキーボウルの化学に関しては, 現在3名の大学院生がそれぞれの方向性で展開研究を見据えた研究に従事しており, この2,3年で面白い結果が出てくることを期待している。ここ数年はナノプラットフォームなどを活用して外部研究者によるバッキーボウルを対象とした研究が増えてきており, 今後も異分野間共同研究を推進していきたい。昨年も述べたが, 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は, 現在多元素系の合金クラスターおよびクラスター/高分子マトリクス界面の相互作用に興味をもって研究を進めている。ともにこれまで系統的な研究例が少なく, また研究手法も限られているため, まだまだ手探り状態であるが, 分子研の研究環境を生かして, 新たな研究分野を開拓していきたい。

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戴いた。また外国人運営顧問であるオックスフォード大学副学長の Ian Walmsley 教授には光分子科学研究領域研究グループと極端紫外光研究施設 UVSOR に於ける研究を重点的にヒヤリングしていただいた。さらに、運営顧問の廣田襄教授、齋藤軍治教授、増原宏教授には、分子研の研究所全体運営状況、研究領域のあり方、研究サポート体制などについての提言を戴いた。

Graham Fleming 教授は光化学研究の世界的リーダーであり、UC, Berkeley 校の研究担当副学長を兼務されている。Fleming 教授は 2013 年 10 月に 4 日間分子研に滞在し、特に、4 月から発足した協奏分子システム研究センターの状況について詳細なヒヤリングをしていただき、その運営や研究の展開の仕方などについて多くの重要な指摘を戴いた。

Ian Walmsley 教授は著名な量子光学の研究者であり、英国オックスフォード大学研究担当副学長を兼務されている。2013 年 8 月に 4 日間にわたり、光分子科学研究領域研究グループと極端紫外光研究施設に於ける研究を重点的にヒヤリングしていただいた。また分子研の全体の運営、人事のあり方などについても有益な提言を戴いた。

さらに運営顧問の廣田襄教授、齋藤軍治教授、増原宏教授には、12 月と 1 月にわたり、分子研の全般の組織運営状況について所長、総主幹から、また各研究領域や研究施設の研究や運営状況について各研究領域主幹・施設長からヒヤリングをしていただき、研究所の組織、各研究領域の研究全般に対する評価、提言を戴いた。

研究顧問の柳田敏雄特任教授には、2012 年 4 月のグループリーダー (PI, 教授および准教授) による研究発表会 (所長ヒヤリング) において、各研究の評価と研究所全体将来の方向に対する提言を戴いている。

(大峯 巖)

7-1 外国人運営顧問による点検評価

7-1-1 Ian A. Walmsley 外国人運営顧問

原文

Report to the Director General of the visit to IMS August 2013

This report for the Director General of the Institute of Molecular Science (IMS) provides a summary of my impressions of the research activities at the IMS, based on my visit to the Institute on Aug 19–22. During that visit I met with each of the Directors of the Research Divisions as well as with the group leaders in the Photonics Division. I also visited UVSOR, and read the annual report of the Institute, together with Prof. Adam Hitchcock's report on UVSOR from October 2012, as well as the general response of Prof. Graham Fleming from his visit around the same time.

My comments should be understood as a particular personal view of the state of activity at IMS rather than as an evaluation, which would be neither appropriate nor feasible for an individual to conduct.

Overall, it is clear that the IMS comprises a group of outstanding scientists conducting excellent research at leading edge of a wider range of fields, some with a closer connection to molecular science than others. In all cases scientists are addressing important research topics. The research staff is clearly among the top in their areas, as indicated by the number and quality of publications in leading journals, invited talks at major international conferences and external grant income. I was particularly impressed by the excellent group of young researchers who have independent positions, and the exciting research questions they are addressing.

The diversity of research activity and the creative autonomy encouraged in the IMS have together led to a broad and capability across many fields of molecular science. A consequence of this approach is that each group is relatively small, comprised of a Professor and one or two Assistant Professors with perhaps a couple of postdoctoral research assistants and a graduate student. It may be worth reflecting on whether this structure is limiting the potential achievements that are possible within the Institute. In many areas, there is a need for a "critical mass" of coordinated activity in order to take ideas beyond the proof-of-principle stage, and to really be one of the agenda-setting groups in the world.

For instance, a major emerging research area is that of ultracold molecular gases. There is only a small emerging research activity at IMS in this area, surprisingly: Prof. Ohmori's work in the photoassociation of ultracold ^{87}Rb atoms into diatomic molecules by means of picosecond laser pulses. While this is addressing an important theme in coherent control in collaboration with the top theory groups in Europe, it will be important to increase the level of activity to embrace the many possibilities for molecular science derived from large densities of ground state molecules contained in optical traps. Plans for this are in hand, but progress to a world-leading activity will require investment in equipment and personnel.

This field is also an area where maintaining a competitive research environment would likely require a greater group size than currently appears to be possible at IMS. Other areas too, such as Chemical Biology or Quantum Information Science, are actively growing elsewhere in the world, and it would be good to engage in some scoping activity for future new activities in these areas to which IMS could make significant contributions. Of course, appointing outstanding individuals with a mandate to take forward their own research is absolutely important, but this can be tensioned against areas of expertise that the IMS wishes to develop in order to continue to be a world-leading research institute in 20 years time.

Any such discussion may also involve a consideration of whether the appointment structure is appropriate to the aspirations of the Institute. The present structure has many similarities to a university, with the exception that there are not internal promotions

from Assistant Professor. This structure underpins the individual creative autonomy that provides the ideas-generation mechanism that lies at the heart of scientific discovery. Yet there are limitations to such a structure. For example, the difficulties in recruiting sufficient number of high quality graduate students into the Graduate School without an undergraduate programme. On the other hand, neither are there the advantages of group size that are usual attributes of a research institute, such as the MPG institutes, where there are fewer autonomous leaders and more research capacity in each group by means of larger numbers of permanent and postdoctoral research staff.

The issue of whether internal promotion from Assistant to Associate Professor might also be considered. There is value in the current policy of bringing in young researchers for an extended period in which they develop their own research programmes, as this “leavens” the research culture and brings forward new ideas. Nonetheless, it is currently not possible to keep on some of these individuals. This is a loss of great intellectual capability that is not obviously the optimal strategy for developing the best ideas to the greatest degree. I concur with Prof. Fleming that enabling these researchers to have a stake in the long-term success of the IMS will ensure the long-term success of the Institute. The risk in appointing young people to permanent positions very early in their careers could be mitigated by rigorous “tenure”-type reviews at an appropriate stage. Indeed, such evaluations might be applied more broadly periodically across the staff.

The “export” of talented researchers to permanent positions in universities has provided IMS with excellent connections to the Japanese academic research community. It could be worth exploring how to use these connections to develop closer ties with Universities—more joint projects, for instance—that will bring in graduate students on shared activity, as well as increased opportunities for competitive research income.

The third element of research capacity is the graduate students. Here the role of SOKENDAI Graduate School is clearly critical in sustaining the vitality of the research environment. There appears to be insufficient numbers of students for the current needs. However, it is not clear to me where the problem really lies, and it would be good to develop a plan of action to address the challenge. If positions at universities are more attractive to students, what is the reason for this? Are they unaware of what IMS has to offer? Are universities offering better stipends and working conditions (*e.g.* funding for conferences)? Is the research and social community environment at universities more conducive to developing a cohort of students in each year? Understanding these issues might enable the problem to be tackled.

Finally the management of intellectual property (IP) deserves a proper review. It appears that there is significant potential for even greater exploitation of IP arising from the IMS activities, and capturing this would probably be in the best interest of the institute. There are established models whereby this is facilitated without perturbing the “blue skies” approach to research that is an IMS hallmark, and it could lead to a new aspect to the research culture that would make the IMS an even more attractive opportunity for the best research staff and graduate students (many of whom will not go on to work in academic research).

Department of Photo-Molecular Science

This Division supports a broad portfolio of research primarily in optical techniques for materials and molecular science, including especially ultrafast science, as appropriate for the study of molecular dynamics. I found the research to be of very high quality, with major innovations and discoveries across all groups.

Laser Science: Assoc. Profs. Taira and Fuji

The technology developed by the groups working in this area including both the development of laser systems as well as applications, is having a major impact in several areas. Prof. Taira's "laser sparkplug" project is garnering high visibility for the IMS in non-traditional industries. It is clearly innovative and excellent quality research.

The development of new sources and measurement techniques of ultra-short optical pulses for ultrafast science is a relatively new activity that has potential applications for research in several other IMS groups. It would be good to see this potential realised, since the broad expertise in molecular science at IMS is an advantage not enjoyed by attoscience groups elsewhere.

Nano-Optics and Nano-Materials: Prof. Okamoto

The visualization of optical fields on the nanometer spatial scale is a key advance for nano-science. The techniques of near-field microscopy developed in this group have great potential for the study of molecular complexes, aggregates and other nano-structures by virtue of the great control over *e.g.* chirality that is possible using designed nano-antennae.

Coherent Control: Prof. Ohmori and Dr. Takei

IMS has a good international reputation in this area, due to several noteworthy accomplishments by this group in the manipulation of quantum states of small molecules for applications such as information processing at the quantum level. The possibilities for scalable new technologies based provide a great opportunity. IMS is well positioned to explore the potential given the conjunction of experimental and theoretical expertise in the Institute.

The emerging projects combining ultrafast optical methods with ultracold matter promises to open new territory for discovery, including in the study of correlations between atoms in a dense cold gas induced by dipole–dipole correlations. In this area particularly, perhaps stronger connections to the IMS Theory Groups could be made, as well as the international experts that are already engaged.

Coherent Control: Prof. Oshima

The control of the rotational and vibrational degrees of freedom in molecules provides new approaches for spectroscopy, and the work at IMS is exploiting this opportunity (for example, in the correlation between molecular orientation and ionization). This group has developed a suite of novel methods using ultrafast lasers to orient collections of molecules and observe their coherent motion. Tools for more comprehensive control, such as complete population transfer using "ladder climbing" approaches promise to yield new insights into the structure of molecular states. Application of these to larger molecules is highly challenging, and the group is making progress in this direction: It will be important to ensure the fruits of this approach are commensurate with the efforts involved. The optical technology developed by this group may have applications in other areas, and this might be considered for the future.

Quantum Information Science: Research Assoc. Prof. Shikano

The appointment of Dr. Shikano as a new principal investigator in the area of many-body quantum correlations in larger systems from a bottom-up perspective opens important new territory for IMS, and could link very well to experimental activity both within the Photonics Division and elsewhere, especially CIMoS. The international connections that Dr. Shikano has will also be helpful in bootstrapping the Institute's profile in this area. His excellent work already has a high profile in that respect.

The opportunity for stronger connections and applications in both experimental quantum information science (QIS) and in nano-science could be further bolstered, perhaps by an additional appointment across these areas.

Photochemistry: Prof. Kosugi

The conjunction of experimental and theoretical expertise in the application of X-ray spectroscopy to the study of local environments of atoms and molecules in solids, liquids and interacting systems is a world-leading capability of this group, and has clearly leveraged the resources of both the IMS facilities and international collaborations to excellent effect. Innovative experimental and computational approaches to a broad range of problems has led to a significant number of high quality research outputs. A particularly exciting development from both a scientific and instrumental point of view is the high-spatial resolution soft X-ray microscope enabling 2-D spectroscopy.

Synchrotron Accelerator Research: Prof. Katoh

Clearly the outstanding work of this group has ensured that UVSOR remains a competitive machine of its kind internationally. I was impressed by the upgrade activity that has been undertaken by the group, especially the world-leading THz beams, and the vision for the future in the generation of coherent synchrotron radiation. This provides an important resource for IMS.

Photochemistry with Soft X-Rays: Assoc. Prof. Shigemasa

The utilization of fluorescence spectroscopy as a means for understanding atomic and molecular processes in strong fields has yielded some very interesting observations from samples irradiated by ultrashort EUV and X-ray free-electron-laser pulses at the SPring-8. In particular the pioneering work of the group in coherent nonlinear optics at such wavelengths is an opportunity to be exploited.

CIMoS (Research Center of Integrative Molecular Systems)

The recent establishment of this research center opens new vistas for synergies across research divisions to address the critical question of how autonomous function emerges in systems based on molecular components. The imaginative combination of life sciences, organic chemistry, materials science and nanotechnology should make for world-leading science in this important area. This activity seems to me to reflect a unique character of research institutes (as opposed to Universities)—they have the capacity to establish research centers that are able to address long-term foundational questions which require concentrated attention from a wide range of disciplines over a long period. This is a necessity if serious progress is to be made. It is a model that might be used in other areas to stimulate cross-divisional fertilization of ideas for “big questions” in molecular science.

UVSOR

I begin my comments on this facility with the disclaimer that I am not an expert on synchrotrons. Further, the expert review of this facility last year by Prof. Hitchcock has already provided relevant important comments.

It is clear that UVSOR occupies an important niche in Japanese and indeed in international synchrotron capability by virtue of its 0.75 GeV beam energy. The current research undertaken on the machine takes significant advantage of this niche and attracts a number of both internal and external users delivering high quality research.

The IMS user community is clearly producing excellent research on this machine, and has a vigorous programme of research for the next several years. This activity, however, will not saturate the machine capacity.

The possibility for X-ray imaging using scanning methods will provide a new capability for nano-science that could open up new areas. Investment will be required in order for this potential to be realized.

Primarily, it will be important to articulate a clear vision for the machine for the future, if it is to remain a world-leading facility for research in the next decade. Is the wavelength region likely to continue to be a critical one for molecular science? How should other unique features, such as the beam brightness, be exploited? What new beam lines should be developed and which current lines closed?

Such scoping activity could identify the emerging key areas of molecular science to which UVSOR could contribute a unique capability, which might be used to direct investment in establishing IMS or joint IMS/University groups to exploit such capabilities.

Other Divisions

The briefing by the Directors of the Departments of Life and Coordination-Complex Molecular Science, Theoretical and Computational Molecular Science, Materials Molecular Science and the Research Center of Integrative Molecular Systems was very helpful in providing context for the IMS research activity. I will claim no expertise in many of the areas covered by these Departments and their respective Divisions, so I cannot comment in detail on the science in which they are engaged. Nonetheless, I was impressed again by the range and quality of activity in all Divisions. The Directors have a clear vision of what they wish to accomplish and a rationale for taking it forward. There appeared to be very good connectivity between these Departments and the Research Centers and UVSOR.

Overall, my impression of research at IMS is that it is of very high quality, with a great potential for continuing to maintain this quality, based on the excellence of its researchers and its outstanding facilities and experimental infrastructure.

I. A. Walmsley

University of Oxford

10 September 2013

訳文

2013 年 8 月 分子研訪問リポート

分子研所長に提出した本リポートは、8月19日から22日にかけて分子研を訪問した際、分子研における研究活動に対する私の印象をまとめたものである。分子研訪問の際には、各研究領域の主幹、および光分子科学研究領域のグループリーダーと面会した。また、UVSORを見学するとともに、分子研 Annual Review, 2012 年 10 月に実施された Adam Hitchcock 教授による UVSOR に関するリポート、および同時期に研究所を訪問した Graham Fleming 教授のリポートにも目を通した。

私のコメントは、評価ではなく、分子研の活動状況に関する個人的な見方であると考えてもらいたい。本リポートを管理者が評価のために利用することは適当ではないし、利用可能なものでも無い。

全体的にみて、分子研は、幅広い研究分野（それらのうちいくつかの領域は、他のものに比べてより分子科学に関連した領域である）の最前線において、すばらしい研究を実施している傑出した研究者のグループから構成されていることは明らかである。すべての研究者が、重要な研究対象を扱っている。一流学術誌に発表された研究論文の量と質、主要国際会議への招待講演、外部資金の獲得状況が示すように、研究スタッフは、それぞれの研究分野において、明

らかにトップクラスである。独立した優秀な若手研究者および彼らが取組んでいる優れた研究には大きな感銘を受けた。

分子研において奨励されている、研究活動の多様性ならびに創造的な自主性はともに、分子科学に関する多くの研究分野の広がりや将来性につながるものである。このような方向性の帰結として、各研究グループのサイズは比較的小さい（教授1名、1～2名の助教と数名のポスドクおよび学生からなっている）。このような組織構造が、研究所において本来達成可能な業績を制限するものになっているか否かについて再考してみる価値はある。多くの研究分野において、原理証明の段階を越えたアイデアをつかみ、世界的に真に最先端に行く研究グループの一つとなるためには、研究活動において「ある一定のサイズ（critical mass）」が必要である。

例えば、現在拡大しつつある研究分野として、極低温分子気体に関する研究がある。分子研においてこの研究分野における研究活動がごく限定されていることは驚くべき事である。本分野の研究には、ピコ秒レーザーパルスを用いて、極低温 ^{87}Rb 原子を光会合し2原子分子を生成するという、大森教授の研究がある。この研究は、コヒーレント制御における重要な研究テーマとして、ヨーロッパで最高の理論グループとの共同研究として取組まれているが、光トラップされた高密度の基底状態分子から引き出される多くの可能性を分子科学に取込むためにも、より研究を活性化することが重要であろう。これらの取組みは進行中であるが、世界をリードする研究活動に発展させるためには、物的ならびに人的な投資が必要であろう。

この研究分野では、研究競争に勝てる環境を維持するためには、現在分子研において可能なグループサイズよりも大きなグループサイズが必要であろう。ケミカルバイオロジー、量子情報科学などもまた、世界的にみて活発に発展しつつある分野である。分子研が重要な寄与ができ得るであろうこれらの研究分野を、将来的な新規研究の対象として取りあげることを視野に入れるのも良いのではないだろうか。もちろん、独自の研究を進める権限をもった優秀な個人を任用することは重要であるが、そのことは、分子研が今後20年間世界をリードする研究所であり続けるために展開したい専門分野とは相反する可能性がある。

上記のような議論は、教員任用のやり方が、研究所が希望するものに合致しているかどうかの議論にも関係している。現状の教員任用のやり方は、准教授の内部昇進が無いことを除けば、大学のそれとよく似ている。このようなやり方は、個人それぞれの創造的な自主性（これは、研究アイデアを生む源であり、かつ、科学的発見の根幹をなすものでもある）を支えるものである。しかしながら、このようなやり方にも限界がある。例えば、充分な人数の優秀な大学院生を、学部を有しない総研大で募集する際の困難さもある。一方、例えばマックスプランク研究所に見られるような、研究所ならではのグループサイズの優位性も分子研には無い。マックスプランク研究所では、ごく少数の独立した研究リーダーのもとに多数の常勤研究者、博士研究員がいることで研究能力を高めている。

准教授の内部昇進に関するルールについても考慮すべきであろう。若手研究者に彼ら自身の研究を展開するために、任期無しの研究期間を提供するという現在の方針は、研究文化の「発酵」を促し、新しいアイデアを生み出すものでもあるので、評価できるものである。それにもかかわらず、現状ではこれら若手研究者をずっと確保しておくことはできない。これは、知的生産性の大きな損失であり、すばらしいアイデアをさらに発展させるための最適な戦略ではないことは明らかである。准教授に対して、長期的にみて研究所全体に利益をもたらす業務と利害関係をもたせることが、長期的な研究所の利益を保証するものであるという点で、私とFleming教授との意見は一致した。研究経歴の非常に早い時期に、若手を常勤ポストに任用するリスクは、適当な時期に「終身在職権（tenure）審査」型の評価を厳密に実施することにより、軽減することができる。それにまた、そのような審査は、研究スタッフに対しても、定期的に幅ひろく実施しても良いかもしれない。

大学の常勤ポストに有能な研究者を供給することで、分子研は日本国内の研究コミュニティと良好な関係を築いている。この関係を、大学との連携強化（例えば、共同研究を通じた大学院生の取込み、外部競争資金獲得の可能性向上をもたらすであろう共同プロジェクトなど）を図るためにどう利用するか、調査してみる価値があるであろう。

研究の生産性を規定する第三の要素は、大学院生である。研究環境の活力維持において、総研大の果たす役割は非常に重要である。現状では、必要とされる数より不足した学生数しかいないように見受けられる。しかしながら、私には、どこに問題があるのかよく分からない。問題に対応するためのアクションプランを進めるのが良いのであろう。学生にとって、他の大学の方がより魅力的であるとするなら、その理由は何なのだろうか？ 学生達は、分子研が彼らに提供するものについて、よく分かってないのだろうか？ 他大学の方が、より良い奨学金や、学会参加費補助のような好条件を提供しているのだろうか？ 大学における研究環境や地域環境が、毎年学生達を引きつける助けになっているのだろうか？ これらの点を考慮することで、解決すべき問題を明らかにできるであろう。

最後に、知財管理について検証する。分子研の活動から生み出される知財の開拓については、大いに見込みがあるように思われる。また、知財を獲得することは、研究所の利益に適合するものであろう。分子研の特徴である、「実用性を求めない」という研究の方向性を阻害することなく、知財開拓を促進するための確立されたモデルがある。これは、優秀な研究スタッフや学生（彼らの多くは、学術研究分野でずっと働き続けるわけではない）にとって、分子研をより魅力的なものとするにちがいない、研究文化に対する新しい見地をもたらし得るものである。

光分子科学研究領域

本研究領域においては、分子ダイナミクス研究にふさわしい、主に高速現象を対象とした科学を含む、材料科学・分子科学に関連した光学技術分野において広範な研究分野をカバーしている。実施されている研究の質は非常に高いものであり、すべての研究グループにおいて、優れた研究上の革新・発見がなされている。

レーザー科学：平等准教授、藤准教授

レーザーシステムの開発および応用を含むレーザー科学分野において研究を実施している彼らの研究成果は、いくつかの研究領域に対して大きな影響力を有している。平等グループで実施されてる「レーザー点火プラグ」に関する研究プロジェクトは、伝統的には分子研と関わらない業界での分子研の知名度獲得に寄与している。本研究は、本当に革新的かつ非常に質の高い研究である。

高速現象を対象とした科学のための、極短光パルスの新規光源ならびに測定技術の開発は、分子研内の他の研究グループの研究にも利用可能な新たな研究対象である。分子研における分子科学分野での幅広い専門的技術は、アト科学を研究している他所の研究グループには無い優位性であるので、この潜在力について認識すべきであろう。

ナノオプティクス・ナノ材料：岡本教授

ナノメートルスケールでの光学イメージングは、ナノサイエンスにおける鍵となる先端技術である。岡本グループにより開発された近接場光学顕微鏡に関する技術は、優れたキラリティー制御（例えば、ナノアンテナ構造の設計に利用可能）により、分子複合体、凝集体、および他のナノ構造体に関する研究に対して大きな可能性を有している。

コヒーレント制御：大森教授、武井博士

分子研は、本研究分野において世界的に高い名声を有しているが、それは、量子レベルでの情報処理などを目指した小分子の量子状態操作において大森グループが成し遂げてきた顕著な研究成果に因るものである。拡張性のある新

しいテクノロジーの可能性は、大いなる好機をもたらすものである。分子研は、所内の実験と理論の専門家間の連携によって、そのような可能性を探求するのに絶好の環境にある。

超高速光学手法と極低温物質とを組み合わせた大森グループの新しい研究プロジェクトは、新たな発見の領域を切り拓くことを約束するものである。例えば、双極子-双極子相互作用によって誘起される高密度低温気体中の原子間の相関に関する研究などが挙げられる。この分野においては特に、既に連携している海外の専門家と同様に、分子研内の理論グループともより強く連携しても良いかもしれない。

コヒーレント制御：大島教授

分子の振動および回転自由度の制御は分光学に対する新しいアプローチであり、分子研における研究はこの方向性（例えば、分子回転とイオン化との相関解明）を開拓するものである。当研究グループは、極短パルスレーザーを利用して配向が揃った分子集団を生成し、そのコヒーレントな運動を観測する新規な手法を開発している。当グループが現在進めている、「ラダークライミング」を利用した状態分布の完全移動のようなより包括的な制御法は、分子運動の量子構造に対する新たな知見をもたらすものと期待される。これらの方法論をより大きな分子に応用することは極めて挑戦的であるが、当グループはこの面でも成果を挙げつつある。その成果が費やす努力に見合うかどうか重要なポイントとなろう。当グループが開発している光技術は他の分野へも応用可能と思われ、今後の方向性として考慮すべきであろう。

量子情報科学：鹿野特任准教授

ボトムアップの視点から非常に大きい系における量子多体相関に関する研究を進める新任のPIとして鹿野博士を任用することにより、分子研にとって重要な新しい領域が開拓されている。また、光分子科学研究領域、および他の部門（特に、協奏分子システム研究センター）内の実験グループとの間でよい連携が取れるであろう。さらに、鹿野博士のもつ国際的なコネクションは、この分野における研究所の評価を引き上げるのに役立つであろう。その点において、彼のすばらしい仕事は、既に高い評価を得ている。

実験量子情報科学およびナノサイエンスにまたがった研究分野における研究者をさらに任用することにより、これらの研究分野間でのより強い連携や応用の可能性が増強されるであろう。

光科学：小杉教授

固体、液体、および相関系における原子・分子の局所環境の研究に対するX線分光の適用を、実験と理論両面において融合して進めることにより、本研究グループは、世界をリードする能力を備えている。また、分子研の研究設備および国際的共同研究の供給源として、すぐれた効果をもたらしていることは明らかである。様々な問題に対する、革新的な実験ならびに理論的な手法により、質の高い多くの研究成果が得られている。2次元分光が可能な、高い空間分解能をもつ軟X線顕微鏡は、科学的な観点・装置的な観点の双方からみて、特筆すべき研究成果である。

放射光加速器研究：加藤教授

UVSORが、この種の実験装置の中で世界的に競争力を維持しているのは、本グループのすばらしい研究によるものであることは明らかである。本研究グループが着手している高度化に関する取組み（特に、世界をリードしているテラヘルツビーム、およびコヒーレントシンクロtron光の発生）については感銘を受けた。

軟X線を利用した光科学：繁政准教授

強い場 (strong field) における原子・分子プロセスを理解するために、蛍光分光を利用し、SPring-8 において極端紫外光 (EUV) およびX線自由電子レーザーを照射したサンプルについて、多くの興味深い研究結果を得ている。

CIMoS (協奏分子システム研究センター)

本研究センターの創設は、分子を構成要素とするシステムにおいて、如何にして自律的な機能が発現するかという根源的な問題に取り組むための、領域を越えた相乗的な取組みにおいて新たな展望を開くものである。生命科学、有機化学、および物質科学・ナノテクノロジーを、構想力に富んだ形で融合させることにより、この重要な研究領域において世界をリードする科学を展開すべきである。本センターの研究活動は、私には、研究所 (大学と対照的なものとして) の特徴的な性格を反映しているものに思われる。研究所においては、根源的な問題に対し長期的に取り組む (これには、長期間にわたって、幅広い研究分野からの集中した取組みが要求される) 研究センターを設立することが可能である。非常に重要な進展を得ようとするならば、このようなやり方が必要となる。本センターは、他の研究分野においても、分子科学分野における「重要な問題」に対して、領域を越えた研究アイデアの融合を促すためのモデルと成り得るであろう。

UVSOR

本研究施設に対してコメントするに際し、私は放射光の専門家ではないことを、まず始めにお断りしておく。さらに、本研究施設に対しては、既に昨年度、Hitchcock 教授が専門家の立場から適切で重要なコメントを寄せている。

0.75 GeV のビームエネルギーという特徴により、UVSOR が日本国内および国際的な放射光施設の中でも、重要で特徴的な立ち位置を占めていることは明らかである。本研究施設で実施されている現在の研究は、このような特徴の優位性を活かしており、質の高い研究を実施している多数の国内および国際的なユーザーを獲得している。

分子研の利用者コミュニティは、本施設を利用して非常にすばらしい研究を実施しており、向こう数年間にわたる活発な研究プログラムが存在している。このような活発な研究状況にもかかわらず、装置の能力的には、まだ余裕がある。

スキニング法を利用したX線イメージングは、新規な研究分野を開拓するであろうナノサイエンスにおいて、新たな可能性をもたらすものであろう。この可能性を実現するためには、設備投資が必要となるであろう。

今後 10 年間にわたり、世界をリードする研究施設であり続けようとするなら、何よりもまず、将来的な装置の在り方に関して、明瞭なビジョンを示すことが重要であろう。UVSOR の波長領域は、分子科学にとって重要なものであり続けるのであろうか？ 他のユニークな特徴 (ビーム輝度のような) を、どのようにして開拓するか？ どのような新規ビームラインを設置するか、現状のビームラインのいずれかを閉鎖するのか？

上記のような精査作業により、UVSOR の特徴を活かし得る、新たな分子科学の重点分野を見極めることができるであろう。また、このような作業は、上記のような可能性を開拓するために、分子研内での研究グループ、あるいは分子研と大学が連携した研究グループを確立するのに役立つであろう。

他の研究領域

生命・錯体分子科学研究領域、理論・計算分子科学研究領域、物質分子科学研究領域の研究主幹および協奏分子システム研究センター長による概要説明は、分子研における研究活動の状況を把握する大きな助けとなった。私は、こ

これらの研究領域がカバーする大部分の研究分野の専門家ではないので、これら研究領域で展開されている科学について詳細なコメントをすることはできない。ただ、これらすべての研究領域がカバーしている研究分野および研究の質の高さには感銘を受けた。各研究領域において何をなしたいのか、および、それをなすための理論的根拠について、各研究主幹は、明確なビジョンを有している。各研究領域、研究センター、および UVSOR 間には、良好な関係性が見て取れた。

以上を総合すると、優れた研究者と最高の施設・実験設備を基盤とした分子研における研究は、非常に質が高いものであり、この質の高さを維持継続していくための力を充分に有しているというのが、私の印象である。

オックスフォード大学

I. A. Walmsley

2013 年 9 月 10 日

7-1-2 Thomas V. O'Halloran 外国人運営顧問

2014 年 3 月 24 日～26 日の 3 日間にわたって、Thomas V. O'Halloran 外国人運営顧問による外部評価を実施した。今年度は主に、生命・錯体分子科学研究領域、ならびに協奏分子システム研究センターに所属する研究グループを対象として評価を実施した。Thomas V. O'Halloran 教授による評価レポートについては、分子研レポート 2014 に掲載予定である。

7-2 研究顧問による点検評価

7-2-1 Graham R. Fleming 研究顧問

原文

Report to the Director General of IMS on visit of October 23–25, 2013

The most substantive portion of the visit concerned a thorough discussion of the new center for Integrated Molecular Systems. This important new center has got off to an excellent start and I was impressed with the breadth and energy that Professor Akiyama has brought to the leadership of this effort. The three components of CIMoS are well thought out and logically connected, with ambitious goals to understand and design systems exhibiting complex emergent properties. High quality scientists including several rising stars at IMS are involved in all three of the Divisions: Trans-Hierarchical Molecular Systems, Functional Molecular Systems and Biomolecular Systems.

To achieve its ambitious goals CIMoS will need to develop, not as the sum of its excellent parts, but as a coherent entity that is more than the sum of its parts. This is a difficult challenge for most institutions and it is my impression that IMS has rather little experience in building such a coordinated effort from the ground up. The tendency is always to divide the money among the individual groups who then prefer to operate independently. Of course there are numerous strategies for counteracting fragmentation: I strongly suggest the Director keep a reasonable amount of money to support cross-divisional projects, organize a 1-day retreat and have very regular (lunch?) meetings with progress reports from the PIs. On next year's visit I would like to hear about the specific efforts to create interaction and coordination within CIMoS as well as, of course, scientific progress. This is an exciting project.

A closely related and impressive new project centered in the joint Okazaki Institute for Integrative Bioscience was described by Professor Kato. The ORION project involves three new departments—Biodesign, Bioorganization, and Biosensing Research—and, with its focus on biological rather than chemical function, is highly synergistic and complementary to CIMoS. The contributions of Professor Kato to both efforts will certainly help ensure appropriate communication and cross-fertilization of these important and timely efforts. I very much look forward to hearing of progress in both ORION and CIMoS.

A second proposed effort that would involve a significant number of IMS PIs—"Precision Measurement and Control of Molecular Systems" has not been developed far enough for a detailed recommendation. It is not clear what scientific problem this project is aimed at solving, hence the need for a new Center/Division is not clearly articulated.

On this visit the number of individual presentations was smaller than usual to allow for full discussion of the new and proposed developments, however the talks I did hear were excellent. In particular Professor Saito gave a superb summary of a wide body of very thoughtful and incisive theoretical investigations into the dynamics of heterogeneous systems, and Professor Kobayashi gave a nice overview of his work on oxyhydrides.

To sum up, the visit this time revealed an Institute beginning a necessary rebuilding in order to make contributions to 21st century molecular science as significant as those in the earlier eras of IMS's development when simpler systems were being understood for the first time. The magnitude of change is significant and there will no doubt be stresses and strains as a result, but the Director General is to be congratulated on setting these important changes in motion. IMS is now set on a path to be a significant contributor

to the next level of molecular science—that of complex systems with properties and functionalities very different from the sum of their parts. The next few years should be very exciting at IMS.

Graham R. Fleming

January 5, 2014

訳文

2013 年 10 月 23 日～ 25 日の分子研訪問に関するレポート

新設された協奏分子システム研究センター（CIMoS）に関して包括的に議論することが、今回の訪問において最も重要な点であった。この重要な新センターは、すばらしいスタートを切っており、秋山教授のリーダーシップによってもたらされている息吹と活力に大いに感銘を受けた。複雑な創発特性を示す各種システムを理解しデザインするという意欲的な目標をもった CIMoS に設けられた 3 研究部門は、よく考慮されており、必然的に互いに関連し合っている。何人かの新進気鋭の研究者を含む分子研の優れた研究者が、3 研究部門（階層分子システム解析研究部門、機能分子システム創成研究部門、生体分子システム研究部門）すべてに配置されている。

CIMoS が掲げた意欲的な目標を達成するためには、優秀な個々の足し合わせとしてではなく、個々の足し合わせ以上の一体化した存在として発展して行く必要がある。このような事は、多くの研究機関にとって困難な挑戦である。私の印象では、分子研が、そのような状況を根底から作り上げる経験はほとんど無いのではないかと思われる。独立して研究を実施することの方を好む個々の研究グループに研究費を配分する傾向は常にある。もちろん、研究グループの細分化に対抗する多くの戦略が存在する。領域間で実施する研究プロジェクトに対するリーズナブルな研究費のサポート、リトリート（1 日）の実施、各 PI による経過報告を含む定期的なミーティング（ランチョンセミナー？）等を継続して実施することをセンター長に強く推奨するものである。来年度に分子研を訪問した際、CIMoS 内での相互作用や連携を作り出す努力についてはもちろん、研究の進展についても話を聞けることを期待している。非常に楽しみな計画である。

岡崎統合バイオサイエンスセンターを中心として実施される、CIMoS と密接に関連した、印象的な新規プロジェクトについて加藤教授より説明があった。化学的機能より生物学的機能に重点を置いた本プロジェクト（オリオンプロジェクト）は、3 つの研究領域（生命時空間設計研究領域、生命動秩序形成研究領域、バイオセンシング研究領域）から構成されており、CIMoS と相乗的および補完的なものである。CIMoS ならびにオリオンプロジェクトの双方に加藤教授が関与していることは、重要で時宜を得たこれら二つの活動間での適切な情報交換ならびに相互交流によって、多いに助けとなると思われる。オリオンプロジェクトならびに CIMoS の進展を大変楽しみにしている。

多くの分子研 PI が関与する第二の概算要求、「極限分子科学開拓プロジェクト——物質科学の革新を先導する分子計測ならびに分子制御の極限化」については、詳細な勧告・助言に値する程に練れたものとはなっていない。本プロジェクトにおいてどのような科学的問題に取り組もうとしているのかが明らかではなく、新しいセンター／研究領域の必要性についても明瞭に関連づけられていない。

今回の分子研訪問においては、新規に申請された概算要求事項の進展状況について包括的に議論を行うため、個々の研究者による研究成果報告についてはこれまでよりも少数にとどめたが、その中で今回聞かせてもらった話はいずれもすばらしいものであった。中でも、斉藤教授は、不均一系ダイナミクスを対象とした、思慮に富んだ鋭い理論研

究の全体像について見事に要約して示してくれた。また、小林准教授は、オキシヒドリド化合物に関する彼自身の研究についての概要を見事に示してくれた。

総括すると、今回の訪問では、まず最初により単純な系の理解を目指した分子研創設期に、研究所が分子科学に対して重要な役割を果たしたのと同様、分子研が21世紀の分子科学に重要な貢献するためには、研究所の再構築が必要な時期に来ていることが明らかとなった。変革の度合いは大きく、その結果として緊張やひずみが現れることは疑いない。しかし、所長は、このような重要な変革を実施することを喜ぶべきである。分子研は今まさに、次世代の分子科学（個々の要素の単純和とは異なる性質や機能を有する複雑系の分子科学）への重要な貢献者となるべき途上にある。分子研の今後数年間は、非常に刺激的なものであるはずである。

Graham R. Fleming

2014年1月5日

7-3 運営顧問による点検評価

運営顧問による組織・研究評価及び提言

運営顧問 廣田 襄（京都大学名誉教授）

齋藤軍治（名城大学農学部教授）

増原 宏（台湾国立交通大学講座教授）

第1回運営顧問会議 2013年12月25日 13時半～17時半

内容

（1）全体像を所長が説明（現状の紹介、将来計画など）

（2）研究領域（理論・計算、光、物質、生命・錯体）と研究施設の現状、将来計画等を主幹・施設長が説明

第2回運営顧問会議 2014年1月9日 11時～17時半

内容

（1）研究室・施設の見学

（2）所長、研究総主幹との意見交換

（3）主幹・施設長との意見交換

7-3-1 報告書

2013年12月25日に3名の運営顧問（廣田 襄、齋藤軍治、増原 宏）は、研究所の現況と将来計画についてヒアリングを行い、所長および各部門（理論・計算分子科学、光分子科学、極端紫外光研究施設、物質分子科学、生命・錯体分子科学、協奏分子システム研究センター、岡崎統合バイオサイエンスセンター）の研究主幹より説明を受け、質疑・応答を行った。2014年1月9日に、UVSOR 施設、光分子科学研究室、岡崎統合バイオサイエンスセンター（NMR装置）などの見学を行い、その後所長および研究主幹とヒアリングおよび見学の内容を基に、研究所の課題、とくに研究所の目指す新しい方向性、組織、人事、各研究グループの研究の現状と課題、共同研究について自由討論形式で意見の交換を行った。

分子研は化学と物理の学際的分野である分子科学における大学共同利用研究所としてスタートし、創立当時から豊かな研究費と整備された装置に支えられ、多くの優れた研究を行って国際的にも高く評価される優れた分子科学研究のセンターであった。また人材育成の面では、物理化学分野を中心に我が国の大学における研究・教育のリーダーとして活躍する人材を数多く輩出して分子科学の発展に大きく貢献した。しかし、創立から40年が経ち分子科学は現在ではより広範な領域と関わりを持つ分野に広がっている。論文引用度指数などに示されるように、分子研は現在でも高い研究水準を維持しているが、大学の研究環境が整備され、とくにナノテクノロジーとバイオ関係の予算が大幅に増えたこともあって、分子研の Visibility が下がってきたことは否めない。また、大学院生が少なく各研究グループの規模が小さいために研究活動を大きく展開することが難しいという問題を抱えている。研究のグローバル化が一層進み、国内でも WPI 拠点が整備されてくる状況と、分子科学研究ならではの特別な装置を持つ予算が保証されないことを考えると、国内的にも国際的にもより存在感のある研究所になるためにはどのような方向を目指すべきであろうか。それには人事の完全な国際化、大きな研究グループを作ることを良しとする柔軟な運営が必要であろう。また、分子科学における国際センターとして、国内・国外の世界的に優秀な分子科学研究者グループとの頭脳・人材相互交流をはかることが不可欠である。ヒアリングおよび見学後の討論では、新分野の開拓、人材の育成、国際交流および

共同研究に関する問題を中心に議論が行われた。本報告書は会議で出された意見に、その後各顧問から出された意見も加えて廣田がまとめたものである。

1. 研究の現状、新しい方向と新分野の開拓

分子研はこれまで、理論・計算化学、光分子科学、分子分光学、分子物性科学などの分野において国際的にも高く評価される顕著な業績をあげてきた。理論・計算化学および光分子科学分野では現在も高度で活発な研究活動が続けられている。一方、物質・分子物性の研究では教授の交代の時期でもあり、まだ研究の新しい方向性がはっきり見えていないように思われる。生命・錯体分野では新しい教授の着任が続いており、今後の大きな発展を期待したい。

分子研における研究の方向としてどのようなものが望ましいであろうか。分子研の研究者には学術研究における世界の指導的役割が要請される。研究課題、観察手法、研究対象、理論などにおいて、世界的な観点から独創的で挑戦的なものであるかを念頭において切磋琢磨することが期待される。分子研では比較的若い教授群を中心に、分子研の持つ恵まれた研究環境（研究および技術支援の人材、共通設備の充実など）を活かして、大型の研究よりもさらに先を見据えた萌芽的研究や人材育成を重視した研究も望まれるであろう。この点から平成25年度より発足した「協奏分子システムの創成」を目指す新たな研究組織の今後の活動が期待される。この組織は分子集団の自律的反応の流れを創る優れた機能をもつ分子系を創成することを目的とし、既存の「エネルギー変換」、「物質変換」、「分子機能発現」、「生命体的分子システム」の4領域を束ねるものである。そして、その実現のために分子系の極限観測とコントロール法の開発を目指す「極限分子科学」の構想が次の概算要求の目標として示された。これに関して、次のような意見が出された。

- ・「協奏分子システムの創成」研究に似た研究は他でもやっている。他との違いは何か。分子研らしさはどこにあるか。世界的な流れに乗りすぎているのではないか。もっと構造と結合と機能の原点に立ち返って基礎に取り組むべきではないか。
- ・「協奏分子システム」の研究に「極限分子科学」を組み合わせるはじめて分子研らしさが生まれる。そのためには新しい研究手法と装置開発が必須である。
- ・明確な問題意識を持って研究を進めるべきである。相互作用系の「極限分子科学」の研究は若い人が中心になって提案し、展開すべきであろう。
- ・大きな競争的資金（国内、国外）の獲得による資金・人材（または場所）の確保により、個人の研究体制の強化および研究者としての世界的認知度の向上を図るべきである。

「協奏分子システムの創成」の研究に限らず、一般に新分野の開拓と新しい研究への挑戦に関して次のような意見が出された。

- ・分子研がどのような新分野を開拓するか海外は注目しているが、最近は visibility が落ちているように思われる。
- ・分子研に着任する若手（准教授）には、今までやってきた仕事の延長でない新しい分野に挑戦するチャレンジ精神が欲しい。准教授にはチャレンジ度に応じた処遇を考えるべきではないか。
- ・PI 同士の切磋琢磨による相乗効果によって新しい研究が生まれるような環境作りが望まれる。他分野の研究者とコミュニケーションのできる人材の養成が重要である。
- ・コロキウムや各領域での合同セミナーをもっと活発にして、若手が新しい研究に挑戦する雰囲気醸成すべきである。

- ・ 国際的にもう少し化学分野での存在感を増すような努力が必要である。とくに物質・物性の研究では物理の一流のジャーナルのみでなく、分子科学や物質科学の視点で研究成果を練ることにより化学や生物学の一流のジャーナルへも論文を発表すべきである。
- ・ 各当該研究分野の研究者コミュニティで、話題になっている原理的な研究課題は何であり、将来の発展性や波及効果はどうであるか、研究戦略を案出する。
- ・ 分子研内の異分野の研究者の融合による挑戦的新分野開拓を期待する。学術的重要性、科学的（社会的）位置づけ、解決法、研究条件、戦略（資金、装置、人など）を議論し、挑戦的な融合プロジェクトを立案することが望まれる。
- ・ 岡崎研究機構内に基生研、生理研、岡崎統合バイオサイエンスセンターがあるにもかかわらず、これまで生命分子科学関係の共同研究がなかった。もっと岡崎統合バイオサイエンスセンターを活用するなどして、研究グループの異なる個人研究者同士の融合プロジェクトが生まれることを期待したい。

2. 組織、人事、人材育成に関して

所長のリーダーシップのもとに優秀な若手を教授に抜擢し、若手独立フェローの制度を導入するなど、人事に関して若手研究者を発掘して育てる意欲的な改革が行われていることを高く評価する。今後は国際化に対応して外国人研究者をふやすために、人事公募に関する書類、手続きを基本的に英文で行うことを考えるべきであろう。

分子研が内部昇格を禁止してきたことは、人事の流動性を高め、大学との人事交流を推進してきた点において大きな意義があった。一方で、優秀な若手研究者を分子研にキープできないという問題点もある。この問題は大学における人事とも関係し、今後慎重に検討すべき課題であろう。

分子研の教授、准教授が研究に関して独立であることは、准教授が独自の研究を展開できる望ましいポリシーであるが、各研究グループが助教＋PD（2助教）の体制で小さく、大学院生も少ないために挑戦的な研究をするには人手が足りないという問題がある。しかし、現状でも相当大きなサイズでの研究室運営に成功しているグループもあり、この問題の改善のために所員の一層の努力が望まれる。研究グループのサイズを大きくするための具体的な提案としては以下のような意見があった。

- ・ 外部資金をさらに積極的に導入してより多くのPD（外国人を含めて）を採用し、優れた研究の魅力によって優秀な大学院生を確保する一層の努力が必要である。
- ・ 研究能力があっても分子研のような研究環境に向いている人とそうでない人がある。所員の採用の際に、分子研でも大きなグループを作れる適性のある研究者を見極めることが必要である。
- ・ JSPSの外国人研究員枠を利用するなどして外国人PDを増やす努力をすべきである。また、外国人所員を生かした人材の国際的なネットワークを構築することが、優秀な外国人PDを増やすために有効であろう。

若手研究者の育成に関して次の意見があった。

- ・ 若手独立フェローは素晴らしい制度であって、定着が望まれる。しかし、彼らの研究を発展させるには、今後PDなどで彼らをサポートすることも必要であろう。
- ・ 若い人の国際化は必須であり、年に1－2ヶ月程度のサバティカル制度の導入が必要ではないか。

3. 共同利用機関としてのあり方と国際交流に関して

分子研は大型の施設、装置として UVSOR 施設、レーザー開発、スパコン、高周波 NMR などを持って、分子科学の研究者に共同利用の場を提供している。これらの装置をトップレベルで維持・整備してゆくには継続的な努力と工夫が必要である。また今後の共同利用では国際化のさらなる推進が期待される。それに対応するには、研究者と事務職員あるいは技術職員の間の連携を円滑に行う URA の活用が必要であろう。共同利用に関しては次のような意見が出された。

- ・ UVSOR は高度化の完成で、この種の施設としては先端的で特徴があり国際的にも競争力のあるものに生まれ変わった。そろそろ次期の計画を考え始めるべきであろう。
- ・ 分子研のスパコンの能力は相対的に低下している。国は「京」コンピュータのような超大型機に力を入れているが、先端分子科学として特徴的な利用はあるのだろうか。
- ・ レーザー開発では先端的な開発が行われてきたことは認めるが、分子科学の研究に生かせるような開発も目指して欲しい。
- ・ 900MHz NMR では固体試料測定のための整備などが着々と進んでいる。また、共同利用の試料測定に対応できる技術職員を置いていることは高く評価される。
- ・ 通常の一般的な研究設備は所内の研究者が共通装置として利用できることが重要で、所内の人が使わない装置に対して技術職員を配置して共同利用に対応する必要はない。
- ・ ヘリウム枯渇問題が深刻になっている。SQUID などヘリウムを使う共同利用を強化してはどうか。

分子研が分子科学研究における世界のセンターになるためには国際的な頭脳・人材の相互交流の強化が必須である。これに関して次のような具体的な提案が出された。

- ・ 一流研究者（国内・国外）の分子研短期・長期滞在と海外一流研究所への訪問（短期）・講演・講義を強化する；これらは、世界的研究ハブ構築に不可欠である。
- ・ インフラ整備：海外からの研究者家族（含子供）の長期滞在に関する整備（衣食住、医療、教育、娯楽等々の世話人、それらの要点を記したパンフレット作成；これらに関して上記 WPI 拠点が良い経験をつんでいる）
- ・ JSPS は海外からの研究者招聘事業を行っており、著名外国人の招聘において、関連する研究所や大学での講演を推奨している。この事業を用いることにより、分子研研究者の国内・国外での認知度を高める。
- ・ 国内・外の大学・研究機関における講演・講義で研究内容を紹介し、優秀な若手研究者・院生をひきつける。優秀な外国人研究者の発掘および育成に関しては、優れた体制と業績を持つ幾つかの拠点（WPI プログラム拠点など）があり、それらを参考にしたらどうか。
- ・ 国際会議は各年開催されているが、上記融合課題や新規プロジェクトに関するテーマでの国際会議の開催を勧める。また、その会議テーマに即した論文を分子研研究者・国際会議参加者、それ以外の関連研究者から集め編集し、世界的ジャーナル特集号として出版する。その巻頭言に、分子研の活動内容を含め上記融合課題や新規プロジェクトに関するテーマの学術的重要性・新規性を訴える。また、特集号の発刊は若手研究者の論文編集能力向上に資する。

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、施設の充実が研究職員が流動していくシステムそのものを支援することになる。従って、施設の継続的な運営が重要であり、毎年、所全体に定員削減、人件費削減の要請があっても施設の技術職員については手を付けず技術の向上に努め、絶えず技術レベルの高い人材を確保するようにした。技術職員が研究所外に出かけその高い技術力で研究支援するなどの技術交流を可能とした。さらに長期戦略が必要な施設には教授を置くことで、現在は、施設所属の研究職員であっても流動性を保てる方向になっている。

現在、極端紫外光研究施設（UVSOR 施設）、計算科学研究センター（組織的には岡崎共通研究施設のひとつ）が大型設備を有し、計画的に高度化、更新を行うことで世界的にトップクラスの共同利用を実施している。国内外の超大型の放射光施設やスーパーコンピュータ拠点との連携を図りつつ、差別化・役割分担を行い、機動性を活かした特徴ある共同利用が進んでいる。分子制御レーザー開発研究センター（1997年設置）、分子スケールナノサイエンスセンター（2002年設置）、機器センター（2007年に旧機器センター、旧極低温センター、旧化学試料室の機能を再構築して設置）は本来の共同利用支援業務を行う一方で、それぞれ最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点事業、ナノテクノロジーネットワーク事業、大学連携研究設備ネットワーク事業をそれぞれ受託し、特定分野の重点的な強化、大学等の研究を支えるシステム作りを行ってきた。また、装置開発室は高度な特殊装置・コンポーネント開発にその高い技術力を活かすべく、研究所外からの依頼に対応することで共同利用施設としての役目を果たしている。2013年4月に、分子スケールナノサイエンスセンターを改組し、多重の階層を越えて機能する分子システムを構築することを目的とした新たな研究センターとして「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。現在，運転の安定性の向上に取り組んでいる。

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，3 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。他，国内では唯一の軟 X 線顕微分光ビームラインとして利用が開始された。

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，装置の整備が完了した。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更に研究を進めている。

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。現在，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が進められており，2014 年度中の利用開始を目指している。

上記のように既存設備の性能を世界最高水準に維持し高度な利用研究を推進しつつ，次期計画の具体化に向けた検討を進める。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。高輝度・高繰り返し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は，リング型光源と相補的な光源となるはずであり，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，その実現可能性について技術的検討を進めている。

8-2 協奏分子システム研究センター

8-2-1 経緯と現状、将来構想

協奏分子システム研究センターは2013年4月に発足し、分子科学研究所がこれまでに培ってきたナノサイエンスに関する研究資産を基盤に、新しい分子科学の開拓に取り組んでいる。センターのミッションは、「分子それぞれの性質が階層構造を持つ分子システムの卓越した機能発現にどう結びつくのか」という分野横断的な重要課題を解決することである。そのためには、システムの構成要素である分子自身について理解を深めるのに加え、それぞれの分子がどのようなネットワークや制御を介して混然一体となり、複雑かつ高度な機能の発現へと繋がっていくのかを理解しなければならない。

このような目的の達成に向けて、微細なナノスケールの分子科学からタンパク質や細胞のようなマクロで不均一な分子科学まで研究者を幅広く募り、「階層分子システム解析研究部門」、「機能分子システム創成研究部門」、「生体分子システム研究部門」の3部門体制で研究活動を展開している。発足時の体制は、専任PIが7名（秋山教授、山本教授、村橋教授、櫻井准教授、鈴木准教授、石崎特任准教授、鹿野特任准教授）、併任PIが6名（斉藤教授、青野教授、加藤教授、古谷准教授、正岡准教授、藤井准教授）の計13名であり、10月1日に小林特任准教授を迎えて現在14名（専任PI 8名、併任PI 7名）となっている。未踏の領域に切り込む若手研究者から、分野をリードするシニア研究者まで、異なる学問領域の研究者が集う、幅広くも層の厚いメンバー構成となっている。

2013年度の主な活動状況として、階層分子システム解析研究部門では、分子時計システムを題材に実験（秋山グループ）と理論（斉藤グループ）のあいだで共同研究が進行している。また、同部門に属する3名の若手特任准教授は研究活動を活発に展開しており、その成果の一部は論文や受賞という形で評価されている。機能分子システム創成研究部門からは、有機分子による超伝導トランジスタの実現（山本グループ）など興味深い研究成果が複数発表されている。設立よりいまだ日も浅く、センターとしての研究成果が目に見える形となって表れるのはまさにこれからである。

専任PI（若手独立フェローを含む）はセンターが掲げる目的に向かって、これまでの研究とは違う新しい一歩を踏み出すことが求められる。既に一部のグループ間で共同研究が進行中であるが、より多くのセンター構成員で共有できる新しい研究プロジェクトを練り上げていく必要がある。専門から少し離れた分野でのプロジェクト立案には人的交流が何よりも重要であるため、明大寺地区の研究グループの居室を1フロアに集中させ、一部をオープンスペースとして運用するべく準備を進めている（2014年度5～6月あたりを計画）。

その他、ウェブサイトの立ち上げ、2回のワークショップ（共催）、8回のCIMoSセミナー等を企画し、これらを通じてセンター活動や成果を国内外に発信している。

8-3 分子制御レーザー開発研究センター

8-3-1 経緯と現状、将来構想

分子制御レーザー開発研究センター（以後「レーザーセンター」）は、旧機器センターからの改組拡充によって平成9年4月に設立された。以降、平成18年度までの10年間、分子位相制御レーザー開発研究部、放射光同期レーザー開発研究部、特殊波長レーザー開発研究部の3研究部において所内課題研究及び調査研究を行う他、多数の共同利用機器、小型貸出機器を維持管理し、利用者の便に供してきた。各研究部には助教授及び助手が各1名配置され、またセンター共通の技術支援は技術課の3名の技術職員が行ってきた。放射光同期レーザー開発研究部は、分子研UVSORとの同期実験に向けた基礎的レーザー光学技術の開発の他、大出力紫外パルスレーザーやコヒーレントテラヘルツ光源の開発などの成果を挙げた。特殊波長レーザー開発研究部は、分子科学の新たな展開を可能とする波長の可変な特殊波長（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・フォトリクス」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の方法論を作っていくことが必要ではないか、という議論があった。またそれに向けて、レーザーセンターを光分子科学に関わる研究者が幅広く議論を行う場として有効活用することが必要との意見もあった。前者はまさに数年前の組織再編時に掲げた理想に沿うものであり、それに向けてレーザーセンターを議論の場として有効活用して行く必要があると考えている。エクストリーム・フォトリ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、平成23年度より試行している。

平成25年度現在、レーザーセンターは以下の3つの研究部門より成り立っている。

- (1) 先端レーザー開発研究部門；平等拓範准教授（専任）、藤 貴夫准教授（専任）、加藤政博教授（UVSOR より併任）
- (2) 超高速コヒーレント制御研究部門；大森賢治教授（光分子科学研究領域より併任）
- (3) 極限精密光計測研究部門；岡本裕巳教授、大島康裕教授（以上、光分子科学研究領域より併任）

それぞれの部門の任務は、(1) テラヘルツから軟X線にいたる先端光源の開発；(2) 主に高出力超短パルスレーザーを用いた量子制御法の開発；(3) 高空間分解および高エネルギー分解分光法の開発などである。レーザー光源の開発から新たなスペクトロスコーピー、マイクロスコーピー、制御法に至る統合的な研究手法を開発することを目的としている。これらの開発研究により、他に類を見ない装置や方法論を創出して分子科学研究の重要な柱として寄与し、分子科学研究所とコミュニティの新たな共同利用の機会を開拓することが求められる。また、技術職員が積極的にこれらの研究開発に参加することによって、新たに開発された装置や方法論をセンターに蓄積し、継承していくための原動力として活躍する事が、センターのミッションに照らして重要な点である。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る。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

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る、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 25 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機能的に構造制御する手法を探索している。これまでにコンボン研・豊田中研との共同研究において、分子研で開発の異方性レーザーセラミックスにおいて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見出した。そこで希土類 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、スピンの歳差運動による揺らぎをアンサンブル平均し、熱雑音を考慮してギブスの自由エネルギーの視点からの新たなモデル構築を行った（関連論文 2 件）。今後、モデルの実験的検証を行う予定である。

2) 「チャープパルス上方変換による単一ショット中赤外スペクトル測定」

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。そのパルスを使った高速な赤外分光装置の開発を香川大学の中西教授と協力して行った。結果として、遠赤外から近赤外までの超広帯域のスペクトル ($200\text{--}5000\text{ cm}^{-1}$) を 1 ms で計測することができた。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7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。

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、2011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。2012年7月よりは、「ナノテクノロジーネットワーク事業」の発展である「ナノテクノロジープラットフォーム（ナノプラットフォーム）事業」が開始された。当センターは、「ナノプラットフォーム」と緊密に連携を取り、様々な汎用設備の維持・管理と所外研究者への供用サポートを継続している。機器センター所有の施設の中、電子スピン共鳴（ESR）装置（Bruker EMX Plus, E500）ならびにSQUID型磁化測定装置は2013年度から「ナノプラットフォーム」にて運用する体制となった。また、理化学研究所より2台のNMR装置（Bruker AVANCE80, AVANCE600）が移管され、2013年秋より本格的な供用が開始されている。電子スピン共鳴装置に関しても各コンポーネントのアップグレードや様々なオプションの導入によって、研究環境の整備が行われた。

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、かなり高額な修理を頻繁に実施せざるを得ない状況になっている。全てを同時に更新することは予算的な制約からほぼ不可能であり、緊急性・使用頻度を考慮して順次更新を進めるプランを策定して、分子研全体の設備マスタープランへ組み込む必要がある。この点で、どのような機器ラインアップを維持するか再検討すべきであり、機器の利用形態を考慮すると、次の3つのタイプに階層化することが有用と思われる。

- 1) 比較的多数のグループ（特に研究所内）が研究を遂行していく上で不可欠な共通基盤の機器。これらの維持は、特に人事流動の活発な分子研において、各グループが類似の装置をそれぞれ新たに用意する必要がない環境作りの面で、最重要である。所内利用者には利便性を図りつつ相応の維持費負担をお願いする必要がある。また、オペレーターとして、技術職員ばかりでなく技術支援員等に対応することも検討する。一方、使用頻度や維持経費の点で負担が大きいと判断されたものは見直しの対象とし、所内特定グループや他機関へも含めた移設などにより有効に利用してもらうことも検討すべきである。
- 2) 当機器センターとしての特色ある測定機器。汎用機器をベースとしつつ改良を加えることによってオリジナル性の高いシステムを開発し、それを共同利用に供する取り組みを強化すべきである。その際、技術職員が積極的に関与して技術力を高めることが重要である。所外の研究者の要請・提案を取り込みつつ連携して進めるとともに、所内

研究者の積極的な関与も求める。当センター内のみならず、例えば、UVSOR や分子制御レーザー開発研究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な関与が不可欠である。特に、新規ユーザーの開拓は、分子科学の新領域形成へと繋がると期待されるものであり、これまで分子研との繋がりがあまり深くはなかった研究者層・学協会との積極的な連携を模索することにも取り組む。先端的機器は不断の性能更新が宿命であるが、全ての面でトップたることは不可能であるので、意識して差別化を行い、分子研ならではの機器集合体を構成することに留意する。

8-5 装置開発室

装置開発室は、分子科学分野の研究者と協力し最先端の研究に必要となる装置や技術を開発すること、日常の実験研究において必要となる装置や部品類の設計・製作に迅速に対応する、という二つの役割を担っている。製作依頼件数は年間 300 件近くに及ぶ。新しい装置の開発では技術職員が研究者と密接に連携し、また、日常の実験研究で必要となる工作依頼などについては、機械加工技能を持つ技術支援員が中心となり、対応している。

分子研外部からの製作・開発依頼を受け入れる「施設利用」を 2005 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。2013 年度には、ナノテクノロジープラットフォーム事業の一環として、マイクロストラクチャー製作・評価のための先進設備を導入することができた。今後も、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、理論計算科学研究の場の提供、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。2013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。

2014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。

まず、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。特徴としては、vSMPが導入してあることで、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、これをジョブ毎に制御が可能である。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に活用されている。

一方、高性能分子シミュレータは、演算サーバ、ファイルサーバ、フロントエンドサーバ、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。本年度はファイルサーバのメモリを32 GBから128 GBに増強することでファイルアクセス速度の大幅な改善に成功した。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300 Tflops以上に増強される。なお両システムのPCクラスタは一体的に運用が可能であり、この場合総演算性能は263.5 Tflopsにもおよぶ。本構成でlinpackによるCPU性能測定を行った結果237.9 Tflopsを記録することができ、2013年6月版TOP500リストに世界で129位の計算機として掲載された。

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 125,646 件のデータが収録され、世界 84 カ国から利用されている。

共同利用に関しては、2013 年度は 200 研究グループにより、総数 737 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ェアを提供していることを示している。

計算科学研究センターは、国家基幹技術の一つとして位置づけられている次世代スーパーコンピュータプロジェクトにおいて、とくにナノサイエンスに関わるアプリケーション開発「ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」において重要な役割の一端を担っている。また、昨年度より、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）戦略プログラムが開始された。この中で、HPCI 戦略分野 2 「新物質・エネルギー創成」計算物質科学イニシアティブ（CMSI: Computational Materials Science Initiative）が物性科学分野、分子科学分野、材料科学分野により構成され、CMSI の戦略機関の一つとして分子科学研究所が参加し戦略プログラムを推進している。HPCI 事業の中で、計算科学研究センターは HPCI の資源提供機関の一つとして HPCI 戦略プログラムに参加し、2011 年度よりコンピュータ資源の一部（20% 未満）を提供・協力している。さらに、ハード・ソフトでの協力以外にも、分野振興および人材育成に関して、スーパーコンピュータワークショップ「計算化学の最新の成果と展開」と 2 つのウィンタースクール「第 3 回量子化学ウィンタースクール～基礎理論と分子物性の理論～」と「第 7 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 25 年度 システム構成

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：21.2 Tflops（20.8 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	
	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2000年に岡崎3機関の共通研究施設として設立されて以来、新たなバイオサイエンス分野の開拓という趣旨のもと、質の高い研究を展開してきた。一方、この10年余りの間に、各種生物における全ゲノム配列の決定などの網羅的研究手法が大きく発展し、生物学の新たな発展の可能性が期待されている。すなわち、生命現象に関わる素子としての分子や細胞の同定を主としたこれまでの還元論的な方法論に加え、同定された分子や細胞群に関する情報を統合することにより、生命現象の本質の理解に新たに迫ることへの期待である。このことは同時に、生命という複雑な階層構造を持つ対象を各階層に分断し、それぞれを詳細に調べるという戦略に沿って進んできたこれまでの研究に対して、階層を超えたさまざまな視点からの統合的なアプローチによる研究方法の確立と展開が求められていることを意味する。

このような状況は、分子科学から基礎生物学、生理学までをカバーする幅広い分野の研究者が結集する岡崎統合バイオサイエンスセンターの存在意義をより高めるものであると同時に、このような学問的要請に本センターが答えるためには、生命現象を理解する上で本質的に重要ないくつかの問題について焦点を当て、それらに統合的な研究方法を組み入れるとともに、階層を超えた研究協力体制を確立することが望まれる。そこで、2013年度において、これまでの研究領域を発展的に改組し、新たに「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」を設立した。各研究領域では、主に下記のような研究を実施する。

「バイオセンシング研究領域」では、分子から個体までのセンシング機構を駆使して生存している生物の生命システムのダイナミズムの解明に迫るために、環境情報の感知に関わるバイオセンシング機構研究を推進する。分子、細胞や個体が環境情報を感知する機構は様々であり、異なる細胞種や生物種におけるバイオセンシング機構の普遍性と相違性を明らかにするとともにセンスされた環境情報の統合機構も明らかにする。そのために、バイオセンサーの構造解析やモデリング解析、進化解析も含めた多層的なアプローチを実施する。

「生命時空間設計研究領域」では、生命現象の諸階層における時間と空間の規定と制御に関わる仕組みを統合的に理解することを目指す。短時間で起きる分子レベルの反応から生物の進化までの多様な時間スケールの中で起きる生命現象や、分子集合体から組織・個体に至る多様な空間スケールでの大きさや空間配置の規定や制御に関わる仕組みを研究する。そのために、分子遺伝学、オミックスによる網羅的解析、光学・電子顕微鏡技術を活用したイメージング、画像解析を含む定量的計測、などによる研究を展開し、さらに数理・情報生物学を駆使した統合的なアプローチを実施する。

「生命動秩序形成研究領域」では、生命体を構成する多数の素子（個体を構成する細胞、あるいは細胞を構成する分子）がダイナミックな離合集散を通じて柔軟かつロバストな高次秩序系を創発する仕組みを理解することを目指す。そのために、生命システムの動秩序形成におけるミクロ・マクロ相関の探査を可能とする物理化学的計測手法の開発を推進するとともに、得られるデータをもとに多階層的な生命情報学・定量生物学・数理生物研究を展開し、さらに超分子科学・合成生物学を統合したアプローチを実施する。

分子科学研究所を兼務している教員のうち、青野重利教授はバイオセンシング研究領域に、加藤晃一教授、藤井浩准教授は生命動秩序形成研究領域に所属している。2012年度末に定年退職した桑島邦博教授の後任は、現在選考中である。

9. 資料

9-1 評議員 (1976 ~ 1981)

氏名・所属 (当時)	1976.1.10 ~ 1978.1.9	1978.1.10 ~ 1980.1.9	1980.1.10 ~ 1981.4.13
小谷 正雄 東京理科大学長	○	○	○
長倉 三郎 東京大物性研教授	○	○	○
石塚 直隆 名古屋大学長	○	○	○
梅棹 忠夫 国立民族学博物館長	○	○	○
岡村 総吾 東京大工教授	○	○	○ (日本学術振興会理事)
ハインツ・ゲリシャー マックス・プランク財団 フリッツ・ハーバー研究所長	○	○	
柴田 承二 東京大薬教授	○	○ (東京大名誉教授)	○
関 集三 大阪大理教授	○		
田島弥太郎 国立遺伝学研究所長	○	○	○
田中 信行 東北大理教授	○		
福井 謙一 京都大工教授	○	○	○
伏見 康治 名古屋大名誉教授	○	○ (日本学術会議会長)	○
ゲルハルト・ヘルツベルグ カナダ国立研究所 ヘルツベルグ天体物理学研究所長	○		
森野 米三 相模中央化学研究所長	○	○	○ (相模中央化学研究所 最高顧問理事)
山下 次郎 東京大物性研究所長	○		
湯川 泰秀 大阪大産業科学研教授	○	○ (大阪大名誉教授)	○ (大阪女子大学長)
渡辺 格 慶應義塾大医教授	○	○	○
植村 泰忠 東京大理教授		○	○
メルビン・カルビン カリフォルニア大学ケミカル・ ヴィオダイナミックス研究所長		○	○
神田 慶也 九州大理学部長		○	○ (九州大学長)
齋藤 一夫 東北大理教授		○	○
ジョージ・ポーター 英国王立研究所教授化学部長			○

9-2 評議員 (1981～2004)

氏名	所 属	第1期 '81.6.1～ '83.5.31	第2期 '83.6.1～ '85.5.31	第3期 '85.6.1～ '87.5.31	第4期 '87.6.1～ '89.5.31	第5期 '89.6.1～ '91.5.31	第6期 '91.6.1～ '93.5.31	第7期 '93.6.1～ '95.5.31	第8期 '95.6.1～ '97.5.31	第9期 '97.6.1～ '99.5.31	第10期 '99.6.1～ '01.5.31	第11期 '01.6.1～ '03.5.31	第12期 '03.6.1～ '04.3.31
赤松 秀雄	東大名誉教授, 分子研名誉教授	○	○	○	○'88.1.8 死亡								
石川 忠雄	慶應大学長	○											
石塚 直隆	名大学長	○~'81.7.22											
飯島 宗一	名大学長	○'81.9.1~	○	○	○~'87.7.21								
植村 泰忠	東大理教授, 東京理大教授	○	○	○									
神田 慶也	九大学長	○											
小谷 正雄	東京理科大学長	○											
小松 登	豊田中研所長	○	○										
齋藤 一夫	東北大理教授, 国際基督教大教授	○	○~'84.5.15			○	○	○					
神 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, 京都工織大学長, 基礎化学研究所長	○	○	○	○	○	○						
藤巻 正生	お茶女大家政教授, お茶女大学長	○	○	○									
向坊 隆	東大名誉教授	○											
森 大吉郎	宇宙研所長	○	○'83.11.25 死亡										
亀谷 哲治	星薬科大学長		○	○									
角戸 正夫	姫路工大学長		○	○									
本多 波雄	豊橋技科大学長		○'84.4.16~	○	○	○							

氏名	所属	第1期 '81.6.1～ '83.5.31	第2期 '83.6.1～ '85.5.31	第3期 '85.6.1～ '87.5.31	第4期 '87.6.1～ '89.5.31	第5期 '89.6.1～ '91.5.31	第6期 '91.6.1～ '93.5.31	第7期 '93.6.1～ '95.5.31	第8期 '95.6.1～ '97.5.31	第9期 '97.6.1～ '99.5.31	第10期 '99.6.1～ '01.5.31	第11期 '01.6.1～ '03.5.31	第12期 '03.6.1～ '04.3.31
田中 郁三	東工大理工学部学部長， 学長，学位授与機構長	○	○	○	○	○	○						
中嶋 貞雄	東大物性研究所長	○											
小田 稔	宇宙研究所長	○	○	○	○								
斎藤 喜彦	慶應理工教授		○	○	○								
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	長岡技術科大教授， 城西大理教授				○	○	○	○					
田丸 謙二	東京理科大学教授				○	○	○						
早川 幸男	名大学長				○	○	○	○	○				
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							○	○		○		
田岡 三生	埼玉大理教授， 理学部長							○	○	○			
土屋 莊次	早稲田大理工学総合研 究センター客員教授							○	○	○	○		
又賀 昌	(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	豊橋技術科大学長							○	○	○		○	
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 '83.6.1～ '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	東大物性研究所長									○	○	○	
山崎 敏光	理化学研 RI ビーム科学研究室協力員									○			
荻野 博	放送大学宮城学習センター所長									○	○	○	
木原 元央	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設長									○			
近藤 保	豊田工業大客員教授									○	○	○	
佐原 眞	国立歴史民俗博物館長									○	○	○	
廣田 襄	京大名誉教授									○	○	○	
福山 秀敏	東大物性研究所長									○	○	○	
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	2013. 4.1 ～ 2015.3.31
加藤 伸一 豊田中央研究所代表取締役	○	○	○	
小間 篤 高エネルギー加速器研究機構理事 物質構造科学研究所長	○			
土屋 莊次 (台湾)国立交通大学講座教授 東京大学名誉教授	○	○	○	
益田 隆司 電気通信大学長	○			
江崎 信芳 京都大学化学研究所長		○		
野口 宏 中日新聞編集局文化部長		○	○ (~2008.7.31)	
時任 宣博 京都大学化学研究所長			○	
田中 宏明 中日新聞編集局文化部長			○ (2008.8.1~)	
齊藤 軍治 名城大学教授				○
廣田 襄 京都大学名誉教授				○
増原 宏 (台湾)国立交通大学講座教授				○

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）	'04. 5.19 ~ '05.3.31	'05. 4. 1 ~ '07.3.31	'07. 4. 1 ~ '09.3.31	'09. 4. 1 ~ '11.3.31	'11. 4. 1 ~ '13.3.31	'13. 4. 1 ~ '15.3.31
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					○ (~'12.3.31)	
WALMSLEY, Ian A. 英国オックスフォード大学副学長					○ ('12.4.1~)	○
O'HALLORAN, Thomas V. ノースウェスタン大学化学科教授						○

9-6 運営に関する委員会委員 (1975 ～ 1981)

氏 名・所 属 (当 時)	'75.7.15 ~ '77.3.31	'77.4.1 ~ '78.3.31	'78.4.1 ~ '79.3.31	'79.4.1 ~ '80.3.31	'80.4.1 ~ '81.3.31
浅原 照三 芝浦工大工教授	○	○			
伊藤 光男 東北大理教授	○				
井口 洋夫 分子研教授	○	○	○	○	○
大野 公男 北大理教授	○	○	○	○	○
角戸 正夫 阪大蛋白研所長	○	○	○		
神田 慶也 九大理教授	○	○ (理学部長)	○ (~'78.11.7)		
朽津 耕三 東大理教授	○			○	
田中 郁三 東工大理学部長	○			○ (教授)	
坪村 宏 阪大基礎工教授	○				
豊沢 豊 東大物性研教授	○	○			
長倉 三郎 東大物性研教授	○	○	○	○	
中島 威 東北大理教授	○	○	○		
細矢 治夫 お茶水大理助教授	○			○	○
又賀 昇 阪大基礎工教授	○			○	
村田 好正 学習院大理教授	○	○ (東大物性研 助教授)	○	○	
山寺 秀雄 名大理教授	○				
吉田 善一 京大工教授	○				
和田 昭充 東大理教授	○	○			
廣田 榮治 分子研教授		○ (委員長)	○ (委員長)	○ (委員長)	○ (委員長)
伊東 椒 東北大理教授		○	○		
大木 道則 東大理教授		○	○		
大瀧 仁志 東工大総合工研教授		○	○		
馬場 宏明 北大応用電研教授		○	○		
福井 謙一 京大工教授		○	○	○	
齋藤 喜彦 東大理教授		○		○	○
諸熊 奎治 分子研教授		○	○	○	
吉原經太郎 分子研教授		○			
霜田 光一 東大理教授			○	○	
武内 次夫 豊橋技科大教授			○	○	
山本 常信 京大理教授			○	○	
岩村 秀 分子研教授			○		
坂田 忠良 分子研助教授			○		
木下 実 東大物性研助教授				○	
黒田 晴雄 東大理教授				○	○
山下 雄也 名大工教授				○	○
高谷 秀正 分子研助教授				○	
花崎 一郎 分子研教授				○	○
安積 徹 東北大理助教授					○
志田 忠正 京大理助教授					○
鈴木 洋 上智大理工教授					○
伊達 宗行 阪大理教授					○
田仲 二郎 名大理教授					○
千原 秀昭 阪大理教授					○
土屋 莊次 東大教養助教授					○
永沢 満 名大工教授					○
務台 潔 東大教養助教授					○
藤田純之佑 名大理教授					○
塚田 捷 分子研助教授					○

9-7 運営協議員 (1981 ~ 2004)

◎ 会長（議長） 人一人人事選考部に属する運営協議員
（副） 副会長（副議長） 共一共同研究専門委員会

[illegible]

氏 名	所 属	第1期 '81.5.1～ '83.4.30	第2期 '83.5.1～ '85.4.30	第3期 '85.5.1～ '87.4.30	第4期 '87.5.1～ '89.4.30	第5期 '89.5.1～ '91.4.30	第6期 '91.5.1～ '93.4.30	第7期 '93.5.1～ '95.4.30	第8期 '95.5.1～ '97.4.30	第9期 '97.5.1～ '99.4.30	第10期 '99.5.1～ '01.4.30	第11期 '01.5.1～ '03.4.30	第12期 '03.5.1～ '04.3.31
山寺 秀雄	分子研教授(客員) (名大理教授)	○											
田仲 二郎	名大理教授	○	○人	○(副)人									
伊藤 光男	東北大理教授		○										
木村 雅男	北大理教授		○										
黒田 晴雄	東大理教授		○										
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	○人								
細矢 治夫	お茶女子理教授			○人	○人								
又賀 昌司	阪大基礎工教授			○共	○～'88.3.31								
松永 義夫	北大理教授			○人	○人	○人・共	○	○人	○人	○	○'00.4.1～	◎	◎
北川 禎三	分子研教授			○共	○人・共								
齋藤 一夫	分子研教授			○	○	○							
青野 茂行	金沢大院自然科学研 究科長												
安積 徹	東北大理教授				○人	○人							
原田 義也	東大教養学教授				○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	○人	○共	○共	○共	○人	○人
葉師 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	○人	○人	○'94.4.1～	○人	○人	○～'00.3.31		
岩田 未廣	分子研教授					○人	○人						
志田 忠正	京大理教授					○人	○人						
田隅 三生	東大理教授					○人	○						
仁科雄一郎	東北大材研教授					○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					
小川楨一郎	九大総合理工教授						○人	○人					
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	○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				
宇理須恒雄	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	○人	○共	○共
西 信之	分子研教授								○人	○人	○人	○共	○共
三上 直彦	東北大理教授								○共	○人	○共	○共	○共
岡田 正	阪大院基礎工教授									○	○共		
加藤 重樹	京大理教授									○人	○人		

氏 名	所 属	第1期 '83.5.1～ '83.4.30	第2期 '83.5.1～ '85.4.30	第3期 '85.5.1～ '87.4.30	第4期 '87.5.1～ '89.4.30	第5期 '89.5.1～ '91.4.30	第6期 '91.5.1～ '93.4.30	第7期 '93.5.1～ '95.4.30	第8期 '95.5.1～ '97.4.30	第9期 '97.5.1～ '99.4.30	第10期 '99.5.1～ '01.4.30	第11期 '01.5.1～ '03.4.30	第12期 '03.5.1～ '04.3.31
小谷野猪之助 関 一彦	姫路工業大理工教授 名大物質科学国際研 究会教授									○共 ○人	○共 ○人		
田中 武彦	九大院理教授									○人	○人		
篠野 嘉彦	九大院総合理工教授									○(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											○	○
山口 宏夫	東大院理教授									○人	○人	○人	○人
松本 和子	早稲田大理工教授									○人	○人 (~'02.3.31)	○人	○人
平田 文男	分子研教授									○人	○人	○人	○人
藤井 正明	分子研教授									○人	○人	○	○
阿久津秀雄	阪大蛋白研教授											○(副)人	○(副)人
宇田川康夫	東北大多元研教授											○人	○人
太田 信廣	北大電子科学研教授											○	○
川合 真紀	理化学研主任研究員												
榊 茂好	九大有機化学基礎七 教授											○人	○人
菅原 正	東大院総合文化教授											○共	○共
魚住 泰広	分子研教授											○'02.4.1～	○
西川 恵子	千葉大院自然科学教授												○
岡本 裕巳	分子研教授												○人
加藤 隆子	核融合科学研教授												○

9-8 運営会議委員（2004～）

◎ 議長 人—人事選考部会に属する委員
 (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	○
薬師 久彌 分子研教授	○人	◎共'07.4.1～	○共		
齊藤 真司 分子研教授				○人	○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	
富宅喜代一 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
寺嶋 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）

法第 4 条第 1 項第 1 号に掲げる 教育研究組織に該当する組織	該当する職	分子研規則 による種別	任 期	任期更新に関する事項	
				可 否	任 期
分子科学研究所に置かれる研究 領域及び研究施設	助教	5 年に満たない 任期を残す者	分子研規則に よる残任期間	可	任期を 定めず に採用
		5 年を越える 任期を残す者	5 年		

9-10 自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則

平成16年4月1日

分研規則第4号

自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則

(目的)

第1条 この規則は、自然科学研究機構分子科学研究所（以下「研究所」という。）の設置目的及び社会的使命を達成するため、研究活動等の状況について自己点検・評価、及び外部の者による評価（以下「外部評価」という。）を行い、もって研究所の活性化を図ることを目的とする。

(点検評価委員会)

第2条 研究所に、前条の目的を達成するため分子科学研究所点検評価委員会（以下「委員会」という。）を置く。

2 委員会は、次に掲げる者をもって組織する。

- 一 研究所長
- 二 研究総主幹
- 三 研究主幹
- 四 研究施設の長
- 五 本部研究連携室の研究所所属の研究教育職員
- 六 技術課長
- 七 その他研究所長が必要と認めた者

3 前項第7号の委員の任期は、2年とし、再任を妨げない。

(委員長)

第3条 委員会に委員長を置き、研究所長をもって充てる。

2 委員長に事故があるときは、研究総主幹がその職務を代行する。

(招集)

第4条 委員会は、委員長が招集し、その議長となる。

(点検評価委員会の任務)

第5条 委員会は、次に掲げる事項について企画、検討及び実施する。

- 一 自己点検・評価及び外部評価の基本方針に関すること。
- 二 自己点検・評価及び外部評価の実施に関すること。
- 三 自己点検・評価報告書及び外部評価報告書の作成及び公表に関すること。
- 四 独立行政法人大学評価・学位授与機構が行う評価に係る諸事業への対応に関すること。
- 五 その他自己点検・評価及び外部評価に関すること。

(点検評価事項)

第6条 委員会は、次の各号に掲げる事項について点検評価を行うものとする。

- 一 研究所の在り方、目標及び将来計画に関すること。
- 二 研究目標及び研究活動に関すること。
- 三 大学等との共同研究体制及びその活動に関すること。
- 四 大学院教育協力及び研究者の養成に関すること。
- 五 研究教育職員組織に関すること。
- 六 研究支援及び事務処理に関すること。
- 七 国立大学法人総合研究大学院大学との関係及び協力に関すること。
- 八 施設設備等研究環境及び安全に関すること。
- 九 国際共同研究に関すること。
- 十 社会との連携に関すること。
- 十一 学術団体との連携に関すること。
- 十二 管理運営に関すること。
- 十三 学術情報体制に関すること。
- 十四 研究成果等の公開に関すること。
- 十五 財政に関すること。
- 十六 点検評価体制に関すること。
- 十七 その他委員会が必要と認める事項

2 前項各号に掲げる事項に係る具体的な点検評価項目は、委員会が別に定める。

(専門委員会)

第7条 委員会に、専門的事項について調査審議するため、専門委員会を置くことができる。

2 専門委員会に関し必要な事項は、委員会が別に定める。

(点検評価の実施)

第8条 自己点検・評価又は外部評価は、毎年度実施する。

(点検評価結果の公表)

第9条 研究所長は、委員会が取りまとめた点検評価の結果を、原則として公表する。ただし、個人情報に係る事項、その他委員会において公表することが適当でないと認めた事項については、この限りではない。

(点検評価結果への対応)

第10条 研究所長は、委員会が行った点検評価の結果に基づき、改善が必要と認められるものについては、その改善に努めるものとする。

(庶務)

第11条 委員会の庶務は、岡崎統合事務センター総務部総務課において処理する。

(雑則)

第12条 この規則に定めるもののほか、委員会の運営に関し必要な事項は、委員会の議を経て研究所長が定める。

附則

1 この規則は、平成16年4月1日から施行する。

2 この規則施行後、第2条第2項第7号により選出された最初の委員の任期は、同条第3項の規定にかかわらず、平成18年3月31日までとする。

9-11 自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則

平成 16 年 4 月 1 日

分研規則第 5 号

自然科学研究機構分子科学研究所将来計画委員会規則

(設置)

第 1 条 自然科学研究機構分子科学研究所（以下「研究所」という。）に、研究所の将来計画について検討するため、将来計画委員会（以下「委員会」という。）を置く。

(組織)

第 2 条 委員会は、次の各号に掲げる委員をもって組織する。

一 研究所長

二 研究総主幹

三 研究所の教授数名

四 研究所の准教授数名

五 その他分子科学研究所長（以下「研究所長」という。）が必要と認めた者

2 前項第 3 号、第 4 号及び第 5 号の委員の任期は、1 年とし、再任を妨げない。ただし、補欠の委員の任期は、前任者の残任期間とする。

3 前項の委員は、研究所長が委嘱する。

(委員長)

第 3 条 委員会は、研究所長が招集し、その委員長となる。

(専門委員会)

第 4 条 委員会に、専門的な事項等を調査検討させるため、専門委員会を置くことができる。

(委員以外の者の出席)

第 5 条 委員長は、必要に応じて、委員以外の者を委員会に出席させ、意見を聴取することができる。

(庶務)

第 6 条 委員会の庶務は、岡崎統合事務センター総務部総務課において処理する。

附則

1 この規則は、平成 16 年 4 月 1 日から施行する。

2 この規則施行の後最初の任命に係る委員の任期は、第 2 条第 2 項の規定にかかわらず、平成 17 年 3 月 31 日までとする。

附則

この規則は、平成 19 年 4 月 1 日から施行する。

9-12 大学共同利用機関法人自然科学研究機構年度計画（平成26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 研究力強化のために新たに設置された研究力強化戦略会議の下に、機構本部に設置した研究力強化推進本部と各機関に設置した研究力強化戦略室が連携して、本格的な活動を推進する。URA（University Research Administrator）職員の配置や組織改革等を行い、機構活動の広報普及、研究企画、研究支援、及び国際的共同研究などの活発化を図り、国際的に一層高い水準の学術研究を進める。
- ③ 岡崎統合バイオサイエンスセンターでは次世代の生命科学研究を牽引する創発型連携研究拠点の形成を目指す。そのために、岡崎統合バイオサイエンスセンター独自の共同利用研究を行える体制を整備し、共同利用研究により全国の研究者を対象に、新拠点における異分野融合型次世代生命科学研究を確立することを検討する。
- ④ 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。特に、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索する認知ゲノミクス研究を推進する。
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。
新分野創成センター・宇宙における生命研究分野においては、自然科学の幅広い分野を包含する機構の特色を生かして、特に天文学と生命科学の両面から、我が国において、「宇宙における生命（アストロバイオロジー）」という新しい学際領域の研究を推進し、研究者コミュニティの形成を図る。

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 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）の定常的な運用を実現し、戦略枠プログラムをはじめとした共同利用観測を推進する。すばる望遠鏡が次世代超大型望遠鏡と役割を分担してその特長を生かせるよう、超広視野主焦点分光器（PFS）等の観測装置の検討を国内外の研究機関と協力して進める。
- ③ 京都大学新光赤外線望遠鏡の製作等を京都大学、名古屋大学等と協力して行う。
- ④ 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。
- ⑤ 平成25年度から運用開始した新しいスーパーコンピュータの共同利用運用を推進する。各機材に関して適宜適切な増強を加えるとともに、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。
- ⑥ 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。
- ⑦ アルマ計画において、本格運用を継続する。
- ⑧ TMT国際天文台を設立し、TMT（30m光赤外線望遠鏡）建設を開始する。日本が担当することが決まった望遠鏡本体の建設、主鏡鏡材の製作、主鏡の研磨、および観測装置のうち日本分担分の製作を開始する。
- ⑨ 次期太陽観測衛星計画の提案を、機会を捉えて行うとともに、詳細検討を更に進める。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。
- ⑩ 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。
- ⑪ 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、閉構造ダイバータや電子サイクロトロン共鳴加熱用ジャイロトロンなど、プラズマを高性能化するための機器整備を進める。電子及びイオン温度の同時向上や、定常プラズマのより高性能化を目指した実験を計画的に実施する。これらの高性能プラズマを共同利用・共同研究に供し、精度の高い計測と数値解析を組み合わせた学術研究を更に進め、プラズマの振舞の物理機構の理解を深める。重水素実験を開始するために必須となるトリチウム除去装置等の機器・施設整備を行う。
- ② 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に向け、（1）平衡・流体・運動論・マルチ時空間スケール・統合輸送・周辺プラズマ輸送コード等の機能拡張・高精度化、及び関連する物理モデルや応用技術の開発を進め、（2）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、コア・周辺領域における輸送、不安定性、非線形発展、高エネルギー粒子物理、関連する物理特性、及び炉材料に関するシミュレーション研究を実施する。
- 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、大型ヘリカル実験装置（LHD）研究及び数値実験炉研究との連携強化によって、原型炉の基本設計を進める。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、及び水素同位体挙動等の研究を行う新たな研究設備によって、原型炉の基本設計に必要な実験研究を推進し、炉工学基盤の構築と基礎学術・学際研究の推進を図る。

（基礎生物学研究所）

- ① 生殖や発生、多様性の進化的獲得、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、新規モデル生物及びライブイメージングの開発、次世代DNAシーケンサーによる遺伝子解析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) を推進するとともに、生物遺伝資源の新規保存技術開発により、研究拠点機能を一層強化する。
- ③ バックアップ保管事業の申請から承認、保管に至るプロセスの迅速化を図り、研究者がより利用しやすいバイオバックアッププロジェクトの運営を行う。
- ④ 新規モデル生物開発センターを本格的に稼働し、未知の生物現象の解明のためのモデル生物開発に着手する。

(生理学研究所)

- ① 生体の働きを担う機能分子の構造、動作・修飾・制御メカニズム、生体機能に果たす役割を解明するとともに、それらの機能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等のメカニズムを、分子レベル、ニューロン・グリアレベルで解明するとともに、それらの病態への関わりについて研究を進める。
- ③ 痛覚・聴覚・視覚等の感覚・認知機構や四肢・眼球の運動制御機構に関する研究、これらが障害された際の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発展させ、脳機能の解析や病態生理についての研究を行う。
- 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。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) を推進する。脳磁計 (MEG) に、最新の記録・解析装置とそのソフトウェアを導入し、時間分解能、空間分解能を飛躍的に高め、無意識下 (サブリミナル) での脳機能活動の解析を進める。

(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、機能性分子やナノ構造体、生体分子などの多体分子系の構造、反応、物性に関する量子力学、統計力学的手法に基づく理論・計算科学的研究を行う。
- 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継続して進める。それらを用いて、多体相互作用する原子分子集合体における極限時空間スケールでの量子ダイナミクスの測定と制御に向けた研究を行う。
- 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、分子高次構造形成原理と機能発現原理の追求、タンパク質や金属錯体が関与するイオン輸送、物質変換、エネルギー変換を指向した分子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。
各研究機関に置かれた研究力強化戦略室においては、多様な形態で研究者の研究支援を試みる。
- 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、研究力強化戦略室等を活用して、研究体制を適切に見直すなど、各機関内の柔軟な研究連携を、組織的に推進する。
- ③ 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研究を推進する体制の整備を進める。
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。
宇宙における生命研究分野では、教授会議を中心に活動方針を策定して、アストロバイオロジーに関する研究者コミュニティ育成のためプロジェクトの公募、ワークショップの開催、懇話会を実施する。

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 機構本部の研究力強化戦略会議の議論の下に、研究力強化推進本部が中心となって研究力強化 (URA 職員の体制確立、国際共同、国内共同、広報、研究者支援など) の企画、実行、点検等を行う。また、研究力強化に関して大学や他の研究機構との連携を図る。
- ② 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。
- ③ 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、大規模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、研究力強化戦略室の方策も受け、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、平成 25 年度から開始した生物遺伝資源新規保存技術開発の共同利用研究を推進し、多様な生物遺伝資源をバックアップ保管できる体制の整備を進める。
生理学研究所では、脳科学・生理学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充実させるとともに、双方向型共同研究に向けて超高磁場機能的磁気共鳴画像装置 (fMRI) の設置を進める。
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継続して実施する。また、活発な人事流動を生かした大学等との双方向の共同研究を、引き続き推進する。

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、国立天文台内外の観測装置等からの大量観測データの解析・公開や高速ネットワークの充実により、データ活用型天文学を推進する。

(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、平成 25 年度の利用実績の分析と要望を基に海外を含めた共同研究者コミュニティと議論し、合理的な改善対策を実施する。これによって実験参加及びデータ利用の促進を引き続き図り、国内外の共同研究を更に推進する。
- ② 共同利用設備であるプラズマシミュレータ（スーパーコンピュータ）の性能向上に向けた更新の仕様検討を行う。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、プラズマシミュレータを用いた共同研究・共同利用のための利用講習会・教育講座・シンポジウム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、新たに強化整備した研究設備を用いて、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。
- ④ 新たに充足した研究力強化戦略室での検討も踏まえ、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、モデル生物研究センター及び新規モデル生物開発センターと連携し高度の品質管理を行うことで、生物遺伝資源の付加価値を向上させるとともに、生物遺伝資源の新規保存技術の開発を推進し、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様な生物情報を統合的に解析する統合解析システムの運用を開始し、共同研究を実施する。
- ③ 植物の生育環境（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の共同利用を開始し、多様な環境下での植物生育応答情報をネット配信することにより、共同研究を促進する。
- ④ 改修後の水生動物室の稼働を開始し、温度制御、水質管理などを最適化することによって淡水、海水、低温海水のそれぞれについて飼育環境を整えたとともに、新規水生モデル動物についても共同利用・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進展させ、データ解析手法の開発も行う。特に、革新的なコネクティクス技術を応用した研究を継続充実させる。
- ② 超高磁場機能的磁気共鳴画像装置（fMRI）導入・稼働のための準備を進めるとともに、稼働に向けた研究会等を立ち上げて、双方向連携研究の核とする。
- ③ ナショナルバイオリソースプロジェクト（NBRP）によるニホンザルの供給事業の将来を見据え、毎年の提供頭数の適切な見積もりとそれに基づく飼育・繁殖体制の見直しを行う。一方で、より広い研究分野の要望に対応できるように、また提供回数を毎年複数回行うようにして、ユーザーの要望により柔軟に対応できるような態勢を整える。
- ④ ウィルスベクターの供給について、提供先の研究者の用途（対象動物、注入部位、搭載する遺伝子など）に応じて、より遺伝子導入効率の高いベクターを開発し、迅速に提供できる体制をさらに整備する。

(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の更なる高度化を図り、また、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し、スピン・角度・空間分解光電子顕微鏡装置の建設と立ち上げを進める。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・放射光同期実験やコヒーレント放射光利用実験を推進する。
- ② 協奏分子システム研究センターにおいて、分子からナノそしてメソスケールの分子集団へと至る階層間ロジックを実験的また理論的に研究する。その際、生体超分子の協奏的反応機構の解明、構造揺らぎを解析する実験的・理論的手法の構築等に取り組む。また、自発的分子集団挙動に基づく触媒設計や揺らぎを利用した情報処理に関する研究を推進する。
- 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など大規模な計算資源を駆使し、機能性分子や生体分子等における反応、構造形成の解明のために電子状態、自由エネルギー面に関する理論・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じ貸出可能な計測器を充実させるとともに、双方向性を活かした共同研究を更に推進する。
- 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、新規モデル生物開発センターの整備、トレーニングコース等の開催によって、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、三次元走査型電子顕微鏡（3D-SEM）を用いた計画共同研究を充実させ、規模を拡大する。
- ⑤ 分子科学研究所では、共同研究専門委員会が中心となって、運用を開始した共同利用研究の電子申請システムの効果を検証するとともに、必要に応じてシステムの修正を行うことによりシステムのより一層の充実を図り、共同利用研究の利便性向上に取り組む。
- 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）とで共同利用観測を進める。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、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さらに活発な国際共同研究が生まれるように国際連携推進の新たな体制を構築する。

- ⑨ 生理学研究所では、7月に予定されている日米科学技術協定の延長を見越し、「脳研究」分野の事業を若手支援に重点をおいて拡張を図るための計画を策定する。
- ⑩ 分子科学研究所では、「分子研国際共同研究」の重点化を進め、協定に基づいたアジア地域及び欧米の分子科学分野での研究者及び大学院生の招へいプログラムを強化するとともに、海外から直接、共同利用・共同研究に申請できる体制を整備する。
- 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、双方向型共同研究において、ヘリカル型核融合炉を実現する上での重要課題解決に向け複数の参画大学附属研究センター間の連携協力関係を一層強化する。
- 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、特に、研究者コミュニティからの要望の多い新規モデル植物のゲノム情報等の基盤整備を、共同利用・共同研究を通して進める。また植物変異体表現型の画像配信システムを整備し、共同利用に供する。
- ⑭ 生理学研究所では、脳科学の研究領域における戦略的プロジェクト等の研究成果が、広く研究者コミュニティで利用できるように、実験技術・研究リソース等の積極的な提供を図る。特に、超高磁場機能的磁気共鳴画像装置(fMRI)の稼働に向けた研究会等を立ち上げて双方向連携研究の核とする。
- ⑮ 分子科学研究所では、機器センターによる「大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用と共同研究の促進」、及び機器センター・極端紫外光研究施設・装置開発室・各研究室による「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。
生命科学研究所及び物理科学研究科の基盤機関である基礎生物学研究所、生理学研究所及び分子科学研究所においては、生命科学の多様化に対応できる分野横断的な研究者の育成を目指し、異なる研究科と専攻を横断する「統合生命科学教育プログラム」をさらに充実させ、研究者の育成を行う。また、専攻を超えた教育システムである「脳科学専攻間融合プログラム」の受講者をさらに博士(脳科学)に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」、「すばる春・秋(冬)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クストレーニングコース」、「生物画像データ解析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)等には、海外からの体験入学を受け入れる「インターンシップ」(基礎生物学研究所、生理学研究所)、「TLL-NIBB インターナショナルプラクティカルコース」(基礎生物学研究所)等を実施し、大学院生を含む国内外の若手研究者の育成に取り組む。国外学生への認知度を高め、大学院生の国際化に取り組む。

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」や分子科学研究所の「市民公開講座：分子科学フォーラム」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、特許取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。
- ④ 研究力強化の取組の一環として、機構の広報体制の充実を図るとともに、国際情報発信を推進する。

(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、研究力強化推進本部を中心に、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、国際交流協定締結等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、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(核融合科学研究所では既に実施)等によって、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。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り、研究力強化を進める。
- 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。また、機構全体としてポジティブアクションを推進する。

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 引き続き、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とともに、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とともに、第3期中期目標期間に向けて運営方法等の見直しについて検討を開始する。

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、引き続き、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

研究力強化の一環として、機構の広報体制を充実し、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 大規模地震による天井崩落等の災害から、職員等の安全確保のみならず、核融合エネルギーの実現に資する最先端の学術研究用実験装置等を保護するための整備を行うなど、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、情報セキュリティポリシーの周知や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。

