

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ととらえ、その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ことが予想され、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』の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。さらに、理論計算に関連するものとして、文科省「元素戦略プロジェクト」の「触媒・電池の元素戦略研究拠点」（分子研は分担）を受託、実施している。

(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勧誘し、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23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事業と呼び26年度はJASSO海外留学支援制度（短期受入れ）に応募採択され、本事業と組み合わせて実施した。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5-10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と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。このプロジェクトは、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が、現在まで、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。2015年2月2日現在、登録機器数は674台、うち外部公開設備は405台、学内専用設備は269台となっている。ユーザー総数は、10,044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、昨年度に引き続き、管理登録画面の英語表記を進めている。現在の共同研究プロジェクトを柱としたプログラムは2015年度で終了となり、第3期中期計画に入る2016年度からの本事業の成り行きは現在のところ不透明であるが、全国の設備ネットワークを維持していくことは、大学共同利用機関法人である自然科学研究機構分子科学研究所の責務であり、常位利便性を追求しつつ本システムの維持発展に努力する所存である。

5-2 連携融合事業「エクストリームフォトニクス」(文部科学省)

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

(1) 「光を造る」

「光波特性制御マイクロチップレーザーの開発」(平等)

「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」を主題とし、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」を主題とした第 5 回シンポジウムを開催した。ここでは、高感度レーザー顕微鏡やテラヘルツ分光を利用した生体系のイメージングについて議論した。さらに、11 月には「先端光源開発と量子科学への応用」を主題とした第 6 回シンポジウムを行い、高強度超短パルスレーザーを始めとする先端レーザー光源の開発と、それらを原子分子クラスターあるいは表面ダイナミクスの観察や制御へと応用した研究成果と今後の展望について議論した。平成 20 年度は、5 月に理化学研究所にて「イメージング」を主題とした第 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」を主題とした第 9 回シンポジウムを開催した。ここでは、これまでに

本事業によって推進された理研の光科学研究の成果を総括するとともに、今後の展開についての意見交換が行われた。さらに、11月には蒲郡にて分子科学研究所が主催で「凝縮系における量子的世界」を主題とした第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」を主題とした第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 - 26年度は、理研が光拠点シンポジウムの幹事業務やエクストリームフォトニクス事業の中間評価等で忙しかったため、合同シンポジウムは開催していない。

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26年度）

回	開催日	テーマ	講演者
55	2014. 5.15	Properties of a Novel Ultra-Cold Quantum Degenerate Plasma	Klaus Müller-Dethlefs (The University of Manchester)
56	2014. 5.22	Protected State Enhanced Quantum Metrology with Interacting Two-Level Ensembles	Claudiu Genes (The University of Innsbruck)
57	2014. 5.29	ハイブリッド量子テレポーテーション	武田 俊太郎 (分子研大森 G 特任助教)
		モノサイクルもつれ光子対と量子位相ゲートの実現に向けた光子の量子状態のコヒーレント制御	田中 陽 (分子研大森 G 特任助教)
58	2014. 7.14	Different Ways to Femtosecond Imaging and Light Amplification	Heide Ibrahim (INRS-EMT)
		Deceleration of Dissociating Molecular Wave Packets by Solvent Cage: The Dynamic Continuum Ansatz	Sebastian Thallmair (Ludwig-Maximilians-Universität München)
59	2014.10.16	狭線幅光周波数コムを用いたデュアルコム分光計による広帯域分子分光	岩國 加奈 (慶応義塾大学物理学科博士課程3年)
60	2015. 2.16	Foundation of Quantum Mechanics Explored with Neutrons—New Uncertainty-Relation and Quantum Cheshire-Cat—	長谷川 祐司 (ウィーン工科大学 准教授)

5-3 イメージング・サイエンス（自然科学研究機構）

5-3-1 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—超高压位相差電子顕微鏡をベースとした光顕・電顕関連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（当時）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だ（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名及び実働部隊としての博士研究員若干名を公募し、上述のようなイメージングコンテンツの新たな表示法や、イメージ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。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きたが、客員教授は平成25年度で任期を終了し、現在特任助教2名が活動を継続している。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て、その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。平成26年度からは研究プロジェクトの公募形態が大幅に変更され、所外の大学等に属する研究者が研究代表者として応募可能となり、また研究会はプロジェクト研究と同じ枠で公募・採択することとなった。平成26年度は7件のプロジェクト（内1件はトレーニングコース開催）が採択された。

5-3-2 実施された主な行事

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。平成26年には2名の特任助教がオーガナイザーとなり、第47回日本発生物学会テクニカルワークショップ「Fundamentals of quantitative image analysis」(5月27日)及びバイオイメージ・インフォマティクスワークショップ2014(6月9日-10日)が開催された。

5-4 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（自然科学研究機構）

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。また、研究活動の一環として、理論・計算科学に関するセミナーを開催した。さらに、理論および計算分子科学に関する人材育成を目的として、分子シミュレーションおよび電子状態理論に関する講習会を開催した。

以上の国際研究拠点形成活動に加え、自然界における階層と全体のに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 1 月 19 ,20 日に名古屋で開催した。

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している。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と呼び、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 26 年度の支援装置・プログラム一覧を示した。平成 26 年度は、平成 24 年度ナノテクノロジープラットフォーム補正予算で導入されたマスクレス露光装置、3 次元光学プロファイラーシステム、低真空分析走査電子顕微鏡、機能性材料バンド構造顕微分析システム、X 線溶液散乱を新たに利用に供し、これに加えて、合成支援強化として金属錯体の合成・機能評価支援、無機材料の合成・物性評価支援を始動した。表 2 には平成 26 年度の採択課題一覧、表 3 には平成 26 年度前期の採択・実施件数日数(平成 26 年 4 月 1 日～9 月 30 日実施分)を示した。

表 1 平成 26 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。 [UVSOR-III BL4B (100-1000 eV 円偏光), 超伝導磁石; JANIS 社製 7THM-SOM-UHV (± 7 T, 5 K), 試料作製槽 LEED/AES, 蒸着などを装備]	小杉信博施設長 横山利彦教授 高木康多助教 上村洋平助教 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 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。 [UVSOR-III BL4U (100-700 eV) 利用, Bruker 社製 (空間分解能 30 nm), 測定雰囲気 (高真空 ~ 常圧)]	小杉信博施設長 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	マスクレス露光装置 ((DL-1000/IMC) 段差計付き マスクレス露光装置は、任意の形状をフォトマスクなしで直接 描画する装置。光源は 405nmLED で、露光範囲 100 mm×100 mm, 最少線幅 1μm の描画が可能。段差計は、150 mm までの 領域でステッチングなしで測定可能。その他にも、精密温湿度 調整付きのイエロークリーンブースは、フォトリソグラフィ に関する一連の作業(基板洗浄,各種レジスト塗布,露光,現像, アッシング,エッチング)に利用可能。 [マスクレス露光装置(ナノシステムソリューションズ DL-1000/ IMC), 段差計(KLA Tencor P7), 精密温度調整機能付クリ ンブース, マスクアライナー(ミカサ社製 MA-10), スピンコー ター(ミカサ社製 MS-A100)]	山本浩史室長 鈴井光一課長 青山正樹技術職員 高田紀子技術職員	装置開発室 技術課 装置開発室 装置開発室
	3次元光学プロファイラシステム(Nexview) 3次元光学プロファイラシステム(ZYGO Nexview)は、非接 触で表面の3次元形状測定,表面粗さ測定を行う装置。つなぎ 合わせ機能により 46.5 mm 範囲の3次元形状測定や, Ra0.1 nm 以下の超精密研磨面の測定, 透明膜の厚さ測定(1μm 以上) などが可能。X-Y ステージ可動範囲 200 mm×200 mm。Z 軸可 動範囲 100 mm [精密温度調整機能付クリーンブース]	山本浩史室長 鈴井光一課長 青山正樹技術職員 近藤聖彦技術職員	装置開発室 技術課 装置開発室 装置開発室
高分解能透過型電子顕微 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。 [日本電子社製 JEM-3100FEF (300kV, 粒子分解能 0.17 nm)]	大島康裕センター長 横山利彦センター長 上田 正技術職員	機器センター 機器センター 機器センター
電解放射走査電子顕微鏡 支援	走査電子顕微鏡を提供。主に施設利用に対応。 [JEOL JSM-6700F (試料4インチまで, EDS付)]	大島康裕センター長 横山利彦センター長 中尾 聡研究員	機器センター 機器センター 物質分子科学
集束イオンビーム加工機 支援	集束イオンビーム加工を提供。主に施設利用に対応。 [JEOL JEM-9310FIB (試料1インチまで, SEM, TEM 加工可)]	大島康裕センター長 横山利彦センター長 中尾 聡研究員 酒井雅弘技術職員	機器センター 機器センター 物質分子科学 UVSOR
低真空分析走査電子顕微 鏡支援	幅広い試料に対する, SEM 観察と EDS 元素分析の環境を提供。 SEM 本体は, 日立ハイテクノロジー社製 SU6600。10 ~ 300Pa の低真空観察に対応し, 絶縁性試料を導電処理なしで観察可能。 分解能は, 高真空 1.2 nm (30 kV), 低真空 3.0 nm (30 kV)。EDS 分析装置は, BrukerAXS 社製 XFlash5060FQ 及び XFlash6 10。 表面凹凸の影ができにくく高感度な EDS 検出器を搭載。温度を -20 ~ 50 程度で変えられるステージも利用可能。 [日立ハイテクノロジー社製 SU6600 (ショットキー型電子銃, 空間分解能 1.2 nm (30 kV), 3.0 nm (1 kV)), 低真空機能 EDS (BrukerAXS 社製 FQ5060/XFlash6)]	大島康裕センター長 横山利彦センター長 中尾 聡研究員 酒井雅弘技術職員	機器センター 機器センター 物質分子科学 UVSOR
機能性材料バンド構造顕 微分析システム支援	静電半球型アナライザーを用いた機能性材料の価電子バンド構 造測定システム。ディフレクターを使用することで2次元波数 空間マッピングを行うことが可能。薄膜作製用真空チェンバー, 試料表面処理チェンバー(電子衝撃加熱, 通電加熱, Ar ⁺ スパツ タが可能), 電子線回折装置, 劈開機構を利用することができる ため, 様々な機能性材料の測定に対応。	大島康裕センター長 横山利彦センター長 小杉信博教授 解良 聡教授 田中清尚准教授 山根宏之助教	機器センター 機器センター 光分子科学 光分子科学 UVSOR 光分子科学
X線光電子分光支援	汎用のX線光電子分光器(AI, Mg-Kα線利用)を提供。施設利 用として気軽に利用いただける。 [電子分光器 Omicron 社製 EA-125 (ツインアノードX線源)]	大島康裕センター長 横山利彦センター長 小杉信博教授 酒井雅弘技術職員	機器センター 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。[Bruker E680 (ハイブリッド磁石 (超伝導 6 T, 常伝導 3.5 T), 3.8–300 K, Q-band パルス ENDOR & ELDORR, X-band パルス ENDOR)]	大島康裕センター長 横山利彦センター長 中村敏和准教授 藤原基靖技術職員	機器センター 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。 [QuantumDesign 社 製 MPMS-7 (±7 T, 2–400 K, 300–800 K, DC), QuantumDesign 社 製 MPMS-XL7 (±7 T, 2–400 K, DC&AC)]	大島康裕センター長 横山利彦センター長 藤原基靖技術職員	機器センター 機器センター 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。 [RENISHAW inVia Reflex (488, 532, 633, 785 nm, 100–3200 cm^{-1} , 分解能: 面内 1 μm , 深度 2 μm , 3.2–500 K)]	大島康裕センター長 横山利彦センター長 山本浩史教授 賣市幹大技術職員	機器センター 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 横山利彦センター長 山本浩史教授 賣市幹大技術職員	機器センター 機器センター 協奏分子センター 協奏分子センター
X線溶液散乱支援	X線小角散乱による溶液状試料 (タンパク質, ミセル, コロイドなど) の構造解析 ・生体高分子試料の状態診断支援 (回転半径, 形状, 分子質量, 距離分布関数など) ・溶液散乱データの解析・解釈支援 ・放射光施設での実験に向けた試料の前評価, 計画立案支援	大島康裕センター長 横山利彦センター長 秋山修志教授	機器センター 機器センター 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, 3 重共鳴にも対応。 [日本電子社製 JMN-ECA920 (溶液・固体両用)]	大島康裕センター長 横山利彦センター長 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 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・ 装置開発室
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。 [Bruker AVANCE 800US (溶液, クライオプローブ)]	大島康裕センター長 横山利彦センター長 加藤晃一教授 山口拓実助教	機器センター 機器センター 生命・錯体分子科学 生命・錯体分子科学
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。 [Bruker AVANCE 600 (固体)]	大島康裕センター長 横山利彦センター長 西村勝之准教授	機器センター 機器センター 物質分子科学
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。 [有機薄膜ナノ構造太陽電池の設計・製作・各種評価]	平本昌宏教授 嘉治寿彦助教	物質分子科学 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。 [有機 FET の設計・製作・各種評価，有機伝導体半導体合成]	山本浩史教授 須田理行助教	協奏分子センター 協奏分子センター
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。 [バッキーボウル分子合成，有機合成触媒創製評価]	櫻井英博准教授 東林修平助教	協奏分子センター 協奏分子センター
大規模量子化学計算支援	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。 [高精度ナノ構造電子状態計算]	江原正博教授 福田良一助教	理論・計算分子科学 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。 [超高真空下での磁性薄膜作成・磁気光学 Kerr 効果によるその場観察評価。紫外レーザー磁気円二色性光電子顕微鏡も利用可]	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 物質分子科学 物質分子科学
金属錯体の合成・機能評価支援	金属錯体の設計，合成，構造解析および触媒機能評価を支援。電気化学的および光化学的な小分子活性化や物質変換反応の評価が可能。 [金属錯体の設計，合成，構造解析。電極触媒機能評価，光触媒機能評価]	正岡重行准教授 近藤美欧助教	生命・錯体分子科学 生命・錯体分子科学
無機材料の合成・物性評価支援	無機材料の合成と結晶構造・物性の評価を支援。超高圧装置を利用した高温・高圧下での物質合成，X線回折による結晶構造解析，温度・雰囲気制御下での電気化学的物性評価が可能。 [無機材料の設計・合成・各種評価]	小林玄器特任准教授	協奏分子センター

表2 2014年度(平成26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
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
ディラック電子系分子性伝導体への静電キャリア注入を目的とした電界トランジスタ作製および物性評価	有機 FET	東邦大学理学部 田嶋 尚也
オルガノゲル薄膜の構造解析と塗布型材料としての展開	太陽電池	島根大学教育学部 西山 桂
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
スピンフラストレーション系の ESR 測定及び磁化測定	ESR E680	神戸大学分子フォトサイエンス 太田 仁 研究センター
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
部分分子置換した有機伝導体の ESR 測定	ESR E680	山梨大学大学院総合研究部工学 米山 直樹 域物質科学系
分子性伝導体におけるスピン流物性の研究	有機 FET	東北大学 WPI - AIMR 齊藤 英治
双安定伝導性錯体の示す光応答とそのメカニズムの解明	有機 FET	神戸大学大学院理学研究科 高橋 一志
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
バッキーボウル分子のレーザー分光	有機合成	京都大学理学研究科 馬場 正昭
分子性伝導体における電界誘起相転移の探索	有機 FET	理化学研究所加藤分子物性研究室 川楯 義高
Theoretical study on the resonance states of large conjugated system: Development of CAP/SAC-CI theory	量子化学計算	Southeastern Louisiana University Thomas Sommerfeld
味覚受容体の X 線小角散乱解析	X線溶液散乱	岡山大学大学院医歯薬学総合研究科 山下 敦子

ジスルフィド結合が制御するタンパク質の溶液構造	X線溶液散乱	慶應義塾大学理工学部	古川 良明
X線小角散乱法による PDI ファミリーおよび PDI ファミリーと PDI 酸化酵素の複合体の構造解析	X線溶液散乱	東北大学多元物質科学研究所	奥村 正樹
Coumarin-based Donor- π -Acceptor Organic Dyes for a Dye-Sensitized Solar Cell	量子化学計算	Ubon Ratchatani University	Siriporn Jungsuttiwong
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
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
基板表面上における有機ラジカル薄膜の作成	SQUID XL-7 磁性薄膜	名古屋大学物質科学国際研究センター	江口敬太郎
有機ダイマーマット絶縁体における光誘起絶縁体金属転移	有機 FET	東京大学大学院新領域創成科学研究科	岡本 博
Metal-porphyrin: A Potential Catalyst for N_2O Direct Decomposition by Theoretical Reaction Mechanism Investigation	量子化学計算	Shanghai University	Phornphimon Maitarad
Benchmark Study on the Triplet Excited-State Geometries and Phosphorescence Energies of Heterocyclic Compounds: Comparison Between TD-PBE0 and SAC-CI	量子化学計算	Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris (ENSCP)	Ilaria Ciofini
超高磁場 NMR による酸化亜鉛ナノロッドの評価	600MHz NMR	大阪工業大学教育センター	尾形 健一
ニッケル触媒による炭素 - フッ素結合の切断過程に関する理論研究	量子化学計算	大阪大学大学院工学研究科	岩崎 孝紀
多周波および多種 ESR による照射食品の研究	ESR E680	(独)農研機構食品総合研究所	亀谷 宏美
時間分解 EPR および高速分光を用いた二分子膜界面における電子移動メカニズムの研究	ESR E680	新潟大学理学部	三浦 智明
PCM SAC-CI study: Pressure effects and excited-state dynamics	量子化学計算	Università di Parma	Roberto Cammi
酸水素化物の合成と物性評価	無機材料	東京工業大学大学院総合理工学研究科	菅野 了次
高原子価金属 - フェノレート錯体の性質と反応性	ESR EMX 金属錯体	茨城大学理学部	島崎 優一
新規違法薬物 3,4-dichloromethylphenidate の合成	有機合成	科学警察研究所法科学第三部	辻川 健治
アライン等価体と一酸化炭素の共重合による新規芳香族ポリケトン	600MHz NMR	東京大学大学院工学系研究科	伊藤 慎庫
Theoretical study of the catalytic activity of iron-oxo porphyrin-like graphene (FeO-prop/graphene) for hydrocarbons transformation: A case study of cyclohexadiene	量子化学計算	Kasetsart University	Sarawoot Impeng
バッキーボウルユニットを導入した TTF 誘導体の物性研究	有機 FET	大阪大学大学院工学研究科	櫻井 英博
リチウムイオン導電体の高圧合成	無機材料	三重大学大学院工学研究科	松田 泰明
ナフタレン -1,8- ジイル基で両端を固定した環状蛍光色素の NMR 測定	800MHz NMR	京都大学大学院工学研究科	廣瀬 崇至
ジスルフィド結合が制御するタンパク質の溶液構造	X線溶液散乱	慶應義塾大学理工学部	古川 良明
絶縁体 - 金属相境界の電荷ゆらぎが示すテラヘルツ素励起の探索	有機 FET	東北大学理学研究科	伊藤 弘毅
高原子価金属 - フェノレート錯体の性質と反応性	金属錯体	茨城大学理学部	島崎 優一
Theoretical Study on Interaction of Adsorbates and Metal Oxide Catalyst Surface	量子化学計算	National Nanotechnology Center (NANOTEC)	Pussana Hirunsit
イオン性共役化合物の励起状態構造計算	量子化学計算	名古屋工業大学大学院	高木 幸治

(2) 施設利用

課題名	支援機器等	代表者	
魔法数金属クラスターの構造評価	TEM	東京理科大学理学部	根岸 雄一
新しい電子機能を併せ持つ超分子金属クラスターの開発	SQUID-MS7	九州大学先端物質化学研究所	姜 舜徹
メカノケミカル法を用いた新規機能性セルロースの創製およびその性能評価	ESR EMX	静岡県立大学大学院食品栄養環境科学研究科	坂口 真人
新規分子磁性体の合成, 構造解析および物性研究	SQUID-MS7 SQUID-XL7	名古屋市立大学大学院システム自然科学研究科	藤田 涉
金属ドーブ型 $BiFeO_3$ の磁化特性に関する研究	SQUID-XL7	山形大学大学院理工学研究科	有馬ボシール アハンマド
Co_2FeAl ナノ粒子, $FeNi$ ナノ細線, $CoMn$ 薄膜の磁気的性質の解明	SQUID-MS7 SQUID-XL7	岐阜大学工学部機能材料工学科	嶋 睦宏
有機ラジカル結晶の磁気ネットワーク制御と低温磁気構造の解明	ESR EMX	大阪府立大学大学院理学系研究科	細越 裕子
遷移金属添加 III 族窒化物の電子 - 格子相互作用研究とバンド構造の解明	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
ラマン分光法を用いた骨マトリックスの分子組成解析	ラマン	愛媛大学医学部附属病院先端医療創生センター	大嶋 佑介
新規ポリオキソ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 EMX	高知大学教育研究部総合科学系	上田 忠治

Pd-Ge- 希土類元素系準結晶及び近似結晶の磁気秩序と電気伝導特性	SQUID-MS7 SQUID-XL7	北海道大学大学院工学研究院	柏本 史郎
チオピラン環を有するドナー分子を用いた電荷移動錯体の振動分光学的研究	ラマン	京都大学低温物質科学研究センター	中野 義明
新規電子供与体を成分とする分子性半導体の物性と構造に関する研究	SQUID-XL7	愛媛大学大学院理工学研究科	白旗 崇
窒化硼素層間化合物の作製と物性	SQUID-MS7 SQUID-XL7 ラマン ESR E500	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	小林 本忠
フラビンを有する光誘起ラジカルペア・システムの構築	ESR E680	富山大学先端ライフサイエンス拠点	岡 芳美
ポリアセチレン誘導体の NMR による動的構造解析	920MHz NMR	北海道大学大学院工学研究院	平沖 敏文
機能性分子性物質のスピンダイナミクス研究	ESR E680 ESR E500 ESR EMX	新潟大学研究推進機構	古川 貢
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	X線光電子	自然科学研究機構核融合科学研究所	高山 定次
ナノクリスタル医薬品中のポリマーの違いが保存時に生じる凝集物増加に与える影響の評価	顕微ラマン	摂南大学薬学研究科	越智 幹記
フタロシアニン金属錯体およびランタン型金属錯体の磁気物性	SQUID-MS7 SQUID-XL7 ESR E500	島根大学大学院総合理工学研究科	池上 崇久
Eu:LiCaAlF ₆ シンチレータ薄膜の特性評価	低 SEM ラマン	名古屋工業大学	小野 晋吾
白金族触媒からの単層カーボンナノチューブ成長に関する研究	SEM ラマン TEM 低 SEM	名城大学理工学部	丸山 隆浩
塩橋型有機半導体の組成解析	920MHz NMR	物質材料研究機構	小林 由佳
ナノ制御による MgB ₂ 超伝導線材の高性能化	SQUID-MS7 SQUID-XL7	自然科学研究機構核融合科学研究所	菱沼 良光
超高磁場 NMR によるアミロイド ペプチドの重合開始機構の構造生物学的基盤の解明	800MHz NMR	国立長寿医療センター研究所	柳澤 勝彦
新規ナノ構造体の構造および物性評価	ラマン ESR E500	法政大学生命科学部	緒方 啓典
磁気光学薄膜の磁気的性質と結晶性の評価	SQUID-MS7 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
カーボン担持白金及び合金ナノクラスター触媒の調製時及び触媒反応前後の構造解析	TEM	名古屋大学大学院理学研究科	邨次 智
多段階電子励起による超広帯域光電変換を実現する III 族窒化物薄膜の構造と光電変換特性の相関解明	FIB TEM	京都工芸繊維大学大学院工芸科学 研究科	園田 早紀
透過電子顕微鏡 (TEM) 観察による微粒子の溶解過程および水質変質過程の解明	FIB 低 SEM	北海道大学低温科学研究所	木村 勇気
グラフェンを用いた新規三次元構造体の構築	ラマン TEM 低 SEM	名城大学理工学部	才田 隆広
ブラウンミライト - ペロブスカイト構造変化に伴う磁気特性 [NiFe] ヒドロゲナーゼの分光学的解析	SQUID-MS7 ESR E500	名古屋工業大学環境材料工学科 奈良先端科学技術大学院大学物 質創成科学研究科	籠宮 功 太 虎林
白金粒子 - セリアジルコニア酸化物固溶体の固体接触界面を持つ粒子分散担持基板の調製	SEM FIB 低 SEM	名古屋大学物質科学国際研究セ ンター	石黒 志
新規キラル磁性体の磁性 (交流磁化率)	SQUID-MS7 SQUID-XL7 ESR E500	広島大学大学院理学研究科	井上 克也
光導電性有機半導体の膜構造研究	ESR E680	新潟大学理学部	生駒 忠昭
フラボノイド化合物における耐熱性および耐光性向上の分子機構解析	ラマン	神戸大学農学研究科	木村 行宏
SorLA Vps10p ドメインとアミロイド ペプチドの NMR 相互作用解析	800MHz NMR	大阪大学 蛋白質研究所	高木 純一
NMR によるミトコンドリア膜間部のジスルフィド結合導入に関わる Tim40 及びその基質との相互作用解析	800MHz NMR	京都産業大学総合生命科学部	遠山 斗志也
スパッタ法を用いた単結晶イットリウム鉄ガーネットの形成	ESR E500	豊橋技術科学大学電気・電子情 報工学系	後藤 太一
多層膜希薄磁性半導体の磁化測定	SQUID	(独)産業技術総合研究所計測 フロンティア研究部門	安本 正人
異常な電子状態を有する鉄及び銅錯体の電子構造	ESR E500	名古屋工業大学大学院工学研究科	増田 秀樹

不純物置換された鉄系超伝導体の単結晶 X 線回折	SQUID-XL7 ESR EMX	東北大学原子分子材料科学高等 研究機構	平郡 諭
高周波 ESR による高純度有機化合物の g 値測定	ESR E500	(独)産業技術総合研究所計測 標準研究部門	松本 信洋
一次元ロジウム - セミキノート錯体の振動状態の解明	ラマン	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	満身 稔
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
BNC 薄膜のスピントロニクス	SQUID-XL7	静岡大学工学部	小林健吉郎
ENDOR による Fe-N- カーボン酸素還元触媒の活性点解析	ESR E500	東京工業大学大学院理工学研究科	黒木 重樹
固体 NMR による Fe-N- カーボン酸素還元触媒の活性点解析	600MHz NMR	東京工業大学大学院理工学研究科	黒木 重樹
様々な生物基材を用いたモデル糖タンパク質の安定同位体標識化法の検討	800MHz NMR	太陽日酸(株)	横山 順
生体関連物質をキラル源とする新規キラル磁性体の構造と磁性	SQUID-MS7 SQUID-XL7	城西大学理学部	秋田 素子
電子スピン共鳴法を用いたアモルファス窒化炭素薄膜の環境依存評価	ESR EMX	防衛大学校機能材料工学科	青野 祐美
糖鎖 dendrimer の合成と機能性評価	920MHz NMR	北見工業大学工学部	韓 淑琴
新規なナノダイヤモンドの合成と電子顕微鏡によるキャラクタリゼーション	TEM	名城大学理工学部	小澤 理樹
次亜塩素酸付加金属錯体の電子構造	ESR E500	奈良女子大学理学部	藤井 浩
鶏糞由来の合成リン酸カルシウムの光誘起活性と熱触媒活性の測定	ESR EMX	千葉工業大学工学部	南澤 優寛
白金 - 鉄多核錯体の合成とスピン状態の追跡	SQUID	岐阜大学工学部	植村 一広
地質有機物の変成度に対応する常磁性緩和時間の変化	ESR E680	大阪大学大学院理学研究科	山中 千博
多周波 EPR 法を用いた光合成酸素発生系高酸化状態の解析	ESR E680	名古屋大学理学研究科	三野 広幸
X 線 CT-XAFS 法の技術開発に関連する燃料電池膜電極接合体の断面 構造観察	TEM	名古屋大学物質科学国際研究セ ンター	松井 公佑
Oxidation of Zn in hydrogen peroxide solution	FIB	名古屋工業大学環境材料工学科	日原 岳彦
多機能性鉄ナノ粒子を用いた新規がん治療法の開発	TEM	名古屋市立大学大学院薬学研究科	田上 辰秋
分子性ドナーアクセプタ型電荷移動錯体の ESR 測定	ESR E500	学習院大学理学部	開 康一
焼結磁石表面の光電子分光計測ならびに仕事関数の決定	機能性材料 バンド構造	(独)産業技術総合研究所計測 フロンティア研究部門	田中 真人
アミド基を有する新規二トロキシドラジカルの合成、構造、磁性	SQUID	城西大学理学部	秋田 素子
アークプラズマ法によって調製した高分散担持金属触媒の XPS 測定	X 線光電子	熊本大学大学院自然科学研究科	日隈 聡士
有機系太陽電池の電極ナノ構造の電顕観測および電力変換効率の改善	TEM	城西大学理学部	見附孝一郎
有機半導体素子の電子スピン物性評価	ESR E680	大阪市立大学理学部	鐘本 勝一
Fe-Ni のイオン照射誘起強磁性の M-H loop 測定	SQUID	愛媛大学理工学研究科	松下 正史
1,2,3- トリアゾール基含有シッフ塩基配位子を用いた金属錯体の結晶 構造と磁気的性質の解明	SQUID	岐阜大学教育学部	萩原 宏明
シリコンクラスレートの極低温での ESR	ESR E500	岐阜大学工学部	山家 光男
Work function measurement on $(\text{Sr}_{1-x}\text{La})_3\text{Ir}_2\text{O}_7$	機能性材料 バンド構造	Boston College	Ruihua He
細胞核内における高分解能 DNA 分布観察	UVSOR(STXM)	東海大学工学部	伊藤 敦
放射性物質回収用吸着剤の性能向上に向けた吸着剤表面状態の評価	UVSOR(STXM)	日本原子力研究開発機構次世代 原子力システム研究開発部門	佐野 雄一
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	UVSOR(STXM)	名古屋工業大学大学院工学研究科	川崎 晋司
はやぶさ 2 汚染試料の XNAES による解析と、その汚染源の特定	UVSOR(STXM)	(独)宇宙航空研究開発機構	上根 真之
マウス精巢ライディッヒ細胞の炭素吸収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
BL4U 宇宙化学研究拠点構築を目指した予備分析 3 : 隕石有機物の XANES と FIB ビームダメージ評価	UVSOR(STXM)	大阪大学大学院理学研究科	薮田ひかる
BL4U 分光光学系のカーボンコンタミネーションの除去	UVSOR(STXM)	Tamkang University	Wang Yu-Fu
In-situ 湿度環境試料セルの開発	UVSOR(STXM)	トヨタ自動車(株)	雨宮 一樹
In situ flow electrochemical STXM of titanium dioxide materials	UVSOR(STXM)	McMaster University	Adam Hitchcock
Studies of electronic structures and chemical composition in well aligned n- and p-type combined GaN nanowires and reduced graphene oxides	UVSOR(STXM)	Tamkang University, Taiwan	Way-Faung Pong
Studies on Drug Uptake into Cells and Skin	UVSOR(STXM)	Freie University Berlin	Eckart Rühl
Study of the Enhanced Crystallinity of Polymer/Fullerene Bulk Heterojunction by Solvent Additives in Organic Photovoltaic	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)	Australian Centre for Research on Separation Science (ACROSS), University of Tasmania	Ruben Dario Arrua
BL4U 宇宙化学研究拠点構築を目指した予備分析 4 : 隕石有機物の XANES と FIB ビームダメージ評価	UVSOR(STXM)	大阪大学大学院理学研究科	薮田ひかる
アポトシス研究のための投影型 X 線顕微鏡システムの開発	UVSOR(STXM)	東海大学工学部	伊藤 敦

細胞核の形態および機能の STXM による高分解能観察	UVSOR(STXM)	東海大学工学部	伊藤 敦
走査型透過軟 X 線顕微鏡による放射線耐性 <i>Deinococcus</i> 属細菌の観察	UVSOR(STXM)	関西医科大学医学部	竹本 邦子
高湿度環境下でのその場観察による燃料電池の高効率 / 劣化プロセスの解明	UVSOR(STXM)	分子科学研究所	大東 琢治
In-situ レーザー加熱洗浄による Carbon Nano Tube の分析法の開発	UVSOR(STXM)	分子科学研究所	大東 琢治
Electronic structures of TiO ₂ nanomaterials studies by using STXM	UVSOR(STXM)	Tamkang University, Taiwan	Way-Faung Pong
Studies on Drug Uptake into Cells and Skin	UVSOR(STXM)	Freie University Berlin	Eckart Rühl
Nickel Oxide/CH ₃ NH ₃ PbI ₃ Perovskite Heterojunction in Organic Photovoltaics	UVSOR(STXM)	National Synchrotron Radiation Research Center (NSRRC)	Yao-Jane Hsu
Skin Penetration Study of Drug Carriers Using Soft X-Ray spectromicroscopy	UVSOR(STXM)	Chulalongkorn University	Supason Wanichwechar ungruang
Comprehensive characterization of monolithic polymers by scanning transmission X-ray microscopy (STXM)	UVSOR(STXM)	Australian Centre for Research on Separation Science (ACROSS), University of Tasmania	Ruben Dario Arrua
In situ flow electrochemical STXM of titanium dioxide materials	UVSOR(STXM)	McMaster University	Adam P. Hitchcock
はやぶさ 2 汚染試料の STXM-NEXAFS による物性評価と、その汚染源の特定	UVSOR(STXM)	(独)宇宙航空研究開発機構	上根 真之
XMCD による [CoNi] 多層膜の磁気異方性係数の測定	UVSOR(XMCD)	大阪電気通信大学工学部	安江 常夫
XMCD による鉄単原子ワイヤの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
半導体表面超構造上に配列した金属含有フタロシアン分子の磁気特性に関する研究	UVSOR(XMCD)	物質・材料研究機構国際ナノアーキテクトニクス研究拠点	内橋 隆
XMCD を用いた遷移金属窒化物薄膜の磁気異方性に関する研究	UVSOR(XMCD)	東京大学大学院理学系研究科	岡林 潤
XMCD を用いた磁性超薄膜における軌道磁気モーメントと磁気異方性の相関の解明	UVSOR(XMCD)	東京大学大学院理学系研究科	岡林 潤
強磁性窒化鉄原子層の構造と磁性	UVSOR(XMCD)	東京大学物性研究所	小森 文夫
安定単層酸化鉄の XMCD による研究	UVSOR(XMCD)	九州大学大学院総合理工学研究院	中川 剛志
強磁性薄膜表面に成長させたニッケロセン単層膜の磁気特性	UVSOR(XMCD)	名古屋大学大学院理学研究科	江口敬太郎
Nickel L-Edge X-ray magnetic circular dichroism of bioinorganic relevant complexes with different oxidation and spin states	UVSOR(XMCD)	University of California- Davis	Pauline Nancy Serrano
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
Fabrication of CPW resonator on a pressure anvil	マイクロストラクチャー	Universitat Stuttgart	飯塚 拓也
空間の異方性がもたらす異常ブラウン運動の定量的測定	マイクロストラクチャー	東京理科大学理学部	住野 豊
レーザー溶接継ぎ手の形状測定および品質評価	マイクロストラクチャー	(資)新美利一鉄工所	新美 広治
ポリカーボネート樹脂の新規用途開発の研究	マイクロストラクチャー	三信建材工業(株)開発室	石田 晃啓
高出力パルスレーザー用金属ミラーの開発	マイクロストラクチャー	名古屋大学全学技術センター	松下 幸司
分子性ディラック電子系デバイスの表面評価	マイクロストラクチャー	東邦大学理学部	田嶋 尚也
電気二重層トランジスタによる分子性導体の電子相制御	マイクロストラクチャー	早稲田大学先進理工学部	武延 大志
細胞伸展チャンパーの作製	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	富田 拓郎
マウス受精卵ホルダーの作製	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	宮成 悠介

(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 26 年度は UVSOR(STXM) 5 件、SEM 1 件、マイクロストラクチャー 1 件、太陽電池 1 件が採択された。業種別内訳は大企業 9 件、中小企業 2 件であった。

表3 2014年度(平成26年度)利用件数一覧(平成26年4月～9月)後期採択件数も併せて示した

	協力研究	施設利用	非公開利用
前期採択件数	32	77	-
実施件数	26	74	11
実施日数	604	697	28
後期採択件数	30	76	-

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。平成27年度が最終年度となる。

(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。また、第2部会の重点課題の見直しも行われ、平成26年度から重点課題が「密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現」に変更となり、従来の特別支援課題「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」の発展したものを統合する形になった。

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26年度の分野振興活動の報告を行う。

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）
	次世代先端デバイス科学 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現（一部分子科学担当） 代表者：押山 淳（東大院工）、分子科学課題担当：信定 克幸（分子研）
第3部会	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）
	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）、研究担当：山下 晃一（東大院工）他 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3部会	拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明 代表者：岡本 祐幸（名大院理）
	ポリモルフから生起する分子集団機能 代表者：松林 伸幸（京大化研）
	ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス 代表者：中井 浩巳（早大先進理工）
	機能性分子設計-光機能分子と非線形外場応答分子の光物性 代表者：江原 正博（分子研）
第4部会	太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算 代表者：山下 晃一（東大院工）
	バイオマス利用のための酵素反応解析 代表者：吉田 紀生（九大高理）

図2 TCCIで支援する特別支援課題

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。

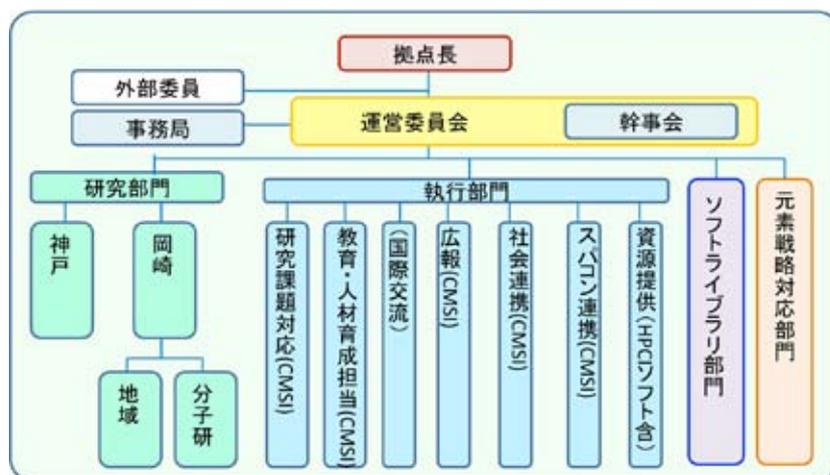


図3 計算分子科学研究拠点 (TCCI) 体制



*:教員
()内は員数を示す。

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、斉藤、江原、榑、佐藤、田中、松本
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、榑、岡崎
外部委員	(未定)
事務局	榑、岡崎、石谷
人事検討委員会	○高塚、榑、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	○太田、高塚、榑、岡崎、江原、佐藤
スパコン連携	○斉藤
資源提供	○江原
ソフトウェアライブラリ部門	○岡崎、北浦、奥村、石村

図5 TCCI 委員会など

(2) 平成 26 年度の活動について

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は 2 日間の開催とし、海外研究者 3 名、国内研究者 9 名の招待講演とともにポスター発表も行った。講演者・参加者の間で活発な議論が行われた。

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、今年度も開催され、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18回分子シミュレーション夏の学校	2014年9月1日(月)~3日(水)	大原温泉 湯元のお宿 民宿大原山荘(京都府)
	講師3名、参加者約30名	
TCCI ウィンターカレッジ(分子シミュレーション)	2014年10月14日(火)~17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88名(内、民間企業6名)	
第4回超並列化技術国際ワークショップ	2014年11月23日(日)、24日(月)	東京大学工学部6号館64講義室(東京都文京区)
	講演者12名、参加者26名(内、民間企業1名)	
TCCI ウィンターカレッジ(量子化学)	2014年12月15日(月)、16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、世話人7名、参加者37名(内、民間企業3名)	

図 6 人材育成・教育

人的ネットワークの形成（研究会，シンポジウムの開催）

図 7 に示す研究会・シンポジウムを開催した。

行事名	開催日程	場所
ポスト京に向けたTCCIインフォーマル研究会	2014年5月21日(水)	名古屋大学(東山キャンパス)ES総合館 ESホール(名古屋市)
	参加者数: 81名(内、民間企業7名)	
第2回TCCIインフォーマルミーティング	2014年9月27日(土)	名古屋大学(東山キャンパス)ES総合館 ES会議室(名古屋市)
	参加者数: 43名(内、民間企業3名)	
TCCI 第5回研究会(実験化学との交流シンポジウム 兼)	2014年10月17日(金)、18日(土)	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: 69名(内、民間企業3名)	
第3回TCCIインフォーマルミーティング	2014年10月12日(日)	イオンコンパス名古屋駅前会議室 5F ROOM A (名古屋市)
	参加者数: 24名(内、民間企業1名)	
TCCI 第4回産学連携シンポジウム/産協第31回産協協スパコンセミナー	2015年1月23日(金)午後	東大弥生講堂一条ホール (東京都文京区)
	参加者数: 85名(内、民間企業48名)	

図 7 研究会・シンポジウム

TCCI 第 5 回研究会：TCCI の全体シンポジウムである第 5 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、予算削減などの影響のため、「実験化学との交流シンポジウム」も兼ねて開催した。このため、実験研究者 5 名、ポスト「京」開発リーダー 1 名の招待講演を行い、TCCI からの報告 9 件を行った。実験サイドが

ら計算科学への期待・要望等も含めて、情報交換、議論が行われ、興味深く有意義なシンポジウムとなった。来年も、この研究会（全体シンポジウム）の開催を予定している。

TCCI 第4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、「触媒研究開発における理論・計算化学の貢献について」をテーマとし、民間企業の団体であるスーパーコンピューティング技術産業応用協議会（産応協）と、共同開催することになった。また、京大触媒・電池元素戦略拠点（ESICB）も協賛を頂き、ESICBからの講演を中心に、三井化学からは民間企業からの事例紹介のご講演が行われた。産応協との共同開催としたこと、民間企業の関心の高いテーマであったため、従来以上の多くの民間企業の方々にご参加頂いたことは収穫であった。

「京」からポスト「京」に向けたインフォーマルミーティング：平成25年度まで、文部科学省が行ってきた調査研究を基に、次のスーパーコンピュータとしてのポスト「京」プロジェクトが開始された。これに対応してポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題の検討に向けて、インフォーマルミーティング等を開催し、分子科学コミュニティの意見の集約を図った。

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。

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年度補正予算により実現し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向け環境を維持し、民間企業のサポートを行った。また、開発中であった大規模並列量子化学計算ソフト「SMASH」が9月に公開された。

アウトリーチ活動について

理研 AICS 及び CMSI からの要請もあり、以下の展示会などにおいて、TCCI 関係者が作成した「京コンピュータを用いた小児マヒウイルスの全原子分子動力学シミュレーション」(3D CG) 及びメタンハイドレートに関する「これからシミュレーションで分子の世界をのぞきにいきましょう」(2D CG) をその解説ポスターとともに展示し、小学生を含む一般国民に対して成果として紹介した。

・「未来をひらくスーパーコンピュータ～「京」からその先へ限りなき挑戦～」

理研 AICS ほか主催，8月23日，24日，科学技術館，東京

・2014年計算科学研究機構一般公開，10月25日，理研 AICS

・サイエンスカフェ「3Dとコンピュータと分子世界」，12月5日，6日，九州工大

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(H26年9月1日公開)	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

分子科学における基盤ソフトウェアとして、上記のソフトを用意しています。ダウンロード先のご紹介の他、TCCIマシン等で試用して頂くことが可能です。但し、ライセンスは、ソフト毎に異なりますので、ご確認をお願い致します。

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マシンの利用については、RCCS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

本プロジェクトも後半に入り、京を利用した成果が確実に出て来ている。今後も、その成果を、分り易く直接またはマスメディアなどを通して国民に紹介していくことが課題である。また、次のポスト「京」に向けて成果の引き継ぎと、分子科学分野に必要な技術・人材の養成を継続していくことも重要である。

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少しでも近づくことができれば幸甚である。

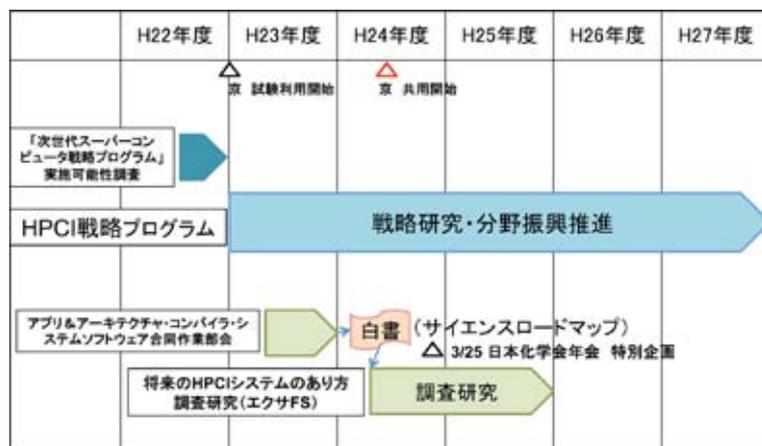


図10 TCCI 研究計画

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7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んでいる。

平成 26 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ソグラフィ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、高速回転する分子の動画を世界で初めて撮影することに成功した。

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、2 μm 帯で世界最短のパルス(45 fs)を発生するファイバーレーザー発振器の開発に成功 [*Opt. Express* **22**, 12461 (2014)]

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、世界最大の 12mm 厚にいたる大口径擬似位相整合素子開発に成功した。

時空間分解顕微分光技術の開発では、世界で初めてキラルでないナノ構造体が局所的に光学活性であることを実証した [*J. Phys. Chem. C* **118**, 22229 (2014)]

(2) 人材育成・施設供用

人材育成では、大森教授が仏ストラスブール大学客員教授として「光と物質の相互作用」に関する講義を行うとともに、米テンプル大・英グラスゴー大学・仏 Chimie ParisTech からの短期留学生を分子研に受け入れることによって、日本の光科学のレベルを海外の若手に周知し、光科学を支える国際的な人材育成に貢献した。また、大森教授・藤准教授による総研大・福井大学における光科学に関する集中講義や、上述の光源要素技術開発業務への東工大・慶応大・福井大学の大学院生の参加を通じて、我が国の光科学の将来を担う人材育成に貢献した。また、各々の PI が総研大生の教育や研究指導を行った。

施設共用では、超高精度光干渉計を東工大・奈良先端大・ストラスブール大との協力研究の資源として提供し、多

体系の量子コヒーレンスを観測・制御する新しい光科学技術の推進と東西拠点の連携に貢献した。同様に、走査型近接場光学顕微鏡を慶応大との協力研究の資源として提供し、ナノスケールでの局在電場増強の解明と東西拠点の連携に貢献した。また、超高輝度マイクロチップレーザーを仏 CNRS・工学院大などとの協力研究の資源として提供し、従来利用できなかったパルスギャップ光源を開発し先端的な光科学の推進に貢献した。

さらに、供用研究の推進に寄与する各種研究会を開催した。

5-8 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 (文部科学省)

平成 24 年度に開始した本プロジェクトは、今年度で 3 年目を迎え、研究活動も本格化し、顕著な成果も出始めている。触媒・電池材料領域は京都大学に研究拠点を置いており、分子科学研究所は電子論グループの連携機関として参画している。本プロジェクトのミッションは、汎用元素を利用した高性能な触媒と二次電池の開発であり、具体的には、自動車排ガス浄化触媒とナトリウムイオン電池の開発である。

本研究拠点の行事である「公開シンポジウム」は年 2 回開催が定例化され、本年も 3 月 19 日に第 4 回を東大本郷キャンパスにて、10 月 14 日に第 5 回を京大桂キャンパスにて開催した。公開シンポジウムでは 3 件の招待講演に加えて、触媒、電池、電子論各グループからの研究報告が行われている。また、本プロジェクトで活動している博士研究員の講演を中心にした「次世代 ESICB セミナー」も本年 10 月までに合計 4 回、開催した。内部的な研究交流会として、年 2 回のペースで「触媒・電子論合同検討会」および「電池・電子論合同検討会」を開催し、実験と理論研究の交流を促進しながら、研究開発を推進している。これらの合同検討会では、実験・理論双方から、研究の進展の報告が行われ、ポスター発表による議論がなされている。またこれ以外にも「電子論検討会」や「電子論分科会」を開催しており、理論研究独自の的方法論開発や触媒・電池研究への応用に関する共通の話題について議論を行っている。昨年度から ESICB コロキウムとして、この分野における内外の著名な研究者を招へいした講演会も随時開催しており、現在で 8 回目を迎えた。

5-9 分子科学国際共同研究拠点の形成

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、分子研独自のプログラムを、自然科学研究機構の国際学術拠点形成事業や日本学術振興会、日本学生支援機構の各種事業の支援も受けながら、国際連携を強化している。

5-9-1 分子科学アジアコア多国間国際共同事業

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、互いに対等な協働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」（分子科学アジアコア多国間国際共同事業）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の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。

平成26年度事業として平成27年1月中旬に総研大アジア冬の学校との連携のもと上記本事業ホスト国に加え、ひるくアジアからの参加者を迎えて『The Winter School of Sokendai/Asian CORE Program “Research and Its Challenges in Molecular Science: Fundamentals and State-of-the-Art”』（<http://www.ims.ac.jp/aws14/index.html>）を開催した。

5-9-2 東アジア若手研究者交流プログラム（EXODASS プログラム）

(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9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2013年からは、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、マヒドン大学（ともにタイ）およびマラヤ大学（マレーシア）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、年々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ている。

(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。

(3) 実施状況

第4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、学術交流協定締結校における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。今年度より、滞在期間の研究成果がより実りのあるものとするため、標準的な受入期間を6ヶ月とし、より厳選した参加者を招へいした。

今回は3カ国、23名の応募が集まった。書類審査を行った後、直接面接試験を行い、最終的に、2カ国7名を採択した。内訳はタイ5名、マレーシア2名である。またキャリアの内訳は、教員1名、博士課程学生6名と、大学院生中心の構成となった。

招聘は、2014年10月～2015年3月にかけて実施され、各研究者に応じて、1～6ヶ月の期間での研究プログラムが組まれた。また2015年1月に、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。

5-9-3 分子研国際インターンシッププログラム (IMS-IIP 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を実施してきたが、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 年度は 31 名、平成 26 年度の実績は表にあるように 39 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たが、今年度は JASSO 海外留学支援制度 (短期受入れ) を利用し、6 ヶ月未満の受入れを可能とした。現在は EXODASS 事業以外すべて分子研国際共同の予算を運用しているが、原則、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	オーストラリア	タイ	韓国	台湾	インド	マレーシア	カナダ	合計
国際交流提携先からの受入	6	2		8			1	2		19
その他共同研究による受入		3	1	1	3	4			1	13
EXODASS				5				2		7
合計	6	5	1	14	3	4	1	4	1	39

2014.4-2015.1

5-9-4 アジア学術セミナー (Asian Academic Seminar)

アジア学術セミナーは、アジア諸国の若手研究者の研究活動強化を目的とした日本学術振興会とインド科学技術局 (Department of Science and Technology) により開催されるプログラムである。日印の著名な研究者に加え、欧米の研究者も講師に迎え、アジアの若手研究者に関連分野の最新の研究を紹介することを目的に、第一回のセミナーは、“Molecular Science and Molecular Materials” をテーマとし 1994 年 11 月 22 日 - 12 月 2 日にバンガロール (Jawaharlal Nehru Center for Advanced Science Research) で開催された。その後、科学の他の分野に関するセミナーが開催され、2007 年 2 月 23 日 - 28 日に “Molecular and Supramolecular Material with Designed Functions” をテーマとし、分子科学分野に関する第二回セミナーがブネで開催された。

今回のセミナーでは、分光、理論、物質科学を中心に据え “Structure, Dynamics, and Functionality of Molecules and Materials” をテーマとした分子科学分野における第三回セミナーが 2015 年 3 月 5 日 - 10 日にカルカッタ Indian Association Cultivative Science および Indian Institute of Science Education and Research で開催された (日本側組織委員は、大峯 (分子研)、檀 (東工大)、岩澤 (電通大)、山本 (分子研) および斉藤 (分子研)。インド側は、R. N. Mukherjee 教授 (IISER))。セミナーでは、インドからの 18 名の講師および日本、韓国、米国、フランスからの 15 名の講師による講演が行われ、インド、日本さらにアジア各国から募集した学生や博士研究員を中心とした若手研究者によるポスター発表も行われた。

5-9-5 その他の実施内容

分子科学研究所では、国際共同研究の拠点としての役割を果たすため、国際研究会等や、著名な研究者を海外から招きオープンセミナーを開催している。また、研究所内の教員による国際共同研究の提案を受け、所内委員による審査を経て 海外の教授、准教授クラスの研究者の招聘、若手外国研究者の招聘、などを伴う国際共同研究が推進されている。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、見直し後は、平成 25 年度 35 件と推移しており、平成 25 年 10 月から平成 26 年 9 月までの 1 年間は 31 件で、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。

また、総研大大学院教育では、国外の最先端研究室等への国際インターンシップを制度化しており（先端研究指向コース）、大学院生においても国際的な研究活動ができる環境である。

岡崎コンファレンス	1 件（2014 年度）
ミニ国際シンポジウム	1 件（2014 年度）
アジア連携分子研研究会	1 件（2014 年度）
海外からの研究者によるオープンセミナー	24 件（2014 年度）
	（内 IMS ミニシンポジウム 1 件）

総研大生国際インターンシップ実績 3 件

所属	インターンシップ先（国名）	日程
構造分子科学専攻 博士課程 3 年	グラスゴー大学（イギリス）	2014 年 9 月 29 日 -12 月 19 日(81 日間)
構造分子科学専攻 博士課程 4 年	ペンシルバニア大学（アメリカ）	2015 年 1 月 5 日 -3 月 30 日（84 日間）
機能分子科学専攻 博士課程 5 年	スイス連邦工科大学チューリッヒ校 （スイス）	2014 年 8 月 25 日 -11 月 13 日(80 日間)

国際共同研究 31 件（2013.10-2014.9 実施状況）

代表者	研究課題名	相手国
斉藤 真司	過冷却水における多重動的転移	インド
江原 正博	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	イタリア
江原 正博	電子移動励起の化学指標に関する理論研究	フランス
江原 正博	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	タイ
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	大規模共役分子系の共鳴状態に関する理論研究：CAP-SAC-CI 法の開発	アメリカ
江原 正博	クマリンを基盤とするドナー・アクセプター型色素増感太陽電池の研究	タイ
江原 正博	Metal-Porphyrin: A Potential Catalyst for N ₂ O Direct Decomposition by Theoretical Reaction Mechanism Investigation	中国
岡本 裕巳	ハイブリッド金属ナノロッドのプラズモン特性	韓国
小杉 信博	バンドギャップ工学のための新奇ハイブリッド 2 次元ナノシートの電子構造マッピング	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	台湾
小杉 信博	走査型透過 X 線顕微鏡（STXM）によるモノリシックポリマーの評価	オーストラリア

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の巨大ラッシュバ分裂	韓国
小杉 信博	液体のX線分光学	ドイツ
小杉 信博	電気化学のX線分光学	ドイツ
小杉 信博	Studies of Drug Uptake into Cells and Skin	ドイツ
小杉 信博	Skin Penetration Study of Drug Carriers Using Soft X-Ray spectromicroscopy	タイ
解良 聡	Epitaxial Organic Thin Films of Large Aromatic Hydrocarbons Structure and Physical Properties	ドイツ
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	スウェーデン， アメリカ， フランス
繁政 英治	高分解能電子分光実験	フランス
平等 拓範	固体レーザーの開発	台湾，中国， ノルウェー
横山 利彦	新奇ハイブリッド2次元ナノシートの磁気特性	台湾
横山 利彦	Electronic and Magnetic Study of $(R_xT_{1-x})BO_3$ Oxides	トルコ
横山 利彦	グラフェン，窒化ホウ素のX線磁気円二色性	台湾
西村 勝之	固体NMRを用いた合成高分子の構造解析	タイ
加藤 晃一	マルチドメインタンパク質の構造ダイナミクスの理論研究	韓国
鹿野 豊	弱測定理論の応用	イギリス， スウェーデン， 中国
山本 浩史	Fabrication of CPW Resonator on a Pressure Anvil	ドイツ
櫻井 英博	フッ素化バッキーボウルの合成と機能	ドイツ
櫻井 英博	高機能性ナノ触媒の開発と環境調和型プロセスへの展開	タイ

5-10 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 国際共同研究支援、国内共同研究支援、広報、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、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 として、の研究マネジメント体制を考えることになった。所長は、戦略室の支援によって、より広い見地からの研究力強化の戦略を立てる。

平成 26 年度は今年の活動に引き続き、以下の活動を行った。

- ・ 研究所の研究力強化のための評価・提言を戴いた。

国内外運営顧問 Thomas V. O'Halloran 教授 2014 年 12 月 16 日、17 日

Ian A. Walmsley 教授 2015 年 2 月 23 日 -25 日

研究顧問 Graham R. Fleming 教授 2014 年 10 月 27 日 -29 日

- ・ 国際インターンシップ生の受入制度を見直し、半年間の受入を強化した。
- ・ 国内共同利用の窓口を一元化するため、機器センター、ナノテクノロジープラットフォーム、大学連携研究設備ネットワークの統合を図った。
- ・ 研究所ホームページ更新、運用を開始した。
- ・ 共同利用の案内パンフレット作成し、配布を開始した。
- ・ 男女共同参画事業として、女性研究者枠の公募を行った。
- ・ アジア連携強化のため、MOU 提携校などの視察を行った。

（2014 年 7 月 シンガポール：NTU, JST シンガポールオフィス

バンコク：マヒドン大学・チュラロンコーン大学・ナンヤン大学、JSPS バンコクオフィス

クアラルンプール：マラヤ大学

2015 年 1 月 バンコク：チュラロンコーン大学）

- ・ 分子科学研究所所長招聘会議「未来を拓く学術のあり方：教育と研究」（2014 年 8 月 28 日）を開催し、学術のあり方について検討した。