

「分子研リポート 2014」 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.....	23
2-6 財 政	24
2-6-1 現員.....	24
2-6-2 財政.....	24
2-7 岡崎共通施設	27
2-7-1 岡崎情報図書館.....	27
2-7-2 岡崎コンファレンスセンター.....	27
2-7-3 岡崎共同利用研究者宿泊施設.....	27
2-7-4 職員会館.....	27
2-8 その他.....	28
2-8-1 知的財産.....	28
3. 共同研究と大学院教育	29
3-1 研究領域	30
3-2 研究施設	36
3-3 共同利用研究	38
3-3-1 共同利用研究の概要.....	38
3-3-2 2014 年度の実施状況.....	38
3-3-3 共同利用研究実施件数一覧.....	53
3-4 国際交流と国際共同研究	55
3-4-1 外国人客員部門等及び国際交流.....	55
3-4-2 岡崎コンファレンス.....	59
3-4-3 日韓共同研究.....	63

3-5 大学院教育.....	64
3-5-1 特別共同利用研究員.....	64
3-5-2 総合研究大学院大学二専攻.....	65
3-5-3 オープンキャンパス・分子研シンポジウム.....	69
3-5-4 夏の体験入学.....	69
3-5-5 総研大アジア冬の学校.....	71
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.....	72
3-5-7 統合生命科学教育プログラム.....	73
 4. 研究支援等	 75
4-1 技術課.....	76
4-1-1 技術研究会.....	76
4-1-2 技術研修.....	78
4-1-3 人事.....	79
4-1-4 受賞.....	80
4-2 安全衛生管理室	81
4-3 社会との交流	82
4-3-1 自然科学研究機構シンポジウム.....	82
4-3-2 大学共同利用機関シンポジウム.....	83
4-3-3 分子科学フォーラム.....	83
4-3-4 分子研コロキウム.....	84
4-3-5 岡崎市民大学講座.....	85
4-3-6 その他.....	85
4-4 理科教育への協力.....	87
4-4-1 スーパーサイエンスハイスクール.....	87
4-4-2 あいち科学技術教育推進協議会.....	87
4-4-3 国研セミナー.....	88
4-4-4 小中学校での出前授業.....	89
4-4-5 職場体験学習.....	90
4-4-6 その他.....	91
4-5 一般公開	92
4-6 見学者受け入れ	93
 5. 各種事業	 95
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）.....	97
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）.....	98
5-3 イメージング・サイエンス（自然科学研究機構）	100
5-3-1 経緯と現状.....	100
5-3-2 実施された主な行事.....	101
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）	102
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）.....	103

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).....	112
5-6-1 はじめに.....	112
5-6-2 TCCI の活動について	113
5-6-3 今後の課題と取組みについて.....	117
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).....	118
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)....	120
5-9 分子科学国際共同研究拠点の形成.....	121
5-9-1 分子科学アジアコア多国間国際共同事業.....	121
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)	122
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)	123
5-9-4 アジア学術セミナー (Asian Academic Seminar)	123
5-9-5 その他の実施内容.....	124
5-10 研究大学強化促進事業 (文部科学省)	126
6. 研究領域の現状	127
6-1 論文発表状況	127
6-2 理論・計算分子科学研究領域.....	128
理論分子科学第一研究部門	128
計算分子科学研究部門	138
6-3 光分子科学研究領域	149
光分子科学第一研究部門	149
光分子科学第二研究部門	157
光分子科学第三研究部門	161
光源加速器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)	171
電子ビーム制御研究部門 (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)	177
光化学測定器開発研究部門 (極端紫外光研究施設)	179
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)	182
6-4 物質分子科学研究領域.....	196
電子構造研究部門	196
電子物性研究部門	200
分子機能研究部門	203
安全衛生管理室	213
6-5 生命・錯体分子科学研究領域.....	217
生体分子機能研究部門	217
生体分子情報研究部門	235
錯体触媒研究部門	239
錯体物性研究部門	246
6-6 協奏分子システム研究センター	251
階層分子システム解析研究部門	251
機能分子システム創成研究部門	265

7. 点検評価と課題	279
7-1 外国人運営顧問による点検評価	280
7-1-1 Ian A. Walmsley 外国人運営顧問	280
7-1-2 Thomas V. O'Halloran 外国人運営顧問	287
7-2 研究顧問による点検評価	295
7-2-1 Graham R. Fleming 研究顧問	295
7-3 国際諮問委員による点検評価	298
7-3-1 R. Stephen Berry 国際諮問委員	298
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 27 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あり今年創立40周年を迎えます。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、2014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。

2014年10月に大島教授、また2015年3月末に村橋教授が東京工業大学に転出しました。これらの2名の教授は分子科学研究所の研究の根幹を担ってこられ、特に大島教授は広報担当また機器センター長として分子研の運営に関わってきました。改めて両氏の貢献に感謝したいと思います。2014年度始めには5名の新任のPIが入所しました。飯野氏が東京大学から岡崎統合バイオサイエンスセンターの教授として、また、解良氏が千葉大学から光分子科学研究領域の教授に就任し、さらに、古賀、田中、榎山3氏がそれぞれ、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の准教授として着任しました。

2014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2014年10月下旬に3日間にわたり、新任PIの4名及び理論研究者3名の研究について、また岡崎統合バイオサイエンスセンター、協奏分子システム研究センター（CIMoS）の現状、次期「メゾスコピック計測・解析センター」計画の内容などについてヒヤリングをおこない、また研究所間の新たなプロジェクトの立ち上げ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、

2015年2月に3日間にわたり、分子研の運営状況、理論・計算分子科学、光分子科学研究領域、協奏分子システム研究センター、生命・錯体分子科学研究領域などの主として新たなPIの研究内容、また極端紫外光研究施設、岡崎統合バイオサイエンスセンターの現状について重点的にヒヤリングしていただきました。さらに生理学研究所の研究室を訪問し、分子科学との共同研究の現状について視察していただきました。さらに11月中旬にはシカゴ大学のBerry教授によって幾つかの研究グループのヒヤリングを行っていただきました。各グループの研究内容の評価とともに、研究所の全体的運営に関する貴重な提言も戴きました。それらの研究評価、提言などは本レ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。

2015年4月
自然科学研究機構
分子科学研究所 所長
大峯 巖

2. 分子科学研究所の概要

2-1 研究所の目的

分子科学研究所は、物質の基礎である分子の構造とその機能に関する実験的研究並びに理論的研究を行うとともに、化学と物理学の境界から生命科学にまでわたる分子科学の研究を推進するための中核として、広く研究者の共同利用に供することを目的として設立された大学共同利用機関である。物質観・自然観の基礎を培う研究機関として、広く物質科学の諸分野に共通の知識と方法論を提供することを意図している。

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

2-2 沿革

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

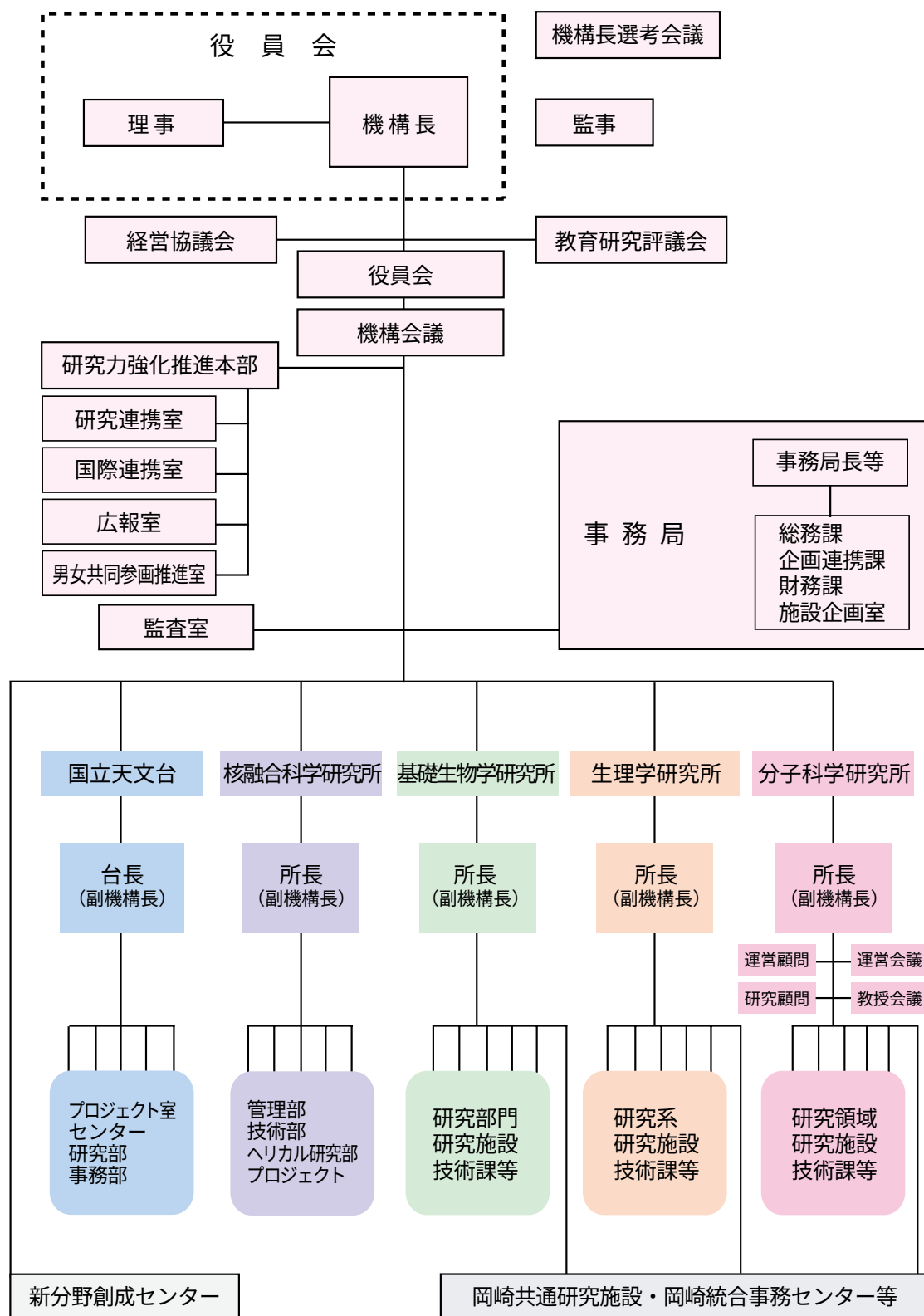
- 1965. 12.13 日本学術会議は、「分子科学研究所」（仮称）の設置を内閣総理大臣あてに勧告した。
- 1973. 10.31 学術審議会は、「分子科学研究所」（仮称）を緊急に設立することが適当である旨、文部大臣に報告した。
- 1974. 4.11 文部大臣裁定により、東京大学物性研究所に分子科学研究所創設準備室（室長：井口洋夫前東京大学物性研究所教授、定員 3 名）及び分子科学研究所創設準備会議（座長：山下次郎前東京大学物性研究所長、学識経験者 35 人により構成）が設置された。
- 1974. 7. 6 分子科学研究所創設準備会議において、研究所の設置場所を岡崎市の現敷地と決定した。
- 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、生理学研究所）が設置されたことに伴い、管理部を改組して分子科学研究所管理局とし、生物科学総合研究機構の事務を併せ処理することとなった。管理局に庶務課、人事課、主計課、経理課、建築課、設備課、技術課が置かれた。
- 1978. 3. 7 分子科学研究所研究棟（2,752 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。

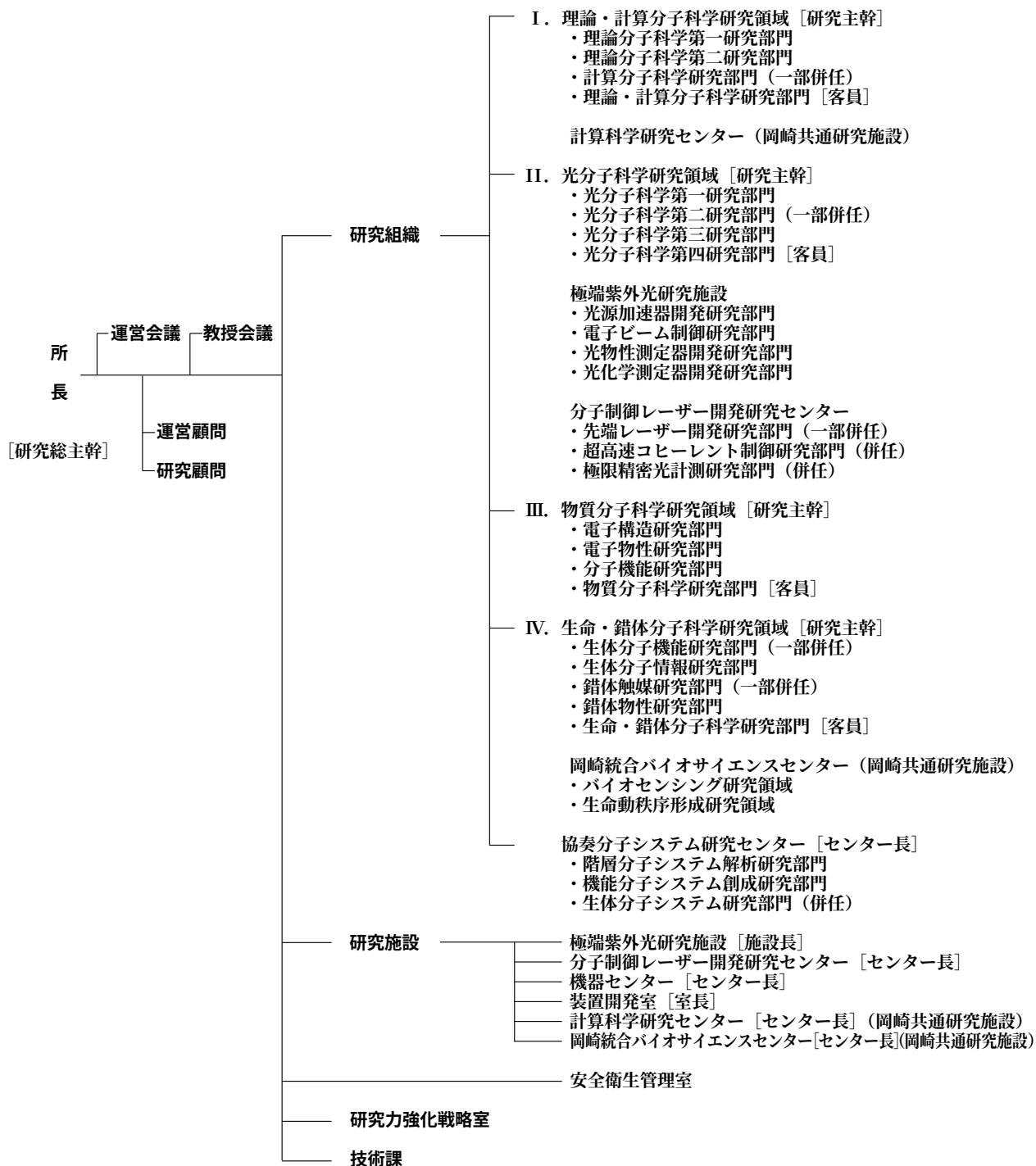
1979. 4. 1 分子構造研究系に分子動力学研究部門が設置され、管理局が総務部（庶務課、人事課、国際研究協力課）、経理部（主計課、経理課、建築課、設備課）、技術課に改組された。
1979. 11. 8 分子科学研究所創設披露式が挙行された。
1981. 4. 1 第二代研究所長に長倉三郎東京大学物性研究所教授が任命された。
1981. 4.14 国立学校設置法の一部を改正する法律により、分子科学研究所と生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所、生理学研究所）は総合化され、岡崎国立共同研究機構として一体的に運営されることになった。理論研究系に分子基礎理論第三研究部門が設置され、管理局が岡崎国立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、相関領域研究系に有機構造活性研究部門（共に流動研究部門）が設置された。
1991. 3.27 極端紫外光実験棟（増築）（283 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 相関領域研究系有機構造活性研究部門（流動）が廃止された。
1995. 4. 1 理論研究系に分子基礎理論第四研究部門が設置された。
1995. 5.12 分子科学研究所創設20周年記念式典が挙行された。
1996. 5.11 相関領域研究系に分子クラスター研究部門（流動）が設置された。
1997. 4. 1 機器センター、極低温センター、化学試料室が廃止され、分子制御レーザー開発研究センター、分子物質開発研究センターが設置された。
1999. 4. 1 第五代研究所長に茅幸二慶應義塾大学教授が任命された。
2000. 4. 1 電子計算機センター、錯体化学実験施設錯体合成研究部門が廃止され、電子計算機室が設置された。共通研究施設として、統合バイオサイエンスセンター、計算科学研究センター、動物実験センター、アイソトープ実験センターが設置された。
2002. 2.28 山手2号館（統合バイオサイエンスセンター、計算科学研究センター）（5,149 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 相関領域研究系分子クラスター研究部門（流動）、極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門（流動）、分子物質開発研究センターが廃止され、分子スケールナノサイエンスセンター（分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門、ナノ触媒・生命分子素子研究部門、ナノ光計測研究部門、界面分子科学研究部門（流動）、分子クラスター研究部門（流動））が設置された。
2003. 8.20 山手4号館（分子科学研究所分子スケールナノサイエンスセンター）（3,813 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（2014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（2014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（2014年度）

FLEMING, Graham
柳 田 敏 雄

カリフォルニア大学バークレ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
BERRY, R. Stephen

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
米国シカゴ大学名誉教授

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、所内委員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2014.4-2016.3）（◎：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
大 西 洋	神戸大学大学院理学研究科教授
○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
鈴 木 啓 介	東京工業大学大学院理工学研究科教授
高 田 彰 二	京都大学大学院理学研究科教授
田 原 太 平	理化学研究所田原分子分光研究室主任研究員
寺 崎 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 初 果	東京大学物性研究所教授
青 野 重 利	岡崎統合バイオサイエンスセンター教授
秋 山 修 志	協奏分子システム研究センター教授
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
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	協奏分子システム研究センター教授
横 山 利 彦	物質分子科学研究領域教授

* 2014年9月まで

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（2014，2015年度）（○：部会長）

神 取 秀 樹（名工大院教授）	魚 住 泰 広（分子研教授）
田 原 太 平（理研主任研究員）	岡 本 裕 巳（分子研教授）
寺 嶋 亨（九大院教授）	加 藤 晃 一（統合バイオ教授）
水 谷 泰 久（阪大院教授）	○齊 藤 真 司（分子研教授）
森 初 果（東大物性研教授）	山 本 浩 史（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（2014，2015年度）（○：委員長）

大 西 洋（神戸大院教授）	岡 本 裕 巳（分子研教授）
北 川 宏（京大院教授）	小 杉 信 博（分子研教授）
高 橋 聡（東北大多元研教授）	鈴 木 敏 泰（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ことについて、検討し、意見を述べる。所長が議長を務める。

学会等連絡会議構成員（2014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	2014.4.10, 11.11~13, 12.16~17, 2015.2.16~20, 2.23~25
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	2014.8.29
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	2014.7.9
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	2015.3.10
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	2014.7.30, 2015.2.18
機器センター運営委員会	センターの管理運営に関する重要事項。	センター長 センターの研究教育職員 センター以外の分子研の研究教育職員若干名 職員以外の研究者若干名	委員会規則	2014.7.31, 2015.2.10
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	2014.9.2
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	2014.6.24, 12.15
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	2014.8.8, 9.12, 11.18, 12.24

利益相反委員会	研究所構成員の利益相反に関する事項。	所長，研究領域及び研究施設の研究教育職員若干名，岡崎共通研究施設の研究教育職員若干名，技術課長	委員会規則	—
大学院委員会	総合研究大学院大学の運営に関する諸事項，学生に関する諸事項等の調査審議を行い，その結果を大学院専攻委員会に提案し，その審議に委ねる。	(原則) 各研究主幹，大学院委員長，正副専攻長及び正副研究科長		2014.4.10, 5.2, 6.6, 7.4, 10.6, 11.7, 12.5, 2015.1.9, 2.6, 3.3
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	2014.4.15, 5.20, 6.26, 7.15, 9.16, 10.22, 11.18, 12.16, 2015.1.21, 2.17, 3.17
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	2014.7.30
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	2015.3.17
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	2014.5.15, 7.17, 9.17, 12.4, 2015.2.5
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	2014.7.28, 11.17, 2015.2.5
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	2014.8.1, 11.17
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	2015.2.20
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	2014.4.15, 5.19, 6.16, 7.15, 8.19, 9.16, 10.21, 11.18, 12.16, 2015.1.21, 2.17, 3.17

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	2014.10.21
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	2014.4.23, 8.4, 12.1, 2015.2.24
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	2014.6.4, 2015.2.5
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	2014.9.2, 2015.2.23
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	2014.6.30
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	2014.9.4
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	2014.5.19
岡崎 3 機関食堂運営委員会	食堂の運営に関する事項を審議。	教授 1 技術課長	委員会規則	2014.10.9
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	—
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	—
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	2014.5.14, 7.9, 9.10, 11.12, 2015.1.14, 3.11
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	2014.10.20, 11.12
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	2014.8.29, 2015.3.17
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	2014.6.16, 11.12

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
小 泉 健 一	特任研究員
西 澤 宏 晃	特任研究員
柳 井 毅	准教授
倉 重 佑 輝	助 教

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
YANG, Tao	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
岡安 竜馬ダヴィッド	特任研究員(名古屋大学大学院情報科学研究科勤務)
西村好史	特任研究員(早稲田大学先進理工学部化学・生命化学科勤務)
RUIZ BARRAGAN, Sergio	特任研究員(日本原子力研究開発機構システム計算科学センター勤務)

理論・計算分子科学研究部門(客員研究部門)

天能精一郎	教 授(神戸大院システム情報)
高田彰二	教 授(京大院理)
杉本 学	准教授(熊本大院自然科学)

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)
大島康裕	教 授(委嘱)(東工大院理)
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)
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
SOMMER, Christian	助 教
田中 陽	特任助教(分子科学研究所特別研究員)
武田俊太郎	特任助教(分子科学研究所特別研究員)
後藤 悠	研究員
平等拓範	准教授(併)

光分子科学第三研究部門

小杉信博	教 授
AZIZ, Emad	外国人研究職員(ベルリン自由大学) '14.6.7 ~ 12.6
長坂将成	助 教
山根宏之	助 教
湯澤勇人	学振特別研究員
解良 聡	教 授
BUSSOLOTI, Fabio	特任研究員
KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika	特別訪問研究員
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)
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

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
江 東 林	准教授
永 井 篤 志	助 教
DALAPATI, Sasanka	研究員(IMS フェロー)
GU, Cheng	学振外国人特別研究員 '14.4.1 ~ '16.3.31
WEI, Hao	特別訪問研究員
DING, Xuesong	特別訪問研究員
西 村 勝 之	准教授
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)

竹 延 大 志	教 授 (早稲田大先進理工)
中 西 尚 志	准教授 (物質・材料研究機構)
根 岸 雄 一	准教授 (東京理科大学)

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
飯 野 亮 太	教 授(兼) (岡崎統合バイオサイエンスセンター)
中 村 彰 彦	助 教(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)
古 谷 祐 詞	准教授
塚 本 寿 夫	助 教

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
檄 山 儀 恵	准教授
DHITAL, Raghu Nath	特別訪問研究員

錯体物性研究部門

村 橋 哲 郎	教 授(併)
山 本 浩 二	助 教(併)
正 岡 重 行	准教授
近 藤 美 欧	助 教
KOOMBIL KUMMAYA, Praneeth V.	研究員

生命・錯体分子科学研究部門（客員研究部門）

加 藤 昌 子	教 授（北大院工）
依 光 英 樹	准教授（京大院理）
上久保 裕 生	准教授（奈良先端大物質創成科学）

極端紫外光研究施設 施設長(併) 小 杉 信 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
雨 宮 一 樹	共同研究員
安 達 誠	共同研究員

光物性測定器開発研究部門

田 中 清 尚	准教授
松 波 雅 治	助 教
羽 尻 哲 也	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
阿 部 淳	研究員
檜 山 卓 也	研究員
古 賀 信 康	准教授
古賀（巽）理恵	特別協力研究員
鹿 野 豊	特任准教授（若手独立フェロー）
杉 尾 一	学振特別研究員
石 崎 章 仁	特任准教授（若手独立フェロー）
藤 橋 裕 太	研究員
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
堀 内 新之介	研究員 (IMS フェロー)
鈴 木 敏 泰	准教授
阪 元 洋 一	助 教
黒 田 康 弘	研究員
東 林 修 平	助 教
PANDIT, Palash	研究員
山 本 浩 司	研究員
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)

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
ZHENG, Lihe	研究員
佐 藤 庸 一	特任研究員
常 包 正 樹	特任研究員
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) 横 山 利 彦

金 子 靖	特任専門員
中 尾 聡	研究員
富 宅 喜代一	特別協力研究員

装置開発室 室長 (併) 山 本 浩 司

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

研究力強化戦略室 室長(併) 小 杉 信 博
 原 田 美 幸 主 任
 永 園 尚 代 特任専門員

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 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)
 矢 木 真 穂 特任助教
 蜷 川 暁 特任研究員
 石 井 健太郎 研究員
 安 西 高 廣 研究員
 NASSIRI, Mohammadreza 特別訪問研究員
 飯 野 亮 太 教 授
 中 村 彰 彦 助 教
 栗 原 顕 輔 特任准教授
 SHENG, Li 研究員
 倉 橋 拓 也 助 教(兼)

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
中 野 路 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

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

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

学術支援二係

内 山 功 一

係 長

＊ 整理日付は2015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会に委ねられている。さらに、厳密な選考を経て採用された准教授、助教は分子科学研究所教員の流動性を保つため原則として内部昇任が禁止されている（例外は2件のみ）。教授、准教授の研究グループの研究活動に関しては、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（2015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）

区分 \ 職名	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	48	79	265	154	3	18	224
転出者数	6	36	65	229	121	0	12	218
現 員	1	12(3)	14	36	33(1)	3	6	6

（ ）は委嘱で外数。

② 客員研究部門

区分 \ 職名	教授	准教授
就任者数	146	157
現 員	7	5

③ 外国人客員研究部門

区分 \ 職名	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	13

^{*}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

2015.1.1

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(5)	2(2)	6	9(7)		9(7)
光分子科学研究領域		4(3)	0(2)	7	11(5)		11(5)
物質分子科学研究領域		2(2)	3(2)	3(1)	8(5)		8(5)
生命・錯体分子科学研究領域		1(6)	3(2)	7(3)	11(11)		11(11)
研究施設		4(7)	6(2)	13	23(9)		23(9)
技術課						33(1)	33(1)
小計	1	12(23)	14(10)	36(4)	63(37)	33(1)	96(38)
岡崎統合バイオサイエンス センター		3	0	1(3)	4(3)		4(3)
計算科学研究センター		1(1)	1	(3)	2(4)		2(4)
合計	1	16(24)	15(10)	37(10)	69(44)	33(1)	102(45)

() 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	2010 年度	2011 年度	2012 年度	2013 年度	2014 年度
人件費	1,224,363	1,187,453	1,126,099	1,068,438	1,118,692
運営費，設備費	2,125,872	2,983,850	2,133,268	2,766,023	2,287,785
施設費	575,589	0	31,269	322,686	22,820
合計	3,925,824	4,171,303	3,290,636	4,157,147	3,429,297

寄付金

区 分	2010 年度	2011 年度	2012 年度	2013 年度	2014 年度
件数 (件)	4	10	11	10	23
金額 (千円)	12,870	7,409	13,340	7,125	21,648

共通研究施設を除く

科学研究費補助金

区 分	2010 年度	2011 年度	2012 年度	2013 年度	2014 年度
件数 (件)	64	58	61	60	68
金額 (千円)	381,763	312,600	236,700	222,310	265,990

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

2014 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	6	5	11
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		8	1	9
若手研究	(S)	0	0	0
若手研究	(A)	6	0	6
若手研究	(B)	20	2	22
基盤研究	(S)	1	0	1
基盤研究	(A)	3	1	4
基盤研究	(B)	10	2	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		1	0	1
奨励研究		1	0	1
合計		68	11	79

* 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	20,300	62,200	82,500
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		10,900	1,600	12,500
若手研究	(S)	0	0	0
若手研究	(A)	37,300	0	37,300
若手研究	(B)	22,000	2,200	24,200
基盤研究	(S)	10,400	0	10,400
基盤研究	(A)	37,800	10,300	48,100
基盤研究	(B)	49,700	7,100	56,800
基盤研究	(C)	12,100	0	12,100
特別研究員奨励費		1,800	0	1,800
特別研究員奨励費	外国人	1,200	0	1,200
研究活動スタート支援		1,000	0	1,000
奨励研究		500	0	500
合計		205,000	83,400	288,400

*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	2010 年度	2011 年度	2012 年度	2013 年度	2014 年度
件数 (件)	10	5	10	8	5
金額 (千円)	29,982	27,730	42,025	133,667	22,688

2014 年 1 月 31 日現在

受託研究

区 分	2010 年度	2011 年度	2012 年度	2013 年度	2014 年度
国	4	4	4	1	1
独立行政法人	22	22	24	16	17
大学等	1	1	2	6	3
民間企業他	0	0	1	2	1
合計件数 (件)	27	27	31	25	22
合計金額 (千円)	919,914	828,934	1,287,601	884,761	847,871

(岡崎共通研究施設を含む)

2014 年 1 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（2014.12）岡崎情報図書館は雑誌1,511種（和292，洋1,219），単行本95,818冊（和13,090，洋82,728）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SciFinder，Reaxys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，和室，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、1,1',9,9'-ビカルバゾール類、1,1'-ビカルバゾール塩類、及びその製造方法、Qスイッチレーザー装置、レーザ点火装置、受動モードロックファイバレーザ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25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4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26年度は、個人有0件、機構有3件（他機関から年度中に譲渡されたものを含む、実出願2件）であった（平成27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。

3-1 研究領域

理論・計算分子科学研究領域

研究目的 量子力学，統計力学などに基づく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，機能に関する理論・計算分子科学研究による解明

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動力学および物性・機能発現の解明
2, ナノ構造体の光応答理論と機能性物質理論設計への展開
3, 有機分子・錯体分子の電子状態の解明とその量子化学理論の開発

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, 電子状態理論の開発と光物性科学・不均一触媒系への応用
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, 複雑な励起状態のための理論開発と応用
2, 生体分子の機能に関係する柔らかいコンフォメーション動力学の理論・計算研究
3, 電子状態シミュレーションと情報化学手法を駆使した物質の構造-機能相関に関する理論的研究

研究課題 1, 決定論と確率論を融合した電子状態理論の開発
2, 高効率光エネルギー変換に関する理論的研究
3, 基質・リガンド結合に伴う生体分子系の大規模構造変化についての MD 計算等による解析
4, 蛍光プローブ分子の構造-機能相関の解明と分子設計
5, エネルギー変換用複合分子システムの構造-機能相関の解明とシステム設計

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

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子分光法の開発研究を行う

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が生ずる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

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

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, 有機材料と電気2重層を用いた電界誘起相転移の探索
2, 新奇有機機能性液体材料の開発および光・磁気物性解析
3, 新規機能性金属ナノクラスターの創製

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。さらに，人工細胞を創成して生物の挙動を再現することを目指した研究を展開する。

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, タンパク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, 金属酵素モデル錯体による酸素分子活性化機構
4, 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
5, 交差触媒システムを内包する人工細胞の構築と解析

生体分子情報研究部門

研究目的 先端計測技術により、細胞内情報伝達を担う生体分子の分子機構を解明する

- 研究課題
- 1, 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
 - 2, 各種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
 - 3, 赤外差分光計測による膜タンパク質の構造機能相関解明
 - 4, イオンチャネル及び G タンパク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, 水素結合・疎水性相互作用・静電的相互作用といった非共有結合性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 機能性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, 機能性金属錯体の合成と構造解明
 - 2, 金属錯体を用いた小分子の高効率変換反応の開発
 - 3, 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, 遷移金属触媒や典型元素の特性を活かした新反応・新分子の創出とそれに基づく新概念の確立
や有用分子の効率的合成法の開発

2, 光の創成と利用に資する光機能性金属錯体の開拓

3, 光応答性タンパク質の励起状態プロトン移動の解析と新規蛍光性タンパク質の開発

研究課題 1, パラジウムやニッケル触媒を用いる含窒素巨大 π 電子系分子の創出ならびに炭素－硫黄結合の触媒的活性化

2, 発光性クロミック白金錯体、元素活用型発光性 3d 金属錯体、および、金属錯体光触媒系の構築と構造、物性、機構解明

3, 光応答性タンパク質 Photoactive Yellow Protein のクマリン誘導体を用いた再構成と発光特性の評価

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, タンパク質分子構造および機能の合理デザイン
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, ナノスケール曲面を有するグラフェン半導体分子
4, 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, 生体分子モーターのエネルギー変換機構の解明

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，先端機器の開発と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 2014 年度の実施状況

(1) 課題研究

課 題 名	提案代表者	
波長選択型有機太陽電池の開発研究	中部大学工学部	宮本 順一

(2) 協力研究

課 題 名 (通年)	代 表 者	
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研究	琉球大学理学部	諸東 雅大
励起状態化学反応に関する理論的研究	筑波大学数理物質系	重田 育照
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
金属ナノ粒子一次元配列構造における局在光電場分布の励起波長依存性に関する研究	弘前大学教育学部	島田 透
電気化学軟X線吸収分光法による酸素生成触媒の研究	慶應義塾大学理工学部	吉田 真明
円偏光 UV 照射による光機能性有機無機複合材料のキラリティー誘起	東京理科大学理学部	秋津 貴城
ピコ秒・高輝度スピン偏極電子源の開発	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	山本 尚人
狭帯域コヒーレントエッジ放射の研究	名古屋大学シンクロトロン光研究センター	保坂 将人

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
 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
 多電子同時計測による金属表面に吸着した分子の電子状態の研究
 実用的テラヘルツ波検出器に向けた擬似位相整合デバイスの作製
 スピン波 Q スイッチマイクロチップレーザーの開発
 赤外フェムト秒パルスレーザーの開発
 磁場や光に応答する新しい外場応答型有機伝導体の微小結晶構造解析
 コヒーレントフォノンの量子状態推定と制御
 砂田格子を用いたメタマテリアルの特性解析

希土類錯体をゲルに分散させた材料の高強度発光メカニズム解明：レーザー媒質としての物性探索
 9,9- ジアリール -2,7- ジ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の開発

京都大学エネルギー理工学研究所 全 炳俊
 広島大学大学院先端物質科学研究科 栗木 雅夫
 新潟大学理学部 彦坂 泰正
 理化学研究所テラヘルツ光源研究チーム 縄田 耕二
 豊橋技術科学大学電気・電子情報工学系 後藤 太一
 福井大学大学院工学研究科 川戸 栄
 大阪府立大学大学院理学系研究科 藤原 秀紀
 東京工業大学応用セラミックス研究所 中村 一隆
 信州大学先鋭領域融合研究群環境・エネルギー材料科学研究所 中田 陽介
 島根大学教育学部 西山 桂
 山形大学大学院理工学研究科 前山 勝也

課 題 名 (前期)

代 表 者

プラズモニクナノポア構造による局在・増強電場の発生とその共鳴波長の制御
 常温接合を用いた高機能固体レーザーの開発
 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
 光渦を用いた弱測定による量子状態推定
 ポルフィリン単分子磁石の光誘起スイッチング挙動と単分子電気伝導特性の評価
 スクイズド状態を用いた分子分光の応用可能性
 アンジュレタ高次光が持つ新奇な性質の解明
 分子性ディラック電子系 α -(BEDT-TTF)₂I₃ の角度分解光電子分光実験
 糖鎖と小胞体関連分解に関する研究
 合金ナノ粒子が協奏的に引き起こす連続触媒反応の解明

慶應義塾大学理工学部 斎木 敏治
 中央大学理工学部 庄司 一郎
 慶應義塾大学理工学部 古川 良明
 高知工科大学システム工学群 小林 弘和
 大阪大学大学院理学研究科 田中 大輔
 北海道大学大学院情報科学研究科 松岡 史晃
 広島大学放射光科学研究センター 佐々木 茂美
 東邦大学理学部 田嶋 尚也
 京都大学大学院理学研究科 森 和俊
 東北大学原子分子材料科学高等研究機構 伊藤 良一

課 題 名 (後期)

代 表 者

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
 赤外分光法によるレチナルタンパク質群の微細構造解析
 ドメインスワップ二量体デノボタンパク質 WA20 とその改変体を用いたナノ分子ブロックによる自己組織化ナノ構造の創製と解析
 常温接合を用いた高機能固体レーザーの開発
 サブナノパルスレーザーを用いたブレイクダウンおよび点火に関する研究
 オージェ電子-イオン同時計測による内殻励起 cis-ヘキサフルオロシクロブタンの特異的解離の解明
 カチオン内包アニオン炭素クラスター複合体を用いた人工光合成システムの構築
 糖鎖と小胞体関連分解に関する研究
 希ガス原子のオージェサテライト分光：PCI 効果と光電子再捕獲によるリユードベリ列の漸次的生成
 精密有機合成を指向した金属クラスター触媒の開発
 DNA/RNA 結合タンパク質が特異的な塩基配列を選択して認識するメカニズム
 スクイズド状態を用いた分子分光の応用可能性
 有機色素 J 会合体薄膜の光学特性
 極端紫外光渦による原子分子の光イオン化ダイナミクス

原子核乾板の性能評価
 有機金属界面の二次元格子構造に依存した電子状態

広島大学大学院理学研究科 江幡 孝之
 岡山大学大学院医歯薬学総合研究科 須藤 雄気
 信州大学繊維学部 新井 亮一
 中央大学理工学部 庄司 一郎
 大阪大学大学院工学研究科 赤松 史光
 広島大学大学院理学研究科 岡田 和正
 大阪大学大学院工学研究科 小久保 研
 京都大学大学院理学研究科 森 和俊
 上智大学理工学部 東 善郎
 大阪大学大学院工学研究科 櫻井 英博
 慶應義塾大学理工学部 古川 良明
 北海道大学大学院情報科学研究科 松岡 史晃
 島根大学大学院総合理工学研究科 水野 斎
 九州シンクロトロン光研究センター加速器グループ 金安 達夫
 名古屋大学大学院理学研究科／エコトピア科学研究科 尾崎 圭太
 千葉大学大学院融合科学研究科 奥平 幸司

(3) 研究会

① 【分子研研究会（一般）】

細胞核内反応の分子科学

Fundamentals and Applications of Laser Filaments

2014 年 9 月 27 日（土） 岡崎コンファレンスセンター中会議室

9:30- 9:50	開会挨拶
9:50-10:15	「細胞親和型ポリマーバイオマテリアル」 石原 一彦 東京大学大学院工学系研究科
10:15-10:40	「細胞場における RNA の動態解析、遺伝子発現の制御システムの解析」 三宅 淳 大阪大学大学院基礎工学研究科
10:40-11:05	「細胞内温度計測」 鈴木 団 早稲田バイオサイエンスシンガポール研究所
11:05-11:20	休 憩
11:20-11:45	「核内タンパク質を標的とした自己免疫抑制」 花方 信孝（独）物質・材料研究機構／北海道大学生命科学院
11:45-12:10	「生きた細胞内で機能する内在性 RNA イメージング法」 小澤 岳昌 東京大学大学院理学系研究科
12:10-13:30	昼 食
13:30-13:55	「非環状人工核酸を用いた高機能 siRNA の設計」 浅沼 浩之 名古屋大学大学院工学系研究科
13:55-14:20	「分子動力学シミュレーションによる分子認識の研究と創薬への応用」 山下 雄史 東京大学先端科学技術研究センター
14:20-14:45	「シミュレーションによる動的クロマチンダイナミクス」 河野 秀俊（独）日本原子力研究開発機構
14:45-15:00	休 憩
15:00-15:25	「ショウジョウバエ生殖細胞における piRNA 生合成機構」 佐藤 薫 東京大学大学院理学系研究科
15:25-15:50	「細胞核ダイナミクスの生細胞蛍光イメージング」 平岡 泰 大阪大学大学院生命機能研究科
15:50-16:15	「アクチンファミリーによる細胞核・クロマチンの機能構造形成」 原田 昌彦 東北大学大学院農学研究科
16:15-16:30	休 憩
16:30-16:55	「超解像度顕微鏡で可視化する染色体とクロマチンのダイナミクス」 ピーター・カールトン 京都大学物質－細胞統合システム拠点
16:55-17:20	「ゲノムイメージングより迫るリプログラミング機構」 宮成 悠介 自然科学研究機構岡崎統合バイオサイエンスセンター
17:20-17:30	開会挨拶

② 【分子研研究会（一般）】

先端放射光源に関する研究会

2014 年 11 月 21 日（金）～ 22 日（土） 岡崎コンファレンスセンター中会議室

11 月 21 日（金）

13:30-13:40	趣旨説明（浜 広幸（東北大））
13:40-13:45	各種お知らせ

【セッション 1：回折限界放射光リングの可能性と意義／コンビナー 佐々木茂美（広大）】

13:45-15:15	講演 I 世界の回折限界放射光リング戦略の動向と SPring-8 II がめざすもの（下崎義人（JASRI/SP8）） 講演 II SPring-8 II への SACLA からの直接入射（大竹雄次（理研／SP8）） 質疑，意見交換
< 15:15-15:30	休憩 >

【セッション 2：レーザープラズマ加速と光源技術の新展開／コンビナー 加藤政博（分子研）】

15:30-17:30	講演 I レーザープラズマ加速の達成点とこれから（細貝知直（阪大）） 講演 II レーザーによる EUV・X 線の発生（藤 貴夫（分子研）） 講演 III 短周期アンジュレータ開発の現状（山本 樹（KEK）） アンジュレータ技術の最先端（金城良太（理研／SP8）） 講演 VI 軌道角運動量を持つ光とその応用（佐々木茂美（広大）） 質疑，意見交換
-------------	--

< 17:30-18:00 移動>
18:00-20:00 懇親会

11月22日(土)

【セッション3: ERLの先端光源としての可能性と意義/コンビナー 花木博文(JASRI/SP8)】

9:00-10:30 講演I ERL開発の現状と展望(宮島 司(KEK))
講演II 超伝導空洞の挑戦(阪井寛志(KEK))
質疑, 意見交換

< 10:30-11:00 休憩>

【セッション4: FEL, 次の10年の進化/コンビナー 浜 広幸(東北大)】

11:00-12:30 講演I 世界のXFELの展望とSACLAの現状と高度化の方向性(大竹雄次(理研/SP8))
講演II XFELOはどのように実現すべきか(羽島良一(JAEA))
質疑, 意見交換

12:30-12:40 閉会挨拶(村上放射光学会長)

③ 【分子研研究会(一般)】

分子システム研究における溶液散乱

2014年12月20日(土) 分子科学研究所 研究棟201号室

12:55-13:00 Opening/開催挨拶
Shuji AKIYAMA(IMS)/秋山修志(分子研)
International Situation/国際情勢

13:00-13:30 SAS Publication Guideline
溶液散乱の出版ガイドラインについて
Hironari KAMIKUBO(NAIST)/上久保裕生(奈良先端大)

13:30-14:00 Report of wwPDB SAS Task Force 2014
会議報告, ガイドラインに関する査読者とのやり取り
Shuji AKIYAMA(IMS)/秋山修志(分子研)
Facility & Apparatus/施設・実験装置

14:00-14:30 Current status of the small and wide angle neutron scattering instrument TAIKAN at J-PARC
J-PARC 小角・広角中性子散乱装置「大観」の現状
Shinichi TAKATA(J-PARC)/高田慎一(J-PARC)

14:30-14:40 Break/休憩

14:40-15:10 Upgrade of SAXS beamlines at the photon factory
フォトンファクトリーの小角散乱ビームラインの高度化
Nobutaka SHIMIZU(KEK)/清水伸隆(高エネ研)

15:10-15:40 Spring-8 理研構造生物学ビームラインI(BL45XU)の高度化
Upgrade of a BioSAXS Beamline BL45XU at Spring-8
Takaaki HIKIMA(RIKEN)/引間孝明(理研)

15:40-16:10 Lab SAXS Apparatus
実験室系小角実験装置の現状
Kazuki ITO(RIGAKU)/伊藤和輝(リガク)

16:10-16:20 Break/休憩

16:20-16:50 Hot Topics/最近の研究から話題提供

16:20-16:50 Aggregation Inhibition Mechanism of Small Heat Shock Protein
スモールヒートショックプロテインの凝集抑制機構
Toshihiko OKA(Shizuoka Univ)/岡 俊彦(静岡大)

16:50-17:20 Wide-resolution structural and functional analyses to address receptor functions
受容体機能を探る広分解能構造機能解析
Atsuko YAMASHITA/山下敦子(岡山大)

17:20-17:50 Molecular mechanisms of virus replication
ウイルス複製の分子機構
Etsuko KATOH/加藤悦子(生物研)

17:50-18:10 Discussion/総合討論

18:10-18:15 Closing/閉会挨拶
Mamoru SATO(YCU)/佐藤 衛(横浜市大)

④ 【分子研研究会（一般）】
 生物無機化学の最先端と今後の展望：金属と生体分子の作用機序解明とモデル化および応用への展開
 2015年1月6日（火）～7日（水） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

1月6日（火）

13:00-13:05 開 会
 13:05-13:25 正岡重行（分子研）
 金属錯体を触媒とする酸素発生反応
 13:25-13:45 莊司長三（名大院理）
 酸化酵素の誤作動を誘起する次世代疑似基質の開発とガス状アルカンの水酸化
 13:45-14:10 廣田 俊（奈良先端大物質創成）
 ヘムタンパク質の多量化：タンパク質変性と機能化
 14:10-14:35 菊地和也（阪大院工）
 高感度機能性 MRI ブローブ
 14:35-15:00 小倉尚志（兵庫県立大・生命理）
 金属中心－タンパク質間の情報伝達ダイナミクス：赤外分光法による検出
 15:00-15:10 break
 15:10-15:35 海野昌喜（茨城大院理工）
 毛髪内亜鉛・カルシウム恒常性維持蛋白質群の構造生物学的研究
 15:35-16:00 石森浩一郎（北大院理）
 ヘムをシグナル分子として利用する翻訳制御系の分子機構
 16:00-16:25 城 宜嗣（理研）
 一酸化窒素の生体内動態の分子科学
 16:25-17:25 齋藤正男（東北大多元研）
 A Paradigm Shift in Biological Heme Degradation
 18:00-20:00 懇親会

1月7日（水）

9:00-10:00 増田秀樹（名工大院工）
 配位子と配位空間と配位環境に拘った生物無機化学 25 年
 10:00-10:25 船橋靖博（阪大院理・JST さきがけ）
 金属活性中心を取り巻く蛋白質内孔と配位子骨格に潜むもの
 10:25-10:50 上野隆史（東工大院生命理工）
 人工金属蛋白質による細胞内 CO 輸送
 10:50-11:00 break
 11:00-11:25 藤井 浩（奈良女子大）
 ハロパーオキシダーゼの活性反応中間体の研究
 11:25-11:50 小寺正人（同志社大院理工）
 sMMO の高い酸化力を再現する二核鉄錯体触媒の開発
 11:50-12:15 久枝良雄（九大院工）
 B12 酵素に学ぶバイオインスパイアード触媒の創製と触媒機能
 12:15-13:10 Group Photo & Lunch
 13:10-13:30 大木靖弘（名大院理）
 ニトロゲナーゼの機能モデル化に向けた第一歩
 13:30-13:50 中島 洋（名大院理）
 鉄硫黄クラスターを有するニトロゲナーゼ転写調節因子一酸化窒素との反応
 13:50-14:15 樋口恒彦（名市大院薬）
 ヘム酵素モデル研究の新たな展開を求めて
 14:15-14:40 吉澤一成（九大先導研）
 量子化学計算による酵素の反応機構の研究
 14:40-14:50 break
 14:50-15:15 小島隆彦（筑波大数物）
 ルテニウム (IV) -オキソ錯体による有機基質の酸化反応機構
 15:15-15:40 小江誠司（九大院工）
 水素の活性化と燃料電池
 15:40-16:40 福住俊一（阪大院工）
 人工光合成の応用展開

⑤ 【分子研研究会（ミニ国際シンポジウム）】
 Workshop on Hierarchy of Quantum Mechanics
 2015年2月21日（土）～23日（月） 岡崎コンファレンスセンター

February 21st (Sat.)

- 10:00- Registration
- 1st Session Chair: Yutaka Shikano
- 10:45-11:00 Opening Remark: Yutaka Shikano
- 11:00-12:00 Yanbei Chen (California Institute of Technology)
 [Invited Talk] Quantum Measurement with Macroscopic Test Masses
- 12:00-13:30 Lunch (Poster Session)
- 2nd Session Chair: Lukas Buchmann
- 13:30-14:30 Haixing Miao (University of Birmingham)
 [Invited Talk] Active Optomechanical Filter
- 14:30-15:00 Vy Nguyen Duy (Osaka Prefecture University)
 Analysis of Optomechanical Oscillator for the Highly-Sensitive Measurement and Quantum Information
- 15:00-15:30 Ramgopal Madugani (Okinawa Institute of Science and Technology Graduate University)
 Microsphere Pendulum Optomechanics
- 15:30-16:00 Coffee Break (Poster Session)
- 3rd Session Chair: Yanbei Chen
- 16:00-17:00 Kentaro Somiya (Tokyo Institute of Technology)
 [Invited Talk] Exceeding the Standard Quantum Limit with the Japanese Gravitational-Wave Detector KAGRA
- 17:00-17:30 Shin-iti Goto (Institute for Molecular Science)
 Aspects of Casimir Effects in Inhomogeneous Media
- 17:30-18:00 Elica Kyoseva (Singapore University of Technology and Design)
 Arbitrarily Accurate Composite Pulses for Dynamical Suppression of Amplitude Noise

February 22nd (Sun.)

- 4th Session Chair: Rekishu Yamazaki
- 10:00-11:00 Hiroyuki Katsuki (Nara Institute of Science and Technology)
 [Invited Talk] Ultrafast Manipulation of Coherent States—from Gas Phase to Condensed Phase
- 11:00-11:30 Albert Benseny Cases (Okinawa Institute of Science and Technology Graduate University)
 Hybrid Systems of Ions and Electric-Dipolar Condensates
- 11:30-12:00 Friedemann Queisser (University of British Columbia / Institute for Molecular Science)
 Long-Lived Resonances at Mirrors
- 12:00-13:30 Lunch (Poster Session)
- 5th Session Chair: Kentaro Somiya
- 13:30-14:30 Lajos Diosi (Wigner Research Centre for Physics)
 [Invited Talk] Non-Quantum Effect and Test of Spontaneous Collapse Models in Mechanical Oscillators
- 14:30-15:30 Caslav Brukner (University of Vienna)
 [Invited Talk] Decoherence due to Time Dilation
- 15:30-16:00 Coffee Break (Poster Session)
- 6th Session Chair: Haixing Miao
- 16:00-17:00 Junho Suh (Korea Research Institute of Standards and Science)
 Quantum Back-Action Evading Measurement of Mechanical Motion
- 17:00-18:00 Tom Purdy (National Institute of Standards and Technology)
 [Invited Talk] Experiments with a Mechanical Resonator at Optomechanical Equilibrium
- 18:30-20:30 Conference Dinner / Snack at Okazaki Conference Center

February 23rd (Mon.)

- 7th Session Chair: Caslav Brukner
- 10:00-11:00 Lukas Buchmann (University of California)
 [Invited Talk] Dynamics of a Dissipative Quantum Spring
- 11:00-12:00 Nobuyuki Matsumoto & Kentaro Komori (University of Tokyo)
 [Invited Talk] Development of the 5-mg Suspended Mirror Driven by Measurement-Induced Back-Action
- 12:00-13:30 Lunch (Poster Session)

8th Session	Chair: Tom Purdy
13:30-14:30	Sungkun Hong (University of Vienna) [Invited Talk] Pulsed Optical Detection of Mechanical States Close to the Standard Quantum Limit
14:30-15:00	Fumika Suzuki (University of British Columbia / Institute for Molecular Science) Environmental Gravitational Decoherence via Gravitational Waves Emission
15:00-15:30	Mohammad H. Ansari (Kavli Institute for Nanoscience, TU Delft) Exact Correspondence between Renyi Entropy Flows and Physical Flows
15:30-16:00	Coffee Break (Poster Session)
16:00-18:00	Free Discussion

⑥ 【分子研研究会（一般）】
金属イオンを用いた超構造体の構築と機能
——錯体化学における境界領域研究の現状と展望——
 2015年3月15日（日）～16日（月） 岡崎コンファレンスセンター小会議室

3月15日（日）

13:00-13:10 趣旨説明 二瓶雅之（筑波大学数理物質系化学域）

座長：山内美穂（九州大学）

13:10-13:40 田中大輔（大阪大学大学院理学研究科化学専攻）
「スピントロニクスデバイスを志向した分子磁性体の機能設計」
 13:40-14:20 佐藤宗太（東北大 WPI-AIMR; JST, ERATO, 磯部縮退 π 集積プロジェクト）
「磁場配向性錯体の自己組織化合成と NMR 解析への展開」
 14:20-15:10 寺西利治（京都大学化学研究所）
「無機ナノ粒子超構造の構築と機能」
 < 休憩 >

座長：植村卓史（京都大学）

15:30-16:00 越山友美（九州大学大学院理学研究院化学部門）
「リボソーム空間と金属錯体の階層的融合と機能発現」
 16:00-16:40 高谷光（京都大学化学研究所附属元素科学国際研究センター）
「メタル化アミノ酸／ペプチドを用いる金属集積制御と機能開拓」
 16:40-17:30 君塚信夫（九州大学工学研究院応用化学部門，分子システム科学センター）
「金属錯体の自己組織化によるソフトマテリアル構築と機能」
 18:00-20:00 懇親会

3月16日（月）

座長：野呂真一郎（北海道大学）

9:00- 9:40 山田泰之（名古屋大学物質科学国際研究センター）
「外部刺激応答性スタッキング型ボルフィリン・フタロシアニンアレイ」
 9:40-10:10 湯浅順平（奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科，JST さきがけ）
「金属イオンとの超分子形成によって誘起される配位子間の $\pi - \pi$ 相互作用」
 < 休憩 >

座長：田中健太郎（名古屋大学）
 10:20-11:00 竹岡裕子（上智大学理工学部物質生命理工学科）
「有機無機ペロブスカイト化合物の構造制御と太陽電池応用検討」
 11:00-11:30 竹田浩之（東京工業大学大学院理工学研究科，CREST/JST）
「Cu 錯体，Fe 錯体，および Mn 錯体を用いた CO₂ 還元光触媒反応」
 11:30-12:20 船橋靖博（大阪大学大学院理学研究科化学専攻，JST さきがけ）
「籠状構造内の配位部位に錯形成した金属中心の分子特性」
 12:20-12:30 閉会挨拶 石谷 治（東京工業大学大学院理工学研究科）

(4) 若手研究会等

課 題 名	提案代表者
第 54 回分子科学若手の会夏の学校講義内容検討会	京都大学大学院工学研究科 福田 将大
第 12 回 ESR 夏の学校	大阪市立大学大学院理学研究科 田中 彩香

(5) 岡崎コンファレンス

課 題 名	提案代表者
先端X線吸収分光が切り拓く分子科学	分子科学研究所 横山 利彦

(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
Ag および Cu 添加型ハイドロキシアパタ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
GTL 触媒用高活性 MoOx 種の L-XANES 構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
酸化物蛍光体中における添加元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
アルミニウム含有金属酸化物ナノ粒子へのリチウム脱挿入反応機構解明	名古屋工業大学大学院工学研究科	園山 範之
パーライト由来の多孔性アルミノシリケートの Si 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絶縁材料の劣化の研究	九州シンクロトロン光研究センター	小林 英一
真空紫外励起での励起子の多重安定化構造の生成とエネルギー移動による発光	秋田大学大学院工学資源学研究科	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	早稲田大学大学院先進理工学研究科	大木 義路
岩塩型 Mg ₂ ZnO 酸化物半導体のバンドギャップの組成依存	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
アルカリハライド結晶中の TI ⁺ 型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
微結晶アルカリハライドの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
ペルオキシド発生電極触媒能を示す高原子価金属酸化物の電子構造解析	北海道大学大学院工学研究院	青木 芳尚
電子・電子・イオン同時計測による分子 2 価イオン状態の安定性の研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
希薄磁性体における 3d 遷移金属の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
ビームライン整備	分子科学研究所	岩山 洋士
LIB 正極用層状酸化物への酸化物コーティングの電池特性への影響の検討	(独)産業技術総合研究所ユビキタスエネルギー研究部門	小林 弘典
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
真空紫外吸収分光によるアモルファス半導体の光誘起結合状態変化の観察	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) その 2	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
赤外吸収分光によるシンチレーター結晶の電子捕獲中心の起源解明	山形大学理学部	北浦 守
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
鉛フリー圧電体の遠赤外線スペクトル	名古屋工業大学大学院工学研究科	柿本 健一
BL6B 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強相関電子系の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
パイ電子共役系有機半導体における電子格子相互作用	分子科学研究所	解良 聡
バルク敏感低エネルギー角度分解光電子分光法によるペンタセン単結晶の真性価電子バンド構造の実測	千葉大学大学院融合科学研究科	中山 泰生
トポロジカル絶縁体／磁性体薄膜のヘテロ接合／超格子の電子構造	東京工業大学大学院理工学研究科	平原 徹
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
偏光依存低励起エネルギー角度分解光電子分光による擬一次元有機導体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
高分子をインターカレーとした層状 Ti 硫化物の電子構造と電子物性	名古屋大学エコトピア科学研究所	竹内 恒博
非化学量論効果が及ぼすホイスラー型 Fe ₂ VAl 化合物における電子構造への影響	名古屋工業大学	宮崎 秀俊
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
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
Local orbital angular momentum studies on bulk spin-split bands in CdTe and MoS ₂ using low photon-energy circular-dichroism in ARPES	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
Linear and circular dichroism ARPES studies of energy band and orbital structures of K _{1-x} Ba _x TaO ₃ and Sr _{1-x} La _x TiO ₃	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
中性子輝散性蛍光体の真空紫外光励起による発光特性	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	国立天文台先端技術センター	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
ダイヤモンド中ボロンの発光及びその時間分解	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
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ユビキタスエネルギー研究部門	北村 直之
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) その 2	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
基板吸着によって発現する巨大 π 共役系分子の擬金属化現象の解明：実験的分子軌道再構成への挑戦	(独)産業技術総合研究所計測フロンティア部門	細貝 拓也
有機－有機ヘテロ界面に発生する「バンドの曲がり」の精密評価	千葉大学大学院融合科学研究科	中山 泰生
Interaction of L-cysteine with noble metal nanoparticles studies by photoemission spectroscopy	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika
Development and maintenance of the BL-8B	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika
有機／金属界面での真空準位シフトと有効仕事関数の関係解明	近畿大学理工学部	田中 仙君
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
クラスター内包フラーレンの紫外光電子スペクトル	愛媛大学大学院理工学研究科	宮崎 隆文
角度分解紫外光電子分光法を用いた酸化物薄膜上の有機分子薄膜の分子配向	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
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
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 (2)	名古屋大学エコトピア科学研究所	吉田 朋子
電子・電子・イオン同時計測装置の調整実験	新潟大学理学部	彦坂 泰正
フェリ磁性体 GdFeCo の回転検光子法による M_NN 殻共鳴磁気光学効果の研究	東京大学物性研究所	松田 巖
コヒーレント光源の利用技術の開発と固体分光への応用	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
真空紫外発光分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
有機固体専用光電子分光ラインの構築：BL2B の立ち上げ	分子科学研究所	解良 聡
(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
GTL 触媒用高活性 MoO_x 種の L-XANES 構造解析	埼玉工業大学工学部	有谷 博文
酸化物蛍光体中における添加元素の局所環境解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
真空紫外励起での励起子の多重安定化構造の生成とエネルギー移動による発光	秋田大学大学院工学資源学研究科	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	早稲田大学大学院先進理工学研究科	大木 義路
アルカリハライド結晶中の Ti^{4+} 型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
ペルオキシド発生電極触媒能を示す高原子価金属酸化物の電子構造解析	北海道大学大学院工学研究院	青木 芳尚
電子・電子・イオン同時計測による分子 2 価イオン状態の安定性の研究	新潟大学理学部	彦坂 泰正
希薄磁性体における 3d 遷移金属の電子状態解析	早稲田大学理工学術院	山本 知之
ビームライン整備	分子科学研究所	岩山 洋士
LIB 正極用層状酸化物への酸化物コーティングの電池特性への影響の検討	(独)産業技術総合研究所ユビキタスエネルギー研究部門	小林 弘典
真空紫外吸収分光によるアモルファス半導体の光誘起結合状態変化の観察	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) その 2	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
赤外吸収分光によるシンチレーター結晶の電子捕獲中心の起源解明	山形大学理学部	北浦 守
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
鉛フリー圧電体の遠赤外線スペクトル	名古屋工業大学大学院工学研究科	柿本 健一
BL6B 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強相関電子系の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
パイ電子共役系有機半導体における電子格子相互作用	分子科学研究所	解良 聡
トポロジカル絶縁体／磁性体薄膜のヘテロ接合／超格子の電子構造	東京工業大学大学院理工学研究科	平原 徹
中性子輝散性蛍光体の真空紫外光励起による発光特性	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	国立天文台先端技術センター	成影 典之
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
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) その 2	神戸大学大学院人間発達環境学研究科	中川 和道
基板吸着によって発現する巨大 π 共役系分子の擬金属化現象の解明：実験的分子軌道再構成への挑戦	(独)産業技術総合研究所計測フロンティア部門	細貝 拓也
有機－有機ヘテロ界面に発生する「バンドの曲がり」の精密評価	千葉大学大学院融合科学研究科	中山 泰生

Interaction of L-cysteine with noble metal nanoparticles studies by photoemission spectroscopy	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika
Development and maintenance of the BL-8B	千葉大学先進科学センター	KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika
クラスター内包フラーレンの紫外光電子スペクトル	愛媛大学大学院理工学研究科	宮崎 隆文
角度分解紫外光電子分光法を用いた酸化物薄膜上の有機分子薄膜の分子配向	千葉大学大学院融合科学研究科	奥平 幸司
Mn 置換型リン酸鉄リチウム正極活物質の局所構造評価	東北大学金属材料研究所	佐藤 充孝
パーライトから合成した LTA 型ゼオライト試料の構造評価	大阪府立大学大学院工学研究科	中平 敦
in-situ NEXAFS による絶縁材料の研究	九州シンクロトロン光研究センター	小林 英一
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
真空紫外光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
岩塩型 $M_{2-x}Zn_xO$ ($M = Mn, Co, Ni$) 酸化物半導体のバンドギャップ	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
希土類イオン添加酸化物の真空紫外励起による 4f-5d 遷移および 4f-4f 遷移のスペクトル測定と解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉野 正人
太陽光励起レーザー材料の真空紫外から近赤外までの分光特性	岐阜大学工学部	山家 光男
アルカリハライド超微粒子形成とシンチレーション機能	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
高輝度遠赤外放射光を用いた固体物性の研究	大阪大学産業科学研究科	入澤 明典
C_{60} / ペンタセン単結晶ヘテロ界面：埋もれた高秩序有機 pn 接合の価電子バンド構造の実測	千葉大学大学院融合科学研究科	中山 泰生
イリジウム酸化物で発現する強相関系トポロジカル量子相の直接観察	東京大学物性研究所	近藤 猛
電荷・スピンスライブ秩序相を有する高温超伝導体の電子構造	分子科学研究所	田中 清尚
ARPES studies on work function dependence of Rashba splitting and OAM	分子科学研究所	田中 清尚
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
低励起エネルギー角度分解光電子分光による (TMTTF) $_2$ X における電荷秩序転移に伴う電子状態変化の研究	名古屋大学大学院工学研究科	伊藤 孝寛
超高分解能 ARPES による鉄系高温超伝導体の擬ギャップおよび 3 次元超伝導ギャップ構造の観測	名古屋大学大学院工学研究科	羽尻 哲也
3 次元角度分解光電子分光法を用いた Fe_2VAl 合金の高温熱電特性のメカニズムの解明	名古屋工業大学	宮崎 秀俊
非フェルミ液体的挙動を示す III-V 族半導体表面の 1 次元金属状態の研究	大阪大学大学院生命機能研究科	大坪 嘉之
鉄ニクタイト超伝導体 $NdFe(As,P)(O,F)$ 単結晶の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
SiC 上の単層グラフェンにおける電子格子相互作用の直接観察	大阪大学産業科学研究科	田中慎一郎
高分解能・偏光依存角度分解光電子分光による La,P コドーピング $CaFe_2As_2$ の超伝導ギャップ測定	岡山大学大学院自然科学研究科	横谷 尚睦
VUV エリプソメトリーの整備	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
ダイヤモンド中ボロンの発光及びその時間分解測定	福井大学大学院工学研究科	福井 一俊
真空紫外領域における $CaSrF_2$ 単結晶の光伝導特性評価	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 晋吾
鉄系超伝導体の真空紫外領域分光	大阪大学大学院理学研究科	中島 正道
真空紫外反射によるニオブリン酸ガラス中のニオブ d0 イオンの電子状態の研究	(独)産業技術総合研究所ユビキタスエネルギー研究部門	北村 直之
コヒーレント光源の利用技術の開発と固体分光への応用	大阪大学大学院生命機能研究科	木村 真一
真空紫外発光分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
有機固体専用光電子分光ラインの構築：BL2B の立ち上げ	分子科学研究所	解良 聡
質量選別されたアルゴン二量体および三量体の吸収スペクトル計測	分子科学研究所	岩山 洋士

(7) 施設利用

① 機器センター

(通年)

結晶構造解析と量子化学計算を用いた有機半導体の固相光物性の解明	静岡大学工学部	植田 一正
非対称型キレート金属錯体の合成と構造解析	静岡大学理学部	仁科 直子
新規なキャリア輸送材料の合成と電子デバイスへの応用	名古屋工業大学大学院工学研究科	小野 克彦
銅硫化物ナノ粒子の近赤外局在プラズモン共鳴における三次非線形光学特性の評価	名古屋工業大学大学院物質工学	濱中 泰
銅カルコゲナイドナノ粒子の発光特性に関する研究	名古屋工業大学大学院物質工学	濱中 泰
シクロデキストリン類と薬物の包接複合体の構造解析	愛知学院大学薬学部	小川 法子
新規な光センサーの生化学的な解析	日本大学生物資源科学部	高野 英晃

(前期)

X線結晶構造解析による分子構造の決定
Yb₂ 分子のレーザー分光
スクレオソームと核内タンパク質の相互作用解析
重水素置換ベンゼンのレーザー分光
好熱性紅色細菌由来の光捕集 1 反応中心複合体における耐熱化の熱力学的解析
シッフ塩基金属錯体複合系の円偏光紫外光誘起分子配向
シグナル分子活性化イメージングプローブの開発

豊橋技術科学大学環境・生命工学系
京都大学大学院理学研究科
横浜市立大学大学院生命医科学研究科
京都大学大学院理学研究科
神戸大学大学院農学研究科
東京理科大学理学部
生理学研究所

藤澤 郁英
馬場 正昭
加藤 秀典
国重 沙知
木村 行宏
秋津 貴城
村越 秀治

(後期)

ポルフィリン結合タンパク質の機能解析
シグナル分子活性化イメージングプローブの開発
重水素置換ベンゼンのレーザー分光
Yb₂ 分子のレーザー分光
光合成タンパク質間相互作用の機構解明
⁴⁸Ca 二重ベータ崩壊研究の基礎研究：BC18 樹脂によるイオン吸着挙動解析
新規有機半導体分子の結晶構造解析
紅色光合成細菌による有害金属吸着能に関する研究
X線結晶構造解析による分子構造の決定
金属間結合を有する多核金属錯体の構造解析
シッフ塩基金属錯体複合系の円偏光誘起紫外光キラル分子配向
ブロック共重合体の相分離により形成されるナノドメインの NMR による運動性解析
糖脂質の機能分子科学研究へ向けた固体 NMR 計測

名古屋大学大学院理学研究科
生理学研究所
京都大学大学院理学研究科
京都大学大学院理学研究科
茨城大学理学部
東京工業大学原子炉工学研究所
東京工業大学理工学研究科
神戸大学農学研究科
豊橋技術科学大学環境・生命工学系
島根大学総合理工学研究科物質化学領域
東京理科大学理学部
東京工業大学資源化学研究所
九州大学大学院理学研究院

中島 洋
村越 秀治
国重 沙知
馬場 正昭
大友 征宇
奥村 森
芦沢 実
木村 行宏
藤沢 郁英
片岡 祐介
秋津 貴城
日比 裕理
松森 信明

② 装置開発室

(前期)

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
マイクロ波イメージング
直交方位を規定する単結晶試料の磁気測定用テフロン極小セル作製
ポルフィリン単分子磁石の単分子電気伝導特性評価装置開発

名古屋大学革新ナノバイオデバイス研究センター
自然科学研究機構核融合科学研究所
京都大学国際高等教育院
大阪大学大学院理学研究科

宇理須恒雄
長山 好夫
加藤 立久
田中 大輔

(後期)

マイクロ波イメージング
ポルフィリン単分子磁石の単分子電気伝導特性評価装置開発
超音波加工装置における低エネルギー損失なヘッド固定方法の開発
A/D 変換基板を用いた健康センサーシステムの開発
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
マイクロチップレーザー用機構部品制作

自然科学研究機構核融合科学研究所
大阪大学大学院理学研究科
(独)産業技術総合研究所先進製造プロセス研究部門
名古屋工業大学大学院工学研究科
名古屋大学革新ナノバイオデバイス研究センター
自然科学研究機構核融合科学研究所

長山 好夫
田中 大輔
銘苅 春隆
増田 秀樹
宇理須恒雄
安原 亮

③ 計算機利用

半導体における不純物電子状態並びに振動形成エネルギーの第一原理的研究
分子内および分子間電子移動の分子軌道法による研究
振動分光に対応した第一原理計算準拠の分極水モデルの開発と種々の分光スペクトルのシミュレーション
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と反応動力学
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
金属蛋白質の電子構造制御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

慶應義塾大学理工学部
神奈川大学理学部
京都大学大学院理学研究科
千葉大学大学院薬学研究院
北海道大学触媒化学研究センター
名古屋大学大学院理学研究科
京都大学福井謙一記念研究センター
京都大学大学院工学研究科
大阪大学蛋白質研究所
広島大学大学院理学研究科
京都大学福井謙一記念研究センター
東京大学大学院工学系研究科

山内 淳
田仲 二郎
谷村 吉隆
星野 忠次
長谷川 淳也
岡本 祐幸
神 茂好
立花 明知
鷹野 優
相田美砂子
諸熊 奎治
押山 淳

階層的電子状態計算理論とナノ構造プロセス	鳥取大学大学院工学研究科	星 健夫
革新的量子計算科学の創造と大規模シミュレーション	量子化学研究協会研究所	中辻 博
タンパク質中 D- アミノ酸残基の起源および機能	金沢大学医薬保健研究域	小田 彰史
色素増感太陽電池に関する理論的研究	(独)産業技術総合研究所	北尾 修
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	神奈川工科大学基礎・教養教育センター	神谷 克政
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	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
溶液界面の構造と機能の計算化学	東北大学大学院理学研究科	森田 明弘
遷移金属触媒をもちいた二酸化炭素変換反応及びプロピレンの重合の機構解析	東京大学大学院工学系研究科	野崎 京子
理論予測振動スペクトルによる 1- ナフトール - (アンモニア) _n クラスターの励起状態プロトン移動の研究	東京工業大学資源化学研究所	宮崎 充彦
バクテリア ATP 合成酵素 ε サブユニットの ATP 結合の理論解析	京都大学大学院理学研究科	高田 彰二
分子間相互作用理論とその分子クラスター研究への応用	分子科学研究所	岩田 末廣
第一原理反応ダイナミクスの多角的展開	北海道大学大学院理学研究院	武次 徹也
真空及び固体中における分子とナノ構造の磁性理論	横浜国立大学大学院工学研究院	Raebiger Hannes
超球面探索法を用いた結晶構造の予測	和歌山大学システム工学部	山門 英雄
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	横浜国立大学大学院工学研究院	上田 一義
一重項および三重項カルベンの分子設計	広島大学大学院理学研究科	山本 陽介
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
分子ナノカーボンの構造と物性	名古屋大学大学院理学研究科	瀬川 泰知
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
自由エネルギー計算によるペプチド-脂質膜の相互作用解析	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
溶媒が有機反応に及ぼす影響に関する理論研究	高知大学大学院総合人間自然科学研究科	金野 大助
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
光合成酸素発生中心 CaMn ₄ O 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
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
量子化学計算と QM/MM 法を利用した大規模複雑系に関する理論研究	名古屋大学大学院理学研究科	Irle Stephan
レプリカ交換アンブレラサンプリング法を用いた蛋白質構造変化ダイナミクスの研究	名古屋大学大学院理学研究科	横 互介
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
アクトミオシン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
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	横浜国立大学大学院生命医科学研究科	森次 圭
ウレア基を有する蛍光アニオンセンサーの振電相互作用機構による蛍光出力スイッチング	北海道大学大学院工学研究科	佐藤信一郎
非共有結合相互作用ならびに生体分子系の量子化学計算	北里大学一般教育部	江川 徹
軟X線光化学に関する理論的研究	広島大学サステナブル・ディベロップメント実践研究センター	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
ナノカーボンにおける光誘起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
分子計算による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
タンパク質の安定性に関する研究	立命館大学薬学部	加藤 稔
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
種々の反応場における化学反応および光物理過程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
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
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
水溶液中におけるタンパク質間相互作用に関する理論的研究	金沢大学理工研究域	川口 一朋
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

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
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
第一原理計算手法にもとづくナノ構造の形成と機能発現に関する研究	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
クラスターイオンの幾何構造および衝突断面積計算	東北大学大学院理学研究科	大下慶次郎
緩和モード解析による高分子溶融体系の粘弾性の研究	慶應義塾大学理工学部	岩岡 伸之
分子シミュレーションによる蛋白質の構造変化に伴う自由エネルギーと反応座標に関する研究	近畿大学先端技術総合研究所	米澤 康滋
高濃度エマルジョンのジャミング転移点近傍におけるシア応力緩和の MD シミュレーション	大阪大学大学院理学研究科	吉野 元
ガラス系における遅いダイナミクスの理論・シミュレーション研究	新潟大学大学院自然科学研究科	金 鋼
二酸化炭素を化学吸収したイオン液体中における水素結合による会合化学種に関する MD シミュレーション	同志社大学理工学部	八坂 能郎
第一原理経路積分インスタント法によるトロポロンのトンネル分裂	東京大学大学院総合文化研究科	河津 励
タンパク質に特有なダイナミクスとその分子基盤の解明	横浜市立大学大学院生命医科学研究科	瀨上壮太郎
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機構	鳥取大学大学院工学研究科	早瀬 修一
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
クロコン酸結晶における光誘起巨視的強誘電消失の理論的解明	高エネルギー加速器研究機構	岩野 薫
ホウ素置換典型元素化合物の性質および反応挙動の解明	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
分子性液体における大規模計算機シミュレーション	岐阜大学工学部	寺尾 貴道
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学研究科	立川 仁典
スーパーシリル基を積極的に活用した有機合成反応に関する理論的研究	愛知教育大学理科教育講座	赤倉松次郎
4d または 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
有機イオンの電子状態の ab initio MO 計算	奈良女子大学研究院自然科学系	竹内 孝江
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
薬物と飲食物に含まれる生理活性物質との相互作用解析	福岡大学薬学部	池田 浩人
非晶質有機半導体材料の能動的屈折率制御を目指した幾何構造・電子構造・分子分極率の計算	山形大学大学院理工学研究科	横山 大輔
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物質工学科	前島 展也
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
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
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
キラルシッフ塩基金属錯体の光学スペクトルの DFT 計算	東京理科大学理学部	秋津 貴城
溶液中での秩序構造に関する MD/3D-RISM シミュレーション	愛媛大学大学院理工学研究科	宮田 竜彦
酸化還元ユニットを有する三次元パイ共役系分子の開発	北里大学理学部	長谷川真士
かさ高い芳香族アジド基が有する高いクリック反応性に関する研究	東京医科歯科大学生体材料工学研究所	吉田 優
計算化学手法を用いた貴金属フリー燃料電池に関する研究	(独)産業技術総合研究所	崔 隆基
シクロデキストリンによる β -ラクトム系抗生物質の包接挙動のエネルギー解析	近畿大学生物理工学部	藤澤 雅夫
化学反応の ab initio 計算による研究	愛媛大学大学院理工学研究科	長岡 伸一
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
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
密度汎関数法による金属クラスターの構造および反応過程の解析	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
酵素加水分解における酵素-基質相互作用	明星大学理工学部	松本 一嗣
糖質の構造解析	(財)野口研究所	山田 一作
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院	中野 幸司
生命関連連環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
蛋白質系の分子シミュレーションの緩和モード解析手法	慶應義塾大学理工学部	光武亜代理
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
第一遷移金属を用いた配位重合触媒の探索	東京大学大学院工学系研究科	伊藤 慎庫
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
量子モンテカルロ法による多原子分子の非調和振動状態解析	横浜市立大学大学院生命ナノシステム科学研究科	北 幸海
水素結合系における光化学過程の理論的研究	弘前大学大学院理工学研究科	山崎 祥平
計算科学的手法によるノルボルネン-1-アルケン共重合の反応機構解析	広島大学大学院工学研究院	塩野 毅
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
励起状態化学反応に関する理論的研究	大阪大学大学院基礎工学研究科	重田 育照
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	分子科学研究所	江原 正博
アミロイド線維形成を理解するための分子動力学シミュレーション	分子科学研究所	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
気相分子クラスターの運動状態制御とダイナミクス観測	分子科学研究所	水瀬 賢太
巨大分子の効率的な構造最適化計算プログラムの開発	分子科学研究所	石村 和也
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再配向機構の解明	分子科学研究所	加藤 晃一
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
4量体型サルコシン酸化酵素の基質と生成物のチャネルの動力学的解析	北里大学理学部	米田 茂隆
光合成水分分解反応における電子・プロトン移動機構	名古屋大学大学院理学研究科	野口 巧
2-ハロ酸脱ハロゲン化酵素と耐熱性システイン合成酵素の反応機構解析	長浜バイオ大学	中村 卓
ホタルルシフェラーゼの構造予測	兵庫県立大学大学院工学研究科	加藤 太一郎
対イオンによる DNA 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への電位の寄与の解明とそのイオン選択性との関係	福井大学医学部	老木 成稔
ドーピングされたグラフェンの構造およびその性質	東京大学大学院新領域創成科学研究科	今村 岳
超臨界水の分子内振動と並進ダイナミクス	徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部	吉田 健
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
近接場光と分子の相互作用	北海道大学大学院理学研究院	岩佐 豪
高圧氷の結晶化ダイナミクスの解明	岡山大学大学院自然科学研究科	望月 建爾
[2+2] 光環化付加反応の生成物選択性に関する理論的研究	岐阜大学工学部	宇田川 太郎
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	早稲田大学先進理工学部	武田 京三郎
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
分子の電子状態と化学反応のポテンシャル面の理論的研究	名古屋大学大学院情報科学研究科	古賀 伸明
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	リントウ オト正美
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
塩基で安定化されたホウ素を配位原子とする遷移金属錯体の合成と反応	東北大学大学院理学研究科	渡邊 孝仁
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
量子化学計算に基づく固体触媒の構造および反応性予測	東京大学大学院総合文化研究科	増井 洋一
グリオキサラーゼIとイソフラボノイド阻害剤の相互作用の分子動力学解析	名城大学薬学部	金田 典雄
ClpXP プロテアーゼの基質認識特異性の構造メカニズムの解明	千葉大学大学院薬学研究院	佐藤 慶治
単一分子電子素子のための分子設計	大阪大学大学院理学研究科	小川 琢治
多孔性材料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
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
4次元 MRI による脳の機能及び構造解析	生理学研究所	福永 雅喜
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
金属クラスターと小分子の相互作用	東京大学大学院理学系研究科	小安喜 一郎
分子動力学計算による水溶液の局所構造の研究	分子科学研究所	長坂 将成

量子化学計算による海底熱水噴出孔における炭素 1 原子を含む分子の化学反応過程の解明	早稲田大学国際教養学部	稲葉 知士
量子化学計算による金属酵素活性中心の分子構造解析	兵庫県立大学大学院生命科学研究科	太田 雄大
光受容タンパク質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
第一原理計算手法に基づくナノ電子材料のプロセス／機能制御に関する研究	島根大学大学院総合理工学研究科	影島 博之
非平面有機半導体の分子設計	分子科学研究所	鈴木 敏泰
有機ホウ素触媒を用いた Hantzsch エステルによるアルデヒドの水素化反応の反応機構解析	分子科学研究所	辻 裕章
ゼオライトの空洞容積に依存する選択的反応機構の理論的研究	東京工業大学大学院総合理工学研究科	馬場 俊秀
二酸化炭素を用いる不飽和アミン類の触媒的環化カルボキシル化反応における反応機構解析	東京工業大学大学院理工学研究科	長谷 俊
有機ケイ素化合物の構造と性質	群馬大学理工学研究科	久新 莊一郎
第一原理計算を用いた分子動力学法の開発と界面への応用	大阪大学大学院基礎工学研究科	大戸 達彦
厳密対角化法による遷移金属酸化物の安定性	沼津高専電気電子工学科	大澤 友克
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
DNA と金属錯体との相互作用	中央大学理工学部	千喜良 誠
量子化学計算と実験に基づくゼオライト骨格中のアルミニウム原子位置制御	東京大学大学院工学系研究科	大久保 達也
ガラス転移動力学の数値的研究	京都大学福井謙一記念研究センター	池田 昌司
計算機および生化学実験によるタンパク質分子デザイン	分子科学研究所	古賀 信康
青色光受容体蛋白質における電子移動反応の理論的研究	名古屋大学大学院理学研究科	倭 剛久
強相関電子系の電子状態計算	神戸大学大学院システム情報学研究科	上島 基之
ヒトタンパク質における O-GlcNAc 修飾タンパク質および天然変性タンパク質の配列・構造解析	立命館大学生命科学部	伊藤 將弘
二酸化炭素水素化に関する凝集系の分子シミュレーション	(独)理化学研究所	畠山 允
ポルフィリン単分子磁石の電子構造評価	大阪大学大学院理学研究科	田中 大輔
ヒトガレクチン 1 のファルネシル基結合構造	東北大学大学院薬学研究科	平松 弘嗣
色素増感太陽電池の電子移動過程の理論的研究	名古屋大学エコトピア科学研究所	安田 耕二
遷移金属ーベンゼンサンドイッチクラスターの幾何構造と電子物性の評価	慶應義塾大学大学院理工学研究科	増潤 継之助
優れた光増感能力を有する新奇有機色素の開発のための理論的検討	立教大学理学部	三井 正明
機能性高分子の設計	関西大学化学系生命工学部	三田 文雄
Ni@Ag バイメタル触媒の CO 酸化反応に関する密度汎関数法計算	名古屋大学大学院工学研究科	沢邊 恭一
有機分子触媒反応の機構解明	分子科学研究所	榎山 儀恵
電子受容性複素芳香環を基軸とする π 共役分子の自己会合挙動の解明	群馬大学大学院理工学部	加藤 真一郎
高周期典型元素を含む遷移金属錯体の反応機構の検討	群馬大学大学院理工学部	村岡 貴子
イオン液体中におけるニトロアニリン化合物の溶媒和構造	同志社大学理工学部	木村 佳文
配座異性体の自動探索法を用いた自由エネルギー解析	東北大学大学院理学研究科	岸本 直樹
ダブルハイブリッド密度汎関数法を用いたフラレン生成熟の高精度計算	(独)理化学研究所	川島 雪生
ソフトマター系のマルチスケールシミュレーション	東北大学大学院理学研究科	村島 隆浩
化学反応動力学のための量子化学計算	分子科学研究所	岩山 洋士
イオン性共役化合物の励起状態構造計算	名古屋工業大学大学院	高木 幸治
軽元素を活用した機能性電子材料の創出	東京大学大学院理学系研究科	神坂 英幸
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 プログラムの開発	分子科学研究所	奥村 久士
(計算物質科学イニシアティブ利用枠)		
全原子シミュレーションによるウィ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
太陽電池および人工光合成における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算	東京大学大学院工学研究科	山下 晃一
バイオマス利用のための酵素反応解析	九州大学高等研究院理学研究院	吉田 紀生
分子における電子の動的過程と多体量子動力学	東京大学大学院総合文化研究科	高塚 和夫
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	名古屋工業大学大学院工学研究科	尾形 修司

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～'07		'08		'09		'10		'11		'12		'13		'14		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	105	857	2	22	1	28	0	0	1	13	1	21	2	27	1	11	人数： 登録人数
協力研究	3,735	5,246	90	200	119	412	122	316	108	292	123	329	64	183	64	207	〃
招へい 協力研究	195	197	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	〃
所長 招へい	3,995	3,995	159	159	148	148	148	148	78	78	93	93	156	156	79	79	人数： 旅費支給者
研究会	320	5,329	4	105	5	110	6	137	4	105	10	207	10	254	5	121	〃
若手研究会等	—	—	1	12	1	10	1	14	1	11	1	19	1	21	2	19	〃
岡崎コンファ レンス	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	1	29	1	18	1	30	〃
施設利用 Ⅰ	1,855	4,173	72	177	60	179	66	166	98	266	60	254	41	105	41	140	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)	4,589	15,133	147	656	171	676	170	666	190	668	190	813	204	786	199	751	〃
協力研究 (ナノプラット)	374	784	55	130	36	86	35	94	25	64	15	51	52	123	37	65	〃
施設利用 (ナノプラット)	181	412	31	103	39	107	25	89	20	35	52	150	132	378	167	402	〃
合計	15,349	36,126	561	1,564	580	1,756	573	1,630	525	1,532	546	1,966	663	2,051	596	1,825	
経費	545,194		—		—		—		—		—		—		—		千円

＊施設利用Ⅱは'00より電子計算機施設利用

('14年度の数値は、2015.2.2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～'07		'08		'09		'10		'11		'12		'13		'14		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	1	1	1	1	人数： 旅費支給者
研究会	39	695	2	18	2	44	1	1	2	68	4	63	1	37	1	37	〃
施設利用	2,675	13,109	156	708	147	660	140	659	139	682	136	706	142	732	125	649	件数： 許可件数 人数： 許可人数
合計	3,150	15,422	159	727	149	704	141	660	145	754	146	775	144	770	127	687	
経費	230,477		—		—		—		—		—		—		—		千円

('14 年度の数値は、2015.2.2 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
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
13	0	0	5	60	149	214
合計	71	51	446	216	1,298	2,082

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
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
13	25	6	18	11	44	42	0	68	214
合計	242	65	139	198	349	390	29	670	2,082

表3 海外からの研究者（2014年度）

1. 外国人運営顧問			
WALMSLEY, Ian A.	イギリス	オックスフォード大学副学長	
O'HALLORAN, Thomas V.	アメリカ	ノースウェスタン大学教授	
2. 分子科学研究所外国人研究職員			
AZIZ, Emad	ドイツ	ベルリン自由大学教授	'14. 6. 7-'14.12. 6
3. 日本学術振興会招へい外国人研究者等			
GU, Cheng	中国	分子科学研究所 IMS フェロー	'14. 4. 1-'16. 3.31
4. 国際共同研究			
PIPART, Franck	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'14. 3.24-'14. 8.23
LECUYER, Thomas	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'14. 3.24-'14. 8.23
DUCHESNE, Constance	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'14. 3.24-'14. 8.23
LE GULLUCHE, Anne-Charlotte	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'14. 3.24-'14. 8.23
WOLANIN, Julie	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'14. 3.24-'14. 8.23
ISLAM, Zeba	インド	インド工科大学ボンベイ校大学院生	'14. 5. 6-'14. 6.30
JHUNJHUNWALA, Tarun	インド	インド工科大学ボンベイ校大学院生	'14. 5. 6-'14. 6.30
PEUVOT, Kevin	フランス	フランス国立パリ高等化学学校大学院生	'14. 6. 1-'14. 8.30
ZENG, Qingcong	オーストラリア	クィーンズランド大学大学院生	'14. 6. 4-'14. 9. 1
AZIZ, Emad	ドイツ	ベルリン自由大学博士研究員	'14. 6. 6-'14.12. 7
ROSENDAHL, Scott	カナダ	マックマスター大学博士研究員	'14. 6.21-'14. 7. 6
PAN-IN, Porntip	タイ	チュラロンコン大学博士研究員	'14. 6.22-'14. 6.25
			'14.10.19-'14.10.27
NOIKHAM, Medena	タイ	マヒドン大学学部学生	'14. 6.24-'14. 8. 9
MEKSERIWATTANA, Wid	タイ	マヒドン大学学部学生	'14. 6.24-'14. 8. 9
TUREK, Yusuf	中国	中国科学院理論物理学研究所大学院生	'14. 7. 1-'14. 9.27
SHIN, Woojong	韓国	浦項工科大学校学部学生	'14. 7. 4-'14. 7.16
RYU, Sae Hee	韓国	浦項工科大学校学部学生	'14. 7. 4-'14. 7.19
WANG, HsiaoTsu	台湾	清華大学大学院生	'14. 7. 6-'14. 7.12
HSIEH, ShangHsien	台湾	淡江大学大学院生	'14. 7. 6-'14. 7.12
			'14.11.16-'14.11.22
KIM, Jimin	韓国	浦項工科大学校学部学生	'14. 7.14-'14. 7.19
KIM, Keun Su	韓国	浦項工科大学校助教	'14. 7.14-'14. 7.19
			'15. 2. 3-'15. 2. 5
ARRUA, Dario	オーストラリア	タスマニア大学博士研究員	'14. 7.15-'14. 7.21
CHIOU, Guan-Chiun	台湾	国立交通大学大学院生	'14. 8.19-'14. 8.23
LIN, Ming-Wei	台湾	台湾国立放射光研究センター博士研究員	'14. 8.19-'14. 8.23
LAI, Yu-Ling	台湾	台湾国立放射光研究センター博士研究員	'14. 8.19-'14. 8.23
FLESCH, Roman	ドイツ	ベルリン自由大学大学院生	'14. 9.13-'14. 9.23
YAMAMOTO, Kenji	ドイツ	ベルリン自由大学大学院生	'14. 9.13-'14. 9.20
RANCAN, Fiorenza	ドイツ	University Medicine Berlin 博士研究員	'14. 9.13-'14. 9.20
RÜHL, Eckart	ドイツ	ベルリン自由大学教授	'14. 9.14-'14. 9.20
SAIN, Basudeb	インド	インド科学振興協会大学院生	'14. 9.16-'14.12. 4
NGUYEN, Quynh	アメリカ	テンプル大学学部学生	'14. 9.30-'15. 1.31
SUWILAI, Chaveanghong	タイ	マヒドン大学大学院生	'14.10.14-'15. 3.31
KEERATI, Soongpilai	タイ	カセサート大学大学院生	'14.10.14-'15. 3.28
LEE, Sze Koon	マレーシア	マラヤ大学大学院生	'14.10.15-'15. 3.27
WOI, Pei Meng	マレーシア	マラヤ大学講師	'14.10.17-'15. 1.17
HOTARAT, Wiparat	タイ	チュラロンコン大学大学院生	'14.11. 4-'15. 3.31
SRISA-ART, Monpichar	タイ	チュラロンコン大学講師	'14.11.26-'14.12.29
CHOOPAWA, Tianchai	タイ	チュラロンコン大学大学院生	'15. 1. 8-'15. 1.30
PETIT, Tristan	ドイツ	ヘルムホルツセンターベルリン博士研究員	'14.10.10-'14.10.18
WANG, Yu-Fu	台湾	淡江大学大学院生	'14.11.16-'14.11.22
CHIOU, Jau-Wern	台湾	国立高雄大学准教授	'14.11.16-'14.11.22

AKA, Gerard Philoppe	フランス	フランス国立パリ高等化学学校教授	'14.11.21-'14.12.12
BRANDENBURG, Tim	ドイツ	ヘルムホルツセンターベルリン大学院生	'14.11.29-'14.12.14
GOLNAK, Ronny	ドイツ	ヘルムホルツセンターベルリン大学院生	'14.11.29-'14.12.14
SHIN, Woo Jong	韓国	浦項工科大学校大学院生	'15. 1.29-'15. 2. 7
CHOI, Mu Yeol	韓国	浦項工科大学校大学院生	'15. 1.29-'15. 2.14
JUNG, Sung Won	韓国	浦項工科大学校大学院生	'15. 2. 5-'15. 2.14
KIM, Jeongkyu	韓国	浦項工科大学校大学院生	'15. 1.29-'15. 2.14
PARK, Min Ju	韓国	浦項工科大学校大学院生	'15. 1.29-'15. 2.14
5. 所長招へい協力研究員			
WALES, David	イギリス	University of Cambridge 教授	'14. 3.24-'14. 4.12
PUPILLO, Guido	フランス	ISIS Laboratoire de Physique Quantique 研究員	'14. 5.18-'14. 5.24
BAGCHI, Biman	インド	Indian Institute of Science 教授	'14.11. 5-'14.11.15
今清水 正彦	アメリカ	Center for Cancer Research, National Cancer Bldg. 博士研究員	'14.11.8-'14.11.13
澤野 卓大	アメリカ	University of Chicago 博士研究員	'14.10.1-'15.3.31
6. 特別訪問研究員			
KOSWATTAGE, Kaveenga Rasika	スリランカ	千葉大学特任助教	'14. 4. 1-'15. 3.31
WEI, Hao	中国	上海交通大学准教授	'14. 4. 1-'14.11.30
DHITAL, Raghu Nath	ネパール	大阪大学大学院学振外国人特別研究員	'14. 4. 1-'15. 3.31
NASSIRI, Mohammadreza	イラン	Ferdowsi University of Mashhad 准教授	'14. 7. 1-'14.12.28
DING, Xuesong	中国	National Center for Nanoscience and Technology 助教	'14. 9. 9-'14.12. 6
7. 招へい研究員			
NAMUANGRUK, Supawadee	タイ	National Nanotechnology Center 研究員	'14. 4. 5-'14. 4. 9
JUNGSUTTIWONG, Siriporn	タイ	Ubon Ratchathani University 助教	'14. 4. 5-'14. 4. 9
CARLO, Adamo	フランス	Ecole nationale superieure de chimie de Paris 教授	'14. 4. 6-'14. 4.11
VINICH, Promarak	タイ	Suranaree University of Technology 准教授	'14. 4. 6-'14. 4. 9
FRENKING, Gernot	ドイツ	philipps-universität marburg 教授	'14. 4. 6-'14. 4.10
孫 世永	韓国	Chungbuk National University 研究員	'14. 4.19-'14. 4.21
JEPPSON, Pamela	アメリカ	Thomas M. Cooley Law School 大学院生	'14. 4.21-'14. 4.30
ZHANG, Zhigang	中国	University of Beijing 教授	'14. 4.25-'14. 4.27
SOROKINA, Irina	ノルウェー	Norwegian University 教授	'14. 4.25-'14. 4.26
ZHANG, Yu-Xiang	中国	Xidian University 大学院生	'14. 5. 7-'14. 7.25
PRIYAKUMAR, Deva	インド	The International Institute of Information Technology, Hyderabad 准教授	'14. 5.10-'14. 8. 7
MULLER, Dethlefs Klaus	イギリス	The University of Manchester 教授	'14. 5.15-'14. 5.16
SOMMERFELD, Thomas	アメリカ	Southeastern Louisiana University 准教授	'14. 5.17-'14. 5.24
SAVARESE, Marika	フランス	Ecole National Superieure de Chimie de Paris 博士研究員	'14. 7. 6-'14. 7.15
LI, Yongfang	中国	中国科学院化学研究所教授	'14. 7. 8-'14. 7.11
CHINAPANG, Pondchanok	タイ	Chulalongkorn University 大学院生	'14. 8.12-'14. 9.30
CAMMI, Roberto	イタリア	Universita' di Parma 教授	'14. 8.27-'14. 9. 7
井本 翔	ドイツ	Ruhr-University Bochum 博士研究員	'14. 9. 1-'14. 9. 4
小杉 貴洋	アメリカ	University of Washington 上席研究員	'14. 9.16-'14. 9.19
櫻井 敦教	スウェーデン	Lund University 博士研究員	'14. 9.26-'14. 9.27
JAKSCH, Dieter	イギリス	University of Oxford 教授	'14. 9.28-'14.10. 1
LORENZ, Victor	ドイツ	ベルリン自由大学研究員	'14. 9.30-'14.10. 3
MA, Shengian	アメリカ	University of South Florida 助教	'14.10. 1-'14.10. 4
HEINE, Thomas	ドイツ	Jacobs University 教授	'14.10. 1-'14.10. 3
ADDICOAT, Matthew	ドイツ	Jacobs University 博士研究員	'14.10. 1-'14.10. 3
SVENSSON, Bengt	スウェーデン	Lund University 名誉教授	'14.10. 8-'14.10.11
MICHL, Josef	チェコ	Institute of Organic Chemistry and Biochemistry ASCR 教授	'14.10.29-'14.10.30
IMPENG, Sarawoot	台湾	Kasetsart University 大学院生	'14.11. 5-'15. 1.31
HSIEH, Yu-Hsin	台湾	National Taiwan University 大学院生	'14.11.17-'14.11.25
BEN, Zhong Tang	香港	The Hong Kong University 教授	'14.11.27-'14.12. 1
MAITARAD, Phornphimon	中国	Shanghai University Nano Science and Technology Research Center 博士研究員	'14.12. 1-'14.12.31
CHALUPSKY, Jakub	チェコ	Institute of Organic Chemistry and Biochemistry AS CR, v.v.i. 研究員	'15. 1. 1-'15. 1.21
GE, Maofa	中国	Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences 教授	'15. 1.13-'15. 1.17

ZHU, Xiaozhang	中国	Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences 教授	'15. 1.13-'15. 1.17
CHEN, Hui	中国	Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences 教授	'15. 1.13-'15. 1.17
YU, Ping	中国	Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences 准教授	'15. 1.13-'15. 1.17
CHEN, Ting	中国	Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences 准教授	'15. 1.13-'15. 1.17
CHEN, Yu	中国	Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
FEI, Huafeng	中国	Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
HOU, Jue	中国	Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
HU, Lianrui	中国	Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
LV, Kai	中国	Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
WEI, Simin	中国	Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
YANG, Chunpeng	中国	Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
ZHANG, Cheng	中国	Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
AHN, Seihwan	韓国	KAIST 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
KIM, Sungmin	韓国	KAIST 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
YANG, Siyeong	韓国	KAIST 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
KANG, Dong-gu	韓国	KAIST 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
EOM, Gayoung	韓国	KAIST 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
SHIN, Seung Min	韓国	KAIST 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
PARK, Joonwoo	韓国	KAIST 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
EOM, Taedaeheong	韓国	KAIST 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
KIM, Junwoo	韓国	Pohang University 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
HEO, Wooseok	韓国	Pohang University 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
ZHANG, Yongjie	中国	Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
ZOU, Xiaoran	中国	Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
PARK, Kiyong	韓国	KAIST 助教	'15. 1.13-'15. 1.17
KIM, Hyungjun	韓国	KAIST 助教	'15. 1.13-'15. 1.17
KIM, Bongsoo	韓国	KAIST 教授	'15. 1.13-'15. 1.17
JOO, Taiha	韓国	浦項工科大学教授	'15. 1.13-'15. 1.17
KIM, Jeongho	韓国	Inha University 助教	'15. 1.13-'15. 1.17
TAKAHASHI, Kaito	台湾	Institute of Atomic and molecular Sciences,academia sinica 准教授	'15. 1.13-'15. 1.17
HUNG, Chin-te	台湾	Institute of Atomic and molecular Sciences,academia sinica 博士研究員	'15. 1.13-'15. 1.17
SHANDILYA, Bhavesh Kumar	台湾	Institute of Atomic and molecular Sciences,academia sinica 博士研究員	'15. 1.13-'15. 1.17
CHEN, Yun-Wen	台湾	Institute of Atomic and molecular Sciences,academia sinica 博士研究員	'15. 1.13-'15. 1.17
USMAN, Muhammad	台湾	Institute of Atomic and molecular Sciences,academia sinica 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
LIN, Wen-Chen	台湾	Institute of Atomic and molecular Sciences,academia sinica 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
SU, Long-Jyun	台湾	Institute of Atomic and molecular Sciences,academia sinica 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
TUNUGUNTLA, Venkatesh	台湾	Institute of Atomic and molecular Sciences,academia sinica 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
CHAO, Wen	台湾	Institute of Atomic and molecular Sciences,academia sinica 大学院生	'15. 1.13-'15. 1.17
MASSIOT, Julien	台湾	Institute of Atomic and molecular Sciences,academia sinica 助手	'15. 1.13-'15. 1.17
WU, Yueh-Chun	台湾	Institute of Atomic and molecular Sciences,academia sinica 助手	'15. 1.13-'15. 1.17
CHEN, Kuei-Hsien	台湾	Institute of Atomic and molecular Sciences,Academia Sinica 研究員	'15. 1.13-'15. 1.17
CHANG, Ming-Shien	台湾	Institute of Atomic and molecular Sciences,Academia Sinica 研究員	'15. 1.13-'15. 1.17
KUO, Jer-Lai	台湾	Institute of Atomic and molecular Sciences,Academia Sinica 研究員	'15. 1.13-'15. 1.16
YU, Tsyr-Yan	台湾	Institute of Atomic and molecular Sciences,Academia Sinica 研究員	'15. 1.13-'15. 1.16
TUKIAINEN, Mikko	フィンランド	University of Turku 大学院生	'15. 1.14-'15. 3.28
HIRUNSIT, Pussana	タイ	National Nanotechnology Center 研究員	'15. 1.26-'15. 3.28
CAHEN, David	イスラエル	Weizmann Institute of Science 教授	'15. 1.28-'15. 1.29
PANG, Shengshi	アメリカ	University of Southern California 博士研究員	'15. 1.31-'15. 2.18
鈴木 史花	カナダ	University of British Columbia 大学院生	'15. 2. 7-'15. 3.25
8. 岡崎コンファレンス			
TSUN-KONG, Sham	カナダ	University of Western Ontario 教授	'15. 2. 1-'15. 2. 7
LIN, X. Chen	アメリカ	Argonne National Laboratory 教授	'15. 2. 3-'15. 2. 6
STEPHEN, P. Cramer	アメリカ	University of California 教授	'15. 2. 1-'15. 2. 5
PETER, Fischer	アメリカ	University of California 助教授	'15. 2. 2-'15. 2. 5
ANDREI, Rogalev	フランス	European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) ビームライン担当者	'15. 2. 3-'15. 2. 9

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	2014.10.14	2018.10.13	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 間の分子科学における協 力に関する覚書	共同研究（物質関連分子科 学、原子、分子との光科学、 理論と計算の分子科学）	2014. 2.20	2017. 2.19	所長	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	2014.10.23	2019.10.22	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

(2014.12.31 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26年度は下記の第74回岡崎コンファレンスを開催した。

会 議 名：第74回岡崎コンファレンス

“Frontier of X-Ray Absorption Spectroscopy and Molecular Science”

期 間：2015年2月3日(火)～5日(木)

場 所：岡崎コンファレンスセンター

組織委員：朝倉清高（北海道大）、横山利彦（分子研）

内 容：

去る2015年2月3日～5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、研究所創設以来約40年の歴史を有する。今回は北海道大学触媒化学研究センター長・朝倉清高教授と分子研・横山が組織委員となり、X線吸収分光の新展開を中心とした討論を目的とした。参加者は外国人招待講演者5名、日本人招待講演者16名を含めてちょうど50名であった。

現代の分子・物質・材料科学に求められることは、人類のさらなる文化的発展に資する調和のとれた物質・材料の開発であり、とりわけ、直面する地球環境・エネルギー問題の解決、さらには、よりいっそうの安全安心社会の構築のために、高機能、省エネルギー、省資源、再生可能、環境保全、耐久性、免震などのさまざまな観点から真に有用な新しい分子・物質・材料を創成することであろう。X線吸収分光法は、1980年代以降のシンクロトロン放射光施設の建設・発展の恩恵により、分子・物質・材料科学、環境・生命科学など極めて幅広い分野にわたって不可欠の観測手法に成長し、確立した手法として広く定着するようになった。しかし、その間の放射光源技術の革新は目覚ましく、超高輝度回折限界放射光源が現実味を帯びる現在において、X線吸収分光でどのような新たなサイエンスが展開できるかをもう一度考える必要がある。X線吸収分光の最大の特徴は元素選択的な化学状態・定量的局所構造解析にあり、硬X線を用いれば様々な困難な環境下でその場観察が可能であることが極めて広い分野に応用されている理由になっている。現状最先端光源を利用した放射光X線吸収分光の特徴を挙げると、(i) 触媒・電池などの化学反応過程で1 ms程度の単発現象の追跡ができる、(ii) 半導体・環境科学などで特に重要な1 ppm以下の希薄濃度での測定が可能である、(iii) 100 nm以下のナノビームによる空間分解計測が可能で、触媒・電池などの空間的不均一性を観測できる、(iv) トモグラフィを利用して空間分解能1 μm 程度の3次元可視化が可能である、(v) 繰り返し観測可能な事象について数10 psの時間分解計測が可能である、などである。一方、将来の回折限界新光源（電子ビームエミッタンス1～0.1 nmrad以下）によれば、輝度1000倍（ $>10^{16}$ photons/s/0.1%b.w.）が期待でき、X線吸収分光において、10 nm以下（1 nm程度まで）の空間分解計測、3次元トモグラフィの大幅高速化・高空間分解能化、10 μs 以下の時間分解単発現象追跡、10 ppb以下の希薄試料計測などが可能となろう。

本岡崎コンファレンスでは、各国の先端X線吸収分光に携わる数名の研究者を招き、様々な角度からの見識を聞きながら新展開を模索したい。上記に想定される条件のもと、あるいは新たに光源性能自体を提案することも含めて、近い将来の先端X線吸収分光の青写真を語った。現状光源では測定できない対象として想定される研究提案も既に数多い。たとえば、現状のHDDは既に磁石1個が~20 nm、近い将来は数 nm に達し、現状最下限のビームサイズより1桁以上も小さい。ひとつひとつのナノ粒子が物性的に全く等価であれば個別に観測する必要は必ずしもなかろうが、ナノ粒子が小さくなればなるほど、わずかな原子数や構造の違いによってその物性が大きく変化し、同一の挙動をとらなくなるものであり、個々の粒子の計測が不可欠となる。また、触媒や電池の化学反応は不可避免的に空間的な不均一性を伴って進行する傾向がある。このような機能性材料・素子における空間的に不均一な現象の根源的な動作機構を理解するために空間分解X線吸収分光測定は必須の要請であり、かつ、経時変化の追跡も必要となるため、広視野時間分解イメージング測定も要求される。高空間分解・広視野・時間追跡を複合した計測の発展が期待されるところである。これらの機能材料・素子の空間的に不均一な動作メカニズムを解明することが、新奇物質・材料開発にブレークスルーにつながると期待される。先端X線吸収分光によってこれらの起源を解明していくことが提言できよう。

外国人招待講演者を以下に挙げる。

Tsun-Kong SHAM (University of Western Ontario & Soochow-Western Centre for Synchrotron Radiation Research, Canada)

Andrei ROGALEV (European Synchrotron Radiation Facility, France)

Peter FISCHER (Lawrence Berkeley National Laboratory & University of California Santa Cruz, U. S. A.)

Lin X. CHEN (Argonne National Laboratory & Northwestern University)

Stephen P. CRAMER (University of California Davis & Advanced Light Source, U. S. A.)

いずれも放射光を用いたX線吸収分光において第一線で活躍中の研究者であり、特に、空間分解・時間分解・新しい偏光計測・新しい方法論開発など、先端的な放射光X線吸収分光利用の成果に加え、近い将来の回折限界光源に関する展望を語っていただいた。

また、日本人招待講演者を以下に挙げる。

Satoru TAKAKUSAGI (Hokkaido University)

Takafumi MIYANAGA (Hiroshima University)

Hirofumi OYANAGI (Advanced Industrial Science and Technology, AIST)

Hitoshi ABE (Photon Factory, High Energy Accelerator Research Organization, KEK-PF)

Shin-ichi ADACHI (Photon Factory, High Energy Accelerator Research Organization, KEK-PF)

Takuya MASUDA (National Institute for Materials Science)

Yoshio TAKAHASHI (The University of Tokyo)

Motohiro UO (Tokyo Medical & Dental University)

Mizuki TADA (Nagoya University)

Tetsuo KATAYAMA (Japan Synchrotron Radiation Research Institute, JASRI SPring-8)

Tomoya URUGA (Japan Synchrotron Radiation Research Institute, JASRI SPring-8)

Naoki ISHIMATSU (Hiroshima University)

Takuya OHGASHI (Institute for Molecular Science)

Masanari NAGASAKA (Institute for Molecular Science)

Yasumasa TAKAGI (Institute for Molecular Science)

Yohei UEMURA (Institute for Molecular Science)

同じく、空間分解・時間分解・新しい方法論開発などの先端的な放射光 X 線吸収分光利用の成果を語っていただいた。

プログラム等は以下のものであった。

The 74th Okazaki Conference

Frontier of X-Ray Absorption Spectroscopy and Molecular Science

Date: February 3–5, 2015

Site: Okazaki Conference Center (OCC), Conference Room C (2nd floor)

Outline

The Okazaki conference has been one of the most important activities in Institute for Molecular Science (IMS), with its origin dated back to just after the foundation of IMS. The Conference has been normally held once or twice per year, with focusing on some specific topic that is emerging as a fundamental issue in the field of molecular science and related research area. The 74th Okazaki Conference is designated as “Frontier of X-Ray Absorption Spectroscopy and Molecular Science.” We would like to discuss new science that can be opened by advanced XAFS techniques like spatial and/or time-resolved measurements. Although XAFS has matured as a sophisticated promising technique, recent progress based on the advance of synchrotron radiation light sources is still outstanding. We will summarize here the advanced XAFS methods and discuss near-future XAFS techniques and more importantly new science. It will be also fruitful if the new XAFS science can contribute to construction plans of diffraction-limited synchrotron radiation facilities in Japan.

Program

February 3, 2015

17:00- Reception @OCC, Conference Room B (1st floor)

February 4, 2015

10:00-10:10 **Iwao OHMINE** (IMS) Opening Address

10:10-10:20 **Toshihiko YOKOYAMA** (IMS) Scope of the Conference

(Chair: K. Asakura)

10:20-11:05 **Tsun-Kong SHAM** (Univ. Western Ontario)

“Soft and Tender X-ray Spectroscopy, Some Recent Development and Applications”

11:05-11:30 **Hiroyuki OYANAGI** (NAIST)

“Synchrotron Radiolysis Synthesizes Novel Nanoclusters”

11:30-11:55 **Hitoshi ABE** (KEK-PF)

“XAFS Microscopy and Dynamics for Materials Science”

11:55-12:15 Photo

12:15-13:30 Lunch @OCC, Conference Room B (1st floor)

(Chair: H. Oyanagi)

13:30-14:15 **Andrei ROGALOV** (European Synchrotron Radiation Facility)

“Polarization Dependent X-Ray Spectroscopy: Recent Advances”

14:15-14:40 **Satoru TAKAKUSAGI** (Hokkaido Univ.)

“3D Structure Analysis of Atomically Dispersed Metal Species on an Oxide Single Crystal Surface by Polarization-Dependent Total-Reflection Fluorescence XAFS”

14:40-15:05 **Mizuki TADA** (Nagoya Univ.)

“In situ XAFS Characterization of PEFC Electrocatalysts”

15:05-15:30 **Takuya MASUDA** (NIMS)

“In situ XAFS and XPS for Electrochemical Processes at Solid Liquid Interfaces”

15:30-15:50 **Yasumasa TAKAGI** (IMS)

“Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy of Polymer Electrolyte Fuel Cell Catalysts”

15:50-16:10 Coffee

(Chair: H. Abe)

16:10-16:55 **Peter FISCHER** (Lawrence Berkeley Nat. Lab. & Univ. California Santa Cruz)

“Future Opportunities with Magnetic Soft X-Ray Spectromicroscopies”

16:55-17:20 **Motohiro UO** (Tokyo Medical & Dental Univ.)

“Application of SR-XRF and XAFS for the Clinical Diagnosis”

17:20-17:40 **Takuya OHIGASHI** (IMS)

“Present Status of Scanning Transmission Soft X-Ray Microscopy at UVSOR-III”

17:40-18:00 **Masanari NAGASAKA** (IMS)

“Soft X-Ray Absorption Spectroscopy of Liquid and its Application to Electrochemical Reaction”

19:00-20:30 Banquet @Okazaki New Grand Hotel (Sky Restaurant PARIS, 9th floor)

February 5, 2015

(Chair: Y. Takahashi)

- 9:30-10:15 **Lin X. CHEN** (Argonne Nat. Lab. & Northwestern Univ.)
“How Can Transient X-Ray Structural Methods Aide Solar Fuel and Solar Electricity Conversion Research?”
- 10:15-10:40 **Shin-ichi ADACHI** (KEK-PF)
“Capturing Structural Dynamics of Photochemistry by Picosecond X-Ray Pulses”
- 10:40-11:05 **Tetsuo KATAYAMA** (JASRI, SPring-8)
“Ultrafast XAFS Using Femto-Second X-Ray Pulses”
- 11:05-11:30 **Tomoya URUGA** (JASRI SPring-8)
“Temporally and Spatially Resolved XAFS at SPring-8”
- 11:30-11:50 **Yohei UEMURA** (IMS)
“Picosecond and Femtosecond X-Ray Absorption of WO₃ Photocatalyst”
- 11:50-13:10 Lunch @OCC, Conference Room B (1st floor)
- (Chair: T. Yokoyama)
- 13:10-13:55 **Stephen P. CRAMER** (Univ. California Davis)
“Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy as an X-Ray Absorption Technique”
- 13:55-14:20 **Naoki ISHIMATSU** (Hiroshima Univ.)
“ α - ϵ Transition of Iron: an EXAFS Study under High Pressure”
- 14:20-14:45 **Yoshio TAKAHASHI** (Univ. Tokyo)
“Molecular Environmental Geochemistry Using XAFS”
- 14:45-15:10 **Takafumi MIYANAGA** (Hiroshima Univ.)
“XAFS study for Ag clusters”
- 15:10-15:40 **Kiyotaka ASAKURA** (Hokkaido Univ.) Summary & Discussion
- 15:40 Closing

3-4-3 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）、第15回シンポジウム“Hierarchical Structure from Quantum to Functions of Biological Systems”（神戸、2013年7月）を開催してきた。第16回シンポジウムは2015年7月に釜山で開催予定である。このような日韓両国からの研究者による継続的なシンポジウムを通して、研究・人材交流を進めている。

3-5 大学院教育

3-5-1 特別共同利用研究員

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

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

所 属	1977 ～2004	05	06	07	08	09	10	11	12	13	14
北海道大学	11	1									
室蘭工業大学	2										
東北大学	13										3
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	42									1	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	9
愛知教育大学			1								
名古屋工業大学	17							2	1		3
豊橋技術科学大学	39				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	1
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	38										
山口大学	1										
愛媛大学	9										
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	6							1			
首都大学東京	19		1								
名古屋市立大学	4	9	8	5	4	4	4	2	3	2	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	9										
東邦大学	3										
星薬科大学	1										
早稲田大学	13										
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	8
計	603	14	16	17	17	17	17	27	30	24	27

＊外国の大学等

3-5-2 総合研究大学院大学二専攻

総合研究大学院大学は、1988年10月1日に発足した。分子科学研究所は、同大学院大学に参加し、構造分子科学専攻及び機能分子科学専攻を受け持ち、1991年3月には6名の第一回博士課程後期修了者を誕生させた。なお、所属研究科は2004年4月より数物科学研究科から物理科学研究科に再編された。

その専攻の概要は次のとおりである。

構造分子科学専攻

詳細な構造解析から導かれる分子および分子集合体の実像から物質の静的・動的性質を明らかにすることを目的として教育・研究を一体的に行う。従来の分光学的および理論的な種々の構造解析法に加え、新しい動的構造の検出法や解析法を用いる総合的構造分子科学の教育・研究指導を積極的に推進する。

機能分子科学専攻

物質の持つ多種多様な機能に関して、主として原子・分子のレベルでその発現機構を明らかにし、さらに分子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（2014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	8	18
機能分子科学専攻	9	7	18
計	17	15	36

在籍学生数（2014年12月現在） 単位：人

（年度別）

入学年度専攻		2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	計	定 員
構造分子科学専攻	5年一貫	0	0	0	0	1	3	4	4	12	2
	博士後期	0	0	0	1	0	4	1	7	13	3
機能分子科学専攻	5年一貫	1	1	0	0	1	0	0	1	4	2
	博士後期	0	0	0	0	1	2	4	1	8	3

学位取得状況 単位：人

（年度別）

専 攻	1991～2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014 (9月修了者まで)	計
構造分子科学専攻	83(11)	7	5	5(1)	7	5	2	2	6	4	1	127(12)
機能分子科学専攻	70(14)	4	5	1	4	3	5	1	3	6	1(1)	103(15)

（ ）は論文博士で外数

入学状況（定員各専攻共6） 単位：人

（年度別）

専 攻	1989～2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014
構造分子科学専攻	112	8	11(1)	8(1)	5(1)	5(3)	5(1)	1(1)	6(2)	5(4)	11(4)
機能分子科学専攻	101	7	4	5(1)	5(2)	7(2)	4(2)	6(2)	8(2)	4	2(1)

（ ）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		
	1989-2012 年度	2013 年度	2014 年度	1989-2012 年度	2013 年度	2014 年度
中 国	25	2	4	8	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			1	4		

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～'12 年度	'13 年度	'14 年度	'89～'12 年度	'13 年度	'14 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		1(1)	3(1)
山形大学				2		1	3
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			4			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	3		2(2)	7			12(2)
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)		1	16			30(1)
京都工芸繊維大学	1			1			2
大阪大学	5		1(1)	4			10(1)
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	4			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
群馬工業高等専門学校			1(1)				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
立教大学			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			3			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	38(3)	1	5	27(3)	3		74(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（2014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	12	9	21
准教授	20	8	28
講 師	2	1	3
助 教	8	16	24
大学・公的機関等研究職	34	20	54
民間企業	23	22	45
その他	28	28	56
計	127	104	231

3-5-3 オープンキャンパス・分子研シンポジウム

2014年5月30日（金）午後～31日（土）午前まで分子研シンポジウム2014を開催し、引き続き31日（土）午後に分子研オープンキャンパス2014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8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44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17名、大学院生19名、教員・研究者5名、民間3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
北海道	0	1	0	0	1
東 北	3	7	0	0	10
関 東	5	4	2	0	11
東 海	0	0	0	2	2
近 畿	5	7	2	1	15
九州・沖縄	4	0	1	0	5
合 計	17	19	5	3	44

3-5-4 夏の体験入学

2014年8月4日（月）から7日（木）までの4日間、分子科学研究所において、第11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、26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4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5日（火）、6日（水）：配属研究室にて研究体験

8月7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	岐阜大学大学院	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
2	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
3	北九州市立大学大学院	修士1年	多孔性と π 共役を兼備する分子	江 准教授
4	北九州市立大学大学院	修士1年	タンパク質を「見て」・「触ってみる」, 「動かしてみる」, 「解析してみる」	斉藤 教授
5	東京工業大学大学院	修士1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
6	東京工業大学大学院	修士1年	ナノの金属ロッドを作って波動関数を見る	岡本 教授
7	フランス国立パリ高等化学学校	修士1年	光シンセサイザー ——マイクロ固体フォトンクスからのアプローチ——	平等 准教授
8	東京理科大学	学部4年	計算化学のハッキング体験学習	柳井 准教授
9	新潟大学	学部4年	量子論におけるダイナミクスとは何であるかを紙と鉛筆・計算機を駆使して体感しよう！	信定 准教授
10	神戸大学	学部4年	ナノの金属ロッドを作って波動関数を見る	岡本 教授
11	神戸大学	学部4年	光を使って原子・分子を制御しよう——冷却原子の実験——	大森 教授
12	京都大学	学部3年	磁気光学 Kerr 効果による磁化消失・発現課程の観測	横山 教授
13	京都大学	学部3年	タンパク質を「見て」・「触ってみる」, 「動かしてみる」, 「解析してみる」	斉藤 教授
14	北見工業大学	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
15	立命館大学	学部3年	有機トランジスタ	山本 教授
16	京都大学	学部3年	計算化学のハッキング体験学習	柳井 准教授
17	名古屋工業大学	学部3年	フロンティア軌道理論と量子化学計算	江原 教授
18	東京大学	学部3年	シンクロトロン光を用いた電子ビームのダイナミクスの観測	加藤(政)教授
19	東京大学	学部2年	光シンセサイザー ——マイクロ固体フォトンクスからのアプローチ——	平等 准教授
20	東京大学	学部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
21	早稲田大学	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
22	京都大学	学部2年	フロンティア軌道理論と量子化学計算	江原 教授
23	東北大学	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	京都大学	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
25	東京理科大学	学部1年	有機 EL 素子の作製と発光測定	平本 教授
26	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

3-5-5 総研大アジア冬の学校

2015年1月13日(火)から17日(金)の期間、岡崎コンファレンスセンターにおいて、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11回目である。今回の冬の学校は、アジア研究教育拠点(アジアコア)事業との共同主催であった。海外からの応募者は49名あり、これを書類選考で絞り込み、15名を受け入れた。その国籍別の内訳はタイ13名、中国1名、ベトナム1名である。また、IIP(IMS国際インターンシッププログラム)の留学生が6名、およびアジアコア多国間国際共同事業の参加者30名、日本国内からの参加者が42名あり、講師を除く参加者は合計93名であった。今回は、テーマを“Research and Its Challenges in Molecular Science: Fundamentals and State-of-the-Art”とし、分子科学の基礎から最先端にわたる講義が行われた。参加者によるポスター発表、参加学生の内10名によるSelf-appeal Flash Talkも行われた。今年度はAsia CORE Program参加国(中国、台湾、韓国)からも講師を招へいし、各分野における分子科学の基礎、最先端および将来展望について講義された。講演者は下記のとおりである。

Hui CHEN (ICCAS, China)

“Transition Metal Chemistry: The Interplay between Computational and Experimental Approaches”

Kiyoung PARK (KAIST, Korea)

“Spectroscopic and Computational Elucidation of Binuclear Non-Heme Iron Enzyme Intermediates”

Shinji SAITO (IMS, Japan)

“Dynamics of Water: From Ambient to Supercooled Conditions”

Jer-Lai KUO (IAMS, Taiwan)

“Motion of H⁺ in H-Bond Network: To Eigen or To Zundel”

Xiaozhang ZHU (ICCAS, China)

“Research on New Organic π -Functional Materials”

Norie MOMIYAMA (IMS, Japan)

“Asymmetric Reaction Space Created by Hydrogen & Halogen Atom”

Hyungjun KIM (KAIST, Korea)

“Multiscale Modeling of Molecular Level of Processes in Materials”

Bongsoo KIM (KAIST, Korea)

“Perfect Crystal Gold Nanostructures: Synthesis, Properties, Applications”

Ting CHEN (ICCAS, China)

“Chiral Induction in 2D Self-Assembly of Achiral Molecules at Liquid/Solid Interface”

Maofa GE (ICCAS, China)

“Atmospheric Photooxidation Study”

Kaito TAKAHASHI (IAMS, Taiwan)

“Coupling in Electronic States and its Imprint on Reaction”

Kenji OHMORI (IMS, Japan)

“Ultrafast Electron Dynamics beyond Mean-Field in a Strongly-Correlated Ultracold Rydberg Gas”

Ming-Shien CHANG (IAMS, Taiwan)

“Spinor Bose-Einstein Condensates in Low Dimensional Traps”

Taiha JOO (POSTECH, Korea)

“Time-Resolved Fluorescence Spectroscopy for Molecular Dynamics and Structures of Excited States”

Jeongho KIM (Inha Univ., Korea)

“Excitation Energy Transfer and Coherent Oscillations in Photosynthetic Chlorosomal Light Harvesting Complex”

Nobuyasu KOGA (IMS, Japan)

“Protein Design from Scratch”

Ping YU (ICCAS, China)

“Tuning Interionic Interaction for Highly Selective In Vivo Sensing”

Koichi KATO (OIIB/IMS, Japan)

“Dynamic Orchestration of Proteasomes, Intracellular Protein Degradation Machines”

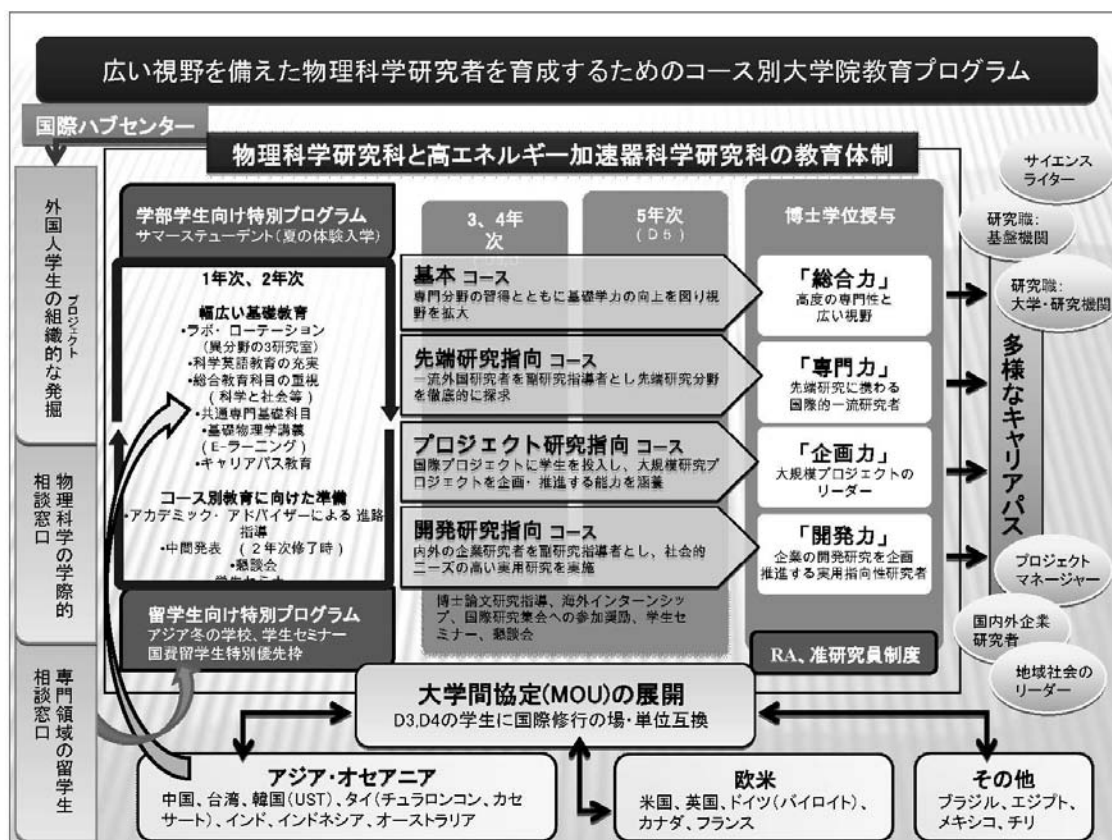
Tsyr-Yan YU (IAMS, Taiwan)

“Study Membrane Protein in a near Native Environment”

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。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。最も重要な取り組みは、3カ月程度の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であり、毎年数名の短期留学を実施している。両研究科所属の各専攻を擁する基盤機関は国内外に分散しており、それゆえに他専攻の授業を受講することは従来困難であった。本プログラムでは両研究科所属の大学院生が幅広い物理科学の素養を得られるべく、複数の研究室を短期間体験するラボ・ローテーションを実施し、また共通専門基礎科目のe-ラーニング化とその積極的活用により専攻間の縦横な授業履修を可能としている。すでに2011年度から分子研所属の構造分子科学専攻、機能分子科学専攻のe-ラーニング授業が配信されている。また学生が主体で企画運営する物理科学学生セミナーなど、積極的な取り組みが行われている。これら以外にも、国内民間企業へのインターンシップ、海外国際会議派遣、英語教育、アジア冬の学校、夏の体験入学、専攻内FD等を本プログラムで実施している。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が、2015年度で終了する。2016年度以降も継続的にプログラムが運用できるよう準備中である。



3-5-7 統合生命科学教育プログラム

総研大では文部科学省・特別経費の支援によって、2011年より4年間の予定で分野・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>)。

2014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11から今年度12に増加。「構造生体分子科学」の代わりに「機能生体分子科学」、新たに「メカノシステムバイオロジー」と「定量生物学」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4件であった。研究成果はレポート提出とした。

(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、本プログラム共催)

本年度は基礎生物学専攻の高田慎治教授がオーガナイザーで「生命現象における時間と空間を制御する仕組み」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。

本プログラムも最終年度となり、得るところ足りなかったところもごもである。教育は継続を旨とすべきであることから、本プログラムの経験を生かして、将来の専攻・研究科を超えた異分野融合教育を進めてゆく必要があろう。

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2014年4月1日現在で34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	
	分子科学研究所	昭和 55 年 2 月	機械, 回路, 電子計算機	
昭和 55	高エネルギー物理学研究所	昭和 55 年 10 月 24 日	機械	
	分子科学研究所	昭和 56 年 1 月 30 日	機械, 回路, 電子計算機, 低温	低温分科会を創設 技術課長 内田 章
昭和 56	分子科学研究所	昭和 56 年 7 月	機械, 回路, 電子計算機, 低温	
	高エネルギー物理学研究所	昭和 56 年 1 月 30 日	機械	
昭和 57	高エネルギー物理学研究所	昭和 58 年 3 月 17-18 日	機械, 回路, 電子計算機, 低温	技術部長 馬場 斉 3 研究機関持ち回り開催が始まる
昭和 58	分子科学研究所	昭和 59 年 3 月 2-3 日	機械, 回路, 電子計算機, 低温	
昭和 59	名古屋大学プラズマ研究所	昭和 59 年 11 月 15-16 日	機械, ガラス, セラミック, 低温回路, 電子計算機, 装置技術	実行委員長 藤若 節也
昭和 60	高エネルギー物理学研究所	昭和 61 年 3 月 19-20 日	機械, 計測制御, 低温, 電子計算機, 装置技術	技術部長 山口 博司
昭和 61	分子科学研究所	昭和 62 年 3 月 19-20 日	機械, 回路, 電子計算機, 低温	
昭和 62	名古屋大学プラズマ研究所	昭和 63 年 3 月 29-30 日	機械, 回路, 低温, 電子計算機, 装置技術	
昭和 63	高エネルギー物理学研究所	平成元年 3 月 23-24 日	機械, 計測制御, 低温, 電子計算機, 装置技術	技術部長 阿部 實
平成元	分子科学研究所	平成 2 年 3 月 19-20 日	機械, 回路, 低温, 電子計算機, 総合技術	2 ヶ所で懇談会
平成 2	核融合科学研究所	平成 3 年 3 月 19-20 日	機械, 低温, 計測制御, 電子計算機, 装置技術	
平成 3	高エネルギー物理学研究所	平成 4 年 2 月 6-7 日	機械, 低温, 計測制御, 電子計算機, 装置技術	
平成 4	分子科学研究所	平成 5 年 3 月 11-12 日	装置 I, 装置 II, 低温, 電子計算機	実行委員長 酒井 楠雄 3 研究機関代表者会議
平成 5	核融合科学研究所	平成 6 年 3 月 23-24 日	機械, 低温, 計測制御, 電子計算機, 装置技術	技術部長 村井 勝治 研究所間討論会
平成 6	高エネルギー物理学研究所	平成 7 年 2 月 16-17 日	機械, 低温, 計測制御, 電子計算機, 装置技術	技術部長 三国 晃 研究所間討論会
平成 7	分子科学研究所	平成 8 年 3 月 18-19 日	機械, 回路, 計測制御, 電子計算機, 化学分析	技術課長 酒井 楠雄 研究所間懇談会 化学分析を創設
平成 8	国立天文台・電気通信大学共催	平成 8 年 9 月 19-20 日	計測・制御, 装置・回路計算機・データ処理	初めての分散開催
	大阪大学産業科学研究所	平成 8 年 11 月 14-15 日	機器分析	
	名古屋大学理学部	平成 9 年 2 月 6-7 日	装置開発 A,B, ガラス工作	
	北海道大学理学部	平成 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	
平成 26	北海道大学	平成 26 年 9 月 4-5 日	機械・材料・製作, 特殊・大型・自然観測, 電気・電子・通信, 極低温, 情報, 生物・農林水産, 生命科学, 機器・分析, 実験・実習, 建築・土木・資源, 施設管理・安全衛生管理, 地域貢献・技術者養成活動	

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。2014年度は5名の講師（所外4名、所内1名）を招き開催した。また、従来の受け入れ研修も小規模ながら続けている。

表2、3に分子研での受け入れ状況を示す。

表2 過去の技術研修受入状況

年 度	受 入 人 数 (延)
平成7年度	6
平成8年度	12
平成9年度	13
平成10年度	7
平成11年度	6
平成12年度	13
平成13年度	47
平成14年度	96
平成15年度	59
平成16年度	8
平成17年度	6
平成18年度	6
平成19年度	6
平成20年度	25
平成21年度	40
平成22年度	21
平成23年度	28
平成24年度	15
平成25年度	19

表3 平成26年度技術研修受入状況（2014.4.1～2015.3.31）

氏 名	所 属	受入期間	備 考
工藤 哲也	名古屋大学全学技術センター	H26.9.8～9.12	加工技術の効率化に関する研修
足立 純一	高エネルギー加速器研究機構	H27.3.9～3.10	放射光利用技術最前線
福井 一俊	福井大	H27.3.9～3.10	放射光利用技術最前線
田中 宏和	高エネルギー加速器研究機構	H27.3.9～3.10	放射光利用技術最前線
北 宏之	友徳精機(株)	H27.3.9～3.10	放射光利用技術最前線
寺島 昭男	高エネルギー加速器研究機構	H27.3.8～3.10	放射光利用技術最前線
岡田 則夫	国立天文台先端技術センター	H27.3.9～3.10	放射光利用技術最前線
大橋 治彦	(公財)高輝度光科学研究センター	H27.3.9	放射光利用技術最前線
瀬戸山寛之	九州シンクロtron光研究センター	H27.3.9～3.10	放射光利用技術最前線

4-1-3 人事

技術職員人事は、法人化されてからは、広く人材を確保するために、国立大学法人等採用試験や公募採用も取り入れ、即戦力、より高度な専門技術を持つ人材の採用を行ってきた。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が、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。

4-1-4 受賞

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

4-2 安全衛生管理室

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

また安全衛生管理室では、分子科学研究所全職員に対する安全衛生教育も行っており、そのための資料作成、各種資格取得の促進、専門家の養成などを行っている。雇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登録されたメーリングリスト (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。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26年度には試薬管理システムの本格的運用を開始した。

4-3 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。

4-3-1 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。

第16回：「天体衝突と生命進化」、名古屋市科学館サイエンスホール、2014年3月8日。

第17回：「記憶の脳科学—私達はどのようにして覚え忘れていくのか—」、学術総合センター一橋記念講堂、2014年9月23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。

4-3-2 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日には第4回「万物は流転する～因果と時間」、2014年11月22日には同会場にて第5回「研究者に会いに行こう！—日本の学術研究を支える大学共同利用機関の研究者博覧会」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、第5回)、および各種の大型分子模型(第4回、第5回)を用いて、研究の現状に関する詳しい説明を行った。

4-3-3 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。2013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。2013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
101	2014. 5.23	ヒッグス粒子から迫る宇宙誕生の謎	浅井 祥仁 (東京大学大学院理学系研究科教授)
102	2014. 8.28	ダイオウイカ、奇跡の遭遇 ——最新技術で迫る深海の世界——	窪寺 恒己 (国立科学博物館標本資料センター コレクションディレクター)
103	2014.11.21	分子とつくる未来 ①身近になってきた有機エレクトロニクス ②回るたんぱく質、歩いたんぱく質の仕組みを 探る	①山本 浩史 (分子科学研究所教授) ②飯野 亮太 (岡崎統合バイオサイエンスセンター教授)
104	2015. 3.18	総力と本気で地震を克服する	福和 伸夫 (名古屋大学減災連携研究センター長・教授)

4-3-4 分子研コロキウム

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

以下は2014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
859	2014. 4.18	光で動く高分子 (Photomobile Polymer Materials)	池田 富樹 (中央大学研究開発機構教授)
860	2014. 5.21	The Importance of Keeping It Cool: Atoms and Molecules below 1 μ K	Prof. Guido PUPILLO (ISIS, University of Strasbourg and CNRS, Strasbourg)
861	2014. 6.20	創発イオントロニクス (Emergent Iontronics)	岩佐 義宏 (東京大学大学院工学系研究科／理化学研究所創発物性科学研究センター教授)
862	2014. 9.26	有機発光材料の新展開 —高効率遅延蛍光材料の登場— Development of Novel Organic Light Emitting Materials —High Efficiency Delayed Fluorescence—	安達千波矢 (九州大学大学院工学府応用化学部門教授, 最先端有機光エレクトロニクス研究センター (OPERA) センター長)
863	2014. 9.30	Electronic Structure in Highly Excited Optical Lattices	Prof. Dieter Jaksch (Clarendon Laboratory, University of Oxford)

864	2014.11.17	Single Molecule Spectroscopy Using STM	川合 真紀 (東京大学大学院新領域創成科学研究科教授, 理化学研究所理事)
865	2015. 1.16	エレクトライドの物質科学と応用展開	細野 秀雄 (東京工業大学フロンティア研究機構&応 用セラミックス研究所教授)
866	2015. 2.20	磁場・電場・電磁場による有機化合物の空 間操作と捕捉：低温分子科学の新展開	百瀬 孝昌 (ブリティッシュコロンビア大学教授)
867	2015. 2.24	Towards Scalable Quantum Memories	Prof. Ian A. Walmsley (University of Oxford)

4-3-5 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

4-3-6 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 26 年度は隔年で開催される「岡崎ものづくりフェア 2014」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

4-4 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・岡崎市のスーパーサイエンススクール推進事業（SSS）・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。

4-4-1 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）。2014年2月10日には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。また、魚住グループによる「国際化学オリンピック」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）も行った。

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博士研究員が講師として参加した。

4-4-2 あいち科学技術教育推進協議会

SSH研究指定校、愛知スーパーハイスクール研究校、さらに、SPP実施校である愛知県下の16高校が、2009年度に「あいち科学技術教育推進協議会」を立ち上げた。これは、文部科学省指定SSH中核拠点育成プログラムの一貫として、SSHで得た知識や組織力を活用し、全県的な取り組みとして理数教育の推進を目指したものである。当協議会は、毎年「科学三昧 in あいち」というイベントを開催している。当イベントには、県内の多数の高校から総数300名以上の参加者が集い、科学や技術についての先進的教育活動の紹介が行われる。第1回は2009年12月24日に岡崎コンファレンスセンターにて開催され、分子研からは「酸化物半導体薄膜を利用した光波干渉と光発電」「デスクトップ電子顕微鏡で観るナノの世界」と題した2つの体験型ブースを出展した。第2回は、2010年12月24日にウィルあいち（名古屋市）にて開催された。第3回（2011年12月27日）、第4回（2012年12月26日）、第5回（2013年12月26日）、第6回（2014年12月25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。

4-4-3 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	冨田 博一 助教授
75	2002. 6. 4	クラスターの科学——原子・分子集団が織りなす機能——	佃 達哉 助教授
78	2003. 6.24	科学のフロンティア——ナノサイエンスで何ができるか？	小川 琢治 教 授
81	2004. 6.22	生命をささえる分子の世界——金属酵素のしくみを探る	藤井 浩 助教授
84	2005. 6.28	環境に優しい理想の化学合成	魚住 泰広 教 授
87	2006. 6.20	電気を流す分子性結晶の話	小林 速男 教 授
90	2007. 6.15	光で探る生体分子の形と機能	小澤 岳昌 准教授

93	2008. 6.17	宇宙の光を地上で作る——シンクロトン光源——	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
112	2014.11.28	生物の時間をはかるタンパク質時計	秋山 修志 教 授

4-4-4 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
六ツ美北中	2014. 7.14	光エネルギーとタンパク質	古谷 祐詞 准 教 授
城北中	2014. 9.26	分子と光の秘密	平本 昌宏 教 授
河合中	2014.10.20	結晶学入門 ～分子のかたち，私たちがのかたち～	村木 則文 特任助教
新香山中	2014.10.30	時間の顕微鏡——目では見えない高速な出来事を観察する光の技	岡本 裕巳 教 授
北中	2015. 1.29	水中での有機分子変換反応 ～水と油の関係改善でグリーン反応～	大迫 隆男 助 教
竜南中	2015. 3. 6	計算化学～実験でも暗記でもない化学	福田 良一 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推進事業

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
新香山中	2014.12.16	電磁誘導・超伝導を体験しよう	中村 敏和 准 教 授

4-4-5 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	体験受入機関名
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
2014	5	7	豊田市立上郷中学校，岡崎市立竜海中学校，岡崎市立東海中学校，岡崎市立福岡中学校，岡崎市立美川中学校

4-4-6 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み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機関の各研究所の研究者により構成される選考委員会により優秀者を選出し，未来の科学者賞を授与している。賞の運営は一般公開を行う研究所が持ち回りでっており，分子科学研究所においては，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。2014年度は，7月に同校の式方式により表彰を行った。

4-5 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

4-6 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 福井県立藤島高等学校 ほか
2014	9	167	愛知教育大学，立命館高等学校，名古屋石田学園星城高等学校，東海大学付属高輪台高等学校，静岡県立浜松南高等学校，山梨県立日川高等学校，東京都立多摩科学技術高校，愛知県立岩津高等学校，岡崎市商工会議所

（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
2014	5	25

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の世界」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リ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—超高圧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。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向けた取り組みとして、天文学や核融合科学の分野で行われている計算科学研究に関する方法論的および概念的な共通項を探るとともに、他分野のアイディアの導入による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 1 μm 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ー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ーンブース、マスクアライナー (ミカサ社製 MA-10)、スピナー (ミカサ社製 MS-A100)]	山本浩史室長 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 技術課 装置開発室 装置開発室
	3次元光学プロファイラーシステム (Nexview) 3次元光学プロファイラーシステム (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 (1 μm 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 鈴木光一課長 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。JEOL JEM-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 XFlash610。表面凹凸の影がでにくく高感度な EDS 検出器を搭載。温度を -20 ~ 50°C 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рак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⁺ スパッタが可能)、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 田中清高准教授 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 (Al,Mg-Kα 線利用) を提供。施設利用として気軽に利用いただける。 [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 川相 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
人工らせん高分子ー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 ₂ O 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ー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
高原子価金属ーフェノラ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
バック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
絶縁体ー金属相境界の電荷ゆらぎが示すテラヘルツ励起の探索	有機 FET	東北大学理学研究科	伊藤 弘毅
高原子価金属ーフェノラ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院 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 渉
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 ₂ FeAl 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 族窒化物の電子ー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析	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 β 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
ブラウンミライトー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 β 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	東北大学原子分子材料科学高等	平郡 論
高周波 ESR による高純度有機化合物の g 値測定	ESR EMX ESR E500	研究機構 (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-セミキノネ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트로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	南澤磨優寛
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ニ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察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 Schiff 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 (Sr _{1-x} La) ₃ Ir ₂ 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	上梶 真之
マウス精巣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	藪田ひかる
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	藪田ひかる
アポトーシス研究のための投影型軟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 Deinococcus 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	上相 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
細胞伸展チャンバーの作製	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）
第2部会	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）
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）、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
第4部会	代表者：中井 浩巳（早大先進理工）
	機能性分子設計-光機能分子と非線形外場応答分子の光物性
	代表者：江原 正博（分子研）
	太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算
	代表者：山下 晃一（東大院工）
第4部会	バイオマス利用のための酵素反応解析
	代表者：吉田 紀生（九大高理）

図2 TCCIで支援する特別支援課題

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。

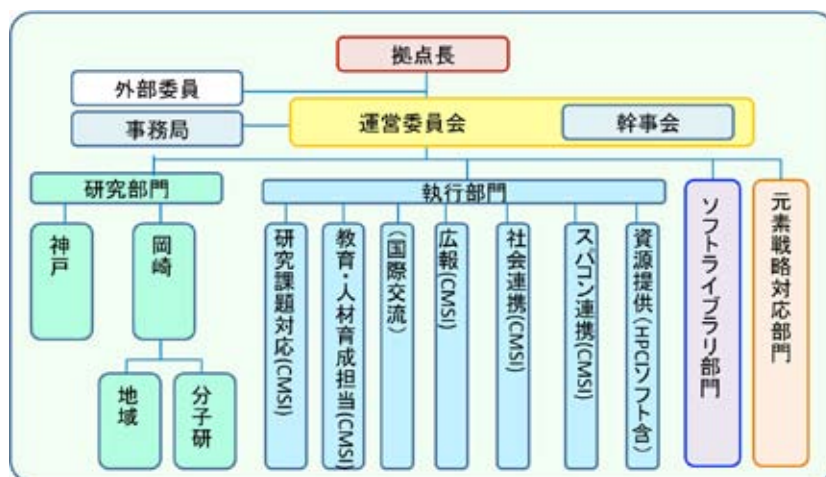


図3 計算分子科学研究拠点（TCCI）体制

		第1部会	第2部会	第3部会	第4部会
分子科学	重点課題	天能(2) 河野(1)	信定(1)	岡崎(2)	田中(1) 長岡(1)
拠点関係 分子研(1) 東大院総合文化(1) 神戸大院シス情報(1)* 名大院工(1)*	特別支援課題			志賀(1) 北尾(1) 中井(1) 奥村(1)	立川(1)

*: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、榊、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、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	○太田、高塚、榊、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 26 年度の活動について

①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

②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／産応協第31回産応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。実験サイドか

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。

③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。

④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。

⑤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。

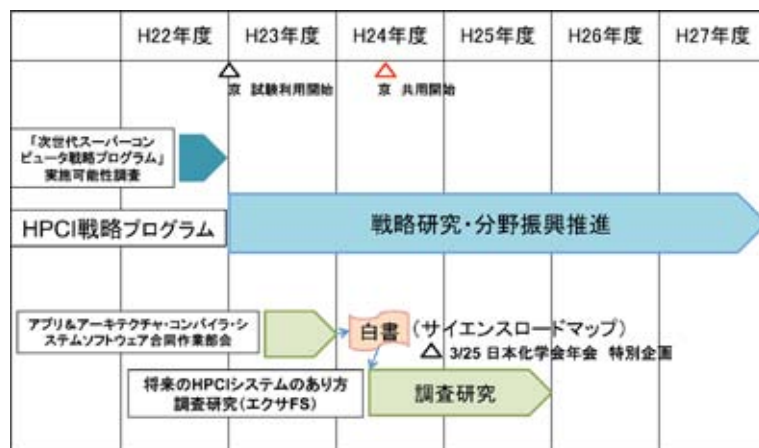


図 10 TCCI 研究計画

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、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、理論研究独自の方法論開発や触媒・電池研究への応用に関係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、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」（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、ひろくアジアからの参加者を迎えて『The Winter School of Soken-dai/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プネで開催された。

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）、榎（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①海外の教授、准教授クラスの研究者の招聘、②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。

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
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
2013.9. ～ 2014.8.	2014	171	38

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

斉 藤 真 司（教授）（2005 年 10 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：物理化学，理論化学

A-2) 研究課題：

- a) 生体分子における階層的構造変化動力学の理論研究
- b) 生体分子における励起エネルギー移動の理論研究
- 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) ANTON による分子シミュレーションのデータから，運動の時間スケールの違いにより決定した構造変化（folding/unfolding）の反応座標により自由エネルギー面を描き，タンパク質の折れたたみに関するダイナミクスの解析を行った。その結果，不均一で多様なダイナミクスを示していることを明らかにした。また，蛍光スペクトルや FRET にも関わる構造変化に関する多次元解析として，残基間の距離の揺らぎの多時間相関関数およびその寿命の多次元スペクトルの解析を提案した。その結果，異なる時間スケールを持つ構造揺らぎのカップリングの時間変化，すなわち，どのように構造変化ダイナミクスが動的に絡み合っているか等を明らかにした。
- b) 光合成系では，発色団で吸収された光エネルギーが励起エネルギー移動により効率よく活性中心へと伝達される。しかし，高効率エネルギー移動がどのように達成されているのか，すなわち，各色素のエネルギーレベルがどのように決まり，それらが振動・構造揺らぎの影響をどの程度受けているのか明らかにされていない。そこで，我々は，異なる環境に置かれた色素の励起エネルギーの揺らぎの解析手法の開発を進めており，Fenna-Matthews-Olson (FMO) タンパク中の色素の励起エネルギーの揺らぎが周囲の環境に大きく依存していることを明らかにした。
- c) 水は他の液体には見られない多くの熱力学的異常性を示すとともに，温度低下とともに異常性が増すことも知られている。我々は，温度低下に伴う等圧比熱の特異的温度依存性や，TIP4P/2005 ポテンシャルを用いた場合，温度を下げ約 220 K で fragile-strong 転移を示すことを明らかにしてきた。さらに低い温度の水の状態を解析し，LDL と HDL の転移が遅くなり動的不均一性が抑制されることを明らかにした。

B-1) 学術論文

M. HIGASHI, T. KOSUGI, S. HAYASHI and S. SAITO, "Theoretical Study on Excited States of Bacteriochlorophyll *a* in Solutions with Density Functional Assessment," *J. Phys. Chem. B* **118**, 10906–10918 (2014).

B-4) 招待講演

S. SAITO, “Spatio-temporal heterogeneous dynamics in condensed phases,” Cooperation of Computational Materials Science and Mathematics, Toward Smart Materials Design II, Sendai, January 2014.

S. SAITO, “Dynamics of supercooled water,” Dynamics of Complex Chemical and Biological Systems, IIT Kanpur, Kanpur (India), February 2014.

S. SAITO, “Fluctuations and relaxation in water,” 7th International Conference on Coherent Multidimensional Spectroscopy, University of Oregon, Eugene (U.S.A.), July 2014.

S. SAITO, 「凝縮系における時空間不均一動力学」, 分子科学討論会, 東広島, September 2014.

S. SAITO, “Dynamics of Water and Biomolecules,” Japan-Indo Bilateral Collaborative Seminar, Nara, November 2014.

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, 2015–).

分子科学会運営委員 (2008–2012).

日中韓理論化学ワークショップ (2013–).

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「生体分子シミュレーション入門」, 2014年12月11–12日.

神戸大学大学院理学研究科, 2014年12月18–19日.

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

近年の計算機の発達により、比較的小さなタンパク質に関してはマイクロ秒オーダーの計算が可能となった。さらに、特殊なハードウェアを用いて求められたミリ秒のトラジェクトリ計算を利用できるタンパク質もある。しかし、このように長時間のトラジェクトリが得られるようになった現在も、依然として構造解析や自由エネルギーに関する解析が殆どであり動的な理解については十分に進んでいない。大量のデータから動的情報を抽出する解析手法が求められている。我々は、様々な観点からタンパク質の構造変化動力学・機能発現機構の解析を進めている。

その一つとして、幅広い時間スケールの運動をもつタンパク質において、速い運動と遅い運動がどのようにカップルしているのかを解析している。約20年前に分子シミュレーションに基づく多次元分光法の解析手法を我々は世界に先駆けて開発し、水の分子内・分子間運動の揺らぎ・緩和の分子機構を明らかにしてきた。その後、多時間相関関数の特徴を活かした解析を過冷却液体の遅い運動、とくに動的不均一性の寿命の解析に展開してきた。今後、本解析を様々なタンパク質の構造変化、機能発現の創発機構の解明を進める。

機能発現の解明に関する二つ目の解析として、光合成系とくにFenna-Matthews-Olson (FMO)タンパク質における高効率な励起エネルギー移動の起源の解明を進めている。FMOにはBChl *a* が7分子が配置されており、励起エネルギー移動ダイナミクスにおけるタンパク質の構造や揺らぎの役割について電子状態計算を行い、ポテンシャルエネルギー面や相互作用の解析をさらに進めている。

機能発現の解明に関する三つ目の解析として、時計タンパク質KaiCにおけるATP加水分解反応の解析を進めている。他のATPaseとは異なり、KaiCの加水分解速度は非常に遅いことが実験により明らかにされている。秋山グループによるKaiCのATP/ADP状態の詳細な構造が詳細に解析されている。分子シミュレーションと電子状態計算により、KaiCにおける構造揺らぎ・変化がATP加水分解とどのように共役しているのか解析を進めている。

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。

信 定 克 幸 (准教授) (2004 年 6 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：分子物理学，理論化学

A-2) 研究課題：

- a) ナノ構造体の光応答理論と機能性物質理論設計への展開
- b) 界面光励起ダイナミクスの理論
- c) 固体表面担持金属クラスター触媒の第一原理分子動力学計算
- d) 金属クラスターの光電子物性

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 最近のナノテクノロジーの飛躍的な進展のおかげで，極めて精緻な高次ナノ構造体を数 nm 程度以下の精度で作成することが可能となってきた。この様なナノ構造体と光が相互作用すると，従前の光応答では見られなかった光励起ダイナミクスが起こり，そのダイナミクスに起因する新たな光機能が発現することが期待されている。そこで我々は，数～数十 nm サイズの実在系ナノ構造体の光応答理論とその理論に基づく実時間・実空間光励起電子ダイナミクス法 (GCEED: Grid-Based Coupled Electron and Electromagnetic field Dynamics) を開発した。理化学研究所スーパーコンピュータ「京」を使った超大規模並列計算 (66 万並列) にも成功し，実在系物質の光励起ダイナミクスでは世界最大規模の計算 (金クラスターのプラズモン励起) を実行した。この研究により，プラズモン励起のクラスターサイズ依存性の詳細を明らかにした。
- b) 電極表面やバルク表面での分子の光励起ダイナミクスでは，分子系と電極やバルク表面との間，すなわち界面領域での電子や核のダイナミクスのマイクロレベルでの解明が重要である。しかしヘテロな領域での光励起ダイナミクスの理論研究は非常に遅れている。我々は，ナノ構造体の光応答の研究において開発してきた計算手法 GCEED を，界面での光励起ダイナミクスに適用できるように拡張し，電極表面での分子の表面増強ラマン散乱の解明を行った。
- c) 数 nm 程度以下の固体表面担持金属ナノクラスターは，有用な触媒として働くことが多くの研究において指摘されている。しかし，貴金属やレアメタル等の非常に高価な原子を使っていることが多く，豊富に存在する安価な原子で代替した触媒の開発が望まれている。本研究課題では，第一原理分子動力学計算を用いて，金や白金などの固体表面担持クラスターの触媒反応メカニズムの解明とその代替クラスターの理論設計の研究を行った。
- d) 金とチオラートから構成されるクラスターは，その安定性と機能性材料への応用の期待から盛んに研究が行われている。昨年に引き続き本年も国内外の実験グループと共同で，金チオラートクラスターの構造や光電子物性の研究を行った。

B-1) 学術論文

K. IIDA, M. NODA, K. ISHIMURA and K. NOBUSADA, "First-Principles Computational Visualization of Localized Surface Plasmon Resonance in Gold Nanoclusters," *J. Phys. Chem. A* **118**, 11317–11322 (2014).

S. YAMAZOE, W. KURASHIGE, K. NOBUSADA, Y. NEGISHI and T. TSUKUDA, "Preferential Location of Coinage Metal Dopants (M = Ag or Cu) in $[\text{Au}_{25-x}\text{M}_x(\text{SC}_2\text{H}_4\text{Ph})_{18}]^-$ ($x \sim 1$) As Determined by Extended X-Ray Absorption Fine Structure and Density Functional Theory Calculations," *J. Phys. Chem. C* **118**, 25284–25290 (2014).

K. IIDA, M. NODA and K. NOBUSADA, “Theoretical Approach for Optical Response in Electrochemical Systems: Application to Electrode Potential Dependence of Surface-Enhanced-Raman Scattering,” *J. Chem. Phys.* **141**, 124124 (7 pages) (2014).

W. KURASHIGE, S. YAMAZOE, M. YAMAGUCHI, K. NISHIDO, K. NOBUSADA, T. TSUKUDA and Y. NEGISHI, “Au₂₅ Clusters Containing Unoxidized Tellurolates in the Ligand Shell,” *J. Phys. Chem. Lett.* **5**, 2072–2076 (2014).

A. DAS, T. LI, G. LI, K. NOBUSADA, C. ZENG, N. L. ROSI and R. JIN, “Crystal Structure and Electronic Properties of a Thiolate-Protected Au₂₄ Nanocluster,” *Nanoscale* **6**, 6458–6462 (2014).

M. NODA, K. ISHIMURA, K. NOBUSADA, K. YABANA and T. BOKU, “Massively-Parallel Electron Dynamics Calculations in Real-time and Real-Space: Toward Applications to Nanostructures of more than Ten-Nanometers in Size,” *J. Comput. Phys.* **265**, 145–155 (2014).

R. JIN and K. NOBUSADA, “Doping and Alloying in Atomically Precise Gold Nanoparticles,” *Nano Res.* **7**, 285–300 (2014).

B-4) 招待講演

K. NOBUSADA, “TDDFT Approach to Near-Field Excitation Dynamics in Molecular Nanostructures,” Quantum Dynamics Research Meeting, Vanderbilt University, Nashville (U.S.A.), March 2014.

K. NOBUSADA, “First-Principles Calculations for Near-Field Excitation Dynamics: Toward Computational Design of Functional Materials,” Computational approaches to light-matter interaction at the nanoscale: Sweden-Japan Workshop, Stockholm (Sweden), June 2014.

K. NOBUSADA, “Theoretical Design of Optical Near-Field and its Application to Functional Nanodevices,” JSPS Core-to-Core Japan Workshop 2014, Nanoscale electron-photon interactions via energy dissipation and fluctuation, The University of Tokyo, Tokyo, November 2014.

K. NOBUSADA, “Spatiotemporal Near-Field Excitation Dynamics in Nanostructures,” The 8th Energy, Materials, and Nanotechnology (EMN) Meeting, Orland (U.S.A.), November 2014.

信定克幸, 「光近接場領域における電子・電磁場ダイナミクス」, 公益財団法人山田科学振興財団山田研究会「電磁応答理論の新展開と先端マテリアルサイエンス」, ホテル北野プラザ六甲荘, 神戸, 2014年10月.

信定克幸, 「光近接場の理論と機能性ナノデバイスの計算科学的設計への展開」, 第30回スーパーコンピューティング・セミナー, 機械振興会館, 東京, 2014年10月.

信定克幸, 「ナノ光応答理論と高機能光近接場の計算科学的設計」, ISSP ワークショップ機能物性融合科学研究会シリーズ (I) 「光機能」, 東大物性研, 柏, 2014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).

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 (2009-2011).

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 (2007-2009).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2013-).

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-.

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).

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し、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・電子融合機能を併せ持った高機能物質の開発へ繋がると期待できる。理論的研究の立場から言えば、実在系に即したナノ構造体を対象として、光と物質(電子系)の露な相互作用を記述するナノ光応答理論の開発を行い、その理論に基づく実用に耐え得る超並列第一原理計算手法の開発が急務である。今後は、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、物質に任意の光機能を付加する指導原理を見出すことが極めて重要になると考える。

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) 多核金属酵素の電子状態解析・反応機構解明へ向けた応用計算

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) 飽和脂肪酸を不飽和脂肪酸へ変換する金属酵素による生化学反応を高精度量子化学計算を用いて解明することに成功した。脂肪酸は炭素が連なった構造を持つ分子であるが，炭素－炭素間に二重結合（C=C）があるかどうかで大きく二つに分類される。二重結合が無いものは「飽和脂肪酸」，有るものは「不飽和脂肪酸」と呼ばれる。体内では，飽和脂肪酸が不飽和脂肪酸へと変換（不飽和化）するプロセスがある。その一つは，ステアリン酸（飽和脂肪酸）がオレイン酸（一価不飽和脂肪酸）に変えられる生化学反応である。この変換反応では，「 Δ^9 －デサチュラーゼ」と呼ばれる金属酵素が主たる役割を担うことが知られる。しかしながら，この不飽和化の酵素反応がどのような機構で起こっているかに関する分子レベルでの詳細は未解明であった。本研究では，密度行列繰り込み群に基づく量子化学計算法 DMRG-CASPT2 法を用いて，この反応の律速過程を直接シミュレートし，不飽和化の分子機構を解明することに成功した。我々の計算結果では，デサチュラーゼ酵素の金属活性中心は，飽和脂肪酸に直接作用するのではなく，タンパク中のプロトン（H⁺）を活性の助けとして利用して複合的に反応を進めることが明らかにされた。推察された複数の反応機構の中から，この反応機構のみが実験で見積もられた活性化エネルギーと一致することが示された。本研究の実現には，電子の量子的振る舞いを精度よく予測する理論手法の開発が必要であった。本研究グループは，その高精度・高速計算アルゴリズムを開発し，世界で初めて多核金属酵素の反応解析へと応用することができた。

B-1) 学術論文

- S. SHARMA, T. YANAI, G. H. BOOTH, C. J. UMRIGAR and G. K.-L. CHAN, "Spectroscopic Accuracy Directly from Quantum Chemistry: Application to Ground and Excited States of Beryllium Dimer," *J. Chem. Phys.* **140**, 104112 (8 pages) (2014).
- T. V. HARRIS, Y. KURASHIGE, T. YANAI and K. MOROKUMA, "Ab Initio Density Matrix Renormalization Group Study of Magnetic Coupling in Dinuclear Iron and Chromium Complexes," *J. Chem. Phys.* **140**, 054303 (10 pages) (2014).
- T. N. LAN, Y. KURASHIGE and T. YANAI, "Toward Reliable Prediction of Hyperfine Coupling Constants Using Ab Initio Density Matrix Renormalization Group Method: Diatomic Radicals as Test Cases," *J. Chem. Theory Comput.* **10**, 1953–1967 (2014).
- Y. KURASHIGE, M. SAITOW, J. CHALUPSKÝ and T. YANAI, "Radical O–O Coupling Reaction in Diferrate-Mediated Water Oxidation Studied with Multireference Wave Function Theory," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 11988–11999 (2014).
- Y. KURASHIGE and T. YANAI, "Theoretical Study of the $\pi \rightarrow \pi^*$ Excited States of Oligoacenes: A Full π -Valance DMRG-CASPT2 Study," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **87**, 1071–1073 (2014).
- J. CHALUPSKÝ, T. A. ROKOB, Y. KURASHIGE, T. YANAI, E. I. SOLOMON, L. RULÍŠEK and M. SRNEC, "Reactivity of Binuclear Non-Heme Iron Δ^9 Desaturase Studied by Large-Scale Multireference Ab Initio Calculations," *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 15977–15991 (2014).
- Y. KURASHIGE, J. CHALUPSKÝ, T. N. LAN and T. YANAI, "Complete Active Space Second-Order Perturbation Theory with Cumulant Approximation for Large Entanglement Space from Density Matrix Renormalization Group," *J. Chem. Phys.* **141**, 174111 (13 pages) (2014).
- Y. KURASHIGE, "Multireference Electron Correlation Methods with Density Matrix Renormalisation Group Reference Functions," *Mol. Phys.* **112**, 1485–1494 (2014).

B-3) 総説, 著書

- 柳井 毅, 「第1章1- 2金属錯体系における電子相関理論の進展」, 錯体化学会選書10「金属錯体の量子・計算化学」, 共立出版, 23–41 (2014). ISBN978-4-7827-709-8
- 柳井 毅, 「非経験的密度行列繰り込み群に基づく多参照電子状態理論」 (Award Accounts), *Molecular Science*, 第8巻, A0069 (11 pages) (2014).

B-4) 招待講演

- 柳井 毅, 「密度行列繰り込み群に基づく量子化学計算」, 理研セミナー, 理化学研究所計算科学研究機構理研柚木研究室, 2014年1月.
- 柳井 毅, 「Big Multireference Calculations with Big Entanglement Space: ab initio DMRG approach」, 第7回ビヨンド・シミュレーション・フォーラム〜スーパーコンピューティング〜, 豊橋技術科学大学, 豊橋, 2014年2月.
- T. YANAI, "Quantum chemistry with quantum algorithm: Ab initio density matrix renormalization group theory," Asian CORE Winter School on Frontiers of Molecular, Photo-, and Material Sciences, Institute of Atomic and Molecular Sciences, Taipei (Taiwan), February 2014.

柳井 毅,「密度行列繰り込み群を用いた光合成マンガンクラスターの電子状態計算」,平成26年度前期物性研短期研究会——真空紫外・軟X線放射光物性研究のパラダイムシフトに向けて——,東大物性研,柏,2014年9月.

柳井 毅,「密度行列繰り込み群を基盤とする多参照電子状態理論の開発と応用」,第8回分子科学討論会,広島,2014年9月.

T. YANAI, “Ab initio quantum chemistry with density matrix renormalization group,” Tensor Network Algorithms in Materials Science, RIKEN Advanced Institute for Computational Science, Kobe, October 2014.

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).

柳井 毅, 日本化学会欧文誌BCSJ賞 (2014).

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

京都大学大学院理学研究科化学専攻, 連携客員准教授, 2014年-.

京都大学大学院理学研究科化学専攻, 化学特別講義1「計算化学の電子状態理論」, 2014年度前期.

B-9) 学位授与

齋藤雅明,「アブ・イニシオ密度行列繰り込み群に基づく多参照配置間相互作用法」, 2014年3月, 博士(理学).

TRAN, Lan Nguyen, “Studies on molecular magnetic properties using ab initio quantum chemical methods,” 2014年9月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

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

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

科研費基盤研究(C),「高精度多参照理論による大規模 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」「DMRG-MRCl」は、いままでにない大規模でプレディクティブな多参照量子化学計算であることを実証してきた。本手法の威力を発揮して、未知なる電子状態を解明する理論計算を推し進める。

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，理論分子分光，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設計
- c) 理論分子分光
- d) 不均一触媒の理論化学

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ナノ・バイオ系のエネルギー変換を実現する分子システムの理論研究や設計には、高精度かつ高効率の電子状態理論が不可欠である。我々は、分割法や汎用の理論では記述できない大規模分子系や非局在系を対象とした高精度電子状態理論の開発を進めている。本方法の特徴は、結合クラスター展開法に摂動選択法を導入し、世界最大級の分子系における多数の励起状態の高速・高精度計算が実現できる点にある。今年度は、摂動選択法の参照関数依存性について系統的に検討した。多数の中規模分子系の幾つかの価電子励起状態の計算を行い、局在化軌道を利用すれば全計算次元の約 10% 程度の計算量で十分な精度（誤差 0.2 eV 以下）を実現できることを示した。さらに、系統的に計算精度を向上することが可能なことを見出し、サイズ依存の物性や、置換基効果等に関する精緻な議論が行えることを示した。また、本高精度理論に基づいて、溶質と溶媒の分極を一次の摂動論によって記述し、多数の励起状態の溶媒効果を一挙に求める方法を開発した。
- b) 我々の高精度分子理論を実在系の光機能分子における光・電子過程に応用し、それらの電子的メカニズムを解明することによって、実験との協力研究を推進することを目的としている。今年度は、電荷移動型の機能性色素の理論設計の観点から、高い電子移動度を示すオリゴチオフェン骨格に電子ドナー・アクセプターを導入した分子システムの研究を行った。これらの電荷移動色素の励起状態と電荷移動度を置換基効果と溶媒効果の観点から検討した。方法は、我々が開発した PCM SAC-CI 法と charge-transfer index を用いた。励起状態と電荷移動度には、顕著な溶媒効果が計算され、特に非極性溶媒においても溶媒効果が重要である結果を得た。この様に、電荷移動色素では、環境の分極効果が極めて重要であることを示した。また、カルボテトラシランの σ 共役に基づく、励起スペクトルの二面角依存性の起源を定量的に解析し、磁気円二色性 (MCD) スペクトルも併用した励起状態の精密な帰属を行った。
- c) 凝縮系や強相関系における精密な分子分光、発光における励起状態の構造論、Pump-Probe レーザー分光の理論解析は理論分子分光の最先端の課題であり、実験との協力が期待される。ナイロンの固相・液相における真空紫外スペクトル (FUV) を解析し、エネルギーシフトが周囲の分子鎖の分極や水素結合パターン、励起の局在性・非局在性によることを示した。また、 Au_3 の励起状態は強相関を示すが、完全縮約結合クラスター (Complete Renormalized Coupled Cluster) 計算による精密な帰属を行った。TD-DFT では三重項不安定性 (triplet instability) 等の課題が指摘されている。ヘテロ環状分子の三重項状態の安定構造と燐光エネルギーおよびストークスシフトに関して汎関数の評価を系統的に行った。また、 I_2 分子によるニュートリノ質量分光の提案、シンナメート誘導体における励起ダイナミクスに関する Pump-Probe レーザー分光の理論解析を実験と共同で実施した。

- d) 不均一系金属微粒子触媒は、環境浄化触媒や化成品合成触媒など様々な分野で活用されており、基礎科学のみならず産業における重要性も高い。しかし、不均一触媒系における活性点の構造、電子状態、触媒作用は一般に複雑であり、その微視的過程の研究は挑戦的な課題である。本研究は、触媒・電池元素戦略プロジェクトの電子論グループ拠点として推進する課題としても重要である。我々は、高分子に担持された Au/Pd 合金微粒子がホモカップリング反応を温和な条件下で高効率に行うことを見出した。この反応の理論解析のため、Au/Pd クラスターの幾何構造やスピン状態を遺伝的アルゴリズムおよび DFT 計算によって検討した。C-Cl 結合の活性化に注目し、熱的に可能なスピン状態や反応経路に基づく内部転換や系間交差が存在すること、表面の Pd サイトが重要であることなどを明らかにした。また、銀表面は酸化触媒として知られているが、アルミナ表面に担持された Ag 微粒子は選択的水素化を可能にする。アルミナ表面に吸着した Ag クラスターのモデル計算によって、水素活性化のメカニズムおよび反応性と Ag 原子の d-band 中心との相関を明らかにした。特に、Ag クラスターとアルミナの境界領域（ペリメターサイト）が触媒作用に重要な役割を果たすことを示した。その他、金属修飾グラフェン、金属ポルフィリン、Ru 錯体の触媒作用に関する理論研究を行った。

B-1) 学術論文

- M. TASHIRO, M. EHARA, S. KUMA, Y. MIYAMOTO, N. SASAO, S. UETAKE and M. YOSHIMURA, "Iodine Molecule for Neutrino Mass Spectroscopy: Ab Initio Calculation of Spectral Rate," *Prog. Theor. Exp. Phys.* 013B02 (21 pages) (2014).
- M. PROMKATKAEW, S. SURAMITR, T. KARPKIRD, S. WANICHWEACHARUNGRANG, M. EHARA and S. HANNONGBUA, "Photophysical Properties and Photochemistry of the Substituted Cinnamates and Cinnamic Acids for UVB Blocking Function: Effect of Hydroxy, Nitro, and Fluoro Substitutions at Ortho-, Meta- and Para-Position," *Photochem. Photobiol. Sci.* **13**, 583–594 (2014).
- R. FUKUDA, M. EHARA and R. CAMMI, "Electronic Excitation Spectra of Molecules in Solution Calculated Using the SAC-CI Method in the Polarizable Continuum Model with Perturbative Approach," *J. Chem. Phys.* **140**, 064114 (15 pages) (2014).
- S. IMPENG, P. KHONGPRACHA, C. WARAKULWIT, B. JANSANG, J. SIRIJARAENSRE, M. EHARA and J. LIMTRAKUL, "Direct Oxidation of Methane to Methanol on Fe–O Modified Graphene," *RSC Adv.* **4**, 12572–12578 (2014).
- P. HIRUNSIT, K. SHIMIZU, R. FUKUDA, S. NAMUANGRUK, Y. MORIKAWA and M. EHARA, "Cooperative H₂ Activation at Ag Cluster/ θ -Al₂O₃ Dual Perimeter Sites: A DFT Study," *J. Phys. Chem. C* **118**, 7996–8006 (2014).
- P. MAITARAD, S. NAMUANGRUK, D. ZHANG, L. SHI, H. LI, B. BOEKFA, L. HUANG and M. EHARA, "Metal-Porphyrin: A Potential Catalyst for N₂O Direct Decomposition by Theoretical Reaction Mechanism Investigation," *Environ. Sci. Technol.* **48**, 7101–7110 (2014).
- S. HIGASHIBAYASHI, B. B. SHRESTHA, Y. MORITA, M. EHARA, K. OHKUBO, S. FUKUZUMI and H. SAKURAI, "Sumanenetrone Anions Generated by Electrochemical and Chemical Reduction," *Chem. Lett.* **43**, 1297–1299 (2014).
- H. TSUJI, H. A. FORGARTY, M. EHARA, R. FUKUDA, D. CASHER, K. TAMAO, H. NAKATSUJI and J. MICHL, "Electronic Transitions in Conformationally Controlled Tetrasilanes with Wide Range of SiSiSiSi Dihedral Angles," *Chem.–Eur. J.* **30**, 9431–9441 (2014).
- D. BOUSQUET, R. FUKUDA, D. JACQUEMIN, I. CIOFINI, C. ADAMO and M. EHARA, "Benchmark Study on the Triplet Excited State Geometries and Phosphorescence of Heterocyclic Compounds: Comparison between TD-PBE0 and SAC-CI," *J. Chem. Theory Comput.* **10**, 3969–3979 (2014).

H. KUNIYASU, A. SANAGAWA, T. NAKAJIMA, T. IWASAKI, N. KAMBE, K. BOBUATONG and M. EHARA, “Halogen Exchange by Reaction of $\text{CpRu(PPh}_3)_2\text{Cl}$ with MeC(O)X ($\text{X} = \text{Br, I}$) and Its Mechanistic Study,” *J. Organomet. Chem.* **769**, 34–37 (2014).

N. BAUMAN, J. A. HANSEN, M. EHARA and P. PIECUCH, “Communication: Coupled-Cluster Interpretation of the Photoelectron Spectrum of Au_3^- ,” *J. Chem. Phys.* (communication), **141**, 101102 (5 pages) (2014).

R. FUKUDA and M. EHARA, “Efficiency of Perturbation-Selection and Orbital Dependence in the SAC-CI Calculations for Valence Excitations of Medium-Size Molecules,” *J. Comput. Chem.* **35**, 2163–2176 (2014).

B. BOEKFA, E. PAHL, N. GASTON, H. SAKURAI, J. LIMTRAKUL and M. EHARA, “C–Cl Bond Activation on Bimetallic Au/Pd Bimetallic Nanocatalysts Studied by Density Functional Theory and Genetic Algorithm Calculations,” *J. Phys. Chem. C* **118**, 22188–22196 (2014).

Y. MORISAWA, M. YASUGANA, H. SATO, R. FUKUDA, M. EHARA and Y. OZAKI, “Rydberg and π – π^* Transitions in Film Surfaces of Various Kinds of Nylons Studied by Attenuated Total Reflection-Far-Ultraviolet Spectroscopy and Quantum Chemical Calculations: Peak Shifts in the Spectra and Their Relation to Nylon Structure and Hydrogen Bondings,” *J. Phys. Chem. B* **118**, 11855–11861 (2014).

R. FUKUDA and M. EHARA, “An Efficient Computational Scheme for Electronic Excitation Spectra of Molecules in Solution Using the Symmetry-Adapted Cluster—Configuration Interaction Method: The Accuracy of Excitation Energies and Intuitive Charge-Transfer Indices,” *J. Chem. Phys.* **141**, 154104 (11 pages) (2014).

Y. MIYAZAKI, K. YAMAMOTO, J. AOKI, T. IKEDA, Y. INOKUCHI, M. EHARA and T. EBATA, “Experimental and Theoretical Study on the Excited-State Dynamics of ortho-, meta-, and para-Methoxy Methylcinnamate,” *J. Chem. Phys.* **141**, 244313 (12 pages) (2014).

B-3) 総説, 著書

福田良一, 江原正博, 「SAC-CI 法」, 錯体化学会選書 10 「金属錯体の量子・計算化学」, 142–160 (2014).

B-4) 招待講演

M. EHARA, “Au and Au/Pd Nanocluster Catalysts,” The 1st IMS-KU Workshop on Molecular Sciences towards Green Sustainability, Bangkok (Thailand), January 2014.

M. EHARA, “Chemically Intuitive Indexes for Charge-Transfer Excitation,” Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON) 2014, Khon Kaen (Thailand), January 2014.

M. EHARA, “Quantum Chemistry for Excited States I, Quantum Chemistry for Excited States II, Au and Au/Pd Nanocluster Catalysts,” Winter School on Modeling Chemical and Biological Reactivity (MCBR), Indian Institute for Technology, Hyderabad (India), January 2014.

M. EHARA and R. FUKUDA, “Solvent Effects in Excited States: PCM-SAC-CI Study,” The 14th conference BioInformatics in Torun, Torun (Poland), June 2014.

M. EHARA, “Unique Heterogeneous Catalysis with Metal Nanoclusters,” University of Marburg, Marburg (Germany), June 2014.

M. EHARA, “Au and Au/Pd Nanocluster Catalysts,” The 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, Santiago (Chile), October 2014.

M. EHARA, “Heterogeneous Nanocluster Catalysts,” The 19th International Workshop Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-XIX), New Taipei (Taiwan), November 2014.

M. EHARA, “Bond Activation Mechanism on Heterogeneous Nanocluster Catalysts,” The 4th Thailand International Nanotechnology Conference (NanoThailand 2014), Bangkok (Thailand), November 2014.

江原正博, 「SAC-CI 法の最近の展開」, シンポジウム「量子化学を原点とする未来科学創造に向けて」, 京都, 2014年2月.

江原正博, 「理論計算化学による微粒子担持触媒へのアプローチ」, 第1回元素戦略に基づいた触媒設計シンポジウム, 東京, 2014年2月.

江原正博, 「バッテリー開発における理論科学の挑戦」, ソニー厚木テクノロジーセンター: セミナー, 神奈川, 2014年10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).

触媒学会元素戦略研究会世話人会委員 (2013-).

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).

Charge Transfer Modeling in Chemistry: New Methods and Solutions for a Long-Standing Problem, Paris, France, Organization Committee (2014-2015).

Pacificchem 2015: Symposium (#277) Interplay between Theory and Experiment in Catalytic Research, CSO (2014-2015).

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, 第3部会小委員会委員 (2011-2015).

量子化学ウィンタースクール世話人 (2011-).

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」,2014年4月17日-18日.

総合研究大学院大学物理科学研究科,「理論化学」,2014年7月8日-10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).

科研費基盤研究(C),「分子システムを対象とした電子励起状態理論の開発と光合成系の電子メカニズムの解明」,福田良一(2014年-2016年).

C) 研究活動の課題と展望

我々は、独自の高精度電子状態理論を発展させ、光機能分子の電子過程、理論分子分光、金属微粒子の不均一触媒を主な対象とした研究を推進している。これらの研究では、実験との研究交流と協力を行い、新しい化学概念や化学指標を構築することを目的とし、実験へのフィードバックを目指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・複合系の理論化学は未だ開発途上にあり、特に上述の研究において信頼性のある情報を提供できる高速・高精度理論や理論モデルを開発する必要がある。理論および理論モデルの開発においては、高機能化と大規模化の観点から我々の方法を進展させるとともに、固体表面反応を高精度に記述できる理論モデルの開発を行う。光機能性分子の電子過程の研究では、エネルギー変換で重要となる太陽電池や人工光合成、電子移動・励起エネルギー移動について研究し、分子システムとしての機能設計へと展開したい。また、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、担持金属微粒子触媒やバルク触媒における触媒作用を理論的に解析する。特に、合金(アロイ)効果、金属-担体(アンカー)効果に着目した研究を進める。触媒・電池の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推進する。

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) アミロイド線維の破壊の分子動力学シミュレーション
- b) ハミルトニアンレプリカ置換法によるアミロイド線維形成の初期過程の機構解明
- c) AK16 ペプチド，C 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) アミロイド線維はタンパク質が間違っ折りたたみ，凝集することによってできた不溶性の線維である。アミロイド線維は 20 種類以上の病気の原因と考えられている。例えばアルツハイマー病はアミロイド β ペプチドが凝集してできたアミロイド線維が原因ではないかと言われている。近年，超音波を使って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。その破壊メカニズムはキャビテーション（気泡生成）によるものではないかと指摘されているが，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。そこで我々はアミロイド β ペプチドからなるアミロイド線維に超音波をかけた非平衡分子動力学シミュレーションを行った。圧力が正の時はアミロイドや水の構造に大きな変化は見られないが，負圧になった時にアミロイドの周りに気泡が生じた。この気泡は疎水性残基の周りに生じることが多かった。アミロイドの周りの水がほぼ蒸発し気泡に包まれてもアミロイドは壊れなかった。その後圧力が再び正になると，気泡が崩壊し水のジェット流がアミロイドにぶつかり，アミロイドが破壊された。この時，水は主に親水性残基めがけて飛んでいることが分かった。
- b) アミロイド線維の形成メカニズムもまだわかっていない。そこで我々が開発したレプリカ置換法の 1 つであるクーロンレプリカ置換法を使ってアミロイド β ペプチドのフラグメント A β (29-42) の 2 量体形成機構を調べた。クーロンレプリカ置換法では電荷をスケールするパラメーターを導入し，温度の代わりにこのパラメーターをレプリカ間で置換することにより，2 つの分子を近づけたり遠ざけたりできる。その結果，2 つの A β (29-42) が離れている状態から近づくにつれ，まず疎水性残基の多い C 末部分で短い分子間 β シート構造を形成し，その後 β シート構造を形成する残基が増えて，最終的に長い反平行 β シート構造を作ることを明らかにした。さらに，分子間 β シート構造を作る直前には分子内での β シート構造（ β ヘアピン構造）が増え，それはもう一方の分子の疎水性残基が接触することにより安定化されていることも発見した。
- 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 ペプチドや C 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。これま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てきた。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。慣性半径の解析から 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。今年はさらに C ペプチドについてもシミュレーションを行った。C ペプチドの場合についても，側鎖間で形成される塩橋が加圧により破壊されるためヘリックス構造の慣性半径は全圧力領域に対してほぼ一定であるものの， α ヘリックス構造が加圧にともない縮むために，高圧力下では α ヘリックス構造が増えるということを明らかにした。

B-1) 学術論文

H. OKUMURA and S. G. ITOH, “Amyloid Fibril Disruption by Ultrasonic Cavitation: Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulations,” *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 10549–10552 (2014).

S. G. ITOH and H. OKUMURA, “Dimerization Process of Amyloid- β (29-42) Studied by the Hamiltonian Replica-Permutation Molecular Dynamics Simulations,” *J. Phys. Chem. B* **118**, 11428–11436 (2014).

Y. MORI and H. OKUMURA, “Molecular Dynamics Study on the Structural Changes of Helical Peptides Induced by Pressure,” *Proteins: Struct., Funct., Bioinf.* **82**, 2970–2981 (2014).

H.-L. CHIANG, C.-J. CHEN, H. OKUMURA and C.-K. HU, “Transformation between α -Helix and β -Sheet Structures of One and Two Polyglutamine Peptides in Explicit Water Molecules by Replica-Exchange Molecular Dynamics Simulations,” *J. Comput. Chem.* **35**, 1430–1437 (2014).

H. OKUMURA, S. G. ITOH, A. M. ITO, H. NAKAMURA and T. FUKUSHIMA, “Manifold Correction Method for the Nosé-Hoover and Nosé-Poincaré Molecular Dynamics Simulations,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **83**, 024003 (5 pages) (2014).

B-4) 招待講演

H. OKUMURA, “All-atom molecular dynamics simulations of amyloid-fibril disruption and peptide oligomerization,” Mini Symposium, Okazaki (Japan), December 2014.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations for amyloid fibril disruption and dimerization of amyloid- β peptides,” 2nd International Conference on Computational Science and Engineering, Ho Chi Minh City (Vietnam), August 2014.

H. OKUMURA, “Generalized-Ensemble Molecular Dynamics Simulations,” 2014 UST-Sokendai Joint Seminar on Computational Sciences, Daejeon (Korea), July–August 2014.

H. OKUMURA, “Generalized-ensemble algorithms to determine free-energy landscape of proteins,” 10th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering, Athens (Greece), April 2014.

H. OKUMURA, “Replica-permutation molecular dynamics simulation of biomolecules,” Pure and Applied Chemistry International Conference 2014, Khon Kaen (Thailand), January 2014.

H. OKUMURA, “Replica-permutation method for protein simulation and amyloid disruption by cavitation in non-equilibrium molecular dynamics simulation,” Joint IMS-KU workshop on molecular sciences towards green sustainability, Bangkok (Thailand), January 2014.

S. G. ITOH, “Free-energy calculation by the replica-permutation method for biomolecules,” 10th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering, Athens (Greece), April 2014.

S. G. ITOH, “Replica-permutation method to realize efficient conformational sampling for biomolecules,” 日本化学会第94回春季大会アジア国際シンポジウム, Nagoya (Japan), March 2014.

奥村久士, 「生体分子系, 液体系における分子動力学シミュレーション手法の開発と応用」, 第28回分子シミュレーション討論会学術賞受賞講演, 仙台市民会館, 2014年11月.

奥村久士, 「Molecular dynamics simulations of A β amyloid fibrils」, 岡崎統合バイオサイエンスセンターリトリート, 岡崎統合バイオサイエンスセンター, 2014年11月.

奥村久士, 「各種統計アンサンブルの生成法」, 第8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, 2014年10月.

奥村久士,「アミロイド線維の破壊と形成初期過程の分子動力学シミュレーション」, 第二回CUTE シンポジウム, 三重大学極限ナノエレクトロニクスセンター, 2014年 10月.

奥村久士,「親水性／疎水性溶液界面でのアミロイドベータペプチド凝集機構の理論的研究」, 新学術領域「動的秩序と機能」全体班会議, 栗津温泉おびし荘, 2014年 8月.

奥村久士,「キャビテーションによるアミロイド破壊の非平衡分子動力学シミュレーション」, 山手イブニングセミナー, 岡崎統合バイオサイエンスセンター, 2014年 6月.

奥村久士,「タンパク質におけるレア・イベントを効率よく引き起こす分子動力学シミュレーション: 拡張アンサンブル法」, 日本物理学会第69回年次大会シンポジウム: 理論物質科学の最前線: レア・イベントを中心として, 東海大学, 2014年 3月.

奥村久士,「拡張アンサンブル法によるタンパク質の分子動力学シミュレーション」, 計測自動制御学会第1回制御部門マルチシンポジウム, 電気通信大学, 2014年 3月.

西澤宏晃,「京一般利用枠採択までの道のり」, 第3回CMSI「京」・HPCI スパコン利用情報交換会, 理化学研究所計算科学研究機構, 2014年 6-7月.

B-6) 受賞, 表彰

奥村久士, 分子シミュレーション研究会学術賞 (2014).

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 (2011-2014).

日本生物物理学会中部支部会幹事 (2013-2015).

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

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」(公募研究), 「親水性／疎水性溶液界面でのアミロイドベータペプチド凝集機構の理論的研究」, 奥村久士 (2014年度-2015年度).

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-2015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伸長過程においては、その末端にタンパク質1分子が順次結合して β シート構造に変化していくと考えられているがそのメカニズムはまだわかっていない。またアミロイド β ペプチドのアミロイド線維の伸長は両端のうち一方でしか起きないことが知られているが、その理由もわかっていない。そこで水中におけるアミロイド線維の分子動力学シミュレーションを行い、揺らぎに注目した解析によりアミロイド β ペプチドのアミロイド線維が一方向にしか伸長しない理由を解明する。
- ② アミロイド β ペプチドの異常凝集は神経系に豊富に存在する糖脂質GM1ガングリオシドクラスター上でアミロイド β ペプチドが会合することで起きると報告されている。これまで糖脂質クラスターを舞台とするアミロイド β ペプチドの凝集機構の解明は実験研究が先行して進められてきた。一方、理論的な試みについては、バルクな水中での研究は数多くあるものの糖鎖／脂質界面での研究はない。そこで糖鎖／脂質界面をモデル化した親水性／疎水性溶液界面でアミロイド β ペプチドがダイナミックに離合集散する過程のシミュレーションを行い、アミロイド β ペプチドが自律的に集合する物理化学的メカニズムを理論的に解明する。
- ③ 拡張アンサンブル法とよばれる方法にはマルチカノニカル法、レプリカ交換法、焼き戻し法などがある。後者2つでは詳細つり合い条件を満たすメトロポリスによるアルゴリズムにより遷移確率を計算する。一方、最近提案された諏訪・藤堂法は詳細つり合い条件を満たさない方法であり、その棄却確率は最小になる。最近我々は諏訪・藤堂法をレプリカ交換法に適用した方法(レプリカ置換法)を開発し、サンプリング効率が向上することを示した。今後、諏訪・藤堂法を焼き戻し法に適用する。

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，これらは陽・陰イオン間相互作用エネルギーの緩和過程の違いによって顕著に表れることに注目し，中間散乱関数などの解析より，動的不均一性と空間的な構造不均一性との研究を進めているところである。

B-4) 招待講演

T. ISHIDA, "Molecular Dynamics Study of The Dynamical Properties on Ionic Liquids," 7th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Barcelona, Catalonia (Spain), July 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ックス」, 石田干城 (2008年-2009年).

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

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

C) 研究活動の課題と展望

本年度は溶液内での光励起後の分子内エネルギー移動過程の解析方法について前年までの研究の拡張を計画し、行った。関連した研究と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ックスを分子動力学法により解析する研究活動を行い、多くの知見と進展を得ることが出来た。また、溶液内での化学反応の研究では解析方法を発展させて、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計画し、研究を開始させた。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ッ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の理論研究をさらに進めることができた。今後、イオン液体に関して分子論的な統一した視点から動的挙動や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。これによりいくつかのサイズの金ナノロッドのプラズモンの緩和（10 fs 前後）を，近接場領域で実時間観測して比較することに成功し，また条件によって複数のプラズモンモードのコヒーレント同時励起後の特徴的な時空間ダイナミクスの可視化にも成功しつつある。また近接場円二色性イメージングの装置開発を進めており，2次元金属ナノ構造の局所光学活性の研究を行っている。この手法についても更に精度を向上させ，様々な系に適用する予定である。
- b) 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，その起源を明らかにした。貴金属微粒子を凝集・配列した試料の近接場領域での光学的性質に関する研究を，多くの所外との共同研究も含め進めている。我々は既に数年前に，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。これを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，その目的で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を導入した。これらを用いて現在，微粒子配列構造の分光特性の計測と光場の空間構造の近接場測定を進めている。
- 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い，光学

活性が部分構造間で電子が流れる電流によるのではなく、遠隔的な電磁気学相互作用で現れていることを示した。また高い対称性を持つアキラな金属ナノ長方形構造において、巨視的な光学活性は当然現れないが、局所的には強い光学活性を示しており、それを平均すると全体の光学活性がほぼ0となっていることを、円二色性イメージングによって明確に示した。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, H. OKAMOTO, D. McARTHUR, B. HOURAHINE and F. PAPOFF, “Plasmon Modes in Single Gold Nanodiscs,” *Opt. Express* **22**, 12189–12199 (2014).

T. NARUSHIMA, S. HASHIYADA and H. OKAMOTO, “Nanoscopic Study on Developing Optical Activity with Increasing Chirality for Two-Dimensional Metal Nanostructures,” *ACS Photonics* **1**, 732–738 (2014).

S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, “Local Optical Activity in Achiral Two-Dimensional Gold Nanostructures,” *J. Phys. Chem. C* **118**, 22229–22233 (2014).

B-3) 総説、著書

成島哲也, 橋谷田俊, 岡本裕巳, 「2次元金属ナノ構造体が見出す強い局所光学活性：近接場円二色性イメージング」, *表面科学* **35**, 312–318 (2014).

岡本裕巳, 「非線形共鳴光トラッピング」, *レーザー研究* **42**, 776–779 (2014).

B-4) 招待講演

岡本裕巳, 「非線形光マニピュレーション」, 日本化学会第94春季年会, 名古屋, 2014年3月.

岡本裕巳, 「プラズモン物質のナノ光学イメージング」, 第8回分子科学討論会, 東広島, 2014年9月.

B-6) 受賞、表彰

岡本裕巳, 光科学技術研究振興財団研究者表彰 (1994).

岡本裕巳, 分子科学研究奨励森野基金 (1999).

井村考平, 応用物理学会講演奨励賞 (2004).

井村考平, ナノオプティクス賞 (2005).

井村考平, 分子構造総合討論会奨励賞 (2005).

井村考平, 光科学技術研究振興財団研究者表彰 (2007).

井村考平, 日本化学会進歩賞 (2007).

井村考平, 日本分光学会賞(奨励賞) (2007).

原田洋介, ナノオプティクス賞 (2010).

岡本裕巳, 日本化学会学術賞 (2012).

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

橋谷田俊, 日本光学会 OPJ ベストプレゼンテーション賞 (2013).

西山嘉男, 日本分光学会年次講演会一般講演賞 (2014).

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).

1st Optical Manipulation Conference, Optics & Photonics International Congress 2014, 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

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 (2012-2014).

B-8) 大学での講義、客員

総合研究大学院大学高エネルギー加速器科学研究科・物理科学研究科,「計測と制御」,2014年7月1日.

総合研究大学院大学物理科学研究科,「構造光科学」,2014年7月3日-4日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「動的近接場分光法による励起伝播ダイナミクスの分子科学」,岡本裕巳(2004年-2006年).

科研費若手研究(B),「メソスコピック領域における金微粒子を用いた空間的エネルギー伝播の直接観測」,井村考平(2004年-2006年).

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

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

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

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

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

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

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

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

科学技術振興機構さきかけ研究,「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-2014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).

二国間交流事業共同研究(英国との共同研究),「ナノフォトニック物質の光電場構造・ダイナミクス解析」,岡本裕巳(2012年-2014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-).

科研費基盤研究(C),「局所的に発現するナノ構造の強い光学活性の実態解明と物質系との相互作用への展開」,成島哲也(2014年-).

科学技術振興機構さきかけ研究,「強い局所光学活性を利用したキラル光デバイス」,成島哲也(2014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。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 レベルの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緩和のイメージング、多モードコヒーレント励起後の時空間ダイナミクスのイメージングが可能となってきた。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。貴金属ナノ構造の局所的な円二色性の分布の観測によって、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ほか、対称性の高いアキラな構造でも局所的に強い光学活性を示すという、ユニークな成果を得ることができた。近接場円二色性イメージングはキラなプラズモンに対する特徴的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る。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～2014 年 8 月 31 日) *)

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ている。
- 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、ベンゼンと He や H₂/D₂ から構成される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。
- 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、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を実現した。

B-1) 学術論文

C. NIIDA, M. NAKAJIMA, Y. SUMIYOSHI, Y. OHSHIMA, H. KOHGUCHI and Y. ENDO, "FTMW Spectroscopy and Determination of the 3-Dimensional Potential Energy Surface for Ar-CS," *J. Chem. Phys.* **410**, 104310 (8 pages) (2014).

B-4) 招待講演

Y. OHSHIMA, “Coherent nonlinear optical manipulation of molecular vibration and rotation,” Indo-Japan Workshop on “Frontiers in Molecular Spectroscopy: Fundamentals and Applications to Material and Biology,” Nara (Japan), November 2014.

K. MIZUSE and Y. OHSHIMA, “Taking a movie of rotating molecules,” International Workshop on “Coherence and Control in the Quantum World: Current and Future Trends,” Rehovot (Israel), December 2014.

水瀬賢太, 「超高速分子回転ダイナミクスの光制御と実時間イメージング」, 第10回若手研究者たちによる先端的レーザー分光シンポジウム, 横浜, 2014年12月.

B-6) 受賞, 表彰

大島康裕, 分子科学研究奨励森野基金 (1994).

北野健太, 第23回化学反応討論会ベストポスター賞 (2007).

北野健太, 平成21年度分子科学会優秀講演賞 (2009).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本分光学会装置部会企画委員 (1995–1999).

日本化学会近畿支部幹事 (2001–2003).

日本化学会東海支部幹事 (2005–2006).

分子科学研究会委員 (2004–2006).

分子科学総合討論会運営委員 (2004–2006).

分子科学会運営委員 (2006–2010, 2012–).

分子科学会幹事 (2008–2010, 2012–).

日本分光学会先端レーザー分光部会幹事 (2006–).

日本化学会物理化学ディビジョン主査 (2010–2012).

日本分光学会理事 (2011–).

学会の組織委員等

The East Asian Workshop on Chemical Reactions, Local Executive Committee (1999).

分子構造総合討論会実行委員 (2002–2003).

化学反応討論会実行委員 (2005–2006).

分子科学討論会実行委員 (2008–2009, 2014–).

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

科研費特定領域研究「強光子場分子制御」(公募研究),「強光子場による分子配列・変形の分光学的キャラクタリゼーション」, 大島康裕 (2003年-2005年).

科研費基盤研究(A),「高輝度コヒーレント光によるコンフォメーションダイナミックスの観測と制御」, 大島康裕 (2006年-2009年).

三菱財団自然科学研究助成,「量子準位分布制御を利用した分子間相互作用の精密決定」, 大島康裕 (2006年-2007年).

科研費若手研究(B),「気相分子の回転固有状態の波動関数イメージング」, 長谷川宗良 (2006年-2007年).

科研費萌芽研究,「マルチカラー同時発振レーザーの開発とコヒーレント分子科学への展開」, 大島康裕 (2008年-2009年).

科研費特定領域研究「高次系分子科学」(公募研究),「非線形コヒーレント分光による分子間相互作用の精密決定」, 大島康裕 (2008年-2011年).

科研費若手研究(B),「高強度レーザー場を用いた新しい振動分光法による孤立分子クラスター研究の新展開」, 長谷川宗良 (2009年-2010年).

科研費基盤研究(A),「分子運動量子状態のデザインと再構築」, 大島康裕 (2010年-2013年).

科研費研究活動スタート支援,「水和クラスターのコヒーレント分光による動的水素結合構造の研究」, 水瀬賢太 (2011年-2012年).

科研費挑戦的萌芽研究,「ナノ秒チャープパルスによる非線形ラマン分光の高感度・高機能化」, 大島康裕 (2014年-2015年).

科研費若手研究(B),「水和クラスターにおける水素結合ダイナミックスの光制御と実時間観測」, 水瀬賢太 (2014年-2015年).

科研費新学術領域研究「柔らかな分子系」(公募研究),「分子クラスターの振動コヒーレント制御による分子間相互作用ダイナミックスの研究」, 水瀬賢太 (2014年-2015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み、ついに、回転量子波束の4Dイメージングを実現することができた。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、より複雑なクラスターへと研究対象を拡大していく。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。

※) 2014年9月1日東京工業大学大学院理工学研究科教授

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

K. OHMORI, “Optically Engineered Quantum States in Ultrafast and Ultracold Systems,” *Found. Phys.* **44**, 813–818 (2014).

Y. OHTSUKI, H. GOTO, H. KATSUKI and K. OHMORI, “Theoretical/Numerical Study on Strong-Laser-Induced Interference in the B State of I_2 ,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 5689–5697 (2014).

B-3) 総説, 著書

K. OHMORI, “Quantum Superrotor,” *Physics* **7**, 29 (2014).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

K. OHMORI, “Ultrafast Electron Dynamics beyond Mean-Field in a Strongly-Correlated Ultracold Rydberg Gas,” Coherence and Control in the Quantum World: Current and Future Trends, Weizmann Institute of Science, Rehovot (Israel), December 2014.*

K. OHMORI, “Exploring Quantum-Classical Boundary with Light,” Fujihara Seminar: Real-time Dynamics of Physical Phenomena and Manipulation by External Fields, Tomakomai (Japan), September 2014.*

K. OHMORI, “Ultrafast Many-Body Dynamics in an Ultracold Rydberg Gas,” Ultracold Rydberg Physics Workshop, Granada (Spain), September 2014.*

K. OHMORI, “Exploring Quantum-Classical Boundary with Coherent Control,” Coherence and Control in the Quantum World: The Legacy of Moshe Shapiro, University of British Columbia, Vancouver (Canada), August 2014.*

K. OHMORI, “Exploring Quantum-Classical Boundary with Light,” Physikalisches Kolloquium of University of Heidelberg, Heidelberg (Germany), January 2014 (**Plenary Talk** at 11th Germany-Japan Science Colloquium, Heidelberg (Germany), January 2014).*

K. OHMORI, “Ultrafast Coherent Control of an Ultracold Rydberg Gas,” Networks of Ultra-Cold Rydberg Atoms, Keble College in Oxford (U.K.), January 2014.

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 (2013–2014).

European Research Council (ERC), Invited Panel Evaluator.

European Research Council (ERC), Invited Expert Referee.

学会誌編集委員

Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, International Advisory Board (2015–).

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-.

University of Strasbourg, 客員教授, 2014年-.

“Exploring Quantum-Classical Boundary with Light,” Public Lecture at University of Strasbourg, Strasbourg (France), July 3, 2014.

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-2016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励起・光電子スペクトルを 1-10 meV オーダーで精密かつ系統的に観測することで，励起・イオン化した原子周辺の局所的な分子間相互作用の様子が明らかにできることを示してきた。特に最近，その場観測用軟X線吸収試料セルを開発することによって，混合液体や固液界面反応系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測定結果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, K. MOCHIZUKI, V. LELOUP and N. KOSUGI, “Local Structures of Methanol-Water Binary Solutions Studied by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. B* **118**, 4388–4396 (2014).

H. KONDOH, Y. HIGASHI, M. YOSHIDA, Y. MONYA, R. TOYOSHIMA, K. MASE, K. AMEMIYA, F. TSUKIOKA, M. NAGASAKA, Y. IWASAWA, H. ORITA, K. MUKAI and J. YOSHINOBU, “Structure and Photo-Induced Charge Transfer of Pyridine Molecules Adsorbed on TiO₂(110): A NEXAFS and Core-Hole-Clock Study,” *Electrochemistry* **82**, 341–345 (2014).

M. NAGASAKA, H. YUZAWA, T. HORIGOME and N. KOSUGI, “In Operando Observation System for Electrochemical Reaction by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy with Potential Modulation Method,” *Rev. Sci. Instrum.* **85**, 104105 (7 pages) (2014).

H. YAMANE and N. KOSUGI, “Site-Specific Intermolecular Valence-Band Dispersion in α -Phase Crystalline Films of Cobalt Phthalocyanine Studied by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy,” *J. Chem. Phys.* **141**, 224701 (5 pages) (2014).

R. FLESCHE, N. KOSUGI, A. KNOP-GERICKE and E. RÜHL, “2s-Excitation and Photolonization of Neon Clusters,” *Z. Phys. Chem.* **228**, 387–403 (2014).

S. B. SINGH, Y.-F. WANG, Y.-C. SHAO, H.-Y. LAI, S.-H. HSIEH, M. V. LIMAYE, C.-H. CHUANG, H.-C. HSUEH, H. WANG, J.-W. CHIOU, H.-M. TSAI, C.-W. PAO, C.-H. CHEN, H.-J. LIN, J.-F. LEE, C.-T. WU, J.-J. WU, W.-F. PONG, T. OHIGASHI, N. KOSUGI, J. WANG, J. ZHOU, T. REGIER and T.-K. SHAM, “Observation of the Origin of d^0 Magnetism in ZnO Nanostructures Using X-Ray-Based Microscopic and Spectroscopic Techniques,” *Nanoscale* **6**, 9166–9176 (2014).

B-3) 総説, 著書

山根宏之, 「放射光を用いた有機薄膜・界面の電子状態と構造の相関解明」, *J. Vac. Soc. Jpn.* **56**(1), 11–17 (2013).

長坂将成, 「軟X線分光法による分子系の局所解析とその場観測手法の開発」, *放射光* **27**(2), 106–109 (2014).

長坂将成, 小杉信博, 「軟X線吸収分光法の基礎と進展」, 「CSJ カレントレビュー 14 放射光が拓く化学の現在と未来」, 日本化学会編, 分担執筆, 化学同人, 第10章, pp. 94–98 (2014).

B-4) 招待講演

N. KOSUGI, “Energy Shifts in X-Ray Absorption and Photoelectron Spectra of Liquid Water,” NORDITA Conference on Water—the Most Anomalous Liquid (Week 3), Nordic Institute for Theoretical Physics, Stockholm (Sweden), October 2014.

H. YAMANE, “Advanced spectroscopic studies on molecular electronic states at UVSOR-III facility,” Asia-Oceania Forum for Synchrotron Radiation Research: AOFSSR 2014, Hsinchu (Taiwan), September 2014.

長坂将成, 「軟X線分光法による分子系の局所解析とその場観測手法開発」, 第27回日本放射光学会年会, 広島, 2014年1月.

長坂将成, 「軟X線吸収分光法による電極固液界面の局所構造の解明」, 日本表面科学会第81回表面科学研究会及び日本真空学会研究例会, 東京, 2014年2月.

長坂将成, 「軟X線吸収分光法による電気化学反応のオペランド観測」, 日本放射光学会第7回若手研究会, 千葉, 2014年9月.

長坂将成, 「軟X線吸収分光法による溶液の局所構造解析とオペランド観測への展開」, 第37回溶液化学シンポジウム, 特別講演, 佐賀, 2014年11月.

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).

山根宏之, 分子科学会奨励賞 (2014).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会評議員 (1994–1995, 1998–1999, 2002–2003, 2006–2007, 2009–2010, 2012–2013), 庶務幹事 (1994), 特別委員会委員 (将来計画 2001–2003, 先端的リング型光源計画 2005–2006, 放射光光源計画 2009–2011).

日本化学会化学技術賞等選考委員会委員 (2001–2002), 学術賞・進歩賞選考委員会委員 (2014).

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, 2014–).

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-II 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の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), 特別研究員等審査会審査員 (2014), 国際事業委員会書面審査員 (2009–2010, 2014).

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, 2010–2016).

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, 2014–).

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).

東北放射光施設推進室委員 (2014–).

SPring-8 評価委員会委員 (2002, 2003, 2004), 登録機関利用活動評価委員会委員 (2008), 専用施設審査委員会委員 (2007-2010), パートナーユーザー審査委員会 (2013-).

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, 2014).

高度情報科学技術研究機構利用研究課題審査委員会委員 (2012-).

B-10) 競争的資金

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).

科研費基盤研究(A), 「軟X線内殻励起によるその場観測顕微分光法の確立と応用」, 小杉信博 (2014年-2016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).

科研費若手研究(B), 「軟X線吸収分光法によるクロスカップリング反応中間体の直接検出」, 湯澤勇人 (2014年-2015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。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、これまでの均一系を対象とした基礎化学から不均一系の化学やバイオ系も対象として、現在、精力的にその場観測・オペランド観測や顕微分光を展開している。また、緩やかな時間変化の追跡を組み合わせた実験も開始している。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、海外の他施設でも不可能なものも多く、国際共同研究に大きく貢献している。今後も引き続き国際的な視野に立った特徴ある研究を国際連携しながら UVSOR-III 施設で進めていく。

解 良 聡（教授）（2014 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：表面物理学，有機薄膜物性

A-2) 研究課題：

- a) シンクロトロン放射光・レーザー光励起による弱相互作用系の電子状態計測
- b) 有機半導体薄膜の電荷輸送機構の研究
- c) 有機半導体薄膜の界面電子準位接合機構の研究
- d) 機能性分子薄膜の光電子放出強度の理論解析と分子軌道撮影法の開発
- e) 機能性分子薄膜の振動状態と電子励起計測
- f) 自己組織化と分子認識機能の分光研究
- g) 分子薄膜の作製と評価：成長ダイナミクス，構造と分子配向

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 機能性分子薄膜の弱相互作用による電子状態変化を計測する技術開発を進めている。弱相互作用を定量的に評価するため，蒸気圧の低い大型分子対応の気相光電子分光実験装置を開発し，分子集合による電子状態の違いに関する議論を進めている。2014年度より新たに超短パルスレーザー光を励起源として電子状態を測定し，ホール緩和や励起子拡散など，電荷ダイナミクス関連の研究を開始した。
- b) 有機半導体のバンド分散関係：良質な配向有機結晶膜を作製し，価電子エネルギーバンド分散を測定し，分子間相互作用の大きさ，ホールの有効質量など，バンド伝導移動度を評価した。更に幾多の実験的困難の克服により，有機単結晶試料に対して行う技術を確立し，世界で初めて分散関係の検出に成功した。またパルス光源を用いた飛行時間型高分解能角度分解測定により，有機単結晶の二次元バンド分散関係の完全決定実験を進めている。
有機半導体の電荷振動結合：配向有機超薄膜の作製により，大型の分子薄膜系における光電子スペクトルの高エネルギー分解測定を実現する方法論を開拓して，分子薄膜における伝導ホールと分子振動の結合状態を初めて実測し，ホッピング移動度（そのポーラロン効果を含む）を分光学的に得る方法を開拓した。これらの物理量を実測することで，輸送機構の解明を目指している。
- c) 本質的には絶縁物である有機分子が n 型／p 型半導体として機能する起源を明らかにすべく研究を進めている。極めて高感度に光電子を捕捉し，評価可能な光電子分光装置を開発し，価電子バンドの 10 万分の 1 程度以下の微小バンドギャップ状態密度の検出に成功した。価電子帯トップバンドの状態密度分布がガウス型から指数関数型に変化し，基板フェルミ準位まで到達している様子をとりえた。ドナー・アクセプター半導体分子間の弱い vdW 結合から，分子と金属原子の局所的な強い化学結合によるギャップ準位形成までを統括し，エネルギー準位接合機構の解明を目指している。
- d) 高配向有機薄膜からの光電子放出強度の角度依存性について，多重散乱理論による強度解析を行い，分子薄膜構造の定量的解析を行うための方法論を検討してきた。多様な有機薄膜の分子配向に依存した電子波のポテンシャル散乱と干渉問題を評価してきた。また理論計算から，二次元角度分解測定により分子軌道の可視化が行え，配向分子系（固体）における分子計測の新たなツールとなりうることを提案した。放射光を利用した実験とともに，局在電子系における一電子近似の限界を検討し，弱相互作用の物理を議論している。

- e) 低速電子エネルギー損失分光により、機能性分子薄膜の振動状態と電子励起状態を測定し、弱相互作用による振動構造への影響を調べている。
- f) 表面場で織り成すパイ共役分子系の超格子構造や、分子薄膜の自己組織化機構の解明を目指している。また超分子系の固相膜を作製し、自己組織化や原子・分子捕獲などによる電子状態への影響を測定することで、分子認識機能について分光学的に研究している。
- g) 有機分子薄膜(高分子薄膜)の電子状態を議論する上で、試料調整方法の確立が鍵である。光電子放射顕微鏡(PEEM)、走査プローブ顕微鏡 (STM)、高分解能低速電子線回折 (SPALEED)、準安定励起原子電子分光 (MAES)、X線定在波法 (XSW)、軟X線吸収分光 (NEXAFS) 等を用い、基板界面における単分子膜成長から結晶膜成長までの多様な集合状態について構造 (分子配向) と成長を観察した。

B-1) 学術論文

Y. LIU, D. IKEDA, S. NAGAMATSU, T. NISHI, N. UENO and S. KERA, “Impact of Molecular Orbital Distribution on Photoelectron Intensity for Picene Film,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **195**, 287–292 (2014).

J.-P. YANG, Q.-J. SUN, K. YONEZAWA, A. HINDERHOFER, A. GERLACH, N. UENO, S.-D. WANG and S. KERA, “Interface Optimization Using Diindenoperylene for C₆₀ Thin Film Transistors with High Electron Mobility and Stability,” *Org. Electron.* **15**, 2749–2755 (2014).

B-3) 総説、著書

Y. NAKAYAMA, S. DUHM, Q. XIN, S. KERA, H. ISHII and N. UENO, “Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy (UPS) I: Band Dispersion Measurements of “Insulating” Organic Single Crystals,” in *Electronic Processes in Organic Electronics: Bridging Nanostructure, Electronic States and Device Properties*, H. Ishii, K. Kudo, T. Nakayama and N. Ueno, Eds., Springer Series in Materials Science, Chapter 2, vol. 209 (2014).

S. KERA, H. YAMANE and N. UENO, “Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy (UPS) II: Electron–Phonon Coupling and Hopping Mobility,” in *Electronic Processes in Organic Electronics: Bridging Nanostructure, Electronic States and Device Properties*, H. Ishii, K. Kudo, T. Nakayama and N. Ueno, Eds., Springer Series in Materials Science, Chapter 3, vol. 209 (2014).

N. UENO, T. SUEYOSHI, F. BUSSOLOTTI and S. KERA, “Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy (UPS) III: Direct Study of “Invisible” Band Gap States by Ultrahigh-Sensitivity UPS,” in *Electronic Processes in Organic Electronics: Bridging Nanostructure, Electronic States and Device Properties*, H. Ishii, K. Kudo, T. Nakayama and N. Ueno, Eds., Springer Series in Materials Science, Chapter 4, vol. 209 (2014).

B-4) 招待講演

S. KERA, “Energy distribution and density of gap states at organic–organic interfaces :Physics behind weak interaction,” The 2nd Workshop on Physics in Organic Optoelectronics (Joint JSPS-NSFC research program), Soochow (China), October 2014.

S. KERA, “Violation of sudden approximation at molecular monolayer interface,” SFB 1083-Workshop on Organic/Metal Interfaces, Marburg (Germany), July 2014.

S. KERA, “Advanced photoelectron spectroscopies for functional molecular materials,” The 7th Japan-Sweden Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications (ASOMEA-VII), Lund (Sweden), June 2014.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

UVSOR 利用者懇談会世話人 (2012–2014).

VUVX 真空紫外光物理およびX線物理国際会議国際諮問委員 (2014).

学会の組織委員等

第62回応用物理学会春季学術講演会プログラム編成委員 (2015).

第28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 (2014).

JSPS-NSFC joint 2nd Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Co-chair (Soochow Univ., China 2014).

第75回応用物理学会秋季学術講演会プログラム編成委員 (2014).

第61回応用物理学会春季学術講演会プログラム編成委員 (2013).

第27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 (2013).

JSPS-NSFC joint 1st Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Co-chair (Tokyo Univ. of Sci., Japan 2013).

UVSOR 研究会「UVSOR 有機固体専用ラインの今後の展開」主催者 (2012).

The 4th Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications (ASOMEA4), Local Committee (Chiba, Japan 2007).

21世紀COE プログラム若手主導研究会主催者 (2006).

Workshop on Electrical and Electronic Properties in Crystalline Thin Films of Small-Molecules, Co-chair (Chiba, Japan 2005).

UVSOR 研究会「有機薄膜の放射光利用研究：BL8B2 の歩みと今後の展開」主催者 (2007).

学会誌編集委員

真空誌編集委員 (2008–2009).

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Guest Editor (2014).

その他

千葉大学工学部工学同窓会部会幹事 (2008–2013).

B-8) 大学での講義，客員

千葉大学大学院融合科学研究科，連携客員教授，2014年9月－.

千葉大学大学院融合科学研究科，「ナノ創造物性工学特論II」，2014年9月－.

蘇州大学，客員教授，2014年4月－.

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(B)，「高度に配向を規定した有機積層膜の電子状態と価電子帯スペクトル構造の真の原因」，解良 聡 (2002年–2004年).

科研費若手研究(A),「巨大分子吸着系における価電子帯ホール・振動結合：有機電荷輸送機構の解明」, 解良 聡 (2005年-2007年).

科研費挑戦的萌芽研究,「有機デバイス材料の個性を知る：移動度の直接評価」, 解良 聡 (2008年-2009年).

科研費若手研究(A),「分子性固体における電荷輸送とその動的現象の解明」, 解良 聡 (2008年-2010年).

科研費基盤研究(B),「バイ共役分子による低次元超格子ヘテロ界面構造とその電子状態」, 解良 聡 (2011年-2013年).

日本学術振興会二国間交流事業共同研究費(NSFC),「有機タンデム光電子デバイスの有機半導体の本性を活用した高性能化」, 解良 聡 (2013年-2015年).

科研費基盤研究(A),「精密電子状態評価による有機半導体界面に特徴的な電子機能の解明」, 解良 聡 (2014年-2016年).

C) 研究活動の課題と展望

これまで積み重ねてきた大型の機能性分子の高配向薄膜試料を作製するノウハウを活用し、その電子状態を高分解能(高感度)光電子分光法により測定することで、分子材料中の「電子の真の姿を見出すこと」を主眼として進めている。着任後の各装置立ち上げを急ぎ、人材確保とともに研究室の定常状態の構築を目指したい。

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開発している。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。現在これらの予備実験結果に基づき、装置開発室と連携して真空装置を製作している。
- 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。また、CNT 対極のみを電気化学的に分析する方法も開発中である。以上により、基礎科学的な観点で、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によって、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、現在の装置は開発段階の試行錯誤の結果として大型・複雑で、広範な利用には不便である。そこで、これを改善した小型軽量で移動及び設置調整が容易な真空装置を作成している。これを用いてビームラインのユーザー利用等でも手軽にこの手法を利用できるようにする。これは(b)の装置との兼用となっている。(b)については、まず、作成した真空装置の組立調整および試運転を装置開発室の協力を得ながら実施する。その後UVSORを利用して、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)については既に、両側がCNT電極からなるシンメトリーセルを試作し、インピーダンス分光を試みている。今後は電池セル全体の作成を試み、電極の電位測定等を行う。また、電池としての性能評価を共同研究により実施する。これを気相分光の結果と比較して議論する事を目指す。これらに加えて、いくつかの大学の研究室と、共同研究を行うことについて相談を始めている。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。次世代の放射光源である回折限界リングや高繰返し極紫外自由電子レーザーに関する基礎研究を進めた。
- 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極紫外領域や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

E. ROUSSEL, C. EVAIN, M. LE PARQUIER, C. SZWAJ, S. BIELAWSKI, M. HOSAKA, N. YAMAMOTO, Y. TAKASHIMA, M. SHIMADA, M. ADACHI, H. ZEN, S. KIMURA and M. KATOH, “Transient Response of Relativistic Electron Bunches to Wave-Number Selected Perturbations near the Micro-Bunching Instability Threshold,” *New J. Phys.* **16**, 063027 (11 pages) (2014).

E. ROUSSEL, C. EVAIN, C. SZWAJ, S. BIELAWSKI, J. RAASCH, P. THOMA, A. SCHEURING, M. HOFHERR, K. ILIN, S. WÜNSCH, M. SIEGEL, M. HOSAKA, N. YAMAMOTO, Y. TAKASHIMA, H. ZEN, T. KONOMI, M. ADACHI, S. KIMURA and M. KATOH, “Microbunching Instability in Relativistic Electron Bunches: Direct Observations of the Microstructures Using Ultrafast YBCO Detectors,” *Phys. Rev. Lett.* **113**, 094801 (5 pages) (2014).

N. YAMAMOTO, H. ZEN, M. HOSAKA, T. KONOMI, M. ADACHI, K. HAYASHI, J. YAMAZAKI, Y. TAKASHIMA and M. KATOH, “Beam Injection with Pulsed Multipole Magnet at UVSOR-III,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A* **767**, 26–33 (2014).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

J. RAASCH, K. S. ILIN, A. SCHEURING, M. SIEGEL, P. THOMA, A.-S. MUELLER, Y.-L. MATHIS, N. J. SMALE, B. HOLZAPFEL, K. IIDA, S. BIELAWSKI, C. EVAIN, E. ROUSSEL, C. SZWAJ, M. KATOH, S. KIMURA, T. KONOMI, M. HOSAKA, N. YAMAMOTO and H. ZEN, “Electrical Field Sensitive High- T_c YBCO Detector for Real-Time Observation of CSR,” *Proc. Internat. Particle Accel. Conf.* 2533–3536 (2014).

T. INAGAKI, N. YAMAMOTO, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, X. G. JIN, M. ADACHI, Y. OKANO, T. KONOMI and M. KATOH, “Development of Temporal Response Measurement System for Transmission-Type Spin Polarized Photocathodes,” *Proc. Internat. Particle Accel. Conf.* 670–672 (2014).

N. YAMAMOTO, M. HOSAKA, T. TAKANO, A. MANO, Y. TAKASHIMA and M. KATOH, “Design Study of Pulsed Multipole Injection for Aichi SR,” *Proc. Internat. Particle Accel. Conf.* 1962–1964 (2014).

E. ROUSSEL, C. EVAIN, C. SZWAJ, S. BIELAWSKI, J. RAASCH, P. THOMA, A. SCHEURING, K. ILIN, M. SIEGEL, M. HOSAKA, N. YAMAMOTO, Y. TAKASHIMA, H. ZEN, T. KONOMI, M. ADACHI, S. KIMURA and M. KATOH, “Numerical Study of the Microbunching Instability at UVSOR-III: Influence of the Resistive and Inductive Impedances,” *Proc. Internat. Particle Accel. Conf.* 1656–1658 (2014).

R. INAGAKI, N. YAMAMOTO, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, T. KONOMI, T. TOKUSHI, Y. OKANO, M. KATOH, E. KAKO, S. YAMAGUCHI, Y. KOBAYASHI, S. SHIRAKI and T. HITOSUGI, “Development of Multi-Alkali Photocathode Deposited on LiTi_2O_4 Substrate for Srf-Gun,” *Proc. Internat. Particle Accel. Conf.* 673–675 (2014).

B-3) 総説, 著書

M. KATOH, “Terahertz Light Source Based on Synchrotron Radiation,” in “*Frontiers in Optical Methods—Nano-Characterization and Coherent Control*,” K. Shudo, I. Katayama and S. Ohno, Eds., Springer Series in Optical Sciences 180, Springer, ISSN 0342-4111, pp. 187–196 (2014).

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).

稲垣利樹, 第11回日本加速器学会年会賞(ポスター部門) (2014).

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), 「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).

科研費基盤研究(B), 「シンクロtron放射による真空紫外コヒーレント光渦ビームの発生」, 加藤政博 (2014年-2016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に到達した。この光源性能を 100% 引き出すための安定性の向上に取り組んでいる。トップアップ運転時のビームの動きを最小限にするパルス六極磁石による高度な入射に成功しその入射効率の向上へ向けて研究を進めている。

自由電子レーザーに関しては, 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に向けた予備実験を進める。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。次世代の真空紫外放射光源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する。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る。

極短パルスレーザーと蓄積リングの電子ビームを併用した, テラヘルツ領域でのコヒーレント放射の生成, 真空紫外領域で

のコヒーレント高調波発生の研究を進める。量子ビーム基盤技術開発プログラムのもと完成した新しい実験ステーションを用いて実用化に向けた技術開発を進める。また光渦など特異な光の発生とその利用法の開拓に取り組む。

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、名古屋大学などと協力し、スピン偏極電子源の開発を進める。生体物質への照射や逆光電子分光などへの展開を図る。

電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設）

大 東 琢 治（助教）（2011 年 8 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：X線光学

A-2) 研究課題：

- a) 査型透過X線顕微鏡ビームラインの高度化
- b) 走査型透過X線顕微鏡を用いた応用観察手法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ビームライン及びエンドステーションの高度化を行い、特に利用エネルギー領域の拡張を図る。現在、150 ～ 770 eV までのエネルギー領域を利用可能としてきた。またビームライン稼働開始以降、コンタミが原因で分析を行う事が出来なかった炭素領域のX線を、光学素子類やチャンバーの精密洗浄のプロセスを経ることで利用を可能とした。
- b) 固体高分子形燃料電池の湿度環境下における in-situ 観察／分析を行うため、加湿したヘリウムガスと乾燥したヘリウムガスの混合比をにより内部の湿度を制御可能な試料セルの開発を行った。この試料セルにより、室温で内部湿度 19 ～ 79% まで変化させられる事を確認した。この試料セルを用いて高分子材料の観察を行い、湿度によりその形状がナノメートルオーダーで変化する事を確認した。

B-1) 学術論文

S. B. SINGH, Y.-F. WANG, Y.-C. SHAO, H.-Y. LAI, S.-H. HSIEH, M. V. LIMAYE, C.-H. CHUANG, H.-C. HSUEH, H. WANG, J.-W. CHIOU, H.-M. TSAI, C.-W. PAO, C.-H. CHEN, H.-J. LIN, J.-F. LEE, C.-T. WU, J.-J. WU, W.-F. PONG, T. OHIGASHI, N. KOSUGI, J. WANG, J. ZHOU, T. REGIER and T.-K. SHAM, “Observation of the Origin of d^0 Magnetism in ZnO Nanostructures Using X-Ray-Based Microscopic and Spectroscopic Techniques,” *Nanoscale* **6**, 9166–9176 (2014).

B-4) 招待講演

T. OHIGASHI, “Present Status of a Newly-Installed STXM Beamline in the UVSOR-III Facility,” 20th NSRRC User’s Meeting and Workshop, Hsinchu (Taiwan), September 2014.

T. OHIGASHI, “Present Status and Researches of a STXM Beamline in the UVSOR-III Facility,” SpectroNanoscopia 2014, Gyeongju (Korea), November 2014.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

日本放射光学会編集委員 (2013–2014), 座長 (2014).

SpectroNanoscopia 2014, Organizing Committee, Chairman (2014).

B-11) 産学連携

トヨタ自動車(株), 共同研究「走査型X線透過顕微鏡を用いた固体高分子形燃料電池用電極の研究」, 大東琢治 (2014年).

C) 研究活動の課題と展望

稼働開始以来のビームラインの問題点であった, 炭素領域のX線は快復してきている。現在, ビームラインで利用可能なエネルギー領域は150～770 eVである。特に低エネルギー領域には新規集光光学素子の導入によってまだ開発の余地があるので, 低エネルギー領域利用のためのキャリブレーションを推進する。最終的な目標は, リチウムK吸収端のXANESを行うこと(55 eV)である。

上記ビームラインの改良と並行して, 湿度環境セルの改良により温度制御も可能とし, 高温・高湿度となる燃料電池の実際の稼働環境により近い状態での観察及び分析を行う。また嫌気性試料観察のための, サンプル搬送チャンバーの開発を行っている。

光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

田 中 清 尚（准教授）（2014 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：物性物理学，放射光科学

A-2) 研究課題：

- a) 高温超伝導体の電子状態の解明
- b) 新規スピン分解角度分解光電子分光装置の開発
- c) 角度分解光電子分光における低温技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 近年発見され世界中で精力的に研究がされている鉄系超伝導体はその高い超伝導転移温度 (T_c) から注目を集め、基礎・応用問わず世界中で精力的に研究がなされている。昨年まで在籍していた大阪大学理学部田島研究室では、高圧合成法により鉄系の中で最も高い T_c を持つ 1111 系と呼ばれる系の P と As を連続的に固溶させた組成の単結晶の育成に成功している。そこでバンド構造・超伝導ギャップ構造の詳細を明らかにすることを目的として UVSOR BL7U において角度分解光電子分光測定を行った。測定の結果、輸送測定で変化の見られた P/As 比を境に d_{xz} 軌道のバンドがフェルミ面を形成することがわかった。これは P/As 比による超伝導状態の違いが、フェルミ面の有無により決定されていることを示している。フェルミ面のネスティングを基本とするスピン揺らぎとは違うメカニズムを持つ超伝導状態が存在していることを直接明らかにした初めての結果であり、今後超伝導ギャップの対称性を測定することで、そのメカニズムを明らかにする予定である。
- b) 固体の光電子分光ビームラインであった BL5U では、高性能化を目指してビームラインとエンドステーションの全面的な更新を行っている。分光器には、入射スリットレス Monk-Gillieson 型可変偏角不等間隔平面回折格子分光器を採用しており、建設途中であるが光子数 10^{12} 光子数/秒以上と分解能 10^4 以上を同時に実現できていることを確認した。また、エンドステーション用に角度方向のスピン情報を一度に取り込める新たなスピン検出器を備え付けた角度分解光電子分光装置の開発を進めている。コンピュータシミュレーションにより電子レンズのパラメータの決定に成功し、今後実際の建設を進めていく。
- c) 角度分解光電子分光実験の高エネルギー分解能測定には、試料をどれだけ冷却できるかが重要となる。現在 UVSOR で最も高分解能な測定が可能である BL7U では、試料を 12 K までしか冷却することができず、その性能を十分生かすことができていない。そこでより低温まで冷却可能な 5 軸マニピュレータの開発を行った。冷却部の抜本的な設計の見直しをすることで試料部において 5 K、参照用金部で 4 K という低温を達成することができた。これにより高エネルギー分解能での測定が可能となるばかりでなく、超伝導など相転移温度の低い物質の測定も可能となることで、今後より幅広いユーザーを獲得できると期待される。

B-1) 学術論文

E. UYKUR, K. TANAKA, T. MASUI, S. MIYASAKA and S. TAJIMA, “Persistence of the Superconducting Condensate Far above the Critical Temperature of $\text{YBa}_2(\text{Cu,Zn})_3\text{O}_y$ Revealed by c-Axis Optical Conductivity Measurements for Several Zn Concentrations and Carrier Doping Levels,” *Phys. Rev. Lett.* **112**, 127003 (5 pages) (2014).

B-7) 学会および社会的活動

学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集委員 (2014-).

B-8) 大学での講義, 客員

大阪大学大学院理学研究科, 招へい教員, 2014年4月- .

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(スタートアップ), 「高温超伝導体の反射型テラヘルツ時間領域分光」, 田中清尚 (2008年-2009年).

科研費若手研究(B), 「電荷・スピンスライプ秩序相を有する高温超伝導体の電子構造」, 田中清尚 (2012年-2014年).

グローバルCOE プログラム「物質の量子機能解明と未来型機能材料創出」萌芽的研究, 「鉄系超伝導体における低エネルギー電荷応答」, 田中清尚 (2012年).

C) 研究活動の課題と展望

4月に着任後, 研究室の人員不足もありUVSORのBL5Uにおけるビームラインの立ち上げにほとんどの労力を割かねばならない状況であった。2015年は4月から新しい助教を迎えることも決定し, 本格的に研究をする体制が整う。2014年に取り組んできた装置開発の仕上げをするとともに, それらの装置を用いた実験を開始する予定である。

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) 内殻励起に起因する諸過程のダイナミクス
- b) 極紫外光渦による原子分子の光イオン化ダイナミクス
- c) 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
- d) シリコンドリフト検出器による内殻空孔状態の蛍光緩和過程の研究

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 1010 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、電子スペクトルを光のエネルギーの関数として計測する、高分解能二次元電子分光法の開発を行った。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的研究として進めている。特に二原子分子の場合、オージェ電子および解離イオンの運動エネルギーを同期計測することで、オージェ終状態ごとに解離イオンの電子状態を明らかにすることができる。理論計算による二価分子イオンのポテンシャル曲線と実験データを比較することにより、二価分子イオンの安定性や反応動力学について研究を進めている。
- b) 円偏光アンジュレータ放射の高次光には、螺旋状の波面を持ち中心部の強度がゼロとなる特異な状態の光、いわゆる光渦の性質があることが知られている。螺旋波面の構造に応じて、光に軌道角運動量が付与されるので、原子分子との相互作用において、通常の電子遷移とは異なる選択則に従うものと考えられる。UVSOR に設置されている、可変偏光型アンジュレータ U1 を光源とする BL1U は、極紫外域の光渦が利用可能な数少ないビームラインであり、ここに電子イメージング装置を持ち込んで、ヘリウム原子からの光電子角度分布測定を行った。BL1U は、ビームラインとしては最低限の設備しかないため、偏向電磁石部からの散乱光による二次電子が多量に発生し、必要な観測データを得ることは困難を極めた。複数回のビームタイムにより、二次電子によるバックグラウンドを低減した状態での測定に成功した。現在、データ解析中である。
- c) 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、100nm 集光ラインにおいて、Ti 薄板に XFEL を集光照射し、X線領域における 2 光子吸収過程の観測に世界に先駆けて成功した。今後も、X線領域における非線形過程の観測や 2 光子吸収過程を利用した XFEL パルス幅の直接計測などの実験研究を進める。

- d) 軽元素の内殻空孔状態は、主にオージェ電子放出によって緩和する。しかし、1%以下の低い確率ながら、軟X線を放出する蛍光緩和過程が存在する。我々は、従来の検出器よりも格段に検出感度が高い、シリコンドリフト検出器を用いて、軟X線蛍光収量法によるX線吸収スペクトルの計測を行った。内殻共鳴励起に対応するピークの強度は、全イオン収量によるスペクトルとは異なることが明らかになった。今後、軟X線蛍光の放出角度異方性、及び蛍光寿命の評価を行い、軽元素の内殻空孔状態の蛍光緩和過程について研究を進めて行く。

B-1) 学術論文

Y. HIKOSAKA, P. LABLANQUIE, F. PENENT, P. SELLES, E. SHIGEMASA and K. ITO, “Resonant Multiple Auger Decay after the $2p_{3/2}^{-1} 4s$ Excitation in Ar Studied with a Multielectron Coincidence Method,” *Phys. Rev. A* **89**, 023410 (6 pages) (2014).

Y. HIKOSAKA, M. SAWA, K. SOEJIMA and E. SHIGEMASA, “A High-Resolution Magnetic Bottle Electron Spectrometer and Its Application to a Photoelectron–Auger Electron Coincidence Measurement of the $L_{2,3}VV$ Auger Decay in CS_2 ,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **192**, 69–74 (2014).

K. TAMASAKU, E. SHIGEMASA, Y. INUBUSHI, T. KATAYAMA, K. SAWADA, H. YUMOTO, H. OHASHI, H. MIMURA, M. YABASHI, K. YAMAUCHI and T. ISHIKAWA, “X-Ray Two-Photon Absorption Competing against Single and Sequential Multiphoton Processes,” *Nat. Photonics* **8**, 313–316 (2014).

Y. HIKOSAKA, Y. SHIBATA, K. SOEJIMA, H. IWAYAMA and E. SHIGEMASA, “Site-Specific Formation of Metastable Dications Following Inner-Shell Ionization of CO_2 ,” *Chem. Phys. Lett.* **603**, 46–50 (2014).

T. GEJO, T. IKEGAMI, K. HONMA, O. TAKAHASHI, E. SHIGEMASA, Y. HIKOSAKA and Y. TAMENORI, “Dynamics of Oxygen Rydberg Atom Generation Following O 1s Inner-Shell Excitation of H_2O ,” *J. Chem. Phys.* **140**, 214310 (7 pages) (2014).

P. LABLANQUIE, H. IWAYAMA, F. PENENT, K. SOEJIMA and E. SHIGEMASA, “Lifetime Broadening of Atomic Lines Produced upon Ultrafast Dissociation of HCl and HBr,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **195**, 96–100 (2014).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会渉外委員 (2005–2006).

日本放射光学会評議員 (2006–2009, 2010–2011, 2012–).

日本放射光学会渉外幹事 (2007–2009).

学会の組織委員等

日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウム組織委員 (1999–2001, 2009, 2012).

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

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

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

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

第22回化学反応討論会実行委員 (2006).

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

第21回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2007).
第2回 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

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).

科研費基盤研究(B), 「短波長自由電子レーザーによる軟X線超蛍光の観測」, 繁政英治 (2014年-2016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

BLIUにおいて実施した極紫外域の光渦を利用した電子分光実験で明らかになった散乱光の問題については、今後、ビームライン上流に四象限スリットやマスクを導入するなどのビームライン整備を実施することで解決を図る。また、より高度な実験研究を実施するために、分光ビームラインの整備を進めている。BL6Uでの研究については、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て継続し、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、電子緩和過程と解離の競合など、内殻電子励起状態のダイナミクスや二価分子イオンの安定性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では，パルスギャップであるサブナノ秒での高輝度光発生が望め，光イオン化過程に有利なため極めて低いエネルギーで効率的なエンジン点火が可能となる。すでに世界ではじめての自動車エンジン搭載，走行実験にも成功して

いる。また、この高輝度光は光パラメトリック過程によるテラヘルツ波発生にも有利で、自由電子レーザーを凌駕する尖頭値で 50 kW に至る高出力化を実証できた。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

- M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “Temporal and Spatial Observations of the Anisotropic Transmission of a Cr:YAG Saturable Absorber in a Passively Q-Switched Laser,” *Rev. Laser Eng.* **42**, 71–78 (2014). (in Japanese)
- H. MINAMIDE, S. HAYASHI, K. NAWATA, T. TAIRA, J. SHIKATA and K. KAWASE**, “Kilowatt-Peak Terahertz-Wave Generation and Sub-Femtojoule Terahertz-Wave Pulse Detection Based on Nonlinear Optical Wavelength-Conversion at Room Temperature,” *J. Infrared Milli. Terahtz. Waves* **35**, 25–37 (2014).
- K. NAWATA, T. NOTAKE, H. ISHIZUKI, F. QI, Y. TAKIDA, S. FAN, S. HAYASHI, T. TAIRA and H. MINAMIDE**, “Effective Terahertz-To-Near-Infrared Photon Conversion in Slant-Stripe-Type Periodically Poled LiNbO₃,” *Appl. Phys. Lett.* **104**, 091125 (3 pages) (2014).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Highly Accurate Interferometric Evaluation of Thermal Expansion and dn/dT of Optical Materials,” *Opt. Mater. Express* **4**, 876–888 (2014).
- S. HAYASHI, K. NAWATA, T. TAIRA, J. SHIKATA, K. KAWASE and H. MINAMIDE**, “Ultrabright Continuously Tunable Terahertz-Wave Generation at Room Temperature,” *Sci. Rep.* **4**, 1–5 (2014).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Improvement of Laser-Beam Distortion in Large-Aperture PPMgLN Device by Using X-Axis Czochralski-Grown Crystal,” *Opt. Express* **22**, 19668–19673 (2014).
- Y. SATO, M. ARZAKANTSYAN, J. AKIYAMA and T. TAIRA**, “Anisotropic Yb:FAP Laser Ceramics by Micro-Domain Control,” *Opt. Mater. Express* **4**, 2006–2015 (2014).
- S. ILAS, P. LOISEAU, G. AKA and T. TAIRA**, “240 kW Peak Power at 266 nm in Nonlinear YAl₃(BO₃)₄ Single Crystal,” *Opt. Express* **22**, 30325–30332 (2014).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- T. TAIRA**, “Giant Micro-Photonics for Laser Ignitions,” *1st International Symposium on High Power Laser Science and Engineering (HPLSE2014)*, C-10 (2014).
- K. NAWATA, T. NOTAKE, H. ISHIZUKI, F. QI, Y. TAKIDA, S. FAN, S. HAYASHI, T. TAIRA and H. MINAMIDE**, “Sensitive THz-Wave Detector Using a Quasi-Phase-Matched LiNbO₃ at Room Temperature,” *Nonlinear Optics and its Applications (Conference 9136A), SPIE Photonics Europe 2014*, 9136-40 (2014).
- T. TAIRA**, “Laser Ignition,” *Plenary II, Plenary Sessions of OPIC’14, OPTICS & PHOTONICS International Congress 2014 (OPIC’14)* (2014).
- T. TAIRA**, “Opening Remarks of Joint Session,” *Joint Session PLD&LIC1, The 2nd Laser Ignition Conference (LIC’14), OPIC’14* (2014).
- R. YASUHARA and T. TAIRA**, “Mmicrochip-Laser Based Probe Laser System for Thomson Scattering Diagnostics,” *Joint Session PLD&LIC, The 2nd Laser Ignition Conference (LIC’14), OPIC’14, PLD&LIC1-1* (2014).
- T. TAIRA**, “Promise of Laser Ignition,” *The 2nd Laser Ignition Conference (LIC’14), OPIC’14, LIC2-1* (2014).

- K. MURATE, Y. TAIRA, S. R. TRIPATHI, S. HAYASHI, K. NAWATA, H. MINAMIDE, T. TAIRA and K. KAWASE**, “High Dynamic Range THz Wave Spectroscopic System Using Microchip Nd:YAG laser,” *The 2nd Laser Ignition Conference (LIC’14), OPIC’14*, LICp-3 (2014).
- J. GAO, T. SAKAMOTO, R. BHANDARI, T. TAIRA, S. ISHIUCHI and Y. FURUKAWA**, “Investigation of Post-Ionizations of Sputtered Atoms in TOF-MS Using a Palm-Top-Size Megawatt Microlaser,” *The 2nd Laser Ignition Conference (LIC’14), OPIC’14*, LIC4-2 (2014).
- K. NAWATA, T. NOTAKE, H. ISHIZUKI, F. QI, Y. TAKIDA, S. FAN, S. HAYASHI, T. TAIRA and H. MINAMIDE**, “Effective THz Detection Using a Periodically Poled LiNbO₃,” *The 3rd Advanced Lasers and Photon Sources (ALPS’14), OPIC’14*, ALPS6-2 (2014).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Linear Thermal Expansion Coefficient of YAG Single Crystal Along Various Orientations,” *The 2nd Laser Ignition Conference (LIC’14), OPIC’14*, LIC7-3 (2014).
- M. TSUNEKANE and T. TAIRA**, “Thin Rod Micro-Laser for Ignition,” *The 2nd Laser Ignition Conference (LIC’14), OPIC’14*, LIC9-2 (2014).
- R. BHANDARI and T. TAIRA**, “Green Microlaser for Ignition,” *The 2nd Laser Ignition Conference (LIC’14), OPIC’14*, LIC9-3 (2014).
- T. TAIRA and H. ISHIZUKI**, “Promise of Large Aperture PPMgLN,” *Proceedings of Advanced Lasers and Their Applications workshop*, Fri-D2-1, 40 (2014).
- T. TAIRA**, “RE³⁺ Ceramic Lasers for Energy: From Engine to Fusion Ignitions,” *5th International Workshop on Photoluminescence in Rare Earths: Photonic Materials and Devices (PRE’14)* (2014).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Updating of Temperature Coefficients of Refractive Index in Nd:GdVO₄ and Nd:YVO₄,” *CLEO 2014*, SM3F.4 (2014).
- R. BHANDARI and T. TAIRA**, “> 0.5 MW Peak Power, kHz Repetition Rate at 266 nm Using [100]-Cut Nd:YAG Microchip Laser,” *CLEO 2014*, STu1I.4 (2014).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Fabrication of Large-Aperture PPMgLN Device Using X-Axis Czochralski-Grown Crystal,” *CLEO 2014*, STu1I.5 (2014).
- T. TAIRA**, “Giant Micro-Photonics for Future Energy,” *14th International Balkan Workshop on Applied Physics (IBWAP-2014)*, S0 03 (2014).
- T. TAIRA**, “Micro Domain-Controlled Laser Materials Toward Giant Micro-Photonics,” *6th EPS-QEOD Europhoton Conference*, ThD-T1-I-01 (2014).
- T. TAIRA**, “VCSEL-Pumped Giant-Pulse Microchip Lasers,” *International Symposium on Physics and Applications of Laser Dynamics 2014 (IS-PALD 2014)* (2014).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “1J Pumped Optical Parametric Oscillation by Using Large-Aperture PPMgLN Device,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, ATu4A.3 (2014).
- A. KAUSAS and T. TAIRA**, “Timing Jitter Control by Scanning Coupled Cavity in Passively Q-Switched Nd:YVO₄/Cr:YAG Laser,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, ATu4A.40 (2014).
- T. TAIRA**, “Giant Micro-Photonics for Laser Ignition,” *OSA Topical Meeting on Latin America Optics & Photonics Conference (LAOP)*, LF2D.2 (2014).

T. TAIRA, “Micro-Domain Control Toward Giant Micro-Photonics,” *10th Laser Ceramics Symposium (LCS2014)*, KIT-5 (2014).

B-3) 総説, 著書

Y. LU and T. TAIRA, “Introduction: Nonlinear Optics (NLO) 2013 Feature,” *Opt. Mater. Express* **4**, 41–42 (2014).

Y. JEONG, S. JIANG, K. GALLO, T. SÜDMEYER, M. HEHLEN and T. TAIRA, “Focus Issue Introduction: Advanced Solid-State Lasers (ASSL) 2013,” *Opt. Express* **22**, 8813–8820 (2014).

T. TAIRA, H. FURUTANI, C. GUO, E. WINTNER, F. AKAMATSU, R. LUCHT and K. WASHIO, “Focus Issue Introduction: Laser Ignition Conference,” *Opt. Express* **22**, A564–A566 (2014).

平等拓範, 「レーザーエンジン点火」, *レーザー研究* **42**, 299–305 (2014).

平等拓範, 「レーザー点火の最新動向 特集号によせて」 (平等企画「レーザー点火の最新動向」特集号), *レーザー研究* **42**, 372 (2014).

常包正樹, 平等拓範, 「レーザー点火のための実用的な固体レーザー」 (平等企画「レーザー点火の最新動向」特集号), *レーザー研究* **42**, 394–399 (2014).

バンドリ ラケシュ, 平等拓範, 「Laser ignition spin-off: giant pulse UV microchip laser」 (平等企画「レーザー点火の最新動向」特集号), *レーザー研究* **42**, 400–403 (2014).

平等拓範, 「OPIC LIC 14 (第2回レーザー点火国際会議)開催報告」, *レーザー研究* **42**, 671–673 (2014).

J. SANGHERA, T. TAIRA and H. J. KONG, “Feature issue introduction: optical ceramics,” *Opt. Mater. Express* **4**, 2221–2224 (2014).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

平等拓範, 「ジャイアントマイクロフォトンクス～テラヘルツ波発生の観点から～」, 公益財団法人名古屋産業振興公社(テラヘルツ波産業応用研究会)テラヘルツ応用技術講演会～最新の研究成果と産業・医工応用への可能性～, 名古屋, 2014年1月.
佐藤庸一, 平等拓範, 「異方性レーザーセラミックスのマイクロドメイン制御」, 静岡大学電子工学研究所共同研究プロジェクト研究会, 静岡, 2014年2月.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics for Laser Ignitions,” 1st International Symposium on High Power Laser Science and Engineering (HPLSE2014), Suzhou (China), March 2014.

Y. SATO and T. TAIRA, “Thermodynamics for the Orientation Control of Micro-Domains,” 61st Spring Meeting for Jpn. Society of Appl. Phys., Kanagawa (Japan), March 2014.

M. TSUNEKANE and T. TAIRA, “Microchip Laser for Next Generation of Ignition,” 61st Spring Meeting for Jpn. Society of Appl. Phys., Kanagawa (Japan), March 2014.

T. TAIRA, “Promise of Energy-Saving With Giant-Pulse Microchip Lasers,” 61st Spring Meeting for Jpn. Society of Appl. Phys., Kanagawa (Japan), March 2014.

T. TAIRA, “Laser Ignition,” Plenary II, Plenary Sessions of OPIC’14, OPTICS & PHOTONICS International Congress 2014 (OPIC’14), Yokohama (Japan), April 2014.* (**Plenary Talk**)

T. TAIRA, “Opening Remarks of Joint Session,” Joint Session PLD&LIC1, The 2nd Laser Ignition Conference (LIC’14), OPIC’14, Yokohama (Japan), April 2014.* (**Plenary Talk**)

R. YASUHARA and T. TAIRA, “Mmicrochip-Laser Based Probe Laser System for Thomson Scattering Diagnostics,” Joint Session PLD&LIC, The 2nd Laser Ignition Conference (LIC’14), OPIC’14, Yokohama (Japan), April 2014.

T. TAIRA, “Promise of Laser Ignition,” The 2nd Laser Ignition Conference (LIC’14), OPIC’14, Yokohama (Japan), April 2014.* (*Plenary Talk*)

T. TAIRA and H. ISHIZUKI, “Promise of Large Aperture PPMgLN,” Advanced Lasers and Their Applications Workshop, Jeju (Korea), May 2014.

T. TAIRA, “RE³⁺ Ceramic Lasers for Energy: From Engine to Fusion Ignitions,” 5th International Workshop on Photoluminescence in Rare Earths: Photonic Materials and Devices (PRE’14), San Sebastian (Spain), May 2014.* (*Plenary Talk*)

平等拓範, 「UV ジャイアントパルスマイクロチップレーザー」, 第81回レーザー加工学会講演会, 大阪, 2014年5月.

T. TAIRA, “Giant Microphotonics: Challenges, Achievements, Future,” National Institute for Laser, Plasma and Radiation Physics, Bucharest (Romania), July 2014.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics for Future Energy,” 14th International Balkan Workshop on Applied Physics (IBWAP-2014), Constanta (Romania), July 2014.* (*Plenary Talk*)

T. TAIRA, “Micro Domain-Controlled Laser Materials Toward Giant Micro-Photonics,” 6th EPS-QEOD Europhoton Conference, Neuchatel (Switzerland), August 2014.

T. TAIRA, “VCSEL-Pumped Giant-Pulse Microchip Lasers,” International Symposium on Physics and Applications of Laser Dynamics 2014 (IS-PALD 2014), Hsinchu (Taiwan), September 2014.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics for Laser Ignition,” OSA Topical Meeting on Latin America Optics & Photonics Conference (LAOP), Cancun (Mexico), November 2014.

T. TAIRA, “Micro-Domain Control Toward Giant Micro-Photonics,” 10th Laser Ceramics Symposium (LCS2014), Wroclaw (Poland), December 2014.* (*Keynote invited talk*)

B-5) 特許出願

特願 2013-011649, 「Qスイッチレーザー装置」, 平等拓範, バンダリ ラケシュ (自然科学研究機構), 2013年.

特願 2013-516204, 「受動Q スイッチ型固体レーザー装置」, 平等拓範, ジョリー シモン, バンダリ ラケシュ (自然科学研究機構), 2013年.

特願 2013-527873, 「固体レーザー装置」, 平等拓範, コウ ウエイベン (自然科学研究機構), 2013年.

特願 2014-041804, 「レーザー点火装置」, 平等拓範, 金原賢治, 杉浦明光 (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), 2014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(OSA)フェロー(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).

平等拓範, 米国電気電子学会(IEEE)フェロー(2014).

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ニクス」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ニクス」研究会座長(2009-2011).

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

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

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

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

燃焼学会「レーザー点火研究分科会」研究会主査(2014-2015).

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).

1st Laser Ignition Conference (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 (2011-2012).

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 (2012-2015).

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 (EPE111) 国際会議委員会共同議長 (2013-2014).

応用物理学学会学術講演会プログラム編集委員会委員 (2013-2014).

Materials Committee, Advanced Solid State Lasers (ASSL) 2014 国際会議プログラム委員会委員 (2013-2014).

Optics & Photonics International Congress 2015 (OPIC2015) 国際会議組織委員会委員 (2014-2015).

大阪大学光科学センター可視光半導体レーザー応用コンソーシアム応用課題検討専門委員会委員 (2014-2016).

10th Laser Ceramics Symposium (LCS2014): International Symposium on Transparent Ceramics for Photonic Applications 国際会議諮問委員 (2014).

2nd Laser Ignition Conference (LIC 14) 国際会議プログラム委員会統括議長 (2013-2014).

米国光学会 The Optical Society (OSA) 評議員 (Council, Board of Meeting) (2014-).

3rd Laser Ignition Conference (LIC 15) 国際会議プログラム委員会統括議長 (2014-2015).

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 (2011-2015).

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).

IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics (JSTQE) on Solid-State Lasers, The Primary Guest Editor for this issue (2013-2015).

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

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「光物理」, 2014年12月1日-5日.

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, 2014年.

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ー点火エンジンの低燃費・高出力特性の実証研究」, 研究リーダー, 平等拓範(シーズ育成プロデューサ (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の研究」, 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-2015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).

革新的研究開発推進プログラム(ImPACT)「ユビキタス・パワーレーザーによる安全・安心・長寿社会の実現(佐野PM)」,「マイクロチップレーザーの開発」, 平等拓範 (2014年-2017年).

B-11) 産学連携

(株)コンボン研究所,「マイクロ固体フォトニクスの基礎研究」, 平等拓範 (2014年).

C) 研究活動の課題と展望

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

藤 貴 夫（准教授）（2010 年 2 月 1 日着任）

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

A-2) 研究課題：超短光パルスの研究

- a) 超短光パルスの超広帯域波長変換技術の開発
- b) 超短光パルスの位相制御，評価の研究
- c) 赤外ファイバーレーザーの開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 超短光パルスを発生できるレーザーの波長は限られている。それを様々な波長へ効率よく，パルス幅が短い状態で波長変換する技術は，超短光パルスの応用範囲を広げる上で，非常に重要である。この研究では，固体結晶と比べて透過領域が桁違いに広い気体を波長変換媒質として使用することで，様々な波長の超短光パルスを発生させることを目標としている。今年度の成果としては，前年度開発した高速赤外スペクトル分光法を減衰全反射分光法に応用したことである。この装置によって，1 ms ごとに液体試料の赤外スペクトルを 2 μm から 20 μm までの範囲で計測し，液体試料が全反射プリズム上でミリ秒の時間スケールで急速に交換される様子を観測した。
- b) 前年度開発した超短光パルスの光電場波形を直接計測する手法をさらに発展させた。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手法であるが，それを単一ショットでできるような光学系を設計し，電場波形の測定に成功した。また，測定対象のパルスについて，位相の揃った 7 フェムト秒のパルスだけでなく，位相の乱れによって幅が数倍長くなったパルスでも計測できることも示した。
- c) 一般的に，波長変換において，変換元と変換先との波長がなるべく近いほうが，変換効率の向上が見込まれる。2-20 μm の赤外光パルス発生を目的として，チタンサファイアレーザーよりも長波長の超短光パルスを発生するファイバーレーザーの開発を行った。ツリウムを添加したフッ化物ファイバーをレーザー媒質として，45 fs 程度で 1.8 μm を中心波長としたパルスを連続的に発生する発振器を製作した。チタンサファイアレーザー（800 nm）に比べて，発振する波長が長いため，長波長への波長変換に適していると同時に，チタンサファイアレーザーに比べて，大幅にコンパクトなレーザー発振器の設計が可能となり，産業や医療への応用が期待される。開発された技術は特許として出願した。

B-1) 学術論文

A. A. VORONIN, Y. NOMURA, H. SHIRAI, T. FUJI and A. ZHELTIKOV, "Half-Cycle Pulses in the Mid-Infrared from a Two-Color Laser-Induced Filament," *Appl. Phys. B* **117**, 611–619 (2014).

Y. NOMURA and T. FUJI, "Sub-50-fs Pulse Generation from Thulium-Doped ZBLAN Fiber Laser Oscillator," *Opt. Express* **22**, 12461–12466 (2014).

H. SHIRAI, Y. NOMURA and T. FUJI, "Real-Time Waveform Characterization by Using Frequency-Resolved Optical Gating Capable of Carrier-Envelope Phase Determination," *IEEE Photonics J.* **6**, 3300212 (12 pages) (2014).

H. SHIRAI, C. DUCHESNE, Y. FURUTANI and T. FUJI, "Attenuated Total Reflectance Spectroscopy with Chirped-Pulse Upconversion," *Opt. Express* **22**, 29611–29616 (2014).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- Y. NOMURA, M. NISHIO, S. KAWATO and T. FUJI**, “Mode-Locked Thulium-Doped ZBLAN Fiber Laser Oscillators at 2 μm ,” *Advanced Solid State Lasers*, AW2A.2 (2014).
- T. FUJI, Y. NOMURA and H. SHIRAI**, “Ultrabroadband Infrared Spectroscopy by Chirped Pulse Upconversion,” *PIERS2014*, 1824 (2014).
- T. FUJI, Y. NOMURA, Y.-T. WANG, A. YABUSHITA and C.-W. LUO**, “Carrier-envelope phase of single-cycle pulses generated through two-color laser filamentation,” *Ultrafast Phenomena XIX—Proceedings of the 19th International Conference*, 08.Tue.D.1 (2014).
- H. SHIRAI, T.-T. YEH, Y. NOMURA, C.-W. LUO and T. FUJI**, “Ultrabroadband infrared pump–probe spectroscopy using chirped-pulse upconversion,” *Ultrafast Phenomena XIX—Proceedings of the 19th International Conference*, 07.Mon.P.1 43 (2014).
- Y. NOMURA, M. NISHIO, S. KAWATO and T. FUJI**, “Ultrafast 2 μm Laser Oscillators Based on Thulium-Doped ZBLAN Fibers,” *Ultrafast Phenomena XIX—Proceedings of the 19th International Conference*, 08.Tue.P2.50 (2014).
- Y. NOMURA, M. NISHIO, S. KAWATO and T. FUJI**, “Development of Femtosecond Thulium-Doped ZBLAN Fiber Laser Oscillator,” *CLEO: Science and Innovations*, STu1N.3 (2014).
- T. FUJI, H. SHIRAI and Y. NOMURA**, “Real-time lightwave measurement by using FROG capable of CEP determination with pulse-front tilt,” *CLEO: Science and Innovations*, SF1E.1 (2014).
- T. FUJI, Y. NOMURA and H. SHIRAI**, “Real-time observation of single-cycle pulse waveforms by using FROG capable of CEP determination with pulse-front tilt,” *High Intensity Lasers and High Field Phenomena*, HW1C.1 (2014).
- T.-T. YEH, C.-W. LUO, H. SHIRAI, T. FUJI and F.-C. CHOU**, “Ultrafast dynamics in topological insulators,” *THz-plasma2014*, Mat-6 (2014).

B-4) 招待講演

- 藤 貴夫**,「超広帯域コヒーレント赤外光を使った高速赤外分光」,日本分光学会中部支部講演会,岡崎,2014年12月.
- 藤 貴夫**,「レーザーによるEUV・X線の発生」,先端放射光源に関する研究会——第3世代放射光リング/SASE-FELを越えて日本が選択すべき放射光源ロードマップに向けて(1),岡崎,2014年11月.
- T. FUJI, Y. NOMURA, Y.-T. WANG, A. YABUSHITA and C.-W. LUO**, “Carrier-envelope phase of ultrashort pulses generated through multi-color filamentation,” *COFIL2014*, Shanghai (China), September 2014.
- T. FUJI, Y. NOMURA and H. SHIRAI**, “Ultrabroadband Infrared Spectroscopy by Chirped Pulse Upconversion,” *PIERS2014*, Session 4A9 FocusSession. SC3: Ultrafast Optics, Guangzhou (China), August 2014.
- 藤 貴夫, 野村雄高, 白井英登**,「キャリア・エンベロープ位相も測定できる超短光パルス評価法」,レーザー・量子エレクトロニクス研究会,福井,2014年5月.
- T. FUJI, Y. NOMURA and H. SHIRAI**, “Real-time observation of single-cycle pulse waveforms by using FROG capable of CEP determination with pulse-front tilt,” *High Intensity Lasers and High Field Phenomena*, HW1C.1, Berlin (Germany), March 2014.

B-5) 特許出願

特願 2014-031286, 「受動モードロックファイバレーザ装置」, 藤 貴夫, 野村雄高, 藤 貴夫, 三村榮紀, 小川和彦(自然科学研究機構, ファイバーラボ(株)), 2014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 2005座長 (2005).

CLEO/USA 2005座長 (2005).

CLEO/Europe 2007国際会議プログラム委員, 座長 (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, 座長 (2009).

CLEO/Europe 2009座長 (2009).

ICONO 2010座長 (2010).

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, 座長 (2012).

COFIL 2012座長 (2012).

CLEO/USA2013座長 (2013).

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, 座長 (2013).

HILAS 国際会議プログラム委員, 座長 (2014).

CLEO/USA2014国際会議プログラム委員, 座長 (2014).

CLEO/USA2015国際会議分科プログラム委員長 (2015).

CLEO/Europe2015国際会議プログラム委員 (2015).

レーザー学会学術講演会第35回年次大会プログラム委員会委員 (2014-2015).

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「光物理」, 2014年 7月1日-9月30日.

総合研究大学院大学, 先端エレクトロニクスDAQセミナー, 「超短光パルスの基礎」, 「超短光パルスの評価法」, 2014年 7月1日.

福井大学大学院工学研究科, 電気・電子工学特別講義, 2014年 7月 28-29日.

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-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,「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).
科研費挑戦的萌芽研究,「自己参照による光電場の直接測定」, 藤 貴夫 (2014年-2016年).
科研費特別研究員奨励費,「高次高調波発生による高繰り返しの極端紫外光源の開発およびその応用」, 野村雄高 (2010年).
豊秋奨学会海外渡航旅費助成,「153 nmにおけるコヒーレントな高繰り返し準連続光源」, 野村雄高 (2011年).
光科学技術研究振興財団 研究助成,「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、分子研において、この手法による超広帯域コヒーレント赤外光発生を実証してきた。さらに、この光源を使用して、分光を行うことにも成功した。今後も、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。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 45 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。今後はこのパルスを増幅し、様々な分野に応用できる光源にしていきたい。

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) 雰囲気制御型硬X線光電子分光法の開発と固体高分子形燃料電池への応用
- c) 時間分解X線吸収分光による光触媒のダイナミクス解明と固体の熱的性質の検討

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，分子研シンクロトン放射光源 UVSOR-III 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い，合わせて国内外との共同研究を広く実施してきた。今年度は，有機金属分子ニッケロセン薄膜の強磁性基板上の磁性の検討を始めた。
- b) SPring-8 の BL36XU で新しく開発した雰囲気制御型硬X線光電子分光装置により固体高分子形燃料電池電極触媒の in situ 測定に成功し，電圧に依存して変化する白金の酸化状態を検出した。この結果はプレスリリースを行った。
- c) シンクロトン放射光とX線自由電子レーザーを用い，光触媒材料の光励起過程での電子状態及び構造変化を，X線吸収微細構造（XAFS）分光を用いて明らかにする目的で，ナノ秒（シンクロトン放射光）あるいはピコ秒（X線自由電子レーザー）の時間領域での変化を追跡している。

B-1) 学術論文

J. OKABAYASHI, J. W. KOO, H. SUKEGAWA, S. MITANI, Y. TAKAGI and T. YOKOYAMA, "Perpendicular Magnetic Anisotropy at the Interface between Ultrathin Fe Film and MgO Studied by Angular-Dependent X-Ray Magnetic Circular Dichroism," *Appl. Phys. Lett.* **105**, 122408 (5 pages) (2014).

Y. TAKAGI, H. WANG, Y. UEMURA, E. IKENAGA, O. SEKIZAWA, T. URUGA, H. OHASHI, Y. SENBA, H. YUMOTO, H. YAMAZAKI, S. GOTO, M. TADA, Y. IWASAWA and T. YOKOYAMA, "In Situ Study of an Oxidation Reaction on a Pt/C Electrode by Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy," *Appl. Phys. Lett.* **105**, 131602 (5 pages) (2014).

M. DABROWSKI, T. R. F. PEIXOTO, M. PAZGAN, A. WINKELMANN, T. NAKAGAWA, Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA, U. BAUER, F. YILDIZ, F. BISIO, M. PRZYBYLSKI and J. KIRSCHNER, "Oscillations of the Orbital Magnetic Moment due to d-Band Quantum Well States," *Phys. Rev. Lett.* **113**, 067203 (5 pages) (2014).

K. EGUCHI, Y. TAKAGI, T. NAKAGAWA and T. YOKOYAMA, "Magnetic Interactions of Vanadyl Phthalocyanine with Ferromagnetic Iron, Cobalt, and Nickel Surfaces," *J. Phys. Chem. C* **118**, 17633–17637 (2014).

- N. ISHIGURO, S. KITAYAKARN, O. SEKIZAWA, T. URUGA, T. SASABE, K. NAGASAWA, T. YOKOYAMA and M. TADA, “Rate Enhancements in Structural Transformations of Pt–Co and Pt–Ni Bimetallic Cathode Catalysts in Polymer Electrolyte Fuel Cells Studied by in Situ Time-Resolved X-Ray Absorption Fine Structure,” *J. Phys. Chem. C* **118**, 15874–15883 (2014).
- N. ISHIGURO, T. URUGA, O. SEKIZAWA, T. TSUJI, M. SUZUKI, N. KAWAMURA, M. MIZUMAKI, K. NITTA, T. YOKOYAMA and M. TADA, “Visualization of the Heterogeneity of Cerium Oxidation States in Single Pt/Ce₂Zr₂O₈ Catalyst Particles by Nano-XAFS,” *ChemPhysChem* **15**, 1563–1568 (2014).
- S. KITAYAKARN, T. SAIDA, A. SODE, N. ISHIGURO, O. SEKIZAWA, T. URUGA, K. NAGASAWA, T. YAMAMOTO, T. YOKOYAMA and M. TADA, “In Situ Time-Resolved XAFS of Transitional States of Pt/C Cathode Electrocatalyst in an MEA During PEFC Loading with Transient Voltages,” *Top Catal.* **57**, 903–910 (2014).
- H. UEHARA, Y. UEMURA, T. OGAWA, K. KONO, R. UENO, Y. NIWA, H. NITANI, H. ABE, S. TAKAKUSAKI, M. NOMURA, Y. IWASAWA and K. ASAKURA, “In Situ Back-Side Illumination Fluorescence XAFS (BI-FXAFS) Studies on Platinum Nanoparticles Deposited on a HOPG Surface as a Model Fuel Cell: A New Approach to the Pt-HOPG Electrode/Electrolyte Interface,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 13748–13754 (2014).
- Y. UEMURA, H. UEHARA, Y. NIWA, S. NOZAWA, T. SATO, S. ADACHI, B. OHTANI, S. TAKAKUSAKI and K. ASAKURA, “In Situ Picosecond XAFS Study of an Excited State of Tungsten Oxide,” *Chem. Lett.* **43**, 977–979 (2014).

B-4) 招待講演

- 横山利彦, 「日本XAFS研究会XAFS光源検討委員会の活動報告」, PF研究会「次世代放射光源で期待されるXAFSを活用したサイエンス」, 高エネルギー加速器研究機構, 茨城, 2014年7月.
- 高木康多, 「燃料電池Pt/Cカソード触媒の雰囲気型硬X線光電子分光測定」, 放射光学会第7回若手研究会「最先端オペランド観測で明らかになる物性科学」, 東京大学, 千葉, 2014年9月.

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, 2014–2015).
- 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 (1998–2014).

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).

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 機関代表者 (2012-).

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-).

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-).

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」, 2014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, 富士フイルム株式会社,「無機機能性材料の固体構造解析」, 横山利彦 (2003年-2013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-2014年).

C) 研究活動の課題と展望

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

また, 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。

これらに加えて, 2013年7月から, 上村洋平助教が着任した。ナノ・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, 光触媒等の高速時間依存電子状態・幾何構造の変化を追跡する研究を行い始めている。

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ダイナミクス計測といった種々な点から，スピン科学研究展開を行っている。本年度は Q-band の多重パルスシステムも稼働した。今後さらに，当該グループだけでなく所外の ESR コミュニティーと連携を取り，パルス・高周波 ESR の新たな可能性や研究展開を議論し，大学共同利用機関である分子研からのスピン科学の情報発信を行っていく。

B-1) 学術論文

M. YOSHIDA, M. KONDO, T. NAKAMURA, K. SAKAI and S. MASAOKA, “Three Distinct Redox States of an Oxo-Bridged Dinuclear Ruthenium Complex,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **53**, 11519–11523 (2014).

T. TERAUCHI, S. SUMI, Y. KOBAYASHI, T. NAKAMURA, K. FURUKAWA and Y. MISAKI, “ Stable Metallic State of (TTPCOO)₂NH₄ with Mobile Dopant,” *Chem. Commun.* **50**, 7111–7113 (2014).

B-6) 受賞，表彰

古川 貢, 電子スピンサイエンス学会奨励賞 (2012).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会領域7世話人 (2000–2001).

日本物理学会代議員 (2001–2003).

日本物理学会名古屋支部委員 (2001–2007, 2013–).

日本化学会実験化学講座編集委員会委員 (2002).

電子スピンサイエンス学会担当理事 (2004–2005).

電子スピンスイエンズ学会運営理事 (2006–2011).

電子スピンスイエンズ学会副会長 (2014–2015).

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 (2010–2014).

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).

Joint Conference of APES2014, IES and SEST2014 (APES-IES-SEST2014), Nov. 12th–16th, 2014, Nara, Japan, Program Chair, 座長 (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 (2006–2013).

B-8) 大学での講義, 客員

電気通信大学, 平成26年度UEC パスポートセミナー「電気を流す有機物とは? 伝導性・磁性を理解しよう。», 2014年11月27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).

科研費挑戦的萌芽研究, 「機能性物質の時間分解ESRイメージング研究」, 古川貢 (2011年–2013年).

科研費若手研究(A),「次世代太陽光エネルギー'希土類色素増感太陽電池'のスピンダイナミクス研究」, 古川 貢 (2009年-2011年).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型),「分子自由度が拓く新物質科学」公募班「光誘起機能性材料のアドバンスト ESR によるスピンダイナミクス研究」, 古川 貢 (2009年-2010年).

科研費若手研究(B),「色素増感太陽電池の光電変換特性とスピンダイナミクスの相関」, 古川 貢 (2006年-2008年).

科研費若手研究(B),「セミマクロスコピックスケールの巨大磁気モーメントイメージング」, 古川 貢 (2004年-2005年).

C) 研究活動の課題と展望

本グループでは、分子性固体の電子状態(磁性、導電性)を主に微視的な手法(ESR, NMR)により明らかにしている。有機導体など強相関低次元電子系の未解決な問題の解明を行うとともに、生体関連試料を含む分子性物質の機能性に関する研究を行っている。多周波 ESR (X-, Q-, W-bands)・パルス二重共鳴法(ELDOR, ENDOR)を用いた他に類を見ない磁気共鳴分光測定を中心に多数の協力研究・共同研究を受け入れ、最先端の ESR 測定研究の展開を全世界に発信している。今後は高圧下・極低温下といった極端条件での測定システム構築を行うとともに、分子科学における磁気共鳴研究のあらたな展開を行っていく。

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) ドーピングイオン化率増感
- b) 1 ppm 極微量ドーピングによる有機太陽電池の性能向上

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機半導体に不純物を極微量加えるドーピングの効率を 100% にすることに成功した。シリコンに代表される無機半導体のドーピング効率は 100% であることが知られているが、これまで有機半導体のドーピング効率は 10% 以下で、仮に不純物を 10 個加えても、そのうちの 1 個にしか電子を発生させることができなかった。

今回、2 種の有機半導体を混合した共蒸着膜においてドーピング効率が 100% に達することを発見し、本現象を「ドーピング増感効果」と命名した（論文 5）。これは、有機半導体においても、加えた不純物 10 個のすべてが電子を発生し、無機半導体と同じ効率 100% でドーピングができるようになったことを意味している。詳細な機構として、電荷分離超格子モデルと直接カスケードイオン化モデルを提出した。ドーピング増感効果は、高性能の有機太陽電池や有機デバイス作製の基盤となる技術である。

- b) ppm 極微量ドーピングによって、有機太陽電池の性能向上できることを証明した。

光電変換層への直接ドーピングによって、初めて、多数キャリアと少数キャリアの概念を有機太陽電池に導入した。1 ppm の極微量ドーピングで、多数キャリア濃度の増大による、セル抵抗低下効果と再結合抑止効果で、曲線因子が大きく向上した。1 から 10 ppm にドーピング濃度を大きくすると、空乏層形成のため、光電流が系統的に向上した。ドーピング濃度が 100 ppm 以上になると、ドーパント不純物散乱のために、少数キャリア拡散距離が減少し光電流量が逆に減少した。

1-10 ppm 極微量のドーピングによる多数キャリア濃度増大が光電流増大を引き起こす結果は、有機太陽電池において、世界初の観測である。

B-1) 学術論文

M. HIRAMOTO, M. KUBO, Y. SHINMURA, N. ISHIYAMA, T. KAJI, K. SAKAI, T. OHNO and M. IZAKI, “Bandgap Science for Organic Solar Cells,” *Electronics* 3, 351–380 (2014).

Y. SHINMURA, T. YOSHIOKA, T. KAJI and M. HIRAMOTO, “Mapping of Band Bending for Doped C₆₀ Films,” *Appl. Phys. Express* 7, 071601 (4 pages) (2014).

K. HARAFUJI, H. SATO, T. MATSUURA, Y. OMOTO, T. KAJI and M. HIRAMOTO, “Degradation in Organic Solar Cells under Illumination and Electrical Stresses in Air,” *Jpn. J. Appl. Phys.* 53, 122303 (9 pages) (2014).

S. KATSUBE, T. HARADA, T. UMECKY, T. TAKAMUKU, T. KAJI, M. HIRAMOTO, Y. KATSUMOTO and K. NISHIYAMA, “Structures of Naphthol-AOT Self-Assembly Organogels and their Applications to Dispersing Media of Rare-Earth Complexes,” *Chem. Lett.* 43, 1861–1863 (2014).

Y. SHINMURA, Y. YAMASHINA, T. KAJI and M. HIRAMOTO, "Ionization Sensitization of Doping in Co-Deposited Organic Semiconductor Films," *Appl. Phys. Lett.* **105**, 183306 (5 pages) (2014).

B-3) 総説, 著書

平本昌宏, 「有機半導体のpn制御と太陽電池応用」, *Molecular Electronics & Bioelectronics* **25**, 81–86 (2014).

B-4) 招待講演

M. HIRAMOTO, "Bandgap Science for Organic Thin-Film Solar Cells," MANA (International Center for Materials Nanoarchitectonics) International Symposium, Tsukuba (Japan), March 2014.

平本昌宏, 「イントロダクトリー」, 第6回有機薄膜太陽電池サテライトミーティング, 理化学研究所和光キャンパス鈴木梅太郎ホール, 和光, 2014年3月.

平本昌宏, 「有機半導体のpn制御と太陽電池応用」, M&BE研究会「有機分子・バイオエレクトロニクスが拓く新しい世界」, キャンパスプラザ京都, 京都, 2014年6月.

平本昌宏, 「有機太陽電池のバンドギャップサイエンス」, 第25回東海地区光電気化学研究会, 豊橋技術科学大学駅前サテライトオフォス, 豊橋, 2014年8月.

平本昌宏, 「有機半導体のpn制御と有機太陽電池への応用」, 有機エレクトロニクス研究会——有機系太陽電池の研究最前線, JR 博多シティ会議室9F 会議室3, 福岡, 2014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).

The 6th World Conference on Photovoltaic Energy Conversion (WCPEC-6), Program Committee Member and Chairman, Kyoto International Conference Center, Kyoto, Japan, Nov. 23–27 (2014).

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)

応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会プログラム編集委員 (2014–2015). (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).

さがかけ「太陽光と光電変換」研究領域 領域アドバイザー (2009-).

戦略的創造研究推進研究(CREST)「低エネルギー, 低環境負荷で持続可能なものづくりのための先導的な物質変換技術の創出(ACT-C)」研究領域 領域アドバイザー (2012-).

その他

岡崎ビジネス大賞評価委員 (2012).

岡崎ものづくり協議会学識委員 (2011-).

B-9) 学位授与

久保雅之, 「pn-Homojunction Organic Solar Cells」, 2014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-2015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).

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4名(久保, 新村, 菊池, 山品(〜8/31))を雇用している。また, 博士後期課程学生である, 大橋が4月より加わった。2014年は, 嘉治助教, 片山(ALCA 雇用研究員(4/11〜1/31)), 中尾研究員, 杉原(秘書)と私の5名とあわせ, 10名のグループで研究を行った。(2014/12/31現在7名)

12/1付で嘉治助教が東京農工大准教授として転出した。

上記プロジェクトにより, 有機半導体の単独, 共蒸着膜のpn 制御技術を完成し, ppm 極微量ドーピングによる有機太陽電池の効率向上ができることを実験的に証明できた。分子研着任後6年間で, 最初の研究目標「有機半導体のpn 制御」を達成できたと考えている。これをReview (論文1)にまとめた。なお, ドーピングイオン化率増感は, 励起子を解離するために平本が1991年に提案した混合接合(バルクヘテロ接合)コンセプトのドーピング版に相当する。

来年度より, 次の目標として, 「有機単結晶pn 制御」を考えている。pn 制御の威力をさらに示すために, 移動度が高い単結晶薄膜にドーピングし, より本質的なドーピング機構の解明と本質的な有機太陽電池の効率向上, 有機デバイスへの展開を目指す。

2015.3に上記CREST プロジェクトが終了する。今年度は, 次の段階の国プロにつなげる努力を集中して行った。

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, 学生に論文を積極的に執筆させている。CREST 研究員の久保は, 今年度, 論文博士学位を取得した。新村は, 来年度, 論文博士取得手続き中である。来年度より, 博士課程学生がさらに1名加わり, 学生が2名になる予定。研究室の国際化も視野に入れる。

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) 2次元高分子の創生と機能開拓
- 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) 2次元高分子の新しい機能を開拓した。電子ドナーとアクセプターからなる2次元高分子の合成に成功し，その電荷分離機能について検討した（アメリカ化学会誌 *J. Am. Chem. Soc.* 2014）。TTF をビルディングブロックとして有する新しい2次元高分子の合成手法を確立し，光伝導性について検討した（*Chem. –Eur. J.* 2014）。有機分子触媒点を導入した2次元高分子を合成し，その高い触媒機能を明らかにした（*Chem. Commun.* 2014）。
- b) 多孔性共役高分子に関して，薄膜を作製する手法を確立した（*Angew. Chem., Int. Ed.* 2014）。また，多孔性共役高分子の蓄電機能について検討し，Li イオン電池の正極材料として有望あることを明らかにした。金属ナノ粒子を多孔性共役高分子に内包し，新型金属ナノ粒子触媒を構築した。これらの金属ナノ粒子は，高い安定性と触媒活性を兼備し，水中で様々なクロスカップリング反応を触媒することができる。

B-1) 学術論文

N. HUANG, Y. XU and D. JIANG, “High-Performance Heterogeneous Catalysis with Surface-Exposed Stable Metal Nanoparticles,” *Sci. Rep.* **4**, 7228 (2014). DOI: 10.1038serp07228 (2014)

H. XU and D. JIANG, “Covalent Organic Frameworks: Crossing the Channel,” *Nat. Chem.* **6**, 564–566 (2014). (News & Views)

L. CHEN, K. FURUKAWA, J. GAO, A. NAGAI, T. NAKAMURA, Y. DONG and D. JIANG, “Photoelectric Covalent Organic Frameworks: Converting Open Lattices into Ordered Donor-Acceptor Heterojunctions,” *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 9806–9809 (2014).

X. CHEN, N. HUANG, J. GAO, H. XU, F. XU and D. JIANG, “Towards Covalent Organic Frameworks with Predesignable and Aligned Open Docking Sites,” *Chem. Commun.* **50**, 6161–6163 (2014).

S. JIN, T. SAKURAI, T. KOWALCZYK, S. DALAPATI, F. XU, H. WEI, X. CHEN, J. GAO, S. SEKI, S. IRLE and D. JIANG, “Two-Dimensional Tetrathiafulvalene Covalent Organic Frameworks: Towards Latticed Conductive Organic Salts,” *Chem. –Eur. J.* **20**, 14608–14612 (2014). (Back Cover)

C. GU, N. HUANG, J. GAO, F. XU, Y. XU and D. JIANG, “Controlled Synthesis of Conjugated Microporous Polymer Films: Versatile Platforms for Highly Sensitive and Label-Free Chemo- and Bio-Sensings,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **53**, 4850–4855 (2014).

F. XU, X. CHEN, Z. TANG, D. WU, R. FU and D. JIANG, “Redox-Active Conjugated Microporous Polymers: A New Organic Platform for Highly Efficient Energy Storage,” *Chem. Commun.* **50**, 4788–4790 (2014). (Inside Front Cover)

Y. XU and D. JIANG, “Structural Insights into the Functional Origin of Conjugated Microporous Polymers: Geometry-Management of Porosity and Electronic Properties,” *Chem. Commun.* **50**, 2781–2783 (2014).

H. XU, X. CHEN, J. GAO, J. LIN, M. ADDICOAT, S. IRLE and D. JIANG, “Catalytic Covalent Organic Frameworks via Pore Surface Engineering,” *Chem. Commun.* **50**, 1292–1294 (2014). (Back Cover)

B-4) 招待講演

D. JIANG, “Two-Dimensional Polymers and Covalent Organic Frameworks: A Class of Covalent Polymers with Inherent Intra- and Intermolecular Orders,” Sino-German Symposium on π -Conjugated Nanomaterials for Catalysis and Clean Energy Applications, Berlin (Germany), April 2014.

D. JIANG, “Porous Organic Materials for Electric Energy Storage and Power Supply,” 248th ACS National Meeting & Exposition, San Francisco (U.S.A.), August 2014.

D. JIANG, “Covalent Organic Frameworks,” Symposium on Computational Materials for Catalysis and Photovoltaics, Suzhou (China), May 2014.

D. JIANG, “Design and Synthesis of Two-Dimensional Polymers and Covalent Organic Frameworks,” The 2nd International Symposium on Polymer Ecomaterials (PEM2014), Kunming (China), August 2014.

D. JIANG, “Two-Dimensional Polymers and Covalent Organic Frameworks,” IUPAC International Conference on Novel Materials and their Synthesis (NMS) & International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers (FCFP), Zhenzhou (China), October 2014.

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).

Japan-China 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, Beijing, 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) 高速 MAS および多重パルスを用いた ^1H -固体 NMR による分子材料の構造解析
- b) 固体 NMR を用いた安定同位体非標識合成高分子の構造解析
- c) 固体 NMR 半定量的原子間距離測定を用いた脂質二重膜中の糖脂質分子会合状態の解析
- d) 固体 NMR 半定量的原子間距離測定を用いた脂質膜結合型生理活性ペプチドの構造および配座解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 生体分子などの固体有機試料では，強力な ^1H 同種核間磁気双極子相互作用が存在し，スペクトルが広幅化するため，一般に高分解能 ^1H スペクトルを得るのは難しい。しかし， ^1H 核は極めて高感度で，安定同位体標識が必要ないことから，近年測定法の開発が進められている。回転周波数が 30 kHz 以上の高速マジックアングルスピンニング (MAS) を適用，または，多重パルスを適用することにより ^1H の同種核間磁気双極子相互作用を時間平均し，スペクトルの高分解能化が可能である。さらに強力なラジオ波を用いれば，これらの手法を組み合わせることも可能である。600 MHz NMR を用いて，高速 MAS 下での ^1H 測定，さらに 20 kHz 以下の回転周波数の MAS と多重パルスを用いた CRAMPS 法の検討を行っている。また，これらの手法を用いて，分子材料の解析を行っている。さらに，920 MHz 超高磁場 NMR を用いて，超高速 MAS 下で生体分子材料の分子近接性の解析を行っている。
- b) 多くの分子材料や合成高分子は溶媒に不溶である。MAS 下で 2 次元 ^1H - ^{13}C 異種核間相関 NMR を用いて，有機溶媒に不溶な合成高分子の構造，および，状態の解析を行った。同測定において， ^1H の同種核間磁気双極子相互作用を時間平均しながら分極移動を行い，短い接触時間を用いて ^1H 信号帰属を行い，長い接触時間を用いて中距離の分子間相関信号の観測を試みた。天然存在比の ^1H および ^{13}C 安定同位体を観測して，らせん状合成高分子とその分子内に包摂されている化合物との分子間 ^1H - ^{13}C 異種核相関信号の検出に成功した。これに基づき，複合体分子が包摂状態にあることの検証に成功した。また，固体 NMR を用いて，機能性高分子合成における各合成反応過程での分子の状態解析を行った。
- c) 固体 NMR を用いて，脂質二重膜中での糖脂質分子間の会合状態の検証を試みている。異なる部位を各々特異的に ^{13}C 安定同位体標識した糖脂質を混合し，DMPC 膜に組み込んだ試料を用いた。MAS 下で同種核間相関 NMR 法の測定を行い，脂質膜中での標識 ^{13}C 間の分子間相関信号を得ることにより，同糖脂質分子間の半定量的原子間距離の同定に基づく，分子近接性の解析を行っている。
- d) 固体 NMR を用いて，脂質二重膜上に結合した生理活性ペプチドの状態解析，および構造解析を行っている。 ^{13}C 安定同位体標識された生理活性ペプチドを DMPC 膜に結合させた試料を用いて，MAS 下で同種核間相関 NMR 法を用いて半定量的原子間距離測定に基づく分子の局所構造解析を行った。特定構造を有すると思われるアミノ酸部位由来の明瞭な分子内相関信号が観測され，信号の帰属と共に化学シフト値に基づく二次構造解析を行った。さらに，会合している隣接分子間の相対配座の解析を目的に，より長距離の分子間相関を得る条件での同 NMR 測定を行い，隣接分子間近接性の解析を行っている。

B-1) 学術論文

T. IIJIMA, T. YAMASE, M. TANSO, T. SHIMIZU and K. NISHIMURA, “Electron Localization of Polyoxomolybdates with ϵ -Keggin Structure Studied by Solid-State ^{95}Mo NMR and DFT Calculation,” *J. Phys. Chem. A* **118**, 2431–2441 (2014).
T. ASAKURA, K. YAZAWA, K. HORIGUCHI, F. SUZUKI, Y. NISHIYAMA, K. NISHIMURA and H. KAJI, “Difference in the Structures of Alanine Tri- and Tetra-Peptides with Antiparallel β -Sheet Assessed by X-Ray Diffraction, Solid-State NMR and Chemical Shift Calculations by GIPAW,” *Biopolymers* **101**, 13–20 (2014).

B-6) 受賞, 表彰

西村勝之, 日本核磁気共鳴学会 優秀若手ポスター賞 (2002).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学学会分野別専門委員 (2004–2009).
日本核磁気共鳴学会評議員 (2009–2010, 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

第27回生体系磁気共鳴国際会議(ICMRBS)実行委員, プログラム委員 (2013–).
第51回NMR 討論会プログラム委員 (2012).

学会誌編集委員

日本生物物理学学会欧文誌 *Biophysics*, Advisory board (2005–2009).
Global Journal of Biochemistry, Editorial Board (2010–2013).

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面タンパク質脂質結合機構の解明」, 西村勝之 (2010年–2012年).
科研費萌芽研究, 「試料状態変調型固体NMR プローブ開発とその適用」, 西村勝之 (2008年–2009年).
(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

固体NMRでは、安定同位体標識を前提とした測定法が多く開発されてきた。しかし、合成高分子や天然物など、安定同位体標識が困難で、かつ溶媒に不溶な分子が多数存在する。現在、天然存在比安定同位体を観測することにより、分子の状態、および構造を解析するための測定法の開発、および手法の確立を検討している。複数の協力研究プロジェクトを通して、多様な試料の解析を行う機会が増えた。今後、研究成果と同様な試料の解析に還元していきたいと考えている。

安全衛生管理室

戸村正章(助教)(2004年6月1日着任)

A-1) 専門領域：有機化学，構造有機化学，有機固体化学

A-2) 研究課題：

- a) 弱い分子間相互作用による分子配列制御と機能性分子集合体の構築
- b) 新しい機能性電子ドナーおよびアクセプター分子の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機エレクトロニクスの研究において，ホウ素原子の機能を利用した物質開発が注目されている。1,3-ジケトンBF₂構造ユニットを含む錯体は強い蛍光とともに高い電子受容性を示すことから，光増感色素や有機半導体材料として期待される。そこで，トリフェニルアミン色素にこの錯体ユニットを導入した新規なドナー- π -アクセプター系有機色素を設計・合成し，その構造をX線結晶構造解析により決定した。その光物性および電気化学的特性から，この色素は色素増感太陽電池用色素として有望であることが明らかとなった。
- b) ねじれた分子構造をもつ有機半導体材料を用いることにより，有機太陽電池の光電変換効率の向上や有機EL素子の高性能化が期待できる。そこで，4つのCF₃基をもち，ベンゾ-1,2,5-チアジアゾール骨格が二量化した分子を設計・合成し，その構造，物性を検討した。X線結晶構造解析の結果，2つのベンゾチアジアゾール骨格間が大きくねじれており，薄膜太陽電池のn型半導体として機能することを見いだした。

B-1) 学術論文

Y. MIZUNO, Y. YISILAMU, T. YAMAGUCHI, M. TOMURA, T. FUNAKI, H. SUGIHARA and K. ONO, “(Dibenzoylmethanato)boron Difluoride Derivatives Containing Triphenylamine Moieties: A New Type of Electron-Donor/ π -Acceptor System for Dye-Sensitized Solar Cells,” *Chem. –Eur. J.* **20**, 13286–13295 (2014).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本化学会コンピューター統括委員会 CSJ-Web 統括的管理運営委員会委員 (2001–2002).

日本化学会広報委員会ホームページ管理委員会委員 (2003–2012).

C) 研究活動の課題と展望

有機固体における電気伝導性，磁性，光学的非線形性などの物性の発現には，その分子固有の特質のみならず，集合体内でどのように分子が配列しているかということが大いに関与している。そのために，このような機能性物質の開発には分子配列および結晶構造の制御，すなわち，「分子集合体設計」というコンセプトが極めて重要となってくる。しかしながら，現状では，簡単な有機分子の結晶構造予測さえ満足には成し遂げられていない。このことは，逆に言えば，拡張 π 電子系内に，水素結合などの分子間の弱い相互作用を導入し，種々の分子集合体を設計・構築するという方法論には，無限の可能性が秘

められているということを示している。今後は、水素結合のみならず、ヘテロ原子間相互作用・C-H $\cdots$ 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す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。また、データマイニング的な結晶構造の解析にも興味を持っている。最後に、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) 巨大分子系の基板表面への精密設置法の開拓

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 本研究では、「単一巨大分子骨格内に量子効果素子回路をまるごと集積化」するための逐次精密合成プロセスの開拓を目指している。昨年度までに、単電荷トンネル素子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）の系統的整備を進めてきた。本年度は、新学術領域「分子アーキテクニクス」におけるナノ半導体工学チームとの議論を受けて、「抵抗」パーツの開発を始めた。「抵抗」の精密設計の重要性は、もっぱら「伝導性の向上」を目指してきた分子素子分野では無視されてきた。しかし、ナノ電子回路の専門家とのネタ合わせから、実働可能な量子効果素子回路を目指す上で「トンネル確率を自在に調整・設定」するための受動素子は必須であると認識を改めた次第である。当然、前例は無く、最初のトライアルとして、単一障壁タイプと多段トンネル接合タイプとについて、1nm 級のを各種試作した。今後、これらを 10nm 長級の分子ワイヤ系に組み込み、その単一分子伝導特性の評価から、「抵抗」の設計法を整備していく段取りである。
- 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・埴田一山田 G、産総研・浅井 G らと実施している。本年度は、特に分子／電極接合部の軌道間カップリング強度について実験的知見を得るため、単一分子接合系の熱起電力の分子鎖長依存性を検討した。ゼーベック係数（透過係数の微分に比例）の比較から、分子／電極間カップリングはチオフェン 8 量体までは鎖長依存するが、それを超えるとほぼ一定になることが分かった。これより、「分子鎖自体の性質」の比較検討を行う場合、チオフェン 8 量体以上の分子鎖系で実施する必要があるとの指針が得られる。なお、ゼーベック係数はいずれも正であり、最高被占軌道を通じた伝導であることも確かめられた。また現在、非弾性トンネル分光法による検討も進めている。一方、発光中心や磁性中心を導入した機能性分子ワイヤの電子特性を評価するための合成 / 計測研究を京大・田中（一）G と実施中である。
- c) 機能集積化巨大分子系について、「基板の定位置に配置かつ固定化」するための方法論の開発、及び「基板上での構造／物性」を実験的に解明するための研究を進めている。昨年度までに、横浜・市立大の横山 G との共同研究により、エレクトロスプレー法を用いて 10nm ～ 120nm 長クラス的大型分子を平坦／清浄基板上に配置する手法を確立した。今年度は、東大・西原 G との共同研究により、特にシリコン基板上へ的大型分子固定化法の検討を進めた。そのために、ドナー性ヘテロ環ヨウ化物で分子末端を活性化したオリゴチオフェン類の新規開発を行った。この「末端活性化オリゴチオフェン」は、パラジウム触媒により水素終端シリコン基板に接合可能である事が確認できた。これにより、巨大分子デバイス系を、微細加工技術で構築したシリコンナノ構造体に直結し、「バルク系とのインターフェース確保」や「駆動力の供給」を行う可能性が開けたものと考えている。

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

当研究室では、世界に先駆け、10nm×10nm クラスの単一分子内単電荷トンネル素子回路の構築のための汎用巨大分子合成法を整備してきた。現在、その実働を確認するための評価法の開発が急務となっている。東大・長谷川Gとのネタ合わせの結果、独立駆動型多端子STMを用いて機能評価するためには、50nm×50nm以上の分子サイズが必要との見積もりを受けた。よって、その要請に対応可能な「超大型」の汎用分子構築ブロックの新規開発を進めている。

6-5 生命・錯体分子科学研究領域

生体分子機能研究部門

青 野 重 利（教授）（2002 年 5 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：生物無機化学

A-2) 研究課題：

- a) 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。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。今年度は特に、*Corynebacterium glutamicum* 中に存在するヘム取込み系を構成する一連のタンパク質（HtaA, HtaB, HmuT）の結晶構造解析に重点的に取り組み、ヘムトランスポーターにヘム分子を運搬するヘム結合タンパク質 HmuT の結晶構造解析に成功した。また、HtaA, HtaB の結晶化条件の検討を行い、全長型 HtaA および HtaA-C 末ドメインの結晶化初期条件を見出した。現在、高分解能回折データを与える良好な結晶を得るため、結晶化条件の最適化を進めている。

B-1) 学術論文

K. NAKATANI, H. ISHIKAWA, S. AONO and Y. MIZUTANI, “Identification of Essential Histidine Residues Involved in Heme Binding and Hemozoin Formation in Heme Detoxification Protein from *Plasmodium falciparum*,” *Sci. Rep.* **4**, 6137 (2014).

Y. OKAMOTO, H. SAWAI, M. OGURA, T. UCHIDA, K. ISHIMORI, T. HAYASHI and S. AONO, “Heme-Binding Properties of HupD Functioning as a Substrate-Binding Protein in a Heme-Uptake ABC-Transporter System in *Listeria monocytogenes*,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **87**, 1140–1146 (2014).

C. KITATSUJI, M. OGURA, T. UCHIDA, K. ISHIMORI and S. AONO, “Molecular Mechanism for Heme-Mediated Inhibition of 5-Aminolevulinic Acid Synthase 1,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **87**, 997–1004 (2014).

B-4) 招待講演

S. AONO, “Structural Basis for the Molecular Mechanism of Dehydration Reaction Catalyzed by a Novel Heme Protein,” 225th The Electrochemical Society Meeting, Orland (U.S.A.), May 2014.

S. AONO, “Molecular Mechanisms of Signal Transduction Upon Oxygen Sensing by the Heme-Based Sensor Protein Aer2,” 8th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-8), Istanbul (Turkey), June 2014.

S. AONO, “Structural Basis for the Reaction Mechanism of Dehydration of Aldoxime Catalyzed by Aldoxime Dehydratase,” 7th Korea-Japan Seminar on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Seoul (Korea), November 2014.

N. MURAKI, Y. OKAMOTO and S. AONO, “Crystal structure of HmuT reveals heme recognition,” 7th Korea-Japan Seminar on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Seoul (Korea), November 2014.

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 (2007–2014).

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, 2012–2014).

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, 2014).

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

奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科, 「光ナノサイエンス特別講義」, 2014年10月24日.

B-10) 競争的資金

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に着目し、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やヘム分子取込み・排出に関与する一連のタンパク質の構造機能相関解明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。

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・超分子化学的アプローチによるタンパク質の構造機能解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 糖鎖は一連の細胞内レクチンとの相互作用を通じて、それを担うタンパク質の分泌経路における運命（フォールディング，輸送，分解）を決定する目印として機能している。特に，3 本鎖高マンノース型糖鎖の中央の枝の末端マンノース残基の除去は分解経路に向かう第一歩となる一方，別の枝の一端には小胞体シャペロンの認識タグとなるグルコース残基が提示される。私たちは，糖鎖分析を通じてこのマンノース切除における一連のマンノシダーゼの役割分担の解明に貢献するとともに，立体構造未完成の糖タンパク質の糖鎖末端にグルコース残基を転移する酵素（UGGT）の基質認識ドメインの一部に関して 3 次元構造情報を得ることに初めて成功した。また，立体構造を整えた糖タンパク質を小胞体から搬出するカーゴ受容体 ERGIC-53 の糖鎖認識ドメインについて結晶構造解析を実施し，本レクチンが高マンノース型糖鎖の非還元末端部分に対して 2 通りの様式で相互作用し，糖鎖認識の特異性の幅を広げていることを明らかにすることができた。一方，常磁性ランタニドプローブを利用した NMR 計測とレプリカ交換分子動力学シミュレーションを組み合わせることにより，3 本鎖高マンノース型糖鎖のコンフォメーション空間の探索を行った。これにより，中央の枝の末端マンノース残基の除去に伴って残る枝の占めるコンフォメーション空間が有意に広がることが判明した。さらに，常磁性効果を利用した NMR 解析をマシャドジョセフ病原因遺伝子産物 ataxin-3 の Josephin ドメインの基質認識様式の解析にも応用し，本酵素がエンド型脱ユビキチン化活性を示す機構の構造基盤を与えることができた。
- b) プロテアソームは細胞内タンパク質の分解装置であり，細胞周期の制御やタンパク質品質管理など様々な高次機能に関わる巨大な分解酵素複合体である。本複合体は $\alpha\beta\alpha4$ 層のリングで構成される 20S 触媒部位（CP）と 19S 制御部位（RP）からなり，70 個を超えるサブユニットが秩序だって厳密に配置することでタンパク質分解装置としての高度な機能を発揮している。真核生物において，これら多数のサブユニットは自発的には 4 次構造を形成せず，これを補助する複数のシャペロン分子の介助を受けて集合している。私たちは，構造生物学的アプローチによりプロテアソームの形成メカニズムを探索するための研究を行ってきた。本年度は，CP の集合シャペロンである Pba3-Pba4 ヘテロ 2 量体が α リングを構成するサブユニットの適切な配置を定める ‘molecular matchmaker’ として機能していることを明らかにした。また，集合シャペロン Nas2 は RP の基底部分が不完全な集合状態で CP と相互作用することを抑える ‘check point’ の役割を演じていることを示すことができた。さらに，集合シャペロン PAC3 を標的とする薬物候補について，その相互作用様式に関する情報を NMR を用いて得ることに成功した。一方，古細菌のプロテアソームは構成サブユニットの多様性に乏しく，それらは自発的に集合することが知られている。それにもかかわらず古細菌ゲノムには集合シャペロンのホモログである PbaA と PbaB がコードされている。私たちは，PbaA の結晶構造を決定するとともに，NMR と中性子小角散乱を利用して PbaB と天然変性タンパク質との相互作用様式を明らかにした。

B-1) 学術論文

- S. KITAZAWA, T. KAMEDA, A. KUMO, M. YAGI-UTSUMI, K. SUGASE, N. J. BAXTER, K. KATO, M. P. WILLIAMSON and R. KITAHARA, “Close Identity between Alternatively Folded State N₂ of Ubiquitin and the Conformation of the Protein Bound to the Ubiquitin-Activating Enzyme,” *Biochemistry* **53**, 447–449 (2014).
- M. SUGIYAMA, H. YAGI, T. YAMAGUCHI, K. KUMOI, M. HIRAI, Y. OBA, N. SATO, L. PORCAR, A. MARTELE and K. KATO, “Conformational Characterization of a Protein Complex Involving Intrinsically Disordered Protein by Small-Angle Neutron Scattering Using the Inverse Contrast Matching Method: A Case Study of Interaction between α -Synuclein and PbaB Tetramer as a Model Chaperone,” *J. Appl. Crystallogr.* **47**, 430–435 (2014).
- T. SATOH, K. SUZUKI, T. YAMAGUCHI and K. KATO, “Structural Basis for Disparate Sugar-Binding Specificities in the Homologous Cargo Receptors ERGIC-53 and VIP36,” *PLoS One* **9**, e87963 (2014).
- T. DOI, M. YOSHIDA, K. OHSAWA, K. SHIN-YA, M. TAKAGI, Y. UEKUSA, T. YAMAGUCHI, K. KATO, T. HIROKAWA and T. NATSUME, “Total Synthesis and Characterization of Thielocin B1 as a Protein–Protein Interaction Inhibitor of PAC3 Homodimer,” *Chem. Sci.* **5**, 1860–1868 (2014).
- T. SATOH, Y. SAEKI, T. HIROMOTO, Y.-H. WANG, Y. UEKUSA, H. YAGI, H. YOSHIHARA, M. YAGI-UTSUMI, T. MIZUSHIMA, K. TANAKA and K. KATO, “Structural Basis for Proteasome Formation Controlled by an Assembly Chaperone Nas2,” *Structure* **22**, 731–743 (2014).
- M. TAGAWA, K. SHIRANE, L. YU, T. SATO, S. FURUKAWA, H. MIZUGUCHI, R. KUJI, K. KAWAMURA, N. TAKAHASHI, K. KATO, S. HAYAKAWA, S. SAWADA and K. FURUKAWA, “Enhanced Expression of the β 4-Galactosyltransferase 2 Gene Impairs Mammalian Tumor Growth,” *Cancer Gene Ther.* **21**, 219–227 (2014).
- K. TAKAGI, Y. SAEKI, H. YASHIRODA, H. YAGI, A. KAIHO, S. MURATA, T. YAMANE, K. TANAKA, T. MIZUSHIMA and K. KATO, “Pba3–Pba4 Heterodimer Acts as a Molecular Matchmaker in Proteasome α -Ring Formation,” *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **450**, 1110–1114 (2014).
- S. NINAGAWA, T. OKADA, Y. SUMITOMO, Y. KAMIYA, K. KATO, S. HORIMOTO, T. ISHIKAWA, S. TAKEDA, T. SAKUMA, T. YAMAMOTO and K. MORI, “EDEM2 Initiates Mammalian Glycoprotein ERAD by Catalyzing the First Mannose Trimming Step,” *J. Cell Biol.* **206**, 347–356 (2014).
- Y. UEKUSA, K. OKAWA, M. YAGI-UTSUMI, O. SERVE, Y. NAKAGAWA, T. MIZUSHIMA, H. YAGI, Y. SAEKI, K. TANAKA and K. KATO, “Backbone ¹H, ¹³C, and ¹⁵N Assignments of Yeast Ump1, an Intrinsically Disordered Protein that Functions as a Proteasome Assembly Chaperone,” *Biomol. NMR Assignments* **8**, 383–386 (2014).
- N. KAWASAKI, T. OKUMOTO, Y. YAMAGUCHI, N. TAKAHASHI, W. H. FRIDMAN, C. SAUTÈS-FRIDMAN, H. YAGI and K. KATO, “Site-Specific Classification of N-Linked Oligosaccharides of the Extracellular Regions of Fc γ Receptor IIIb Expressed in Baby Hamster Kidney Cells,” *J. Glycomics Lipidomics* **4**:116, doi:10.4172/2153-0637.1000116 (2014).
- T. YAMAGUCHI, Y. SAKAE, Y. ZHANG, S. YAMAMOTO, Y. OKAMOTO and K. KATO, “Exploration of Conformational Spaces of High-Mannose-Type Oligosaccharides by an NMR-Validated Simulation,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **53**, 10941–10944 (2014).
- T. SATOH, A. SUMIYOSHI, M. YAGI-UTSUMI, E. SAKATA, H. SASAKAWA, E. KURIMOTO, Y. YAMAGUCHI, W. LI, C. A. P. JOAZEIRO, T. HIROKAWA and K. KATO, “Mode of Substrate Recognition by the Josephin Domain of Ataxin-3, Which Has an Endo-Type Deubiquitinase Activity,” *FEBS Lett.* **588**, 4422–4430 (2014).

T. ZHU, T. SATOH and K. KATO, “Structural Insight into Substrate Recognition by the Endoplasmic Reticulum Folding-Sensor Enzyme: Crystal Structure of Third Thioredoxin-Like Domain of UDP-Glucose:Glycoprotein Glucosyltransferase,” *Sci. Rep.* **4**, 7322 (2014).

A. SIKDAR, T. SATOH, M. KAWASAKI and K. KATO, “Crystal Structure of Archaeal Homolog of Proteasome-Assembly Chaperone PbaA,” *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **453**, 493–497 (2014).

B-3) 総説, 著書

Y. KAMIYA, T. SATOH and K. KATO, “Recent advances in glycoprotein production for structural biology: Toward tailored design of glycoforms,” *Curr. Opin. Struct. Biol.* **26**, 44–53 (2014).

矢木宏和, 矢木-内海真穂, 加藤晃一, 「糖鎖構造生物学の最前線」, *ファルマシア* **50**, 746–750 (2014).

Y. YAMAGUCHI, T. YAMAGUCHI and K. KATO, “Structural analysis of oligosaccharides and glycoconjugates using NMR,” in *Glycobiology of the Nervous System, Advances in Neurobiology*, R. K. Yu and C.-L. Schengrund, Eds., Springer; New York, **9**, pp. 165–183 (2014).

T. YAMAGUCHI and K. KATO, “Paramagnetism-assisted nuclear magnetic resonance analysis of dynamic conformations and interactions of oligosaccharides,” in *Glycoscience: Biology and Medicine*, N. Taniguchi, T. Endo, G. W. Hart, P. Seeberger and C.-H. Wong, Eds., Springer; Japan, **Vol. 1**, pp. 137–145 (2014).

B-4) 招待講演

K. KATO, “Dynamic Assembly of Proteins Involved in the Ubiquitin-/Proteasome-Mediated Protein Degradation System,” Joint IMS-KU Workshop on Molecular Sciences towards Green Sustainability, Bangkok (Thailand), January 2014.

K. KATO, “Mechanistic Insights into Dynamic Orchestration of Proteasomes,” Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON) 2014, Khon Kaen (Thailand), January 2014.

K. KATO and T. SATOH, “Exploration of micro–macro relationships in dynamic ordering of biomolecular systems and their underlying design principles,” The 2nd International Symposium on Dynamical Ordering of Biomolecular Systems for Creation of Integrated Functions, Kyoto (Japan), January 2014.

K. KATO, “Conformational Dynamics of Oligosaccharides Characterized by Paramagnetism-Assisted NMR Spectroscopy in Conjunction with Molecular Dynamics Simulation,” The 10th International Symposium on Biochemical roles of Eukaryotic Cell Surface Macromolecules, Kolkata (India), January 2014.

K. KATO, “NMR approaches for elucidating the functional roles of carbohydrate chains,” 20th Symposium of National Magnetic Resonance Society (NMRS-2014), Assam (India), February 2014.

加藤晃一, 「生命分子の揺らぎと秩序形成」, 日本学術振興会分子系の複合電子機能第181委員会, 木津川, 2014年2月.

加藤晃一, 「超高磁場NMR分光法を中心としたタンパク質の高次構造・相互作用解析」, 第2回ISIT ナノ・バイオフィォーラム, 福岡, 2014年3月.

加藤晃一, 「NMRを応用した糖鎖の動的構造解析」, よこはまNMR構造生物学研究会第49回ワークショップ, 横浜, 2014年3月.

加藤晃一, 「創薬と生命分子構造学」, 名古屋市立緑高等学校大学見学模擬授業, 名古屋, 2014年5月.

K. KATO, “Structural views of glycosylation as potential drug target,” The 4th Asia Pacific Protein Association (APPA) Conference, Jeju (Korea), May 2014.

K. KATO and T. SATOH, “Dynamic ordering in proteasomal subunit assembly,” 第14回日本蛋白質科学会年会, 横浜, 2014年6月.

K. KATO, “Dynamic Orchestration of Proteasomes,” University of Cambridge Seminar, Cambridge (U.K.), May 2014.

加藤晃一, 「生命分子の動的秩序形成におけるミクロ-マクロ相関の探索と設計原理の探求」, 新学術領域「動的秩序と機能」平成26年度全体班会議, 小松, 2014年8月.

加藤晃一, 「生命分子構造学を基礎とする生命分子システムの動的秩序形成の仕組みの探求」, 第54回生物物理若手の会夏の学校, 蒲郡, 2014年8月.

K. KATO, “Structural views of physiological and pathological roles of glycans,” Academia Sinica Institutional Lecture, Taipei (Taiwan), September 2014.

K. KATO, “Structural basis for fate determination and functional regulation of proteins mediated by sugar chains,” The Cordeliers Research Center Seminar, Paris (France), September 2014.

K. KATO, “NMR exploration of dynamic conformations and interactions of oligosaccharides and glycoconjugates,” The 6th Iberoamerican NMR meeting/IV Iberian NMR meeting/VII Reunion Bienal del GERMN, Alcala de Henares (Spain), September 2014.

加藤晃一, 「NMRとSANSによる生命分子のダイナミクス研究」, 平成26年度第1回生物構造学研究会, 東京, 2014年10月.

加藤晃一, 「タンパク質機能の制御に関わるN型糖鎖構造の多様性と多型性」, 第87回日本生化学会大会, 京都, 2014年10月.

加藤晃一, 「X線とNMRによる抗体の構造解析」, 第87回日本生化学会大会, 京都, 2014年10月.

K. KATO, T. YAMAGUCHI, M. YAGI-UTSUMI, H. YAGI and T. SATOH, “A multilateral approach for structural characterization of dynamic organization of flexible biomolecules,” Okazaki Institute for Integrative Bioscience Retreat, Okazaki (Japan), November 2014.

T. SATOH, T. TOSHIMORI, K. SUZUKI, T. YAMAGUCHI, G. YAN, T. ZHU and K. KATO, “Structural basis for recognition of the terminal glucose tag of *N*-glycans as fate-determinant of glycoproteins in cells,” The 7th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Seoul (Korea), November 2014.

K. KATO, “Biophysical Exploration of Biomolecular Systems Characterized by Conformational Dynamics and Dynamical Assembly,” National Chiao Tung University Seminar, Hsinchu (Taiwan), December 2014.

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).
山口拓実, 第3回自然科学研究機構若手研究者賞 (2014).
Zhu Tong, 第87回日本生化学会大会若手優秀発表者賞(鈴木紘一メモリアル賞) (2014).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本バイオイメージング学会評議員 (1995-).
日本生化学会評議員 (2002-).
日本糖質学会評議員 (2003-), 理事 (2013-).
日本核磁気共鳴学会評議員 (2006-2012), 理事 (2008-2012, 2014-).
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).
日本糖鎖科学コンソーシアム幹事 (2012-).
日本生物物理学会委員 (2013), 代議員 (2014-).
日本生化学会中部支部幹事 (2014-).

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-).

The Journal of Biochemistry, Associate Editor (2014–).

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 (2004–2014), 取締役 (2005–2013).

(株)医学生物学研究所科学技術顧問 (2014–).

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」, 2014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」, 2014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–.

名古屋大学大学院工学研究科, 非常勤講師, 「生物機能工学特論Ⅲ」, 2014年.

B-9) 学位授与

Zhang Ying, 「Paramagnetism-assisted NMR Analyses of Conformational Dynamics of Ganglioside Glycans」, 2014年 3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査」,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-2013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-2014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-).

科研費挑戦的萌芽研究,「機能性ネオ糖脂質クラスターを利用した神経幹細胞の幹細胞性制御」,加藤晃一(2014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(2014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(2014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(2014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(2014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(2014年).

C) 研究活動の課題と展望

研究活動の課題と展望は今年と変わるところはない。すなわち、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、結晶構造解析、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品質管理システムや、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。

飯 野 亮 太 (教授) (2014 年 6 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：生物物理学，タンパク質科学，1 分子計測

A-2) 研究課題：

- a) 回転分子モーター V-ATPase のエネルギー変換機構の解明
- b) リニア分子モーターセルラーゼのエネルギー変換機構の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 腸内連鎖球菌由来 Na^+ 輸送性 V-ATPase (EhV_0V_1) は、ATP 加水分解反応のエネルギーで回転運動することで Na^+ イオンを能動輸送する分子モーターである。 EhV_0V_1 の大腸菌における発現系を初めて構築した。これにより、変異体作製や 1 分子計測に必要な固定用タグの導入の効率が大幅に改善された。この改変試料を用いて EhV_0V_1 の 1 分子回転観察系を確立し、回転速度とトルクの計測に成功した。可溶性の単離 EhV_1 の回転速度やトルクと比較することで、 EhV_0V_1 では固定子と回転子の相互作用がペリフェラルストークにより安定化され回転が安定化し、単離 EhV_1 よりも高いトルクを発生することが明らかとなった。
- b) *Trichoderma reesei* 由来 cellobiohydrolase I (TrCel7A) は結晶性セルロースを加水分解しながら連続的に直進運動する分子モーターである。蛍光色素 Cy3 で標識した TrCel7A を調製して 1 分子蛍光観察を行った。これにより、結晶形の異なるセルロース I_α とセルロース III_1 への TrCel7A の結合・解離速度定数を求めて比較することに成功した。さらに、高速 AFM 観察によるセルロース上での運動速度の比較にも成功した。これらの速度パラメーターを比較した結果、 TrCel7A によるセルロース I_α とセルロース III_1 の分解活性の大きな違いは化学反応素過程の速度定数の違いによるものではなく、セルロース上の加水分解可能なレーン数の違いや TrCel7A の「渋滞」の度合いの違いによるものであることが明らかとなった。

B-1) 学術論文

- H. UENO, Y. MINAGAWA, M. HARA, S. RAHMAN, I. YAMATO, E. MUNYUKI, H. NOJI, T. MURATA and R. IINO, "Torque generation of *Enterococcus hirae* V-ATPase," *J. Biol. Chem.* **289**, 31212–31223 (2014).
- T. IKEDA, T. TSUKAHARA, R. IINO, M. TAKEUCHI and H. NOJI, "Motion Capture and Manipulation of Single Synthetic Molecular Rotors by Optical Microscopy," *Angew. Chem., Int. Ed.* **53**, 10082–10085 (2014).
- T. IKEDA, R. IINO and H. NOJI, "Real-Time Fluorescence Visualization of Slow Tautomerization of Single Free-Base Phthalocyanines under Ambient Conditions," *Chem. Commun.* **50**, 9443–9446 (2014).
- Y. SHIBAFUJI, A. NAKAMURA, T. UCHIHASHI, N. SUGIMOTO, S. FUKUDA, H. WATANABE, M. SAMEJIMA, T. ANDO, H. NOJI, A. KOIVULA, K. IGARASHI and R. IINO, "Single-Molecule Imaging Analysis of Elementary Reaction Steps of *Trichoderma reesei* Cellobiohydrolase I (Cel7A) Hydrolyzing Crystalline Cellulose I_α and III_1 ," *J. Biol. Chem.* **289**, 14056–14065 (2014).
- H. TAKEHARA, K. MIYAZAWA, T. NODA, K. SASAGAWA, T. TOKUDA, S. H. KIM, R. IINO, H. NOJI and J. OHTA, "A CMOS Image Sensor with Stacked Photodiodes for Lensless Observation System of Digital Enzyme-Linked Immunosorbent Assay," *Jpn. J. Appl. Phys.* **53**, 04EL02 (5 pages) (2014).

B-3) 総説, 著書

R. IINO, Y. MINAGAWA, H. UENO, M. HARA and T. MURATA, “Molecular structure and rotary dynamics of *Enterococcus hirae* V₁-ATPase,” *IUBMB Life* **66**, 624–630 (2014).

飯野亮太, 中村彰彦, 五十嵐圭日子, 鮫島正浩, 「1分子計測からわかるエクソ型セルラーゼの分子機構」, *生物物理* **54**, 318–320 (2014).

内橋貴之, 飯野亮太, 安藤敏夫, 野地博行, 「高速 AFM による F₁-ATPase 分子回転の直接可視化」, *生化学* **86**, 127–136 (2014).

飯野亮太, 「デジタルPCR とデジタルELISA」, 「化学フロンティア 23 1分子ナノバイオ計測: 分子から生命システムを探る革新的技術」, 化学同人, pp. 144–146 (2014).

B-4) 招待講演

R. IINO, “Single-molecule imaging analysis of molecular motors,” The 7th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences, Seoul (Korea), November 2014.

R. IINO, “Motions of individual biomolecular motors probed by gold nanoparticle and nanorod,” International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (ISSPIC XVII), Fukuoka (Japan), September 2014.

R. IINO, “Watching and manipulating biomolecules one at a time,” PITTCON 2014 PAI-NET Session: Ultrasensitive Analytical Technologies for Biology and Chemistry, Chicago (U.S.A.), March 2014.

飯野亮太, 「生体分子モーターを測る, 壊す, 創る」, シンポジウム「細胞のメソスケール構造機能」, 京都, 2014年12月.

飯野亮太, 「金ナノ粒子, 金ナノロッドを用いた生体分子モーターのマイクロ秒1分子計測」, 新学術領域「柔らかな分子系」第7回ワークショップ, 岡崎, 2014年12月.

飯野亮太, 「目に見えないとても小さなタンパク質機械の動きを見る」, 日本化学会東海支部「夢・化学—21高校生のための化学講座: 見えないのを見る化学」, 浜松, 2014年11月.

飯野亮太, 「回るたんぱく質, 歩くたんぱく質の仕組みを探る」, 分子科学研究所市民公開講座第103回分子科学フォーラム, 岡崎, 2014年11月.

飯野亮太, 「生体分子モーターダイナミクスの1分子計測: 構造解析と理論予測との協奏を目指して」, TCCI 第5回研究会, 岡崎, 2014年10月.

飯野亮太, “Importance of membrane pumps and channels: an introduction,” 第52回生物物理学学会年会シンポジウム “Which is important for biophysicists, pump or channel?” 札幌, 2014年9月.

飯野亮太, 「1分子計測技術で生体分子マシン, 人工分子マシンの“動き”を調べる・考える」, 第63回高分子討論会 S14 “動き”のある自己組織化材料: 動的応答・変化を示す材料の設計・機能・応用の最前線, 長崎, 2014年9月.

R. IINO, “Single-molecule high-speed imaging of rotary and linear molecular motors,” Andor Academy Kyoto, Kyoto, August 2014.

飯野亮太, 「細菌多剤排出ポンプ計測マイクロデバイス」, 第9回トランスポーター研究会年会シンポジウム「チャネル・トランスポーター研究の最前線2 (機能評価系・創薬)」, 名古屋, 2014年6月.

飯野亮太, 「DNA を巻き取る分子リール」, 第66回日本細胞生物学会大会シンポジウム「遺伝情報を司るDNA のふるまい」, 奈良, 2014年6月.

飯野亮太, 「天然ナノモーターと人工ナノローターの1分子ダイナミクス」, 第三回次世代の物質科学・ナノサイエンスを探る, 札幌, 2014年1月.

B-6) 受賞, 表彰

R. IINO, Emerging Investigator. Lab on a Chip., The Royal Society of Chemistry, U.K. (2012).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会代議員 (2014.1.1-2015.6.31).

日本生物物理学会分野別専門委員(A-13. モータータンパク質) (2014.1.1-2014.12.31).

学会誌編集委員

日本生物物理学会学会誌「生物物理」編集委員 (2014-2015).

その他

公益財団法人新世代研究所バイオ単分子研究会委員 (2012.4.2-2015.3).

B-8) 大学での講義, 客員

東京大学大学院農学生命科学研究科, 非常勤講師「生体触媒分子論」, 2014年6月.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「リニアモータータンパク質糖質加水分解酵素の1ナノメートルステップの1分子計測」, 飯野亮太 (2012年-2014年).

科研費新学術領域研究「動的秩序と機能」(公募研究), 「ATP 駆動サイボーク回転分子モーターの創生」, 飯野亮太 (2014年-2015年).

科研費新学術領域研究「柔らかな分子系」(公募研究), 「金ナノロッドを用いた分子モーター構造ダイナミクスの高速1分子計測」, 飯野亮太 (2014年-2015年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「生体・人工ハイブリッドナノモーターの創製」, 飯野亮太 (2012年-2013年).

科研費新学術領域研究「揺らぎと生体機能」(公募研究), 「分子モーターの構造揺らぎを調べる超高速配向イメージング法の開発」, 飯野亮太 (2011年-2012年).

科研費特定領域研究「高次系分子科学」(公募研究), 「生細胞内1分子FRET 法による回転モータータンパク質のダイナミクス計測」, 飯野亮太 (2010年-2011年).

科研費新学術領域研究「揺らぎと生体機能」(公募研究), 「モータータンパク質の揺らぎと性能の相関を調べる超高速光学顕微鏡の開発」, 飯野亮太 (2009年-2010年).

科研費若手研究(B), 「プロトン駆動力で回転するATP 合成酵素を1分子技術とマイクロデバイスで可視化する」, 飯野亮太 (2009年-2010年).

科研費若手研究(B), 「プロトン駆動力で回転する生体分子モーター ATP 合成酵素の1分子計測」, 飯野亮太 (2006年-2008年).

日本学術振興会二国間交流事業共同研究, 「生細胞内で働くATP 合成酵素の回転速度を1分子技術で計測する」, 飯野亮太 (2010年-2011年).

大阪大学産業科学研究所リーダーシップ支援経費, 「1細菌培養・観察・回収用マイクロドロップレットアレイの開発」, 飯野亮太 (2009年).

大阪大学産業科学研究所原子力工学専攻21世紀COE 若手研究A,「マイクロ加工技術を駆使した異物排出遺伝子の網羅的スクリーニング」, 飯野亮太 (2006年).

C) 研究活動の課題と展望

回転分子モーター V-ATPase に関しては, ATP 加水分解駆動時の Na^+ 輸送を伴う回転運動の詳細な解析が今後の課題である。また, 脂質膜を介する Na^+ の電気化学ポテンシャル(濃度差と膜電位差)で一方向に回転できるのか, さらに回転できる場合, アップヒルな化学反応である ATP 合成を触媒できるのか, が今後検証すべき重要な課題である。界面活性剤で可溶化した試料の計測だけでなく, 人工脂質二重膜に埋め込んだ試料の1分子計測にも取り組む。またリニア分子モーターセルラーゼについては, 運動時の結合ドメインと触媒ドメイン間の協調機構の解明が重要な課題である。1分子FRET 計測によりこれらのドメインの距離変化の計測を行うことで機構の解明に取り組む。さらに異種のセルラーゼを混合した際に結晶性セルロースの加水分解活性が大幅に上昇する現象, 「シナジー効果」の機構解明が重要な課題である。今後は異種のセルラーゼを同時に1分子観察することによりシナジー効果の仕組みを明らかにする。

藤 井 浩（准教授）（1998 年 3 月 1 日～2014 年 3 月 31 日）*

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) 不斉マンガンサレン錯体による不斉エポキシ化活性種の研究

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レンとの反応により，ヨードシリアレン付加体の合成，単離に成功した。さらにこの錯体の構造解析にも成功した。結晶構造では，ヨードシリアレンの配位によりサレン配位子が平面から階段状に大きく構造変化し不斉な環境を作り出していることが明らかとなった。本年度我々は，この解明された構造を基に，ヨードソアレ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。

B-1) 学術論文

Z. CONG, H. KINEMUCHI, T. KURAHASHI and H. FUJII, “Factors Affecting Hydrogen-Tunneling Contribution in Hydroxylation Reactions Promoted by Oxidized Iron(IV) Porphyrin π -Cation Radical Complexes,” *Inorg. Chem.* **53**, 10632–10641 (2014).

S. AONO, M. NAKAGAKI, T. KURAHASHI, H. FUJII and S. SAKAKI, “Theoretical Study of One-Electron Oxidized Mn(III)- and Ni(II)-Salen Complexes: Localized vs. Delocalized Ground and Excited States in Solution,” *J. Chem. Theory Comput.* **10**, 1062–1073 (2014).

T. KURAHASHI, M. HADA and H. FUJII, “Di- μ -Oxo Dimetal Core of Mn^{IV} and Ti^{IV} as a Linker Between Two Chiral Salen Complexes Leading to the Stereoselective Formation of Different *M*- and *P*-Helical Structure,” *Inorg. Chem.* **53**, 1070–1079 (2014).

B-4) 招待講演

H. FUJII, "Hypochlorito-Iron(III) Porphyrin Complexes as Models for Reaction Intermediates of Catalytic and Biological Reactions," 41st International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines, Singapore, July 2014.

H. FUJII, "Functional Role of Heme Axial Ligand on the Reactivity of Oxoiron(IV) Porphyrin π -Cation Radical Complex," 8th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines, Istanbul (Turkey), June 2014.

藤井 浩, 大阪大学基礎工学研究科研究会「金属新機能場の開発を目指して」, 大阪大学, 大阪, 2014年2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-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。

※) 2014年4月1日奈良女子大学研究院自然科学系教授

栗原 顕 輔 (特任准教授(岡崎オリオンプロジェクト)) (2014 年 5 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：界面化学，超分子化学

A-2) 研究課題：

- a) 交差触媒系を内包するベシクル型人工細胞の創成
- b) 増殖に最適な組成選択を行うベシクル系の構築
- c) 遺伝子型と表現型が内在する人工細胞の構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) これまで外部より添加していた両親媒性触媒分子を，ベシクル膜という疎水場を利用して合成する。この触媒分子はベシクル自己生産において，膜合成を触媒するので，シグモイド的にベシクルが生産されると予測できる。膜分子の合成と触媒の合成は連動しており，膜内で触媒分子が増えすぎるとベシクル膜が不安定化してベシクルは崩壊するが，一方ベシクルが分裂して増えすぎると，触媒分子生産が追いつかず膜内の触媒濃度が下がり，ベシクルの生成速度は減少する。この二つの生産系が，ある点に収束すれば，より堅牢でしなやかな人工細胞が誕生すると期待できる。これまで，膜分子と内部で合成可能な触媒分子の前駆体を合成し，実際にベシクル内部で触媒が合成され，ベシクルが増殖する過程が確認できた。
- b) 現在の人工細胞系の膜分子，およびその前駆体は1種類に限られていた。ベシクルにあえて異種の膜分子前駆体を添加し，ベシクル自己生産ダイナミクスを見守る。この摂動により，ベシクル生産系が消滅する場合もあろうが，やがて混合脂質系で，より堅牢に自己生産し続けるベシクルが現れる場合もあろう。このようなベシクルの多様性は，生命起源が自己複製する脂質膜から誕生したとするリピッドワールド仮説を支持するものである。現在，2種類の脂質からなるベシクル系が共存した際に，ベシクル膜を構成する脂質が化学反応により交換することを確認している。
- c) 現在，鎖長を変えた鋳型 DNA を内部に封入し，その自己増幅過程を観察している。その中で，DNA の鎖長に応じてベシクルの自己生産ダイナミクスが異なることを既に見出した。長い DNA (1164 bp) ではベシクルが自己生産するが，鎖長が短い DNA (374 bp) を内包するベシクルは，小さいベシクルを内部に形成し個数は増加しない。ベシクル内の DNA の摂動はベシクル融合法で起こすことが可能であり，その中で，より自己生産に特化した DNA の混合比などが見つければ，遺伝子型と表現型とが相関をもつ人工細胞が創出すると期待される。

B-1) 学術論文

S. K. TAKAKURA, T. YAMAMOTO, K. KURIHARA, T. TOYOTA, K. OHNUMA and T. SUGAWARA, "Spontaneous Transformation from Micelle to Vesicle Associated with Sequential Conversions of Comprising Amphiphiles within Assemblies," *Chem. Commun.* **50**, 2190–2192 (2014).

B-3) 総説，著書

菅原 正，鈴木健太郎，栗原顕輔，豊田太郎，「分子システムとしてつくる人工細胞」，*豊田研究報告* **67**, 63–70 (2014).

B-4) 招待講演

K. KURIHARA, “A Constructive Approach to Artificial Cell,” The 7th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Seoul (Korea), November 2014.

C) 研究活動の課題と展望

本研究では、構成的アプローチをもとに既知の分子から「生命らしい」機能や挙動を示す物質を創成することを目的としている。最も単純であろう原始細胞には、情報物質の自己複製および境界膜の自己生産（外部から取り込んだ養分を自分の構成物質に変換して個体を増殖すること）の2つのダイナミクスが必要であり、いずれも触媒系を介して行われていたと考えられている。現在のベシクル型人工細胞モデルでは、膜分子生産を触媒する分子システムは実現されておらず、触媒能が低下し数世代しか増殖できない。我々は境界の生産系と触媒の生産系の連動性に着目し、ベシクル膜を触媒場とする交差触媒系を導入した新規の人工細胞システムを構想した。本システムは触媒生産系を内包することで、ベシクル内で触媒分子が過剰に生産されると相対的に膜分子が減少し、ベシクルが崩壊して新しいベシクルが再構築することが予想される。よって従来のように増殖に伴いベシクルの情報（サイズ、組成など）が発散していくのではなく、生産と再構築を繰り返すことで、触媒と膜の生産のバランスが取れた人工細胞のみが存続していくことも期待できる。

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) 表面増強赤外分光法によるクラウンエーテルのアルカリ金属イオン選択機構の研究
- b) 表面増強赤外分光法による GroEL タンパク質の二次構造への界面活性剤 SDS の影響に関する研究
- c) 急速溶液交換法による新規赤外分光計測系の構築
- d) 体内時計の調節に関わる光受容タンパク質メラノプシンの機能発現機構の解析
- e) 哺乳動物カリウムイオンチャ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) 厚さ数ナノメートル程度の金薄膜を全反射赤外分光用のプリズム表面に作製することで、金薄膜に吸着した分子種の赤外吸収強度を増強することが可能である。本手法をカリウムイオンを選択的に吸着するクラウンエーテルに適用し、各種アルカリ金属イオンを含む緩衝液と含まない緩衝液との赤外吸収差スペクトルを計測した。その結果、 K^+ 、 Rb^+ 、 Cs^+ では似たような差スペクトルが得られたが、 Li^+ 、 Na^+ では異なる形状の差スペクトルが得られ、イオン吸着に伴う構造変化に差異があることが示唆された。本研究は広島大学の井口佳哉准教授との共同研究として行われ、*Chem. Phys. Lett.* に発表された。
- b) GroEL はタンパク質のリフォールディングにはたらくシャペロニン的一种である。そのアピカルドメインと呼ばれる部位は α ヘリックスと β シート構造からなる。アピカルドメインに界面活性剤であるラウリル硫酸ナトリウム (SDS) を作用させると、タンパク質の構造が変化し、ファイバーが形成される。表面増強赤外分光計測を適用した結果、SDS を作用させると、 β シート構造が減り、 α ヘリックスやターン構造が増えることが分かった。本研究は、岡崎統合バイオサイエンスセンターの特任助教であった Jin Chen 博士との共同研究として行い、*Sci. Rep.* に発表された。
- c) 圧縮気体で動作するシリンジポンプによる急速溶液交換装置を、藤貴夫准教授のグループが開発したチャープパルス上方変換による全反射赤外分光装置と組み合わせて実験を行った。全反射プリズム上で、水とアセトンが置き換わる様子を 1 ミリ秒の時間分解能で計測することに成功した。その結果、溶液交換が約 10 ミリ秒で完結していることが分かった。本研究は、分子科学研究所の藤貴夫准教授との共同研究として行われ、*Opt. Express* に発表された。
- d) ヒトなどの哺乳類では、メラノプシンという光受容タンパク質が光情報を受け取ることで、概日時計や瞳孔径の調節が行われる。分子系統的には、メラノプシンは無脊椎動物の視覚を担う光受容タンパク質と近縁である。今年度は、これらの近縁であるが機能の異なる光受容タンパク質の機能特性を比較した結果、哺乳類のメラノプシンは自発的に発色団であるレチナールを放出して、光受容能を失いやすくなっていることを生化学的・分光学的・電気生理学的解析から明らかにした。また哺乳類の種ごとに、メラノプシン分子におけるレチナール分子の「放出しやすさ」が大きく異なることも見出した。
- e) ほぼすべての生物は、イオンチャネルという膜タンパク質を用いて細胞内外で物質のやりとりを行っている。その中でカリウムを選択的に通すチャネルはカリウムチャネルと呼ばれるが、哺乳類が持つ TWIK-1 というカリウムチャネルは、イオン選択性を生み出す領域のアミノ酸配列が他のカリウムチャネルと異なり、また他のカリウムチャネルが

通さないナトリウムイオンも通すことが知られている。今年度は、TWIK-1が持つ特異的なアミノ酸配列がどのように、イオン選択性に寄与しているのかを、赤外分光法を用いて解析した。その結果、実際に TWIK-1 特異的なアミノ酸配列が、チャネルイオン間相互作用を大きく変化させていることを示す結果を得た。

B-1) 学術論文

Y. INOKUCHI, T. MIZUUCHI, T. EBATA, T. IKEDA, T. HAINO, T. KIMURA, H. GUO and Y. FURUTANI, “Formation of Host–Guest Complexes on Gold Surface Investigated by Surface-Enhanced IR Absorption Spectroscopy,” *Chem. Phys. Lett.* **592**, 90–95 (2014).

J. CHEN, H. YAGI, Y. FURUTANI, T. NAKAMURA, A. INAGUMA, H. GUO, Y. KONG and Y. GOTO, “Self-Assembly of the Chaperonin GroEL Nanocage Induced at Submicellar Detergent,” *Sci. Rep.* **4**, 5614 (2014).

L.-F. SUN, E. KAWANO-YAMASHITA, T. NAGATA, H. TSUKAMOTO, Y. FURUTANI, M. KOYANAGI and A. TERAOKA, “Distribution of Mammalian-Like Melanopsin in Cyclostome Retinas Exhibiting a Different Extent of Visual Functions,” *PLoS One* **9**, e108209 (2014).

J. SASAKI, H. TAKAHASHI, Y. FURUTANI, O. SINESHSHEKOV, J. SPUDICH and H. KANDORI, “His166 is the Schiff Base Proton Acceptor in the Attractant Phototaxis Receptor Sensory Rhodopsin I,” *Biochemistry* **53**, 5923–5929 (2014).

H. SHIRAI, C. DUCHESNE, Y. FURUTANI and T. FUJI, “Attenuated Total Reflectance Spectroscopy with Chirped-Pulse Upconversion,” *Opt. Express* **22**, 29611–29616 (2014).

B-3) 総説、著書

Y. FURUTANI and H. KANDORI, “Hydrogen-Bonding Changes of Internal Water Molecules upon the Actions of Microbial Rhodopsins Studied by FTIR Spectroscopy,” *Biochim. Biophys. Acta* **1837**, 598–605 (2014).

古谷祐詞, 木村哲就, 岡本基士, 「急速緩衝液交換法による時間分解全反射赤外分光法の開発」, *生物物理* **54**, 272–275 (2014).

古谷祐詞, 「赤外分光法による膜タンパク質の分子機構研究」, *Mol. Sci.* **8**, A0067 (2014).

塚本寿夫, 「G タンパク質共役受容体オプシンとその構成的活性化変異体の構造ダイナミクス」, *生物物理* **54**, 111–112 (2014).

H. TSUKAMOTO, “Diversity and functional properties of bistable photopigments,” in *The evolution of visual and non-visual pigments*, M. Hankins, S. Collin, J. Marshall and D. Hunt, Eds., 219–239 (2014).

B-4) 招待講演

Y. FURUTANI, “Protein-Ion Interactions of Membrane Proteins Studied by Fourier-Transform Infrared Spectroscopy,” 18th East Asian Workshop on Chemical Dynamics, Busan (Korea), May 2014.

古谷祐詞, 「赤外分光法による膜タンパク質の動作機構研究」, 大阪大学生命機能研究科FBS コロキウム, 吹田, 2014年 6月.

古谷祐詞, 「赤外分光法による膜タンパク質の動作機構研究」, 第8回分子科学討論会奨励賞受賞講演, 東広島, 2014年 9月.

Y. FURUTANI, “Structural Changes of Membrane Proteins Studied by Difference FTIR Spectroscopy; Microbial Rhodopsins and Potassium Ion Channels,” 16th International Conference on Retinal Proteins, Nagahama (Japan), October 2014.

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).

古谷祐詞, 木村哲就, 岡本基士, 第1回BIOPHYSICS Editor's Choice Award (2014).

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, 2013).

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, 2013-2014).

日本分光学会中部支部幹事 (2012-2014).

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 (2012-2014), 座長 (2014).

学会誌編集委員

日本生物物理学会中部地区編集委員 (2007, 2010).

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, 第3回生体物理化学セミナー「赤外分光法による膜タンパク質研究」, 2014年9月19日.
総合研究大学院大学物理科学研究科, 「メカノシステムバイオロジー」(受容体構造), 2014年11月20日.

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(スタートアップ), 「ATR-FTIR 分光法によるロドプシンのタンパク質間相互作用の解析」, 古谷祐詞 (2006年).

科研費特定領域研究「革新的ナノバイオ」(公募研究), 「光駆動プロトンポンプの動作機構の解明」, 古谷祐詞 (2007年-2008年).

科研費特定領域研究「細胞感覚」(公募研究), 「古細菌型ロドプシンの新奇情報伝達機構の解明」, 古谷祐詞 (2007年-2008年).

科研費特定領域研究「高次系分子科学」(公募研究), 「孤立ナノ空間に形成された水クラスターの水素結合ダイナミクス解析」, 古谷祐詞 (2008年-2009年).

科研費特定領域研究「革新的ナノバイオ」(公募研究), 「光駆動イオン輸送蛋白質の動作機構の解明」, 古谷祐詞 (2009年-2010年).

科研費特定領域研究「細胞感覚」(公募研究), 「古細菌型ロドプシンの新奇情報伝達機構の解明と光応答性カリウムチャネルの開発」, 古谷祐詞 (2009年-2010年).

科研費特定領域研究「高次系分子科学」(公募研究), 「孤立ナノ空間を有する有機金属錯体での特異な光化学反応の分光解析」, 古谷祐詞 (2010年-2011年).

科研費若手研究(B), 「赤外差スペクトル法によるイオン輸送蛋白質の分子機構解明」, 古谷祐詞 (2010年-2011年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト,「膜輸送蛋白質によるイオン選択・透過・輸送の分子科学」,古谷祐詞(2010年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト,「イオンチャネル蛋白質のイオン認識および開閉制御の分子機構解明」,古谷祐詞(2011年).

科学技術振興機構さきがけ研究,「様々な光エネルギー変換系における水分子の構造・機能相関解明」,古谷祐詞(2011年-2014年).

科研費挑戦的萌芽研究,「哺乳動物イオンチャネルの機能的発現と分子機構解析」,古谷祐詞(2012年-2013年).

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).

科研費挑戦的萌芽研究,「膜電位存在下での膜タンパク質の赤外分光解析系の開発」,古谷祐詞(2014年-2016年).

科研費若手研究(A),「膜タンパク質の分子機構解明に資する新規赤外分光計測法の開発」,古谷祐詞(2014年-2017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).

ノバルティス科学振興財団研究奨励金,「部位特異的蛍光標識を用いたGタンパク質共役受容体の動的構造変化の解析」,塚本寿夫(2012年).

C) 研究活動の課題と展望

2014年は様々な共同研究の成果を報告することができた。その一方でイオンチャネルやメラノプシンなどの独自テーマでの成果報告に時間が掛かっている。2015年は順次、これらについても成果をまとめて報告していきたいと考えている。さきがけ研究のテーマの一環として、時間分解FTIR用回転セルを用いた計測系の構築を装置開発室のメンバーと行っている。1つの試料だけでの計測に比べると、回転セル上の試料の数だけ計測時間を短縮することが可能になる。来年度は、より多数の試料を均一に塗布することを可能にする試料塗布装置を完成させ、1つの試料だけでは計測に非常に時間の掛かる光受容タンパク質などに適用していきたいと考えている。

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，ロジウム，銅錯体触媒などを両親媒性高分子に固定化するとともに機能修飾することで，これら遷移金属錯体触媒有機変換工程の多くを完全水系メディア中で実施することに成功した。水中不均一での高立体選択的触媒反応の開発を世界にさきがけて成功した。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。前項で開発した高分子触媒をカラムカートリッジ化することで実用性に富む連続フロー反応システムを構築した。
- 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。
- d) 水中での反応加速，連続フローシステムに依る効率化，ピンサー錯体触媒化学における新しい反応形式などに立脚して各種反応の ppm-ppb 触媒化を進めつつある。

B-1) 学術論文

Y. M. A. YAMADA, Y. YUYAMA, T. SATO, S. FUJIKAWA and Y. UOZUMI, “A Palladium-Nanoparticle and Silicon-Nanowire-Array Hybrid: A Platform for Catalytic Heterogeneous Reactions,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **53**, 127–131 (2014).

M. MINAKAWA, Y. M. A. YAMADA and Y. UOZUMI, “Driving an Equilibrium Acetalization to Completion in the Presence of Water,” *RSC Adv.* **4**, 36864–36867 (2014).

Y. ITO, H. OHTA, Y. M. A. YAMADA, T. ENOKI and Y. UOZUMI, “Bimetallic Co–Pd Alloy Nanoparticles as Magnetically Recoverable Catalysts for the Aerobic Oxidation of Alcohols in Water,” *Tetrahedron* **70**, 6146–6149 (2014).

Y. ITO, H. OHTA, Y. M. A. YAMADA, T. ENOKI and Y. UOZUMI, “Transfer Hydrogenation of Alkenes Using Ni/Ru/Pt/Au Heteroquaternary Nanoparticle Catalysts: Sequential Cooperation of Multiple Nano-Metal Species,” *Chem. Commun.* **50**, 12123–12126 (2014).

G. HAMASAKA and Y. UOZUMI, “Cyclization of Alkynoic Acids in Water in the Presence of a Vesicular Self-Assembled Amphiphilic Pincer Palladium Complex Catalyst,” *Chem. Commun.* **50**, 14516–14518 (2014).

D. PI, K. JIANG, H. ZHOU, Y. SUI, Y. UOZUMI and K. ZHOU, “Iron-catalyzed C(sp³)-H Functionalization of Methyl Azaarenes: A Green Approach to Azaarene-Substituted α - or β -Hydroxy Carboxylic Derivatives and 2-Alkenylazaarenes,” *RSC Adv.* **4**, 57875–57884 (2014).

T. OSAKO and Y. UOZUMI, “Enantioselective Copper-Catalyzed Azide-Alkyne Cycloaddition for Construction of Chiral Biaryl Derivatives,” *Org. Lett.* **16**, 5866–5869 (2014).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

Y. UOZUMI, “Development of Silicon Nanowire Array as a Platform for Catalytic Heterogeneous Reactions,” Asian CORE Winter School on Frontiers of Molecular, Photo-, and Material Sciences, Taipei (Taiwan), February 2014.

魚住泰広, 「両親媒性高分子反応場：「雨宿り効果」に立脚する反応駆動システム」, 第11回岡山理科大学グリーン元素科学シンポジウム, 岡山, 2014年3月.

Y. UOZUMI, “Amphiphilic Polymeric Reaction Environment: Reaction Driving Based on the ‘Umbrella Effect,’” Institute for Chemical Research International Symposium 2014, Kyoto (Japan), March 2014.*

Y. UOZUMI, “Development of Polymer-Supported Catalysts: Green Processes for Green Materials,” “Glorious Three Gorges” Summer Camp of Japanese College Students & Sino-Japanese Seminar on Utilization of Biological Resources and Environmental Protection, Hubei (China), August 2014.

魚住泰広, 「固定化触媒による水中化学合成でトリプルプレー!」, 第4回CSJ 化学フェスタ2014, 東京, 2014年10月.

Y. UOZUMI, “Development of Silicon Nanostructure-Supported Palladium Nanoparticle Catalysts and Their Application to Organic Transformations,” The 7th Kansai-CMDS Meeting on OMCOS 2014, Gifu (Japan), October 2014.

Y. UOZUMI, “Highly Active Self-Assembled Polymeric Transition Metal Catalysts for Coupling Reactions,” 18th Malaysian International Chemical Congress (18MICC), Kuala Lumpur (Malaysia), November 2014.*

Y. UOZUMI, “Highly Active Self-Assembled Polymeric Transition Metal Catalysts for Coupling Reactions,” Vietnam Malaysia International Chemical Congress (VMICC) 2014, Hanoi (Vietnam), November 2014.

Y. UOZUMI, “Highly Active Self-Assembled Polymeric Transition Metal Catalysts for Coupling Reactions,” The Ninth International Symposium on Integrated Synthesis (ISIS-9), Awaji (Japan), November 2014.*

B-5) 特許出願

PCT/CA2013/050995, 「HYDROGENATION CATALYST」, A. MOORES, R. HUDSON, Y. YAMADA, Y. UOZUMI, 小川和彦 (McGill University, 理化学研究所, 自然科学研究機構), 2012年.

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, 井上學術賞 (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).

魚住泰広, 文部科学大臣表彰科学技術賞 (2014).

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 (2007-2009).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会第 116 委員会委員 (1998-).

日本学術振興会科学研究費補助金第一次審査員 (2002-2006).

科学振興調整費審査委員 (2003-2004).

振興調整費「新機能材料開発に資する強磁場固体NMR」研究運営委員 (2004-2007).

学会誌編集委員

日本化学会速報誌編集委員 (2001-2002).

SYNLETT 誌アジア地区編集主幹 (2002-).

Tetrahedron Asymmetry 誌アドバイザリーボード (2002-).

SYNFACTS 誌編集委員 (2005-).

ACS Combinatorial Science 誌エディトリアルアドバイザリーボード (2010-).

The Chemical Record 編集委員 (2010-).

その他

科学技術振興機構 CREST 研究「水中での精密分子変換を実現するナノ遷移金属触媒創製」 研究リーダー (2002-2007).

理化学研究所研究チームリーダー (2007-).

経済産業省グリーン・サステ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).

科学技術振興機構 ACCEL 研究「超活性固定化触媒開発に立脚した基幹化学プロセスの徹底効率化」 研究代表 (2014-2019).

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,「錯体触媒化学」, 2014年1月.

中国湖北省三峡大学, 楚天学者講座教授, 2014年8月-.

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).

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製」, 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 (2010年-2013年).

科研費挑戦的萌芽研究,「ユビキタス金属ナノ粒子の触媒機能開発」, 魚住泰広 (2014年-).

科研費若手研究(B),「ポリマー担持ユビキタスメタル触媒による高環境調和型水中フロー酸素酸化工程の開発」, 大迫隆男 (2014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。さらに2014年12月からACCEL 研究(5年間)に採択され「超活性固定化触媒開発に立脚した基幹化学プロセスの徹底効率化」研究を開始した。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-ACCEL, 理研へと発展的に移行している。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。加えてこれまで開発してきた触媒およびその駆動方法論をACCEL 研究において実践的なステージへと展開したい。

榎 山 儀 恵（准教授）（2014 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：有機合成化学

A-2) 研究課題：

- a) プロトン触媒とする不斉骨格転位反応
- b) 水素結合を鍵とする不斉分子触媒の設計・開発
- c) ハロゲン結合供与体触媒の設計・開発と有機分子変換

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) トリフルオロ酢酸による 1,2,2-置換ブテニルアミンの 1,3-アルキル移動反応に成功した。特に、1位の炭素上が光学的に純粋なブテニルアミンを用いた場合に良好な不斉転写率でプレニルアミンが得られることを見出した。本成果は、不斉 1,3-アルキル移動反応に成功した世界初の例である。
- b) C_1 対称型のキラルビスリン酸触媒を設計・開発した。特に、2つのリン酸基間の水素結合が動的軸不斉を制御することを明らかにした。また、電子求引性置換基の導入が、2つのリン酸基間の水素結合の強さと方向性を強化し、触媒活性の向上と不斉反応場の識別を可能にすることを見出した。
- c) ペンタフルオロヨードベンゼンが、イソキノリンとアリルシラトランとのアリル化反応の触媒として機能することを見出した。本成果は、ハロゲン結合供与体が有機分子変換の触媒として機能することを示唆する重要な知見である。

B-4) 招待講演

榎山儀恵, 「プレnstedd酸触媒の設計と反応開発」, 第94日本化学会春季年会特別企画「進化する有機分子触媒」, 名古屋大東山キャンパス, 名古屋, 2014年 3月.

榎山儀恵, 「水素原子・ハロゲン原子が創り出す不斉空間・不斉反応」, 平成26年度若手研究者のためのセミナー, 東京大学大学院薬学系研究科薬学講堂, 東京, 2014年 11月.

B-6) 受賞, 表彰

鳴海智裕, 第2回国際会議(兼)第7回有機触媒シンポジウムポスター賞 (2014).

榎山儀恵, 有機合成化学協会セントラル硝子研究企画賞平成26年度 (2014).

榎山儀恵, Thieme Chemistry Journals Award (2008).

榎山儀恵, Damon Runyon Cancer Research Foundation Post Doctoral Research Fellowship (2005).

榎山儀恵, Abbott Laboratories Graduate Fellowship (2005).

榎山儀恵, The Elizabeth R. Norton Prize for Excellence in Research in Chemistry (2003).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C),「有機分子アリル化剤の開発を基軸とする革新的不斉有機分子触媒反応の開拓」, 榎山儀恵 (2011年-2013年).

科研費若手研究(B),「ペルフルオロフェニル基の特性を利用した不斉有機酸触媒の開発とアリル化反応への応用」, 榎山儀恵 (2009年-2010年).

科研費特定領域研究「協奏機能触媒」,「 π -アリル・0価鉄複合体—キラルプレンステッド酸触媒による新規アリル化反応の開発」, 榎山儀恵 (2008年-2009年).

科研費若手研究(スタートアップ),「酵素模倣型キラル求核触媒の設計および不斉反応の探索」, 榎山儀恵 (2007年-2008年).
公益信託林女性自然科学者研究助成基金,「アゾール／グアニジン2成分系キラル求核触媒の設計開発および不斉反応の探索」, 榎山儀恵 (2007年-2008年).

住友財団基礎化学研究助成,「アザ-コープ転位を基盤とする触媒的不斉炭素-炭素結合形成反応の開発」, 榎山儀恵 (2007年).
東北大学理学研究科若手奨励研究基金,「アザ-コープ転位を基盤とする触媒的不斉アリル化反応の開発」, 榎山儀恵 (2007年).
分子系高次構造体化学国際教育研究拠点若手奨励費研究,「高次構造アルカロイドの合成を指向した鍵中間体ピロリジンの触媒的不斉合成反応の開発」, 榎山儀恵 (2007年).

C) 研究活動の課題と展望

地球上に生存する生命を特徴付ける性質のひとつがキラリティーである。ほとんど全ての生体系は、本来的にキラルでありエナンチオマー的に純粋である。このことは、物質のキラリティーが至るところで私たちの日常に浸透している所以である。私たちの社会に欠かすことのできない物質・材料にキラリティーを組み入れること、それを可能にする一連の方法論を開発することは、次世代の純粋化学と応用化学の両面、そして材料科学において、極めて大きな意味をもつ。

当グループでは、キラル分子を供給する方法論の開拓とその確立を目指し、不斉分子触媒の設計・合成と触媒的不斉合成反応の開発を進めている。これまでに、不斉空間の構築ならびに不斉反応において「金属-配位子錯結合」よりも弱い相互作用である「水素結合」や「ハロゲン結合」の潜在的有用性を明らかにしつつある。水素結合やハロゲン結合の「強さ」と「方向性」を利用する戦略を不斉分子触媒・不斉合成反応の開発において確立することを目標に、引き続き研究を遂行する。将来的には、機能性物質合成としてのキラル化学からキラル分子の振る舞いを明らかにするキラル分子科学への応用展開を目指したい。

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-π-π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

M. YOSHIDA, M. KONDO, T. NAKAMURA, K. SAKAI and S. MASAOKA, "Three Distinct Redox States of an Oxo-Bridged Dinuclear Ruthenium Complex," *Angew. Chem., Int. Ed.* **53**, 11519–11523 (2014).

M. KAWAI, T. YAMAGUCHI, S. MASAOKA, F. TANI, T. KOHZUMA, L. CHIANG, T. STORR, K. MIEDA, T. OGURA, R. SZILAGYI and Y. SHIMAZAKI, "Influence of Ligand Flexibility on the Electronic Structure of Oxidized Ni^{III} Phenoxide Complexes," *Inorg. Chem.* **53**, 10195–10202 (2014).

G. NAKAMURA, M. OKAMURA, M. YOSHIDA, T. SUZUKI, H. D. TAKAGI, M. KONDO and S. MASAOKA, "Electrochemical Behavior of Phosphine-Substituted Ruthenium(II) Polypyridine Complexes with a Single Labile Ligand," *Inorg. Chem.* **53**, 7214–7226 (2014).

A. FUKATSU, M. KONDO, M. OKAMURA, M. YOSHIDA and S. MASAOKA, "Electrochemical Response of Metal Complexes in Homogeneous Solution under Photoirradiation," *Sci. Rep.* **4**, 5327 (2014).

T. NAGASHIMA, T. NAKABAYASHI, T. SUZUKI, K. KANAIZUKA, H. OZAWA, Y.-W. ZHONG, S. MASAOKA, K. SAKAI and M. HAGA, "Tuning of Metal–Metal Interactions in Mixed-Valence States of Cyclometalated Dinuclear Ruthenium and Osmium Complexes Bearing Tetrapyridylpyrazine or -Benzene," *Organometallics* **33**, 4893–4904 (2014).

H. A. EL-GHAMRY, S. MASAOKA and K. SAKAI, "Hydrogen-Bonded Frameworks of Propylenediamine-*N,N'*-Diacetic Acid Pt(II) Complexes, Synthesis, Structural Characterization and Antitumor Activity," *J. Coord. Chem.* **67**, 943–955 (2014).

B-3) 総説, 著書

吉田将己, 正岡重行, 「金属錯体を触媒とする水素および酸素発生反応」, 「CSJ カレントレビュー 15 次世代のバイオ水素エネルギー」, 日本化学会編, 化学同人, 100–108 (2014).

M. YOSHIDA and S. MASAOKA, "Cerium(IV)-Driven Water Oxidation Catalyzed by Mononuclear Ruthenium Complexes," *Res. Chem. Intermed.*, **40**, 3169–3182 (2014).

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする水の酸化反応」, *化学工業* **65**, 194–199 (2014).

B-4) 招待講演

S. MASAOKA, "Artificial Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation," 8th International Symposium on Nanomedicine (ISNM2014), Ehime University, Matsuyama (Japan), December 2014.

S. MASAOKA, "Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation," 2014 International Conference on Artificial Photosynthesis (ICARP2014), Awaji Yumebutai International Conference Center, Awaji (Japan), November 2014.

正岡重行, 「人工光合成を志向した金属錯体化学」, 名古屋大学自然科学連携講義1講演会, 名古屋大学, 名古屋, 2014年11月.

正岡重行, 「系外惑星環境での光合成について～分子科学の視点から～」, 若手連携研究会「低温度星まわりの生命居住可能惑星を想定した光合成特性の連携研究」, 国立天文台, 三鷹, 2014年11月.

正岡重行, 「OEC に倣う錯体設計と電気化学的機能評価」, 分野間連携ワークショップ「酸素発生型光合成: 機構理解と新機能創出」, 蒲郡, 2014年10月.

正岡重行, 「金属錯体を利用した多電子酸化還元触媒の開発」, 分子研TCCI 第5回研究会, 岡崎, 2014年10月.

S. MASAOKA, "Electrochemical evaluation of photochemical and catalytic properties of transition metal complexes," Annual Meeting on Photochemistry 2014, Hokkaido University, Sapporo, October 2014.

S. MASAOKA, "Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation," 2nd Japan-UK Joint Symposium on Coordination Chemistry, Chuo University, Tokyo, September 2014.

正岡重行, 「金属錯体を用いた多電子酸化還元反応」, 第47回有機金属若手の会夏の学校, 休暇村大久野島, 広島, 2014年9月.

S. MASAOKA, "Water Oxidation Catalyzed by Mononuclear and Multinuclear Metal Complexes," Symposium on Molecular Catalysis Toward Sustainable Energy, Nanyang Technological University, Singapore, July 2014.

S. MASAOKA, "Water Oxidation Catalyzed by Mononuclear and Multinuclear Metal Complexes," 41st International Conference on Coordination Chemistry, Suntec Singapore Convention & Exhibition Centre, Singapore, July 2014.

正岡重行, 「金属錯体を用いた多電子酸化還元反応」, 第50回錯体化学若手の会近畿支部勉強会, 京都大学桂キャンパス, 京都, 2014年6月.

S. MASAOKA, "Water Oxidation Catalyzed by Transition Metal Complexes," Supramolecular Coordination Chemistry, Japan-Canada Joint Symposium in CSC2014, Vancouver Convention Centre, Vancouver (Canada), June 2014.

正岡重行, 「水から酸素を創り出す金属錯体の化学」, 第4回フォーラム「人工光合成」, 名古屋大学東山キャンパス, 名古屋, 2014年3月.

正岡重行, 「金属錯体を用いた多電子酸化還元反応」, 分子研研究会「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」, 分子科学研究所, 岡崎, 2014年3月.

正岡重行, 「酸素発生型光合成への挑戦～機構理解と新機能創出～」, 若手研究者による分野間連携研究ワークショップ, 三谷温泉, 蒲郡, 2014年2月.

S. MASAOKA, "Development of Functional Metal Complexes for Artificial Photosynthesis," CU-IMS Faculty Exchange Meeting, Institute for Molecular Science, Okazaki (Japan), February 2014.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする酸素発生反応」, 研究会「金属新機能場の開発を目指して」, 大阪大学基礎工学研究科, 豊中, 2014年2月.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする多電子酸化還元反応」, 日本化学会東海支部先端科学セミナー, 豊田中央研究所, 長久手, 2014年1月.

S. MASAOKA, "Water Oxidation Catalyzed by Transition Metal Complexes," Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON), Centara Hotel and Convention Centre, Khon Kaen (Thailand), January 2014.

S. MASAOKA, "Water Oxidation Catalyzed by Transition Metal Complexes," Joint IMS-KU Workshop on Molecular Sciences towards Green Sustainability, Kasetsart University, Bangkok (Thailand), January 2014.

B-6) 受賞, 表彰

深津亜里紗, International Conference on Artificial Photosynthesis (ICARP2014), Excellent Poster Award (2014).

伊豆 仁, 第4回CSJ 化学フェスタ2014優秀ポスター発表賞 (2014).

伊東貴宏, CrystEngComm Poster Prize (2014).

伊東貴宏, 錯体化学会第64回討論会ポスター賞 (2014).

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).

学会誌編集委員

日本化学会「化学と工業」編集委員 (2013-).

B-8) 大学での講義, 客員

名城大学理工学部, 非常勤講師, 2014年9月- .

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

科研費挑戦的萌芽研究, 「異種金属多核錯体による革新的電気化学物質変換」, 正岡重行 (2014年-2016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 (2014年).

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

R. KOJIMA, M. OKUMURA, S. MASUI, S. KANEMURA, M. INOUE, M. SAIKI, H. YAMAGUCHI, T. HIKIMA, M. SUZUKI, S. AKIYAMA and K. INABA, “Radically Different Thioredoxin Domain Arrangement of ERp46, an Efficient Disulfidebond Introducer of the Mammalian PDI Family,” *Structure* **22**, 431–443 (2014).

B-4) 招待講演

S. AKIYAMA, “KaiC as Circadian Pacemaker of Cyanobacterial Circadian Clock,” Society for Research on Biological Rhythms, Montana (U.S.A.), June 2014.

S. AKIYAMA, “Small-Angle X-Ray Scattering Study on Cyanobacterial Clock Protein KaiC,” The 6th Taiwan-Japan Joint Meeting on X-Ray and Neutron Scattering, Taipei (Taiwan), March 2014.

S. AKIYAMA, “KaiC as A Circadian Pacemaker of Cyanobacterial Circadian Clock,” Asian CORE Winter School on Frontiers of Molecular, Photo-, and Material Sciences, Taipei (Taiwan), February 2014.

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 (2011-2014).

日本生物物理学会分野別専門委員 (2010, 2012, 2015).

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, 2013-2014).

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-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).

科研費挑戦的萌芽研究, 「時限機能付き薬剤輸送システムの開発」, 秋山修志 (2014年-2016年).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型), 「X線小角散乱と液中高速AFM の相補利用による分子時計の離合集散計測」, 秋山修志 (2014年-2016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3年目を迎え，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の成果を論文として出版・発表しつつある。

古 賀 信 康 (准教授) (2014 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：生物物理学，タンパク質分子デザイン

A-2) 研究課題：

a) 計算および生化学的アプローチによるタンパク質分子デザイン

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 「アミノ酸配列はどのような原理により天然構造を決定しているのか？」という折りたたみ問題が解明されれば、アミノ酸配列に基づいて折りたたむ立体構造を予測することも、またその逆に、望みの立体構造に折りたたむアミノ酸配列を自在にデザインすることも可能になる。タンパク質の立体構造を主鎖構造を含めて完全にゼロからデザインすることにより折りたたみ問題の解明を行った。これまでに、2次構造パターンやループの長さといった局所主鎖構造が3次構造トポロジーの決定に重要であることを発見し、それらの関係性を3つのルールとして体系化している。今年度は、タンパク質構造を主鎖二面角パターンとして捉えることにより、これらルールの拡張を行った。その結果、タンパク質構造のサイズや形をより詳細にデザインすることが可能になった。拡張ルールを用いて計算機上でタンパク質構造を実際にデザインし、それらを大腸菌に組み込み発現・精製し、生化学実験によって折り畳み能を調べたところ、デザイン配列は安定な構造を形成していた。さらに、これらの構造を NMR によって解いたところ、計算機上で構築したデザインモデルと主鎖二面角レベルで正確に一致していた。

B-3) 総説，著書

古賀信康，古賀(巽)理恵，「蛋白質分子デザイン」，化学フロンティア 23 1分子ナノバイオ計測：分子から生命システムを探る革新的技術，化学同人，120-130 (2014).

古賀信康，古賀(巽)理恵，「タンパク質を創って理解する」，生体の科学，医学書院，65(5)，512-513 (2014).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

古賀信康，「創って分かるタンパク質分子の仕組み」，産業科学研究所講演会，大阪大学，2014年7月.

N. KOGA, "Toward design of molecular motors," Symposium on Rise of Molecular Machines, The 52nd Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Sapporo Convention Center, Sapporo (Japan), September 2014.*

N. KOGA, "Designing protein molecules from scratch," Symposium on Synthetic Study to Uncover Hierarchical Ordering of Biological Systems, The 37th Annual Meeting of the Molecular Biology Society of Japan, PACIFICO Yokohama, Yokohama (Japan), November 2014.*

B-6) 受賞，表彰

古賀信康，第13回日本蛋白質科学会年会若手奨励賞 (2013).

古賀信康，第51回日本生物物理学会年会若手奨励賞 (2013).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究,「細胞機能の制御・設計に向けたアロステリックタンパク質の人工設計」,古賀信康(2014年-2016年).

日本学術振興会海外特別研究員,「タンパク質分子構造の理論研究:構造変化する機能性タンパク質のデザイン」,古賀信康(2007年-2009年).

日本学術振興会特別研究員DCI,「タンパク質機能調節の分子機構の理論研究:構造の柔らかさとアロステリック効果」,古賀信康(2003年-2005年).

C) 研究活動の課題と展望

2014年4月に着任し,計算機および生化学実験両方を用いてタンパク質分子をデザインする研究グループをスタートさせた。協奏して機能するタンパク質分子の動作原理の解明と創製を目指して,タンパク質分子の基本物性:折りたたみ,複合体形成,基質結合,酵素活性,構造変化,それぞれに着目して研究を進め,これら基本物性を生み出す原理の解明と,これらを自在にデザインするための基盤技術の開発を行う。今年度は,折りたたみに特に着目して研究を行ったが,来年度はそれ以外の物性についても研究を行う。そのためにも,グループの拡大が急務である。

石 崎 章 仁（特任准教授（若手独立フェロー））（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) 光合成光捕集系におけるエネルギー移動・電荷分離ダイナミクスを解析する有用な実験手法の一つとして二次元電子分光法が挙げられる。光合成光捕集系二次元電子分光データに見られる量子ビートの物理的起源に関して、2009 年の Ishizaki と Fleming による理論予測と Engel らによる実験データの解析に基づき、色素分子の 0-0 振電遷移と別の色素分子の 0-1 振電遷移の量子力学的混合と複数のレーザーパルス照射により誘起される電子基底状態と電子基底状態の両方の振動コヒーレンスが提案されている。本プロジェクトでは、色素分子の振電遷移間の量子混合がタンパク質環境が誘起する揺らぎによってどのように破壊されるのかを解析し、分光データの温度依存性について整合性のある描像を与えることができた。また、タンパク質環境における揺らぎや再配置過程の中で振電遷移間の量子混合が電子励起エネルギー移動のダイナミクスに与える影響について解析した。さらに、光化学系 II 反応中心における初期電荷分離過程についても同様の解析を進めている。
- b) 光合成光捕集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・環境応答性を説明できない。本プロジェクトでは、光合成エネルギー移動過程の環境応答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を検討している。

B-3) 総説、著書

A. SHABANI, M. MOHSENI, S. JANG, A. ISHIZAKI, M. B. PLENIO, P. REBENTROST, A. ASPURU-GUZI, J. CAO, S. LLOYD and R. J. SILBEY, "Open quantum system approaches to biological systems," in *Quantum Effects in Biology*, Cambridge University Press, Cambridge (2014).

B-4) 招待講演

A. ISHIZAKI, "Impacts of protein-induced fluctuations upon quantum mechanically mixed electronic and vibrational states in photosynthetic energy transfer," Indo-Japan joint Workshop on "Frontiers in Molecular Spectroscopy: Fundamentals and Applications to Material and Biology," Nara (Japan), November 2014.

A. ISHIZAKI, “Non-Markovian quantum dynamical aspects in photosynthetic energy transfer,” The XIXth International Workshop on Quantum Systems, in Chemistry, Physics and Biology (QSCP XIX), Taipei (Taiwan), November 2014.

A. ISHIZAKI, “Quantum Dynamic Aspects in Photosynthetic Light Harvesting—Old Roots, New Shoots,” International Symposium on Optobiotechnology, OptBioTechnology Research Center, Nagoya Institutes of Technology, Nagoya (Japan), October 2014.

A. ISHIZAKI, “Impact of environment-induced fluctuations on quantum mechanically mixed electronic and vibrational states of pigments in photosynthetic energy transfer,” Technische Universität Dresden, Dresden (Germany), June 2014.

A. ISHIZAKI, “Energy transfer dynamics in photosynthetic light harvesting systems and their two-dimensional electronic spectra,” 2nd Sweden-Korea Joint Symposium on Advanced Spectroscopy: Light Capture and Conversion Processes in Biological and Artificial Systems, Lund University, Lund (Sweden), May 2014.

A. ISHIZAKI, “Electronic and Vibrational Coherences in Photosynthetic Energy Transfer and 2D Electronic Spectra,” CECAM workshop “investigating fine quantum effects in biological systems: Toward a synergy between experimental and theoretical approaches?” Paris (France), May 2014.

石崎章仁, 「レーザー分光と理論で探る光合成光捕集系における量子力学」, 第6回超高速時間分解光計測研究会「ソフトマターの先端光計測」, 浜松, 2014年3月.

A. ISHIZAKI, “What do we learn about photosynthetic light harvesting systems from long-lived electronic quantum coherence?” German-Japanese Colloquium on Frontiers of Laser Science, Heidelberg (Germany), January 2014.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

45th World Chemistry Congress of the International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC-2015), Physical Chemistry “Natural and Artificial Photosynthesis,” セッションオーガナイザー (2014).

第3回NINS Colloquium 「自然科学の将来像」運営組織委員 (2014).

NTU-IMS Faculty Exchange Meeting 世話人 (2014).

第22回化学ソルベール会議, 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

京都大学大学院理学研究科, 「光合成光捕集系の物理化学」, 2014年1月.

Wissenschaftskolleg zu Berlin (ベルリン高等研究所), Fellow, 2012年–2013年.

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).

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の理論的解析」, 石崎章仁 (2006年–2008年).

C) 研究活動の課題と展望

2008年より開始した光合成エネルギー移動の量子ダイナミクス理論のプロジェクトも収束しつつある。当面の科学的課題は、光合成光捕獲系の電子励起エネルギー移動・電荷分離過程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、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小ささを鑑みて、この数年は将来の詳細かつ大規模な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。

鹿 野 豊（特任准教授（若手独立フェロー））（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) 振動基底状態を用いた量子基礎論
- 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きた線形パウルトラップ中の 3 個のカルシウムイオンを用いて、マイクロモーションである回転振動状態制御に成功し、空間的に離れたフォノンの干渉についてアハラノフ・ボーム効果を量子トンネル効果中にも実現させることにより世界で初めて成功した。
- 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. SHIKANO, T. WADA and J. HORIKAWA, “Nonlinear Discrete-Time Quantum Walk and Anomalous Diffusion,” *Sci. Rep.* **4**, 4427 (2014).

A. NOGUCHI, Y. SHIKANO, K. TOYODA and S. URABE, “Aharonov-Bohm Effect with Quantum Tunneling in Linear Paul Trap,” *Nat. Commun.* **5**, 3868 (6 pages) (2014).

H. KOBAYASHI, K. NONAKA and Y. SHIKANO, “Stereographical Tomography of Polarization State Using Weak Measurement with Optical Vortex Beam,” *Phys. Rev. A* **89**, 053816 (5 pages) (2014).

杉尾 一, 「時空に依存する物理量概念」, *時間学研究* **7**, 9–21 (2014).

杉尾 一, 「自然哲学における数量概念の歴史」, *比較文化研究* **111**, 281–288 (2014).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. SHIKANO, “On Signal Amplification from Weak-Value Amplification,” in *Kinki University Series on Quantum Computing Volume 9 “Physics, Mathematics, and All that Quantum Jazz,”* World Scientific, pp. 91–100 (2014).

Y. SHIKANO, “On signal amplification via weak measurement,” *AIP Conf. Proc.* **1633**, 84–86 (2014).

H. SUGHIO, “Reconstruction of the Concept of Physical Quantity,” *Proceedings of the 4th East Asia & Southeast Asia Conference on The Philosophy of Science*, 21 (2014).

B-3) 総説, 著書

鹿野 豊, 「Foundational Questions Institute 主催エッセイコンテスト(ラ・トッカータ)」, *日本物理学会学会誌* **69**, 326 (2014).

B-4) 招待講演

Y. SHIKANO, “Observation of Aharonov-Bohm effect with quantum tunneling,” Fifth Nagoya Winter Workshop on Quantum Information, Measurement, and Foundations, Nagoya University, Nagoya (Japan), March 2014.

Y. SHIKANO, “Stereographical Visualization of Polarization State using Weak Measurement with Optical Vortex Beam,” Interdisciplinary Workshop on Quantum Device—towards operation of the quantum information and the quantum computer—2014, National Institute of Informatics, Tokyo (Japan), March 2014.

Y. SHIKANO, “Toward the Polariton Lasing,” BIT’s 3rd Annual World Congress and EXPO of Advanced Materials 2014, Chongqing Yuelai International Conference and EXPO Center, Chongqing (China), June 2014.

Y. SHIKANO, “Discrete Time Quantum Walk Is Quantum Dynamical Simulator,” 2014 edition of the International Conference in Statistical Physics (Sigma Phi 2014), Sheraton Rhodes Hotel, Rhodes (Greece), July 2014.

鹿野 豊, 「波動関数を可視化する方法～光を用いた実験を例として～」, プラズマ科学のフロンティア2014, 核融合科学研究所, 土岐, 2014年8月.

鹿野 豊, 「量子ウォークによる量子シミュレーション」, 量子系の数理解と物質制御への展開: 量子ウォークを架け橋に, 東北大学情報科学研究科, 仙台, 2014年9月.

Y. SHIKANO, “Optomechanics of Quantum Rotor,” Quantum Technologies Based On Hybrid Emitter—Solid State Systems, University of Strasbourg, Strasbourg (France), September 2014.

鹿野 豊, 「Massless Dirac Equation from Fibonacci Quantum Walk」, RIMS 研究集会「量子場数理解とその周辺」, 京都大学数理解析研究所, 京都, 2014年10月.

後藤振一郎, 「緩和過程の接触多様体上での幾何学的記述——幾何学的非平衡統計力学構築の試み——」, 分子科学研究所, 岡崎, 2014年10月.

鹿野 豊, 「情報理論的アプローチの理論再構築の限界」, Nagahama Workshop “From Quantum to Life,” 長浜バイオ大学, 長浜, 2014年11月.

鹿野 豊, 「量子ウォークの数理解と応用」, 第31回量子情報技術研究会(QIT31), 東北大学片平キャンパス, 仙台, 2014年11月.

鹿野 豊, 「Seeking the SIC POVM」, 3rd Yokohama Quantum Walk Workshop, 横浜国立大学, 横浜, 2014年11月.

鹿野 豊, 「Introduction to Weak Value and Weak Measurement from Historical Viewpoint」, 学融合研究 Kick Off Meeting 「新たな量子物理量の基礎の探求と精密測定への応用」, 東北大学東京分室, 東京, 2014年11月.

杉尾 一, 「物理学と認識論」, 第1回科学哲学若手の会, 京都大学, 京都, 2014年11月.

Y. SHIKANO, “Discrete-time quantum walk and Quantum dynamical simulation,” Tensor Network States: Algorithms and Applications at Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing (China), December 2014.

Y. SHIKANO, “Weak measurement with higher-order Gaussian modes,” Deep dive into the Aharonov-Albert-Vaidman amplification effect, Chapman University, Orange (U.S.A.), December 2014.

鹿野 豊, 「イオントラップを用いたフォノン干渉と量子基礎実験——量子基礎論から見たマイクロイオントラップへの期待——」, マイクロイオントラップ講演会, 大阪大学基礎工学部国際棟, 大阪, 2014年12月.

鹿野 豊, 「量子計算機の基礎と実状」, 第6回暗号及び情報セキュリティと数学の相関ワークショップ (CRISMATH 2014), 産業技術総合研究所臨海副都心センター, 東京, 2014年12月.

杉尾 一, 「物理学にとって実在とは何か: 量子的な実在についての哲学的考察」, 総研大学際合同研究「新たな量子物理量の基礎の探究と精密測定への応用」第1班研究会 (第2回), 総合研究大学院大学葉山キャンパス, 葉山, 2014年12月.

B-6) 受賞, 表彰

鹿野 豊, 平成25年度公益財団法人光科学技術研究振興財団研究表彰 (2014).

Y. SHIKANO, 2013 Quantum Information Processing Top Reviewers 受賞 (2014).

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

学協会役員等

電子情報通信学会量子情報技術時限研究専門委員会委員 (2014-).

日本物理学会男女共同参画推進委員会委員 (2014-).

学会の組織委員等

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).

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).

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 (2014-).

その他

橘学苑高等学校進路懇談会 (2014).

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).

World Physics Year Launch Conference “Physics for Tomorrow” 日本代表派遣学生 (2005).

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

大幸財団,「量子動力学シミュレータの原理の理論的探究」, 鹿野 豊 (2014年-2015年).

科研費特別研究員奨励費,「時間対称化された量子力学における弱値と文脈解釈による真値についての認識論的研究」, 杉尾 一 (2013年-2015年).

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-2015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

研究活動に関しては、これまでに研究を行ってきた量子情報科学の一分野である量子測定理論や量子基礎論では順調に結果を残してきている。しかし、分子科学研究所着任以後に始めた研究テーマに関しては結果が残せるタイミングであるにも関わらず、いまだに新しい研究の方向性を見いだせていない。この理由は、グループリーダーである鹿野が分子科学研究所に着任以後、自分自身の研究環境およびグループメンバーや共同研究者に対する研究環境を向上するためにグループメンバーを増やすことに努めてきたが、結果として定常的にグループにいる人数がそもそも少なくヒューマンリソースが未だに乏しい。様々な制度や構造的問題があることは別としても、グループメンバー個々人の研究活動が本格化していないということにも理由があると思えるので、今後グループの研究活動レベルを海外の研究グループと比肩できるように一定水準まで引き上げなければならない。そのようなモチベーションを維持できるような研究環境の雰囲気作りがより一層重要であると考えている。

小 林 玄 器（特任准教授（若手独立フェロー））（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。Au/LiCoO₂/Li₃BO₃/Li_{1+x+y}Al_x(Ti, Ge)_{2-x}Si_yP_{3-y}O₁₂/Li₃BO₃/In/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

J. SUGIYAMA, H. NOZAKI, M. HARADA, Y. HIGUCHI, J. BREWER, A. H. JESS, J. EDUARDO, G. KOBAYASHI and R. KANNO, “Variation of Local Magnetic Environments in Olivine-Type Compounds: $\text{Na}_{0.78}\text{FePO}_4$ and FePO_4 Synthesis,” *Phys. Rev. B* **90**, 014426 (10 pages) (2014).

T. GUNJI, G. SARAVANAN, T. TANABE, T. TSUDA, M. MIYAUCHI, G. KOBAYASHI, H. ABE and F. MATSUMOTO, “Application of Ordered Intermetallic Phases to Electrocatalysis, Long-Term, Stable, and Improved Oxygen-Reduction Performance of Titania-Supported PtPb Nanoparticles,” *Catal. Sci. Tech.* **4**, 1436–1445 (2014).

H. HASHIMOTO, G. KOBAYASHI, R. SAKUMA, T. FUJII, N. HAYASHI, T. SUZUKI, R. KANNO, M. TAKANO and J. TAKADA, “Bacterial Nanometric Amorphous Fe-Based Oxide: A Potential Lithium-Ion Battery Anode Material,” *ACS Appl. Mater. Interfaces* **6**, 5374–5378 (2014).

C. HANSEN, K. KUBOTA, G. KOBAYASHI, M. HIRAYAMA and R. KANNO, “High-Pressure Synthesis and Electrochemical Properties of Lithium Transition Metal Oxides with Layered Rock-Salt Structure,” *J. Power Sources* **252**, 1–7 (2014).

B-3) 総説，著書

G. KOBAYASHI and Y. SATO, “Solid electrolytes, basic evaluation method of whole solid secondary battery,” *Electrochemistry* **82**, 1108–1113 (2014).

B-4) 招待講演

小林玄器,「酸水素化物の合成とヒドリド導電特性」,第12回水素量子アトミクス研究会,仙台,2014年10月.

G. KOBAYASHI, “Hydrode Conduction in Oxyhydrides,” Solid State Protonic Conductor-17, Seoul (Korea), September 2014.

小林玄器,「ヒドリド導電性酸水素化物の合成と新規エネルギー貯蔵・変換デバイスへの展開」,化学電池材料研究会,第34回講演会,三重,2014年8月.

小林玄器,「リチウム過剰系正極材料への異種酸化物表面修飾が電池特性に与える影響」,大阪大学産業科学研究所ナノテクノロジーセンター「若手セミナー」,大阪,2014年2月.

G. KOBAYASHI, “Solid State Ionics for Next-Generation Electrochemical Devices,” Asian CORE Winter School on Frontiers of Molecular, Photo-, and Material Sciences, Taipei (Taiwan), February 2014.

B-6) 受賞,表彰

橋本英樹,小林玄器,鈴木智子,第三回ネイチャー・インダストリー・アワード特別賞(2014).

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。本年はより高密度のキャリア注入を実現するため、イオン液体を用いた電気化学的ドーピングを試みることににより、EDL（Electric Double Layer Transistor）としての両極性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歪みや静電キャリアドーピングで小さくしていくと、低温において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、これにゲート電圧を印加することによって、有機トランジスタにおける世界初の電界誘起超伝導を実現した。具体的には、基板としてひっぱり歪み効果の小さいNb-doped SrTiO₃を選択し、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、電子相がちょうど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。実際このデバイスにほんの数ボルトのゲート電圧をかけると、絶縁体だったデバイス抵抗が超伝導状態に転移した。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することが可能となった。本年はこうした光制御型超伝導トランジスタの詳細な動作特性を検討した。
- 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

C. LEMOUCHI, H. M. YAMAMOTO, R. KATO, S. SIMONOV, L. ZORINA, A. RODRÍGUEZ-FORTEA, E. CANADELL, P. WZIEITEK, K. ILIOPOULOS, D. GINDRE, M. CHRYSOS and P. BATAIL, “Reversible Control of Crystalline Rotors by Squeezing Their Hydrogen Bond Cloud Across a Halogen Bond-Mediated Phase Transition,” *Crys. Growth Des.* **14**, 3375–3383 (2014).

H. M. YAMAMOTO, Y. KAWASUGI, H. CUI, M. NAKANO, Y. IWASA and R. KATO, “Asymmetric Phase Transitions Observed at the Interface of a Field-Effect Transistor Based on an Organic Mott Insulator,” *Eur. J. Inorg. Chem.* **2014**, 3841–3844 (2014).

M. SUDA, Y. KAWASUGI, T. MINARI, K. TSUKAGOSHI, R. KATO and H. M. YAMAMOTO, “Strain-Tunable Superconducting Field-Effect Transistor with an Organic Strongly-Correlated Electron System,” *Adv. Mater.* **26**, 3490–3495 (2014).

H. M. YAMAMOTO, “Sheathed Nanowires Aligned by Crystallographic Periodicity: A Possibility of Cross-Bar Wiring in Three-Dimensional Space,” *CrystEngComm* **16**, 2857–2868 (2014).

B-3) 総説, 著書

山本浩史, 「世界初の有機超伝導トランジスター」, *パリティ* **29**, 46–50 (2014).

山本浩史, 田嶋尚也, 「電気的手法による有機薄膜物性評価(ホール効果)」, 薄膜の評価技術ハンドブック, テクノシステム (2013).

B-4) 招待講演

H. M. YAMAMOTO, “Sheathed Nanowires Aligned by Crystallographic Periodicity,” 3CG, Phuket (Thailand), November 2014.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Field-Effect-Transistors with Light-Tunable Superconducting Channel,” Malaysian Chemical Congress, Kuala Lumpur (Malaysia), November 2014.

H. M. YAMAMOTO, “A Possibility of Cross-Bar Wiring in Three-Dimensional Crystallographic Space,” SSDM2014, Tsukuba (Japan), September 2014.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Field-Effect-Transistors with Light-Tunable Superconducting Channel,” IMRC2014, Cancun (Mexico), August 2014.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Field-Effect-Transistor with Flexible Superconducting Channel,” NIMS Conference, Tsukuba (Japan), July 2014.

H. M. YAMAMOTO, “Organic field-effect-transistor with light-tunable superconducting channel,” Nanyang Technological University, Singapore, July 2014.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Electronics with ‘Nano’ Crystals,” Mahidol University, Bangkok (Thailand), July 2014.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Electronics with ‘Nano’ Crystals,” Chulalongkorn University, Bangkok (Thailand), July 2014.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Electronics with ‘Nano’ Crystals,” Kasesat University, Bangkok (Thailand), July 2014.

山本浩史, 「有機電荷移動錯体のデバイス化と相転移トランジスタ」, 理工談話会, 名城大, 名古屋, 2014年12月.

山本浩史,「強相関パイ電子系を用いた有機転移トランジスタ」,応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会講習会,産業技術総合研究所,東京,2014年11月.

山本浩史,「有機Mott-FETにおける相転移現象」,高分子学会有機エレクトロニクス研究会,東京,2014年7月.

山本浩史,「有機モットFETにおける相転移挙動」,金研研究会,東北大学,仙台,2014年7月.

山本浩史,「有機強相関トランジスタと電界誘起超伝導」,応用物理学学科談話会,東京理科大学,東京,2014年5月.

山本浩史,「有機強相関物質を用いたパイ電子エレクトロニクス」,物性談話会,名古屋大学,名古屋,2014年5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-).

日本学術振興会情報科学用有機材料第142委員会B部会主査 (2014-).

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).

日本化学会物理化学ディビジョン幹事 (2014-).

アジア科学セミナー組織委員 (2014-2015).

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」,2014年11月-2015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- .

総合研究大学院大学物理科学研究科,「基礎物性科学」,2014年10月-11月.

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(B),「有機単分子膜モットFETの開発」,須田理行 (2013年-2015年).

科学技術振興機構さきがけ研究,「電子相関を利用した新原理有機デバイスの開発」,山本浩史 (2009年-2013年).

科研費若手研究(A),「超分子ナノワイヤーの冗長性拡張による金属化」,山本浩史 (2008年-2011年).

科研費特定領域研究(公募研究),「電極との直接反応によるDCNQI ナノ単結晶作成とその機能探索」, 山本浩史 (2006年-2008年).

理研理事長ファンド戦略型,「シリコン基板上での分子性導体ナノ結晶作成とその物性測定」, 山本浩史 (2005年-2007年).

理研研究奨励ファンド,「Crystal Engineering を用いた導電性ナノワイヤーの多芯化・直交化」, 山本浩史 (2003年-2004年).

C) 研究活動の課題と展望

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) 一次元金属鎖サンドイッチ錯体のオリゴマーサイズへの展開。
- b) 二次元金属シートサンドイッチ錯体の創成展開：8員環シクロオクタテトラエンを配位子とする多核サンドイッチ錯体を初めて実験的に実証。
- c) パラジウムクラスターの不飽和基質バインド様式と原理を解明。

B-1) 学術論文

T. MURAHASHI, S. KIMURA, K. TAKASE, T. UEMURA, S. OGOSHI and K. YAMAMOTO, “Bis-Cyclooctatetraene Tripalladium Sandwich Complexes,” *Chem. Commun.* **50**, 820–822 (2014).

B-4) 招待講演

T. MURAHASHI, “Metal Assembly in Organometallic Sandwich Frameworks,” The 97th Canadian Chemistry Conference, Vancouver (Canada), June 2014.

T. MURAHASHI, “Chemistry of Dimensionally Extended Sandwich Complexes,” The 41st International Conference on Coordination Chemistry (ICCC-41), JOM Symposium, Singapore (Singapore), July 2014.

T. MURAHASHI, “Metal Assembly in Organometallic Sandwich Frameworks,” The 2nd Japan-UK Joint Symposium on Coordination Chemistry, Tokyo (Japan), September 2014.

T. MURAHASHI, “Chemistry of Dimensionally Extended Sandwich Complexes,” JSPS Japan/South Europe Forum “Inorganic Chemistry and Its Interfaces,” Strasbourg (France), October 2014.

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).

村橋哲郎, JST ーさががけ The Chemical Conversion of Light Energy Prize (2014).

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 (2012-2014).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

文部科学省学術審議会専門委員会科研費審査委員 (2009-2010, 2012-2013).

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かけ研究, 「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かけ研究, 「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-2014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, ①新有機金属化合物群の実証・創成研究, および②反応活性遷移金属錯体の反応機構の解明を主体とする研究を進めている。①については, 独自の分子設計指針に基づいて研究を展開しており, 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つに制限されると考えられてきた。これに対して, 我々の研究グループでは, 新しい錯体合成法を開発し, 多数の金属原子からなる金属集合体がサンドイッチ分子内に形成・固定され, 安定な分子を与えることを初めて発見している(*Science*, 2006 など)。この発見を契機として, 様々なサイズ・形状を持つ多核サンドイッチ化合物が得られることを明らかにしてきており, 多核サンドイッチ化合物は広く存在しうる一般性の高い新分子群であることが判明しつつある。今後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、いくつかの化学的性質を明らかにしており、興味深い動的構造変化、光応答性、レドックス応答性等を明らかにしている (*Nat. Chem.* 2012 など)。引き続きその全貌を明らかにしていくことを目指していく。また、②については、均一系で取り扱うことのできる反応活性 Pd-Pd 結合錯体を合成することに成功しており、その反応機構についての研究を進めている。特に、ここ数年は、アレーン類とパラジウムクラスターとの配位結合様式および変換パターンの解明を進めている。パラジウムとアレーン類との結合相互作用は弱いため、これまでその配位結合様式は詳しく理解されていなかったが、これを初めて詳細に解明できる可能性がある。アレーン類の二核付加反応等を明らかにしている (*J. Am. Chem. Soc.* 2011 など)。

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) 最近、ナノフープと呼ばれる $[n]$ シクロパラフェニレン (n CPP) やその誘導体が新たな高歪み芳香族化合物として注目され、活発に研究されている。カルバゾール誘導体は、有機半導体としてのホール輸送性および光導電性の点で興味深い。このため、今回カルバゾールの CPP 構造への導入を行い、テトラシクロ (2,7-カルバゾール) の 9-メチル体 (4CMeCz) およびフェニル体 (4CPhCz) の合成を完了した。まず、2,7-ジブROMOカルバゾールのリチオ化と、それに続く塩化トリメチルスズとのトランス金属化によってカルバゾール・スズ体を得た。Pt(nbd)Cl₂ との反応により白金錯体を与え、dppf を加えて配位子交換を行った。臭素を用いた還元的脱離反応によって、4CMeCz を 10%、4CPhCz を 10% の収率で単離した。カルバゾールナノフープの ¹H NMR では、環内に位置する水素が直鎖状のオリゴマーと比べ、1 ppm 以上遮蔽されていることが分かった。この原因を探るため、GIAO 法による NMR 計算を行った。30×30×30 Å の空間を 0.5 Å 間隔のグリッドに分け、すべての点における nucleus-independent chemical shift (NICS) 値を求めた。これを NICS grid 法 (2D) および iso-chemical-shielding surface 法 (3D) により、等高線図または isosurface で可視化した。ナノフープの環内はジアトロピック、環外はパラトロピックときれいに別れており、このために水素原子の遮蔽が起こることがわかった。これは、CPP の各ベンゼン環がナノフープの中心に向かっているため、ベンゼンの環電流によるパラトロピックの成分はナノフープの接線方向に伸びる。このため、環内に入ることができるのは、環の中心方向に伸びるジアトロピックの成分だけとなる。次に、各ベンゼン環のローカル環電流とナノフープ全体を巡るグローバル環電流の分離を試みた。NICS_{xx}+NICS_{yy} は主にローカル π 環電流、NICS_{zz} は主にグローバル π 環電流とローカル σ 成分に由来する。CPP のベンゼン環の一つの 1,4 位に水素原子 2 個を加えることにより、グローバル環電流の流れを遮断する。CPP と CPPH₂ の NICS_{zz} の差を取ることで、グローバル環電流に由来する NMR 遮蔽の様子を描き出すことができた。その結果、4CPP から 7CPP ではパラトロピックのグローバル環電流が生じ、8CPP 以上ではグローバル環電流は発生しないことが分かった。これにより、8CPP 以上の CPP では環が小さいほど ¹H NMR の遮蔽が大きくなり、7CPP 以下の CPP では逆の傾向になる理由が明らかになった。

B-1) 学術論文

T. IWAMOTO, E. KAYAHARA, N. YASUDA, T. SUZUKI and S. YAMAGO, "Synthesis, Characterization, and Properties of [4]Cyclo-2,7-pyrenylene: Effects of Cyclic Structure on the Electronic Properties of Pyrene Oligomers," *Angew. Chem., Int. Ed.* **53**, 6430–6434 (2014).

B-10) 競争的資金

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。

櫻井英博(准教授)(2004年4月1日～2014年3月31日)*)

A-1) 専門領域：有機化学

A-2) 研究課題：

- a) お椀型共役化合物「バッキーボウル」の合成手法の開発と物性評価
- b) 金属ナノクラスターを触媒とする新規反応の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) お椀型共役化合物「バッキーボウル」は、フラーレン・単一組成カーボンナノチューブ合成達成への鍵物質として、あるいはそれ自身の特異な物理的性質を利用した新規物質の基本骨格として魅力的な化合物群である。我々はバッキーボウルの「シンプル」かつ「エレガント」な合成経路を確立し、さらに合成した化合物の物性や錯体触媒への応用を目指している。今年度の主な成果としては以下のような研究が挙げられる。①ヒドロキシスマネンは、その構造上フェノール類縁体と考えられるが、通常フェノール化合物と異なり、本来不安定であるはずのケト体が著しく安定であることを見出した。この異常な現象と湾曲 π 系との関係について、現在実験・理論の両面で検討を行っている。② TTF を導入したスマネン誘導体が、圧力や熱などの外的刺激によって容易に電子移動反応を引き起こすことを見出した。
- b) ナノメートルサイズの金属クラスターはバルク金属とも単核金属錯体とも異なる特性を示し、従来にない触媒の開発が期待される。特に金属表面と分子との相互作用が弱く、バルクにおける触媒活性がない金のクラスターに注目して研究を行っている。今年度の主な成果としては以下のような研究が挙げられる。①これまでパラジウムナノクラスターの触媒反応機構として、クラスター表面上の反応、リーチングによる原子上パラジウムによる反応、の2つが提唱されていたが、クロスカップリング反応と呼ばれる形式の反応の場合、そのほとんどが後者のリーチングプロセスによるものであること、および Au/Pd 合金クラスターの場合には、金による安定化によって Pd が金属表面上に留まるため、全く異なる反応活性を示すことを実験的に明らかにした。②金属表面における反応に対する不斉誘起はこれまで困難とされてきたが、キラルなポリビニルピロリドン誘導体をマトリクスとして用いることにより、アルコールの空気酸化反応において速度論的光学分割が進行することを明らかにした。

B-1) 学術論文

S. HAESUWANNAKIJ, W. KARUEHANON, V. L. MISHRA, H. KITAHARA, H. SAKURAI, S. KANAOKA and S. AOSHIMA, "Size-Controlled Preparation of Gold Nanoclusters Stabilized by Hydrophilic Polymers with High Viscosity Using Micro-Flow Reactor," *Monatsch. Chem.* **145**, 23–28 (2014).

J.-I. FUJITA, M. TACHI, K. MURAKAMI, H. SAKURAI, Y. MORITA, S. HIGASHIBAYASHI and M. TAKEGUCHI, "Beam-Induced Graphitic Carbon Cage Transformation from Sumanene Aggregates," *Appl. Phys. Lett.* **104**, 043107 (5 pages) (2014).

B. B. SHRESTHA, S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI, "Columnar/Herringbone Dual Crystal Packing of Pyrenylsumanene and its Photophysical Properties," *Beilstein J. Org. Chem.* **10**, 841–847 (2014).

- K. MAEYAMA, M. SUZUKI, T. TSUKAMOTO, S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI**, “Synthesis of Thermally Stable Wholly Aromatic Polyketones Bearing 2,2’-Dimethoxy-1,1’-binaphthyl-6,6’-diyl Units through Nanosized Palladium Clusters-Catalyzed Suzuki-Miyaura Coupling Polymerization,” *React. Funct. Polym.* **79**, 24–28 (2014).
- B. B. SHRESTHA, S. KARANJIT, S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI**, “Correlation Between Bowl-Inversion Energy and Bowl Depth in Substituted Sumanenes,” *Pure Appl. Chem.* **86**, 747–753 (2014).
- M. YAMANAKA, M. MORISHIMA, Y. SHIBATA, S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI**, “DFT Studies on the Mechanism and the Origin of the Stereoselectivity of Pd-Catalyzed Cyclotrimerization Reaction Affording *syn*-Tris(norborneno) benzenes,” *Organometallics* **33**, 3060–3068 (2014).
- B. B. SHRESHTA, Y. MORITA, T. KOJIMA, M. KAWANO, S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI**, “Eclipsed Columnar Packing in Crystal Structure of Sumanenetrione,” *Chem. Lett.* **43**, 1294–1296 (2014).
- S. HIGASHIBAYASHI, B. B. SHRESTHA, Y. MORITA, M. EHARA, K. OHKUBO, S. FUKUZUMI and H. SAKURAI**, “Sumanenetrione Anions Generated by Electrochemical and Chemical Reduction,” *Chem. Lett.* **43**, 1297–1299 (2014).
- B. BOEKFA, E. PAHL, N. GASTON, H. SAKURAI, J. LIMTRAKUL and M. EHARA**, “C–Cl Bond Activation on Au/Pd Bimetallic Nanocatalysts Studied by Density Functional Theory and Genetic Algorithm Calculations,” *J. Phys. Chem. C* **118**, 22188–22196 (2014).

B-3) 総説, 著書

- 東林修平**, 「キラルバッキーボウル, キラルアザバッキーボウルの不斉合成」, *有機合成化学協会誌* **72**, 26–38 (2014).
- R. N. DHITAL and H. SAKURAI**, “Oxidative Coupling of Organoboron Compounds,” *Asian J. Org. Chem.* **3**, 668–684 (2014).

B-4) 招待講演

- H. SAKURAI**, “Colloidal Nanogold as a Unique *quasi*-Homogeneous Catalyst,” Pure and Applied Chemistry International Conference 2014 (PACCON2014), Khon Kaen (Thailand), January 2014.
- H. SAKURAI**, “Nanoscience from Organic Synthesis: Chemistry of Nano(Bucky)bowls and Nanoclusters,” Department Seminar, Mahasarakham University, Mahasarakham (Thailand), January 2014.
- 櫻井英博**, 「バッキーボウル化学におけるキラリティ」, 第5回キラルサイエンス&テクノロジーシンポジウム, 早稲田大学, 東京, 2014年2月.
- 櫻井英博**, 「精密合成法を基盤とした非平面 π 共役化合物「バッキーボウル」に関する研究」, 日本化学会第94春季年会, 名古屋大学, 名古屋, 2014年3月.
- 櫻井英博**, 「バッキーボウルの特徴を生かした機能開発へ向けて」, 日本化学会第94春季年会, 名古屋大学, 名古屋, 2014年3月.
- 櫻井英博**, 「Au/Pd 合金クラスター: 新たな金属触媒デザインの可能性」, 学術講演会, 京都大学大学院理学研究科, 京都大学, 京都, 2014年6月.
- H. SAKURAI**, “Peculiar Activity of Bimetallic Gold/Palladium Alloy Nanoclusters,” Department Seminar, Nanyang Technological University, Singapore, July 2014.

H. SAKURAI, "Colloidal Nanogold as a Unique *quasi*-Homogeneous Catalyst," Department Seminar, Shanghai Jiaotong University, Shanghai (China), October 2014.

H. SAKURAI, "Colloidal Nanogold as a Unique *quasi*-Homogeneous Catalyst," Department Seminar, Shanghai University, Shanghai (China), October 2014.

H. SAKURAI, "Chemistry of Sumanene and Related C_3 Symmetric Buckybowls," Department Seminar, East China Normal University, Shanghai (China), October 2014.

H. SAKURAI, "Peculiar Activity of Bimetallic Gold/Palladium Alloy Nanoclusters," 10th IUPAC International Symposium on Novel Materials and their Synthesis, Zhengzhou (China), October 2014.

H. SAKURAI, "Asymmetric Synthesis of C_3 Symmetric Buckybowls," International Symposium on the Synthesis and Application of Curved Organic π -Molecules and Materials (CURO- π), Uji, October 2014.

櫻井英博, 「有機合成における金属クラスター触媒」, 学術講演会, 東京理科大学理学部, 東京理科大学, 東京, 2014年10月.

H. SAKURAI, "Substituted Sumanenes: From Fundamental to Applied Research," The International Conference on Advanced Materials and Nanotechnology, Kathmandu (Nepal), November 2014.

櫻井英博, 「Au/Pd 合金クラスター: 新たな金属触媒デザインの可能性」, 学術講演会, 大阪市立大学理学部, 大阪市立大学, 大阪, 2014年11月.

櫻井英博, 「Palladium Meets Gold: Peculiar Activity of Bimetallic Gold/Palladium Alloy Nanoclusters」, 第57回分子システムデバイスセミナー, 九州大学, 福岡, 2014年12月.

櫻井英博, 「合金クラスターが示す新触媒開発の可能性」, 有機合成化学協会東海支部総合講演会, 静岡大学, 静岡, 2014年12月.

B-6) 受賞, 表彰

櫻井英博, 有機合成化学協会研究企画賞 (2002).

櫻井英博, IUPAC Distinguished Award for Novel Materials and their Synthesis (2013).

櫻井英博, 日本化学会第31回学術賞 (2014).

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

科研費特定領域研究(公募研究),「ボウル型共役配位子を有する金属錯体の動的挙動と機能」, 櫻井英博 (2004年-2005年).

科研費特定領域研究(公募研究),「バッキーボウルの自在構築」, 櫻井英博 (2006年-2008年).

科研費特定領域研究(公募研究),「3次元リンク実現のためのお椀型化合物の合成」, 櫻井英博 (2006年-2007年).

科研費特定領域研究(公募研究),「金ナノクラスターの触媒活性を実現するためのマトリクス開発」, 櫻井英博 (2006年-2007年).

科研費若手研究(B),「キラル・ヘテロバッキーボウル類の合成」, 東林修平 (2008年-2009年).

科研費基盤研究(B),「ヘテロフラーレン自在合成へのアプローチ」, 櫻井英博 (2008年-2010年).

科研費基盤研究(B),「官能化バッキーボウルの合成と機能発現」, 櫻井英博 (2011年-2013年).

科研費基盤研究(B),「固体物性発現を指向したバッキーボウル分子の設計と合成」, 櫻井英博 (2014年-2016年).

科研費基盤研究(C),「新規ヘテロバッキーボウルの合成」, 東林修平 (2013年-2015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).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型),「バッキーボウルをモチーフとする湾曲 π 造形」, 櫻井英博 (2014年-2018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,「ヘテロフラーレン合成を指向したボウル型共役化合物合成法の開発」, 櫻井英博 (2004年).

石川カーボン研究助成金,「バッキーボウル分子の一般的合成法の開発と物性評価」, 櫻井英博 (2004年).

旭硝子財団研究助成,「ヘテロフラーレン合成を指向したバッキーボウル分子の自在合成」, 櫻井英博 (2005年-2006年).

住友財団基礎科学研究助成,「お椀型共役化合物「バッキーボウル」の自在合成」, 櫻井英博 (2005年).

住友財団基礎科学研究助成,「 C_3 対称曲面 π 共役系拡張バッキーボウルの合成」, 東林修平 (2009年).

C) 研究活動の課題と展望

10年間、分子科学研究所で行ってきたバッキーボウルに関する研究に対して、日本化学会学術賞を受賞することができた。これまでの研究に対する評価として素直に喜ぶたい。同様に分子研に来てから始めた金属ナノクラスター触媒の化学も順調に伸展しており、今後大阪大学においても展開していきたい。

※) 2014年4月1日大阪大学大学院工学研究科教授

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。

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 2014 年 10 月下旬に 3 日間にわたり、新任 PI の 4 名及び理論研究者 3 名の研究について、また岡崎統合バイオサイエンスセンター、協奏分子システム研究センター (CIMoS) の現状、次期「メゾスコピック計測・解析センター」計画の内容などについてヒヤリングをおこない、また研究所間の新たなプロジェクトの立ち上げ方などに種々の提言を戴いた。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。2015 年 2 月に 3 日間にわたり、分子研の運営状況、理論・計算分子科学、光分子科学研究領域、協奏分子システム研究センター、生命・錯体分子科学研究領域などの主として新たな PI の研究内容、また極端紫外光研究施設、岡崎統合バイオサイエンスセンターの現状について重点的にヒヤリングしていただいた。さらに生理学研究所の研究室を訪問し、分子科学との共同研究の現状について視察していただいた。

さらに 11 月中旬にはシカゴ大学の Berry 教授によって幾つかの研究グループのヒヤリングを行っていただいた。

研究顧問の柳田敏雄特任教授には、2014 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

IMS report

I visited IMS on 25–27 February 2015, and met with academic staff members. I also visited several laboratories, research centers and facilities.

The research groups with whom I met were all involved in the science and application of molecules. In all cases the standard of work was excellent. Projects are often led by creative young researchers who are set to make a mark on their respective fields. Further, the range of expertise available across the institute makes it possible to address significant questions in both science and technology that demand multiple areas of knowledge, skills and technology. This is a feature I noted strongly in the groups with which I interacted on this visit, and the ability of IMS to support cross-disciplinary work of this kind is commendable.

One of the points I spent some time discussing with each group was their perception of their position of their projects with respect to international competition: who are their main competitors around the world and what are their unique advantages? How has this impacted the way in which the IMS researchers approach their projects? How will they frame their strategies in light of this competition?

I was interested to probe what these researchers felt about sustaining and growing the excellence of research activity at IMS in the face of strong and growing research capabilities across the world. Overall, most academics were able to identify some aspect of their expertise that was different from competitors, and which gave them an area in which they were among the leading groups in the world. Similarly, they were clear which areas were stronger elsewhere, and which areas or methods they did not try to compete against. There was a good awareness of the international agenda and activity in which IMS research took place.

Generally there was a sense that the groups could have a larger impact if they were larger – there were, as is common, many more problems of interest to address than the personnel to address them. An expansion of groups by adding fixed-term postdoctoral researchers and graduate students should be explored.

Nonetheless, the constraints on personnel does appear in many cases to have steered groups to seek collaborations that brought together expertise outside that available in any one group. This has broadened the range of research questions that can be addressed and has led to some very fruitful research. Perhaps this is a positive feature of the small number of academic staff per group.

Visits to other Institutes, Centers and Facilities

The IMS approach of providing capacity and capability beyond what is feasible for any one group is also commendable. During my visit I went to another NINS institute in Okazaki, a collaborative research center and an IMS research facility.

Okazaki Institute for Integrative Bioscience (OIIB) represents an outstanding facility for interdisciplinary research, bringing together scientists from across the NINS consortium in a single building with a broad mission and state-of-the art equipment to provide an environment that enables broad questions across all of biosciences, from neuroscience to medicinal chemistry. Appointments of researchers to the OIIB (with a substantive appointment in an Institute) is the right way to bring together different areas of research. The work undertaken there is exceptional in its scope and breadth. Nonetheless, it would be useful to consider how stronger ties could be made between the OIIB and the Institutes themselves, thereby raising awareness of new questions and new ideas and enabling wider cross-fertilization.

UVSOR Facility of IMS provides an exceptional internationally competitive facility with capabilities that attract researchers from around the world. Prof. Kosugi has cleverly positioned the facility so that it occupies a unique set of features – such as beam brightness in the low photon energy range below 100 eV – that set it apart from other facilities around the world.

The colocation of the National Institute for Physiological Sciences likewise provides an impressive array of research capabilities for neurosciences, bioinformatics and physiology. Some of these areas have opportunities for greater collaboration with IMS research, providing new applications for research expertise in the latter. The physical proximity of the two institutes should reduce the barriers for novel interdisciplinary research. It would be interesting to consider possibilities to explore ways in which these could be identified and prioritized—perhaps by a joint workshop or series of inter-institute talks.

Meetings with IMS Research Staff

Takeshi Yanai / Yuki Kurashige

The research undertaken by this group, one of a few theory groups in the quantum chemistry at IMS, is directed towards the numerical modelling of many body electron effects in large molecules. The study of strong correlations for determining the macroscopic properties of materials is a broad field, from high-energy physics, to condensed matter physics, to chemistry, biochemistry and materials science. This team has developed an approach that combines several state of the art techniques—DMRG and perturbation theory—that has enabled them to solve several important problems, in biocatalysis, charge transport in photosystem II and the oxidation states of cluster-bound Mn.

The work of this team shows how expertise in computing and in chemistry is able to advance significantly the state of the art with respect to computing the structure and hence the properties of molecules. The codes they develop are put into the public domain, along with the methodology and applications, which are published in high-quality journals, such as *JCP* and *JACS*.

The pair have a broad range of collaborators with leading groups worldwide, including at IMS, deriving from (a) the availability of the computer code and (b) their own demonstrations of its capability for solving important problems.

Hiroshi Yamamoto

Prof. Yamamoto's research in molecular electronics—in particular the study of organic FETs based on the Mott effect is unique and high profile. His technique of inducing superconductivity by means of applied fields to remove electrons from a Mott insulating state in order to provide conduction pathways, yielding a very rapid, low-switching-energy transistor based on a metal to insulator transition. There is great potential for application of such work in ultra-high-speed computers, which have a long history in Japan.

This work epitomises how physics, chemistry and engineering are brought together to deliver a potentially revolutionary technology, based on a deep understanding of the fundamental properties of quantum materials. Prof. Yamamoto has used this to frame a compelling vision for improving materials of organic semiconductors, which provides his international competitive edge, to enable metal–insulator transition at room temperature. This would be the basis of a revolutionary technology, which IMS should be in a position to capture.

Kiyohisa Tanaka

Prof. Tanaka's group has established a strong ARPES capability at IMS, marrying this with the in-house synchrotron to enable spin-resolved photoelectron spectra with greatly improved sensitivity (by means of iron-based detectors and new spectrometer slit design). Prof. Tanaka's responsibility for maintaining the beamline capability for users means that he is able to implement state of

the art technology for this important low energy probe of materials. Building on UVSOR capabilities, this provides IMS with a world-leading experimental method for photons with <100eV energy, using an exceptionally bright source.

Prof. Tanaka uses the ability of ARPES to directly measure electronic bandstructure at surfaces to study charge transfer in molecular materials. His plan is to make use of the spin-resolution to explore systems relevant to spintronics, such as topological insulators, by probing the distortions of the Fermi surface.

The international competition in this area is naturally sparse, since UVSOR occupies a unique position in the synchrotron community. Groups at Hiroshima and Stanford are the main rivals, but IMS has the source brightness at low photon energies that make the Institute's competitive edge strong.

Satoshi Kera

This group's research on functional properties of organic materials is a recent addition to the IMS portfolio. It brings additional capabilities for the study of materials on surfaces that utilise the strengths of UVSOR.

Prof. Kera's vision is bold: a new "textbook" for molecular semiconductors, which will enable their unique properties of flexibility and printability to be better exploited, especially if the carrier mobility can be increased. To this end, his recent work on the origin of conductivity in organic semiconductors has shed light on what limits this and thus to how it might be improved.

International competition is focussed in Germany, which has a leading position in this area. However, the unique features of high-resolution UV photoelectron spectroscopy together with a strong collaborative theory effort provide the group with a unique position that they can use to advantage.

Prof. Kera has kept a visiting professorial appointment at Chiba, which helps to attract graduate students. Nonetheless, this is an experimental group where increased numbers of personnel will be important to drive forward research in the face of strong competition.

Ryota Iino

Molecular motors are a hot topic in biophysics, and Prof. Iino's research has shed light on the mechanisms of operation that are having a wide impact on the field. He has pioneered a technique of attaching small particles to the molecules, and using light scattering to image the motion directly with very high precision (to better than 1 nm in fact). His innovation of using gold particle means that he can study much higher rotation speeds, since the inertia of the particules is much lower than plastic beads. By this means he has show how the coordinated motion of the "stator" units in the motor delivers unidirectional rotation even in a warm biologically relevant environment. He has recently applied similar technique to linear motors (kinesin) in order to understand why the molecular motion is in one direction only.

His vision is also ambitious: to understand fully the operating mechanism of molecular motors and machines: to develop new kinds of linear motors, based on a fundamentally different fuel; design and build new kinds of molecular machines, such as a hybrid carbon nanotube rotors matched to molecular stators.

International competition is primarily in Japan and Europe, with some work on the linear motors in the USA. The unique ability to attach Au nanoparticle probes, which, when combined with a novel dark-field imaging methods, leads to high spectral and temporal resolution provides a competitive advantage for the time being. Collaborations are mainly in Japan, in structural analysis and modeling.

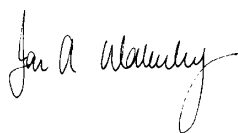
This group could also speed up its rate of research if it were larger. This would provide resources to work on more types of molecular machines, thereby maintaining the strong international position it currently holds.

Akihito Ishizaki

This young theorist, recently appointed to IMS, brings world-leading profile in the modelling of the transport of excitations within biomolecules, especially between the special pair and the reaction center in photosynthetic complexes. This transfer is an essential precursor to charge separation and the efficiency and speed of transport have garnered significant attention in the past decade because it appears that quantum interference may play a role in delivering the favourable properties of these transfer dynamics.

Dr. Ishizaki's new areas of interest in excitation/charge transfer are to elucidate the regulatory mechanisms in photosynthesis (in particular PS II) and explore adiabatic quantum chemical dynamics such as charge transfer at conical intersections.

There is strong international competition in this area from the US and Europe (*e.g.* Whaley, Mukamel, Ronge, Castro and Plenio). Prof. Ishizaki has worked with many of these groups in the past, with particularly strong connections to Graham Fleming's group. Therefore his unique expertise for calculating accurately complex quantum dynamics using statistical mechanics is well known to leading global researchers and offers new opportunities for collaboration with experiment.



訳文

分子研レポート

2015年2月25日－27日に分子研を訪問し、研究教育職員と面談した。またいくつかの研究室、研究センター、施設の訪問をおこなった。

面談した研究グループは全て、分子科学および、その応用に関する研究に携わっており、その研究内容は素晴らしいものであった。プロジェクトの多くは、それぞれの研究分野において優れて創造的な若手研究者により主導されている。さらに研究所が幅広い専門分野をカバーしているので、多様な知識、技能、技術が要求される科学・技術の重要な課題に取り組む事が可能となっている。このことは、今回の訪問で面談したグループで特に強調すべき特色であり、この種の学際的テーマを支援する分子研の能力は特筆すべきである。

それぞれのグループリーダーとは、国際競争という点に関して自分たちのプロジェクトの位置をどう認識しているか（世界で主な競争相手は誰で、彼ら独自の優れている点は何か？ 分子研の研究者がプロジェクトを進めるうえで、どのようにして影響力を発揮するのか？ この競争を考慮して、どのような戦略を練るのか？）について、議論する時間を持つこととした。

世界中で研究力が強化・発展している中で、分子研の研究アクティビティの素晴らしさを維持・発展させることに関して、今回面談した研究者達が、何を考えているかを明らかにしたいと考えた。ほとんどの研究者は競争相手とは異なった、何らかの専門性を見いだすことで、世界をリードする研究グループの中で自らの領域を確立してきている。他の研究者の方がより強力である研究分野、競争すべきでない研究分野、または研究手法についてもよく理解していた。分子研が関わるべき国際的研究課題や研究活動もよく認識されていた。

一般的には、グループがより大きければ、より大きな影響力をもつと考えられている。俗に言う、興味ある問題に

対応する人員よりも、対応すべき興味ある問題の方が多く存在するということである。任期制の博士研究員や大学院生を加えてグループを大きくする事を試みるべきである。

しかしながら、いずれの研究グループにおいても、人的制約が、外部の共同研究者を捜そうという方向性を生み出している。これにより取り組むことができる研究課題が広がり、非常に実りの多い研究が導かれてきた。おそらくこれは、グループの規模が小さいことの肯定的な側面である。

他の研究所、センター、施設訪問

分子研が一つのグループを超えた受入能力と体制を提供しようとしている点もまた特筆すべきである。訪問中、岡崎にある他の自然科学研究機構の研究所、共通研究施設、分子研の研究施設を訪れた。

岡崎統合バイオサイエンスセンター（OIIB）は、自然科学研究機構の研究者が一つの建物で学際的な研究を行う、すばらしい研究施設であり、幅広いミッションと最先端の機器を備え、脳科学から薬化学までを包含する、すべてのバイオサイエンスに関する広範な課題に取り組む環境を提供している。（3研究所のうちの一つと併任した）研究者をOIIB所属とする事は、異なった研究分野の融合をもたらすためには正しいやり方である。OIIBで行われている研究は、非常に幅広いものである。それでもなお、OIIBと3研究所の連携をより強めようとする事は有益であろう。それによって新たな課題やアイデアに気付き、より広範な相互交流が可能となるだろう。

分子研のUVSORは、世界中から研究者を惹き付けている、国際的競争力のあるすぐれた施設である。小杉教授は、例えば、100 eV以下の低光子エネルギー範囲における高輝度ビームといったような独自の特徴をもつよう、施設の位置づけを上手く行い、世界の他の施設とは一線を画している。

脳科学、バイオインフォマティクス、生理学を研究している生理学研究所が近くにあることもまた印象的だった。これらの分野には、分子研との共同研究の好機がまだあり、分子研における新たな研究専門領域の開拓に資するものである。二つの研究所が物理的に近いことで、今までにない学際的な研究を進めるにあたっての障壁は軽減されるだろう。おそらくジョイントワークショップや研究所間の談話会などを開催することで、学際的な研究を設定し、優先順位をつけながら、それらを進める可能性を考慮するのも面白いだろう。

分子研研究スタッフとの面談

柳井 毅／倉重佑輝

分子研における量子化学分野の研究グループの一つである本研究グループで実施されている研究は、大きな分子を対象とした多電子理論に関するものである。材料のマクロな性質を決定する強相関相互作用に関する研究は、高エネルギー物理、凝縮系物理、化学、生物化学、および材料科学にまたがる広範囲な研究分野を形成している。本研究グループは、精緻な実験手法（DMRGと摂動論）を組み合わせるという研究アプローチにより、酵素反応、光化学系II中での電荷移動およびマンガンクラスターの酸化状態等、重要な問題を解決することに成功している。

本研究グループは、計算科学ならびに化学に精通しており、分子の構造ならびに性質の計算に関して、最先端の展開が可能である。彼らが開発した計算アルゴリズムは、計算機に実装されており、その研究手法および応用例は、JCPやJACSといった一流学術誌に掲載されている。

本研究グループは、世界をリードする所内外の研究グループとの間で、幅広い共同研究を実施している。これらの共同研究が実施されているのは、彼らが開発しているコンピュータコードの有効性ならびに、彼ら自身が、重要な問題の解決能力を有していることを知られているからである。

山本浩史

山本教授の分子エレクトロニクス、特に Mott 効果に基づく有機 FET の研究は類のないものであり際立っている。伝導経路を与えるため Mott 絶縁体状態から電子を取り除くよう場を加える事により超伝導を導入する彼の手法により、金属―絶縁体転移に基づく、スイッチングが非常に速く、所要エネルギーの小さなトランジスタがもたらされた。超高速コンピュータへの応用にも、大きな可能性を有している。日本は、この分野で長い実績がある。

彼の研究は、量子物質の基礎的な性質を深く理解し、物理、化学、工学を融合すれば革新的な技術がもたらされる可能性があるという典型的な例である。山本教授は、このような考え方を、有機半導体という材料を改善するという事に適用した。室温での金属―絶縁体転移を可能とすることで、彼の国際的競争力は高まった。分子研が獲得すべき、革新的な技術の基礎となるであろう。

田中清尚

田中准教授のグループは、分子研で強力な ARPES 装置の開発を行い、所内の放射光施設に組み込むことにより、スピン分解光電子分光法の感度を非常に向上させた（鉄ベースの検出器及び新たな分光器スリットデザインを用いることによる）。田中准教授は、ユーザーのためビームラインを維持管理する立場にあるので、この重要な低エネルギープローブ材料に最先端の技術を提供できる。UVSOR に組み込むことにより、分子研は非常に高輝度な光源を利用した、100 eV 未満の低エネルギー光子の実験方法で世界を主導できるようになる。

田中准教授は、ARPES でまず表面の電子バンド構造を直接観測し、分子物質の電荷移動を研究している。彼は、スピン分析を利用しフェルミ面のディストーションを観測する事により、トポロジカル絶縁体などのスピントロニクス系を探究しようとしている。

UVSOR が放射光コミュニティにおいて独自の位置を占めているため、この分野の国際競争が少ないのは当然である。広島大学やスタンフォード大学のグループが主なライバルであるが、分子研の低光子エネルギー高輝度光源は非常に競争力がある。

解良 聡

有機物質の機能的性質に関する本グループの研究により、分子研には新たな分野が加わった。UVSOR の強みを生かした物質表面に関する研究に関して、新たな可能性をもたらしている。

解良教授のビジョンははっきりしている。分子半導体の新たな“標準”である。特にキャリア移動度を増やす事ができれば、柔軟性や印刷可能であるといったユニークな性質を更に活用出来るようになるだろう。この目的に向けた、彼の有機半導体の伝導性の起源に関する最近の研究は、伝導性を何が制限しており、どうすれば改善されるかを明らかにしている。

この分野の主導的位置を占めているドイツが、主な国際的競争相手である。しかしながら、高分解能 UV 光電子分光というユニークな特徴と理論との強力な共同研究により、グループは有利に立てる位置にある。

解良教授は千葉大学の客員教授でもあり続けており、大学院生を惹き付ける一助となっている。それでも、このグループは実験グループであり、厳しい競争にある研究を進めるには人的増員が重要となるであろう。

飯野亮太

分子モーターは生物物理におけるホットな話題である。飯野教授の研究は、その作用機構を明らかにしており、本

研究分野で大きなインパクトを示している。彼は分子に小さな粒子をとりつける技術を開発し、光散乱を利用して非常に高い精度で、その動きを直接観測した（実際 1 nm 以下の精度で）。金粒子を用いるという革新により、より高速の回転速度を研究できるようになった。それは金粒子の慣性が、プラスチックビーズより小さいためである。これにより彼は、暖かい生物的に適切な環境においてさえ、モーターの“ステータ”ユニットの調和した動きが、どのようにして一方向の回転を与えるかを示した。彼は最近、なぜ分子モーターの回転が一方向性に限られているのかを理解するため、同じ手法をリニアモーター（キネシン）に適用している。

彼のビジョンもまた意欲的である。分子モーター、分子機械の動作原理の完全な解明、基本的に異なったエネルギー源に基づく新たな種類のリニアモーターの開発、分子ステータに組み合わせたハイブリッドカーボンナノチューブロータといった新たな種類の分子マシンのデザインと作製などである。

国際競争相手は、まず日本とヨーロッパであり、リニアモーターに関してはアメリカもある。金ナノ粒子プローブを取り付けるのは独自の手法であり、新奇な暗視野イメージング法と結びつけば高いスペクトル分解能及び時間分解能が得られ、しばらくの間優位さを保てるであろう。共同研究は、構造解析やモデリングに関して、主に日本国内で実施されている。

このグループもまた、規模が大きければ研究はスピードアップするだろう。より多くの種類の分子マシンを研究でき、現在の強力な国際的な位置を保持できるだろう。

石崎章仁

最近分子研に採用されたこの若い理論家は、生体分子内（特に光合成複合体中におけるスペシャルペアーと反応中心間）での励起移動のモデル化において、世界有数の成果を挙げている。この励起移動は、電荷分離のきわめて重要な前駆反応である。量子干渉がこれらの移動ダイナミクスの望ましい性質をもたらす役割を担っているのではないかと考えられているため、励起移動の効率とスピードが過去 10 年間にわたり、大きな注目を集めてきた。

石崎博士の励起／電荷移動における新たな対象分野は、光合成（特に PS II）における制御機構の解明と円錐型交差での電荷移動のような断熱量子化学ダイナミクスの探究である。

この分野では、アメリカやヨーロッパに強力な国際競争相手がいる（例えば Whaley, Mukamel, Ronge, Castro, Plenio）。石崎准教授は、過去にこれらのグループの多くと一緒に仕事をしており、特に Graham Fleming のグループとは強い結びつきがある。従って、統計力学を用いて複雑な量子ダイナミクスを正確に計算する彼の専門性は、世界の主な研究者によく知られており、実験科学者との共同研究の新たな可能性にもつながるものである。

I. A. Walmsley

Report to the Director General, Institute for Molecular Science

March 2014 visit of

Prof. Thomas V. O'Halloran, Foreign Councilor

This report for the Director General of the Institute for Molecular Science (IMS) summarizes my findings after a visit from March 24–26, 2014. On this first visit, I toured the research facilities and met with the faculty group leaders as described below. I spent time with each individual and received updates on the status of their individual research programs. In addition, I examined larger team-science projects like the Orion Project in the Okazaki Institute for Integrative Bioscience, the Research Center of Integrative Molecular Systems, the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science and the UVSOR. In this advisory document I summarize my own impressions and provide comments concerning strengths and challenges faced by the Institute in its ambitious plan to be a world leading site for molecular sciences from materials to life.

It is clear from the 39 year history of the IMS that it has steadily fostered some of the most talented entry level chemists and physical scientists in Japan as they begin independent careers. Many of these scientists have gone on to become scholars in the Imperial Universities and several have emerged as key international thought leaders in areas where there is a convergence of molecular theory and precise experimental methods. Dr. Ohmine has done a superb job of guiding the IMS through some important transitions as it approaches its 40th anniversary: seven of the Institute's eighteen professors retired in 2011 ~ 2014. The complexity is also a great opportunity and the Institute is now stepping up to meet new challenges at the interface between theory and high-precision experimental science. I am quite impressed by the direction and momentum in the following areas: understanding the molecular basis of energy conversion, exploiting the inorganic basis of life processes, articulating and developing new materials, and establishing the temporal basis information exchange in complex molecular systems.

I am deeply impressed by the strong scientific accomplishments (in terms both of numbers and impact of publications), the significant societal impact, the overall organization and administration of IMS. This Institute supports a diverse array of cutting-edge research missions such as understanding and improving the physical properties of materials involved in catalysis, solar energy conversion, biophysics, reaction mechanisms of metalloenzymes and the molecular nature of biological clocks. While the primary driving force for the Institute is to understand the molecular basis of very fundamental processes, most of the team leaders have a strong predilection to seek applications of their findings to pressing technological problems, and they are making important contributions in several of these areas. The significant breadth of topic areas and approaches is a strength of the Institute and the research activities are well coordinated across departments. There was clear evidence of a highly supportive core facility infrastructure as well as moderate interaction between groups that have allied methods approaches and goals.

I was also impressed by the progress and contributions to the literature from the larger teams (*i.e.* Orion Project) as well as the smaller groups alike. I do not find that group size correlates with the ability of an Investigator to achieve a highly creative endpoint. The examples of Professor Murahashi and Aono reveal the strong potential and impact of small groups. Thus the concept that there must be a specific mass necessary for progress does not seem to be an essential criterion for evaluating success: some individuals will be better running small teams and others running large teams. Having said this, a major limitation that most of the Investigators at the IMS face is the relatively small pool of talented graduate students.

In terms of targets as the IMS faces for growth and improvement, many of the faculty I met with would have a higher impact on their field if they had access to an additional foreign and Japanese graduate students, either from the Sokendai Graduate School, from Nagoya University or from other partnerships. This is an important issue for the IMS and may have an impact on the successful exiting trajectory of current faculty and the future recruitment of young faculty.

Finally, the IMS has played a central role in nurturing some of the most talented physical chemists in the world and it may have role in addressing a pressing need recently identified by Prime Minister Shinzo Abe and discussed shortly after my visit in the March 29, 2014 issue of *The Economist*: i.e. how to bring a significantly higher percentage of women into the national work force. The IMS's mission and its proven track record of fostering the careers of talented academics at early stage in their career might provide a starting point for a new program to facilitate the recruitment of outstanding female scientists at both the Assistant and Associate Professor levels.

This is not a challenge faced by Japan alone: physical science departments in leading academic institutions across Europe, and to a significant extent in the US as well, struggle with this same challenge: while many female PhD students compete well and excel in the best graduate programs, the percentage of women who go on to take academic appointments as assistant professors is not commensurate. Thus a good deal of scientific capital and creative talent goes untapped. Each country faces different cultural hurdles in optimizing the recruitment of the most talented members of society, but it seems to me that the unique history and widely recognized international strengths of the IMS provide a real opportunity for significant impact on this nationwide challenge. There is not a simple way to address this but I would be happy to discuss how some leading European and US Institutes are making innovative experiments in how to meet this challenge.

Individual Meeting Summaries

S. Masaoka—Division of Functional Coordination Chemistry

Shigeyuki Masaoka is an Associate Professor working on the development of functional metal complexes for artificial photosynthesis. His group is interested in artificial solar energy conversion and storage. In addition to Masaoka, the group consists of one assistant professor, a postdoctoral fellow, several graduate students and a number of research technicians. Masaoka's work on electrochemical water oxidation and oxygen activation chemistry using mononuclear Ruthenium/pyridine complexes is elegant and mechanistically sound. In other project areas there is clear progress in understanding and assembling coherent bi-functional and multi-component complexes that can carry out multiple electron transfer reactions with donors and specific redox partners. The challenge is that these coordination polymers must have the appropriate mixture of first, second and third row transition metals built into appropriately inert scaffold that provides access to the target redox partners. Masaoka is on the right path.

Y. Furutani—Division of Biomolecular Sensing Division

Yuji Furutani work on molecular mechanisms of transporters and receptors in membranes is really at the cutting edge of precise ion flux measurements in complex molecular systems. His use of stimulus-induced difference infrared spectroscopy provides a sensitive probe of the structural and environmental changes of organic and bio-molecules. The group is relatively small and consists of two assistant professors and a graduate student.

K. Kato—Orion Project—Okazaki Institute for Integrative Bioscience—Division of Biomolecular Functions

Professor Kato has assembled a large team to evaluate dynamical structures of biological macromolecules and their complexes at the atomic level, using NMR spectroscopy along with other biophysical, biochemical and molecular biology techniques. His team includes several IMS Fellows, two postdoctoral fellows, more than 8 graduate students and several technical fellows. His strong relationship with Nagoya City University serves the mission of this institute quite well.

T. Murahashi—Division of Functional Molecular Systems

The Murahashi leads a smaller group which includes an assistant professor, an IMS fellow, a visiting scientist and several graduate students. The focus of their research is on a new class of transition metal complexes and their work has led to inventive new approaches to synthetic inorganic and organometallic chemistry. His group's research in the chemistry of multinuclear sandwich complexes is highly regarded and his discoveries concerning reaction mechanism and redox chemistry of highly reactive Pd–Pd complexes has served as the basis for the discovery and development of whole new classes of materials that have intriguing and promising properties. The discovery and characterization of a large number of these new stable multinuclear sandwich complexes has important implications in a number of areas and may lead to entirely new classes of polymers. This is a good example of how small research groups can provide cutting edge breakthroughs even though they are not highly integrated into a larger group. Sometimes creative new avenues are best opened up by a few individuals. This being said, it seems that Murahashi has highly creative streak and that if he had access to additional graduate students, he would make progress in a number of additional areas.

H. Sakurai—Division of Functional Molecular Systems

The Sakurai group's focus on the understanding and manipulating the chemistry of bowl-shaped aromatic compounds (buckybowls) and metal nanoclusters has lead to new insights into novel electronic structures and catalytic compounds. Unlike a good deal of the published 'nano' chemistry, work from the Sakurai group has led to robust synthetic protocols and well characterized materials. This is one of the larger groups consists of numerous postdoctoral fellows, graduate students and visiting scientists.

S. Aono—Division of Biomolecular Functions

Aono's work on gas sensing metalloproteins which regulate the cellular biosynthetic/transcriptional apparatus has led to the discovery that the oxidation state of the metal heme center is the key to information transfer. This is a smaller research group that applies a wide array of very precise spectroscopic measurements and structural methods to understand the molecular mechanisms of metal-containing sensor site in these proteins. Aono's team has expertise in theory and precise molecular measurements and their work has important implications for understanding the molecular mechanisms in several tropical diseases as well as very fundamental mechanisms of heme metabolism. Given the importance of inorganic materials being developed across the IMS to improve energy conversion and understand dynamic features of information transfer, further work in the area of inorganic chemistry of life appears to be a growth area as the Institute considers future priorities.

S. Akiyama—Research Center of Integrative Molecular Systems—Division of Trans-hierarchical Molecular Systems

Professor Akiyama has rapidly built a most impressive trans-disciplinary research operation focusing on establishing the molecular machinery that regulates the 24 hour period of biochemical activity in photosynthetic bacteria. This is perhaps some of the most

impressive experimental work going on at the interface of physical science and biomolecular assemblies in the world. ‘Clock’ genes are being cloned and characterized in many systems and this progress has been critical to understanding a great deal of microbial and mammalian physiology; however, there is little consensus on ANY molecular mechanism for how a biological clock might actually work! Akiyama’s studies of the ‘cyanobacterial clock’ proteins is impressive and in my opinion, on the right track. His work is visible and well known around the world... and there is a good deal of anticipation of what kind of mechanism his precise molecular studies will support.

D. Jiang—Division of Molecular Functions

Prof. Jiang work on the design, synthesis and development of porous, ordered, polymer frameworks is elegant. The group is a healthy size with several IMS Fellows and a number of graduate students. This team is quite productive and publishes in the best journals in the field on several platforms: two-dimensional polymers, covalent organic frameworks and microporous polymers. These provide a base for a number of interesting applications.

T. Suzuki—Division of Functional Molecular Systems

Prof. Suzuki directs a small research group that focuses on development of organic semiconductors for molecular thin-film devices. This work is outside of my expertise and I found it difficult to follow Suzuki’s presentation. I was impressed by the combination of synthetic prowess and spectroscopic characterization.

Y. Uozumi—Division of Complex Catalysis

I was not able to meet with Prof. Uozumi to hear about his current work on heterogeneous catalytic systems for organic transformations in water.

UVSOR—Ultraviolet Synchrotron Radiation

Operational since 1983, it is the brightest in the world among low energy synchrotron light sources. The time is near for an upgrade, but unfortunately I am not familiar enough with the user community’s experimental needs in terms of low energy synchrotron applications.

訳文

2014 年 3 月 分子研訪問リポート

外国人運営顧問 Thomas V. O'Halloran 教授

分子研所長に提出した本リポートは、2014 年 3 月 24 日から 26 日に分子研を訪問した際の私の知見をまとめたものである。今回、外国人運営顧問としての最初の訪問に際し、下記に示すように、研究施設見学ならびに研究グループリーダーとの面談を実施した。各グループリーダーとの面談においては、各人が実施している研究の最新の成果についての説明を受けた。さらに、岡崎統合バイオサイエンスセンターにおいて実施しているオリオンプロジェクト、分子研の協奏分子システム研究センター、生命・錯体分子科学研究領域、UVSOR の活動についても説明を受けた。本リポートでは、私自身が受けた印象と、分子研が分子科学から生命科学の分野で世界をリードする研究所となるこ

とを考えた際に、強みとなる点、および研究所が努力すべき点についてのコメントを述べる。

日本の化学および物理学分野における多くの優秀な若手研究者が、独立した研究者としてのキャリアをスタートするにあたり、分子研が常に彼らの育成に取り組んできたことは、研究所創設 39 年間の歴史からも明らかである。彼らの多くは、旧帝大の教員となっている。また、そのうちの何人かは、理論と実験が融合した研究分野において世界的な指導者にもなっている。分子研が創設 40 年を迎えつつある重要な過渡期（2011 年度～2014 年度にかけて、18 名中 7 名の教授の退職があった）中での研究所運営において、大峯所長は、素晴らしい手腕を発揮している。研究分野の多様性は、大いなる可能性を生み出すものである。分子研は、理論科学と実験科学の境界領域において、あらたな挑戦の階段を昇りつつある。私は、エネルギー変換反応の分子機構の解明、無機化学に立脚した生命プロセス研究の開拓、新規な材料開発、および複雑な分子システム中での時間軸からみた情報交換の確立などの研究分野の方向性や進展に大いに感銘を受けた。

分子研の科学的な業績（発表論文の数および影響力、双方の観点から見て）、社会的な影響力、およびその管理運営全般については、深い感銘を受けた。分子研は、触媒反応、太陽エネルギー変換、生物物理学、金属酵素の反応機構、生物時計の分子の性質などの理解や、それらに関連する材料の改良など、多様かつ最先端の研究活動をサポートしている。非常に基本的なプロセスにおける分子科学的基盤を理解するというのが、分子研にとっての基本的なドライビングフォースである一方で、大部分の研究リーダーは、彼らの得た知見を技術的な問題の解決に応用できないかという思いを強くもっており、いくつかの分野においては重要な寄与をなしている。研究分野や研究手法の広さは、研究所の強みであり、分子研における研究活動は、研究領域間でうまく連携が取れている。研究を大いにサポートする研究施設・装置があり、研究手法や研究のゴールを共有する研究グループ間での適度な連携もある。

各研究グループの場合と同様、オリオンプロジェクトのような複数の研究グループをまたぐプロジェクト研究の進展や学問分野への貢献についても感銘を受けた。研究グループのサイズと、非常に高い研究成果を達成するための PI の能力との間には、相関関係は見いだせない。例えば、村橋教授や青野教授のグループは、小さな研究グループの潜在能力や可能性を示している。すなわち、研究成果を挙げるためには特定のグループサイズが必ず必要であるという考え方は、成功を収めるためには必ずしも必須な基準ではないように思われる。小さな研究グループでうまくやって行く場合もあれば、大きな研究グループでうまくやる場合もある。そうは言っても、分子研の中の大部分の研究者が直面している最も大きな問題は、優秀な大学院生が少ないことである。

分子研のより一層の発展という観点から言えば、私が面談した研究者の多くは、もし彼らが、総研大、名古屋大学、あるいは他の連携大学から、さらなる外国人留学生あるいは日本人学生を受け入れることができれば、より大きな成果を挙げることができると思われる。この点は、分子研にとって重要な点であり、これまでうまくいっている若手研究者の外部転出や、これからの若手研究者採用においても大きな意味を持つものであろう。

最後に、分子研は、多くの世界的にみて優秀な物理化学者の育成に中心的な役割を果たしてきた。また、分子研は、安倍晋三首相により最近表明され、また、私の分子研訪問の直後、2014 年 3 月 29 日発行の The Economist 誌でも論評された、「日本の成長戦略において、どのように女性の活力を活かすか」という要請に対して、役割を果たすことができるであろう。分子研の使命および、これまで分子研が、研究者としてのキャリアの初期段階において、優秀な若手研究者の育成を行ってきた実績は、助教および准教授レベルの優秀な女性研究者の採用を促進するための新たなプログラムの出発点となるであろう。

これは日本のみが直面している問題ではない。ヨーロッパの一流研究機関における物理科学科、および多くのアメリカの機関においても、同様な問題に取り組んでいる。多くの女性の博士課程学生は、大学院教育の中で競い合い、

優れた成績を上げている一方で、assistant professor として研究職を得ることができる女性の割合は、それに見合ったものにはなっていない。すなわち、多くの科学的な資産、創造的能力が、有効に利用されていない。それぞれの国においては、最も優秀な人材を採用し、活用することに対して、それぞれ異なる文化的障壁がある。しかしながら、分子研のこれまでの歴史と国際的に広く認知されているという強みは、国をあげてのこの挑戦に対して、大きな影響を与える可能性をもたらすものである。この問題を解決することは簡単な事ではないが、ヨーロッパやアメリカの一流研究機関がこの問題に取り組むために、どのような革新的取り組みを行ってきたかについて、議論できれば幸いである。

個別面談の概要

生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 正岡重行

正岡重行准教授は、人工的な太陽エネルギーの変換・貯蔵に関して興味をもっており、人工光合成反応のための機能性金属錯体開発に関する研究に取り組んでいる。彼の研究グループは、正岡准教授以外に、助教1名、博士研究員1名、大学院生数名、および何人かの技術支援員から構成されている。電気化学的な水分子の酸化反応、および単核 Ru/pyridine 錯体を用いた酸素の活性化反応に関する彼の研究は、素晴らしい研究であり、機能的なものに思われる。他の研究プロジェクトにおいても、電子供与体と、その特異的電子受容体間での多電子移動反応が進行する多機能・多成分錯体の合成および、それらの性質解明に関して、明らかな進展を見せている。ターゲットとしている酸化還元中心への出入り口となる、不活性な骨格構造中に組み込まれた、反応に適した複数の第一周期、第二周期および第三周期の金属を有する配位性高分子を合成することは、挑戦的な課題である。正岡准教授は、正しい方向性で研究を進めている。

生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門 古谷祐詞

生体膜中のトランスポーターおよびレセプターの分子機構に関する古谷准教授の研究は、複雑な分子システム中での精密なイオン流の測定において最先端を走るものである。彼が用いている外部刺激に応答した差赤外吸収分光では、有機分子および生体分子の構造および局所環境変化を高感度で測定可能である。本研究グループは、比較的小さなグループであり、2名の助教および1名の大学院生から構成されている。

生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門 加藤晃一

(岡崎統合バイオサイエンスセンター オリオンプロジェクト)

加藤教授は、NMR 分光法と生物物理学的、生物化学的、および分子生物学的な実験手法と組み合わせて用いることで、生体高分子および、その複合体の動的構造を解析するため、大きな研究グループを作りあげている。彼の研究グループは、IMS フェロー、2名の博士研究員、8名以上の大学院生および数名の技術支援員から構成されている。彼が有している名古屋市立大学との強固な関係は、研究所のミッションにも大いにかなうものである。

協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 村橋哲郎

村橋グループは、助教、IMS フェロー、訪問研究員および数名の大学院生から構成される比較的小さな研究グループである。新規な金属錯体に関する研究に主眼を置いており、無機合成化学および有機金属化学における独創的な研究に取り組んでいる。本研究グループで実施されている多核サンドイッチ錯体に関する研究は、高く評価できる。高

い反応性を有する Pd-Pd 結合を有する錯体の反応機構、酸化還元特性に関して、彼が明らかにした新たな知見は、興味深い特性を持ち、発展性を秘めた一群の新規材料の発見・発展の基礎となるべきものである。新規で安定な、一群の多核サンドイッチ錯体の発見とその性質解明は、広い研究分野を包含するものであり、本当に新しい高分子化合物群にも通じるものとなるであろう。村橋グループは、たとえ大きな研究グループではなくても、小さな研究グループが、どのようにして最先端のブレークスルーを成し得るかを知るための良い例である。創造的な新発見は、しばしば、少数の個人によってなされる。ただし、村橋教授は、創造性豊かな才能を有しており、もし彼の研究室に、より多くの大学院生がいれば、さらに広い研究分野において業績を挙げることであろう。

協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 櫻井英博

櫻井グループが注力している、お椀型芳香族化合物（バッキーボウル）および金属ナノクラスターの合成および、それらの性質の解明は、新規な電子材料および触媒開発においてあらたな知見をもたらすものである。これまでに報告されている多くの“ナノ”化学とは異なり、櫻井グループの研究は、しっかりとした合成手法、きちんと解析された材料に基づいて実施されている。多くの博士研究員、大学院生、および訪問研究員から構成されている本研究グループは、分子研の中でも大きな研究グループの一つである。

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

細胞内代謝や転写反応を制御する金属含有型ガス分子センサータンパク質に関する青野グループの研究は、ヘム分子中に含まれる鉄イオンの酸化状態が、細胞内情報伝達の鍵であることを明らかにしている。小さな研究グループであるが、金属含有型センサータンパク質中の活性中心の分子機構を解明するため、精緻な各種分光学的測定および構造生物学的手法を適用して研究を行っている。青野グループは、理論および精緻な分子測定に精通しており、彼らの研究は、ある種の熱帯病の分子機構の解明および、ヘム代謝反応の基礎的機構解明などにも関連している。エネルギー変換効率の向上および情報伝達における動的挙動の解明のため、分子研で推進されている無機材料の重要性を考えると、分子研が将来的にどのような研究分野に注力するかを考えた場合、生命科学分野における無機化学という研究分野が、今後発展する研究分野であると思われる。

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

秋山教授は、光合成細菌中での 24 時間周期で生物活性を制御している分子機械の立証に焦点をおいた、非常に優れた学際的な研究活動を実施している。これは、世界的に見ても、物理化学と生体分子集合との融合領域で行われている、最も印象深い実験的研究の一つであろう。「時計」遺伝子は、多くの系で単離され、その性質が調べられつつある。これら成果は、微生物および哺乳類の生理機能を理解するうえで必要不可欠なものである。しかしながら、生物時計が実際には、どのようにして機能しているかについての分子機構については、未だ、ほとんど共通理解は得られていない。シアノバクテリアの生物時計に関する秋山教授の研究は、非常に素晴らしいものであり、私見では、正道を行くものである。彼の研究は、世界的にも非常によく認知されている。彼の精緻な分子レベルでの研究により、必ずやその分子機構が明らかにされるであろう。

物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 江 東林

江准教授の多孔性、規則性高分子骨格構造の設計、合成、およびそれらの展開に関する研究は、素晴らしいもので

ある。IMS フェローおよび多数の大学院生から構成されている研究グループは、望ましいサイズの研究グループである。非常に生産的なグループであり、2次元高分子、共有結合性有機分子骨格、ミクロ孔高分子などの研究分野における一流雑誌に成果を報告している。これらの研究は、数多くの興味深い応用の基礎となるものである。

協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 鈴木敏泰

鈴木准教授は、小さな研究グループで分子薄膜デバイスに使用する有機半導体の開発に注力している。彼の研究は、私の専門分野外であり、研究説明を完全に理解するのは困難であった。有機合成の能力と分光学的な解析の組み合わせには感心した。

生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門 魚住泰広

今回の訪問では、水中での有機変換反応の不均一系触媒システムに関して研究を進めている魚住教授とは、面談できなかった。

極端紫外光研究施設 (UVSOR)

1983年に運用を開始して以来、低エネルギー放射光光源の中では、世界でもっとも高光度なものである。高度化の時期が近づいているが、残念ながら、私は低エネルギー放射光光源のユーザーコミュニティの要望については不案内である。

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 on October 27–29, 2014 Visit to the Institute for Molecular Science, Okazaki and the Okazaki Institute for Integrative Bioscience

The Institute for Molecular Science (IMS) is clearly undergoing a period of significant change as a number of retirements have led to the hiring of a group of energetic and creative younger faculty, whose research covers a wide range of topics. I was particularly pleased to see the new program on strongly correlated materials at UVSOR described by Professor Tanaka. Assistant Professor Kurashige described his work as combining renormalization group with quantum chemistry. This work appears well connected with actual problems such as water splitting, and not complexity for its own sake.

Professor Saito described a range of topics. His work has achieved full maturity and is extremely impressive. Professor Saito's ability to bring in and integrate effectively concepts and techniques from fields somewhat removed from the dynamics of liquids and biomolecules is very impressive. His approach to connecting fast and slow motions is very exciting and has great potential for new insights.

Professor Ishizaki described the important progress he has made in understanding the role of intramolecular vibrations in both electronic energy transfer and in two-dimensional spectroscopic studies of energy transfer systems. This is a very difficult and complex topic and Ishizaki is operating at a world-leading level.

Since the 2013 visit ideas on the creation of a new center whose focus is on measurement and analysis in mesoscopic systems has emerged. The plan for a new research center that focuses on precision multiscale measurement and analysis is coming together well. I believe that there is still work to do in defining the special contributions of this new center, but prospects look good that Professor Okamoto will be able to clearly define an exciting new program in the near future.

Continuing with new centers at IMS, Professor Akiyama gave an update on progress as CIMoS. The new space is carefully thought out to encourage interaction. I applaud Professor Akiyama's efforts to make CIMoS more than the sum of its parts and the new center seems to be off to a very good start. Professor Kaga described his interesting work in CIMoS on designed protein structures from scratch. His success in using coarse-grained models to design structural motifs opens up the possibility of designing for function. This is an exciting prospect.

At the Okazaki Institute for Integrated Bioscience (OIIB) Professor Kato described project ORION with three major components: Biosensing, Biodesign and Bioorganization. This is a multi institution initiative involving universities and the three national institutes at Okazaki. Later I will comment on some ways that interaction can be improved between the three Okazaki Institutes. Professor Kato leads a large group with energy and a clear vision, and project ORION seems well set to have a substantial international input.

I met with three new faculty: Professor Iino, who described impressive work on molecular machines based on single molecule spectroscopy. This is a forefront field worldwide and Professor Iino's goal to create new molecular machines is very exciting. Professor Kurihara described his approach to exploring the boundary between living and non-living matter. I found the program to be thoughtful and ambitious, but have some concern that the work will be limited by manpower and will have difficulty competing with larger groups in Japan and worldwide (for example, Sam Strupp at Northwestern).

Finally, Professor Momiyama described her synthetic chemistry program. She is a very articulate and enthusiastic scientist and

should add considerably to the interactive atmosphere at IMS.

Interactions between the Okazaki Institute

Here I describe a few techniques that I have experience with in developing interactions across separate institutions or very different fields.

1. Lightning Talks. 3 – 5 minute duration talks to a combined audience. These are so short speakers are forced to focus on the key points. They need to be practiced and a rigorous timekeeper is required.
2. Seed funding from multiple institutions available only if lead investigators come from all three Institutes or two of the three. Reporting of progress on seed funds to mixed groups from the different institutes.
3. Lunchtime talks with lunch provided. Two talks per lunch with speakers from the most disparate fields possible.
4. Postdocs who are “Directors’ Fellows” and who are not attached to any specific group. Their role is to help facilitate joint projects between groups from different areas. They act as the glue and the translators between the different areas. They have a modest research fund of their own and higher prestige than typical postdocs.

訳文

分子科学研究所ならびに岡崎統合バイオサイエンスセンター訪問リポート

2014 年 10 月 27 日～29 日

多数の教員の定年退職に伴い、幅広い研究分野をカバーする、精力的かつ創造的な若手研究者を後任として採用することとなり、分子研が重要な変革期を迎えていることは明らかである。田中教授から説明のあった UVSOR における強相関材料に関する新しい研究プログラムは、非常にすばらしいものであった。倉重助教は、空間くりこみ群と量子化学の融合として、彼自身の研究を説明した。彼の研究は、水の分解反応という実際の問題とも深く関係している。ただしこの水分解反応のもつ本質的な複雑性の解明にはまだ至っていない。

齋藤教授は、様々なトピックスについて説明した。彼の研究は、円熟期を迎えており、大変印象的なものである。液体のダイナミクスや生体分子を扱う研究分野から、効果的にそれらのコンセプトやテクニックを取り入れ、統合する齋藤教授の能力には、非常に感銘を受けた。(分光スペクトルなどの)観測結果と、スローダイナミクスを継ごうとする彼の研究アプローチは、非常に刺激的なものであり、新たな展開への大きな発展性を秘めている。

石崎准教授は、電子エネルギー移動反応、およびエネルギー移動系の二次元分光研究における分子内振動の役割解明において、彼が達成した重要な進展について説明した。この研究は、大変に難しく、複雑な研究である。石崎准教授は、世界最先端のレベルで研究を実施している。

2013 年の訪問以来、メゾスコピック系の計測と解析に重点を置いた、新しいセンターを立ち上げる計画案が練られている。精密なマルチスケール計測・解析に焦点をあてた新しい研究センター案についても、同時に考えられている。この新しい研究センターの具体的研究内容についてまだ議論すべきことは多々あるが、岡本教授により、近い将来、魅力的な新プログラムが明確に示されていくであろう。

分子研の新センターにも関与しつつ、秋山教授は CIMoS の最新の進展について説明した。新しい居室スペースは、お互いの連携を促進するよう、考慮された設計となっている。私は、CIMoS を、単に個々の集まり以上のものにしようとする秋山教授の努力を称えるものである。新センターは、非常によいスタートをきっているように思われる。古

賀准教授は、ゼロからタンパク質の構造をデザインするという、CIMoSにおいて実施している彼自身の興味深い研究について説明した。粗視化モデルを利用して、構造モチーフの設計に成功していることは、タンパク質の機能デザインの可能性を切り開くものである。本研究の展望は、非常にエキサイティングなものである。

岡崎統合バイオサイエンスセンターの加藤教授は、センターの3研究領域（バイオセンシング研究領域、生命動秩序形成研究領域、生命時空間設計研究領域）の説明とともに、オリオンプロジェクトについて説明した。本プロジェクトは、大学および岡崎3機関と連携して実施されているプロジェクトである。岡崎3機関内での連携強化の方策については、後述したい。加藤教授は、精力的かつ明確なビジョンを持って、大きな研究グループを率いる。また、オリオンプロジェクトは、実のある国際連携を挙げ得るよう、よくセットアップされているように思われる。

今回、3名の新任教員と面談した。飯野教授からは、一分子分光を用いた分子機械に関する研究についての印象深い説明を受けた。この分野は、世界的にも最先端の研究分野であり、飯野教授が掲げる、新しい分子機械を創成するという研究目標は、非常にエキサイティングなものである。栗原准教授からは、生物と非生物の境界の探索に関する、彼の研究アプローチに関して説明を受けた。彼の研究テーマはよく考えられたものであり、また挑戦的なものでもある。ただ、彼の研究が、マンパワーの面で制限をうけてしまい、国内外の大人数の研究グループ（例えば、ノースウェスタン大学のSam Strupp教授）との競争において、苦勞するのではないかと危惧がある。

最後に、鍛山准教授からは、彼女が行っている合成化学に関する研究についての説明を受けた。彼女は、大変理路整然とした、熱意に満ちた科学者であり、分子研にインタラクティブな雰囲気をもたらすであろう。

岡崎の研究所間での相互連携

ここで、異なる研究所あるいは非常に異なる研究分野間での相互連携の進展を図る際に、私が経験したいくつかのやり方について述べる。

1. 異なる研究所あるいは異なる研究分野から集まった聴衆を対象とした、3～5分間の短い発表（ライトニングトーク）。発表時間が大変短いので、演者は重要な点に集中せざるを得ない。演者には、訓練が必要であるとともに、厳格な時間係も必要である。
2. 岡崎3研究所すべて、あるいは3研究所のうちの2研究所からの研究者が研究主務者となっているものに対し、複数の研究所から研究立ち上げのための予算を措置することを可能とする。異なる研究所に所属する研究者から構成された研究グループに措置された、研究立ち上げ用予算による成果についての報告を実施する。
3. 昼食付きのランチタイムトーク。可能な選択肢の中で、最も異なった分野から2名の演者を選び、その2名が、話題提供する。
4. 特定の研究グループには所属しない、「所長直属」のポストドクの創設。その役割は、異なる研究分野の研究グループ間での共同研究推進を促進することにある。彼らは、異なる分野間の接着剤および媒介として機能する。適度な研究資金を配分するとともに、通常のポストドクより高い格付けとする。

7-3 国際諮問委員による点検評価

7-3-1 R. Stephen Berry 国際諮問委員

原文

Review: Institute for Molecular Science

November, 2014

Overall, this reviewer came away with a very positive impression of the current and ongoing research efforts of the Institute for Molecular Science, Okazaki. The individual research groups are strong and, so far as this reviewer could tell, have positive, constructive interactions. They also have very productive collaborations with scientists in other institutions in many countries. There is a healthy mixture of very experienced, senior scientists and young researchers, with ventures into new, challenging areas. Here, we present comments on each research group, as presented by its leader, and a few summary comments at the end.

Director General of the Institute for Molecular Science

Iwao Ohmine

Okazaki Institute for Integrative Bioscience

Presenter: Professor Ryota Iino:

Determining the mechanism of molecular motor motion is a long-standing problem; this group is making very important contributions to solving this problem. They may be very close to achieving such a solution for the mechanism of kinesin motion. Their new single-molecule methods are improving space- and time-resolution in protein studies. Of course there is always the question of whether the probe, in this case a gold nanorod, induces a mechanism different from that in the absence of the probe, but that is a second-level question. Creating new molecular machines is a high-potential direction of “synthetic biology.” Likewise the creation and application of proteins with “non-natural” amino acids is a real frontier area.

Research Center of Integrative Molecular Systems

Presenters: Professor and Director Shuji Akiyama:

A very elegant and impressive elucidation of the molecular basis of circadian rhythms in cyanobacteria, clearly a key step in understanding this universal phenomenon in animal organisms; a powerful combination of experimental tools and interpretations.

Associate Professor Nobuyasu Koga:

A very inventive and daring project, designing “artificial” proteins, predicting their properties and checking the extent of validity of the predictions. The approach gives new insights into the relations between structure and behavior of “real” proteins as well. Quite an unusual effort.

Professor and Director of the Instrument Center Hiroshi Yamamoto:

Ingenuous device development, based on optically-induced state changes in organic semiconductor; is it possible to produce this

behavior at conditions more accessible than 2 K? The achievement of his group is already at the frontier, with their organic FET. Might it be possible to fabricate these or their next generation in some very efficient way, to mass-produce them?

Photo-Molecular Science

Presenters: Professor and Director of the Laser Research Center Hiromi Okamoto:

The importance of high-resolution imaging was clearly emphasized by the 2014 Nobel Prize for Chemistry. Hence the work of this group is obviously very timely. This group's approach, enabling them to probe electronic structures of nanoparticles, seems unique to this observer. Could this group's studies of gold nanoparticles be coordinated with the research of the group of Professor Iino? I was intrigued by the study of chiral nanoparticles, and the possibility of strong circular dichroism at the nanoscale.

Professor Masahiro Hiramoto:

Very sophisticated and ingenious approach to developing organic photocells. This is an area of global interest. The various approaches used by this group represent significant progress. Whether the need, for example, of very high purity C₆₀ fullerene will be a severe constraint on wide application is a question for the future, but one that comes to mind. Since development of efficient photocells is such an obvious societal need, one can't help looking at research of this kind with the long-term question in mind of the potential large-scale applicability of the findings of the research. But the research must be done, and this group is making very significant, original advances. For example, the codeposition approach seems quite an innovation.

Associate Professor Takunori Taira:

In a sense, a counterpart for photonics of the work of Professor Hiramoto, the research of this group involves theory and experiment to create micron-sized optical source devices of remarkably high power and high efficiency. The group also demonstrates the utility of these devices by carrying out precision measurements with them. They also are developing methods for controlling structures of the devices they are studying. A dramatic application of their work is the laser-ignited internal combustion engine. The breadth of collaborations of this group is very impressive.

Professor and Department Chair Kenji Ohmori:

Perhaps the most fundamental science presented to me, a very impressive advance in our understanding of many-body interactions at the atomic level under quantum conditions, showing the need to go deeper than mean-field approaches to understand and explain interatomic interactions.

Deputy Director General, Professor and Director of UVSOR Nobuhiro Kosugi:

Huge list of collaborators, natural for working with a high-energy synchrotron; the study of the behavior of core electrons of atoms in different environments provides a new kind of tool to understand the kinds of fundamental interparticle interactions that occur in those environments. Combining theory and experiment is a very sound and healthy way to do science, and the work of this group is well-adapted for such an approach. The extensive study of water-methanol interaction is, I believe, unique in approaching it through the behavior of inner-shell electrons. The observation of catalysis in process is impressive. I hope the study of interactions in 2-dimensional systems can be helpful in creation of new devices.

Theoretical and Computational Molecular Science

Presenters: Associate Professor Takeshi Yanai, Professor:

Strikingly wide range of research, from basic quantum mechanics of many-electron systems including correlation effects, to biological processes, notably photosystems, and possible new mechanisms for artificial water-splitting. I like the recognition that the in-vivo structure of photosystem II could differ from that determined by x-ray methods for the crystal. It's a very ambitious program, with strong indications that it will succeed in several areas. The collaboration with people at other institutions is very healthy.

Department Chair & Director, Research Center for Computational Science Shinji Saito:

Very much a forefront problem, the behavior of supercooled liquids, especially the onset of heterogeneous distributions and their effect on dynamics; reinforces how strange water is. The study reveals the difference between traditional freezing to a regular ice structure and the anomalous behavior involved with glassy ice formation. Multiple time scale analysis of protein dynamics is a powerful way to determine the molecular level of behavior. The concept of Dynamic Component Analysis is a powerful analogue and extension of Principal Coordinate Analysis. The parametrization of Density Functional Theory will be quite useful; I wish this group could consider trying to do a basic derivation of DFT that would give a rigorous means to evaluate exchange and correlation effects, to turn DFT from an empirical tool into a truly basic computational tool.

Overall Summary and Comments

The scope and strength of the IMS are quite impressive. The range of topics under study and the means used to study them are as broad as at any of the very best institutions doing molecular science today. From very basic physical processes, through complex biological systems to potential applications as tools, the IMS is contributing to science globally. The internal strength and breadth currently will keep the momentum of the institution for at least the near term. The resilience of the IMS is apparent in the way it has maintained its strength with new appointments, when several of its senior faculty retired.

I wonder whether a way might be found to enable retired faculty members who wished to continue research to do that. I am quite aware that that would be contrary to the traditional Japanese system, but in reality, many scientists wish to remain active in research after their formal retirement and many of those continue to make major contributions.

I wish to thank the IMS and its faculty and staff for the opportunity to visit and make these comments.

R. Stephen Berry

訳文

分子科学研究所 レビュー

2014 年 11 月

全体的にみて分子科学研究所において実施されている研究活動について非常にポジティブな印象を受けた。各研究グループは強力であり、私が見るかぎり、グループ間に実際的かつ建設的な関係が築かれている。また、海外の研究機関に所属する多くの研究者とも、豊富な共同研究を実施している。経験を積んだシニア研究者と、若手研究者が丁

度良い割合で混ざり合っており、新奇な挑戦的な課題に思い切って取り組んでいる。本レビューでは、PIによる説明に基づく各研究グループの活動状況に対してのコメントを述べると共に、末尾に、全体的なコメントを付記する。

岡崎統合バイオサイエンスセンター

発表者：飯野亮太 教授

分子モーターの運動メカニズムの解明は長年の課題であり、本グループは、この課題の解明に向け非常に重要な貢献をしている。本グループは、キネシンの運動メカニズムの解明にとっても近づいているようである。本グループの新規1分子計測法は、タンパク質を対象とした研究において、空間分解能および時間分解能を改善するものである。観察プローブ（この場合は、金ナノロッド）の付加によりメカニズムは変化しないのか、という疑問はもちろんあるが、これは副次的な疑問である。新しい分子機械の創成は、「合成生物学」における、大いなる発展性を有した研究の方向性に合致したものである。同様に「非天然」アミノ酸をもつタンパク質の創成と応用は、真に未開拓の領域である。

協奏分子システム研究センター

発表者：センター長 秋山修志 教授

シアノバクテリアにおける概日リズムの分子基盤を、最先端の研究手段を用いて見事に解明している。この知見は、その他の生物種にも存在する、この普遍的な生物現象の理解を深める重要な鍵となると期待される。

古賀信康 准教授

計算機上で「人工」タンパク質分子を設計し、それらの物性を予測し、その予測の妥当性がどの程度であるかを検証するという、非常に独創的で斬新な研究を行っている。また、このようなアプローチは、「現実存在する」タンパク質分子の立体構造と挙動との関係性についても、新たな知見をもたらすものである。非常に素晴らしい取り組みである。

装置開発室長 山本浩史 教授

有機半導体における光誘起相転移を用いた非常に独創的なデバイスの開発を行っている。このようなデバイス動作を、2 Kより高い温度で実現することは可能であろうか？ 彼のグループが有機トランジスタで達成した成果は、既に最先端のものである。大量生産に向けて、これらのデバイス、あるいは次世代のデバイスを、より効率的な手法により製造することは可能であろうか？

光分子科学

発表者：分子制御レーザー開発研究センター長 岡本裕巳 教授

高分解能イメージングの重要性は、2014年のノーベル化学賞からも明らかである。従って、本研究グループの仕事は言うまでもなく時宜を得たものである。本グループの、ナノ微粒子の電子構造探査を可能とする研究方法是、彼らの独自のものと思われる。本グループの金ナノ微粒子に関する研究は、飯野教授のグループの研究に連携できるのではないだろうか？ キラルなナノ微粒子の研究、及びナノスケールでの強い円偏光二色性の可能性については、興味をそそられた。

平本昌宏 教授

非常に洗練された独創的なアプローチによる有機太陽電池セル開発である。この分野は、世界的に関心が高い研究分野である。本グループにより実施されている様々なアプローチにより、顕著な研究の進展が見られる。例えば、広範な応用において、超高純度 C₆₀ フラーレンが必要不可欠になってくるかどうかは、将来的な問題であろうが、すべての研究者が注目しておくべきことである。高効率太陽電池の開発が、社会的に求められていることは明らかである。したがって、この種の研究は、研究の成果が広範な応用可能性を有しているのかという問いかけと共に、見られざるを得ない。しかし、この種の研究は、必要不可欠である。本グループは、非常に重要で、独創的な成果を挙げている。例えば、共蒸着によるアプローチは、非常に革新的であると思われる。

平等拓範 准教授

ある意味、フォトニクス分野における、平本教授の研究に対応する研究といえる。本グループは、驚異的高出力、さらには高効率のマイクロサイズ光素子を創り出すため、理論と実験の両面から研究に取り組んでいる。また、これらの素子を用いた高精度な測定を行うことにより、開発した素子の有効性を実証している。彼らが研究している素子の、構造制御法の開発も行っている。内燃機関のレーザー点火は、彼らの研究の顕著な応用例の一つである。本グループにおける広範な共同研究は、大変に印象的であった。

研究主幹 大森賢治 教授

今回の発表の中で、おそらく最も根源的なサイエンスである。量子力学的な条件下にある原子レベルでの多体相互作用の理解において、非常に感銘を与える成果である。原子間相互作用を理解し説明するためには、平均場近似を超えたより深い考え方が必要であることを示した。

研究総主幹・UVSOR 施設長 小杉信博 教授

シンクロトロン放射を用い、非常に多くの共同研究者と共同研究が行われている。様々な環境に置かれた原子の内殻電子の挙動に関する研究は、このような環境によって引き起こされる粒子間の相互作用を理解するための新しい方法を提供するものである。科学研究の方法として、理論と実験を組み合わせることは非常に大切であり、本グループの研究はそのような研究アプローチにまさに適合している。内殻電子の挙動から調べた水とメタノールの相互作用の詳細な研究は、独創的なものであると確信している。触媒反応のその場観測に関する研究は、素晴らしいものである。2次元分子系における相互作用に関する研究は、新しい分子デバイスを作る際に役立つことが期待できる。

理論・計算分子科学

発表者：柳井 毅 准教授

多電子系の電子相関に関する基礎的な量子力学研究から、光合成などの生物過程、および人工水分解反応の反応機構に関する研究まで、幅広い研究を行っている。光合成系 II において、X線結晶解析で決定された分子構造と in vivo での構造が異なる可能性があるという彼らの研究は、興味深い。非常に意欲的な研究であり、他の研究分野でも成果をあげることが強く示唆される。外部研究機関の研究者との共同研究も、非常にうまくいっている。

研究主幹・計算科学研究センター長 斉藤真司 教授

非常に最先端の問題である過冷却液体の挙動、とくに、不均一分布の発現および、それらの動力学への影響について研究するとともに、水がどのように異常であるかを明確にしている。これらの研究により、従来の、規則正しい氷構造への凍結と、ガラス性氷形成の関わる特異的振る舞いの差異を明らかにしている。タンパク質ダイナミクスの多時間解析は、タンパク質の微視的挙動の解明に強力な方法である。主成分分析に類似し、その拡張として導入された動的成分解析は、強力な解析手法である。密度汎関数理論のパラメータ化は非常に有用と思われる。DFT を、経験的手法から真に計算科学的な手法へと転換するために、交換および相関効果を見積もる確固たる方法を与え得る DFT の基本的な導出を試みることを、本グループで考えてみてはどうだろうか。

全体的なまとめとコメント

分子研の先見性とその研究力に大きな感銘を受けた。研究領域範囲や、研究手法は、分子科学研究を先導している他の世界のトップレベル研究所と同様、非常に幅広いものである。最も基礎的な物理プロセスから複雑な生物システム、また応用的な手法に至るまで、分子研は、世界的な貢献をしている。高い研究力と見識の広さにより、この研究所のもつ活力はここ当分確保されていくだろう。何名かのシニア研究者が退職したが、新たに採用した後任により分子研の持つ力が維持されたことは明らかである。

退職した教員が研究を継続したいと希望した場合に、それを可能とすることができないものかと思う。もちろん、それが日本の伝統的なシステムに反していることは承知している。しかしながら、現実的には、多くの研究者は、退職後においても研究を継続したいと希望しており、十分な成果を上げ続ける者も多い。

研究所を訪問し、コメントを述べる機会を与えていただいたことに対して、分子研および、その教職員の皆様に感謝申し上げたい。

R. Stephen Berry

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化学分野で特徴ある分光研究に利用されている。特に，国内では唯一，国際的にも数少ない軟 X 線顕微分光ビームラインの利用が開始され，海外からの利用者が 1 / 3 を占めるまでに至っている。

新しい光源技術の開発として，レーザーと電子ビームを用いた光発生とその利用法に関する研究を，文部科学省の受託研究として進め，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，2015 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。現在、専任PIが8名（秋山教授、山本教授、村橋教授、古賀准教授、鈴木准教授、石崎特任准教授、鹿野特任准教授、小林特任准教授）、併任PIが6名（斉藤教授、青野教授、加藤教授、飯野教授、古谷准教授、正岡准教授）の計14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。

2014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。

専任PIはセンターが掲げる目標に向かって、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、研究グループの居室を南実験棟の3階の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しつつ、科学的な議論や交流を活発に進めている。

その他、CIMoSセミナー、CIMoSランチ、ワークショップなどを企画・実施し、それらを通じてセンターの活動や成果を国内外のコミュニティに向けて発信している。

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、基礎研究としてだけでなく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26年度現在、レーザーセンターは以下の3つの研究部門より成り立っている。

- (1) 先端レーザー開発研究部門；平等拓範准教授（専任）、藤 貴夫准教授（専任）、加藤政博教授（UVSOR より併任）
- (2) 超高速コヒーレント制御研究部門；大森賢治教授（光分子科学研究領域より併任）
- (3) 極限精密光計測研究部門；岡本裕巳教授、大島康裕教授（以上、光分子科学研究領域より併任）

それぞれの部門の任務は、(1) テラヘルツから軟X線にいたる先端光源の開発；(2) 主に高出力超短パルスレーザーを用いた量子制御法の開発；(3) 高空間分解および高エネルギー分解分光法の開発などである。レーザー光源の開発から新たなスペクトロスコピー、マイクロスコピー、制御法に至る統合的な研究手法を開発することを目的としている。これらの開発研究により、他に類を見ない装置や方法論を創出して分子科学研究の重要な柱として寄与し、分子科学研究所とコミュニティの新たな共同利用の機会を開拓することが求められる。また、技術職員が積極的にこれらの研究開発に参加することによって、新たに開発された装置や方法論をセンターに蓄積し、継承していくための原動力として活躍する事が、センターのミッションに照らして重要な点である。センターが保有する光計測に関する汎用の小型装置と技術については、一部を所内で共用することを試行している。その意味で、現在1名しか配置されていない技術職員ポストが増員されることが強く望まれる。

一方、先端レーザー開発研究部門への加藤教授（UVSOR 所属）の参加は、レーザーセンターと UVSOR との連携による新しい研究分野の創出を目指すものである。平成22年度からは実際に、レーザーセンターと UVSOR の現場の研究者・技術職員が、レーザーと相対論的電子ビームを組み合わせたコヒーレント放射光源の開発に関して議論を重ね、実験に取りかかっている。今後、先鋭化するレーザー光源を用いた観測制御技術と放射光を用いた研究との連携がさらに進むことが期待され、それにより光分子科学の新たな領域を創出する正のフィードバックも加速されるであろう。この延長線上には、将来的に、放射光とレーザーの技術を総合した大規模な新規の研究施設を建設する構想も持っておく価値はあろう。

センターが将来に進むことを想定する構想として、上述のような放射光とレーザーを総合した大規模な光源施設を建設することが一つの選択肢としては考えられる。しかし現在の分子科学における先端的なレーザー実験では、多くの場合、それぞれの研究目的に適した小型レーザーが用いられており、大規模な光源を共同で利用するという形態が

一般的ではない。またこれまでの分子科学研究所、また分子科学研究分野全体の光分子科学の蓄積を飛躍的に発展させる観点からは、レーザー光源を主に用いた高度な光分子科学研究手法を広範に追求する研究施設への展開が、一つの重要な方向性として考えられる。具体的には、強度、波長などで極限的な性能を持つ光源により分子に大きな摂動を与える研究手法ではなく、分子の機能や反応の契機となる過程をできる限りありのままの姿で捉える、低摂動で繊細な計測手法を開拓する研究施設の構想が、所内で議論されている。分子に少なからぬ摂動を与えて得られる微小部分を繋ぎ合わせて全体像を得るという従来の計測法を超えた、ホーリスティックで革新的なアプローチを目指す。量子性に正面から取り組む研究手法、ノイズに埋もれた信号を繊細に取り出す計測手法、また時間や振動数領域を多変数で、或いは高分解能かつ超広帯域に測定して分子とその集合体の物理過程の全体像を描き出す手法等を開発し、分子の持つ高度な物質・エネルギー・情報変換能力を精緻に引き出すための研究手段を提供することを使命とする研究センターとする。この構想に関する所内外での議論を深め、予算措置に向けた取組みを進める。

8-3-2 共同研究の状況

平成26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。コンポン研との共同研究では、レーザーセラミックスの限界とされていた配向制御を検討している。発光中心として添加する希土類(Re^{3+}) 4f 電子のスピン・軌道角運動量を利用することで配向制御、透明化を行う。最近、次世代高強度レーザーとして期待の高いYb:FAP レーザーセラミックスの開発に成功した。研究成果の一部は国際会議で発表、論文としても出版された。

2)「赤外フェムト秒パルスレーザーの開発」

赤外光である $2\mu\text{m}$ を発振波長としたフェムト秒パルスレーザーは、周波数コムを利用した気体分子の高分解能分光など、広い分野への応用が期待されている。本研究では、 $2\mu\text{m}$ を発振波長としたフェムト秒ツリウムフッ化物ファイバーレーザーの製作を行った。藤グループにおいては、すでにチタンサファイアレーザーを励起光源として、パルス発振に成功していたが、本研究では、はるかに安価な半導体レーザーによる励起によってパルス発振に成功した。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、先端機器の開発・維持・管理・運用、汎用的な物性・分析・分光機器の維持・管理・運用、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。先端機器開発に関しては、研究所内外の共同利用者と協力して、特色ある測定装置の開発とその共同利用を行っている。また、汎用的な化学分析機器、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・管理を行い、全国の共同利用者が分子科学研究を推進するための研究支援を担っている。さらには、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（兼任）のほかに6名の専任技術職員、2名の事務支援員、1名の技術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、「ナノテクノロジーネットワーク事業」の発展である「文部科学省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。ナノテクノロジープラットフォームは3つのプラットフォーム（微細構造解析、微細加工、分子・物質合成）と1つのセンターが運用しており、分子科学研究所は分子・物質合成プラットフォーム（全11機関）の代表機関として参画している。機器センターは、ナノテクプラットフォーム実施機関における共用設備運用組織として登録されており、事務を担うナノプラットフォーム室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。2013年度には、2012年度ナノプラットフォーム補正予算により、マイクロストラクチャー製作装置（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、クリーンブース）、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（紫外光電子分光）、X線溶液散乱装置が導入され、マイクロストラクチャー製作装置は装置開発室が管理し、それ以外の3機は担当教員のもと機器センターが維持・管理・運用している。

2015年度においては、ナノテクプラットフォーム室を廃止し、機器センターがナノテクプラットフォーム実施機関の運用母体として統一的にその責を担うこととした。このため、機器センター所外公開機器のすべてをナノテクプラットフォーム登録機器とすることになった。これにより民間利用の促進も期待できる。また、技術職員の欠員を補い、さらに機器利用を促進する目的から、2014年度に既に技術支援員1名（汎用NMR等担当）を配置したが、2015年度には博士研究員1名（高磁場NMR担当）、技術支援員1名（TEM等担当）をさらに配置する。

研究所外のコミュニティから広く意見を集約する必要性が増加したため、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。次年度以降、さしあたり質量分析器、粉末X線回折、単結晶X線回折から更新を進めるべきであると結論している。

一方、中長期的にどのような機器ラインアップを維持するか改めて検討すべきであろう。機器の利用形態を考慮すると、次の3つのタイプに階層化することが有用と思われる。

- 1) 比較的多数のグループ（特に研究所内）が研究を遂行していく上で不可欠な共通基盤的機器。これらの維持は、特に人事流動の活発な分子研において、各グループが類似の装置をそれぞれ新たに用意する必要がない環境作りの面で、最重要である。所内利用者には利便性を図りつつ相応の維持費負担をお願いする必要がある。また、オペレーターとして、技術職員ばかりでなく技術支援員等でも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 の開発等に取り組んでいる。

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、さらに、研究の場の提供、ネットワーク業務の支援、人材育成等の新たな業務に取り組んでいる。2014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。

2015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。さらに後者は、今年度最新のCPUを有する演算サーバに入れ替えを行い、2015年1月から運用を開始した。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製のPRIMERGY RX300S7とSGI製のUV2000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 メモリ構成のノード 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 メモリを有する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、32 GB メモリの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 CX2550M1で、28 CPU コア、128 GB メモリ構成のノード 260 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302.8 Tflops、総メモリ容量は33.2 TB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。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429.7 Tflopsにもおよぶ。入れ替え以前の総演算性能は263.5 Tflopsであったが、本構成時はlinpackによるCPU性能測定結果は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ている。

ハードウェアに加え、利用者が分子科学の計算をすぐに始められるようにソフトウェアについても整備を行っている。

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 131,771 件のデータが収録されている。

共同利用に関しては、2014 年度は 214 研究グループにより、総数 783 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、2011 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「様々な対象に応用される計算分子科学」と 2 つのウィンタースクール「第 4 回量子化学ウィンタースクール～大規模系を目指した基礎理論～」と「第 8 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 26 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 CX2550M1
	OS：Linux
	CPUCore 数：7280 (28CPUCore×260 ノード)
	総理論性能：302.8 Tflops (1164.8 Gflops×260 ノード)
	総メモリ容量：33.2 TB (128 GB×260 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：1024 GB (MDS: 128 GB×2 ノード+ OSS: 128 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：512 GB (128 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、飯野亮太教授は生命動秩序形成研究領域に所属している。2013年度末に異動した藤井浩准教授の後任は、今後選考予定である。

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	東京理科大学大理教授				○	○	○						
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	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
岩村 秀	加藤 延夫	九大有機化学基礎研究 センター教授 名大総長							○	○				
黒田 晴雄	塩野 宏	東京理科大総合研教授 成蹊大法教授							○	○	○			
田中 久		前京都薬科大学長							○	○	○			
堀 幸夫	森本 英武	金沢工業大副学長 (株)豊田中央研顧問							○	○				
守谷 亨	大瀧 仁志	東京理科大理工教授 立命館大理工教授							○	○				
清水 良一		統数研所長							○	○		○		
田岡 三生	土屋 莊次	埼玉大理教授， 理学部長 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	大塚 榮子	京都工繊大学長 (独)産業技術総合研 フェロー							○	○			○	
京極 好正	後藤 圭司	(独)産業技術総合研生 物情報解析研究セン ター長									○	○		
高橋 理一	中西 敦男	豊橋技術科大学長 (株)豊田中央研代表取 締役所長							○	○	○		○	○
細矢 治夫		学術著作権協会 常務理事 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 ビーム科学研究室研究協力員									○			
荻野 博	放送大学宮城学習センター所長									○	○	○	
木原 元央	高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設長									○			
近藤 保	豊田工業大客員教授									○	○	○	
佐原 眞	国立歴史民俗博物館長									○	○	○	
廣田 襄	京大名誉教授									○	○	○	
福山 秀敏	東大物性研究所長									○	○	○	
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		○共										
高柳 和夫	宇宙研教授		○	○									
中島 威	東北大理教授		○人										
中村 宏樹	分子研教授	○(共'82.5.1～)	○共	○	○人	○人	○共	○人	○	○	◎共	○人	○人
丸山 有成	分子研教授(客員) (お茶女大理教授)		○	○	○	○人	○人	◎					
山本 明夫	分子研教授(客員) (東工大名誉教授)	○	○	○	○	○							
茅 幸二	慶應大理工教授			○共	○共	○共							
菅野 暁	東大物性研教授			○	○								
坪村 宏	阪大基礎工教授			○人	○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						
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 '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
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			
西 信之	分子研教授								○人	○人			
三上 直彦	東北大院理教授								○共	○人		○共	○共
岡田 正	阪大院基礎工教授										○共		
加藤 重樹	京大院理教授									○人	○人		

氏 名	所 属	第1期 '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	第6期 2014. 4. 1～ 2016. 3.31
阿久津秀雄 阪大たんぽく質研所長	○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	◎人・共
小杉 信博 分子研教授	○人	○	○人	◎人・共	◎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	○人
大島 康裕 分子研教授				○	○人	○
魚住 泰広 分子研教授				○共	○人・共	○人・共
青野 重利 分子研教授(岡崎統合 バイオ)				○人・共	○人・共	○共
加藤 晃一 分子研教授(岡崎統合 バイオ)					○	○人
加藤 政博 分子研教授					○	
山本 浩史 分子研教授					○	○人
秋山 修志 分子研教授						○
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		

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	第6期 2014. 4. 1 ～ 2016. 3. 31
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 熊本大院葉教授				○	○	
上村 大輔 神奈川大理教授				○	○	
山内 薫 東大院理教授				○人	○人	
森 健彦 東工大院理工教授				○人	○人	
佃 達哉 東大院理教授				○	○	○
朝倉 清高 北大触媒セ教授				○	○(副)人	○(副)人
神取 秀樹 名工大院工教授				○	○共	○
河野 裕彦 東北大院理教授				○人	○人	○人
寺崎 亨 九大院理教授				○人	○人	○人
水谷 泰久 阪大院理教授						○共
大西 洋 神戸大院理教授						○
鈴木 啓介 東工大院理工教授						○
高田 彰二 京大院理教授						○人
田原 太平 理研主任研究員						○人
森 初果 東大物性研教授						○人

9-9 自然科学研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規則

平成 16 年 4 月 1 日
分研規則第 20 号

自然科学研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規則

(趣旨)

第 1 条 この規則は、大学の教員等の任期に関する法律（平成 9 年法律第 82 号。以下「法」という。）第 5 条第 2 項の規定に基づき、自然科学研究機構分子科学研究所の研究教育職員の任期に関し、必要な事項を定める。

(教育研究組織、職及び任期)

第 2 条 任期を定めて任用する研究教育職員の教育研究組織、職、任期として定める期間及び任期更新に関する事項は、別表に定めるとおりとする。

(同意)

第 3 条 任期を定めて研究教育職員を採用する場合には、文書により、採用される者の同意を得なければならない。

(周知)

第 4 条 この規則を定め、又は改正したときは、速やかに周知を図るものとする。

附則

この規則は、平成 16 年 4 月 1 日から施行し、岡崎国立共同研究機構分子科学研究所研究教育職員の任期に関する規則（平成 10 年岡機構規程第 8 号。以下「分子研規則」という。）により任期を付されて採用された者について適用する。

附則

この規則は、平成 19 年 4 月 1 日から施行し、改正前の別表の規定により任期を定めて雇用されていた者について適用する。

別表（第 2 条関係）

法第 4 条第 1 項第 1 号に掲げる 教育研究組織に該当する組織	該当する職	分子研規則 による種別	任 期	任期更新に関する事項	
				可 否	任 期
分子科学研究所に置かれる研究 領域及び研究施設	助教	5 年に満たない 任期を残す者	分子研規則に よる残任期間	可	任期を 定めず に採用
		5 年を越える 任期を残す者	5 年		

9-10 自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則

平成16年4月1日
分研規則第4号

自然科学研究機構分子科学研究所点検評価規則

(目的)

第1条 この規則は、自然科学研究機構分子科学研究所（以下「研究所」という。）の設置目的及び社会的使命を達成するため、研究活動等の状況について自己点検・評価、及び外部の者による評価（以下「外部評価」という。）を行い、もって研究所の活性化を図ることを目的とする。

(点検評価委員会)

第2条 研究所に、前条の目的を達成するため分子科学研究所点検評価委員会（以下「委員会」という。）を置く。

2 委員会は、次に掲げる者をもって組織する。

- 一 研究所長
- 二 研究総主幹
- 三 研究主幹
- 四 研究施設の長
- 五 本部研究連携室の研究所所属の研究教育職員
- 六 技術課長
- 七 その他研究所長が必要と認めた者

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 27 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、行動計画に沿った活動を推進する。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のため、平成 26 年度にバイオネクストプロジェクトを立ち上げ、公募プロジェクトの採択、プロジェクト人事選考を完了させたので、平成 27 年度はプロジェクトを軌道に乗せる。また、海外（特にアジア）との交流を盛んにするための準備を行うとともに、新たに開始した共同利用研究をさらに充実させる。
 - 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。また、研究会／シンポジウム開催等の活動を通して、コミュニティの拡大を図り、「画像科学」の創成を図る。
- さらに、上記 2 研究分野の融合発展による「次世代生命科学センター」（仮称）の設置に向けて、生命科学における膨大な情報に基づく新たな研究の展開による新たな学問分野創出の可能性について調査・検討する。
- また、宇宙における生命研究分野においては、機構直轄の国際的共同研究拠点として「アストロバイオロジーセンター」を創設し、①系外惑星探査、②装置開発において、国内外の第一級の研究者を結集し、世界をリードする先端的研究を推進する。

各分野の特記事項を以下に示す。

（国立天文台）

- ① すばる望遠鏡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 すばる望遠鏡の主力観測装置である超広視野主焦点カメラ（HSC）を安定して運用し、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。また、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活かせるよう、主焦点超広視野分光器（PFS）等の観測装置の検討・開発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について、京都大学、名古屋大学等に協力する。
- 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、名古屋大学、京都大学等と協力しながら共同研究を推進する。
- ⑤ 平成 25 年度から運用開始され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 国際天文台のもとで TMT（30m 光赤外望遠鏡）の建設を推進する。日本の担当である、望遠鏡本体の最終設計を完了し、製造に向けた部品調達を開始するとともに、主鏡鏡材の製作、主鏡の研磨・加工、および観測装置の製作を進める。
- ⑨ 将来の太陽観測衛星、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。また、次期太陽観測衛星計画の一環として、ロケット実験の開発を進める。
- 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）で、これまで軽水素実験により得られた核融合炉を見通すことができる高性能プラズマを、更に性能向上させることが可能な重水素実験の開始に向け、トリチウム除去装置をはじめとする安全管理に必要な設備、機器等の整備を進め、それらの機能確認を行うとともに、運転・管理マニュアル類の整備を進め、異常・災害時を含めた安全管理体制の確立を行う。併せて、準備研究として、加熱・計測機器等の整備と活用を進め、共同研究・共同利用により水素プラズマのデータベースを拡充し、これまでの知見を統合してプラズマの輸送機構の解明など学術研究の進展を図る。
- 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、今年度性能向上予定のプラズマシミュレータを有効活用し、（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平衡、輸送、不安定性、非線形発展、高エネルギー粒子物理、関連する複雑性プラズマの物理、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 核融合炉の早期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、原型炉の安全性や保守交換を優先した基本設計の改良を進める。並行して、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最新の研究設備の有効利用によって、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 生殖と発生、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、次世代 DNA シーケンサーによる遺伝子発現解析、比較ゲノム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、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。大学連携バイオバックアッププロジェクト（IBBP）を安定して運営して研究基盤を支えるとともに、生物遺伝資源の新規保存技術開発を推進する。以上により、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をデータベース管理することで、生物遺伝資源バックアップ保管拠点としてのIBBPの機能強化を図る。
- ④ 多様な生物機能を研究するための新規モデル生物開発に向けて実施した所内プロジェクトのうち、有用性が高く生物学への貢献度が高いと見込まれるモデルについては継続して開発を行う。

(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。特に、シナプス可塑性にとって重要なタンパク質の機能について明らかにする。
- 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。特に、神経細胞の結合の特異性のメカニズムについて明らかにする。
- 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、これらが障害を受け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。特に、一次視覚野を損傷された際における「盲視」のメカニズムや、注意共有の神経科学的基盤について研究を進める。
- 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や、ブレイン・マシン・インタフェースを応用し、脳神経系障害からの運動回復のメカニズムについて調べる。
- ⑤ 分子・細胞から個体に至る各レベルでの生体機能の可視化に関する研究を進める。可視化のためのプローブ・ベクターの作製、イメージング技術開発・改良等を行う。特に、マイクローム組込み型の三次元走査型電子顕微鏡（3D-SEM）の2台稼働体制を維持し、神経結合の網羅的解析（コネクトミクス）を推進するとともに、超高磁場機能的磁気共鳴画像装置（fMRI）導入完了に伴い、撮像を開始する。

(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、触媒、機能性分子、ナノ構造体、生体分子などの多体分子系の物性、反応、ダイナミクスに関する量子力学、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、先端的な光源や光計測・制御法の開発を継続する。それらを用いて、新しいイメージング手法の開発、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、ナノ構造体の特異な光物性と動的挙動の研究、有機半導体や液体、固液界面での化学反応系などの局所電子構造の研究を進める。
- 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・有機FET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ならびに生体関連物質・燃料電池などの機能物性解析のための新規分光学的手法の開発等を行う。
- 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、生体系における分子機能発現原理の探究、新しい金属錯体創製とその分子機能開拓を推進する。特に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 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。
さらに、上記2研究分野の融合発展による「次世代生命科学センター」（仮称）の設置に向けたワーキンググループの設置など、新分野の芽出しを恒常的に検討するための組織を設置する。
- ④ 機構長のリーダーシップの下、戦略会議を中心として研究システム改革を推進するとともに、新分野創成センターの再編により恒常的な新分野の創成を促進する体制を整備し、機構の既存機関とは独立した異分野融合によるアストロバイオロジーに係る新たな学際領域の研究を推進する国際的共同研究拠点（アストロバイオロジーセンター）を創設する。また、当該拠点に既存組織から研究者の再配置を行うとともに、プリンストン大学等を含む海外機関から最先端の研究者を招へいし、海外の大学・研究機関との連携強化を図る。

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、大型観測装置を共同利用に供するほか、電波VLBI分野及び光赤外分野において、大学間連携の枠組み等により天文学研究ネットワークの中核拠点としての役割を果たす。
核融合科学研究所では、双方向型共同研究における連携強化や一般共同研究におけるネットワーク型の推進を通じて共同研究に参画する大学間の交流を一層進めるとともに、研究力強化戦略室の下で各大学との個別の連携研究を推進する。
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することで、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とともに、国内外の関連研究者ネットワークの充実を図る。
生理学研究所では、脳科学・生理学研究に必要な実験動物やツール・技術の開発・供給、及び先端的研究機器の共同利用を通じて学術ネットワークの中核拠点としての役割を果たす。特に、ウィルスベクターの供給体制の充実、三次元走査型電子顕微鏡（3D-SEM）の2台稼働体制の維持による神経結合の網羅的解析の共同研究の充実を図り、超高磁場機能的磁気共鳴画像装置（fMRI）を用いた双方向連携研究を開始する。

分子科学研究所では、各研究分野の研究動向・需要調査等に基づき各研究施設で整備している先端的研究設備を利用した共同利用研究を推進するとともに、中小型設備も含めて大学連携研究設備ネットワーク及びナノテクノロジー・プラットフォームに登録することで利用拡大を図る。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 する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、高い研究成果を上げる。
- 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充実に努め、その解析・公開や高速ネットワークの活用を通じ、データ活用型天文学を推進する。

(核融合科学研究所)

- ① LHD の重水素実験へ向けて、共同研究者の実験への参加形態について、海外を含めた共同研究者コミュニティと議論して、安全管理体制の強化も含めた合理的な制度を確立する。併せて、実験データに関して、利用実績の分析と要望を基に利便性の向上を図る。これら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及び利用環境の整備を実施する。理論・シミュレーションによる国内外共同研究を積極的に推進する。また、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、最新の研究設備を有効利用し、材料・ブランケット・マグネット・高熱流機器・トリチウム研究などを、国内外の共同研究、特に双方向型共同研究を活用して推進する。
- ④ 研究力強化戦略室で検討した方針を踏まえ、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 センター、生物機能解析センター、モデル生物研究センターを中心に、最新の研究ニーズに対応出来る設備を整備する。これにより、生物遺伝資源の新規保存技術の開発推進と関連研究者ネットワークの構築、大学間連携による共同利用・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を活用して質の高い共同研究を継続、推進する。
- ③ 植物の多様な生育環境（温度、湿度、日長、二酸化炭素濃度）を精密に制御する野外型精密環境制御装置の共同利用を一層推進する。植物環境応答情報の収集・ネット配信設備を整備することにより、共同利用・共同研究を促進する。
- ④ 水生動物室における飼育環境の安定化、最適化を進め、環境制御実験を可能にすることによって水生モデル生物を用いた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、三次元走査型電子顕微鏡（3D-SEM）の2台稼働体制を維持し、革新的なコネクストミ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）導入完了に伴い、撮像を行いつつ、前年度までに整備した研究会等を通じて双方向連携研究を開始する。
- 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について、疾病対策の強化、安定供給を引き続き行うとともに、臓器などのサンプル提供も含め、潜在的な要望に対応するための広報活動を充実させる。
- ④ 脳科学研究に最適化した、遺伝子導入効率や特異性のより高い高品質のウィルスベクターを開発し、迅速に提供できる体制を、引き続き整備する。
- ⑤ サバティカル受け入れ部門体制の充実化を引き続き行う。

(分子科学研究所)

- ① 極端紫外光研究施設において、高輝度放射光源装置やアンジュレタビームライン装置の高度化を継続すると共に、スピン・角度・空間分解光電子顕微鏡装置の最終立ち上げを行う。また、特徴ある観測装置については欧米施設とのジョイントラボの検討を進める。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・放射光同期実験やレーザー利用電子源開発を推進する。
- ② 協奏分子システム研究センターにおいて、主要分子の性質・揺らぎとシステム全体の性質・揺らぎの相関を解析する。その際、高効率有機エレクトロニクス用パイ電子系の設計、生体系の機能発現原理をもとにした人工生体分子システムの設計、複雑系の不均一ダイナミクスの観測と理論的解明等に取り組む。
- 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、機能的分子の構造や反応性、タンパク質の構造揺らぎ・構造形成に関する理論・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、貸出可能な計測器を更に充実させるとともに、共同研究公募のカテゴリーを柔軟に見直し、研究者コミュニティの要請に応える。
- 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や利便性の向上とともに、ゲノム解析や画像解析などに関する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）2台稼働体制を維持し、計画共同研究を充実させ規模を拡大するとともに、超高磁場機能的磁気共鳴画像装置（fMRI）を用いて撮像を行いつつ、研究会等を通じて双方向連携研究を開始する。
- ⑤ 分子科学研究所では、共同利用研究の電子申請システムについて、利用者からの意見をフィードバックしながら、改善を継続するとともに、共同利用研究の種別についても利用度を検証して見直すことで、より一層の充実を図る。

- ⑥ 国立天文台ハワイ観測所では、米国ハワイ州マウナケア山頂の他の観測所等と観測時間の交換を行い、共同利用観測者に多様な観測機会を提供する。また、アルマ東アジア地域センターでは、その本格運用を継続し、日本や東アジアの研究者が多くの優れた研究成果を挙げられるよう、観測提案、観測データ解析、論文文化における支援業務を強化する。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とともに、東アジア中核天文台連合の活動を強化する。
- 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開催や、平成26年度に開始したボトムアップ型国際共同研究を通して、活発な国際共同研究を推進する。
- ⑨ 生理学研究所では、2014年7月に日米科学技術協定の延長されたことを受けて、米国側と緊密に連携して「脳研究」分野の事業を展開する。
- ⑩ 分子科学研究所では、「分子研国際共同研究」の改善を継続し、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枠を拡大する。
- 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を共通課題とし、参画大学附置研究センター間の連携協力による研究を進める。
- ⑬ 基礎生物学研究所では、植物科学最先端研究拠点ネットワークで導入した機器のうち、次世代DNAシーケンサーの一層の活用を進め、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にLED照明を設置し、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)の稼働開始に伴って、前年度までに整備した研究会等を通じ、実質的な双方向連携研究を進める。
- 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」、及び機器センターを中心とした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、先端的計測設備の相互利用による効率的な運用と、構造機能力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」を実施し、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、生命科学研究所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」、「脳科学専攻間融合プログラム」を充実させ、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「脳科学データ解析教育プログラム」を開始し、博士(脳科学)を授与できる体制を引き続き整備する。また、e-ラーニングの整備に基づいた基礎教育の充実や複数の専攻の協力による共通講義の整備を引き続き進める。
- ③ 全国の国公私立大学より特別共同利用研究員を受け入れ、大学院教育に協力する。また、東京大学大学院、名古屋大学大学院等との間で、単位取得互換制度を備えた教育協力の実施を図る。

(2) 人材養成に関する目標を達成するための措置

- ① 優秀な若手研究者を、国内外を問わず公募して、博士研究員として受入れる。また、各大学から委託された大学院生を受入れ教育指導を行う。総合研究大学院大学の大学院生に対しては、高いレベルのリサーチアシスタント(RA)制度等を維持し、研究に集中できる環境を整える。
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「夏の体験入学生」及び「アジア冬の学校」を実施するとともに、総合研究大学院大学大学院生を対象としたすばる望遠鏡や野辺山または水沢の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「異分野連携脳科学トレーニング&レクチャー」(生理学研究所)、更には、海外からの体験入学者を受け入れる「インターンシップ」(基礎生物学研究所、生理学研究所)、海外若手研究者向けのトレーニングコースである「IBROスクール」(生理学研究所)等を実施し、大学院生を含む国内外の若手研究者の育成に取り組む。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。また、世界トップレベルの研究機関への若手研究者の派遣や、優秀な若手研究者に独立した研究室を主宰させる「若手独立フェロー制度」により、新たな研究を切り開く研究者の養成を引き続き進める。

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い、自然科学における学術研究の重要性を直接的にかつ分かり易く社会・国民に訴える活動を展開する。
- 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研究者と中学校・高等学校の理科教員との科学コミュニケーション、生理学研究所の「せりりけん市民講座」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公開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、所内研究者に対し特許出願までの所内手続きを周知することや特許の活用方法等に関するセミナーを開催するなどにより特許出願を支援するとともに、特許収支を考慮した登録特許の適切な管理（評価・PR・維持）を実施する。

（2）国際化に関する目標を達成するための措置

- ① 我が国の自然科学分野における国際的学術拠点として、機構長のリーダーシップの下、研究力強化推進本部国際連携室を中心に、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、生理研国際研究集会（生理学研究所）、岡崎コンファレンス（分子科学研究所）等の各機関主催の国際シンポジウムを開催し、国際交流を進める。更には、各機関が締結した国際学術交流協定などに基づき、アストロバイオロジーセンターにプリンストン大学等を含む海外機関から最先端の研究者を招へいするなど、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ことにより連携強化を図る。また、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、生理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。また、機構長を議長とした戦略会議において、機能強化の方針の策定、資源の再配分を決定するとともに、新たな組織の運営の評価を行い、機能強化を強力に推進する。
- 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、アストロバイオロジーセンターの充実、機構長裁量経費等による萌芽的な分野間協力形成の支援等を行い、機構内外での恒常的な分野間連携体制を強化する。
- 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など、優秀な研究者を確保するため、人事・給与システムの弾力化に取り組む。特に、年俸制については、適切な業績評価体制を整備し、退職手当に係る運営費交付金の積算対象となる研究教育職員について年俸制導入等に関する計画に基づき促進する。
- ⑤ 技術職員、事務職員の専門的能力の向上を図るため、機構及び各機関主催の研修を計画的に実施しつつ、外部の研究発表会、研修等へも積極的に参加させる。また、機構内部の研修については、研修内容の見直しを行う。
- ⑥ 男女共同参画社会に適した環境整備を行うため、男女共同参画推進に向けたアクションプランを計画的に実施する。そのため、これまでの取組みを総括するシンポジウムを開催するとともに、パンフレットを作成して内部啓発や広報活動を行う。また、機構全体としてポジティブアクションを推進する。

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、必要に応じて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運用を開始する。
- 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行う。

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。また、IR機能の強化に向けて体制を整備する。

2 情報公開や情報発信等の推進に関する目標を達成するための措置

研究力強化の一環として、機構の広報室と各機関の広報担当が連携し、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。また、国際情報発信を推進する体制を充実させる。

V その他業務運営に関する重要目標を達成するためにとるべき措置

1 施設設備の整備・活用等に関する目標を達成するための措置

- ① 環境への影響が少なく安全性の高い将来の核融合発電の実現に向けた学術研究を推進するため、大型ヘリカル実験の基盤となる施設設備の整備を行うなど、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 施設マネジメントポリシーに基づく、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、機構及び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。