

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（理化学研究所との連携）、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、光科学関連の理化学研究所との連携はすべて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。

（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、文科省の「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」プロジェクトは平成27年度で終了し、平成26年度より「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発（ポスト「京」）」が開始している。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（機器センター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、平成27年度には平成28年度以降の事業の方向性を見直した。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。なお、後者は平成24年度～平成26年度はEXODASS事業と呼び、特に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。平成27年度以降はIMS-IIPA（International Internship Program in Asia）としてアジア地区の国際ネットワークを構築するとともに、米国、欧州、インド、イスラエルとの国際共同研究（こちらはIMS-IIPと呼ぶ）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5-11を参照のこと。

5-1 大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用と共同研究の促進 (文部科学省)

化学系の教育研究組織を持つ全国の機関が連携し、老朽化した研究設備の復活再生、及び、最先端研究設備の重点的整備を行い、大学間での研究設備の有効活用を図ることを目的として、文部科学省特別経費「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」事業が2007年度よりスタートした。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72法人ばかりでなく、私立大学や企業も含めて約130の機関が参加している。外部公開機器の登録台数は約400台、登録ユーザー数は10,000名を超えている。2015年度は「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」事業の最終年度であり、全国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。また、2015年度は、サーバー負荷軽減のためのデータアーカイブ化、ホームページリニューアルを行った。

2014、2015年度において、本事業に会計検査が入り、指摘と改善要求を受けた。参画大学等での周知不足、参画大学の全公開装置数に比べて本ネットワークに登録されている機器の数ははるかに少ないこと、2008～2009年度に主に実施した復活再生プログラムにより再生された機器45台のうち21台の学外利用がなかったことが主たる指摘点であり、利用者の便宜を図るため、事業の周知、登録台数の増大(既に他システムで運用のものはHP上リンク等)、さらなる学外利用促進等について改善すべきとされた。各参画機関や文部科学省は極めて熱心にご対応くださっており、次年度には改善要求が解けるよう努力しているところである。

本事業が今年度で終了することと会計検査指摘があったことから、当初は次年度以降の展開が危ぶまれたが、会計検査院からも積極的推進を期待され、各参画機関や文部科学省研究振興局学術機関課と検討し、最終的にはむしろ発展的に事業を継続することとなった。具体的には、文部科学省が2011年度より進めている設備サポートセンター整備事業(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、設備サポートセンター設立を支援するもの)と共同利用推進・人材育成などについて積極的な連携を行うこと、さらには、国立大学法人機器・分析センター協議会と人材育成などについて積極的な連携を行うことなどを検討中である。2016年度からは第3期中期計画並びに第5期科学技術基本計画期に入り、国立大学の先端機器共用促進および大学共同利用機関法人の大学機能強化貢献が一層求められる。全国の設備ネットワークを率先して維持していくことは分子研の責務であり、利便性を追求しつつ本システムの維持発展に努力する所存である。

5-2 連携融合事業「エクストリームフォトニクス」(文部科学省)

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

(1) 「光を造る」

「光波特性制御マイクロチップレーザーの開発」(平等)

「単一サイクル赤外光パルスの発生」(藤)

(2) 「光で観る」

「エクストリーム近接場時間分解分光法の開発」(岡本)

(3) 「光で制御する」

「アト秒コヒーレント制御法の開発と応用」(大森)

「高強度極短パルス紫外光を用いた超高速光励起ダイナミ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きた。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科学との接点」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 - 27年度は、理研が光拠点シンポジウムの幹事業務やエクストリームフォトニクス事業の中間評価等で忙しかったため、合同シンポジウムは開催していない。

また、このプログラムを中心に、所内に日常的な議論の場としての光分子科学フォーラムを設け、光分子科学の進展を図っている。

光分子科学フォーラム開催一覧（平成27年度）

回	開催日	テーマ	講演者
61	2015. 7. 1	Pulse-Shape Dynamics in Synchronously Pumped OPO's	Ryan Hamerly (PhD Candidate, Stanford University)

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・電顕相關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、平成27年度は8件のプロジェクト（内1件はトレーニングコース開催）が採択された。

5-3-2 実施された主な行事

このプロジェクトの具体的な最初の行事として、各研究所のイメージングに関わる興味の対象と研究ポテンシャルを、5研究所が互いに知ることを目的として、「イメージング・サイエンス」に関する公開シンポジウムを開催することとなった。平成17年8月8日 - 9日に、「連携研究プロジェクト Imaging Science 第1回シンポジウム」として、公開シンポジウムが岡崎コンファレンスセンターで開催された。このシンポジウムでは、天文学、核融合科学、基礎生物学、生理学、分子科学におけるイメージング関連研究に関する、機構内外の講師による16件の講演、及び今後の分野間連携研究に関する全体討論が行われた。参加者は機構外36名、機構内148名、大学院生80名、合計264名を数えた。また、講演と全体討論の内容は、175ページのプロシーディングス（日本語）としてまとめられ、同年12月に発行された。この機会によって機構内のイメージング・サイエンス関連研究に関する研究所間の相互理解が進み、その後の機構内連携研究の推進に相当に寄与したと考えられる。

平成18年3月21日には、立花隆氏のコーディネート、自然科学研究機構主催で「自然科学の挑戦シンポジウム」が東京・大手町で開催された。これは、一般の市民を対象に、機構の研究アクティビティーをアピールすることを目的として、立花氏が企画して実現したもので、当日は約600名収容の会場がほぼ満席となる参加があった。このシンポジウムの中で、「21世紀はイメージング・サイエンスの時代」と称して、イメージングを主題とするパネルディスカッションが組まれた。ここにはパネラーとして「イメージング・サイエンス」小委員会委員を中心とする講師によって、5研究所全てから、各研究所で行われているイメージング関連の研究の例が紹介され、最後に講師が集まりパネルディスカッションが開かれた。このシンポジウムの記録の出版は諸々の事情で遅れていたが、平成20年度にクバプロから出版された。

平成18年12月5日 - 8日には、第16回国際土岐コンファレンス（核融合科学を中心とする国際研究集会）が核融合研究所主催で土岐市において開催された。この会議ではサブテーマが“Advanced Imaging and Plasma Diagnostics”とされ、プラズマ科学に限らず、天文学、生物学、原子・分子科学を含む広い分野におけるイメージング一般に関するシンポジウムとポスターセッションが企画された。分子科学研究所からも、数名が参加し、講演及びポスター発表を行った。また平成19年8月23日 - 24日には、「画像計測研究会2007」が核融合科学研究所一般共同研究の一環として、核融合科学研究所において開催された。平成20年11月10日 - 13日には、第39回生理研国際シンポジウムとして、“Frontiers of Biological Imaging—Synergy of the Advanced Techniques”が開催され、機構内のイメージングに関わる研究者も数名（分子研1名）が講演を行った。平成22年3月21日には、再び立花隆氏のコーディネートによる自然科学研究機構シンポジウム（東京で開催）において、イメージングサイエンスを取り上げた。平成22年12月28日には、核融合科学研究所において、イメージングサイエンス研究分野所属の研究教育職員と様々な関連分野の全国から研究者が集まり、「画像科学シンポジウム」が開催された。平成24年3月5、6日には、岡崎コンファレンスセンターにおいて、基生研バイオイメージングフォーラムと合同で「画像科学シンポジウム」が開催された。平成25年4月10日には、2名の特任助教による公開セミナーも実施され、画像処理ソフトウェアの開発にまつわる現状と課題が紹介された。平成26年には2名の特任助教がオーガナイザーとなり、第47回日本発生物学会テクニカルワークショップ「Fundamentals of quantitative image analysis」（5月27日）及び「バイオイメージ・インフォマティクスワークショップ2014」（6月9日 - 10日）が開催された。平成27年には同様に「生物画像データ解析トレーニングコース」（12月7日 - 9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取り組みとして、天文学や核融合科学の分野で行われている計算科学研究に関する方法論的および概念的な共通項を探るとともに、他分野のアイデアの導入による研究の展開を目指した活動も進めている。今年度は MD シミュレーションとその応用、アストロバイオロジー、プラズマ物理などに関する国際シンポジウムを 2 月 5、6 日に国立天文台で開催した。

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 27 年度の支援装置・プログラム一覧を示した。平成 27 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 27 年度の採択課題一覧、表 3 には平成 27 年度採択・実施件数日数(平成 27 年 4 月 1 日～12 月 31 日実施分)を示した。

表 1 平成 27 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)	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	UVSOR 物質分子科学 物質分子科学 物質分子科学
走査型透過軟 X 線顕微鏡 (STXM)	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 稲垣裕一技術支援員	UVSOR 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，最小線幅 1 μ m 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 中野路子技術職員	装置開発室 技術課 装置開発室 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 μ m 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
装置開発	市販品では実現できない研究用装置類の金属工作図面作成，電気電子回路設計，それらの製作および性能評価 【付帯設備】 NC フライス盤（BN5-85A6 牧野フライス），NC 旋盤（SUPER QUICK TURN 100MY Mazak），電子ビーム溶接機（EBW(1.5)500 × 400 × 500 日本電気），プリント基板加工機（Accurate A427A），構造解析ソフト（ANSYS DesignSpace アンシス・ジャパン）など各種工作機器	山本浩史室長 青山正樹技術職員 吉田久史技術職員	装置開発室 装置開発室 装置開発室
高分解能透過型電子顕微鏡	ナノ粒子などの構造および電子状態解析のための電界放出型エネルギーフィルター高分解能透過電子顕微鏡。JEOLJEM-3200，粒子像分解能 0.17 nm，格子像分解能 0.10 nm。 [日本電子社製 JEM-3100FEF（300kV，粒子分解能 0.17 nm）]	横山利彦センター長 上田 正技術職員 伊木志成子技術支援員	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	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）]	横山利彦センター長 中尾 聡研究員	機器センター 物質分子科学
集束イオンビーム加工機	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）]	横山利彦センター長 中尾 聡研究員	機器センター 物質分子科学
低真空分析走査電子顕微鏡	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。表面凹凸の影ができにくく高感度な EDS 検出器を搭載。温度を -20 ~ 50 程度で変えられるステージも利用可能。 [日立ハイテクノロジー社製 SU6600（ショットキー型電子銃，空間分解能 1.2 nm (30 kV)，3.0 nm (1 kV)），低真空機能 EDS（BrukerAXS 社製 FQ5060/XFlash6）]	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 物質分子科学 UVSOR
単結晶 X 線回折	Rigaku 社製 MERCURY CCD-1・R-Axis IV，MERCURY CCD-2 [X線源 Mo, 50 kV・100 mA (5 kW)，検出器 MERCURY CCD，温度可変 100-400 K]	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

単結晶 X 線回折(微小結晶)	微小結晶 / Rigaku MERCURY CCD-3 [MoK α , コリメータ Φ 0.3 mm , 100 K-RT , 24-100 K]	横山利彦センター長 岡野芳則技術職員	機器センター 機器センター
粉末 X 線回折	Rigaku 社製 RINT-UltimaIII [X 線源 Cu 管球 , 光学系 ; 集中法 , 平行ビーム法 , 小角散乱 , 検出器 ; シンチレーションカウンタ , オプション ; 低温試料台他]	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
X 線溶液散乱計測システム	X 線小角散乱による溶液試料 (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	横山利彦センター長 秋山修志教授 向山 厚助教	機器センター 協奏分子センター 協奏分子センター
蛍光 X 線分析	JEOL JSX-3400RII Na-U , RhK α	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
機能性材料バンド構造顕微分析システム	静電半球型アナライザーを用いた機能性材料の価電子バンド構造測定システム。ディフレクターを使用することで 2 次元波数空間マッピングを行うことが可能。薄膜作製用真空チェンバー , 試料表面処理チェンバー (電子衝撃加熱 , 通電加熱 , Ar ⁺ スパッタが可能) , 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。	小杉信博教授 解良 聡教授 田中清尚准教授 山根宏之助教 出田真一郎助教	光分子科学 光分子科学 UVSOR 光分子科学 UVSOR
X 線光電子分光	汎用の X 線光電子分光器 (Al,Mg-K α 線利用) を提供。施設利用として気軽に利用いただける。 [電子分光器 Omicron 社製 EA-125 (ツインアノード X 線源)]	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 光分子科学 UVSOR
電子スピン共鳴	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 ESR EMX (X-band) , ESR E500 (X-band) , ESR E680 (W-band , X-band) を提供。ESR E680 では , 通常の X-band CW-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 ESR 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)]	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 物質分子科学 機器センター
SQUID 型磁化測定装置	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 ($\pm$ 7 T , 2-400 K , 300-800 K , DC) , QuantumDesign 社製 MPMS-XL7 ($\pm$ 7 T , 2-400 K , DC&AC)]	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
示差走査型カロリーメーター (溶液)	MicroCal VP-DSC 1-130 °C (生体試料に特化)	横山利彦センター長 牧田誠二技術職員 長尾春代技術支援員	機器センター 機器センター 機器センター
等温滴定型カロリーメーター (溶液)	MicroCal iTC200 2-80 °C	横山利彦センター長 牧田誠二技術職員 長尾春代技術支援員	機器センター 機器センター 機器センター
熱分析装置 (固体 , 粉末)	TA Instruments 社製 TGA2950 , SDT2960 , DSC2920 [温度範囲 TGA : 室温 -1000 °C , SDT : 室温 -1500 °C , DSC : -130-600 °C]	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
MALDI-TOF 質量分析	Applied Biosystems Voyager DE-STR [$\geq$ 300,000Da]	横山利彦センター長 牧田誠二技術職員	機器センター 機器センター

顕微ラマン分光	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 μ m , 深度 2 μ m , 3.2–500 K)]	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 協奏分子センター 協奏分子センター
FT 遠赤外分光	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。	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 協奏分子センター 協奏分子センター
蛍光分光	HORIBA SPEX Fluorolog 3-21 [Xe ランプ 250–1500 nm]	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
可視紫外分光	Hitachi U-3500 [200–3200 nm]	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
円二色性分散	JASCO J-720WI [165–1100 nm]	横山利彦センター長 牧田誠二技術職員	機器センター 機器センター
ピコ秒レーザー	Spectra-Physics, Quantronix Millennia-Tsunami, TITAN-TOPAS [490–800 nm, 1180–1700 nm, RGA 1.5 W @790 nm, <5 ps, 1 kHz]	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
ナノ秒エキシマー励起色素レーザー	エキシマー励起色素レーザー [Coherent Compex Pro 110, Lambda Physik LPD3002 320–970 nm, 260–348 nm, 10 mJ@580 nm, 1 mJ@290 nm, <10 ns, single-shot–50 Hz]	横山利彦センター長 山中孝弥課長補佐	機器センター 技術課
ナノ秒 Nd:YAG 励起 OPO レーザー	Nd:YAG 励起 OPO レーザー [Spectra-Physics, Lambda Physik GCR-250, ScanmateOPPO, 426–710 nm, 710 nm–2135 nm, 10 mJ@580 nm, 12 ns, 10 Hz]	横山利彦センター長 山中孝弥課長補佐	機器センター 技術課
ナノ秒フッ素系エキシマーレーザー	フッ素系エキシマーレーザー [Lambda Physik Compex110F, 193 nm 200 mJ, 248 nm 400 mJ, 351 nm 150 mJ, single-shot–100 Hz]	横山利彦センター長 山中孝弥課長補佐	機器センター 技術課
920MHz NMR	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)]	横山利彦センター長 加藤晃一教授 西村勝之准教授 奥下慶子特任助教	機器センター 生命・錯体分子科学 物質分子科学 物質分子科学
800MHz クライオプローブ溶液 NMR	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的高感度・高分解能測定支援。極低温プローブによる ¹ H- 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)]	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 生命・錯体分子科学 生命・錯体分子科学
600MHz 固体 NMR	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。 ¹ H- ¹³ C- ¹⁵ N 三重共鳴実験まで対応。 [Bruker AVANCE 600 (固体)]	横山利彦センター長 西村勝之准教授 奥下慶子特任助教	機器センター 物質分子科学 物質分子科学
600MHz 溶液 NMR	¹ H 600MHz 溶液 [JEOL JNM-ECA600]	横山利彦センター長 牧田誠二技術職員 長尾春代技術支援員	機器センター 機器センター 機器センター
機能性分子システム創製 (太陽電池)	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	物質分子科学

機能性分子システム創製 (有機 FET)	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
機能性分子システム創製 (有機合成)	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]	横山利彦センター長 東林修平助教	機器センター 協奏分子センター
機能性分子システム創製 (大規模量子化学計算)	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
機能性分子システム創製 (磁性薄膜作製評価)	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 上村洋平助教	物質分子科学 物質分子科学 物質分子科学
機能性分子システム創製 (金属錯体)	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
機能性分子システム創製 (無機材料)	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 2015年度(平成27年度)採択課題一覧 分子科学研究所担当分(平成27年12月31日現在)

(1) 協力研究

課 題 名	支援機器等	代 表 者
液体ゲートを用いた分子性伝導体に対する高密度キャリアドーピング	有機 FET	理化学研究所 川 曄 義高
バッキーボウルユニットを導入した TTF 誘導体の物性研究	有機 FET	大阪大学大学院工学研究科 櫻井 英博
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
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効果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
920MHz 超高磁場 NMR によるアミロイドβペプチドの重合開始機構の構造生物学的基盤の解明	920MHz NMR 800MHz NMR	国立長寿医療センター研究所 柳澤 勝彦
マルチフェロイック物質 CuB_2O_4 の ESR による研究	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
スイッチング機能を有する分子性錯体の光応答	有機 FET	神戸大学大学院理学研究科 高橋 一志
トポロジカル表面状態に対する表面酸化層の影響	ARUPS	大阪大学大学院生命機能研究科 大坪 嘉之
分子性ディラック電子系 α -(BEDT-TTF) $_2\text{I}_3$ の角度分解光電子分光実験	ARUPS	東邦大学理学部 田嶋 尚也
ジスルフィド結合が制御するタンパク質の溶液構造	SAXS	慶應義塾大学理工学部 古川 良明
バッキーボウル分子のレーザー分光	有機合成	京都大学大学院理学研究科 国重 沙知
X線小角散乱法による PDI ファミリー酵素とそのパートナー酵素との複合体の構造解析	SAXS	東北大学多元物質科学研究所 奥村 正樹
カチノン系危険ドラッグの代謝物のジアステレオ選択的な合成	有機合成	科学警察研究所法科学第三部 辻川 健治
縮退 π 集積材料を用いた有機 FET 素子の開発	有機 FET	東北大学原子分子材料科学高等 佐藤 宗太 研究機構
多周波 ESR による照射食品の計測研究	ESR E680	北海道教育大学大学院教育学研 鷗飼 光子 究科

再生医療材料開発のための新規 NMR 解析システムの構築と絹人工血管開発への応用	920MHz NMR 600NMR 固体	東京農工大学大学院工学研究院	朝倉 哲郎
受容体輸送タンパク質 RTP による嗅覚受容体の機能発現機構の解析	920MHz NMR 800MHz NMR	東京農工大学大学院工学府	養王田正文
CMP 加工により表面処理を施した SiC 上のグラフェン電子状態の直接観測	ARUPS	名古屋工業大学大学院工学研究科	宮崎 秀俊
Theoretical Studies on the Catalytic Reactions on Nanoclusters, and Effect of Substrate Adsorption on the Stabilities of Nanoparticles	量子計算	International Institute of Information Technology	U. Deva Priyakumar
硬度を変化させた細胞培養用 PDMS シートの開発	装置開発	岡崎統合バイオサイエンスセンター	富田 拓郎
免疫調節活性を持つ分子の構造解析	920MHz NMR 600MHz NMR	慶應義塾大学理工学部	藤本ゆかり
インドールブレニル基転移酵素の NMR 解析	920MHz NMR 600NMR 固体	富山大学和漢医薬学総合研究所	森田 洋行
<i>Spirulina platensis</i> の高磁場固体 NMR による構造解析	920MHz NMR 600NMR 固体	東京工業大学フロンティア研究機構	鎌田 香織
カーボンブラック充填ポリイソブレンゴムの超高磁場固体 NMR による構造解析	920MHz NMR 600NMR 固体	防衛大学校応用化学科	浅野 敦志
ナノポーラス非晶質アルミナの構造解析	無機材料	工学院大学先進工学部	橋本 英樹
結晶性イオン導電材料の結合状態解析	無機材料	東京工業大学総合理工学研究科	鈴木 耕太
赤痢菌エフェクターによる宿主防御応阻害機構の解析	920MHz NMR 800MHz NMR	兵庫県立大学大学院生命理学研究科	水島 恒裕
フォトクロミズムを示す液晶性ピオロゲンの電気化学測定	無機材料	東京理科大学理学部	中 裕美子
非弾性散乱トンネル電流による有機伝導体単結晶表面の局所励起	金属錯体	関西学院大学理工学部	田中 大輔
蒸着法によるリチウム二次電池用 Li 金属負極の開発	無機材料	三重大学大学院工学研究科	松田 泰明
架橋アゾベンゼン液晶高分子の極低温における光屈曲挙動の解明	有機 FET	中央大学研究開発機構	宇部 達
縮環 π 電子系化合物の励起状態構造およびエネルギー計算	量子計算	名古屋工業大学大学院物質工学専攻	高木 幸治
光学測定用歪み導入機構	装置開発	早稲田大学理工学術院先進理工学部	竹延 大志
磁性絶縁体 / トポロジカル絶縁体薄膜ヘテロ構造・超格子の電子状態	ARUPS	東京工業大学大学院理工学研究科	平原 徹
閾値光電子磁気円二色性を用いたチタン酸化物の表面・界面強磁性に関する研究	磁性薄膜	東京大学物性研究所	谷内 敏之
標的結合ペプチドのゆらぎを制御する足場タンパク質の分子基盤解明	920MHz NMR 800MHz NMR	東京工業大学生命理工学研究科	門之園哲哉
高磁場 NMR を用いた薬剤・生体分子複合体の構造解析	920MHz NMR 800MHz NMR	浜松医科大学医学部	近藤 豪
HECT ユビキチンリガーゼによるユビキチン鎖重合の分子基盤	920MHz NMR 800MHz NMR	名古屋大学環境医学研究所	増田 雄司
有機半導体・無機半導体界面のエネルギー準位接合波数分解測定	ARUPS	千葉大学大学院融合科学研究科	吉田 弘幸
Theoretical Studies on the Reaction Mechanism of Fullerenes and Metallofullerenes	量子計算	Institute for Chemical Physics and Xi'an Jiaotong University, China	Xiang Zhao (趙翔)
ナノカーボン (グラフェン・カーボンナノチューブ) とポリマーのコンポジット材料における電子励起状態研究	量子計算	関西学院大学理工学部	尾崎 幸洋
二ホウ化物薄膜上エピタキシャルゲルマネンの電子状態測定	ARUPS	北陸先端科学技術大学院大学マテルアルサイエンス研究科	高村由起子

(2) 施設利用

課 題 名	支援機器等	代 表 者
水素結合性磁性体の合成, 構造解析および磁性研究	ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7 600NMR 固体 ラマン FT	名古屋市立大学大学院システム自然科学研究科 藤田 渉
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 上田 忠治
ラマン分光法による骨粗鬆症モデルの解析	ラマン	愛媛大学大学院医学系研究科 大嶋 佑介
多周波 ESR 法による祖先型光合成反応中心の反応解析	ESR E680	大阪大学蛋白質研究所 武藤 梨沙
白金族触媒からの単層カーボンナノチューブ作製と構造評価に関する研究	ラマン ESCA TEM SEM FIB 低 SEM	名城大学理工学部 丸山 隆浩

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 新規電子供与体を成分とする導電性有機材料の構造と物性に関する研究 NMR 装置を用いたタンパク質複合体および複合糖質の構造解析	ESR E680 SQUID-XL7 920NMR 800NMR 600NMR 固体 iTC200	名古屋大学理学研究科 愛媛大学大学院理工学研究科 名古屋市立大学大学院薬学研究科	三野 広幸 白旗 崇 矢木 宏和
ドーブ型 BiFeO ₃ ナノ粒子の合成及び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
金属錯体分子の相転移挙動解析	SQUID-MS7 SQUID-XL7 ラマン	九州大学先端物質化学研究所	姜 舜徹
グラフェン壁を有する三次元構造体の触媒担体への応用	ラマン TEM SEM 低 SEM	名城大学理工学部	才田 隆広
Co ₂ FeAl ナノ粒子, FeNi 細線, (Eu,In)-YAIG の磁気的性質の解明	SQUID-MS7 SQUID-XL7 蛍光分光	岐阜大学工学部	嶋 睦宏
多層膜希薄磁性半導体の磁化測定	SQUID-MS7 SQUID-XL7	(独)産業技術総合研究所	安本 正人
多次元磁気格子を形成する有機ラジカル磁性体の低温磁気構造解明	ESR E500 ESR EMX	大阪府立大学大学院理学系研究科	細越 裕子
新規ナノマテリアルの構造および物性評価	ESR E500 ESR EMX 920NMR ラマン ARUPS ESR E680	法政大学生命科学部	緒方 啓典
Pd-Si-(希土類)系準結晶および近似結晶の磁気秩序	SQUID-MS7 SQUID-XL7	北海道大学大学院工学研究院	柏本 史郎
窒化硼素層間化合物の物性	ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7 ラマン	兵庫県立大学大学院物質理学研究科	小林 本忠
金属ナノクラスターにおける構造変遷及び安定化起源の解明 MgB ₂ 超伝導線材の超伝導特性におけるボロン同位体原料粒径の効果	TEM SQUID-MS7 SQUID-XL7 熱分析 VP-DSC iTC200	東京理科大学理学部 核融合科学研究所	根岸 雄一 菱沼 良光
大気圧 CVD による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 新規ナノ磁性体およびマルチフェロイクスの磁気物性	TEM ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	名城大学理工学部 広島大学大学院理学研究科	小澤 理樹 井上 克也
BNC 薄膜のスピン트로ニクス 1,2,3- トリアゾール含有シッフ塩基配位子を用いた金属錯体の結晶構造と磁気的性質の解明	SQUID-XL7 SQUID-MS7 SQUID-XL7 CCD-1 CCD-2 CCD-3	静岡大学工学部 岐阜大学教育学部	小林健吉郎 萩原 宏明
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装置の開発	FIB	名古屋大学グリーンモビリティ連携研究センター	宇理須恒雄
酸素貯蔵 - 放出能を持つ 3d 金属酸化物担持触媒の構造解析	TEM SEM 低 SEM	名古屋大学大学院理学研究科	邨 次 智
PLD 法により作製した CaF ₂ 薄膜特性評価	ラマン FT FIB SEM 低 SEM ピコ秒 ナノ秒 YAG 蛍光分光 可視紫外	名古屋工業大学大学院機能工学専攻	小野 晋吾

超分子の示す磁性に関する研究	ESR E680 ESR EMX ESR E500 SQUID-MS7 SQUID-XL7	京都大学国際高等教育院	加藤 立久
MMX 型構造を有するベンズアミジナート架橋二核金属錯体の構造解析と磁化率測定	SQUID-MS7 SQUID-XL7 CCD-1 CCD-2 CCD-3	島根大学大学院総合理工学研究科	片岡 祐介
単一分子性伝導体の開発	SQUID-MS7 SQUID-XL7	日本大学文理学部	周 彪
スパッタ法により形成された単結晶イットリウム鉄ガーネットのダンピング定数に関する研究	ESR E500 ESR EMX SQUID-MS7 SQUID-XL7	豊橋技術科学大学電気・電子情報工学系	後藤 太一
生体分子と薬剤の相互作用評価	iTC200 円二色性	浜松医科大学医学部	近藤 豪
ねじれたポルフィリン金属錯体の磁氣的相互作用の研究	ESR E680 ESR E500 ESR EMX SQUID-MS7 SQUID-XL7	名古屋大学大学院工学研究科	忍久保 洋
SU6600 と Bruker QUANTAX FlatQUAD EDS による炭素質隕石素片観察	SEM	国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構	上梶 真之
新規ポルフィリン，フタロシアニン鉄 (III) およびオキシドバナジウム (IV) 錯体の磁氣的性質	ESR E500 SQUID-MS7 CCD-3	島根大学大学院総合理工学研究科	池上 崇久
混合原子価状態を有するロジウムとルテニウムの二核錯体の構造および磁氣的性質の研究	SQUID-XL7 SQUID-MS7 CCD-1 CCD-2	島根大学大学院総合理工学研究科	井手 雄紀
有機化合物の低温における結晶構造と光物性との関連性に関する研究	CCD-3	東京大学生産技術研究所	務台 俊樹
部位特異的変異を導入した好熱性紅色細菌由来光捕集 1 複合体の熱力学的解析	VP-DSC iTC200	神戸大学大学院農学研究科	木村 行宏
エピタキシャルグラフェンの評価	ラマン	大阪大学産業科学研究所	田中慎一郎
金属ポルフィリノイド錯体を含む人工金属酵素の電子状態解析	ESR EMX	大阪大学大学院工学研究科	大洞 光司
ポリイミドフィルム上に堆積した CoTTDPz 分子薄膜の構造制御	SEM 低 SEM	名古屋大学物質科学国際センター	江口敬太郎
ガーネットシンチレーターのシンチレーション特性に及ぼす二価金属イオンドーピングの効果	ESR EMX ESR E500	山形大学理学部	北浦 守
核磁気共鳴法を活用した酵素複合体の構造・ダイナミクス・相互作用の解析	800NMR	Kasetsart University (タイ)	Supa Hannongbua
溶媒熱合成法を用いた金属ポルフィリン超分子の構造と磁性	SQUID-MS7 SQUID-XL7	城西大学理学部	秋田 素子
貴金属薄膜のレーザー加工とその光特性評価	ラマン FT 低 SEM ピコ秒 ナノ秒 YAG 可視紫外	早稲田大学	井村 考平
小惑星イトカワの微粒子の微細表面観察と元素分布分析	低 SEM	宇宙科学研究所	松本 徹
光センサーとアンテナ分子の相互作用解析	iTC200	日本大学生物資源科学部	高野 英晃
X 線結晶構造解析による分子構造の決定	CCD-1 CCD-2 CCD-3	豊橋技術科学大学環境・生命工学系	藤沢 郁英
カルコゲナイド半導体ナノ粒子の発光特性に関する研究	蛍光分光 可視紫外	名古屋工業大学大学院物質工学専攻	濱中 泰
硫化銅ナノ粒子の近赤外局在プラズモン共鳴における光学非線形性の研究	ピコ秒 可視紫外	名古屋工業大学大学院物質工学専攻	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	CCD-1 CCD-2 CCD-3	愛知学院大学薬学部	小川 法子
キレートカルベン金属錯体の合成と構造解析	CCD-1 CCD-2 CCD-3 粉末 X 線	静岡大学理学部	仁科 直子

自己凝集能を導入した有機半導体の光吸収と分子配列の解明	CCD-1 CCD-2 CCD-3	静岡大学工学部	植田 一正
メタ位に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-MS7 SQUID-XL7	城西大学理学部	秋田 素子
放射性物質回収用吸着剤の加工	FIB	日本原子力研究開発機構	佐野 雄一
酸化劣化に伴うゴム構造変化の解析法に関する研究	920NMR	横浜ゴム(株)	八柳 史
新規機能性物質の磁気機能解明研究	ESR EMX ESR E500 ESR E680 SQUID-MS7 SQUID-XL7	新潟大学研究推進機構	古川 貢
金属ナノ粒子担持型グラフェンオキサイドの化学状態分析	ESCA 低 SEM	関西学院大学理工学部	橋本 秀樹
EPR による鉄硫黄クラスター生合成タンパク質郡が構成する超分子複合体の解析	ESR EMX ESR E500	埼玉大学大学院理工学研究科	藤城 貴史
有機ピラジカルドーブ試料の ESR 緩和時間測定	ESR E680	京都大学化学研究所	梶 弘典
電場応答スピン転移錯体の開発	CCD-3	九州大学大学院総合理工学府	中西 匠
超広帯域光電変換を実現する III 族窒化物薄膜の電子 - 格子相互作用の解明	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
キネシン Eg5 と阻害剤の熱分析	iTC200	静岡県立大学薬学部	横山 英志
核内受容体と低分子の相互作用に関する研究	iTC200 蛍光分光	岡山大学大学院医歯薬学総合研究科	加来田博貴
磁気光学薄膜および複合体の磁気的性質の研究	ESR E500 SQUID-MS7	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
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装置の開発	FIB	名古屋大学グリーンモビリティ連携研究センター	宇理須恒雄
常磁性異種金属一次元鎖錯体の磁気物性評価	SQUID-MS7 SQUID-XL7 CCD-1 CCD-2 CCD-3	岐阜大学工学部	植村 一広
含ヨウ素ドナー分子 (EDO-TTF-I) を用いた陽イオンラジカル塩の結晶構造解析と振動分光学的研究	ラマン CCD-3	京都大学低温物質科学研究センター	中野 義明
光合成タンパク質間相互作用の機構解明	VP-DSC iTC200	茨木大学理学部	大友 征宇
曲面 π 分子上に発生させたカルベンの磁気的性質の解明	SQUID-MS7 SQUID-XL7	広島大学大学院理学研究科	安倍 学
レーザー応答性薬物ナノキャリアを用いた新規ドラッグデリバリーシステムの開発	ピコ秒 可視紫外	名古屋市立大学大学院薬学研究科	田上 辰秋
蛋白質針の示差熱量測定	VP-DSC	岡崎統合バイオサイエンスセンター	石井健太郎
シッフ塩基金属錯体と種々の複合系の円偏光紫外光誘起分子配向	円二色性	東京理科大学理学部	秋津 貴城
モノクロロ EDO-TTF(EDO-TTF-Cl) の陽イオンラジカル塩の X 線構造解析とラマン分光	ラマン CCD-3	京都大学低温物質科学研究センター	石川 学
高分子保護金属クラスターの電子状態に関する測定	ESCA	大阪大学大学院工学研究科	櫻井 英博
甲状腺の形態形成とヨウ素集積機能の進化に関する研究	低 SEM	東京大学理学系研究科	窪川かおる
ヨウ素添加イオン液体の低温核磁気共鳴測定	600NMR 液体	防衛大学校機能材料工学科	青野 祐美
紫外光照射によるアミノ酸の不斉合成	ナノ秒フッ素系 ナノ秒エキシマ ナノ秒 YAG	広島大学理学研究科	平谷 篤也
固相相変態を用いたナノグラニューラー磁性体の作製と組織及び磁気特性の検討	SQUID-MS7 SQUID-XL7	横浜国立大学大学院工学研究院	竹田真帆人
有機半導体素子の電子スピン物性	ESR E680	大阪市立大学大学院理学研究科	鐘本 勝一
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	佐野 雄一
UVSOR(STXM) による微生物—鉱物付着面のナノオーダー分析に基づいたバイオリチング機構の詳細解明	UVSOR(STXM)	静岡県立大学環境科学研究所	光延 聖
UVSOR(STXM)-NEXAFS を用いたはやぶさの炭素質汚染物質の特性記載，及びはやぶさ 2 にむけた有機物分析および汚染評価手法の確立	UVSOR(STXM)	国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構	上 梶 真之
アポトーシス細胞核の高分解能分子マッピング	UVSOR(STXM)	東海大学工学部	伊藤 敦
生体試料の三次元構造観察を目指した投影型軟 X 線顕微鏡システムの開発	UVSOR(STXM)	東海大学工学部	伊藤 敦
UVSOR(STXM) 法を用いたエアロゾル粒子中の硫酸塩の化学種と分布状態の解明	UVSOR(STXM)	東京大学大学院理学系研究科	高橋 嘉夫

隕石有機物の高速衝突変性に関する UVSOR(STXM) 研究：国際宇宙ステーションでの宇宙塵採集計画に向けて	UVSOR(STXM)	大阪大学大学院理学研究科	藪田 ひかる
燃料電池の動作条件下における構造・化学状態変化の観察	UVSOR(STXM)	分子科学研究所	大東 琢治
赤外レーザーを用いた Carbon Nano Tube 単体の分析法の開発	UVSOR(STXM)	分子科学研究所	大東 琢治
Studies of Nanocarrier Mediated Drug Uptake into Cells and Skin	UVSOR(STXM)	Freie University Berlin	Eckart Rühl
Influence of the Oxygen Vacancy at (Ta,Cu,Al,Ag)/TaO _x Interface on Resistive Switching Memories	UVSOR(STXM)	Tamkang University,Taiwan	Way-Faung Pong
Morphological Control of Perovskite Film for High Efficient, Solution-Processable Perovskite Solar Cells	UVSOR(STXM)	National Synchrotron Radiation Research Center (NSRRC)	Yao-Jane Hsu
UVSOR(XMCD) を用いた遷移金属合金界面における異方的軌道磁気モーメントと垂直磁気異方性の相関に関する研究	UVSOR(XMCD)	東京大学大学院理学系研究科	岡 林 潤
強磁性薄膜上ラジカル分子の磁気特性に関する研究	UVSOR(XMCD)	名古屋大学物質科学国際センター	江口 敬太郎
原子層窒化鉄薄膜と磁気結合した磁性ナノドットに関する研究	UVSOR(STXM)	東京大学物性研究所	宮町 俊生
操作型透過X線顕微鏡 (UVSOR(STXM)) を用いた微生物による地殻内エネルギー獲得戦略の解明	UVSOR(STXM)	静岡県立大学環境科学研究所	光 延 聖
はやぶさ汚染試料の NEFXAFS による記載と試料ダメージの推定	UVSOR(STXM)	国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構	上 梶 真之
生体試料における高分解能分子マッピングの高精度化の試み	UVSOR(STXM)	東海大学工学部	伊 藤 敦
三次元生体試料観察を目指した投影型軟X線顕微鏡光学系の構築	UVSOR(STXM)	東海大学工学部	伊 藤 敦
UVSOR(STXM) を用いた南極雪宇宙塵の局所有機物分析	UVSOR(STXM)	大阪大学大学院理学研究科	藪田 ひかる
炭素質隕石中の有機物の同定分析およびダメージ評価	UVSOR(STXM)	宇宙科学研究所	中藤 亜衣子
温度・湿度環境セルを用いた燃料電池の動作・劣化プロセスの研究	UVSOR(STXM)	分子科学研究所	大東 琢治
Single Wall Carbon Nano Tube の海面活性剤 in-situ クリーニング法の開発	UVSOR(STXM)	分子科学研究所	大東 琢治
Studies on Drug Uptake into Cells and Skin	UVSOR(STXM)	Freie University Berlin	Eckart Rühl
Lithium Induced Defect Levels in ZnO Nanoparticles to Facilitate Electron Transport in Inverted Organic Photovoltaics	UVSOR(STXM)	Tamkang University,Taiwan	Way-Faung Pong
Microwave-Assisted Hydrothermal Synthesis of NiO Spheres for Efficient Photovoltaics of CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /PCBM PHJ Solar Cells	UVSOR(STXM)	National Synchrotron Radiation Research Center (NSRRC)	Yao-Jane Hsu
UVSOR(STXM) による液液界面の顕微 XAS 観察	UVSOR(STXM)	分子科学研究所	長 坂 将成
反強磁性超薄膜と交換結合した強磁性原子層窒化鉄薄膜に関する研究	UVSOR(XMCD)	東京大学物性研究所	宮町 俊生
W(112) 上の Co および Fe ナノ構造の UVSOR(XMCD) 測定	UVSOR(XMCD)	九州大学大学院総合理工学府	中 川 剛志
Effect of Carbon Substitution on the Magnetic Properties of Nano-Architectural ZnO	UVSOR(XMCD)	Tamkang University,Taiwan	Way-Faung Pong
Co/Pd 多層膜における Co L 吸収端, Pd M 吸収端の UVSOR(XMCD) による垂直磁気異方性の起源の解明	UVSOR(XMCD)	東京大学大学院理学系研究科	岡 林 潤
半導体表面超構造上に形成した遷移金属フタロシアニン単分子層の磁気特性	UVSOR(XMCD)	物質・材料研究機構	吉 澤 俊介
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
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装置用基盤製作	マイクロスト ラクチャー	名古屋大学グリーンモビリティ 連携研究センター	宇理 須恒雄
温度可変遠赤外吸収セル	マイクロスト ラクチャー	神戸大学分子フォトサイエンス 研究センター	富 永 圭介
フェムト秒レーザー照射によるシリコン表面のアブレーションしきい値測定	マイクロスト ラクチャー	東京農工大学大学院工学研究院	宮 地 悟代
In situ 走査型顕微 XAFS 法による Pt 担持 Ce ₂ Zr ₂ O _x 触媒の Ce 酸化状態分布の可視化	マイクロスト ラクチャー	名古屋大学大学院理学研究科	松 井 公佑
マイクロ流体デバイスを用いた生体由来物質の検出	マイクロスト ラクチャー	北海道大学大学院工学研究院	真 栄城正寿
ガラス流路の作製	マイクロスト ラクチャー	愛知教育大学教育学部	日 野 和之
硬度を変化させた細胞培養用 PDMS 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

(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 27 年度は UVSOR(STXM) 5 件, SEM・TEM・920NMR・600NMR 固体 1 件, ナノ秒 1 件, マイクロストラクチャー 1 件が採択された。業種別内訳は大企業 8 件であった。

表3 2015年度（平成27年度）利用件数一覧（平成27年4月～12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
採択件数	43	121	8
実施件数	43	120	8
実施日数	635	1389	29

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

スーパーコンピュータ「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年度より活動を開始し、平成27年度で5年間の活動を完了した。

(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27年度を中心に5年間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

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（阪大院基礎工）
	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）
	バイオマス利用のための酵素反応解析
	代表者：吉田 紀生（九大高理）

図2 TCCI で支援する特別支援課題

5-6-2 TCCI の活動について

(1) 推進体制について

今年度の推進体制を図3に示す。左側は、研究部門であり、特別支援課題、重点課題を支援するための組織である。支援を行う研究員・教員の配置を図4に示す。図3の右側が、TCCIとしての執行部門であり、各先生にお願いして拠点として必要な活動を分担して頂いている（図5）。その多くは、上部組織であるCMSIの小委員会の機能に対応するもので、TCCIの責任者は、CMSIの委員も兼務して、CMSIとTCCIで風通しのよい活動をねらっている。特に執行の要となる運営委員会では、これらの執行部門と前記の部会の分子科学の責任者などから構成し、TCCIの運営に必要な審議・決定を行うようにしている。

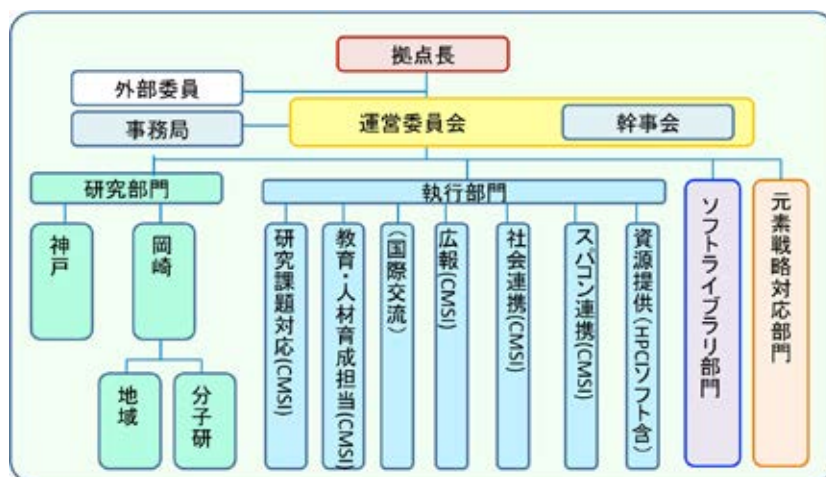


図3 計算分子科学研究拠点 (TCCI) 体制



*:教員
()内は員数を示す。

図4 CMSI 研究員・教員配置

会議体	委員(○委員長または責任者)
運営委員会 (3ヶ月に1回)	○高塚、天能、信定、岡崎、山下、長岡、関野、奥村、柳井、斉藤、江原、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	-
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	-
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 27 年度の活動について

人材育成・教育

TCCI では、CMSI の人材育成・教育活動の一環として、図 6 - 1 から図 6 - 4 までの教育コースを企画推進、或いは共催した。平成 27 年度、超並列化技術国際ワークショップは、CMSI 若手国際ワークショップと合わせて実施することにより、昨年同様 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。

平成 27 年度も人材育成の一環として、国際 HPC サマースクールに研究員 1 名を派遣した（図 6 - 5 ）。

平成 27 年度、阪大が中心となって計算科学技術特論 A（ネットワーク配信）が上期に開催され、下期には東大を中心にソフト開発者のための計算科学技術特論 C が開講され、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。

行事名	開催日程	場所
第15回分子シミュレーション夏の学校	2011年9月9日（金）～11日（日）	岡山大学理学部附属牛窓臨海実験所（岡山県）
	講師4名、参加者27名（内、民間企業0名）	
第52回分子科学若手の会夏の学校	2012年8月20日（月）～24日（金）	東京大学本郷キャンパス（東京都）
	講師7名、参加者103名（内、民間企業0名）、特別企画を中心に支援	
第16回分子シミュレーション夏の学校	2012年9月6日（木）～8日（土）	慶應義塾 立科山荘（長野県）
	講師3名、参加者52名（内、民間企業1名）	
第17回分子シミュレーション夏の学校	2013年9月2日（月）～4日（水）	湯沢ニューオータニホテル（新潟県）
	講師3名、参加者42名（内、民間企業6名）	
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24名（内、民間企業2名）	
第19回分子シミュレーション夏の学校	2015年9月2日（水）～4日（金）	美浜・海鮮料理旅館かざりや（愛知県）
	講師3名、参加者34名（内、民間企業3名）	

図 6-1 人材育成・教育
CMSI 人材育成・教育の一環として企画・実施
夏の学校をサポート

行事名	開催日程	場所
第5回分子シミュレーションスクール ー基礎から応用までー	2011年12月12日（月）～15日（木）	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9名）	
第6回分子シミュレーションスクール ー基礎から応用までー	2012年12月11日（火）～14日（金）	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター（岡崎市）
	講師15名、参加者89名（内、民間企業9名）	
第7回分子シミュレーションスクール ー基礎から応用までー	2013年10月23日（水）～25日（金）	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター（岡崎市）
	講師15名、参加者86名（内、民間企業22名）	
第8回分子シミュレーションスクール ー基礎から応用までー	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90名（内、民間企業12名）	
第9回分子シミュレーションスクール ー基礎から応用までー	2015年10月13日（火）～16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76名（内、民間企業10名）	

図 6-2 人材育成・教育
CMSI 人材育成・教育の一環として企画・実施
「TCCI ウィンターカレッジ——分子シミュレーション」としてサポート

行事名	開催日程	場所
第1回量子化学ウインタースクール ～基礎理論を中心として～	2011年12月19日(月)、20日(火) 講師5名、参加者44名(内、民間企業5名)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター(岡崎市)
第2回量子化学ウインタースクール ～基礎理論と生体系の理論～	2012年12月17日(月)、18日(火) 講師5名、参加者52名(内、民間企業0名)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター(岡崎市)
第3回量子化学ウインタースクール ～基礎理論と分子物性の理論～	2013年12月16日(月)、17日(火) 講師5名、参加者45名(内、民間企業7名)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター(岡崎市)
第4回量子化学ウインタースクール ～大規模系を目指した基礎理論～	2014年12月15日(月)、16日(火) 講師5名、参加者数42名(内、民間企業2名)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター(岡崎市)
第5回量子化学ウインタースクール ～基礎理論～	2015年11月16日(月)、17日(火) 講師5名、参加者数61名(内、民間企業4名)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター(岡崎市)

図 6-3 人材育成・教育
CMSI 人材育成・教育の一環として企画・実施
「TCCI ウィンターカレッジ：量子化学」としてサポート

行事名	開催日程	場所
International Workshop on Quantum Chemistry Massively Parallel Programming Now in Supercomputers	2012年2月28日(火) 参加者61名(内、民間企業11名)	東大駒場ファカルティハウス(目黒区)
2nd International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Molecular Science	2013年1月28日(月) 参加者51名(内、民間企業5名)	早稲田大学理工学部(新宿区)
3rd International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Molecular Science	2014年2月4日(火) 参加者35名(内、民間企業4名)	東大山上会館(文京区)
4th International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics – Toward post-K computers	2014年11月23日(日)、24日(月) 参加者42名(内、民間企業4名)	東大工学部6号館64講義室(文京区)
5th International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics – Toward exascale computing (CMSI若手国際WS兼)	2015年11月26日(木)、27日(金) 参加者36名(内、民間企業0名)	東大工学部6号館セミナー室AD 東大工学部8号館84講義室(文京区)

図 6-4 人材育成・教育
CMSI 人材育成・教育の一環として企画・実施
International Workshop on Massively Parallel Programming Now

参加者(所属)氏名、職名	開催日程	場所
(名大)安藤 嘉倫、特任研究員※	2013年6月23日～30日	ニューヨーク大学 (米国)
(慶応大)野村昂太郎、大学院生	2014年5月31日～6月8日	ブダペスト工科大学 (ハンガリー)
(東北大)Wilfredo Credo Chung、産学官連携研究員	2015年6月21日～26日	トロント大学 (カナダ)

※ 職名は派遣当時のもの

図 6-5 人材育成・教育
International Summer School on HPC Challenges in Computational Sciences へ派遣

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 - 1 から図 7 - 3 に示す研究会・シンポジウムを開催した。平成 27 年度については以下の通り。

行事名	開催日程	場所
TCCI第1回研究会	2011年2月4日(金)、5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: 106名(内、民間企業12名)	
TCCI第2回研究会	2011年8月11日(木)、12日(金)	理研計算科学研究機構(AICS) 6F 講堂 (神戸市)
	参加者数: 96名(内、民間企業11名)	
TCCI第3回研究会	2012年10月9日(火)、10日(水)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター (岡崎市)
	参加者数: 80名(内、民間企業4名)	
TCCI第4回研究会 (実験化学との交流シンポジウム兼)	2013年9月10日(火)、11日(水)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター (岡崎市)
	参加者数: 74名(内、民間企業8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: 73名(内、民間企業5名)	
TCCI第6回研究会 (実験化学との交流シンポジウム兼)	2016年3月14日(月)、15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)
	参加者数: 69名(内、民間企業4名)	

図 7-1 TCCI 研究会
全体シンポジウムとして開催

行事名	開催日程	場所
TCCI第1回実験化学との交流シンポジウム	2011年11月10日(木)～11日(金)	京都大学 福井謙一記念研究センター (京都市)
	参加者数: 85名(内、民間企業5名)	
TCCI第2回実験化学との交流シンポジウム	2012年11月16日(金)～17日(土)	京都大学 福井謙一記念研究センター (京都市)
	参加者数: 85名 (内、民間企業6名)	
TCCI第3回実験化学との交流シンポジウム	2013年11月5日(火)、6日(水)	京都大学 福井謙一記念研究センター (京都市)
	参加者数: 61名(内、民間企業3名)	

※ 第4回以降は、TCCI研究会に併合

図 7-2 実験化学との交流シンポジウム

行事名	開催日程	場所
TCCI第1回産学連携シンポジウム	2011年11月24日(木)	野村コンファレンスプラザ日本橋、5階 大ホール (東京都中央区)
	参加者数: 66名(内、民間企業28名)、民間企業役員2名が講演	
TCCI第2回産学連携シンポジウム 「大学の何が役に立ったか? 卒業生に聞く」	2013年1月24日(木)	大阪大学 中之島センター (大阪市)
	参加者数: 67名(内、民間企業31名)	
TCCI第3回産学連携シンポジウム 「HPCの利用と成果と人材」	2014年1月31日(金)	名古屋大学 野依記念学術交流館 (名古屋市)
	参加者数: 68名(内、民間企業16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(共同開催) 「触媒研究開発における理論・計算化学の貢献について」	2015年1月23日(金)	東京大学 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)	
TCCI第5回産学連携シンポジウム／ 産応協第34回産応協スパコンセミナー／ 計算物質科学人材育成コンソーシアム(分子科学)(共同開催) 「次世代電池」(ポストLIB)の取り組みについて	2016年1月19日(火)	東京大学 武田ホール(東京都文京区)
	参加者数: 66名(内、民間企業36名)	

図 7-3 産学連携シンポジウム

- TCCI 第 6 回研究会：TCCI の全体シンポジウムである第 6 回研究会を最終報告会として 3 月に岡崎コンファレンスセンターで開催した。今年度も、「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 4 名の他、関係機関からの来賓を含めて合わせて 10 名の方々に招待講演をお願いし、TCCI からの成果報告

11件を行った。活発な議論は勿論のこと、併せて実験サイドから、また、高所・大所からコメントを頂いた。

- TCCI 第5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。平成27年度は、「次世代電池」(ポストLIB)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)及び平成27年度から始まった計算物質科学人材育成コンソーシアムと、共同で開催した。また、京大触媒・電池元素戦略拠点(ESICB)も協賛を頂き、ESICBからのご講演に加えて、民間企業の事例紹介として豊田中研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、昨年度同様、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。

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%の提供して、研究推進に貢献してきた。

基盤ソフト(分子科学アプリ)の普及に向けて(図8)

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、平成27年度も維持した。

アウトリーチ活動について

3年に一度開催される分子研の一般公開において、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」(3次元CG)及び「メタンハイドレートの分解(純水と塩水中の比較)」(3次元CG)をその解説ポスターとともに展示し、小学生を含む多くの一般国民に対し成果として紹介した。

- ・ 2014年分子研一般公開、10月17日(土)

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	(阪大)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。

5-6-3 謝辞

本プロジェクトで計画以上の成果を挙げることができた。これは一重に関係者の皆様のご尽力の賜物であり、深く感謝したい。また、本プロジェクトが、次のポスト「京」や、分子科学分野に必要な技術・人材の養成に、少しでもお役に立てたとすれば幸甚である。人材育成、実験化学との交流及び産学連携は、今後も重要と思われるため、何かの形で継続して頂くよう是非お願いしたい。

5-7 ポスト「京」重点課題

「エネルギーの高効率な創出，変換・貯蔵，利用の新規基盤技術の開発」 (文部科学省)

5-7-1 はじめに

「京」コンピュータの後継機を開発するための文部科学省「フラッグシップ2020」(通称：ポスト「京」)が，平成27年2月より開始された。このプロジェクトは，最先端のスーパーコンピュータを開発するプロジェクトであり，システムとアプリケーションを協調的に開発し，我が国が直面する社会的・科学的課題(健康長寿，防災・減災，エネルギー，産業競争力，基礎科学の重点9課題)の解決に貢献するものである。

・ 予定期間：平成26年度～31年度，システムとアプリケーションの開発。

[平成32年度～，運用・利用研究(別プロジェクトを予定)]

・ 実施機関：- ポスト「京」システム開発：理化学研究所(富士通)

- 重点課題研究：9課題を国が定めて実施機関を公募し，決定。

平成26年4月～8月，文科省検討委員会で課題決定。

平成26年10月公募開始，平成26年12月採択決定。

従来から「京」を研究に利用していた研究者を中心に，分子研が責任機関となりエネルギー課題の一つに応募したところ，幸い採択された。以下，この重点課題 について紹介する。

5-7-2 重点課題 研究課題について

ポスト「京」を駆使することにより，太陽電池，人工光合成による新エネルギーの創出・確保，燃料電池，二次電池によるエネルギーの変換・貯蔵，また，メタンやCO₂の分離・回収，貯蔵，触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用など，太陽光エネルギー，電気エネルギーや化学エネルギーにおいて中心的な役割を担う複雑で複合的な分子・物質過程に対する電子・分子レベルでの全系シミュレーションを行い，実験研究者，産業界と連携して，高効率，低コスト，また環境に優しく持続可能なエネルギー新規基盤技術を確立する。

同時に，これまで計算機資源の不足により制限されていた孤立系や部分系における単一現象の科学から脱却し，現実系である界面，不均一性を有する電子，分子の複合現象を統合的に捉え得る新しい学術的視点を確立し，科学的なブレークスルーを達成する。

(1) サブ課題A 新エネルギー源の創出・確保——太陽電池，人工光合成

高効率太陽光エネルギー変換による新エネルギー源の創出を目指す。スピンの組み換えを含む天然・人工光合成系の素反応から物質設計までを取り扱える統合的な計算手法を確立し，水分解反応の本質解明と新エネルギー創出に有望な物質探索を行う。また，太陽電池の物質設計とモルフォロジー・界面の制御に貢献できるシミュレータの開発を行い，スピン制御や熱電変換などの新機構に基づく高効率太陽電池を実現することにより，次世代のエネルギー資源の創出に貢献する。

(2) サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵——燃料電池，二次電池

第一原理電子状態理論に基づく電極反応の計算と分子動力学法に基づく電解質，セパレータの計算を統合させ，個々の部材の性能に加えて，システムとしての二次電池の充放電曲線や燃料電池の電流電圧曲線を予測し，信頼性の向上

に貢献できる手法を確立する。これを用いて次世代・次々世代電池技術の重要問題に挑戦し、蓄電・水素エネルギー社会の実現に貢献する。

(3) サブ課題C エネルギー・資源の有効利用——メタン、CO₂、高効率触媒

化学エネルギー創成から消費に至る過程において、メタンやCO₂の分離・回収、貯蔵、触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用に関わる基盤技術を開発する。そのために、電子状態理論と分子動力学法を基盤とした統合シミュレーション技術を構築し、実用的な物質設計に向け分子レベルからの指針を供する。ハイドロートの有効利用、高効率触媒の開発、CO₂の回収・分離に貢献することにより、エネルギー多消費型工業プロセスを革新する。

(4) 基盤アプリの開発

ポスト「京」を有効に活用し、国家的に取り組むべき社会的・科学的課題の解決に資するアプリケーションを開発するため、本重点課題では4つの基盤アプリケーションを設定する。「京」で実効的な超並列計算の実績があり、本重点課題で共通に利用できる観点から、量子化学計算プログラム (NTChem, GELLAN)、分子動力学計算プログラム (MODYLAS)、第一原理計算プログラム (stat-CPMD) の4つを基盤アプリケーションとし、ポスト「京」での超並列計算で実効性が上がるように設計開発を行う。

5-7-3 重点課題 実施体制について

・代表機関：分子研、分担機関：10 機関

(名大×2, 東大×2, 神戸大, 理研, 物材機構, 岡山大, 北大, 早大)

課題実施者 11 名, 博士研究員 26 名 (申請数), 事務局 1 名 + 補助者 2 名

・協力機関：46 機関, 内企業 14 社 (申請時)

実施体制を図1に示す。

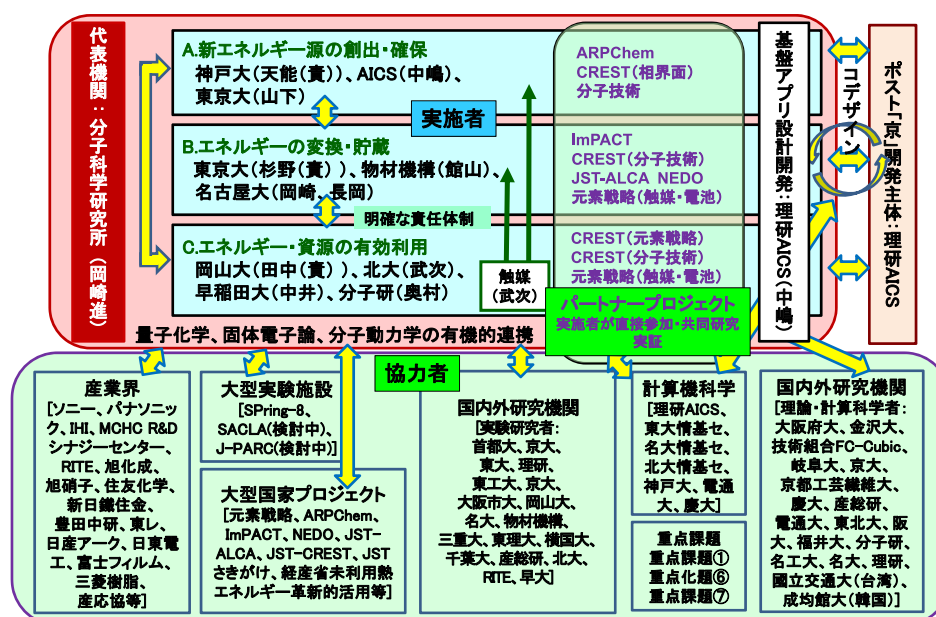


図1 実施体制

5-7-4 平成 27 年度について

平成 27 年度は、平成 26 年度に引き続いて、「調査研究・準備研究」を行い、平成 26 年度に作成した実施計画書のブラッシュアップを行った。また、3 月には第 2 回目の公開シンポジウムを行い、策定した研究計画について議論を行った。

5-7-5 今後の課題と取組みについて

本プロジェクトでは、前述のように、ポスト「京」に向けたアプリケーションプログラムを開発することが求められており、基盤アプリケーション 4 本をベースに幾つかのシミュレータを開発していく。また、アプリケーションの実証のため応用研究も行う。更に、開発したアプリケーションのアカデミア・産業界へ普及や、その利用人材の育成も行っていく計画である。

平成 28 年度からは、研究開発の本格実施フェーズに入る。この分子研リポートが出る頃には、研究員の雇用も完了し、研究開発が本格化している予定である。競合する海外の同様なプロジェクトに、成果で負けないように邁進していきたい。ご支援の程よろしく申し上げます。

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

文部科学省は、平成 20 年度より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)を進めている(<http://www.photonfrontier.net/>)。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いる。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している。

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形成している(<http://www.c-phost.jp/>)。本年度で8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、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形成されており、これら二つの異なる拠点間の交流も進んでいる。なお今年度は平成 28 年 2 月 7 日に 2 回目の中間評価が行われ、研究開発「s」;人材育成「a」;連携体制「s」;今後の展望「a」(s:非常に優れている,a:優れている)の評価結果が得られた。

平成 27 年度の分子科学研究所における活動内容を以下にまとめる。

(1) 光源要素技術の開発

超高精度量子制御技術の開発では、時空間コヒーレント制御に有効と期待される京都大学の野田進教授のフォトリソニ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した結果を報告し[*Science Advances* 1, e1400185 (2015)],さらに、回転の加速・減速を行った。

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、前年度までに開発されたサブサイクル赤外光パルスを分光に応用した。具体的には、半導体におけるキャリアの超高速ダイナミクスや急速溶液混合の様子を、赤外全域の吸収スペクトルを単一ショットで計測することによって、観測した。

マイクロドメイン制御に基づく超小型高輝度高品位レーザーの開発において、高性能 OPCPA 開発に求められるチャープ構造を世界最大の 10mm 厚の大口径疑似位相整合素子開発に作り込むことに成功した。さらにメガワット出力マイクロチップレーザーを用いて波長 1.7–2.6 μm に亘る広帯域光発生に成功した[*Opt. Express* 24, 1046 (2016)]

時空間分解顕微分光技術の開発では、10 fs 程度の時間分解能でプラズモンのダイナミクスを直接観測可能な超高速時間分解近接場イメージング装置によって、金ナノロッド中のプラズモン波束の伝搬ダイナミクスの時空間計測に成功した[*Nano Lett.* 15, 7657 (2015)]

(2) 人材育成・施設供用

人材育成では、シャリフ工科大学(イラン)・グラスゴー大学(英国)・Chimie ParisTech(フランス)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、藤准教授による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

務への東京工業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。岡本教授は韓国の朝鮮大学校で光科学に関する講義を行った。また、藤准教授は、台湾交通大学において光科学に関する講演を行い、ウィーン工科大学において博士論文の審査を行った。さらに、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京工業大学・奈良先端科学技術大学院大学・ストラスブール大学・ハイデルベルグ大学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グラスゴー大学・慶応義塾大学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、コヒーレント X 線発生、アト秒発生に重要なモノサイクル中赤外光発生に重要な大口径擬似位相整合素子を独 MPQ・スイス ETH などに協力研究の資源として提供した。

さらに、共用研究の推進に寄与する各種研究会を開催した。

5-9 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 Elements Strategy Initiative for Catalysis and Battery (ESICB) (文部科学省)

平成 24 年度に開始した「元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>」は、今年度で 4 年目を迎えた。本プロジェクトは磁石材料、触媒・電池材料、電子材料、構造材料の 4 領域から構成され、その中で触媒・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る。ここでは昨年 3 月に分子研レターズ 71 号に報告して以降の研究拠点の活動を概括する。

本プロジェクトの本年度の特筆すべきことは、10 年計画の第 1 期 3 年間を終え、中間評価を受けたことである。その評価結果を受けて、これまで進めてきた自動車排ガス浄化触媒とナトリウムイオン電池の開発を研究ターゲットとして、より先鋭化させることとなった。また、さらに効率的なプロジェクトの展開を図るために研究体制もそれに見合った形に変更することとなった。

最近の外部向け事業としては、第 6 回公開シンポジウムを 3 月 18 日に東大本郷キャンパスにて開催し、第 7 回は 9 月 25 日に京大桂キャンパスにて開催し、それぞれ 100 名以上の参加者を得た。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、昨年 12 月で 6 回を数えている。さらに内部的な研究交流会として「全体合同検討会」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。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た。合同検討会は、これまで触媒分野、電池分野別々に開催していたものだが、今回は同時に行い、両分野の共通の問題意識の醸成を図っている。また、分子研を会場として「電子論検討会」を開催し、実験分野における最新の話題を受けながら、理論研究として行うべき課題の抽出に努めている。さらに 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 10 回目を迎えている。

このようにプロジェクト内外の研究交流を積極的に行っており、実験と理論のインタープレイについては、成果として実験と理論の共著の論文も多く出てきている。今後はさらに触媒・電池開発を先導する理論計算科学の役割をより前面に押し出すことが期待され、この分野における理論計算の役割がますます重要なものとなってくると考えられる。

5-10 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。

5-10-1 分子科学アジアコア多国間国際共同事業

21世紀はアジアの時代と言われている。とくに日本をはじめとする一部のアジア諸国では学術、産業、経済などさまざまな分野において既に欧米のキャッチアップを終え、第三の極を確立しつつある。分子科学においても欧米主導の時代を離れ、新たな研究拠点をアジア地域に構築し、さらにはアジア拠点と欧米ネットワークを有機的に接続することによって、世界的な研究の活性化と新しいサイエンスの出現が期待される。

分子科学研究所では、平成18年度より平成22年度までの5年間にわたり日本学術振興会・アジア研究教育拠点事業（以下「JSPSアジアコア事業」という。）「物質・光・理論分子科学のフロンティア」を展開してきた。JSPSアジアコア事業においては分子科学研究所（IMS）、中国科学院化学研究所（ICCAS）、韓国科学技術院自然科学部（KAIST）、台湾中央研究院原子分子科学研究所（IAMS）を日本、中国、韓国、台湾の東アジア主要3カ国1地域の4拠点研究機関と位置づけ、また4拠点研究機関以外の大学や研究機関の積極的な研究交流への参加を得て、互いに対等な協働体制に基づく双方向の活発な研究交流を進めることができた。平成23年度からは上記JSPSアジアコア事業の後継として、分子研独自の予算によるIMSアジアコア事業「東アジアにおけるポスト・ナノサイエンスを指向した分子科学研究」（分子科学アジアコア多国間国際共同事業）を実施している。これは上述のJSPSアジアコア事業によって醸成したIMS-ICCAS-KAIST-IAMS相互のパートナーシップをさらに発展させ、研究者交流を深めるためのプラットフォームのプロジェクトである。とくに平成24年度からは東アジアとの学術交流は、国内研究機関との学術交流や共同利用と比較して時間的にも予算的にも大きな差異がないことから、東アジア地域との学術交流・研究会開催は原則として通常の共同利用における研究会申請において取り扱うこととし、発展的に取り扱われつつある。

平成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 Sokendai/Asian CORE Program “Research and Its Challenges in Molecular Science: Fundamentals and State-of-the-Art”』（<http://www.ims.ac.jp/aws14/index.html>）を開催した。

平成27年度は、ICCASのホストにより「2016 Winter School of the Asian Core Program “Molecular sciences for Energy, Environment, and Life”」が開催された（平成28年2月中旬、北京）。日本・韓国・中国・台湾から100人超の参加者があった。

5-10-2 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 年度は 39 名、平成 27 年度の実績は表にあるように 69 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、平成 26 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。これらの見直しにより、平成 27 年度よりアジア版 IMS-IIP として IMS-IIPA と呼んで事業化している。

	フランス	ドイツ	タイ	インド	マレーシア	中国	韓国	台湾	オーストラリア	イラン	フィンランド	イギリス	カナダ	合計
国際交流提携先からの受入	6	4	14	4	3									31
その他共同研究による受入		1	3			15	7	2	3	3	2	1	1	38
合計	6	5	17	4	3	15	7	2	3	3	2	1	1	69

2015.1-2015.12

5-10-3 その他の実施内容

分子科学研究所では、国際共同研究の拠点としての役割を果たすため、国際研究会等や、著名な研究者を海外から招きオープンセミナーを開催している。また、研究所内の教員による国際共同研究の提案を受け、所内委員による審査を経て、海外の教授、准教授クラスの研究者の招聘、若手外国研究者の招聘、などを伴う国際共同研究が推進されている。平成 16 年度 7 件、平成 17 年度 10 件、平成 18 年度 12 件、平成 19 年度 10 件、平成 20 年度 9 件、平成 21 年度 12 件、平成 22 年度 13 件、平成 23 年度 13 件、平成 24 年度 11 件、見直し後は、平成 25 年度 35 件、平成 26 年度 31 件と推移しており、平成 26 年 10 月から平成 27 年 9 月までの 1 年間は 40 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（2015 年度）
アジア連携分子研研究会	2 件（2015 年度）
海外からの研究者によるオープンセミナー	13 件（2015 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 4 年	グラスゴー大学（イギリス）	2015 年 11 月 22 日 -12 月 6 日(14 日間)
構造分子科学専攻 博士課程 4 年	エモリー大学（アメリカ）	2016 年 1 月 2 日 -3 月 30 日（88 日間）
機能分子科学専攻 博士課程 1 年	チェラロンコン大学（タイ）	2016 年 2 月 8 日 -2 月 29 日（21 日間）

国際共同研究

40 件（2014.10-2015.9 実施状況）

代表者	研究課題名	相手国
小杉 信博	In Situ Soft X-Ray Absorption Spectroscopy Applied to Chemical Reaction in Liquid Solutions	ドイツ
小杉 信博	In Situ Soft X-Ray Absorption Spectroscopy Applied to Liquid Solutions	ドイツ
小杉 信博	In Situ Soft X-Ray Absorption Spectroscopy Applied to Electrochemical Reactions in Liquid Solutions	ドイツ
小杉 信博	STXM Study of Electrochemical Reactions	カナダ
小杉 信博	Study of the Enhanced Crystallinity of Polymer/Fullerene Bulk Heterojunction by Solvent Additives in Organic Photovoltaic	台湾
小杉 信博	Studies of Electronic Structures and Chemical Composition in Well Aligned n- and p-Type Combined GaN Nanowires and Reduced Graphene Oxides	台湾
小杉 信博	Lithium Induced Defect Levels in ZnO Nanoparticles to Facilitate Electron Transport in Inverted Organic Photovoltaics	台湾
小杉 信博	The band Structure of Alkali-Metal Decorated Graphene	韓国
小杉 信博	Skin Penetration Study of Drug Carriers Using Soft X-Ray Spectromicroscopy	タイ
小杉 信博	Comprehensive Characterization of Monolithic Polymers by Scanning Transmission X-Ray Microscopy (STXM)	オーストラリア
小杉 信博	Influence of the Oxygen Vacancy at (Ta, Cu, Al, Ag)/TaO _x Interface on Resistive Switching Memories	台湾
小杉 信博	Electronic Band Structure of Ge-Intercalated Graphene	韓国
小杉 信博	Studies of Drug Uptake into Cells and Skin	ドイツ
小杉 信博	Microwave-Assisted Hydrothermal Synthesis of NiO Spheres for Efficient Photovoltaics of CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /PCBM PHJ Solar Cells	台湾
加藤 晃一	フコース非修飾抗体の産生細胞の確立と抗体抗原相互作用の構造基盤の解明	イラン
鹿野 豊	弱値の実在論	アメリカ，スウェーデン
鹿野 豊	事後選択状態におけるノイズ同定	アメリカ
鹿野 豊	量子機械振動子系における解析	カナダ
平等 拓範	新規紫外線発生用非線形光学結晶の探索	フランス
平等 拓範	固体レーザーの開発	中国
岡本 裕巳	金属ナノ微粒子の近接場分光イメージングの理論解析	イギリス
岡本 裕巳	キラルなプラズモンの研究	イギリス
石崎 章仁	GPU による量子ダイナミクス計算	シンガポール
解良 聡	アミノ酸化合物の気相および固相電子状態 有機金属触媒化学	イスラエル
解良 聡	有機薄膜界面の時間分解光電子分光	ドイツ

解良 聡	有機薄膜における二量体化とバンド形成	中国，ドイツ
横山 利彦	X線磁気円二色性による生体関連 Ni 錯体の磁性評価	アメリカ
奥村 久士	TDP43 のアミロイド繊維形成のシミュレーション	台湾
江原 正博	電子移動過程の理論計算	オーストラリア
魚住 泰広	ブレンステッド酸触媒合成化学	中国
魚住 泰広	有機金属触媒化学	韓国
田中 清尚	Circular Dichroism ARPES Studies on Magnetic Impurity Topological Insulator	韓国
田中 清尚	Local Orbital Angular Momentum Studies on Bulk Spin-Split Bands in GaAs, InSb and GdTe Using Low Photon-Energy Circular Dichroism in ARPES	韓国
江 東林	Design of Large π -Systems	中国
江 東林	Porous Organic Polymers as Photocatalysts	中国
江 東林	Luminescent Porous Polymers	中国
江 東林	Covalent Organic Frameworks for Carbon Dioxide Adsorption	中国
江 東林	Design of Metal-Organic Frameworks	中国
江 東林	Conjugated Microporous Polymers	中国
江 東林	Deposition of Novel Polymer Films	韓国

5-11 研究大学強化促進事業（文部科学省）

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

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

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

平成 27 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。

研究顧問	Graham R. Fleming 教授	2015 年 10 月 7 日 -9 日
外国人運営顧問	Ron Naaman 教授	2016 年 3 月 2 日 -3 日
	Peter J. Rossky 教授	2016 年 3 月 29 日 -31 日
国際諮問委員	David Wales 教授	2015 年 11 月 16 日 -18 日

- ・ 国際インターンシップ生の受入制度を見直し，半年間の受入をさらに強化した。
- ・ 研究所ホームページ更新，アクセス解析を行った。
- ・ アジア連携強化のため，MOU 提携校などの視察を行った。

2015 年 5 月	マレーシア：マラヤ大学
	タイ：マヒドン大学，チュラロンコン大学
	シンガポール：ナンヤン大学
2016 年 2 月	タイ：チュラロンコン大学
2016 年 2 月	中国：中国科学院化学研究所
	韓国：韓国高等科学技術院自然科学部
	台湾：中央研究院原子與分子科學研究所

